



**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**

**Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y**

**Tecnología Avanzada Unidad Legaria**

**CICATA-IPN Legaria**

**MODELADO NUMÉRICO EN 3D DE UN  
GASIFICADOR DE BIOMASA PARA  
PRODUCCIÓN DE GAS DE SÍNTESIS**

**T E S I S**

Que para obtener el Grado de  
Doctor en Tecnología Avanzada

PRESENTA

**Hugo Díaz Sánchez**

Directores de Tesis

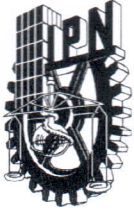
Dr. Fernando Trejo Zárraga

Dra. Zenaida Carolina Leyva Inzunza



CICATA-LEGARIA

Ciudad de México; julio 2017



# INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

## ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de           México           siendo las   12:00   horas del día   7   del mes de   julio   del   2017   se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de la Tesis, designada por el Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de           CICATA-Legaria           para examinar la tesis titulada:

Modelado numérico en 3D de un gasificador de biomasa para producción de gas de síntesis

Presentada por el alumno:

          Díaz            
Apellido paterno

          Sánchez            
Apellido materno

          Hugo            
Nombre(s)

Con registro:

B	1	3	1	1	1	9
---	---	---	---	---	---	---

aspirante de:

Doctorado en Tecnología Avanzada

Después de intercambiar opiniones los miembros de la Comisión manifestaron **APROBAR LA TESIS**, en virtud de que satisface los requisitos señalados por las disposiciones reglamentarias vigentes.

### LA COMISIÓN REVISORA

Directores de tesis

Dr. Fernando Trejo Zárraga

Dra. Zenaida Carolina Leyva Inzunza

Dra. Mónica Rosalía Jaime Fonseca



SEP

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIA  
APLICADA Y TECNOLOGÍA AVANZADA  
CICATA - LEGARIA

Dr. José Bruno Rojas Trigos

Dr. Fabián Salvador Mederos Nieto

PRESIDENTA DEL COLEGIO DE PROFESORES

Dra. Mónica Rosalía Jaime Fonseca



**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**  
**SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO**

*CARTA CESIÓN DE DERECHOS*

En la Ciudad de México el día 03 del mes julio del año 2017, el (la) que suscribe C. Hugo Díaz Sánchez alumno (a) del Programa de Doctorado en Tecnología Avanzada con número de registro B131119, adscrito a el Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada Unidad Legaria CICATA-Legaria, manifiesta que es autor (a) intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de Dr. Fernando Trejo Zárraga y Dra. Zenaida Carolina Leyva Inzunza y cede los derechos del trabajo intitulado Modelado numérico en 3D de un gasificador de biomasa para producción de gas de síntesis, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección: hdiazl@ipn.mx. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

---

Hugo Díaz Sánchez  
Nombre y firma

## AGRADECIMIENTOS

Al Instituto Politécnico Nacional (IPN) y al Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada (CICATA), Unidad Legaria por haberme aceptado en este programa de posgrado y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo otorgado.

## DEDICATORIA

Deseo dedicar este trabajo a mi esposa por apoyo incondicional.

## TABLAS

Tabla 2.1 Visión general de gasificación de biomasa .....	13
Tabla 5.1 Modelo de reacción .....	25
Tabla 5.2 Parámetros cinéticos.....	26
Tabla 6.1 Características del carbón mineral tipo lignito usado para la validación del modelo.....	29
Tabla 6.2 Condiciones de reacción para la validación .....	29
Tabla 6.3 Condiciones de alimentación para validación del modelo .....	30
Tabla 6.4 Características polvo de aserrín (biomasa).....	39
Tabla 6.5 Condiciones de alimentación del reactor .....	39

# FIGURAS

Figura 5.1 Diagrama esquemático del reactor primer reactor .....	27
Figura 5.2 Geometría y Malla .....	28
Figura 6.1 Validación del modelo considerando la producción de hidrógeno a la salida del reactor .....	31
Figura 6.2 Validación del modelo considerando la producción de dióxido de carbono a la salida del reactor .....	32
Figura 6.3 Validación del modelo considerando la producción de monóxido de carbono + Nitrógeno a la salida del reactor .....	32
Figura 6.4 Comparación de perfiles de fracción molar de hidrógeno para los esquemas simple y coupled, caso 1 .....	33
Figura 6.5 Comparación de perfiles de fracción molar de dióxido de carbono para los esquemas simple y coupled, caso 1 .....	34
Figura 6.6 Comparación de perfiles de fracción molar de monóxido de carbono + nitrógeno para los esquemas simple y coupled, caso 1 .....	34
Figura 6.7 Perspectiva de trayectoria de partículas en el caso 1, con el esquema coupled .....	35
Figura 6.8 Tiempo de residencia y distribución de partículas en el caso 1, con el esquema coupled .....	35
Figura 6.9 Temperatura de partículas en el caso 1, con el esquema coupled.....	36
Figura 6.10 Líneas de flujo, velocidad del fluido en el caso 1, para el esquema coupled .....	36
Figura 6.11 Perfil de temperatura dentro del reactor.....	37

Figura 6.12 Perfil de concentración molar de oxígeno en el caso 1, para el esquema coupled .....	37
Figura 6.13 Perfil de fracción molar de vapor de agua en el caso 1, para el esquema coupled .....	38
Figura 6.14 Perfil de fracción molar de monóxido de carbono en el caso 1, para el esquema coupled .....	38
Figura 6.15 Composición de gas de síntesis para simulación de biomasa .....	40
Figura 6.16 Distribución de las partículas sólidas dentro del reactor de gasificación .....	41
Figura 6.17 Perfil de la fracción molar de oxígeno en la gasificación de biomasa .....	41
Figura 6.18 Perfil de la fracción molar de monóxido de carbono en la gasificación de biomasa.....	42
Figura 6.19 Perfil de la fracción molar de hidrógeno en la gasificación de biomasa .....	42
Figura 6.20 Perfil de la fracción molar de dióxido de carbono en la gasificación de biomasa .....	43
Figura 6.21 Perfil de la fracción molar de vapor de agua en la gasificación de biomasa .....	43
Figura 6.22 Perfil de temperatura en la gasificación de biomasa.....	44
Figura 6.23 Perfil de temperatura total del reactor en la gasificación de biomasa .....	44
Figura 6.24 .....	45
Figura 6.25 .....	45
Figura 6.26 .....	46



## RESUMEN

Este trabajo consiste en el modelo en CFD de un reactor de gasificación de flujo arrastrado a escala banco para procesamiento de biomasa, en enfoque Euler-Lagrange de fase densa discreta en ANSYS Fluent 17.2 Academic. La simulación toma en cuenta reacciones fase homogénea y heterogénea, el modelo de turbulencia k-epsilon, interacción de partículas y fase gaseosa. El modelo fue validado con los datos de un reactor de gasificación de flujo arrastrado de carbón lignito con alto contenido de volátiles. Posteriormente el modelo CFD se utilizó para simulación de gasificación de biomasa con la misma configuración de gasificación de flujo arrastrado en corriente descendente. El estudio se centra en gasificación de biomasa con aire y oxígeno como agentes de gasificación para producir gas de síntesis y analizar el efecto de la relación de alimentación de carga con respecto a la alimentación de agente de gasificación en la composición del gas de síntesis, así como en los fenómenos internos en el reactor. En base a los resultados obtenidos en este trabajo, el modelo reproduce adecuadamente el proceso de gasificación de un reactor de flujo arrastrado.

## ABSTRACT

CFD modelling of a laboratory scale entrained flow gasifier of biomass using Euler-Lagrange approach with Dense Discrete Phase Model (DDPM) based on ANSYS Fluent 17.2 Academic. The simulation takes into account homogeneous and heterogeneous reactions, the k-epsilon turbulence model, particle interaction and gas phase. The model was validated with the experimental data from a study of a high volatile coal entrained flow gasifier. CFD model was used for simulation of biomass gasification with the same entrained flow gasifier. The study focuses on gasification of biomass with air/O<sub>2</sub> as gasification agents to produce syngas and analyse the effect of feedstock and gasification agent ratio on the syngas composition, as well as on the internal phenomena inside reactor. Based on the results obtained in this work, the model adequately reproduces the gasification process of entrained flow gasifier.

# ÍNDICE

AGRADECIMIENTOS .....	1
DEDICATORIA.....	2
TABLAS .....	3
FIGURAS .....	4
RESUMEN.....	6
ABSTRACT .....	7
1 INTRODUCCIÓN .....	9
2 ANTECEDENTES .....	10
3 JUSTIFICACIÓN .....	15
4 OBJETIVOS .....	16
5 METODOLOGÍA.....	17
6 RESULTADOS .....	29
7 DISCUSIÓN DE RESULTADOS .....	<b>¡Error! Marcador no definido.</b>
8 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES .....	47
9 REFERENCIAS.....	<b>¡Error! Marcador no definido.</b>

# 1 INTRODUCCIÓN

Se entiende como gasificación al proceso termoquímico, en condiciones de oxidación sub estequiométricas controladas, que transforma un material carbonoso<sup>1</sup> en una mezcla gaseosa llamada gas de síntesis. El gas de síntesis, es un gas combustible formado principalmente de monóxido de carbono e hidrogeno. Este gas es usado en la generación de energía eléctrica, producción de compuestos químicos como el metanol y amoniaco, en la síntesis de combustibles como gasolinas y diésel, e incluso como fuente de generación de hidrógeno.

Es importante mencionar que la gasificación es un proceso altamente complejo, independientemente del tipo de cargar a gasificar, puesto que el proceso se lleva a cabo a temperaturas en un rango típico de los 1000-1600 °C, en involucra fenómenos de transferencia de movimiento, masa y calor, en donde la turbulencia generada por la dinámica del mismo proceso tiene una influencia importante.

La necesidad de comprender el proceso de gasificación y encontrar modelos que permitan simular adecuadamente el comportamiento de un reactor de gasificación con un nivel de precisión aceptable en las aproximaciones numéricas ha llevado al desarrollo de modelos en dinámica de fluidos computacional, lo que la hace una herramienta clave en el diseño y simulación de reactores de gasificación.

En este trabajo se presenta la validación del modelo en dinámica de fluidos computacional de un reactor de gasificación de flujo arrastrado y la simulación de gasificación de biomasa aplicando el modelo de reactor antes mencionado.

---

<sup>1</sup> Se considera como material carbonoso, toda aquella materia prima de gasificación que contenga una composición C, H, O, N, S.

## 2 ANTECEDENTES

El proceso de gasificación ha ido evolucionando con el tiempo, desde el primer reporte del uso del “gas de carbón” en 1792, donde Murdoch, un ingeniero escocés, mediante pirolisis de carbón mineral obtiene este gas y lo utiliza en iluminación doméstica. Para 1826, esta tecnología empieza a ser explotada en mayor escala ya que fueron construidas plantas de producción de gas de carbón para la iluminación de calles en Boston y Nueva York. Para finales del siglo XIX, la gasificación de carbón se volvió una realidad comercial. Durante la Segunda Guerra Mundial este proceso fue ampliamente utilizado como un proceso previo a la obtención de combustibles sintéticos, productos químicos e hidrógeno.

La disminución del uso de esta tecnología ocurre después de la Segunda Guerra Mundial, debido a descubrimientos de grandes yacimientos de gas natural en diferentes partes del mundo y la explotación de estos requería menor inversión económica, además de que la producción de la industria petrolera competía con las necesidades energéticas de ese entonces. Sin embargo, para mediados del siglo XX, esta tecnología vuelve a ser de interés, debido a que controversiales proyecciones sugerían que la demanda de gas natural y petróleo excedería la producción estimando que a finales del siglo se agotarían las reservas, situación que a la fecha no ha ocurrido.

No fue hasta la década de 1980, donde investigadores y algunas industrias reconocieron los beneficios ambientales de la gasificación, motivado principalmente por normas ambientales más estrictas en países desarrollados con relación en la emisión de contaminantes. Actualmente, existen plantas de gasificación alrededor del mundo que operan con carbón mineral, residuos de petróleo e incluso una combinación de estas materias primas. El principal objetivo de la gasificación actual es la generación de energía eléctrica a través de sistemas integrados de gasificación de ciclo combinado, usando carbón mineral. La gasificación de carbón mineral ha sido ampliamente estudiada a lo largo de los años, actualmente sigue siendo de interés.

Una de las áreas de investigación en la gasificación es la simulación numérica de la cual representa una herramienta fundamental en el desarrollo de nuevos diseños, solución de problemas operativos, optimización y rediseño de los sistemas de gasificación. Uno de los primeros trabajos reportados en el uso de la simulación numérica con la gasificación fue el escalamiento de un reactor de gasificación de flujo de arrastre de dos etapas, en la cual la simulación se llevó a cabo para determinar el diseño que permitiera el control de deposición de cenizas en las paredes del reactor de gasificación (Kojima, Chen, Miyoshi, Kamiya, & Horio, 1999).

Trabajos subsecuentes reportan el modelado de la gasificación con la incorporación de reacciones de volatilización y reacciones heterogéneas entre el carbón residual y los agentes de gasificación, involucrando también el efecto de modelos de turbulencia como primera parte (Kojima, Chen, & Horio, 2000). Después en la segunda parte analizando los efectos de las condiciones de operación en el desempeño de reactor de gasificación (Kojima, Chen, & Horio, 2000).

Park, et. al. (2001) usa en su simulación el modelo de turbulencia k-epsilon para la fase gaseosa mientras que incorpora un modelo de trayectoria aleatoria para predecir el comportamiento de las trayectorias, acoplado también dos modelos de reacción el modelo unreacted-core shrinking model y el modified Eddy break-up.

Estos trabajos son base de muchos otros en los cuales diferentes autores analizan diferentes etapas y fenómenos que ocurren dentro de la gasificación desarrollan especial interés en alguna etapa de la gasificación o fenómeno presente en la gasificación.

Watanabe y Otaka (2006) propusieron un modelo para predecir el comportamiento de un reactor de gasificación de flujo arrastrado estudiando la influencia de la relación de alimentación de aire en un reactor con capacidad de 2 ton/día basando su reactor de gasificación en el presentado por Kojima, et. al (1999).

Aproximadamente a partir del 2006 se empieza a utilizar el nombre de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) en lugar de simulación numérica o modelado numérico en los trabajos reportados.

La incorporación de vapor de agua en las simulaciones CFD de gasificación tienen el fin de promover la producción de hidrógeno, como lo muestra Sundararajan, Ajilkumar y Shet (2009) incluyen el uso de vapor de agua y varían las relaciones de alimentación de aire validando la simulación con datos experimentales en literatura.

En algunos casos debido a la complejidad de los modelos propuestos, los trabajos de investigación han sido reportados en dos partes en las cuales se muestra primero la validación del modelo de reacción en el reactor de gasificación reportado en los trabajos de Kojima et. al. (1999) como lo presentan Ghoniem y Kumar (2011) en sus trabajos para posteriormente usar el modelo de reacción propuesto en una geometría de reactor de gasificación diferente.

En trabajos en donde se cuenta con acceso a reactores de gasificación de planta piloto o comerciales los reportes de simulación suelen ser más extensivos ya que se enfocan en temas específicos como problemas operativos o de mejora en la operación, apoyándose de CFD, Ma y Zitney (2012) presentan la calibración de la simulación CFD de dos tipos de reactores de gasificación ajustando submodelos químicos y físicos.

Estudios más recientes presentan simulaciones tratando de optimizar las condiciones de gasificación para obtener mayor eficiencia de gas frío<sup>2</sup>, analizando la relación de alimentación oxígeno/carbono y el efecto en el desempeño del reactor (Hla, Roberts, & Harris, 2015).

Como se ha mostrado la simulación en CFD permite analizar una gran cantidad de fenómenos involucrados en la gasificación. Se han reportado trabajos que presentan simulaciones de fenómenos específicos que ocurren durante la gasificación, como los efectos de la densidad de partículas y distribución de las fracciones de tamaño de partícula en la alimentación (Kuhlman, Slezak, Shadle, Spenik, & Shi, 2010). Así también la formación de capas de escoria en las paredes del reactor, estudiando el efecto que tiene el

---

<sup>2</sup> El término eficiencia de gas frío (Cold Gas Efficiency), se emplea cuando el gas va a ser utilizado en máquinas de combustión interna, ya que en este caso el gas debe enfriarse a temperatura ambiente para remover los alquitranes (Basu, 2006).

tamaño de la partícula en la deposición de escoria y analizando las interacciones que ocurren en estas zonas del reactor (Dapeng, Qingliang, Weiwei, & Jiansheng, 2015).

Para los reactores de gasificación no existe un manual que determine el tipo de reactor de acuerdo a la carga de alimentación, más bien, la configuración del reactor de gasificación se enfoca en la calidad de gas de síntesis y/o productos a obtener. En lo que se refiere al carbón mineral las tecnologías tienen una tendencia marcada hacia los reactores de flujo de arrastre (Entrained Flow) ya que estos son principalmente para generación de electricidad mediante turbinas de ciclo combinado. Respecto a la gasificación de biomasa se ha investigado experimentalmente una gran variedad de tecnologías (Kirkels & Verbong, 2011).

En la Tabla 2.1 se presenta un resumen de las tecnologías aplicadas a la gasificación de biomasa, las principales aplicaciones y los países donde predominan.

**Tabla 2.1 Visión general de gasificación de biomasa**

<b>Gasificación de biomasa</b>	
<b>Tecnologías</b>	Flujo ascendente (Updraft flow)
	Flujo descendente (Downdraft flow)
	Lecho Fluido Circulante (CFB)
	Flujo de arrastre (Entrained Flow)
<b>Principales aplicaciones</b>	Generation de calor (Combined Heat and Power)
	Co-combustión
	Generación de electricidad por Gasificación Integrada de Ciclo Combinado (en investigación)
	Producción de combustibles y productos químicos (en investigación)



	Energía eléctrica en comunidades rurales de países en desarrollo
	Gasificación de desechos municipales
<b>Escalas</b>	0.05-10 MW <sub>th</sub> <sup>3</sup>
<b>Países dominantes</b>	EUA, Finlandia, Suecia, Alemania; Japón (desechos); China, India (en pequeña escala)

Es un hecho que la gasificación de biomasa no es un tema nuevo o una línea de investigación reciente, sin embargo, el estudio de la gasificación de biomasa sigue vigente en la investigación. Puesto que “La biomasa es considerada como la cuarta mayor fuente de energía del mundo después del carbón, petróleo y gas natural” (Ku, Li, & Lovas, 2014). En este sentido, muchos investigadores continúan con la investigación en la gasificación de la biomasa, como fuente energética alternativa a las fuentes de energía fósiles, incluso para producción de fuentes de energías más limpias como la producción de hidrógeno (Cattolica, Liu, & Seiser, 2016).

---

<sup>3</sup> MW<sub>th</sub> se refiere a la potencia térmica producida.

### 3 JUSTIFICACIÓN

Las problemáticas actuales del país demandan opciones de generación de energía limpia y renovable, con una visión sustentable y acorde a las necesidades de las diferentes regiones y actividades económicas. Una de las tecnologías que puede contribuir a disminuir el impacto ambiental de nuestra sociedad es la gasificación. Este proceso flexible de transformación de materiales carbonosos en gas de síntesis, es una posible respuesta a la problemática del tratamiento de residuos de las ciudades que además se pueden aprovechar en la obtención de energía o en productos de mayor valor comercial.

De allí la importancia de poder entender y predecir los fenómenos que intervienen en el proceso de gasificación a través de modelos de dinámica de fluidos computacional que permitan aproximar y asistir en el diseño de este tipo de reactores con la finalidad de implementar y mejorar el uso de este tipo de tecnologías en nuestro país en el mediano plazo.

## 4 OBJETIVOS

### 4.1 Objetivo General

Simular un reactor de gasificación de flujo arrastrado a escala de laboratorio capaz de procesar diferentes cargas para producción de gas de síntesis

### 4.2 Objetivos específicos

Simular las condiciones operativas de un reactor de gasificación de flujo arrastrado a escala de laboratorio para la gasificación biomasa, en dinámica computacional de fluidos (CFD) con una geometría tridimensional.

Comparar el efecto que tiene en el gas de síntesis la relación de alimentación de la carga con respecto al el agente de gasificación.

## 5 METODOLOGÍA

La gasificación es un proceso altamente complejo que involucra la interacción de al menos dos fases reaccionantes (sólida y gaseosa) en las cuales se tienen que resolver de manera acoplada las ecuaciones de transporte de masa, momento y energía. En Dinámica de Fluidos Computacional, los sistemas reaccionantes como el proceso de gasificación, pueden ser modelados mediante la solución de las ecuaciones gobernantes de transporte relacionadas con la convección, difusión y reacción química para cada componente, haciendo consideraciones que simplifiquen el proceso, reduciendo así el nivel de complejidad en el modelado.

### 5.1 Consideraciones

Las consideraciones empleadas para establecer el modelo solución fueron las siguientes:

- El sistema se considera en estado cuasi-estacionario
- El fluido del sistema se considera como incompresible y mezcla de gas ideal
- Las reacciones no son dependientes de la presión
- Los agentes para gasificación son aire, aire/O<sub>2</sub> y vapor de agua
- Las partículas reaccionantes se consideran esféricas
- Las interacciones partícula-partícula no se consideran

Ecuaciones de transporte

La Dinámica de Fluidos Computacional se basa en las ecuaciones fundamentales que gobiernan la dinámica de fluidos que involucran:

- Conservación de masa
- Conservación de momento
- Conservación de energía

## 5.2 Continuidad (Conservación de masa)

La ecuación para la continuidad es la siguiente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = S_m \quad (1)$$

donde,  $\rho$  es la densidad del fluido,  $\vec{u}$  es el vector de velocidad en las direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$  respectivamente.  $S_m$  es la masa adicionada a la fase continua desde una segunda fase dispersa (ej., por vaporización de gotas de líquido) y cualquier otra alimentación de masa.

## 5.3 Momento

La ecuación de conservación de momento para un marco de referencia inercial es la siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2)$$

donde,  $p$  es la presión estática,  $\bar{\tau}$  es el tensor de esfuerzos,  $\rho \vec{g}$  la fuerza gravitacional del cuerpo, y  $\vec{F}$  cualquier otra fuerza externa aplicada al sistema.

El tensor de esfuerzos está dado por la siguiente ecuación

$$\bar{\tau} = \mu \left[ (\nabla \cdot \vec{u} + \nabla \cdot \vec{u}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{u} I \right] \quad (3)$$

donde,  $\mu$  es la viscosidad molecular, e  $I$  es el tensor unitario.

### 5.3.1 Turbulencia

Las ecuaciones de transporte para la turbulencia considerando el modelo  $k-\varepsilon$  estándar se muestran a continuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \nabla \cdot (\rho k \vec{u}) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (4)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \varepsilon \vec{u}) \\ = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \end{aligned} \quad (5)$$

En estas ecuaciones,  $G_k$  representa la generación de energía cinética de la turbulencia debida a los gradientes de velocidad,  $G_b$  es la energía cinética de la turbulencia generada por flotabilidad,  $Y_M$  representa la contribución de la dilatación fluctuante en la turbulencia compresible a la tasa global de disipación,  $\mu_t$  la viscosidad de turbulencia o viscosidad de eddy,  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$ , y  $C_{3\varepsilon}$  son constantes,  $\sigma_k$  y  $\sigma_\varepsilon$  son los números de turbulencia de Prandtl para  $k$  y  $\varepsilon$  respectivamente.

La viscosidad de turbulencia se determina combinando  $k$  y  $\varepsilon$  de la siguiente manera:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (6)$$

donde  $C_\mu$  es una constante.

Los valores para las constantes en el modelo de turbulencia  $k-\varepsilon$  estándar son los siguientes:

$$C_{1\varepsilon} = 1.44, C_{2\varepsilon} = 1.92, C_\mu = 0.09, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3, \quad (7)$$

Fase discreta

Al usar el modelo de partículas en fase discreta se debe considerar la fuerza ejercida sobre las partículas, que está dado en un marco de referencia Lagrangiano, y puede escribirse de la siguiente manera:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = F_D(\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad (8)$$

donde,  $\vec{F}$  es un término de aceleración adicional, el término  $F_D(\vec{u} - \vec{u}_p)$  representa la fuerza de arrastre en el que está dado por:

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24} \quad (9)$$

aquí,  $\vec{u}_p$  es la velocidad de la partícula,  $\rho_p$  la densidad de la partícula y  $d_p$  el diámetro de partícula.  $Re$  es el número relativo de Reynolds, definido como:

$$Re \equiv \frac{\rho d_p |\vec{u}_p - \vec{u}|}{\mu} \quad (10)$$

#### 5.4 Energía

La ecuación de conservación de energía se puede expresar de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{u}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left( k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\vec{\tau}_{eff} \cdot \vec{u}) \right) + S_h \quad (11)$$

donde,  $k_{eff}$  es la conductividad efectiva, y  $\vec{J}_j$  es la densidad flujo (flux) difusiva de la especie  $j$  en el sistema. Los primeros tres términos del lado derecho de la ecuación representan la transferencia de calor debido a la conducción, difusión por especies y disipación por viscosidad.  $S_h$  incluye el calor de reacción química y otras fuentes de calor volumétricas aplicadas al sistema.

En la ecuación 11,  $E$  está dada por:

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2} \quad (12)$$

donde, la entalpía sensible para gases ideales se define como:

$$h = \sum_j Y_j h_j \quad (13)$$

y para flujos incompresibles como:

$$h = \sum_j Y_j h_j + \frac{p}{\rho} \quad (14)$$

En las ecuaciones (13) y (14),  $Y_j$  es la fracción masa de la especie  $j$  y la entalpía sensible para cada especie está dada por:

$$h_j = \int_{T_0}^T c_{p_j} dT \quad (15)$$

Las fuentes de energía debido a las reacciones químicas están dadas por

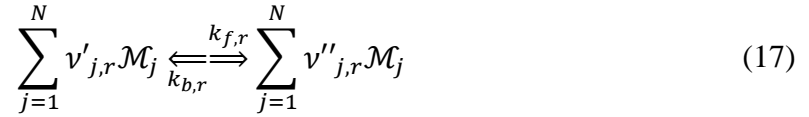


$$S_{h_{reac}} = - \sum_j \frac{h_j^0}{M_{w_j}} \mathcal{R}_j \quad (16)$$

donde,  $h_j^0$  es la entalpía de formación de la especie  $j$ ,  $M_{w_j}$  la masa molecular de la especie  $j$  y  $\mathcal{R}_j$  la rapidez de formación de la especie  $j$ .

#### 5.4.1 Reacción

Considerando la reacción  $r$ -ésima escrita en su forma general como:



donde,  $N$  es el número de especies químicas presentes en el sistema,  $\nu'_{j,r}$  el coeficiente estequiométrico para el reactante  $j$  en la reacción  $r$ ,  $\nu''_{j,r}$  el coeficiente estequiométrico para el producto  $j$  en la reacción  $r$ ,  $\mathcal{M}_j$  es el símbolo para denotar la especie  $j$ ,  $k_{f,r}$  es la constante de velocidad de reacción hacia adelante para la reacción  $r$ , y  $k_{b,r}$  es la constante de velocidad de reacción hacia atrás para la reacción  $r$ .

La constante de velocidad de reacción hacia adelante para la reacción  $r$ ,  $k_{f,r}$ , se determina usando la expresión de Arrhenius:

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{\frac{-E_r}{RT}} \quad (18)$$

donde  $A_r$  es el factor pre-exponencial para la reacción  $r$  en (unidades consistentes),  $\beta_r$  el exponente de temperatura para la reacción  $r$  (adimensional),  $E_r$  la energía de activación para la reacción  $r$  (en unidades de J/kmol),  $R$  la constante universal de los gases ideales (en J/[kmol K]).

Para las reacciones reversibles, la constante de velocidad de reacción hacia atrás para la reacción  $r$ ,  $k_{b,r}$ , se determina a partir de la constante de velocidad de reacción hacia adelante mediante la siguiente relación:

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r} \quad (19)$$

donde,  $K_r$  es la constante de equilibrio para la  $r$ -ésima reacción, calculada por la siguiente expresión:

$$K_r = \exp\left(\frac{\Delta S_r}{R} - \frac{\Delta H_r}{RT}\right) \left(\frac{p_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{j=1}^N (v''_{j,r} - v'_{j,r})} \quad (20)$$

El término dentro de la función exponencial representa la energía libre de Gibbs, y sus componentes se determinan como sigue:

$$\frac{\Delta S_r}{R} = \sum_{j=1}^N (v''_{j,r} - v'_{j,r}) \frac{S_j}{R} \quad (21)$$

$$\frac{\Delta H_r}{RT} = \sum_{j=1}^N (v''_{j,r} - v'_{j,r}) \frac{h_j}{RT} \quad (22)$$

donde,  $S_j$  y  $h_j$  son la entropía y entalpía de la  $j$ -ésima especie evaluadas a la temperatura  $T$  y presión atmosférica.

Para la interacción turbulencia–reacción química el modelo de disipación eddy determina la velocidad neta de producción de la especie  $j$  mediante la reacción  $r$ ,  $R_{j,r}$  y está dada por el menor valor de las dos expresiones siguientes:

$$R_{j,r} = v'_{j,r} M_{w_j} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min_r \left( \frac{Y_r}{v'_{r,r} M_{w_r}} \right) \quad (23)$$

$$R_{j,r} = v'_{j,r} M_{w_j} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_i^N v''_{i,r} M_{w_i}} \quad (24)$$

donde,  $Y_P$  es la fracción masa de cualquier especie ( $P$ ) en el producto,  $Y_r$  la fracción masa de un reactante ( $r$ ) en particular,  $A$  y  $B$  constantes empíricas con valores de 4 y 0.5 respectivamente.

La velocidad de la reacción  $r$  en la superficie de la partícula de la especie  $j$  con la especie  $n$  de la fase gaseosa está dada por la siguiente ecuación

$$\bar{R}_{j,r} = A_p \eta_r Y_j R_{j,r} \quad (25)$$

$$R_{j,r} = R_{kin,r} \left( p_n - \frac{R_{j,r}}{D_{0,r}} \right)^{N_r} \quad (26)$$

donde,  $\bar{R}_{j,r}$  es la velocidad de reducción en la superficie de la partícula en kg/s,  $A_p$  el área de la superficie de la partícula en  $m^2$ ,  $Y_j$  la fracción masa de la especie  $j$  en la superficie de la partícula,  $\eta_r$  el factor de efectividad,  $R_{j,r}$  la velocidad de reacción de la especie  $j$  en la superficie de partícula por unidad de área en  $kg/(m^2 s)$ ,  $p_n$  la presión parcial de la especie  $n$  en la fase gaseosa en Pa,  $D_{0,r}$  el coeficiente de velocidad de difusión para la reacción  $r$ ,  $R_{kin,r}$  la velocidad cinética de la reacción  $r$  y  $N_r$  el orden aparente de la reacción  $r$ .

La velocidad cinética de la reacción  $r$  está definida en términos de la expresión de Arrhenius como:

$$R_{kin,r} = A_r T_p^{\beta_r} e^{\frac{-E_r}{RT_p}} \quad (27)$$

donde,  $T_p$  es la temperatura en la superficie de la partícula.

## 5.5 Modelo de reacción

La gasificación involucra las reacciones de múltiples especies de reactantes así como productos. El modelo de reacción considerado en este trabajo consta de siete reacciones, de las cuales, tres son reacciones en la superficie de la partícula y cuatro en fase gaseosa como se muestra en la Tabla 5.1. En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se muestran los parámetros cinéticos usados en las reacciones.

Tabla 5.1 Modelo de reacción

Reacciones en superficie de partícula		
<b>Combustión del carbono residual</b>	$C + 0.5O_2 \rightarrow CO$	(I)
<b>Reacción de Boudouard</b>	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	(II)
<b>Gasificación de carbono residual</b>	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	(III)
Reacciones en fase gaseosa		
<b>Combustión de volátiles</b>	$Volátiles + xO_2 \rightarrow aCO_2 + bH_2O + cN_2$	(IV)
<b>Combustión de monóxido de carbono</b>	$CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2$	(V)
<b>Combustión de hidrógeno</b>	$H_2 + 0.5O_2 \rightarrow H_2O$	(VI)
<b>Conversión agua-gas</b>	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	(VII)

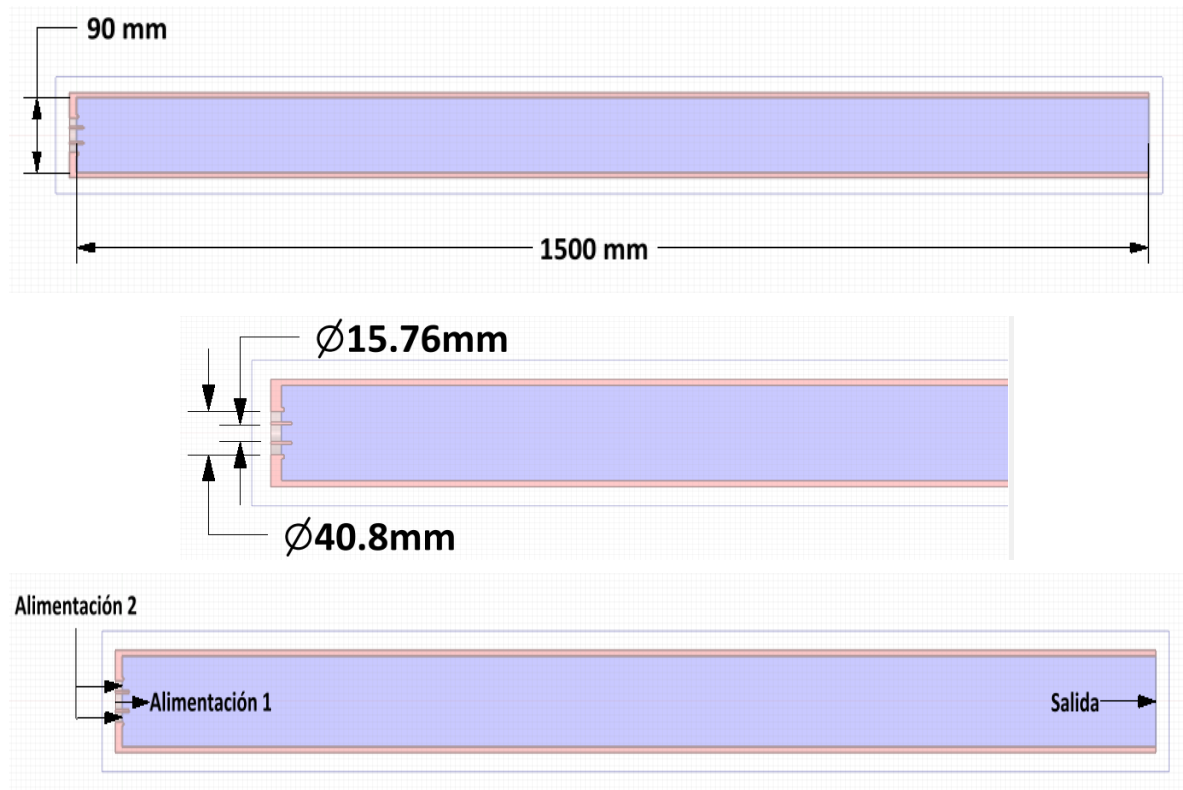
**Tabla 5.2 Parámetros cinéticos**

<b>Parámetros Cinéticos</b>			<b>Referencia</b>
	$A_r$	$E_r$ (J/kmol)	
<b>Reacciones en superficie de partícula</b>			
(I)	0.052	$6.1 \times 10^7$	(Chen, Horio, & Kojima, 2000)
(II)	0.0732	$1.125 \times 10^8$	(Chen, Horio, & Kojima, 2000)
(III)	0.0782	$1.15 \times 10^8$	(Chen, Horio, & Kojima, 2000)
<b>Reacciones en fase gaseosa</b>			
(IV)	$2.119 \times 10^{11}$	$2.027 \times 10^8$	(ANSYS, Inc.)
(V)	$2.239 \times 10^{12}$	$1.7 \times 10^8$	
(VI)	$6.8 \times 10^{15}$	$1.68 \times 10^8$	(Ajilkumar, Sundararajan, & Shet, 2009)
(VII)	$2.75 \times 10^{10}$	$8.38 \times 10^7$	
	$2.65 \times 10^{-2}$	$3.96 \times 10^3$	

## 5.6 Sistema de gasificación

El sistema consiste en el modelo 3D de un reactor tubular con alimentación por la parte superior. La entrada de los flujos de alimentación al reactor se realiza por dos tubos concéntricos; en el tubo interno se alimenta la carga a gasificar en forma de partículas sólidas y una mezcla de agentes de gasificación, por el tubo externo se alimenta un flujo de alimentación de aire. En la Figura 5.1 se muestra la representación esquemática del reactor usado en la simulación.

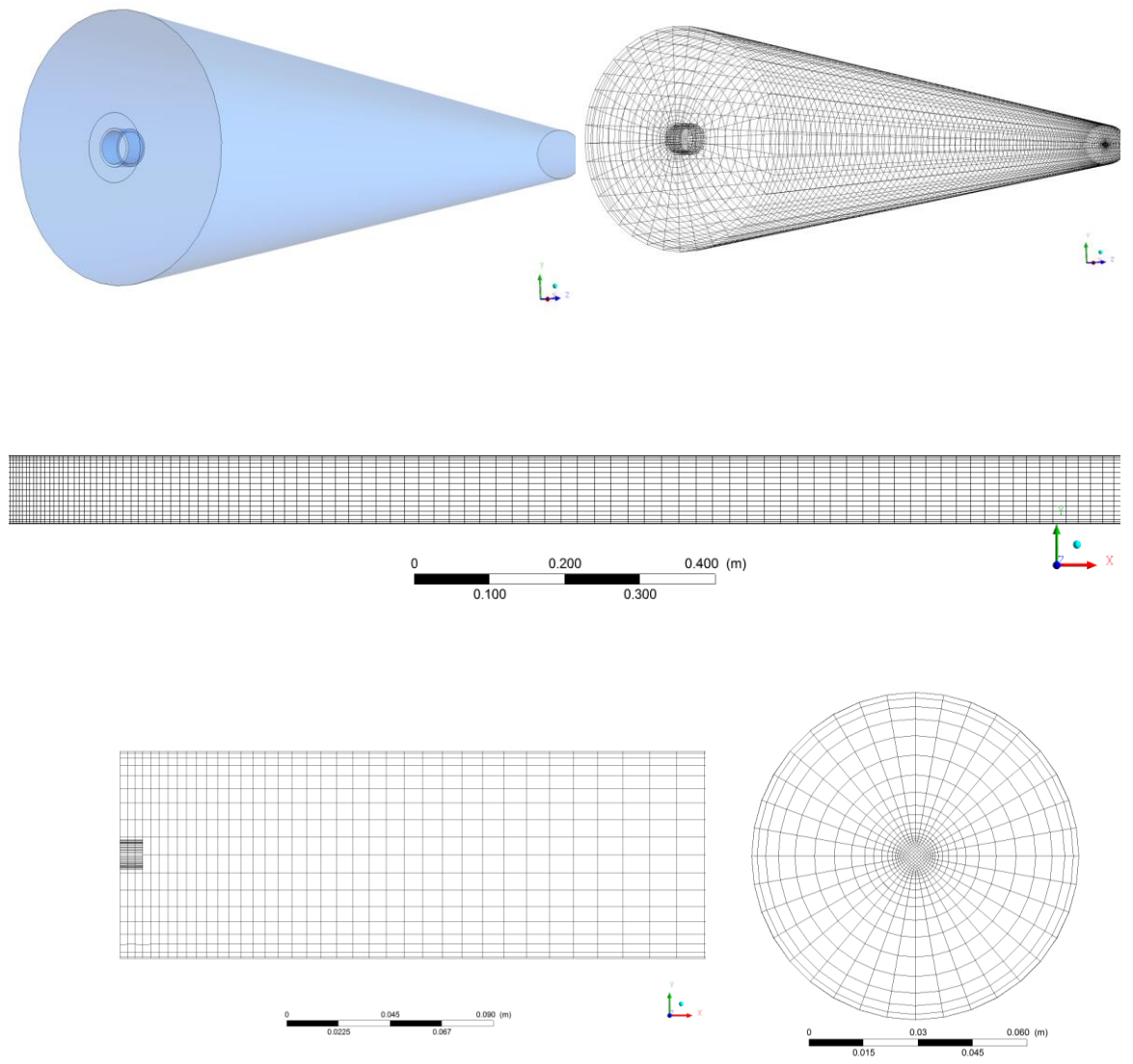
Figura 5.1 Diagrama esquemático del reactor primer reactor



### 5.6.1 Geometría y Malla

Con las dimensiones de la Figura 5.1 Diagrama esquemático del reactor primer reactor, se genera un volumen de control para representar al fluido, en el cual se definieron las fronteras de entrada, las áreas concéntricas de la parte superior, como frontera de salida el área de la circunferencia de la parte inferior, la envolvente como fronteras de pared así como también la boquilla de alimentación 1.

A este volumen de control se le realizó un mallado hexaédrico con una malla de 66,906 elementos y 69,628 nodos, concentrando la mayor cantidad de nodos en la parte superior y en la entrada de alimentación 1, por ser las zonas en las que se presentan la mayoría de variaciones. En la Figura 5.2 Geometría y Mallase muestra la geometría y mallado que se usaron en la simulación.



**Figura 5.2 Geometría y Malla**

## 6 RESULTADOS

### 6.1 Condiciones de validación del modelo

Para la validación del modelo se tomaron datos de literatura de la gasificación del carbón lignito con alta concentración de volátiles reportado por Mladenovic, Crnomarkovic, Repic, Neskovic, & Veljkovic, (2007), cuyas características se muestran en la Tabla 6.1.

**Tabla 6.1 Características del carbón mineral tipo lignito usado para la validación del modelo**

Análisis proximal (% wt, a.r.)		Análisis elemental (% wt, d.b.)	
<b>Carbón fijo</b>	40.7	C	59.8
<b>Materia volátil</b>	50.6	H	5.8
<b>Cenizas</b>	6.4	O	32.9
<b>Humedad</b>	2.3	N	0.78
		S	0.67
<b>Poder Calorífico Inferior:</b> $2.62 \times 10^7$ J/kmol			

Se analizaron distintos casos para la validación del modelo tomando en cuenta un reactor de gasificación de  $4000 \text{ kW}_{\text{th}}/\text{m}^3$ . En la Tabla 6.2 se muestran las condiciones de reacción usadas.

**Tabla 6.2 Condiciones de reacción para la validación**

Validación	Flujo másico de alimentación (kg/h)	H <sub>2</sub> O/Carbón	Exceso de oxígeno $\lambda$
<b>Caso 1</b>	5.1	0.287	0.43
<b>Caso 2</b>	5.1	0.287	0.56
<b>Caso 3</b>	5.1	0.287	0.73

El flujo másico de oxígeno  $M_{O_2}$  requerido se determina como:

$$M_{O_2} = M_{\text{Carga}} * \lambda * O_{\text{min}}$$



donde  $M_{carga}$  es el flujo másico de la carga,  $\lambda$  el factor de exceso de oxígeno y  $O_{min}$ <sup>4</sup> es la relación de oxígeno mínimo necesario para la combustión completa.

Los parámetros utilizados en la simulación para la validación del modelo se muestran en la Tabla 5.2, donde se puede observar que las condiciones de alimentación en la entrada 2 se mantienen constantes, mientras que los parámetros de la entrada 1 varían de acuerdo a las condiciones de reacción por caso presentadas en la Tabla 6.2. En la Tabla 6.3 se muestran las condiciones de alimentación en cada caso.

**Tabla 6.3 Condiciones de alimentación para validación del modelo**

	<b>Caso 1</b>	<b>Caso 2</b>	<b>Caso 3</b>
<b>Entrada 1</b>			
<b>Flujo másico de carga (kg/h)</b>	5.10	5.10	5.10
<b>Flujo másico de fluido (kg/h)</b>	2.63	3.67	5.04
<b>Fracción masa de oxígeno</b>	0.49	0.64	0.74
<b>Fracción masa de vapor de agua</b>	0.51	0.36	0.26
<b>Entrada 2</b>			
<b>Flujo másico de aire (kg/h)</b>	9.47	9.47	9.47
<b>Fracción masa de oxígeno</b>	0.23	0.23	0.23

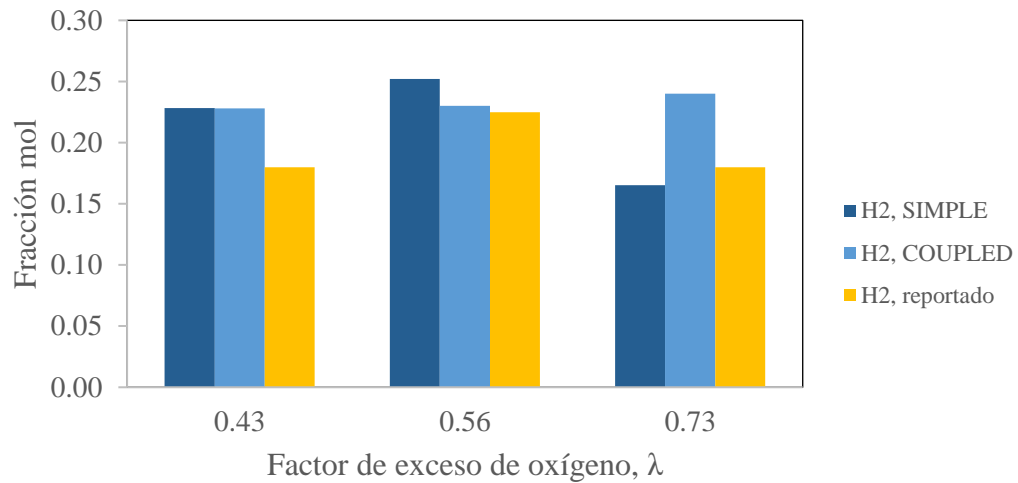
### 6.1.1 Resultados de la validación del modelo de reacción

En la Figura 6.1 se muestran los valores de la fracción mol de hidrógeno a la salida del reactor obtenida de las simulaciones en los esquemas de solución SIMPLE y COUPLED, y el valor reportado en la literatura.

La simulación se realizó con dos esquemas de solución: SIMPLE y COUPLED. El esquema SIMPLE sólo considera los efectos de la fase continua, es decir, no considera

<sup>4</sup> Se determina por estequiometría y composición de la carga; para la validación este valor es 1.5856 kg O<sub>2</sub>/kg carga.

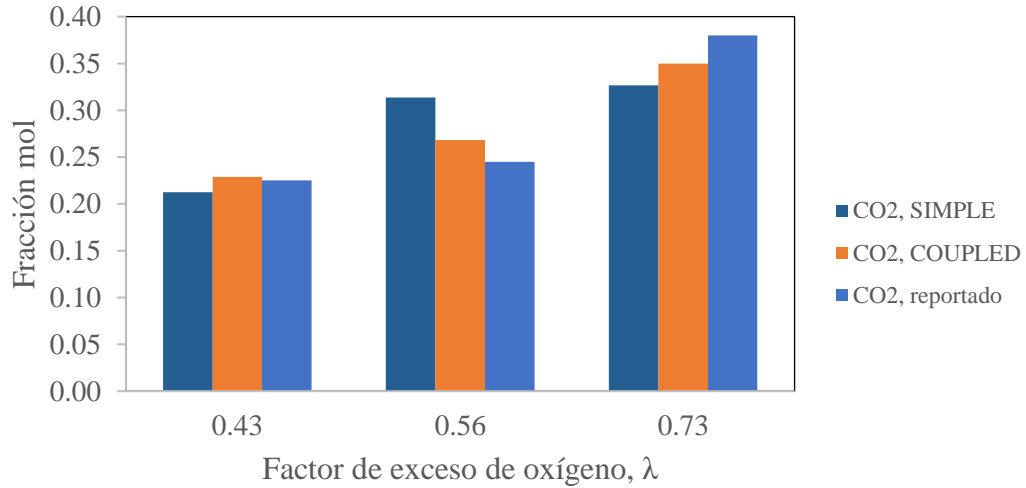
el efecto de la fase dispersa en el flujo dentro del reactor. El esquema COUPLED, incluye los efectos de las fuerzas ejercidas por la fase discreta sobre el fluido.



**Figura 6.1 Producción de hidrógeno a la salida del reactor**

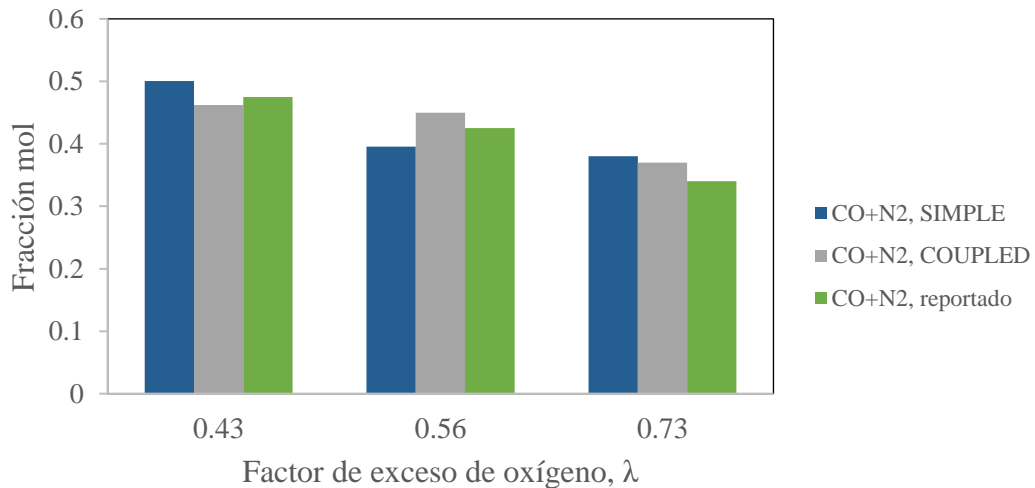
En la Tabla 6.3 se observa que los resultados obtenidos de la simulación para los diferentes factores de exceso de oxígeno con esquema SIMPLE son más cercanos a los valores reportados, mientras que los resultados obtenidos con el esquema COUPLED son casi constantes.

En la Figura 6.2 se muestran de forma comparativa los resultados de la simulación en ambos esquemas de solución y los datos experimentales de literatura para el dióxido de carbono. Se puede observar que el efecto de interacción de la fase discreta con el fluido influye directamente en la reacción de producción de dióxido de carbono y ésta se describe mejor en el esquema de solución COUPLED, puesto que la fase discreta se conforma principalmente de carbono residual, y al incluir estos efectos de actividad partícula–fluido se observa una mayor cercanía con los resultados experimentales que aquellos obtenidos con el esquema de solución SIMPLE.



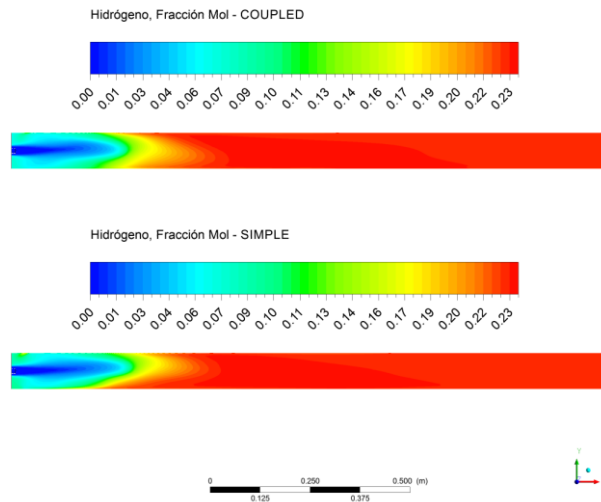
**Figura 6.2 Producción de dióxido de carbono a la salida del reactor**

Para la Figura 6.3, se observa una tendencia similar a la reportada en la Figura 6.2 para el caso de las composiciones de monóxido de carbono y nitrógeno, ya que el esquema de solución COUPLED se acerca más a los valores reportados en la literatura. En este caso en particular los resultados de la simulación se presentan como la suma de las fracciones molares de CO+N<sub>2</sub>. En el resultado de la simulación se obtuvo entre 0.05 y 0.09 en fracción molar de monóxido de carbono para el gas de salida, mientras que la diferencia corresponde a la fracción molar de nitrógeno.



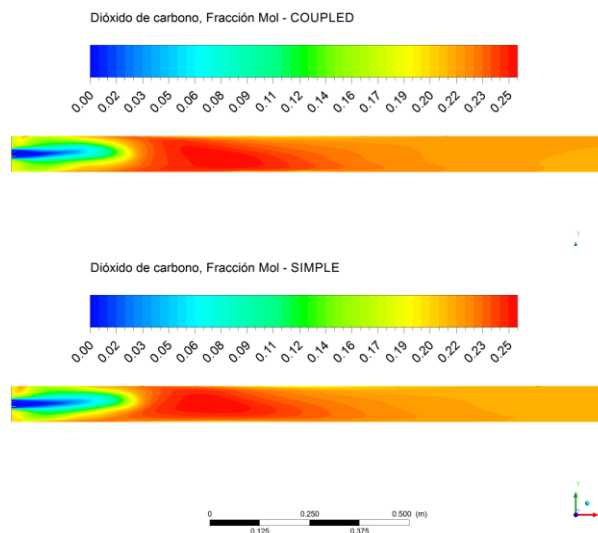
**Figura 6.3 Producción de monóxido de carbono + Nitrógeno a la salida del reactor**

La Figura 6.4 muestra de manera comparativa los esquemas de solución SIMPLE y COUPLED los perfiles a lo largo del reactor de las fracciones molares de hidrógeno. En la Figura 6.5 se muestran los perfiles para el dióxido de carbono y en la Figura 6.6 los correspondientes a la mezcla de monóxido de carbono y nitrógeno.



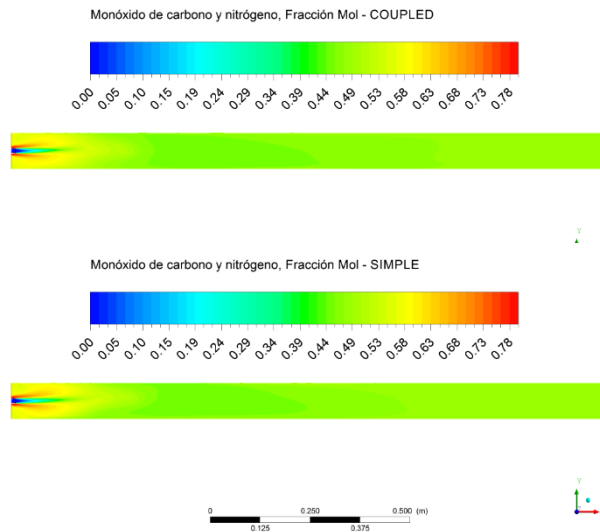
**Figura 6.4 Comparación de perfiles de fracción molar de hidrógeno para los esquemas simple y coupled, caso 1**

En la Figura 6.4 se observan pequeñas diferencias en el comportamiento de los perfiles según sea el esquema de solución, principalmente en la zona cercana a la salida del reactor.



**Figura 6.5 Comparación de perfiles de fracción molar de dióxido de carbono para los esquemas simple y coupled, caso 1**

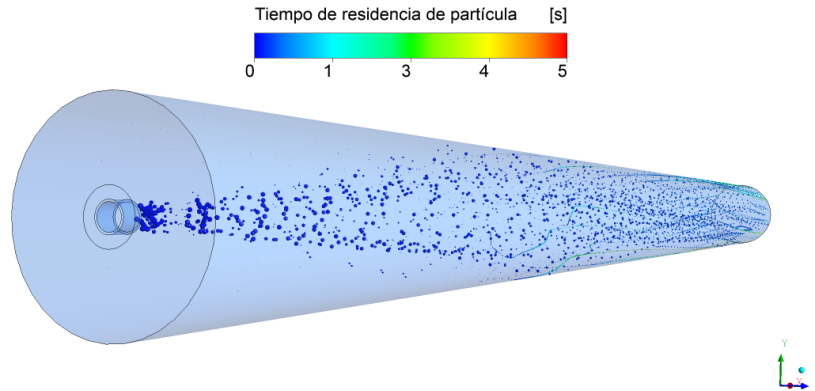
En la Figura 6.5 se observa una variación en los contornos entre ambos esquemas de solución desde la parte media del reactor hacia la salida. Sin embargo, desde la entrada hasta la parte media, las variaciones en la concentración del gas no son perceptibles.



**Figura 6.6 Comparación de perfiles de fracción molar de monóxido de carbono + nitrógeno para los esquemas simple y coupled, caso 1**

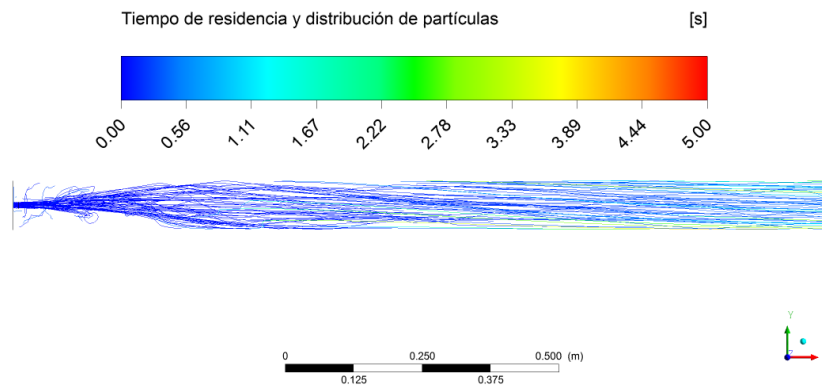
En la Figura 6.6 se observa que prácticamente ambos perfiles de concentración son idénticos.

En la Figura 6.7 se muestra la trayectoria de las partículas a lo largo del reactor. Dicha trayectoria se obtuvo con el esquema COUPLED para el primer caso de simulación, observándose que el tiempo de residencia es cercano a 1 segundo.

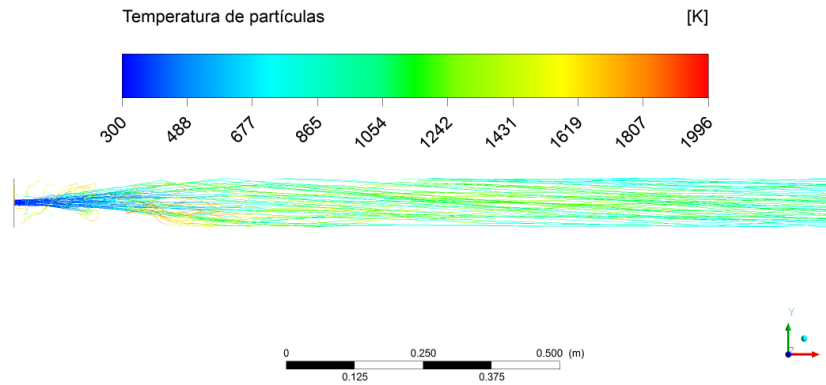


**Figura 6.7** Perspectiva de trayectoria de partículas en el caso 1, con el esquema coupled

En la Figura 6.8 , se muestra la el tiempo de residencia y la distribución de las partículas desde un corte longitudinal del reactor, mientras que en la Figura 6.9 se muestra la variación de la temperatura de las partículas conforme avanzan a lo largo del reactor.

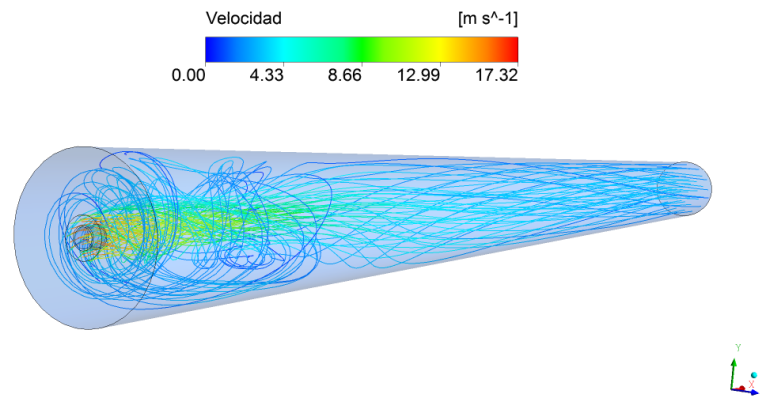


**Figura 6.8** Tiempo de residencia y distribución de partículas en el caso 1, con el esquema coupled

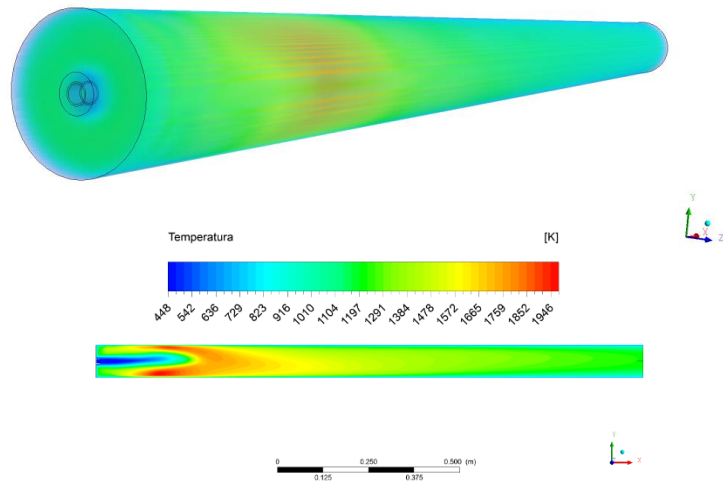


**Figura 6.9 Temperatura de partículas en el caso 1, con el esquema coupled**

Los perfiles de velocidad dentro del reactor se muestran en la Figura 6.10, donde se puede observar una zona de vórtices (remolinos) cercana a la zona de entrada de los flujos de alimentación, que coincide también con la zona de mayor temperatura dentro del reactor como se muestra en la Figura 6.11, mientras que la zona donde se consume todo el oxígeno alimentado al reactor se observa en la Figura 6.12.

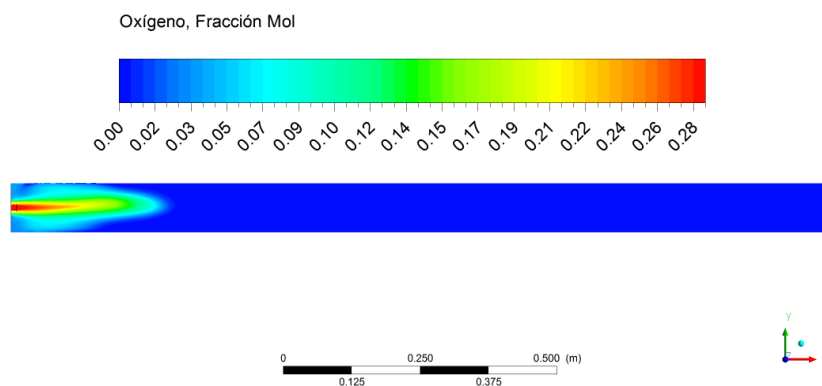


**Figura 6.10 Líneas de flujo, velocidad del fluido en el caso 1, para el esquema coupled**



**Figura 6.11 Perfil de temperatura dentro del reactor**

Es en la entrada donde se obtiene la mayor temperatura y una alta turbulencia debido a la velocidad de los flujos de alimentación en la entrada y a la energía liberada mediante las reacciones químicas, principalmente de combustión. Es aquí donde se obtiene la energía necesaria para llevar a cabo las reacciones endotérmicas de gasificación. Conforme se van llevando a cabo las demás reacciones se observa una disminución en la temperatura a lo largo del reactor, como se muestra la Figura 6.11, mientras que en la Figura 6.12 se observa que todo el oxígeno se agotó desde la zona de combustión hasta la salida del reactor.

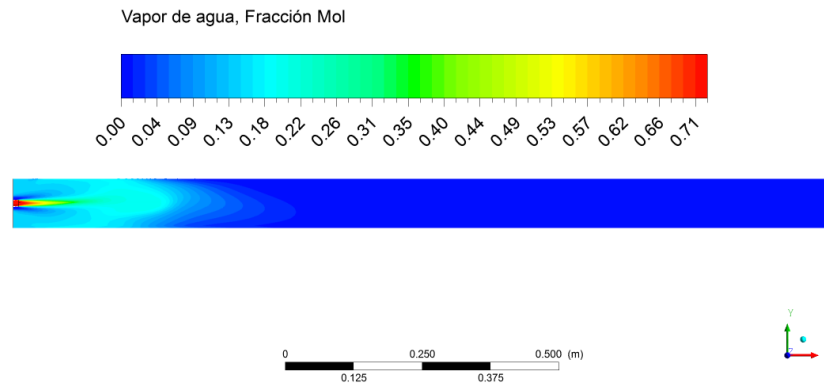


**Figura 6.12 Perfil de concentración molar de oxígeno en el caso 1, para el esquema coupled**

El perfil de temperatura y la concentración del vapor de agua que se muestra en la Figura 6.13 principalmente en la zona de mayor temperatura, benefician directamente la reacción de gasificación (III) y de conversión agua-gas (VII) debido a que estas reacciones

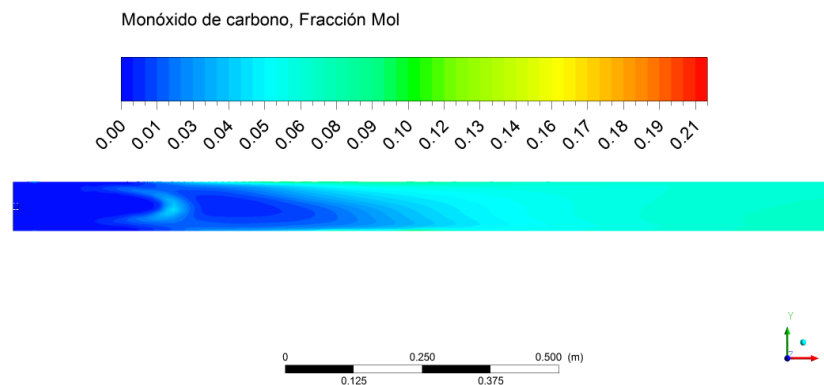


se llevan a cabo en la zona de alta temperatura. Posteriormente, el vapor de agua se agota completamente.



**Figura 6.13 Perfil de fracción molar de vapor de agua en el caso 1, para el esquema coupled**

Después de esta zona de alta temperatura y turbulencia, las partículas se dispersan a lo largo del reactor lo que provoca una mayor interacción partícula-fluido, beneficiando las reacciones de superficie de la partícula, principalmente la reacción de Boudouard (II) puesto que en esta zona se incrementa la concentración de monóxido de carbono (Figura 6.14).



**Figura 6.14 Perfil de fracción molar de monóxido de carbono en el caso 1, para el esquema coupled**

## 6.2 Condiciones de gasificación de biomasa

Una vez validado el modelo de reacción con la geometría se realiza la simulación de gasificación de biomasa como caso de estudio comparando el efecto de la relación de alimentación de carga/gas en la cual se mantiene los flujos másicos de la corriente gaseosa y cambiando la composición del agente de gasificación

La biomasa se caracteriza por una alta cantidad de material volátil (60-80 % wt) para lo cual se elige de literatura datos de polvo de aserrín (ingresar) cuya composición se muestra en la Tabla 6.4.

**Tabla 6.4 Características polvo de aserrín (biomasa)**

<b>Análisis proximal (% wt, a.r.)</b>		<b>Análisis elemental (% wt, d.b.)</b>	
<b>Carbón fijo</b>	23.7	C	50.0
<b>Materia volátil</b>	68.6	H	6.3
<b>Cenizas</b>	0.46	O	43.0
<b>Humedad</b>	7.24	N	0.4
		S	0.3
<b>Poder Calorífico Inferior:</b> $1.82 \times 10^7$ J/kmol			

Las condiciones de alimentación para la gasificación de biomasa se calcularon a partir del balance de masa, considerando el oxígeno teórico para la conversión total de carbono contenido en la carga a monóxido de carbono y de tal manera que puedan ser reproducidas fácilmente en pruebas de laboratorio del reactor de gasificación a escala banco. Como en la validación se considera un arreglo de arrastre corriente hacia abajo. Los flujos másicos en las corrientes gaseosas se mantienen para conservar la dinámica de los fluidos en la geometría del reactor

**Tabla 6.5 Condiciones de alimentación del reactor para gasificación de biomasa**

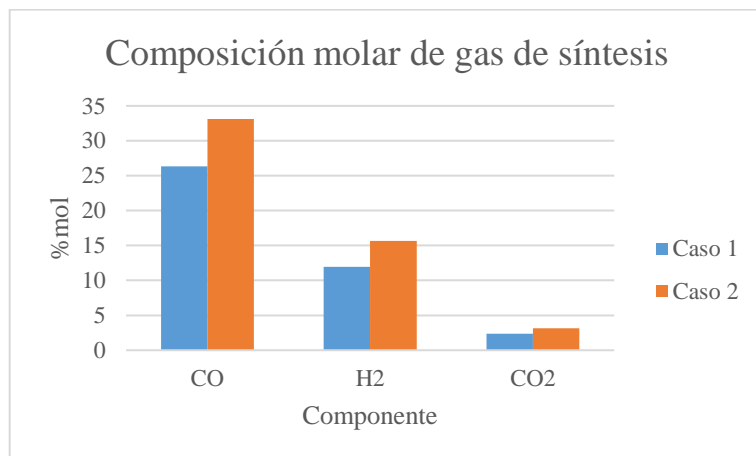
<b>Entrada 1</b>	<b>Caso 1</b>	<b>Caso 2</b>
<b>Flujo másico de carga (kg/h)</b>	11.6	20.25
<b>Flujo másico de gas (kg/h)</b>	2.5	2.5
<b>Fracción masa de oxígeno</b>	0.23	0.40

<b>Temperatura de alimentación (°C)</b>	525	525
<b>Entrada 2</b>		
<b>Flujo másico de aire (kg/h)</b>	9.5	9.5
<b>Fracción masa de oxígeno</b>	0.23	0.4
<b>Temperatura de alimentación (°C)</b>	525	525

### 6.2.1 Resultados de la simulación de gasificación de biomasa

Los resultados del gas de síntesis obtenidos de la gasificación de biomasa a las condiciones de alimentación establecidas en la Tabla 6.5 se muestran a continuación.

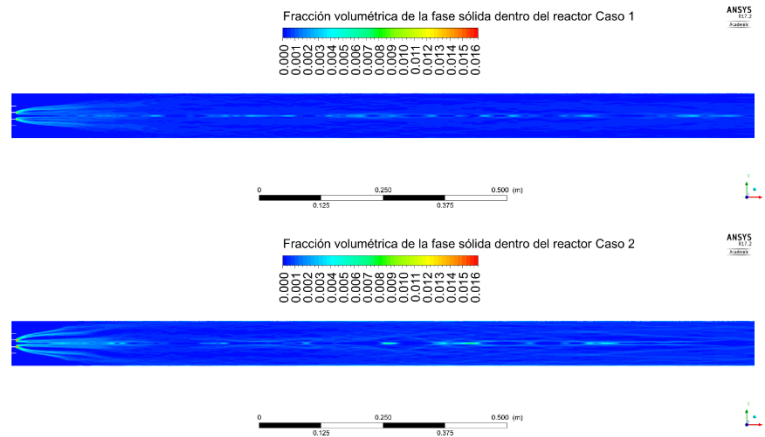
En la Figura 6.15 se observa la composición del gas de síntesis a la salida del reactor para ambas condiciones de reacción, la cual muestra que al reducir la cantidad de nitrógeno presente en la alimentación de gas aumenta la fracción molar de monóxido de carbono e hidrógeno.



**Figura 6.15** Composición de gas de síntesis para simulación de biomasa

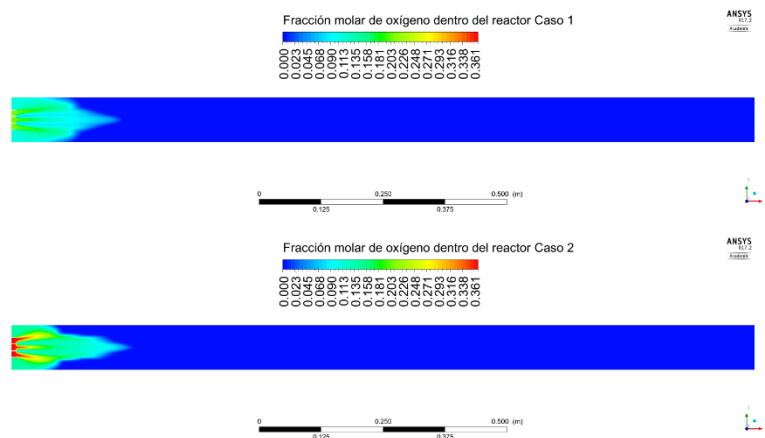
La relación de alimentación de carga contra alimentación de gas tiene un efecto directo en la distribución de la fase sólida a través del reactor, ya que para mantener las condiciones de dinámicas del fluido se incrementa la carga de biomasa a gasificar a tratar. Sin embargo, la carga de biomasa que se puede alimentar está limitada a la geometría y capacidad del reactor.

En la Figura 6.16 se observa el perfil de la fracción de la fase sólida presente a lo largo del reactor. Esta distribución muestra que aun después de las zonas de combustión y reducción hay presencia de fase sólida, como cenizas y carbón residual sin reaccionar.



**Figura 6.16 Distribución de las partículas sólidas dentro del reactor de gasificación**

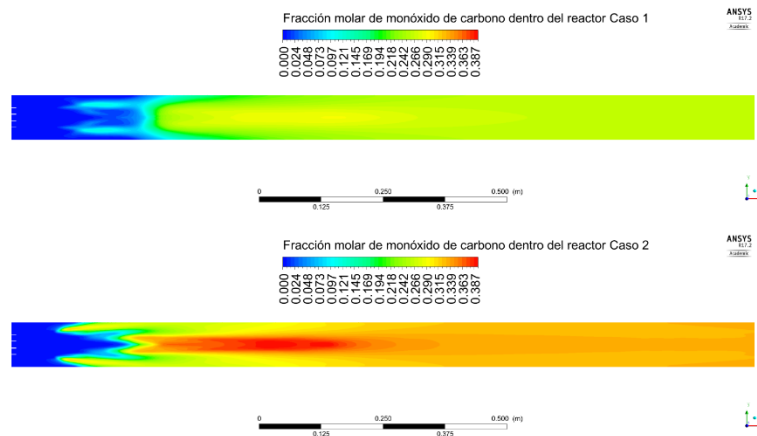
Una de las principales zonas del reactor de gasificación, es la zona de combustión, podría decirse que es la zona de mayor importancia ya que sin ella, no sería posible llevar a cabo la gasificación, como se observa en la Figura 6.17 el perfil de la fracción molar, indica el inicio de la zona de combustión.



**Figura 6.17 Perfil de la fracción molar de oxígeno en la gasificación de biomasa**

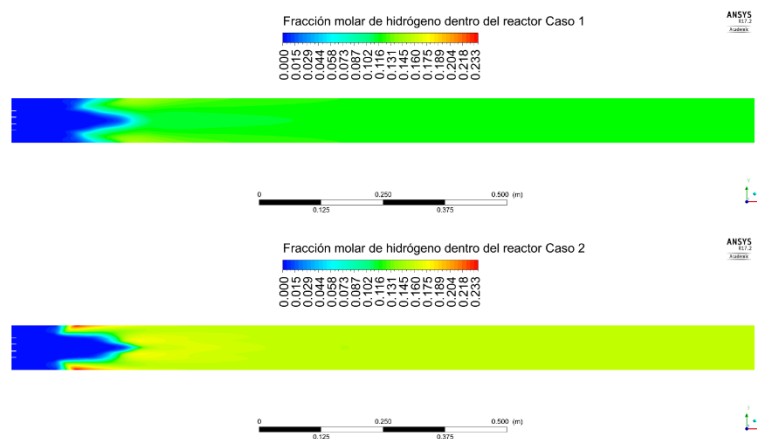
Una vez que comienza la combustión del material carbonoso, en este caso biomasa, la energía generada de las reacciones de oxidación de la materia volátil, el carbón residual, ceden esa energía a las reacciones subsiguientes de gasificación, debido a que el oxígeno prácticamente se ha consumido, no hay forma de continuar con la oxidación de los demás componentes.

Las reacciones de gasificación heterogéneas se benefician en esta zona de baja concentración de oxígeno. Comenzando a producir hidrógeno y monóxido de carbono como se muestra en la Figura 6.18, en donde la relación de alimentación carga/gas del caso 2 beneficia la producción de monóxido de carbono.



**Figura 6.18 Perfil de la fracción molar de monóxido de carbono en la gasificación de biomasa**

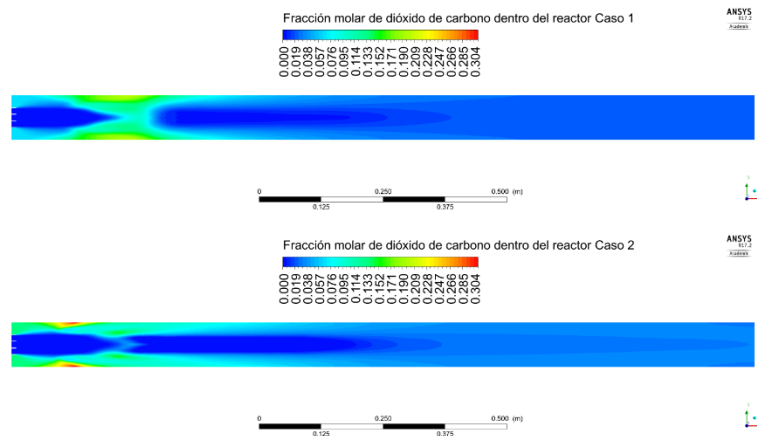
Así mismo, la reacción (III) de gasificación se beneficia con las condiciones de ausencia de oxígeno, la relación de alimentación del caso 2 muestra una mayor actividad en la producción de hidrógeno observada en la Figura 6.19. El perfil de la fracción molar de hidrógeno se mantiene una vez que pasa la zona de gasificación.



**Figura 6.19 Perfil de la fracción molar de hidrógeno en la gasificación de biomasa**

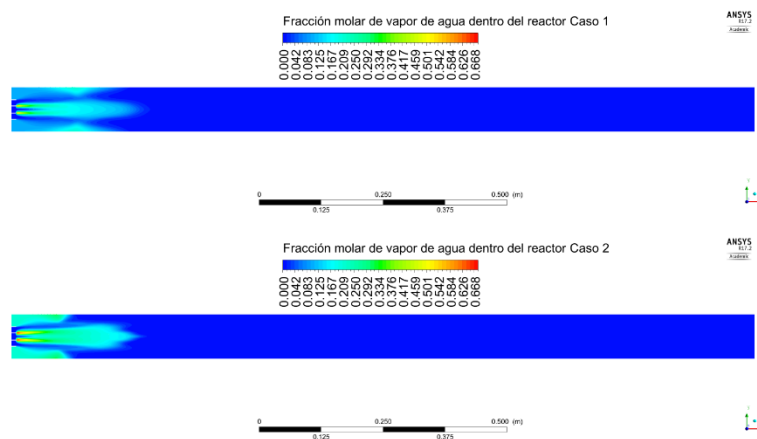
El perfil de la fracción del dióxido de carbono nos muestra una mejor referencia de la zona de combustión, la zona entre el consumo total del oxígeno alimentado y la

producción de los componentes principales del gas de síntesis, estos dos componentes con la suficiente energía para continuar reaccionando. En la Figura 6.20, se observa la zona de mayor producción de dióxido de carbono, así también, es posible observar la zona de gasificación de la fase gaseosa, en condiciones que benefician a la reacción II.



**Figura 6.20 Perfil de la fracción molar de dióxido de carbono en la gasificación de biomasa**

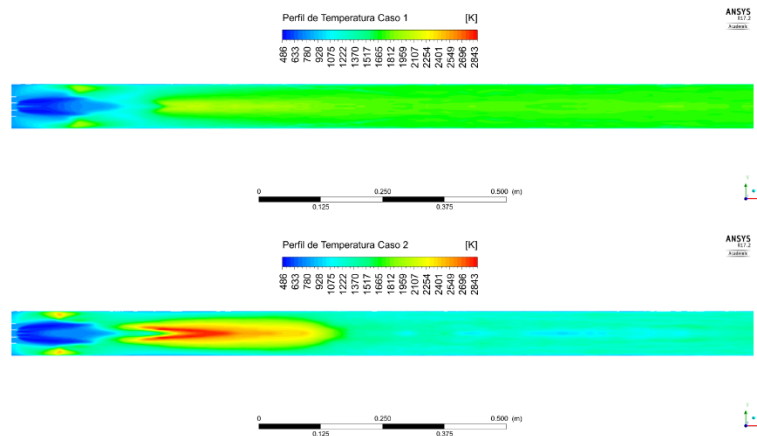
El vapor de agua generado en el reactor de gasificación, se consume en casi inmediatamente después de la combustión, principalmente por la reacción III, como se presenta en la Figura 6.21, al no haber ingresado vapor de agua como agente de gasificación, la mayor producción de hidrogeno se le atribuye a la reacción III.



**Figura 6.21 Perfil de la fracción molar de vapor de agua en la gasificación de biomasa**

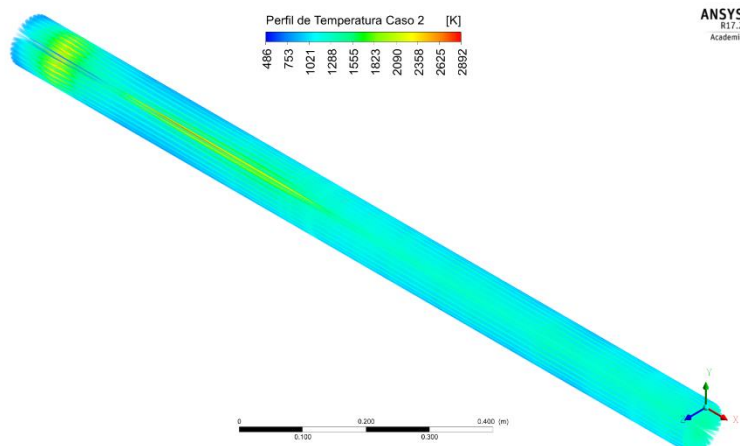
El perfil de temperatura a lo largo del reactor ayuda a explicar a la formación de los componentes del gas de síntesis, así también, a identificar las zonas en las que ocurren las reacciones.

La Figura 6.22 muestra claramente que al disminuir el contenido de nitrógeno en la mezcla del agente de gasificación, en la que el caso 1 es aire ambiente, y para el caso 2 una mezcla con 40% peso de oxígeno, muestra un incremento considerable de temperatura en una zona pequeña del reactor.



**Figura 6.22 Perfil de temperatura en la gasificación de biomasa**

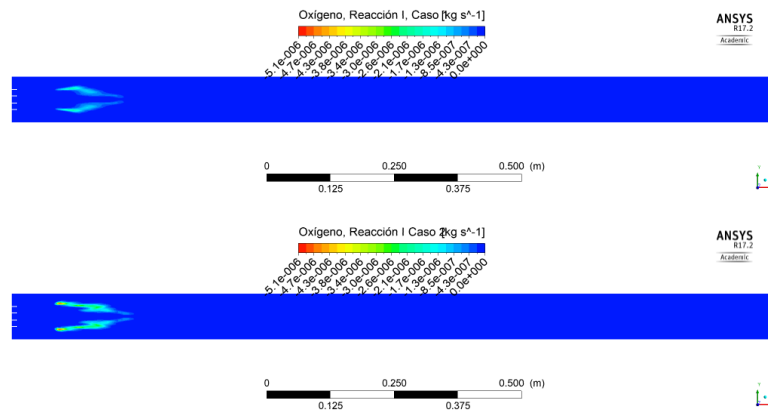
En la vista de corte longitudinal del reactor se aprecia hay una zona de elevada temperatura, sin embargo, en el perfil de temperaturas del reactor total, el tamaño de la zona de mayor temperatura es pequeño, como se ve en la Figura 6.23.



**Figura 6.23 Perfil de temperatura total del reactor en la gasificación de biomasa**

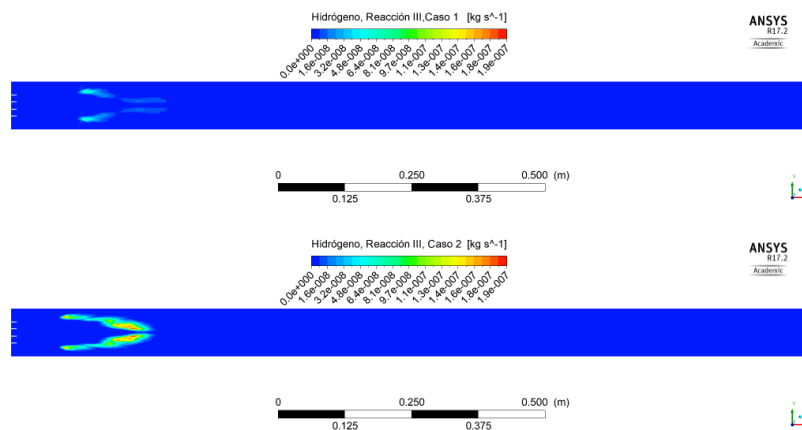
Las reacciones heterogéneas de gasificación suceden en la zona de mayor energía dentro del reactor como se presentan a continuación.

La zona en donde se lleva a cabo la reacción (I) se observa indirectamente, con el consumo el de oxígeno por parte de la fase sólida en el reactor, como se aprecia en la Figura 6.24, en los que los valores negativos representan la transferencia de masa se la fase gaseosa a la fase sólida, el caso 2 muestra mayor interacción.



**Figura 6.24**

De la misma manera en la Figura 6.25 se observa la zona de gasificación con el vapor de agua que corresponde a la reacción (II), la cual se ve beneficiada con las condiciones del caso 2.



**Figura 6.25**

Las interacciones de las tres reacciones heterogéneas de gasificación se observar con la generación de monóxido de carbono proveniente de la fase solida que puede observarse en laFigura 6.26, aquí se marca una ligera diferencia entre las condiciones del caso 1 y caso 2, puesto que para el caso 1 el perfil sugiere actividad en dos etapas, reacción (I) y posteriormente reacciones (II) y (III), mientras que el perfil del caso sugiere un



comportamiento en el cual la reacción (I) y (III) se conjuntan en una etapa y la reacción (II) continua después de esta.

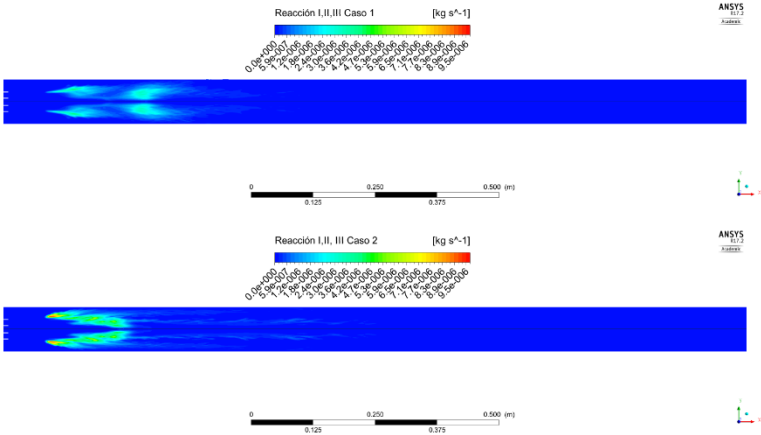


Figura 6.26

## 7 CONCLUSIONES

En este trabajo se realizó la validación y simulación de un reactor de gasificación de flujo arrastrado con corriente descendente a escala de banco en tres dimensiones, con un enfoque numérico Euler-Lagrange usando el método de fase densa discreta que permite simular la interacción entre las fases sólida y gaseosa. En el modelo de reacción se consideraron tres reacciones heterogéneas y cinco en la fase gaseosa.

Los resultados obtenidos de la validación del modelo de reacción y simulación CFD corresponden adecuadamente con los datos reportados en el trabajo experimental de Mladenovic, et. al. (2007) , por lo cual se utiliza el modelo de reacción y la geometría de reactor para realizar la simulación de gasificación de biomasa en el estudio del efecto de la relación de alimentación de la carga y el agente de gasificación.

El estudio se centra en la comparación de dos casos de gasificación de biomasa para producir gas de síntesis con condiciones de alimentación que permitan comparar con futuras pruebas de laboratorio los resultados presentados en este trabajo.

La simulación de la gasificación de biomasa se llevó a cabo estableciendo la cantidad de oxígeno conforme al balance de materia y simulando dos casos el primero donde se usa aire como agente de gasificación y otro una mezcla de oxígeno al 40 % en peso. Donde obtuvo que los resultados de la simulación de la gasificación de biomasa en las composiciones de gas de síntesis corresponden a los esperados. Según de diferentes autores, las composiciones mol de gas de síntesis en reactores de gasificación no presurizados con agentes de gasificación aire/oxígeno como agente de gasificación se encuentran en los rangos de 20-30% mol para monóxido de carbono, 10-20% mol para hidrógeno, 5-10% mol para dióxido de carbono, trazas de metano, vapor de agua, etc. (Andersson, 2017).

La relación de alimentación de la carga respecto al agente de gasificación mostro tener un efecto en la mejora en la composición del gas de síntesis como se ve en la Figura 6.15, aunque en términos de calidad de gas de síntesis para ambos se considera baja. Sin

embargo, si muestra un efecto importante en los fenómenos internos del reactor de gasificación, aumentando la actividad en interacción entre fases y una mayor distribución de la fase sólida a lo largo del reactor.

Basado en los resultados de validación del modelo de reacción y la simulación CFD, así como también en los resultados obtenidos de estudio de la simulación de biomasa, se considera que el presente trabajo describe adecuadamente la simulación en CFD del proceso de gasificación, ya que considera: diferentes condiciones de operación, diferentes cargas de material carbonoso, diferentes relaciones de alimentación, modelo multi-fase y modelo de reacción.

Se considera como trabajo futuro la construcción de un reactor de gasificación, con características y dimensiones que se presentan en este trabajo. Con la finalidad de lograr la calibración del modelo de reacción y la verificación de la simulación CFD para investigaciones posteriores en el uso de esta tecnología.

## 8 REFERENCIAS

- Ajilkumar, A., Sundararajan, T., & Shet, U. (2009). Numerical modeling of a steam-assisted tubular coal gasifier. *Internacional Journal of Thermal Sciences* 48, 308-321.
- Andersson, J. (2017). *Systems Analysis of Chemicals Production via Integrated Entrained Flow*. SE-971 87 Luleå, Sweden: Luleå University of Technology.
- ANSYS, Inc. (s.f.). Fluent Reactions Database.
- Basu, P. (2006). *Combustion and gasification in fluidized beds*. Boca Raton, Florida: CRC press.
- Basu, P. (2010). *Biomass gasification and pyrolysis: practical design and theory*. Academic press.
- Basu, P. (2013). *Biomass gasification, pyrolysis and torrefaction: practical design and theory*. Academic press.
- Cattolica, R. J., Liu, H., & Seiser, R. (2016). CFD studies on biomass gasification in a pilot-scale dual fluidized-bed system. *International Journal of Hydrogen Energy*, 11974-11989.
- Chen, C., Horio, M., & Kojima, T. (2000). Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers. Part I: Modeling of coal gasification in an entrained flow gasifier. *Chemical Engineering Science* 55, 3861-3874.
- Dapeng, B., Qingliang, G., Weiwei, X., & Jiansheng, Z. (2015). Combined slag flow model for entrained flow gasification. *Fuel* 150, 565–572.
- Dayton, D. C., Brown, A. L., Nimlos, M. R., & Daily, J. W. (2001). Design and Characterization of an Entrained Flow Reactor for the Study of Biomass Pyrolysis Chemistry at High Heating Rates. *Energy & Fuels*, 1276-1285.
- ECN Biomass. (2004). Contributios ECN Biomass. *The 2nd world conference and technology exhibition on biomass for energy, industry and climate protection*. Rome, Italy.
- Ghoniem, A. F., & Kumar, M. (2011). Multiphysics Simulations of Entrained Flow Gasification. Part I: Validating the Nonreacting Flow Solver and the particle Dispersion Model. *Energy and Fuels*, 451-463.
- Ghoniem, A. F., & Kumar, M. (2011). Multiphysics Simulations of Entrained Flow Gasification. Part II: Constructing and Validating the Overall Model. *Energy and Fuels*, 464-479.

- Halama, S., & Spliethoff, H. (2015). Numerical simulation of entrained flow gasification: Reaction kinetics and char structure evolution. *Fuel Processing Technology, 138*, 314-324.
- Halama, S., Steibel, M., Geißler, A., & Spliethoff, H. (2017). Gasification kinetics of a bituminous coal at elevated pressures: Entrained flow experiments and numerical simulations. *Fuel, 196*, 210-216.
- Hla, S. S., Roberts, D. G., & Harris, D. J. (2015). A numerical model for understanding the behaviour of coals in an entrained-flow gasifier. *Fuel Processing Technology 134*, 424–440.
- Hwang, J., Jeong, H. J., Hwang, I. S., & Park, S. S. (2017). Investigation on co-gasification of coal and biomass in Shell gasifier by using a validated gasification model. *Fuel, 196*, 371-377.
- Hwang, J., Seo, D. K., & Jeong, H. J. (2014). CFD modeling for coal size effect on coal gasification in a two-stage commercial entrained-bed gasifier with an improved char gasification model. *Applied Energy, 29-36*.
- Janajreh, I., Adeyemi, I., & Arink, T. (2015). Numerical Modeling of the Entrained Flow Gasification (EFG) of Kentucky Coal and Biomass. *Energy Procedia, 75*, 232 – 239.
- Kirkels, A. F., & Verbong, G. P. (2011). Biomass gasification: Still promising? A 30-year global overview. *Renewable and Sustainable Energy Reviews 15*, 471–481.
- Kojima, T., Chen, C., & Horio, M. (December de 2000). Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers. Part I: modeling of coal gasification in an entrained flow gasifier. *Chemical Engineering Science, 55*, 3861-3874.
- Kojima, T., Chen, C., & Horio, M. (December de 2000). Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers. Part II: effects of operating conditions on gasifier performance. *Chemical Engineering Science, 55*, 3875-3883.
- Kojima, T., Chen, C., Miyoshi, T., Kamiya, H., & Horio, M. (August de 1999). On the Scaling-up of a Two-stage Air Blown Entrained Flow Coal Gasifier. *The Canadian Journal of Chemical Engineering, 77*, 745-750.
- Ku, X., Li, T., & Lovas, T. (2014). Eulerian–Lagrangian Simulation of Biomass Gasification Behavior in a High-Temperature Entrained-Flow Reactor. *Energy & Fuels, 5184-5196*.
- Kuhlman, J. M., Slezak, A., Shadle, L., Spenik, J., & Shi, S. (2010). CFD simulation of entrained-flow coal gasification: Coal particle density/size fraction effects. *Powder Technology 203*, 98–108.

- Ma, J., & Zitney, S. E. (2012). Computational Fluid Dynamic Modeling of Entrained-Flow Gasifiers with Improved Physical and Chemical Submodels. *Energy & Fuels*, 7195-7219.
- Mladenovic, R., Crnomarkovic, N., Repic, B., Neskovic, O., & Veljkovic, M. (2007). Experimental investigation of role of steam in entrained flow coal gasification. *Fuel*, 86, 194-202.
- Park, T. J., Choi, Y. C., Li, X. Y., Kim, J. H., & Lee, J. G. (2001). Numerical study on the coal gasification characteristics in an entrained flow coal gasifier. *Fuel*, 80, 2193-2201.
- Rezaiyan, J., & Cheremisinoff, N. P. (2005). *Gasification Technologies A Primer for Engineers and Scientists*. Taylor & Francis Group.
- Stark, A. K., Altantzis, C., Bates, R. B., & Ghoniem, A. F. (2016). Towards an advanced reactor network modeling framework for fluidized bed biomass gasification: Incorporating information from detailed CFD simulations. *Chemical Engineering Journal*, 409-424.
- Sundararajan, T., Ajilkumar, A., & Shet, U. (2009). Numerical modeling of a steam-assisted tubular coal gasifier. *International Journal of Thermal Sciences*, 48, 308-321.
- Vascellari, M., Arora, R., & Hasse, C. (2014). Simulation of entrained flow gasification with advanced coal conversion submodels. Part 2: Char conversion. *Fuel*, 118, 369-384.
- Vascellari, M., Arora, R., Pollack, M., & Hasse, C. (2013). Simulation of entrained flow gasification with advanced coal conversion. Part 1: Pyrolysis. *Fuel*, 113, 654-669.
- Watanabe, H., & Otaka, M. (March de 2006). Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier. *Fuel*, 85, 1935-1943.
- Yan, L., & Wang, Y. (2008). CFD Studies on Biomass Thermochemical Conversion. *International Journal of Molecular Sciences*, 1108-1130.