



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**



FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA

**ANÁLISIS NUMÉRICO DE UN GASIFICADOR ESTRATIFICADO
DE BIOMASA MEDIANTE VOLÚMENES FINITOS CON CFD**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA

JOSÉ LUIS NAVA FABIAN

TUTOR

DR. ALEJANDRO ROGEL RAMÍREZ



MÉXICO D.F. 2008



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
ZARAGOZA
JEFATURA DE LA CARRERA DE INGENIERÍA
QUÍMICA

OFICIO: FESZ/JCIQ/007/08

ASUNTO: Asignación de Jurado

ALUMNO: NAVA FABIÁN JOSÉ LUIS
P R E S E N T E

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado, la jefatura a mi cargo, ha propuesto a los siguientes sinodales:

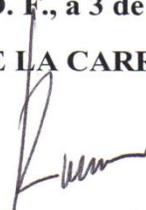
PRESIDENTE	Dr. Alejandro Rogel Ramírez
VOCAL	I. Q. Tomás Vargas Ramírez
SECRETARIO	M. en C. Esteban Minor Pérez
SUPLENTE	I. Q. Fausto Calderas García
SUPLENTE	M. en C. Javier Hernández Aguilar

Sin más por el momento, reciba un cordial saludo.

A T E N T A M E N T E
“POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU”

México D. F., a 3 de Marzo de 2008

JEFE DE LA CARRERA


I. Q. RAÚL RAMÓN MORA HERNÁNDEZ



*Este no es el fin,
ni siquiera el principio del fin
pero si es el fin del principio.*

Winston Churchill

Dedicado...

A la inagotable fuente de energía que anima todo lo existente en el universo.

A mi madre que me ha dado todo sin dudarle, su apoyo, su protección, su confianza pero sobre todo su amor, indudablemente mi amiga de toda la vida, quien con sus sabios consejos me ha sabido consolar en los momentos más difíciles de mi vida.

A mi padre que es una guía en mi vida, que gracias a su tenacidad, trabajo y dedicación ha logrado mostrarme que los obstáculos en la vida jamás serán más grandes que la convicción de luchar por lo que se anhela.

No tengo palabras para decirles cuanto los amo y seguramente nunca las tendré, por todo lo que me han dado y aun me dan solo les puedo decir GRACIAS.

En el arte como en el amor la ternura es lo que da la fuerza.

Oscar Wilde

Agradecimientos.

A la Universidad Nacional Autónoma de México y su Facultad de Estudios Superiores Zaragoza por la educación invaluable que me ha brindado, además de apoyar mis estudios profesionales la mayor parte de mi estancia en la ella con una beca que mas allá de un estímulo económico fue un estímulo moral para continuar esforzándome.

Al ambicioso “*Macroproyecto ciudad universitaria y la energía*” que engloba al programa de “*Generación de energía eléctrica para el alumbrado de algunas calles de ciudad universitaria por medio de gasificación de residuos biomásicos orgánicos*”, dirigido por Dr. Javier Aguillón Martínez. En este programa se me brindo la oportunidad de poder participar por lo cual agradezco ampliamente, además de agradecer el apoyo económico prestado para la realización de esta tesis.

Al Dr. Alejandro Rogel Ramírez director de esta tesis, por su incondicional apoyo y dedicación, así como por sus sugerencias sin las cuales no hubiera sido posible la elaboración de este trabajo.

Al profesor Tomas Vargas Ramírez, que mas que un profesor se mostro como un amigo del cual aprendí que el aprendizaje es una constante y jamás debe convertirse en una variable.

Agradezco las oportunas observaciones y comentarios del I. Q. Calderas García Fausto, del M. C. Hernández Aguilar Javier, del M. C. Minor Pérez Esteban y del I. Q. Vargas Ramírez Tomás, que ayudaron a mejorar y enriquecer este trabajo.

A mi hermano de quien he aprendido que pensar diferente no implica vivir en un mundo ajeno a los demás.

A todos mis amigos por los momentos donde reímos, discutimos pero sobre todo por haber aprendimos junto a ellos el valor de la amistad, pues la amistad sólo puede tener lugar a través del desarrollo del respeto mutuo y dentro de un espíritu de sinceridad.

A F.A.L por estar a mi lado.

***Solo un exceso es recomendable en el mundo:
el exceso de gratitud.***

Jean de la Bruyère



Índice

Resumen.....	1
Objetivos.....	2
Introducción.....	3
Capítulo I Antecedentes	
Introducción.....	6
1.1 Necesidad de las fuentes de energías renovables.....	7
1.1.1 Protocolo de Montreal.....	8
• Países desarrollados	
• Países subdesarrollados	
1.1.2 Protocolo de Kioto.....	9
1.2 Potencial y aprovechamiento de las fuentes energías renovables en el mundo.....	10
1.3 Panorama de las energías renovables en México.....	10
1.4 La formación de la biomasa.....	11
1.5 Biomasa.....	13
1.5.1 La biomasa en el mundo.....	13
1.6 Técnicas de gasificación para la biomasa.....	15
1.6.1 Gasificación.....	15
1.6.2 Pirolisis.....	16
1.6.3 Gasificación por plasma.....	17
1.7 Gasificadores.....	18
1.7.1 Gasificadores de lecho móvil y lecho fluidizado.....	18
1.7.2 Empresas que desarrollan la tecnología de los gasificadores.....	19



1.8 Estado del Arte.....	19
Capítulo II	
Tecnologías de Gasificación	
Introducción.....	24
2.1 Evolución histórica y perspectivas de gasificación.....	25
2.2 Gasificación.....	27
2.3 Aspectos energéticos de la gasificación.....	28
2.3.1 Reacciones Químicas.....	29
2.4 Producción de energía a partir de biomasa: las tecnologías de gasificación.....	30
2.4.1 La gasificación como vía de conversión de la biomasa.....	30
2.5 Pre-tratamiento de la Materia prima.....	30
2.6 Propiedades de la materia prima.....	31
2.6.1 Contenido de humedad.....	31
2.6.2 Cenizas.....	31
2.6.3 Compuestos volátiles.....	32
2.6.4 Tamaño de las partículas.....	32
2.7 Tipo de gasificadores.....	32
2.7.1 Gasificador de corriente ascendente o gasificador a contracorriente.....	32
2.7.2 Gasificador de corriente descendente o de corrientes paralelas.....	33
2.7.3 Gasificadores de flujo cruzado.....	34
2.7.4 Rendimiento.....	34
2.8 Gasificación de lecho fluidizado.....	35
2.8.1 Gasificador de lecho fluidizado burbujeante y Circulante.....	35
2.9 Problemas en el proceso de gasificación.....	36
2.9.1 Partículas.....	37
2.9.2 Eliminación de alquitranes.....	37
2.9.3 Impurezas.....	39



2.10 Selección del tipo de gasificador.....	40
2.11 El desarrollo de otras tecnologías de gasificación en el mundo.....	42
Capítulo III	
Modelado matemático	
Introducción.....	45
3.1 Modelos cinéticos de las reacciones.....	46
3.2 Modelo de núcleo sin reaccionar.....	46
3.3 Modelo de Arrhenius.....	47
3.4 Modelo Eddy Break Up (EBU).....	47
3.5 Modelo disipación turbulenta (EDC).....	48
3.6 Pirolisis.....	48
3.6.1 Reacciones consideradas en el proceso de pirolisis.....	49
3.7 Ecuaciones gobernantes.....	50
3.8 Componentes de la fase gaseosa (Syngas).....	51
3.9 Reacciones homogénea y heterogénea.....	51
3.10 Transferencia de calor.....	55
3.11 Transferencia de momentum.....	55
3.12 Turbulencia.....	55
3.13 Tamaño de partícula.....	56
3.14 Propiedades físicas.....	57
3.15 Condiciones iniciales.....	58



3.16 Detalles numéricos.....	59
3.17 Volumen finito.....	59
3.18 Resultados.....	64
3.18.1 Composición del syngas.....	64
3.18.2 Perfil de temperaturas.....	66
3.18.3 Perfil de Velocidades.....	67
Conclusiones.....	68
Anexo I	
CFD PHOENICS	
Introducción.....	70
A.1 ¿Qué es CFD?.....	71
A.1.1 Usos de CFD.....	71
A.1.2 Predicciones CFD.....	71
A.2 Componentes de PHOENICS.....	72
A.3 El procesador EARTH.....	73
A.4 Archivos de intercomunicación.....	76
A.5 Construcción del archivo Q1.....	78
A.6 Modos de operación.....	79
A.7 Versiones de PHOENICS para propósitos especiales.....	80
A.8 Plataformas.....	81
A.9 La Estructura de GROUND.....	82
A.10 Opciones de comunicación entre Q1 y EARTH.....	84



Anexo II

Q1.....90

Bibliografía.....107



Resumen.

El desarrollo de proceso de gasificación ha sido utilizado desde finales el siglo XIX, con el paso del tiempo fue enfrentándose gradualmente a un desuso provocado por el auge de los combustibles fósiles especialmente del petróleo. El uso excesivo de estos combustibles y el hecho de que la población mundial se multiplicó por seis en el último siglo y el consumo mundial de energía aumentó 80 veces durante este mismo siglo [Rogner, 2000] ha provocado severos daños al medio ambiente debido a las altas emisiones de gases de efecto invernadero.

Hoy en día la humanidad se enfrenta a una crisis energética provocada por el agotamiento de los combustibles fósiles como el petróleo el cual se encuentra cada vez a más altas profundidades lo cual eleva el costo de extracción y por ende el del combustible.

Diversos países han buscado nuevas fuentes de energía destacando la biomasa la cual es considerada como el combustible de mayor potencial como fuente de energía del futuro y como recurso energético podría representar el 50 % de la demanda energética total de Europa [B.V. Babu and Pratik N. Sheth, 2005], en vista de esto la gasificación es nuevamente retomada y es considerada económicamente competitiva, térmicamente eficiente y respetuosa con la naturaleza, razón por la cual se han desarrollado diferentes tipos de gasificadores los cuales básicamente son de dos tipos: de lecho fijo y de lecho fluidizado, con variaciones dentro de cada tipo [Rampling,1993; Rampling and Gill, 1993].

El tema central de este trabajo es el desarrollo de un modelo numérico del las principales variables térmicas e hidrodinámicas de un gasificador estratificado de flujos paralelos que opera con partículas de madera medianas y gruesas de 5 μm a 5 cm con un contenido de humedad de 0% a 30 % utilizando el software **PHOENICS 3.5.1** CFD el cual proporciona un entorno preciso y amplio para la resolución y simulación de procesos que incluyen el tratamiento de flujos de fluidos, transferencia de masa, reacciones químicas etc.

Los datos resultantes de la simulación (composición, perfil de temperatura y perfil de velocidades) fueron comparados con otros modelos y con de datos experimentales disponibles en la literatura [Chee, 1987; Senelwa, 1997; Jayah Datos experimentales, 2003; Modelo de D.L. Giltrap et al; 2003] encontrando una aceptable congruencia.



Objetivos

- Estudiar el entorno de las fuentes de energías renovables en México y en el mundo.
- Analizar las diversas tecnologías de gasificación
- Simular las variables térmicas e hidrodinámicas de un gasificador estratificado de flujos paralelos
- Construir un modelo numérico, para diseñar y optimizar el comportamiento hidrodinámico de un gasificador estratificado de flujos paralelos, que opera con mezclas biomásicas.
- Compar el modelo matemático con datos experimentales disponibles en la literatura.

*No. No hay intentos hazlo o déjalo
Pero no hay intentos*



Introducción.

La humanidad ha comprendido a lo largo de la historia su amplia dependencia por la energía, empleándola en múltiples formas desde cocinar sus alimentos, sobrevivir ante las inclemencias del clima hasta poner en órbita satélites indispensables para la comunicación. Actualmente la demanda de energía se incrementa cada vez más en cada nación del mundo y de forma contraria la principal fuente de energía (combustibles fósiles) se encamina a una crisis global causada por la disponibilidad del petróleo ya que se vuelve cada vez más caro de extraer.

En el último siglo la utilización excesiva de los combustibles fósiles ha traído como consecuencia graves daños al medio ambiente provocando cambios climáticos severos que dañan directamente al ser humano. Por lo anterior es indispensable un enfoque más amplio a las fuentes de energía renovables que son aquellas que están siendo constantemente renovadas en un proceso natural como los son la solar, eólica, mareomotriz, biomasa, hidroeléctrica, geotérmica. Las cuales actualmente están siendo consideradas como una importante alternativa para hacer frente a la crisis energética que vive el mundo y de esta forma disminuir progresivamente muchos de los problemas ambientales como la lluvia ácida, la contaminación atmosférica, el efecto invernadero, los cuales provocan cambios climáticos en el mundo.

La importancia del consumo de los combustibles derivados de la biomasa ha sido ampliamente manifestada en diversos estudios, documentos y reuniones de carácter nacional como internacional. Algunos de ellos analizan el tema de una manera muy genérica y cualitativa; otros se concentran en aspectos específicos de realidades muchas veces locales. A menudo, a partir de estos estudios se elaboran generalizaciones que, en muchos casos, no se ajustan a la realidad.

Sin duda, alguna esta es la razón por la cual se han emprendido esfuerzos por parte de la organización para la alimentación y la agricultura (FAO), el consejo mundial de energía, la oficina de estadística de Naciones Unidas, entre otras para pronosticar la utilización de los combustibles de la biomasa que están encaminados a la producción de energía.

Por lo tanto comprendemos a la biomasa como la energía solar convertida por la vegetación en materia orgánica; esa energía la podemos recuperar por combustión directa o transformando la materia orgánica en otros combustibles. Es por esto que se cree que la biomasa puede llegar a ser uno de los combustibles más importantes en el futuro. En los próximos veinte años podría suministrar un octavo del presupuesto energético mundial. [Agencia internacional de energía 2005]

Una gran variedad de desechos agrícolas como leña, cultivos energéticos, simbolizados por el campo de maíz pueden transformarse para suministrar una gama de combustibles para el transporte, o pueden ser quemados para generar electricidad. Un ejemplo de esto



es la conversión de las astillas de madera en un gas rico en metano. [US Dept. of Energy/SPL, 2005]

Las Energías renovables como una alternativa para la conservación del Medio Ambiente.

Las fuentes de energías renovables (FER) se pueden definir como aquellas fuentes de energía que se renuevan de forma continua, de forma opuesta están los combustibles fósiles como petróleo, carbón, gas, uranio, etc. Al hablar de energías renovables, encontramos a:

- La energía solar, utilizada a través de celdas solares fotovoltaicas o de colectores solares de concentración de energía.
- La energía eólica, utiliza el viento como recurso principal para producir energía;
- La biomasa, basada en el uso de materia orgánica formada por vía biológica o de productos derivados de ésta.
- La energía geotérmica, que tiene su origen en el poder calorífico de las reacciones químicas naturales que ocurren en el interior de la tierra.
- Las centrales hidráulicas, que aprovechando la fuerza cinética del agua, han evolucionado notablemente en los últimos años.

Modelos.

En este trabajo se presenta el desarrollo de un modelo para un gasificador estratificado por lo tanto es importante describir brevemente el concepto “modelo” y sus ventajas de emplearlo.

Puesto que seguramente es imposible incluir dentro de una sola definición las diferentes acepciones de la palabra “modelo”, se presentan a continuación algunas de las más frecuentes: Coloquialmente, por modelo se entiende la representación de algo, generalmente un objeto físico.

Definimos a un modelo como una abstracción matemática de los fenómenos. Entre más complejo más representativo aun que se vuelve más complicado de resolver. Ya que el propósito del estudio determina la naturaleza de la información que se reúne, no hay un modelo único de un sistema. Los distintos analistas producirán distintos modelos del mismo proceso según cambie su comprensión del proceso.

Existen ciertas características de los procesos industriales que las diferencian de otros tipos de industrias, debido esencialmente a que hay una compleja estructura de muchas etapas, cada una de las cuales consta a su vez de numerosos subcomponentes. Teniendo en cuenta que interviene un elevado flujo de materiales con un valor económico relativamente alto, se comprende que pequeñas modificaciones en las características de diseño y operación pueden tener una importante repercusión económica. Debido a que un cambio en la operación de una planta puede significar un ahorro de miles de pesos, y



el hecho de que el experimentar con plantas es una tarea difícil de realizar, una muy buena opción lo constituye el modelado.

La tarea de obtener un modelo de un proceso se dividirá en forma genérica en dos subtareas: la determinación de la estructura del modelo y la de proporcionar los datos. La determinación de la estructura, fija la frontera del proceso e identifica las entidades, atributos y actividades del proceso. Los datos suministran los valores de los atributos que pueden tener y define las relaciones involucradas en las actividades. Las dos tareas tanto crear una estructura como suministrar los datos se definen como partes de una tarea más que como dos tareas por separado, debido a que no se pueden hacer una sin la otra.

Las suposiciones relativas al proceso orientan la recolección de datos, y el análisis de estos confirma o refuta las suposiciones. Es común que los datos recolectados revelen una relación no sospechada que cambie la estructura del modelo.

¿Cómo se puede evaluar un modelo? En primer lugar el ingeniero puede recoger datos y ver la forma en que dichos datos se ajustan a las predicciones del modelo. Si el ingeniero dispone de dos series de datos (una correspondiente al proceso real y la otra al modelo) para un modelo poco complicado, suele ser preciso introducir una cantidad considerable de subjetividad en el análisis a la hora de establecer la concordancia entre las dos series de datos. En cualquier caso, si la respuesta del modelo concuerda satisfactoriamente con los resultados experimentales, aumenta la confianza del ingeniero en la aptitud de las descripciones matemáticas. Si la concordancia es mala, tal vez convenga revisar el modelo o bien intentar otro método de abordar el problema.

CAPÍTULO I

ANTECEDENTES

Introducción.

La demanda de energía en el mundo seguirá aumentando como consecuencia del crecimiento de la población, el uso generalizado de diversos productos tecnológicos y mayor desarrollo económico. Históricamente, los combustibles fósiles han sido protagonistas en los esquemas de generación de energía. Sin embargo, las preocupaciones ambientales en general y los impactos de las emisiones de gases que causan un efecto invernadero, resaltan y dirigen hoy los reflectores hacia el desarrollo de energías limpias y usos eficiente de esta.

Estamos a punto de entrar en un nuevo orden energético. Durante las próximas décadas, nuestras reservas de petróleo empezarán a agotarse y es imperativo que los gobiernos, tanto en los países productores como en los consumidores se preparen para ese momento. No debemos depender del crudo hasta su última gota, debemos dejar el petróleo antes de que nos deje nosotros. Eso significa que debemos encontrar nuevas soluciones pronto.[Agencia Internacional de la Energía, 2008]



Capítulo I

Antecedentes.

1.1 Necesidad de las fuentes de energías renovables

Cuando se toma en cuenta el daño al medio ambiente provocado directamente por nuestro consumo de energía, las perspectivas para el futuro son inquietantes e incluso alarmantes. Aunque durante mucho tiempo se negó o minimizó el daño al medio ambiente por razones relacionadas directamente con la generación de energía a base de combustibles fósiles, actualmente el calentamiento del planeta es un fenómeno científico y políticamente reconocido.

La generación de gases de efecto invernadero es considerada como una de las principales causas de la contaminación atmosférica y calentamiento global. En la actualidad sabemos que el uso de las principales combustibles (carbón, petróleo y gas) puede sufrir una disminución en su valor debido a las externalidades que generan a corto, medio o largo plazo. Los problemas del medio ambiente, aunque por mucho tiempo ignorados o no identificados, deben ser analizados en el contexto de políticas de desarrollo sustentable.

Mundialmente se ha generado una conciencia internacional sobre la vinculación que el consumo convencional de energía a base de combustibles fósiles, tiene con la degradación del medio ambiente. En las últimas décadas, esta preocupación ha dejado de ser un problema local y se ha convertido en un tema de atención a nivel global.

Las energías renovables representan hoy la respuesta alternativa a la imperante necesidad energética. La posibilidad que nos brindan de producir energía con un mínimo impacto al medio ambiente, a través de recursos que la naturaleza genera diariamente, convierte a las energías renovables en un planteamiento atractivo para la humanidad.

La crisis del petróleo de los años setenta y la preocupación medioambiental provocada por eventos peligrosos como el incremento del agujero en la capa de ozono, el efecto invernadero o los residuos nucleares han provocado que las energías renovables sean consideradas como una fuente viable de abastecimiento. Considerando el deterioro que ha sufrido el medio ambiente en todo el mundo en el último siglo se han realizado múltiples esfuerzos internacionales para controlar los efectos nocivos de las acciones humanas sobre el medio ambiente en el que se entrelazan aspectos ecológicos y económicos. Por lo anterior el frenar el daño excesivo del medio ambiente es uno de los puntos principales de los protocolos de Montreal y Kioto.



1.1.1 Protocolo de Montreal.

El Protocolo de Montreal se firmó el 16 de septiembre de 1987, dicho protocolo es un acuerdo internacional que limita, controla y regula la producción, el consumo y el comercio de sustancias dañinas para la capa de ozono. Tres años después de su firma la comunidad internacional adoptó el protocolo, cuyo objetivo final es acabar con todas las nuevas sustancias dañinas para el año 2040. Sin embargo, las medidas adoptadas hasta ahora han permitido importantes avances.

Las metas de este protocolo son las siguientes

Países desarrollados

- Eliminación de los halones antes de 1994
- Eliminación de los CFC, el tetracloruro de carbono, el metilcloroformo y los hidrobromofluorocarbonos (HBFC) antes de 1996.
- Reducción del metilbromuro en un 25% antes de 1999, 50% antes de 2001, 70% antes de 2003 y eliminación antes de 2005;
- Reducción de los hidrofluorocarbonos (HCFC) en un 35% antes de 2004, 65% antes de 2010, 90% antes de 2015 y 99,5% antes de 2020 (se permitirá un 0,5% para fines de mantenimiento sólo hasta 2030).
- Eliminación de los hidrobromofluorocarbonos (HBFC) antes de 1996 y eliminación del bromoclorometano (BCM) de inmediato.

Los países en desarrollo cuentan con un período de gracia antes de que deban comenzar sus calendarios de eliminación. Esta medida refleja el reconocimiento de los países desarrollados son responsables de la mayor parte de las emisiones totales en la atmósfera y que tienen más recursos financieros y tecnológicos para adoptar los sustitutos.

Países subdesarrollados

- Eliminación de los HBFC antes de 1996 y eliminación del BCM de inmediato.
- Congelación de la producción y el consumo de HCFC antes de 2016 a los niveles correspondientes a 2015 y eliminación antes de 2040.
- Congelación de la producción y el consumo de CFC, halones y tetracloruro de carbono a los niveles medios correspondientes a 1995-97 antes del 1° de julio de 1999, reducción en un 50% antes de 2005, en un 85% antes de 2007 y eliminación completa antes de 2010.
- Congelación de la producción y el consumo de metilcloroformo antes de 2003 a los niveles medios correspondientes a 1998-2000, reducción en un 30% antes de 2005, en un 70% antes de 2010, y eliminación antes de 2015.



Tanto los fluorocarbonos CFC como los hidrofluorocarbonos HCFC tienen un elevado potencial de efecto invernadero, por lo que la eliminación de los primeros en la pasada década tuvo ya efectos beneficiosos en la lucha contra el cambio climático. La industria química, y en concreto la gran transnacional estadounidense Dupont, ha anunciado que tiene desarrollados los nuevos refrigerantes alternativos (ISCEON), y esta lista para una sustitución de HCFC a ISCEON.

Actualmente 191 países ratifican su compromiso para contrarrestar el problema del cambio climático.

1.1.2 Protocolo de Kioto.

El 11 de diciembre de 1997 los países industrializados se comprometieron, en la ciudad de Kioto, a ejecutar un conjunto de medidas para reducir los gases de efecto invernadero. Este protocolo es un instrumento internacional que tiene por objeto reducir las emisiones de seis gases que han provocado el calentamiento global: dióxido de carbono (CO_2), gas metano (CH_4) y óxido nitroso (N_2O), además de tres gases industriales fluorados: Hidrofluorocarbonos (HFC), Perfluorocarbonos (PFC) y Hexafluoruro de azufre (SF_6), en un porcentaje aproximado de 5%, dentro de un periodo que va desde el año 2008 al 2012, en comparación a las emisiones al año 1990.

Se estableció que el tratado se tendría que cumplir cuando lo ratificaran los países industrializados responsables de al menos un 55% de las emisiones de CO_2 . Con la ratificación de Rusia en Noviembre de 2004, después de conseguir que la Unión Europea pague la reconversión industrial, así como la modernización de sus instalaciones, en especial las petroleras, el protocolo ha entrado en vigor.

El gobierno de Estados Unidos firmó el acuerdo pero no lo ratificó (ni Bill Clinton, ni George W. Bush), por lo que su adhesión solo fue simbólica hasta el año 2001 en el cual el gobierno de Bush se retiró del protocolo, por considerar que la aplicación del Protocolo es ineficiente e injusta al involucrar solo a los países industrializados y excluir de las restricciones a algunos de los mayores emisores de gases en vías de desarrollo (China e India en particular).

Cabe aclarar que el mayor reto de este protocolo es frenar el calentamiento global que está afectando al planeta.

Actualmente el Protocolo de Montreal es considerado como el más exitoso tratado internacional vinculante en materia ambiental (Kofi Annan) y se espera que este sea un modelo para emular por el Protocolo de Kioto.



1.2 Potencial y aprovechamiento de las fuentes energías renovables en el mundo.

La inminente preocupación por el daño al medio ambiente deja claro que los Protocolos de Montreal y Kioto estimulan en cierta forma la utilización de energías renovables las cuales poseen un potencial enorme para proporcionar servicios de energía de manera más sostenible, con cero o casi nulas emisiones de contaminantes o de gases que causan el efecto invernadero. Los marcos legislativos de las distintas naciones suelen darles un tratamiento preferencial con el objeto de apoyar su desarrollo.

Actualmente diversas compañías y países alrededor del mundo desarrollan tecnologías para minimizar el uso de combustibles fósiles y aprovechar fuentes de energías renovables, ejemplo de esto tenemos a:

- **Escocia:** Este gobierno aprobó un proyecto de la empresa Scottish Power para construir 71 turbinas eólicas en las granjas de Dumfries y Galloway con una capacidad 213 MW, este proyecto finalizara en el año 2013 (Agencia internacional de energía IEA 2007)
- **Estados Unidos:** La empresa alemana Conergy dio a conocer un plan para construir una planta de energía solar en Pennsylvania que contará con 17 mil paneles solares. Cuando sea terminada será la cuarta planta solar fotovoltaica más grande de Estados Unidos, Se estima que para mediados de 2008 ya estará operando. (Agencia internacional de energía IEA 2007)
- **Suiza:** Ubicara una planta de energía solar en el mar con una capacidad de generar 1 megavatio. (Agencia internacional de energía IEA 2007)
- **Google:** Invertirá 10 millones de dólares en iniciativas que se centren en los vehículos híbridos eléctricos. (Agencia internacional de energía IEA 2007)

Los proyectos mencionados anteriormente muestran una tendencia al desarrollo tecnológico para un mejor aprovechamiento de las fuentes energía renovable.

1.3 Panorama de las energías renovables en México

En el aspecto económico, las fuentes de energías renovables se encuentran en una situación desigual frente a los métodos tradicionales de generación. Muchas de ellas presentan una incertidumbre sobre su potencia generadora. Por ejemplo, la disponibilidad o magnitud del viento y el periodo de luz solar suelen ser factores inciertos. Además, la mayoría de estas tecnologías requieren de grandes espacios y elevados costos de mantenimiento, lo que conlleva a la producción de una energía relativamente cara.

Dada la dispersión y la baja densidad energética de las fuentes renovables de energía, se requiere de grandes extensiones de tierra para lograr un nivel de aprovechamiento similar al de los sistemas que operan con combustibles fósiles. Igualmente, los sistemas de



aprovechamiento de energías renovables tienen que ubicarse en el lugar donde se dispone del recurso, lo que muchas veces ocurre lejos de donde está la necesidad. Estas circunstancias, sin embargo, no han sido un impedimento para su desarrollo, como lo demuestran los proyectos en operación diferentes países del mundo.

Igualmente importante ha sido el trabajo de difusión y promoción de la Asociación Nacional de Energía Solar (ANES), la cual ha unificado a esta comunidad, particularmente a través de sus semanas y reuniones nacionales celebradas anualmente desde 1977.

Por otro lado, son importantes los trabajos para la manufactura y comercialización de equipos y sistemas relacionados con las energías renovables, en donde resalta la gran cantidad de fabricantes de calentadores solares planos en el territorio nacional. Para analizar y plantear estrategias nacionales sobre energías renovables, la Secretaría de Energía se ha apoyado en la Comisión Nacional para el Ahorro de Energía (CONAE), quien a su vez, estableció, desde hace más de tres años, una alianza con la Asociación Nacional de Energía Solar (ANES), y juntas han operado el Consejo Consultivo para el Fomento de las Energías Renovables, COFER, al cual concurren reconocidos especialistas de los sectores público y privado y en cuyo contexto se han organizado foros públicos sobre asuntos relacionados con la promoción de las energías renovables.

La Red Mexicana de Bioenergía A. C. (REMBIO), una organización no gubernamental, que impulsa el desarrollo sustentable y eficiente de la biomasa con fines energéticos en el país. También, pone al alcance del público documentos de análisis sobre aspectos específicos del uso de la bioenergía, su problemática actual y su potencial futuro.

Al identificar las fuentes de energía renovables, este trabajo se centrara en la importancia de la biomasa en la actualidad.

1.4 La formación de la biomasa

La mayoría de los sistemas desarrollados por el ser humano para captar la energía solar, si bien han representado un considerable esfuerzo de investigación, carecen de la falta de unas perspectivas económicamente rentables para aprovechar la energía solar de forma masiva. Ello ha hecho volver la vista al modelo básico de captación y acumulación de energía solar por las especies vegetales verdes, seleccionado por la naturaleza a lo largo de un proceso evolutivo de más de 3, 000 millones de años, y que ha mantenido la vida en la Tierra hasta nuestros días.

Esta forma de captación de energía es la única fuente renovable que conlleva asimismo un almacenamiento, lo que distingue de la energía solar directa, la eólica u otras que han de concentrarse y almacenarse artificialmente, a menudo con dificultad. Así pues, la materia orgánica constituye energía solar almacenada y es la denominada energía de la biomasa.



La formación de materia viva o biomasa a partir de la luz solar se lleva a cabo por el proceso denominado fotosíntesis, gracias al cual se producen, grandes moléculas de alto contenido energético, cuyo costo de almacenamiento es nulo y, en principio, sin pérdidas. Mediante la fotosíntesis, los vegetales transforman productos minerales sin valor energético, dióxido de carbono y agua, en materias orgánicas de alta energía, proceso que sólo tiene lugar en las plantas verdes, que contienen clorofila, ya que este compuesto es el que posibilita toda la serie de reacciones químicas que tienen lugar. Los productos que fabrican para sí, las plantas (azúcares, proteínas, grasas, etc.) y el oxígeno que simultáneamente eliminan, sirven, a su vez, directa e indirectamente, de alimentos constituyentes o energéticos a todos los demás seres que habitan el planeta.

Ahora bien, en todo proceso de conversión energética un importante factor a considerar es el rendimiento con que éste tiene lugar, es decir, la fracción del total de energía incidente (energía solar) que queda convertida en la forma de energía de interés (energía de la biomasa). Teniendo en cuenta las reacciones que gobiernan la fotosíntesis, se puede obtener el valor teórico del rendimiento fotosintético, que resulta ser, aproximadamente, de un 30%. Sin embargo, del total de la radiación solar que llega a la Tierra, sólo algo más del 40% es fotosintéticamente activa; además, sólo el 70% de ésta es absorbida por las hojas, ya que el resto suele ser reflejada, con lo cual, la eficacia máxima teórica del proceso será de alrededor del 8%. Por otra parte, las pérdidas de energía debidas a la respiración de las plantas (estimadas en cerca de un 40%) lleva a un rendimiento máximo teórico de transformación de la energía solar en biomasa que no llega al 5%.

La realidad es que los valores más altos que se encuentran en condiciones óptimas de campo son del 3%, mientras que la media para el caso de plantas de cosecha anual no sobrepasa el 1 %.

Aunque el rendimiento del proceso de conversión biológica de la energía solar pueda parecer bajo, se ha de considerar que los sistemas vivos que captan y convierten la energía solar se encuentran ampliamente distribuidos sobre tierras y aguas del planeta, cubriendo una enorme superficie, lo que determina que la cantidad de energía almacenada por fotosíntesis sea inmensa, alrededor de 8,5 millones de TW/h-año.

Cerca del 40% de la biomasa que se produce en el mundo es de tipo acuático, localizada en los océanos y, por tanto, de difícil recolección. Por otro lado, de la biomasa terrestre, gran parte se encuentra muy dispersa, lo que hace que los costos energéticos de recolección y transporte restrinjan el posible aprovechamiento de la biomasa producida en lugares relativamente alejados de los centros de utilización. Finalmente, la existencia de vastos eriales, la extensión limitada de las zonas cultivables y el tipo de materias primas energéticas en que la civilización actual basa su funcionamiento, impone ciertos



condicionantes tanto a la producción de biomasa aprovechable como al estado en que ésta puede utilizarse.

A pesar de todo, mediante el desarrollo de una adecuada tecnología parece evidente que podría utilizarse el enorme potencial energético de la biomasa para cubrir un considerable porcentaje de la demanda energética actual.

1.5 Biomasa

La biomasa es la principal fuente de energía para usos domésticos empleada por más de 2, 000 millones de personas en el Tercer Mundo (US Dept. of Energy/SPL). Los empleos actuales son la combustión directa de la leña y los residuos agrícolas y la producción de alcohol como combustible para los automóviles como sucede en Brasil. Los recursos potenciales son enormes, superando los 120, 000 millones de toneladas anuales, recursos que en sus dos terceras partes corresponden a la producción de los bosques.

La biomasa es uno de los principales combustibles utilizados en México se estima que la leña provee cerca del 75% de la energía de los hogares rurales, consumiendo alrededor de 37.56 millones de m³ al año (Semarnat, Recursos Forestales, Estadísticas 2000). En el sector agroindustrial, específicamente la industria de la caña de azúcar, se ha establecido un potencial de generación de electricidad, a partir del bagazo de caña, superior a 3,000 GWh al año. Actualmente, se tienen 22 permisos de la Comisión Reguladora de Energía (CRE) para instalar 210 MWe, equivalentes a 387 GWh/año, en plantas de generación eléctrica a partir de mezclas de bagazo de caña y combustóleo (CRE, Registro Público, 2006).

Panorama de las fuentes de energía renovable en México

Año	2001		2005		2010	
	MW	GWh	MW	GWh	MW	GWh
Biomasa	210	367	222	382	246	422
Minihidráulica	92	363	176	762	225	972
Geotermia	855	5,567	975	6,350	975	6,350
Solar	14	8	18	10	24	13
Biogas	11	54	13	65	17	86
Eólico	64	62	140	455	187	608
Total	1,246	6421	1,544	8024	1,674	8,451

Tabla 1. Fuente Secretaria de energía (SENER) y Comisión Nacional para el Ahorro de Energía (CONAE). Año (2002)

1.5.1 La Biomasa en el mundo

La utilización de las fuentes de energía renovables han impulsado la utilización cada vez mayor de la biomasa alrededor del mundo tomando en cuenta que la biomasa es la tercera



fuente de energía del mundo (Werther, 2000; Bapat, 1997) y tiene un potencialidad que excede la demanda actual de energía mundial. Está disponible en la mayoría de los países y representa un recurso valioso para mucha gente, principalmente en los países en desarrollo.

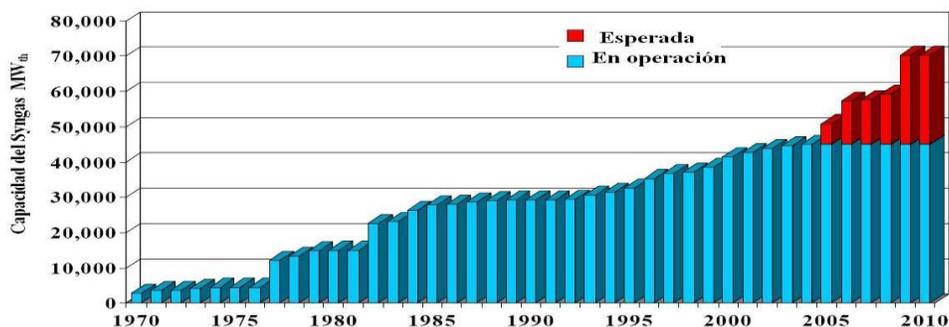
La mayoría de los países desarrollados están buscando medios para reducir su dependencia de los combustibles fósiles y se encuentran estructurando proyectos basados en la biomasa tendientes a satisfacer una parte de sus necesidades energéticas. Suecia obtiene ya un 10 % de su energía de desechos forestales y agrícolas, y Finlandia, el 14 %. En Francia, seis millones de hogares utilizan la madera como fuente de calor. En Dinamarca una planta quema 28,000 toneladas anuales de paja para producir 13,000,000 MW de electricidad, cabe resaltar que este país actualmente cubre 7% de su oferta energética con energías renovables, 5% corresponde a biomasa y para el año 2020 planea cubrir 20% con este recurso. En Brasil unos 2,000,000 de vehículos funcionan con alcohol casi puro, obtenido del cultivo de la caña de azúcar, y 8,000,000 más utilizan una mezcla de gasolina y alcohol.

EE.UU. tiene instalados más de 9 000 MW para generación de energía eléctrica, obtiene el 4% de la energía que necesita de la biomasa (US Dept. of Energy/SPL) . La Unión Europea tiene un potencial económico en biomasa del orden de 100 Mtep, aproximadamente el 10% de sus necesidades, su potencial técnico es del orden de 306 Mtep.

Actualmente la Unión Europea destaca por la implementación de un sistema energético sustentable, destacando Alemania, y Dinamarca.

Lo mencionado anteriormente muestra un importante tendencia a la utilización de la biomasa en el mundo como una importante fuente de energía renovable, el proceso utilizado es la gasificación, la capacidad de gasificación en el mundo corresponde un 82 % para el carbón y un 18 % para la biomasa.

Capacidad y Crecimiento de la Gasificación en el Mundo

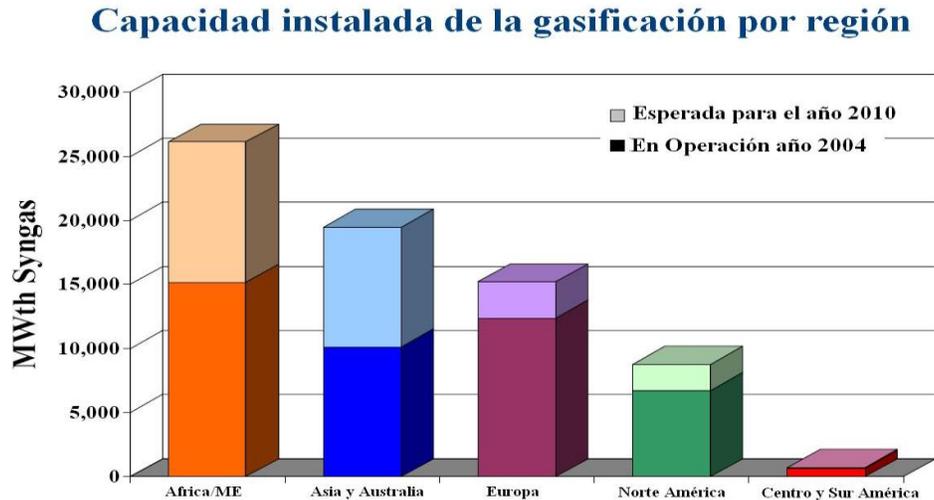


Grafica 1.1 Capacidad y crecimiento de la gasificación en el mundo (ChildressGasificationDatabase 2004)



La mayor cantidad de energía biomásica es producida a partir de madera y sus desechos (64%), seguida por desechos municipales sólidos (24%) desperdicios de agricultura (5%) y otros (5%) (Werther, 2000).

En la siguiente grafica se muestra la capacidad de gasificación de biomasa, carbón y otros materiales en las diferentes regiones del mundo.



Grafica 1.2 Capacidad instalada de gasificación (Carbón, biomasa, otros) por región. (ChildressGasificationDatabase 2004)

1.6 Técnicas de gasificación para la biomasa.

1.6.1 Gasificación

La gasificación es un proceso termoquímico en el que la biomasa es transformada en un gas combustible de bajo poder calorífico, mediante una serie de reacciones que ocurren a una temperatura determinada en presencia de un agente gasificante (aire, oxígeno y/o vapor de agua).

La elección del método para llevar a cabo el proceso de gasificación depende de varios factores como el tamaño y forma de la biomasa, el aprovechamiento de la energía del gas producido que vaya a hacerse y, por supuesto, de los condicionantes económicos.

Algunas de las ventajas del proceso de gasificación son:

- Versatilidad en la valorización del residuo, ya que se puede aprovechar la energía que contiene en forma de calor, electricidad o como gas de síntesis para la obtención de productos químicos.
- Buen rendimiento eléctrico, en el caso de que esa sea la vía más adecuada para el aprovechamiento del residuo.



- Menor impacto ambiental.



Figura 1.1 Proceso de gasificación.

El proceso de gasificación de la biomasa o residuos orgánicos tiene lugar en tres etapas: secado (evaporación de la humedad contenida en el sólido), pirólisis (descomposición térmica en ausencia de oxígeno) y gasificación (oxidación parcial de los productos de la pirólisis).

En el capítulo II se profundizará más en el tema de la gasificación

1.6.2 Pirólisis

La pirólisis se define como la descomposición térmica de un material en ausencia de oxígeno o cualquier otro reactante. Esta descomposición se produce a través de una serie compleja de reacciones químicas y de procesos de transferencia de masa y calor. La pirólisis también aparece como paso previo a la gasificación y la combustión.

Se puede considerar que la pirólisis comienza en torno a los 250 °C, llegando a ser prácticamente completa en torno a los 500°C, aunque esto está en función del tiempo de residencia de la biomasa en el reactor.

A partir de la pirólisis pueden obtenerse diferentes productos secundarios útiles en función de la tecnología de tratamiento que se utilice.

Los productos primarios formados son los siguientes (en diferentes proporciones según el proceso empleado):

- Gases: Compuestos principalmente de CO, CO₂, CH₄, C₂H₆ y pequeñas cantidades de hidrocarburos ligeros.
- Líquidos: Compuesto por una gran mezcla de distintos productos como pueden ser: cetonas, ácido acético, compuestos aromáticos, y otras fracciones más pesadas.
- Sólidos: El producto sólido de la pirólisis es el carbón fijo que puede ser utilizado como combustible o para la producción de carbón activo.



1.6.3 Gasificación por plasma

La gasificación por plasma utiliza temperaturas muy altas entre 3 000 °C y 10 000 °C en condiciones de ausencia casi total de oxígeno para descomponer los materiales de desecho a una estructura molecular básica. En el horno se calienta el gas mediante un arco eléctrico (con corriente alterna o directa), con lo que se forma el plasma (gas con sus átomos ionizados) y luego se introducen los residuos biomásicos que en estas condiciones, sufren un proceso de descomposición molecular desintegrando prácticamente el original, que queda como una masa vitrocerámica de propiedades físico-químicas completamente diferentes a las iniciales

El proceso controla la cantidad de oxígeno y permite que exista solamente el oxígeno suficiente para producir monóxido de carbono. La materia orgánica se transforma en un gas combustible compuesto por monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H₂). Solamente se libera una pequeña cantidad de energía cuando se combinan las moléculas de carbono y oxígeno. El monóxido de carbono aún contiene una energía química considerable y puede ser utilizado de muchas maneras. Las altas temperaturas del proceso de Gasificación por Plasma funden metales, vidrio, sílice, tierra, etc., que fluyen desde el fondo del reactor. Los metales son reciclados y los otros materiales inorgánicos resultan fundidos en un material vítreo. Debido a las altas temperaturas y la falta de oxígeno, no hay alquitranes, dioxinas o furanos, y los niveles de óxidos de nitrógeno y óxidos de azufre son mucho más bajos. El resultado neto es que solo una fracción del 1% de los desechos ingresados no se convierte en productos vendibles.

Diferencia entre gasificación por plasma y la gasificación habitual

Las tecnologías habituales de gasificación operan el reactor en el rango de 400-800°C. No utilizan ninguna fuente externa de calor y dependen del mismo proceso para mantener la reacción. El proceso de gasificación produce un gas combustible similar al producido por el proceso por plasma, sin embargo esta mucho más contaminado y contiene alquitranes y carbonilla debido a que las temperaturas más bajas no pueden descomponer todos los materiales. Otra diferencia significativa es que muchos materiales deben ser separados del flujo de desechos entrante antes de ingresar al reactor y ser destinados a relleno o ser procesados de otra manera. El gas que se produce contiene alquitranes que son difíciles de remover y otros contaminantes que deben ser posteriormente limpiados.

Además de esas desventajas, la mayoría de los sistemas de gasificación no pueden aceptar desechos sólidos urbanos en forma directa desde el camión. Los desechos deben ser secados hasta un nivel de humedad aceptable y procesados hasta lograr un tamaño y consistencia uniformes, incrementando los costos y la complejidad.



1.7 Gasificadores.

1.7.1 Gasificadores de lecho móvil y lecho fluidizado.

Los tipos de gasificadores que pueden ser utilizados en la gasificación de biomasa son los de lecho móvil (también conocidos como lecho fijo) (en contracorriente y corrientes paralelas), de lecho fluidizado y de transporte. Cada uno de estos reactores presenta una serie de ventajas e inconvenientes, lo que hace que su elección dependa de varios factores.

Los principales criterios de elección son el tamaño y la densidad del residuo biomásico a procesar, la capacidad de procesamiento y la calidad deseada para el gas combustible generado.

Los gasificadores más utilizados son los de lecho fijo y fluidizado. Los reactores de lecho fijo permiten utilizar un amplio intervalo de tamaños de sólidos, lo que les convierte en adecuados para cáscara de almendra, ramón de olivo, astillas, zuro de maíz pero no son adecuados para la gasificación de residuos de baja densidad (pajas de cereales, serrín, etc.) aunque, si previamente estos residuos fueran densificados en pellets o briquetas sí serían adecuados para su procesamiento en lechos móviles.

Para un mismo volumen de reactor, un lecho fluidizado permite procesar una mayor cantidad de sólido que un lecho móvil. En general, las capacidades de procesamiento se sitúan entre 100-800 y 600-6000 Kg. biomasa/h para el lecho móvil y fluidizado respectivamente.

Algunas de las diferencias más importantes entre gasificadores de lecho móvil y fluidizado, y que van a influir decisivamente en la calidad del gas generado, son las derivadas del flujo del sólido en el reactor.

Es importante resaltar que en un lecho fijo, la pirólisis tiene lugar en una zona de relativamente baja temperatura (300-400°C), por lo que se forman muchos productos líquidos, principalmente alquitranes.

Si se opera con flujo de contracorriente (updraft), estos líquidos son arrastrados por el gas hacia zonas de menor temperatura y fuera del gasificador. En consecuencia, el gas obtenido contiene mucho alquitrán y polvo, por lo que es necesaria su purificación antes de ser utilizado como combustible en motores de combustión interna. Sin embargo, puede tener aplicaciones directas en el secado de materiales y en generación de vapor en calderas modificadas.

Este inconveniente se evita utilizando un reactor de flujo en paralelo (downdraft). En este caso, el flujo descendente del gas arrastra los alquitranes procedentes de la pirólisis hacia la zona de oxidación que se encuentra a una temperatura elevada (1200-1500°C), donde se consigue su craqueo y/o descomposición. Con el flujo en corrientes paralelas se presenta



una cuarta zona en el reactor (zona de reducción) que permite obtener mayores cantidades de CO y CH₄ en los gases producto, aumentando su contenido energético. Al ser un gas limpio y de alta calidad, dicho gas puede ser utilizado (debido a su alta temperatura de salida), en quemadores de calderas y turbinas de gas o, si se enfría previamente, en motores de combustión interna.

En el capítulo II se presenta la principales características de lo gasificadores además de una descripción más detallada del proceso de gasificación.

1.7.2 Empresas que desarrollan la tecnología de los gasificadores

En la actualidad los gasificadores de lecho fluidizado circulante han sido desarrollados, construidos y algunos se encuentran en fase de demostración, por LURGI, TPS (sistemas atmosféricos), FOSTERWHEELER y CARBONA (sistemas a alta presión y limpieza del gas a alta temperatura) utilizando trozos o pélets de biomasa con una capacidad de hasta 100 MWe (Engstrom, M. F., 1999). En 1995, LURGI puso en funcionamiento en Alemania el mayor gasificador de biomasa (100 MWth) del que se tiene conocimiento. Actualmente se planea la construcción de un gasificador de biomasa/turbina de gas utilizando el proceso LURGI de 12 MWe, en Italia.

FERCO es una empresa que cuenta con un proceso que acepta una gama amplia de insumos, tal como productos de cosechas, silvicultura y residuos municipales. Además se encarga del desarrollo y construcción de gasificadores de lecho fluidizado en Vermont, USA (Hand S, Gasificador FERCO, 1997); James G, Gasifier Commissioning, Nepco, 1999) cuenta con plantas de demostración de gran escala con 40 MWe de potencia de salida. En el Reino Unido, la compañía First Renewables Ltd construyó un gasificador para una planta de electricidad de 10 MWe de potencia. En ambos casos se trata de un ciclo combinado con gasificador integrado (IGCC).

El proceso Battelle/ FERCO de gasificación emplea arena para calentar indirectamente y gasificar la biomasa (Farris, 1998). Produce gas de valor calorífico medio (12-15 MJ/m³) sin necesidad de una planta de oxígeno. En Vermont, EUA, existe un gasificador de demostración de 40 MWe.

1.8 Estado del Arte

Lecho Fijo

Manurung and Beenackers (1994) desarrollaron un gasificador estratificado de lecho móvil para cáscara de arroz, para aplicación a pequeña escala y un modelo de ingeniería de reacción química para predecir su comportamiento. Para propósitos de simulación se divide al gasificador en dos regiones y en cada una de ellas ocurren reacciones diferentes. La zona superior, en donde ocurre el secado, la pirólisis y la oxidación de los volátiles y el



carbonizado, es descrita por el modelo termodinámico de Schlapfer. La zona del fondo (de reducción) es descrita por un modelo de ingeniería de reacciones químicas de no equilibrio. El modelo está basado en balances de masa y energía para cada una de las fases y para sus componentes, cinéticas de reacción, velocidades de transporte y relaciones termodinámicas fundamentales. La temperatura simulada y los perfiles de composición del syngas y de la conversión del carbonizado fueron comparados con los datos obtenidos en las corridas de la planta piloto. El modelo puede usarse para predecir los efectos de las variaciones de las condiciones de operación y de las propiedades de la alimentación sobre el comportamiento del reactor, eficiencia de conversión del carbón, rendimiento de gas combustible y su poder calorífico, como una función de la distancia a la rejilla.

Bryden and Ragland (1996) proponen un modelo unidimensional, en estado estable, para un combustor de lecho fijo, de flujos a contracorriente y alimentado por la parte superior. Las pérdidas de calor a través de las paredes que rodean el lecho son despreciadas. Un diámetro inicial del tronco y una porosidad constante se utilizan para caracterizar el lecho fijo y se supone que los troncos están orientados perpendicularmente al flujo del gas. La relación del área superficial/volumen se determina en cada paso de la simulación como función del diámetro. Al mismo tiempo que el tronco se encoge debido a la reacción con oxígeno, dióxido de carbono y vapor de agua, se desprenden de la madera vapor de agua y materiales volátiles. El modelo resuelve las ecuaciones de conservación de masa y energía, para la fase sólida y ecuaciones de conservación de masa y energía y conservación de especies para la fase gaseosa. Se consideran siete especies en la fase gaseosa: oxígeno, nitrógeno, vapor de agua, dióxido de carbono, monóxido de carbono, hidrógeno e hidrocarburos ($\text{CH}_{1.522}\text{O}_{0.022}$). Los hidrocarburos incluyen todos los productos gaseosos de la pirólisis excepto el vapor de agua, dióxido de carbono, monóxido de carbono e hidrógeno. Los alquitranes se incluyen en los hidrocarburos. Los hidrocarburos reaccionan con oxígeno para formar agua y dióxido de carbono. Las propiedades físicas del gas incluyendo el calor específico, los coeficientes de difusión y la densidad son función de la temperatura y la concentración de las especies.

Di Blasi (2000) considera las reacciones de oxidación de CH_4 y $\text{CH}_{1.522}$ a CO y H_2O , oxidación de H_2 y CO , la reacción de sustitución de agua en fase gaseosa y las reacciones heterogéneas de oxidación del carbonizado y su gasificación con CO_2 y H_2O . La rapidez de las reacciones heterogéneas se representa como una media armónica de la difusión de masa y la cinética química, considera a la porosidad del lecho como función de su posición radial y toma en cuenta los coeficientes efectivos de transferencia de masa y de calor. Obtiene perfiles de composición de syngas, temperatura del sólido y del gas, y perfiles de conversión de carbonizado como función del tamaño de partícula, relación de gas/sólido alimentado, en el rango de 7-18 kg/h. La solución numérica del modelo se realizó con aproximación de diferencias finitas. El reactor es dividido en celdas cilíndricas elementales, cuyas secciones transversales coinciden con la sección transversal del reactor, mientras que



la temperatura puede ser variable. La solución es realizada en tres etapas, correspondientes a los procesos de reacción química, transferencia de calor (entre las fases y con la pared del reactor) y los fenómenos de transporte. Para cada paso de tiempo, en las primeras dos etapas, la solución es calculada, para cada volumen de control, de la ecuación diferencial ordinaria linealizada, mediante un método implícito de Euler de primer orden.

Zainal *et al* (2001) proponen un modelo basado en el equilibrio termodinámico para describir el proceso de gasificación y determinar la composición del syngas y su valor calorífico. El modelo de equilibrio supone que todas las reacciones están en equilibrio termodinámico, es decir, se espera que los productos de pirólisis se quemen y alcancen el equilibrio en la zona de reducción antes de salir del gasificador. Las reacciones consideradas son: gasificación del carbonizado con bióxido de carbono y vapor de agua, metanación del carbonizado y reacción de sustitución en la fase gaseosa.

Mathieu and Dubuisson (2002) proponen un modelo de gasificación de biomasa a pequeña escala y más precisamente de madera. En el modelo propuesto, el proceso de gasificación consiste en el acoplamiento de cuatro procesos básicos: la pirólisis, la combustión, la reacción de Boudouard y procesos de gasificación. Primeramente, suponen una pirólisis instantánea del combustible tan pronto como es alimentada la biomasa, luego fracciones de los productos de devolatilización son quemados o gasificados o toman parte en la reacción de Boudouard. Analizando la reacción de Boudouard (aquí se consume el 10% del carbonizado) concluyen que a temperaturas superiores a 1000°C solo se produce CO en la oxidación del carbonizado y al final se alcanza un equilibrio en la composición del syngas. Realizan un estudio de sensibilidad del modelo considerando: eficiencia de gasificación, influencia del porcentaje de oxígeno con respecto al estequiométrico (concluyendo que el 25% es el óptimo), la temperatura del aire (300°C es la óptima), la presión de operación (se obtiene un syngas con mayor poder calorífico y una eficiencia de proceso de 77.5% a presiones entre 12-13 bar) y la inyección de vapor para catalizar la reacción de reducción con vapor de agua. El modelo, basado en la minimización de la energía libre de Gibbs, es resuelto en el simulador de procesos ASPEN PLUS.

Wurzenberger *et al* (2002) presentan un modelo de gasificador de lecho móvil de flujos cruzados de biomasa que considera gradientes dentro de la partícula y en el lecho móvil. El lecho es dividido en dos subsistemas: la fase gaseosa en el lecho y las partículas individuales. Esta aproximación es llamada modelo transiente “1-D+1-D”. La fase gaseosa dentro del lecho empacado es descrita mediante coordenadas cartesianas 1-D y las partículas individuales mediante coordenadas esféricas 1-D. El modelo considera calentamiento, secado, pirólisis primaria, pirólisis secundaria del alquitrán, reacciones homogéneas de oxidación de CO, H₂O y CH₄, y la reacción de sustitución con vapor de agua. Reacciones heterogéneas de carbonizado con O₂, CO₂ y H₂O. Obtienen perfiles de temperatura durante el secado y la pirólisis, del vapor de agua, conversión de la partícula,



temperatura de la partícula. Establecen los balances de masa y energía para cada fase y cada componente de la fase y junto con las condiciones de frontera. Obtienen un sistema de ecuaciones diferenciales parciales, ecuaciones diferenciales ordinarias y ecuaciones algebraicas. Las dos últimas clases se sustituyen en las ecuaciones diferenciales parciales, estas se discretizan espacialmente utilizando el método de **volúmenes finitos**. El sistema resultante de ecuaciones diferenciales ordinarias es resuelto utilizando LIMEX (Deuflhard *et al.* 1987).

Zhubrin (2002) presenta un modelo para gasificación de carbón, usando PHOENICS (IPSA) para un flujo reactivo de dos fases, en no-equilibrio, de partículas de carbón y partículas finamente dispersas la corriente de arrastre de aire- vapor de agua. El modelo utiliza la descripción Euleriana de dos fases continuas inter penetrantes con transferencia de calor, masa y momentum entre ellas.

Los procesos considerados son volatilización, oxidación de los volátiles en la fase gaseosa, reacciones heterogéneas de oxidación de carbonizado y reacciones en la fase gaseosa de reformación del metano con vapor de agua, la reacción de sustitución con vapor de agua y la reducción de monóxido de carbono con hidrógeno para producir metano. Supone que primero sucede la oxidación del carbonizado y los gases de combustión resultantes junto con los materiales volátiles (CH_4) son transferidos a la fase gaseosa donde se llevan a cabo reacciones de reformación con vapor de agua, reacción de sustitución con vapor de agua y reducción de monóxido de carbono con hidrógeno.

Babu and Sheth (2006). Hacen una modificación al modelo de **Giltrap *et al*** (2003) quienes desarrollan un modelo fenomenológico de la gasificación en un gasificador estratificado de flujos paralelos, operando en estado estable, para la zona de reducción del gasificador de biomasa. No consideran la pirólisis y la descomposición térmica de los materiales pirolíticos, ni tampoco el número de posibles productos de la pirólisis. Asumen que todo el oxígeno de la corriente de aire alimentado es consumido para producir CO_2 y que los productos de la devolatilización son descompuestos térmicamente en su totalidad. Se supone que el carbonizado está presente en la zona de reducción. El modelo utiliza los parámetros cinéticos de reacción desarrollados por Wang and Kinoshita (1993) y se adopta el esquema de reacciones siguientes de gasificación de carbonizado con CO_2 y H_2O , reformación del metano con vapor de agua y reacción de carbonizado con hidrógeno para producir metano (metanación).

El modelo describe un lecho cilíndrico en el gasificador de sección transversal constante con variaciones radiales en las propiedades despreciables tanto del gas como del sólido. Considera seis especies en la fase gaseosa: nitrógeno, dióxido de carbono, monóxido de carbono, metano, vapor de agua e hidrógeno.



Las reacciones se consideran del tipo Arrhenius. El modelo de Babu y Sheth considera además que la reactividad del carbonizado varía (de 1 a 10 000, en forma exponencial), aumentando, a lo largo del gasificador y considera un factor de actividad del carbonizado (CRF). Resuelve un sistema de nueve ecuaciones (seis para los componentes del gas y para P, velocidad del gas y T) utilizando un método explícito de diferencias finitas.

CAPÍTULO II

TECNOLOGÍAS DE GASIFICACIÓN

Introducción.

La gasificación es un proceso para convertir materiales carbonosos sólidos en un combustible o gas sintético. En general la gasificación involucra las reacciones de carbón con un agente oxidante como lo puede ser el aire o el oxígeno a una temperatura de 800 °C a 1900 °C para producir el gas sintético que puede ser utilizado en energía eléctrica o bien como materia prima, la síntesis de químicos, combustibles líquidos u otros combustibles como el hidrógeno.

La gasificación no es un proceso de combustión ó de incineración. En realidad es un proceso de conversión que produce elementos más útiles y valiosos a partir de materiales carbonosos mencionados anteriormente.

La gasificación también se vislumbra como una solución para deshacerse de los desechos municipales e industriales que se generan. Dependiendo de las características de estos desechos pueden ser utilizados como combustibles primarios en la gasificación o gasificados junto con algún combustible de alto poder calorífico [Gil, J.; Corella, J.; Aznar, M. Pand Caballero, M.A, 1999].



Capítulo II

Tecnologías de Gasificación

2.1 Evolución histórica y perspectivas de gasificación.

La gasificación es una vieja tecnología con grandes perspectivas para el futuro. La gasificación de carbón, sólidos carbonosos y materiales líquidos se ha estado utilizando desde hace más de doscientos años y fue extensivamente utilizada para la producción de gas de ciudad desde finales del siglo XIX y durante el siglo XX. Aunque estas aplicaciones prácticamente han desaparecido, han ido apareciendo otras nuevas, de forma que la gasificación sigue jugando un papel importante como tecnología comercial. Desde sus orígenes, se han introducido sustanciales mejoras, convirtiéndola en una tecnología económicamente más competitiva, térmicamente más eficiente y más respetuosa con el medio ambiente.

Los primeros gasificadores de carbón fueron construidos en Alemania por Bischof, 1839, y por Siemens, 1861. Los gasificadores Siemens utilizaban principalmente para proporcionar combustible a hornos para la industria metalúrgica y siderúrgica pesada. El desarrollo de equipos para la limpieza y el enfriamiento de gas en Inglaterra, 1881, extendió el uso de gasificadores a hornos pequeños y motores de combustión interna. A principios del siglo XX, la tecnología de los gasificadores había avanzado hasta el punto de que podían gasificarse cualquier tipo de residuos lignocelulósicos, como pepitas de aceitunas, paja y cáscaras de nueces. Estos primeros gasificadores se utilizaron principalmente para proporcionar combustible a motores de combustión interna, para la molienda y otros usos agrícolas. También a principios del siglo XX se desarrollaron los gasificadores portátiles. Se usaban en barcos, automóviles, camiones y tractores. El verdadero impulso para el desarrollo de la tecnología de los gasificadores fue la escasez de gasolina durante La Segunda Guerra Mundial. Durante los años del conflicto, Francia tenía más de 60,000 coches alimentados por carbón vegetal y Suecia tenía cerca de 75,000 autobuses, coches, camiones y barcos equipados con gasificadores que utilizaban madera.

Después de la Segunda Guerra Mundial, la abundancia de gasolina y gasóleo relativamente abarato y condenó al olvido a la tecnología de los gasificadores para su uso en automoción.

La utilización de la gasificación para producción de gas de ciudad o para la automoción prácticamente ha desaparecido en la medida que otras fuentes de energía, tanto el petróleo o el gas natural, han satisfecho esta demanda de forma más ventajosa y económica. No obstante, las nuevas aplicaciones que han ido apareciendo en los sectores industriales han forzado a los suministradores a obtener nuevos desarrollos tecnológicos para seguir siendo competitivos. Estos desarrollos han mantenido la gasificación como un proceso industrial importante durante muchos años. La aparición de regulaciones medioambientales las cuales son cada vez más restrictiva, junto con las presiones y oportunidades para el uso eficiente de fuentes energéticas de bajo costo se



está promoviendo en la actualidad la investigación y el desarrollo de soluciones tecnológicas apropiadas. Estos avances tecnológicos son los que impulsarán el proceso de la unificación para la aplicación durante el siglo XXI. [Xavier Elías y Enric Velo, 2005]

Durante muchos años, gobiernos e industrias han estado trabajando en el concepto de integración limpia y eficiente de la gasificación de carbón con turbinas de gas y vapor para crear plantas de Gasificación Integrada con Ciclo Combinado (GICC o IGCC en la nomenclatura anglosajona). Se han construido plantas en EE UU, Países Bajos y España. Los avances conseguidos han hecho que la GICC pueda convenirse, una vez superados los inconvenientes del elevado costo de inversión y de la incertidumbre propias de un nuevo proceso, en la tecnología más apropiada para las futuras centrales eléctricas de carbón en la segunda década del siglo XXI.

A finales del siglo XX. La gasificación se había desplegado ampliamente por todo el mundo. En 1999 existían 128 plantas, con 366 gasificadores en operación. La mayoría de estas instalaciones se encontraban en Europa Occidental, el Pacífico Oriental, África y Norteamérica. Combinadas, estas plantas generaban 42.000 MWth de gas de síntesis.

En el periodo 1999-2003 se tenía previsto construir 33 plantas adicionales con 48 gasificadores, añadiendo otros 18 000 MWth de capacidad de producción de gas de síntesis. La mayoría de estas plantas corresponden a países asiáticos con necesidades de ampliar su producción eléctrica debido a su desarrollo económico. La segunda área en importancia de crecimiento corresponde a Europa Occidental, seguida de Norteamérica, donde las refinerías de crudo necesitarán utilizar plenamente sus fuentes de alimentación disponibles mientras reducen su producción de fuelóleo. [Stiegel y maxwell, 2003]

Actualmente, las principales materias primas usadas en las plantas para el proceso de gasificación son el carbón y los residuos de petróleo, a los que corresponde más del 70% del gas de síntesis producido, seguido por el gas natural con un 20%, aproximadamente, de la capacidad actual. En este último caso se utiliza exclusivamente como materia prima para la obtención de productos químicos. En los próximos años el crecimiento esperado corresponderá al uso de carbones de bajo rango, residuos de petróleo y otros tipos de productos.

En la situación actual del mercado de generación de energía, la gasificación no puede competir con el ciclo combinado alimentado con gas natural debido a los altos costos de inversión y al bajo precio del gas natural. Los bajos costos de los combustibles sólidos o materiales residuales susceptibles de ser gasificados, comparados con el del gas natural no son suficientes, en la mayoría de los escenarios para conseguir el retomo de la inversión en capital de la planta de gasificación.

La gasificación es la única tecnología de conversión energética que ofrece simultáneamente flexibilidad y ventajas tanto en la alimentación, como en la tipología del producto. Todas las materias primas que contienen carbono, incluyendo residuos



peligrosos, residuos sólidos urbanos, lodos de depuradora, biomasa. etc., pueden ser gasificados tras su preparación para producir gas de síntesis limpio para su posterior procesado. Debido a esta capacidad para utilizar materias primas de bajo costo, la “gasificación es la tecnología más adecuada para muchas aplicaciones industriales. [B.V. Babuand Pratik N. Sheth, 2005]

Comparada con los sistemas de combustión, la gasificación es una tecnología de mayor eficiencia y menor impacto ambiental cuando se trata de producir electricidad a bajo costo a partir de materiales sólidos que puede llegar a aproximarse a la producción de electricidad en ciclo combinado a partir de gas natural. Por otro lado la gasificación puede limpiarse y depurarse mucho más fácilmente que los procedentes de la combustión para la reducción de emisiones de azufre y óxidos de nitrógeno.

2.2 Gasificación.

Por lo anterior es necesario tener un concepto más claro del significado de la gasificación pudiendo comprenderlo como un proceso en el que se convierte, mediante oxidación parcial a temperatura elevada, una materia prima (generalmente sólida) en un gas con un moderado poder calorífico. Normalmente, se trabaja con un 25-30 % del oxígeno necesario para la oxidación completa. Esta característica distingue a la gasificación de otros procesos termoquímicos como la combustión (oxidación completa, generalmente con exceso de oxígeno) y la pirólisis (descomposición térmica en ausencia de oxígeno).[B.V. Babuand Pratik N. Sheth, 2005]

En la gasificación, la energía química contenida en el sólido se convierte en energía química contenida en un gas. Este gas se puede utilizar de forma mucho más flexible (como materia prima de procesos químicos o como pilas de combustible). Las cenizas pueden considerarse un residuo importante si son usadas como material de construcción o como fertilizante, fabricación de vidrio, etc. Si el combustible es un residuo orgánico con un bajo contenido en cenizas y estas no son aprovechables, se habrá conseguido, en cualquier caso minimizar considerablemente el volumen de residuo al tiempo que se inertiza y se aprovecha su contenido energético.

Así pues, la gasificación es una técnica energéticamente eficaz para reducir el volumen de los residuos sólidos y recuperar energía en el marco del desarrollo sostenible.

Son susceptibles de ser gasificados aquellos materiales con un alto contenido carbonoso. Cualquier tipo de carbón, biomasa, residuos orgánicos y residuos carbonosos [Xavier Elías y Enric Velo, 2005].

Por su origen, los residuos orgánicos se pueden clasificar de la siguiente forma:



- *Agrícolas*: Incluyen una amplia gama de materiales lignocelulósicos generados por el sector agroalimentario. Entre ellos destaca por su disponibilidad la paja de trigo y otros cereales.
- *Forestales*: Incluye la madera procedente de la limpieza de bosques, aserraderos y otras industrias de la transformación de la madera.
- *Industriales*: Proceden generalmente de embalajes, que se generan en grandes cantidades. Acostumbran a incluir papel, cartón, madera y plásticos (todos ellos con un alto poder calorífico). La presencia de plásticos clorados puede representar un inconveniente.
- *Urbanos*: Los residuos sólidos urbanos (RSU) también pueden gasificarse si se elimina previamente el vidrio y los metales.
- *Mixto*: Se puede incluir en este apartado lodos de depuradora, neumáticos, otros residuos de automóvil y madera procedente de la construcción y demolición de edificios. Los lodos de depuradora si bien tienen un alto contenido en carbono, presentan dificultades relacionadas con el alto contenido de humedad, gran cantidad de cenizas y presencia de metales pesados. La madera procedente de derribo de edificios puede también contener metales pesados en cantidades significativas.

2.3 Aspectos energéticos de la gasificación

En el proceso de gasificación parte de una materia prima con un poder calorífico alto (carbones de alta calidad o biomasa) o moderado (carbones pobres o RSU) y se obtiene un gas caliente con un poder calorífico medio (gasificación con oxígeno o hidrógeno) o bajo (gasificación con aire). La principal característica, desde el punto de vista energético, que diferencia a la gasificación de la combustión es que, si bien en la combustión, toda la energía del gas está en forma de calor sensible, en la gasificación parte de la energía química contenida en la materia prima pasa al gas (se habla del calor latente del gas). No obstante, no toda la energía se aprovecha en forma de poder calorífico del gas, existe un rendimiento de la gasificación que dependerá del tipo de gasificador y del agente oxidante.

El principal motivo para la existencia de un rendimiento de gasificación es que el proceso descrito (secado → pirólisis → gasificación) es endotérmico siendo necesario aportar energía, Esto puede realizarse en dos formas: mediante una fuente externa o por medio de la combustión de una parte del sólido a gasificar. Esta última alternativa, que es la más utilizada industrialmente, requiere un control cuidadoso de la relación sólido/aire (u oxígeno). En este caso, tienen lugar, dentro del gasificador, una serie de reacciones endotérmicas y exotérmicas. Si el proceso está correctamente controlado (a temperatura constante) el calor aportado por las reacciones exotérmicas (combustión) compensa el calor absorbido por las reacciones endotérmicas. Se dice entonces que el proceso es auto- térmico.



2.3.1 Reacciones Químicas.

Cuando el sólido orgánico entra al gasificador, se produce rápidamente la pirolisis. El sólido libera los compuestos volátiles y se forma un residuo carbonoso o “char”. Si bien el conjunto de reacciones es muy complejo, las reacciones limitantes de la velocidad global del proceso son las reacciones salido-gas, por lo que son las únicas que suelen tenerse en cuenta junto con las reacciones deformación de hidrogeno (Shift) y metano (metanización) a partir de CO.

Combustión (Reacciones exotérmicas)

Completa



Parcial



Gasificación.



Reacción Shift (exotérmica)



Metanización (exotérmica)



El char “carbonizado” en presencia del oxígeno llevara a cabo la combustión (reacción 2.1). Cuando el oxígeno se introduce de forma insuficiente al reactor se favorece la presencia de CO por combustión incompleta (reacción 2.2). El exceso de char reacciona con los gases presentes (principalmente CO₂ y agua, reacciones 2.3 y 2.5). Las reacciones 2.5 y 2.6 están favorecidas por la presencia de vapor de agua en el agente oxidante por lo que la presencia de vapor favorece la producción de hidrogeno. La formación de metano reacción 2.7 esta favorecida por las altas presiones.

Las anteriores reacciones proporcionan una descripción general del proceso de gasificación esto no implica que sean las únicas reacciones participantes, en el capítulo III de este trabajo se presentan una clasificación de las reacciones (homogéneas y heterogéneas) que fueron consideradas para desarrollar el modelo matemático que presenta esta tesis.



2.4 Producción de energía a partir de biomasa: las tecnologías de gasificación

2.4.1 La gasificación como vía de conversión de la biomasa.

La biomasa está ampliamente considerada como el combustible de mayor potencial como fuente de energía del futuro. Como recurso energético podría representar el 50 % de la demanda energética total de Europa, utilizando cultivos específicos para la biomasa en terrenos que no puedan producir alimentos además de considerar otros desechos y residuos de la agricultura, comercio y población en general. De hecho esta cifra podría ampliarse de forma importante si se incluyeran los denominados cultivos energéticos. [B.V. Babuand Pratik N. Sheth, 2005]

Los procesos de transformación de la biomasa para una posterior utilización del combustible en la generación de electricidad o cogeneración termoeléctrica son la combustión la gasificación y la pirolisis.

De los tres procesos descritos para la valorización energética de la biomasa, la gasificación es el que se comporta en teoría con mayores ventajas:

1. En primer lugar el volumen de los gases producidos en la gasificación es mucho menor y la concentración de contaminante es menor, con lo cual los sistemas de depuración son más pequeños y actúan de forma más eficiente.
2. En segundo lugar en la gasificación se obtiene un combustible que puede ser empleado en una amplia variedad de aplicaciones con equipos convencionales diseñados para gases combustibles debidamente adaptados, de manera que es posible transportarlo a una cierta distancia del lugar de la generación.
3. En tercer lugar si el objetivo es producir electricidad y vapor el rendimiento termodinámico global utilizando un gas de síntesis para que se expanda en motores térmicos tras una combustión y aproveche la energía sobrante en los gases calientes para producir vapor es muy superior en la gasificación que en la combustión.
4. Finalmente la gasificación está mucho más desarrollada que la pirólisis a escala de operación industrial y tanto el diseño de los equipos como la operatividad es más sencilla para el caso de la gasificación.

Uno de los mayores problemas de la biomasa como cultivo energético es el costo asociado a la mano de obra, recolección y transporte dado la dispersión en grandes áreas de cultivo. Por ello debe recurrirse a formas más eficientes de conversión energética.

2.5 Pre-tratamiento de la materia prima

El grado de pre-tratamiento de la biomasa como materia prima depende de la tecnología utilizada para gasificación. Los principales problemas son:



Secado. La biomasa debe contener en contenido de humedad por debajo de 10-15% antes de la gasificación.

Tamaño de las partículas. El rango en el tamaño de partículas es 20-80 mm generalmente.

Fraccionamiento. El nitrógeno y el álcali contenido en la biomasa son fundamentales, ya que son en parte arrastrados en la corriente de gas. Pequeñas partículas tienden a contener menos nitrógeno y álcalis, por lo que en el fraccionamiento de partículas finas y gruesas ayuda a producir un gas con menos impurezas.

Lixiviación. El nitrógeno y el álcali contenido de la biomasa se puede reducir antes de la lixiviación con agua.

El secado de madera en un 50% a 60% (madera talada) y el uso de la madera con un contenido de humedad del 20%, requiere secado al aire para tener un nivel requerido de 10-15% de humedad de no alcanzarlo se requiere el uso de secadores. Los secadores pueden ser con calefacción de combustión en lecho fluido utilizando un secador de vapor para calentar la materia prima. Los vapores emitidos durante el secado contienen una serie de compuestos orgánicos volátiles (COV), principalmente terpenos, que requieren un adecuado sistema de control para evitar contaminación del aire.

2.6 Propiedades de la materia prima

Las características de la biomasa como materia prima tienen un efecto significativo sobre los resultados del gasificador, en especial las siguientes características.

2.6.1.1 Contenido de humedad

El combustible con contenido de humedad por encima de alrededor de un 30% hace difícil la ignición y reduce el valor calorífico del gas producido debido a la necesidad de evaporar la humedad adicional antes que se pueda producir la combustión y la gasificación. Un alto contenido de humedad reduce la temperatura alcanzada en la zona de oxidación. [Stamford Consulting Gp 1994].

2.6.1.2 Cenizas

Un alto contenido de material mineral puede hacer imposible la gasificación. La oxidación se lleva a cabo generalmente a una temperatura por encima del punto de fusión de la ceniza de la biomasa. El clinker (escoria de inferior calidad) es un problema de contenido de cenizas por encima del 5%, especialmente si la ceniza es alta en óxidos alcalinos y sales que produce eutéctica mezclas con un bajo punto de fusión.



2.6.1.3 Compuestos volátiles

El gasificador debe estar diseñado para destruir los alquitranes y los hidrocarburos pesados liberados durante la etapa de pirólisis en el proceso de gasificación.

2.6.1.4 Tamaño de las partículas

Las partículas más grandes pueden formar puentes que impiden el movimiento hacia abajo de alimentación, mientras que las partículas más pequeñas tienden a obstruir las voidage, dando lugar a una alta caída de presión y el posterior obstrucción de la gasificador.

2.7 Tipos de gasificadores.

Los gasificadores son de dos tipos principalmente, de lecho fijo y de lecho fluidizado, con variaciones dentro de cada tipo [Rampling,1993; Ramplingand Gill, 1993]. Un tercer tipo de gasificador por arrastre, ha sido desarrollado para la gasificación de carbón, pero la necesidad de un material finamente dividido con una alimentación (<0.1-0.4 mm) presenta problemas para los materiales fibrosos como la madera, que hacen que el proceso en gran medida inadecuados para la mayoría de materiales de la biomasa y, por tanto, el proceso actualmente ya no se considera.

2.7.1 Gasificador de corriente ascendente o gasificador a contracorriente (gasificador updraft).

En este tipo de gasificadores, la biomasa y el agente oxidante fluyen en direcciones opuestas. La biomasa entra por la parte superior mientras que el agente oxidante entra por la parte inferior. Primeramente la biomasa se seca, posteriormente el combustible sólido es pirolizado para dar "char" (residuo carbonoso). El residuo carbonoso continúa moviéndose hacia abajo y los productos pirolizados en estado gaseosos son llevados hacia arriba por la corriente de gas caliente. Los alquitranes condensados o bien en fase vapor salen del reactor con el gas producto. Los alquitranes condensados también pueden ser craqueados y convertidos en gas y "char". En el fondo del gasificador el residuo carbonoso procedente de la pirólisis y los alquitranes craqueados son parcialmente oxidados por el agente gasificante [Bridgwater, 1995]. Estos gasificadores son de construcción simple y alta eficiencia térmica, sin embargo, convierten entre un 10 y un 20% del combustible en alquitranes ($1-100 \text{ g/Nm}^3$) que deberán eliminarse para la posterior utilización del gas producto [Padban, 2000]. Una ventaja de estos gasificadores es la posibilidad de funcionar con muchos tipos de carga.

En la figura 2.1 se muestran las típicas zonas de un gasificador de corriente ascendente.

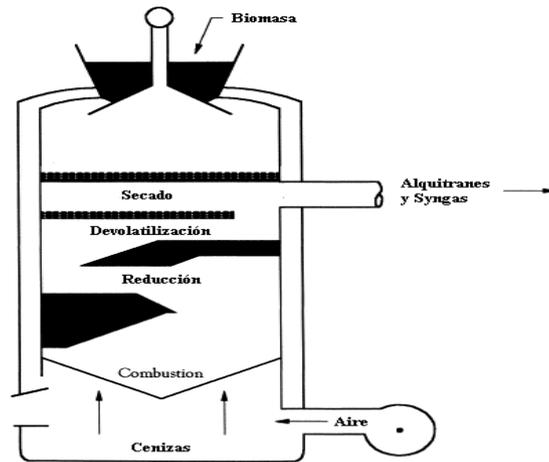


Figura 2.1 Esquema de gasificador updraft

2.7.2 Gasificador de corriente descendente o de corrientes paralelas (gasificador downdraft).

En los gasificadores de corriente descendente, la biomasa y el gas producto fluyen en la misma dirección. Es importante señalar que la dirección del combustible y el gas producto podrán ser ascendente (upstream) o descendente (downstream). Como podemos observar en la figura hay una reducción (garganta) donde ocurren la mayoría de las reacciones de gasificación. Los productos que se forman estarán íntimamente mezclados en una región a alta temperatura alrededor de la garganta que permitirá el craqueo de alquitranoes. También se producirá el craqueo de alquitranoes debajo de la garganta sobre la cama de residuo carbonoso "char", donde se completa el proceso de gasificación. A este tipo de equipos se les conoce como gasificadores Imbert [Bridgwater, 1995].

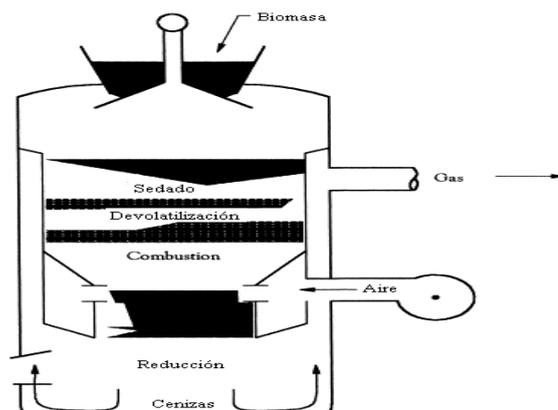


Figura 2.2 Esquema de gasificador downdraft del tipo Imbert

Otro tipo de gasificadores de corrientes paralelas es el gasificador estratificados que a diferencia del gasificador Imbert este no tiene reducción y tanto la biomasa como el



agente oxidante son alimentados por la parte superior del reactor. El aire fluye a través de la cama de combustible soportada por una rejilla, hacia el fondo del gasificador. Este reactor es más fácil de construir y se puede tener acceso a las diferentes zonas. Este gasificador tiene, en principio, mejores propiedades de escalamiento que los gasificadores Imbert (Xu, 1997; Schenk, 1997).

En la parte superior del lecho la biomasa es calentada y secada, por debajo de esta zona la temperatura se incrementa y se produce la volatilización o pirólisis y se presenta una combustión parcial de estos productos con el aire existente, que es la fuente de calor para los procesos de secado, descomposición térmica y gasificación posterior del carbonizado. La temperatura en esta zona está entre 1000-1100°C. En la tercera zona, de reducción del carbonizado, los gases calientes formados en la zona de pirólisis (principalmente CO₂ y H₂O) reaccionan con el carbonizado remanente en ausencia de oxígeno alrededor de los 800-900°C. El carbonizado es convertido en producto gaseoso principalmente por las reacciones endotérmicas de Boudouard y de vapor de agua. A medida que estas reacciones avanzan la temperatura disminuye tanto (800°C) que las velocidades de reacción son insignificantes.

2.7.3 Gasificadores de flujo cruzado

En estos gasificadores no se introducen partículas inertes como ocurría en los de lecho fluido. La alta velocidad del agente gasificante es suficiente para transportar la biomasa a través del reactor. Estos gasificadores operan a temperaturas muy altas (1200 °C – 1500 °C) y el gas producto tiene un bajo contenido en alquitranes [Bridgwater, 1995]. Un inconveniente de estos gasificadores es que la materia prima debe ser muy fina.

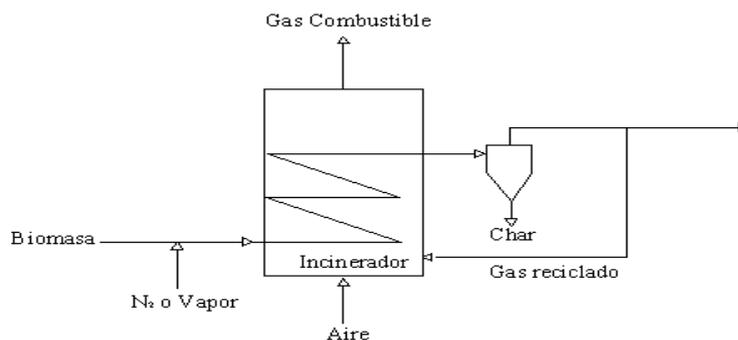


Figura 2.3 Gasificador de flujo cruzado (Bain 2004)

2.7.4 Rendimiento.

En general los gasificadores lecho fijo tienen la ventaja de un diseño simple, pero el inconveniente de producir un bajo valor calorífico (VC) del gas con un alto contenido de alquitrán.



El producto de la composición del gas es típicamente 40-50% N₂, 15-20% H₂, CO 10-15%, 10-15% de CO₂ y 3-5% CH₄, con un neto 4-6 MJ/Nm³ de valor calorífico. Para obtener un alto VC del gas, el contenido de humedad de la alimentación debe ser <15-20%, por lo que pre-secado de la biomasa como materia prima suele ser necesario. El calor residual de la gasificador puede ser usado para ayudar a un pre-secado de la materia prima. El contenido energético de los productos del gas es hasta el 75% del contenido de energía de la biomasa, las pérdidas se explica por el calor sensible del gas en el producto, el contenido de calor de las cenizas y las pérdidas de radiación.

2.8 Gasificación de lecho fluidizado.

La gasificación en un lecho fluido se ha utilizado ampliamente para la gasificación del carbón durante muchos años, su ventaja sobre gasificadores de lecho fijo es que se tiene una distribución uniforme de la temperatura alcanzada en la zona de gasificación. En los gasificadores de lecho fluidizado la biomasa junto con un lecho de partículas sólidas se comporta como un fluido. Como medio de fluidización se utiliza normalmente aire, oxígeno o una mezcla de vapor/oxígeno.

La clasificación de los gasificadores de lecho fluidizado se divide en:

- Gasificador de lecho fluidizado circulante
- Gasificador de lecho fluidizado burbujeante.

Un tercer tipo de gasificado de lecho fluidizado se está desarrollando actualmente, el cual combina las características de diseño de los otros dos tipos. El reactor se encuentra aún en la etapa experimental de desarrollo.

2.8.1 Gasificador de lecho fluidizado burbujeante y Circulante.

Las velocidades en los lechos burbujeantes son de 1 m/s aproximadamente mientras que las de lecho circulante serán mayores de 3 m/s arrastrando muchas partículas que son recicladas por un ciclón.

En los lechos burbujeantes se hace pasar el agente oxidante a través de la cama de partículas. La velocidad del gas es tal que se produce un proceso de fluidización. Las partículas inertes que se utilizan como medio fluidizante se quedan en el reactor. Esta cama de partículas rompe la materia prima (biomasa) de manera efectiva y asegura una buena transferencia de calor en el reactor. En estos tipos de gasificadores es posible una alta tasa de conversión de materia prima con una baja producción de alquitranes (1-5 g/Nm³).

En los gasificadores de lechos circulantes las velocidades del gas son tales que las partículas inertes formarán parte del flujo de gas y posteriormente serán separados a la salida del reactor y llevados de nuevo a él. Los lechos circulantes también tienen una



alta tasa de conversión de materia prima y producirán un gas con bajo contenido en alquitranes ($1-5 \text{ g/Nm}^3$).

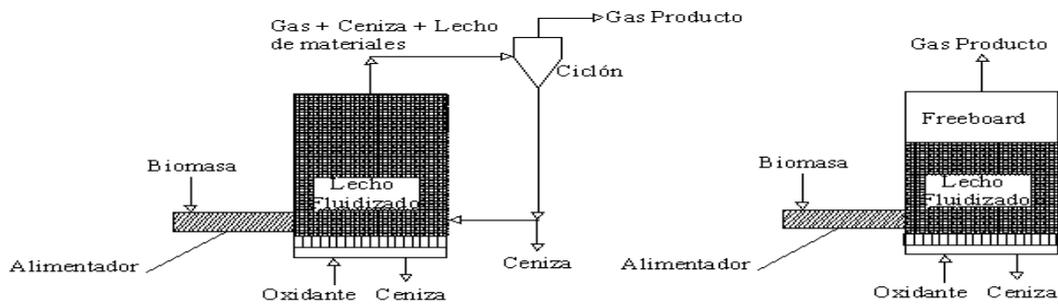


Figura 2.4 Gasificador de lecho fluidizado: circulante y burbujeante respectivamente [Bridhwater 1995]

En resumen, se puede decir que las principales características de los gasificadores de lecho fluidizado son:

- Mayor tolerancia en cuanto al tamaño de las partículas que los gasificadores de corriente ascendente y descendente.
- Buen control de temperatura y altas tasas de reacción.
- Buen contacto sólido-gas.
- Nivel de alquitranes en el gas producto bajo-moderado ($1-30 \text{ g/Nm}^3$)

En estos gasificadores podremos encontrar sistemas atmosféricos y presurizados. Los sistemas atmosféricos operan cerca de la presión atmosférica mientras que los sistemas presurizados operan a más de tres atmósferas de presión. En los gasificadores a presión atmosférica, el gas producto deberá estar suficientemente limpio para comprimirlo antes de pasar a una turbina, sin embargo, en los sistemas presurizados el gas producto se introduce en la turbina a presión permitiendo un alto contenido de alquitranes en el gas que necesitarán ser completamente quemados en el combustor de la turbina [Bridgwater, 1995]. Ambos sistemas producirán, gases de similares poderes caloríficos.

La principal dificultad operacional de estos gasificadores es la potencial formación de escoria debido a las cenizas de la biomasa. De particular importancia es el metal alcalino contenido de la biomasa derivada de plantas herbáceas. Para evitar la escoria, se puede bajar la temperatura en el lecho, pero esto resulta en un aumento de la pérdida de char con la ceniza eliminada. [B.V. Babuand Pratik N. Sheth, 2005]

2.9 Problemas en el proceso de gasificación

El gas formado en los diferentes tipos de gasificadores contiene una serie de impurezas:



- Partículas.
- Alquitranes.
- Compuestos de nitrógeno.
- Compuestos de azufre.
- Compuestos alcalinos.

El uso final del gas determina el grado de limpieza requerido y por lo tanto la limpieza de los gases puede lograrse en una limpieza en caliente o frío. El beneficio de la limpieza de gases en caliente es más energía obtenida a partir del gas, pero el proceso plantea importantes retos técnicos, mientras que una limpieza en frío es técnicamente más sencilla, pero produce aguas residuales contaminadas con alquitranes, que probablemente planteen un problema de eliminación.

2.9.1 Partículas

Consisten principalmente en partículas de ceniza y de carbón, la cantidad de material con partículas es producidas en función de la tecnología de gasificación utilizada. Los gasificadores de lecho fijo generalmente producen una menor carga de partículas que los gasificadores de lecho fluidizado. Las partículas superiores a 10 μm puede eliminarse utilizando ciclones, el material removido se recicla en el gasificador de ser necesario. La eliminación de partículas finas requiere el uso de dispositivos de filtro. Estos dispositivos logran una eficiencia de remoción 99,8%. Utilizar el filtro a una temperatura de 500 ° C puede reducir obstrucciones, mientras que a temperaturas más bajas generar alquitrán condensándose en la superficie del filtro que sólo puede ser removido por combustión controlada.

2.9.2 Eliminación de alquitranes.

El tipo de biomasa determina en gran medida la naturaleza del alquitrán producido, que también es influenciado por el proceso de gasificación y de las condiciones de funcionamiento. La investigación ha demostrado que los gasificadores de lecho fijo, gasificador downdraft son capaces de producir un bajo contenido de alquitrán.

Dos estrategias pueden aplicarse a la eliminación de los alquitranes:

- Mejorar la tecnología de gasificación para que se produzca un menor contenido de alquitrán.
- Desarrollo de procesos de eliminación de alquitranes.

Los alquitranes pueden ser agrietados en compuestos de menor peso molecular usando procesos catalíticos o procesos térmicos:



Craqueo catalítico tiene lugar a $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ - $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ y en el craqueo térmico $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ - $1100\text{ }^{\circ}\text{C}$. El craqueo catalítico utiliza catalizadores como la dolomita y los compuestos de níquel.

Craqueo térmico. A temperaturas entre $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ - $1,000\text{ }^{\circ}\text{C}$. Sin embargo, los alquitranes de biomasa son más difíciles de craquear por este camino. Utilizando temperaturas más elevadas en la parte Final del gasificador mejora algo. Métodos más habituales son: a) Incrementando el tiempo de residencia, b) Contacto directo con una superficie mantenida a alta temperatura, c) por oxidación parcial introduciendo aire u oxígeno. Es muy efectivo a temperaturas del orden de $1300\text{ }^{\circ}\text{C}$.

El proceso de gasificación suele ser en el rango $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ - $900\text{ }^{\circ}\text{C}$, el craqueo térmico; requiere más energía para calentar el gas, que es generalmente logrado mediante la introducción de una pequeña cantidad de aire para que la combustión eleve la temperatura. Si bien el craqueo térmico es un método eficaz este reduce la eficiencia global de conversión de biomasa en energía en el proceso de gasificación. Una uniformidad de alta temperatura ha resultado ser la combinación ideal para lograr el total resquebrajamiento de alquitrán.

Se puede también utilizar el lavado de gas como método efectivo de separación de los alquitranes de la corriente gaseosa (eliminación de alquitranes por vía húmeda). Los alquitranes requieren una captura física con coalescencia, más que una simple condensación. Se necesita una disminución de temperatura para que la condensación de gotas de agua en las partículas de alquitrán, incrementando su tamaño, y facilitando el proceso de aglomeración y coalescencia.

Una etapa final con tiempos de residencia altos permite que se alcance el equilibrio. Se reduce hasta $20\text{-}40\text{ mg/Nm}^3$ los alquitranes, y a $10\text{-}20\text{ mg/m}^3$ el de partículas. También se eliminan los gases solubles tales como amoníaco.

Este sistema origina un efluente con gran cantidad de agua contaminada aunque puede ser tratada por métodos biológicos usuales. Este sistema es caro, además de reducir la eficiencia energética. Vale la pena reflexionar un poco sobre las consecuencias ambientales y económicas que el sistema indica. Una depuración: enfriamiento y lavado del gas de síntesis en agua, transfiere la mayor parte de la contaminación (no toda) al agua.

La parte de contaminantes residuales contenidos en los gases puede dar lugar a serios problemas en los sistemas de valorización posterior, como ha acontecido cuando se introduce en motores de combustión. [Xavier Elías y Enric Velo, 2005]

La parte de contaminantes que se transfiere al agua, la mayor parte obliga a la construcción de una planta de tratamiento de aguas residuales de gran envergadura (con frecuencia es más cara la planta de tratamiento de aguas que el propio gasificador). Sin embargo una parte de los alquitranes también son solubles y ello obliga a tratar las



aguas con carbón activo antes de un servicio de reutilización. . [Xavier Elías y Enric Velo, 2005]

2.9.3 Impurezas

La eliminación de N_2 , S, Cl_2 y resto de elementos volátiles durante la gasificación de la biomasa suele ser necesaria en la mayoría de los usos finales de gas. Los compuestos de nitrógeno están presentes principalmente como amoníaco, cianuro de hidrógeno, algunos no se pueden eliminar por filtración, sino que requiere de lavado húmedo con agua o soluciones acuosas, que se enfría el gas a alrededor de $50\text{ }^\circ\text{C}$. La alternativa a la depuración húmeda es retirar los compuestos de N_2 para utilizar las técnicas de baja emisión de NO_x durante la combustión, o de reducción catalítica selectiva de los óxidos de nitrógeno en los gases de combustión.

El cloro contenido en la biomasa está presente por lo general como HCl en el gas del gasificador, la concentración es en función de la materia prima y las condiciones de gasificación. La eliminación de HCl se realiza habitualmente por lavado húmedo o absorción activa con materiales como CaO y MgO.

Los componentes alcalinos en la biomasa, especialmente los compuestos de Na y K, son volátiles a altas temperaturas, pero no se tiene certeza de que los compuestos están realmente presentes en el gas. Los compuestos alcalinos pueden causar corrosión de los filtros de cerámica y la lámina de la turbina por lo tanto la mejor manera de reducir las concentraciones es enfriar los gases a unos $500\text{ }^\circ\text{C}$ para condensar los compuestos.

En la figura 2.5 muestra un ejemplo de los problemas que pueden ocasionar estos contaminantes en los equipos donde se hayan utilizado los gases producidos de la gasificación de biomasa. En este caso, podemos observar los problemas que podrían ocasionar los alquitranes condensados (normalmente aromáticos y fenoles) en estos sistemas.



Figura 2.5 Problemas causados por alquitranes condensados en los equipos.

Es importante tener en cuenta que no sólo son necesarios métodos de limpieza para eliminar estos contaminantes sino que el buen diseño del gasificador así como las condiciones operativas del proceso que se seleccionen pueden contribuir a una



reducción significativa del contenido de estos contaminantes debido a que inhiben ciertas reacciones de formación de los mismos.

El uso de catalizadores en el gasificador o en reactores situados abajo del mismo está también muy extendido para reducir el contenido de alquitranes en los gases producto. Se puede decir que el estudio de la formación de estos contaminantes durante el proceso de gasificación será crucial para poder obtener un gas de calidad y a si poder diseñar un gasificador óptimo seleccionando los parámetros operativos adecuados, reduciendo así el uso de los equipos de limpieza posteriores. Aunque esta cuestión es mucho más compleja de cómo aquí se ha explicado, este capítulo pretende dar una visión general del proceso de gasificación, los tipos de gasificadores y los problemas de estos procesos en lo que a contaminantes se refiere.

2.10 La selección del tipo de gasificador y su diseño, depende de una serie de factores, incluido el tipo de proceso que se utilice, la influencia de las propiedades de la materia prima (químicos y físicos); las características de los productos de gas, etc.

A continuación se enumeran algunos criterios que deben abordarse al seleccionar un gasificador:

- Gastos de capital del gasificador y de los productos de limpieza de gases los cuales deben ser lo más bajo posible.
- Los costos de mantenimiento deben ser bajos.
- El gasificador debe ser robusto, idealmente sin partes móviles.

Las características de un gasificador de lecho fluidizado que lo hacen parecer menos atractivos son:

- diseño y operación de complejos,
- requiere una reducción en el tamaño de las partículas de la materia prima,
- el gas producido tiene un alto contenido de alquitrán el cual requieren de limpieza.

En comparación con los gasificadores de lecho fluidizado, el gasificador de lecho fijo parece la opción más viable para la producción de un gas de bajo VC para el uso en pequeña escala de generación de energía.

La estimación de capital para una planta productora de gas con un gasificador de lecho capaz de generar 2,5 MWe (es decir, unos 7,5 MWth en un 30% de eficiencia de la conversión a la electricidad) es de alrededor de 2,3 millones de libras esterlinas.

El procesamiento térmico utilizado en la gasificación de la biomasa (y pirolisis) tiene el potencial de desempeñar muchos papeles diferentes en los países desarrollados y en los países tercer mundo.



En el tercer mundo en el que la disponibilidad de electricidad se considera un factor clave en la asistencia al desarrollo en las zonas rurales, la gasificación puede proporcionar una fuente local de electricidad mediante el uso de la biomasa local (Hislop y Hall, 1996). En el mundo desarrollado la gasificación tanto puede ayudar en la crisis actual de calentamiento de la Tierra como proporcionando una fuente de energía renovable y también abordar el problema ambiental del aumento de las cantidades de residuos producidos por la sociedad.

En las tablas 2.1 y 2.2 se muestra las principales características de los gasificadores de lecho móvil, lecho fluidizado y lecho fluidizado circulante.

Principales características de operación de los diferentes tipos de gasificadores.

Reactor	Alquitrán	Partículas	Escalado	Capacidad máx. (T/h)	MWe	
					Min	Max
Downdraft	muy bajo	moderado	Limitado	0,5	0,1	1
Updraft	muy alto	moderado	Bueno	10	1	10
Burbujeante	medio	alto	Bueno	20	1	50
Circulante	bajo	muy alto	Bueno	20	5	100

Tabla 2.1 Principales características de operación de los diferentes tipos de gasificadores [B.V. Babuand Pratik N. Sheth, 2005].

Tipo de Gasificador	Lecho móvil	Lecho móvil	Lecho fluidizado	L. fluidizado Circulante
Modo de operación	Contracorriente	Corrientes paralelas	-	Corrientes paralelas
Tamaño de partícula adecuado (mm)	2-50	20-100	0-20	0.1
Estado de las cenizas eliminadas	Sólido o líquido	Sólido	Sólido	Líquido
Presión de trabajo (atm)	1-30	1	1-70	1-70
Capacidad de Procesamiento (Kg/h)	100-500	100-800	600-6000	-

Tabla 2.2 Características de los diversos gasificadores [B.V. Babuand Pratik N. Sheth, 2005].



2.11 El desarrollo de otras tecnologías de gasificación en el mundo

A pesar que una de las finalidades de esta tesis es mostrar las tecnologías de gasificación para la biomasa es importante mencionar las tecnologías de gasificación no necesariamente de esta, tecnologías que se están utilizando en otros países desarrollados y subdesarrollados como ocurre con la gasificación subterránea del carbón.

Para comprender la importancia de la Gasificación Subterránea del Carbón se analiza brevemente el contexto de la India donde la demanda de energía de dicho país está en constante crecimiento y el carbón es el principal combustible fósil en la India y sigue desempeñando un papel fundamental en el sector de la energía.

La India tiene relativamente grandes reservas de carbón (253 millones de toneladas) en comparación con el petróleo crudo (728 millones de toneladas) y el gas natural (686 billones de metros cúbicos). El carbón reúne alrededor del 60% de las necesidades de energía comercial y aproximadamente el 70% de la electricidad producida en la India es a través del carbón, por lo tanto hay una necesidad de tecnologías para la utilización de carbones de manera eficiente y limpia [Anil Khadse, Mohammed Qayyumi, Sanjay Mahajaniand Preeti Aghalayam 2007]

Debido a la disponibilidad y bajos precios de petróleo crudo y gas natural, el consumo de carbón el desarrollo de un proceso fue lento en las últimas décadas. Pero como el petróleo se agota al igual que las reservas de gas natural, el carbón volverá a surgir como la mejor opción para la producción de energía.

El uso de carbón se ha visto afectado por la contaminación provocada por el transporte, el almacenamiento, y la combustión. Para hacer frente a estos problemas, "las tecnologías de carbón limpio" se han adoptado en todo el mundo, como el control integrado de gasificación y ciclo combinado (IGCC).

La gasificación subterránea del carbón (UCG) es una tecnología prometedora, ya que es una combinación de la minería, la explotación y la gasificación. La principal motivación para avanzar hacia UCG como un futuro del carbón es la utilización de la técnica del medio ambiente y otras ventajas sobre el proceso convencional de minería. Algunos de los beneficios incluyen el aumento de la seguridad de los trabajadores, bajas cantidades de polvo y menor contaminación acústica, el bajo consumo de agua, mayor explotación de los recursos de carbón y de baja emisión de metano a la atmósfera. La UCG es especialmente ventajoso para los depósitos de carbón ya que en estas condiciones hay menos fugas de gas en los alrededores y las altas presiones favorecen la formación de metano. Pero la UCG implica algunos impactos ambientales, como hundimientos de la tierra y la contaminación de agua subterránea, que son desventajas. Así, antes de seleccionar el proceso de UCG en un determinado lugar se debe realizar una exhaustiva evaluación de impacto ambiental y un completo análisis de riesgos.



La tecnología UCG está relativamente bien desarrollada en países como los EE.UU., Rusia, Francia, España y China. Ellos han realizado una serie de ensayos de campo y están listos para comercializar la tecnología de UCG. Con una vasta reserva probada de carbón, la India tiene el potencial para el uso de la tecnología UCG y a si utilizar el carbón de manera eficaz.

GAIL (India) se propone el uso de lignito, para producir gas sintético mediante el empleo de la tecnología de gasificación de carbón en Rajastán. GAIL tiene planes para utilizar el gas producido a manera de generar 70-80 MW de potencia.

Descripción del proceso de Gasificación subterránea del carbón (UCG).

La gasificación subterránea consiste en una cámara, dentro de la propia veta de carbón, en la que se inyecta oxígeno a presión y agua. De esta forma, las reacciones químicas conseguidas producen un gas rico en monóxido de carbono, hidrógeno y otros elementos como metano. Este gas, tras una desulfuración, puede utilizarse para generar energía eléctrica o como combustible. El carbón empleado no necesita ser de alto poder calorífico, sino que permita buenas reacciones, aunque su óptimo aprovechamiento también depende de las características geológicas del terreno adyacente.

La gasificación subterránea ofrece, según los expertos, una de las maneras más ecológicas y versátiles de convertir el carbón en electricidad, hidrógeno y otros productos energéticos. En este sentido, los beneficios medioambientales y económicos de esta tecnología son varios:

- Podría servir para generalizar el uso del hidrógeno como combustible limpio, aprovechando además capas de carbón de difícil explotación
- Permite aprovechar la energía contenida en el carbón sin necesidad de extraerlo, evitando los problemas ecológicos y de seguridad de la minería convencional, ya que las cenizas y otros componentes indeseables permanecen en el propio yacimiento, lo que significa además un gran ahorro
- Emite cantidades muy bajas de los gases contaminantes derivados de la combustión del carbón, como óxidos de azufre (SO_x) o de nitrógeno (NO_x). Asimismo, el dióxido de carbono (CO₂), uno de los principales gases de efecto invernadero, puede ser capturado por procesos químicos de manera que no escape a la atmósfera.

Los principales componentes de los gases producidos son H₂, CO₂, CO, CH₄ y vapor. La proporción de estos gases varía con el tipo de carbón y de la eficiencia del proceso de gasificación.

- Las plantas de gasificación de carbón son más eficientes energéticamente que las convencionales de combustión (hasta un 50%), y los expertos consideran que en los próximos años se podría llegar hasta el 70 u 80%.



Hace unos años, la gasificación subterránea se realizaba normalmente mediante dos pozos verticales, uno para inyectar los agentes gasificantes y otro para recuperar los gases resultantes. Sin embargo, en algunos casos resultaba muy difícil la conexión entre ambos pozos. En la actualidad, la tecnología de perforaciones petrolíferas ha permitido sondeos desviados, que conectan el pozo de inyección y el de recuperación de los gases.

En cualquier caso, la gasificación subterránea depende de que la mina esté situada cerca de los centros de consumo o los sistemas de transmisión eléctrica: Como el reactor de combustión es la propia mina, cualquier proyecto sólo se podría ejecutar en el mismo lugar.

CAPÍTULO III

MODELADO MATEMÁTICO

Introducción.

Para estudiar un proceso debe ser posible experimentar con el mismo. Sin embargo, el objetivo de muchos estudios de procesos es predecir la manera en cómo se comportará antes de que sea construido. Es claro que no es factible experimentar con un proceso mientras este todavía en su forma hipotética. Incluso con un proceso existente, es seguro que sea imposible o impráctico experimentar con el proceso real.

La finalidad principal del desarrollo de este modelo es la optimización matemática para un gasificador estratificado de biomasa alimentado con partículas de madera medianas y gruesas de 5 μm a 5 cm con un contenido de humedad de 0% a 30 %. Este modelo resuelve las ecuaciones gobernante con el método de volúmenes finitos.

En los siguientes puntos se muestran las reacciones químicas y las relaciones matemáticas que se utilizaron para el desarrollo del presente modelo



Capítulo III

Modelado matemático

3.1 Modelos cinéticos de las reacciones.

Los modelos cinéticos ofrecen la posibilidad de describir las condiciones locales en un reactor, representando así el proceso que eventualmente conduce a las condiciones de salida del reactor. La representación matemática consiste de ecuaciones diferenciales basadas en la ecuación de continuidad, ecuaciones de energía y movimiento, incluyendo expresiones de la velocidad de reacción y transferencia de masa y calor. Debido a que este tipo de modelo provee la descripción más detallada de los reactores de gasificación, requiere un gran número de parámetros como energías de activación, parámetros de transferencia de masa y calor, etc.

Las reacciones sólido-fluido son numerosas y de gran importancia industrial. Pueden encontrarse dos grandes grupos de reacciones: aquellas en las que aparentemente no varía el tamaño del sólido por que se forma algún producto sólido de características similares al sólido inicial y las que presentan un decrecimiento del tamaño del sólido inicial debido entre otras cosas, a que el producto de la reacción es un gas (tal como sucede en nuestro caso).

A continuación se mencionan los modelos cinéticos que se emplearon para el modelo propuesto en esta tesis.

3.2 Modelo de núcleo sin reaccionar.

El modelo cinético de núcleo sin reacción considera una partícula esférica compacta (no porosa) de manera que primeramente un ataque químico por un componente activo de una fase fluida tiene lugar en la superficie exterior. Después la zona de reacción se desplaza hacia el interior del sólido dejando atrás el material completamente convertido en forma de producto sólido (capa de cenizas) de manera que durante la reacción exista un núcleo de material sin reaccionar, cuyo tamaño ira disminuyendo a medida que transcurre la reacción. Cuando el único producto de la reacción es un gas el núcleo sin reaccionar disminuirá progresivamente sin dejar atrás material sólido convertido.

El modelo de núcleo sin reacción fue planteado por primera vez por Yagi and Kunii, en 1995 y considera que durante las reacciones en particular las de tamaño constante se presentan en una serie de cinco etapas:

1. Transferencia externa de materia del reactante procedente de la fase fluida hasta la superficie del sólido a través de la película fluido-sólido.
2. Difusión del reactante de la fase fluida a través de las capas de cenizas.



3. Reacción química del reactante de la fase fluida con el sólido en la superficie del núcleo sin reaccionar.
4. Difusión del producto o productos fluidos a través de la capa de cenizas para alcanzar la interfase fluido-sólido.
5. Transferencia externa de materia del producto o productos fluidos desde la superficie del sólido hasta el exterior a través de la interfase fluido-sólido.

3.3 Modelo de Arrhenius.

Este modelo está basado en la cinética química mediante velocidades de reacción finitas y asume que la turbulencia no juega ningún rol en la combustión. Aquí, el término de producción está evaluado a partir de una forma típica de *Arrhenius*.

$$K_{Arrhenius} = -A[X_i]^a [X_j]^b [X_k]^c e^{\frac{-E}{RT}} \dots\dots\dots (3.1)$$

Donde:

$[X_{i,j,k}]$ = Son las concentraciones molares de las especies participantes;

R = Constante universal

T = Temperatura;

A, a, b, c, E = Constantes empíricas.

3.4 Modelo *Eddy Break Up* (EBU)

Este modelo fue propuesto inicialmente por Spalding y después modificado por varios autores, supone que el factor limitante en la tasa de reacción química no es la velocidad cinética, sino la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel molecular (a diferencia del modelo de *Arrhenius* en donde la turbulencia es la que no juega un papel destacado). La velocidad de reacción media está dada en términos de un tiempo de turbulencia típico y por la fluctuación local media cuadrática del combustible, los cual se expresa en la siguiente ecuación.

$$K_{EBU} = C_{EBU} Y_k^{rms} \rho \frac{\varepsilon}{k} \dots\dots\dots (3.2)$$

Donde C_{EBU} es una constante empírica y Y_k^{rms} es el valor cuadrático medio (*rms*) de las fluctuaciones locales en las especies k. Como una primera aproximación, el valor es obtenido como:

$$Y_k^{rms} = \min\{Y_k, \alpha_k Y_{O_2}\} \dots\dots\dots (3.3)$$

donde $\alpha_k Y_{O_2}$ es la fracción másica máxima de las especies k que son capaces de reaccionar con el oxígeno local.



3.5 Modelo disipación turbulenta (EDC)

Este modelo es una combinación de las aproximaciones de *Arrhenius* y de *Eddy Break Up*.

A menudo se asume que:

- la turbulencia no juega un papel (Modelo *Arrhenius*); o que,
- la cinética química no juega un rol explícito (Modelo *Eddy Break Up*).

Sin embargo, en ocasiones la validez de asumir exclusivamente una u otra condición puede no ser muy representativo del sistema. Una solución intermedia es el modelo EDC, aunque al ser combinación de los modelos anteriores, posee parte de las limitaciones anteriormente descritas. En esta aproximación la velocidad de reacción química se modela limitándose por el más pequeño de los dos valores de las ecuaciones 3.1 y 3.2

La expresión que expresa a este modelo es la siguiente:

$$k_{EDC} = \min \{ k_{Ar}, k_{EBU} \}$$

Este modelo fue aplicado en las ecuaciones 3.7 a 3.11 para determinar sus velocidades de reacción.

3.6 Pirólisis

La pirólisis produce tres productos principales que son los volátiles (que pueden ser condensables e incondensables), alquitranes que son generalmente hidrocarburos pesados (en la práctica se tratan como productos intermedios) y carbonizado (*char*) que es un combustible sólido rico en carbón con pequeñas cantidades de hidrógeno y oxígeno.

Los cambios físicos sufridos son la contracción que se origina cuando los volátiles producidos se trasladan a la superficie de la partícula y ocurren reacciones químicas secundarias, originando alquitranes que pueden tapar los poros y por lo tanto se genera una presión interna que rompe la estructura de la partícula del combustible. Los cambios difieren para carbones que exhiben y que no exhiben un comportamiento de ablandamiento.

Los cambios químicos modifican las propiedades termodinámicas y de transporte en las partículas de combustible, por medio de reacciones que ocurren en la zona activa de pirólisis, siendo la temperatura de reacción la que se tiene entre la zona no reactiva del combustible y la zona activa de pirólisis.

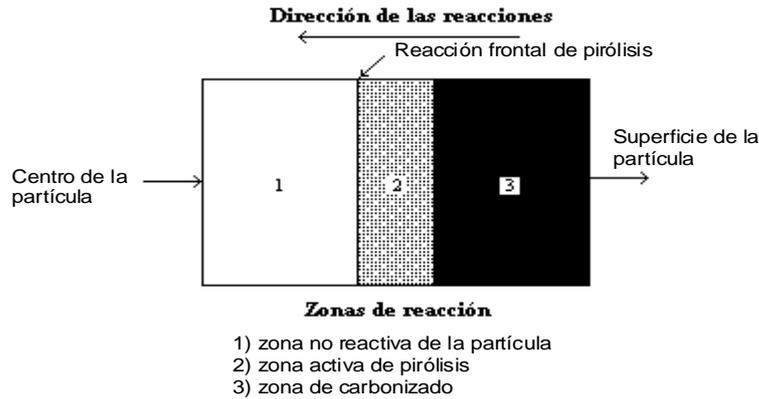
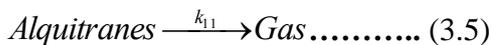


Figura 3.1 Dirección de la pirólisis.

En su revisión Di Blasi recomienda el uso de dos reacciones secundarias en las cuales el alquitrán se craquea a gases más ligeros y a una repolimerización del alquitrán en el cual se modela el carbón. Este esquema de la pirólisis es utilizado en este trabajo.

3.6.1 Reacciones consideradas en el proceso de pirólisis.



Parámetros usados para las reacciones de la pirólisis

Reacciones.	A (s ⁻¹)	E (kJ mol ⁻¹)	Calor de reacción.
Reacciones de Pirólisis			
$\text{Madera} \xrightarrow{k_{10}} \text{Gases}$	1.44 x 10 ⁴	88.6	-0.42
$\text{Alquitranes} \xrightarrow{k_{11}} \text{Gas}$	4.28 x 10 ⁶	107.5	0.04

Tabla 3.1 Kenneth M. Brydena ; Kenneth W. Raglandb , Christopher J. Rutlandb, 21 September 2001, Biomass and Bioenergy 22 (2002) 41–53

Donde:

A=Factor de frecuencia pre-exponencial

E= Energía de activación.

En general las velocidades de reacciones de la pirólisis se representan con una ecuación tipo Arrhenius dependiente de la temperatura y una dependencia de primer orden con respecto a la masa de la madera sin reaccionar. Chan, Kelbon, y Krieger presentan parámetros de velocidades cinéticas para combustión térmica gruesa en la cual la onda de la presión dentro de la partícula no se modela y la resistencia al flujo dentro de la partícula no fue asumida para ser insignificantes.



3.7 Ecuaciones gobernantes.

La determinación de propiedades de la biomasa como son:

- Fracciones másicas de todas las especies químicas (biomasa cruda, carbonizado, agua y ceniza).
- Componentes de velocidad (radial y axial, en coordenadas cilíndricas)
- Entalpía

Son resueltas con la siguiente ecuación de conservación

$$\frac{\partial(\rho_i r_i \Phi_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i r_i \Phi_i) - \nabla(\Gamma_{r_i} \Phi_i \nabla r_i) + \nabla(\Gamma_{\Phi_i} r_i \Phi_i) = S_{\Phi_i} + \Pi m_{j \rightarrow i} \Pi \Phi_+ - \Pi m_{i \rightarrow j} \Pi \Phi_- + f_{j \rightarrow i} (\Phi_j - \Phi_i) \dots (3.6)$$

Φ = Representa cualquier propiedad de la fase gaseosa o de la biomasa.

Φ_+ = Valor de Φ en la fracción másica ($m_{j \rightarrow i}$) que proviene de la fase j hacia la fase i.

Φ_- = Valor de Φ en la fracción másica ($m_{i \rightarrow j}$) que proviene de la fase i hacia la fase j.

$f_{j \rightarrow i}$ = Es un coeficiente de fricción para el transporte difusivo Φ entre las fases.

S_{Φ_i} = representa otras (no-interfase) fuentes, por ejemplo los gradientes de presión en la ecuación de momentum.

$\nabla(\Gamma_{r_i} \Phi_i \nabla r_i)$ = Término de difusión donde el transporte de Φ_i es causado por la difusión turbulenta r_i .

$\nabla(\Gamma_{\Phi_i} r_i \nabla \Phi_i)$ = Representa la difusión turbulenta inherente a la fase de Φ_i el cual solo está presente en la fase gaseosa.

El término $\nabla(\Gamma_{\Phi_i} r_i \nabla \Phi_i)$ solo está presente en la fase gaseosa dicho término es modelado como si fuera una fase, es decir modelando ($V' \Phi'$) fluctuaciones de velocidad y fluctuaciones de la propiedad.

Además las ecuaciones de conservación también se resuelven para: dos componentes de velocidad tres componentes de fluxes de radiación (densidades de energía), energía cinética turbulenta y su rapidez de disipación.



3.8 Componentes de la fase gaseosa (Syngas)

La mezcla de gases es modelada con siete especies químicas, las cuales son representadas por sus fracciones másicas de:

- oxígeno O_2 ;
- vapor de agua H_2O ;
- monóxido de carbono CO ;
- hidrógeno H_2 ;
- dióxido de carbono CO_2 ,
- hidrocarburo genérico CH_4
- nitrógeno (N_2) (el nitrógeno es obtenido por balance).

La ecuación 3.6 es resuelta para cada una de estas especies.

3.9 Reacciones homogénea y heterogénea.

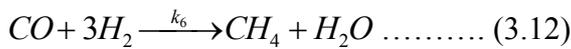
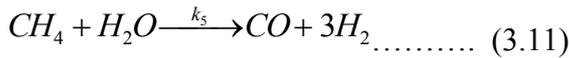
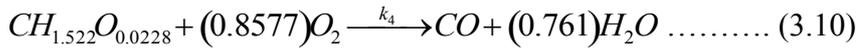
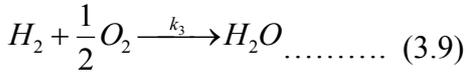
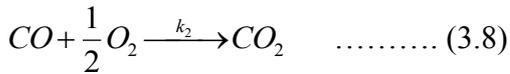
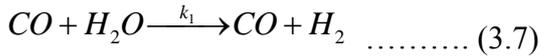
Hay una distinción entre dos tipos de reacciones químicas: las reacciones que se llevan a cabo de manera uniforme en toda una fase dada, se denominan reacciones homogéneas y las reacciones que tienen lugar en una región restringida dentro o fuera de la fase se llama reacciones heterogéneas.

Las reacciones homogéneas manejadas en esta tesis son el resultado de la pirolisis de la biomasa donde hay producción de especies gaseosa reactivas las cuales reaccionan entre sí como sucede con el vapor de agua en la reacción de sustitución o con el oxígeno del aire primario.

El calor generado por las reacciones exotérmicas es importante para la pirólisis de los gases o ignición del carbonizado.

La constante de equilibrio K es calculada a partir de las energía libre de Gibbs de la reacción, además el equilibrio de las siguientes reacciones homogéneas es en dirección a los productos y, por lo tanto, la reacción inversa no se considera.

La reacción (3.7) es una reacción limitada por el equilibrio, a temperaturas bajas favorece la producción de CO_2 .



La velocidad de reacción para las ecuaciones 3.7 a 3.11 se determina por la siguiente ecuación

$$k = \min(k_{Ar}, k_{EBU}) \dots\dots\dots (3.13)$$

Donde k_{Ar} siguen la cinética tipo Arrhenius.

La rapidez de mezclado turbulento, k_{EBU} es calculada con el modelo Eddy Break-up siguiendo la siguiente expresión.

$$k_{EBU} = C_{EBU} \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{y_1^i}{S_i}, \frac{y_1^j}{S_j} \right) \dots\dots\dots (3.14)$$

Donde

y_1^i = fracción másica de la especie i

y_1^j = fracción másicas de la especies j,

S_i y S_j = Coeficientes estequiométricos asociados,

κ y ε = son la energía cinética turbulenta y su rapidez de disipación, respectivamente.

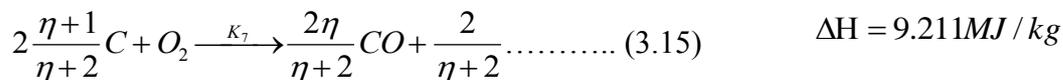
En este trabajo se consideraron las anteriores reacciones homogéneas para el desarrollo de este trabajo donde los parámetros cinéticos para estas reacciones son obtenidos de la literatura como se muestra en la Tabla 3.2.



Rapidez de Reacción	Unidades	Fuente
$r_4 = 2.78 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{-1,510}{T_g}\right) \left(y_{CO} y_{H_2O} - \frac{y_{CO_2} y_{H_2}}{K}\right) c_{mol}^2$	mol/m ³ /s	De Souza-Santos (2004)
$K = 0.0265 \exp\left(\frac{-65.8}{RT_g}\right)$	----	Yoon <i>et al</i> (1978)
$r_5 = 3.98 \times 10^{14} \exp\left(\frac{-20,119}{T_g}\right) y_{CO} y_{O_2}^{0.25} y_{HO_2}^{0.5} c_{mol}^{1.75}$	mol/m ³ /s	Groppi <i>et al</i> (2000)
$r_6 = 2.19 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-13,127}{T_g}\right) y_{H_2} y_{O_2} c_{mol}^2$	mol/m ³ /s	Groppi <i>et al</i> (2000)
$r_7 = 1.58 \times 10^{13} \exp\left(\frac{-24,343}{T_g}\right) y_{CH_4}^{0.7} y_{O_2}^{0.8} c_{mol}^{1.5}$	mol/m ³ /s	Groppi <i>et al</i> (2000)
$r_8 = 3.21 \times 10^2 \exp\left(\frac{-468}{T_g}\right) y_{H_2O}^{1.3} y_{CH_4} c_{mol}^2$	mol/m ³ /s	Zubrin <i>et al</i> (2000)
$r_9 = 3.21 \times 10^2 \exp\left(\frac{-468}{T_g}\right) y_{H_2}^{1.3} y_{CO} c_{mol}^2$	mol/m ³ /s	Zubrin <i>et al</i> (2000)

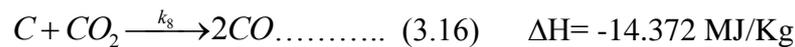
Tabla 3.2 Expresiones cinéticas para las reacciones homogéneas en la fase gaseosa.

Para las reacciones heterogéneas de este estudio, estas se dan entre el char (residuo sólido de la pirólisis) con las especies en fase gaseosa como HO₂, O₂, CO₂. Para la presente tesis se empleó un modelo simplificado de las reacciones globales, considerando las siguientes:



η = La razón de producción de CO a CO₂ la cual depende de la temperatura

Reacción Boudouard



Raccion Agua-Gas



El orden aparente de las reacciones (3.15)-(3.17) es 1 y puede ser calculado con la siguiente expresión



$$r_{het} = \frac{3r_2 k_{Ti} P_i}{D} \dots\dots\dots (3.18)$$

D= Diámetro de la partícula
 p_i =Presión parcial de O₂, CO₂, y H₂O

$$k_{Ti} = \frac{1}{\frac{1}{k_{ci}} + \frac{1}{k_{Di}}} \dots\dots\dots (3.19)$$

i = O₂, CO₂, H₂O, H₂
 k_c =Constante cinéticas
 k_D = Constante difusión

Los valores de k_c y k_D se calculan con las siguientes expresiones:

$$k_c = A_h e^{\frac{-E_h}{RT_2}} \dots\dots\dots (2.28) \quad , \quad k_D = \frac{McShD_k}{DRT_1} \dots\dots\dots (3.20)$$

M_c = Peso molecular del carbón
 Sh = Número de Sherwood;
 D_k = Coeficiente de difusión de O₂, CO₂, y H₂O y, es el peso molecular del carbón.

Rapidez de reacción	Unidades	Fuente
$r_1 = 1.5 \times 10^6 \exp\left(\frac{-13,078}{T_2}\right) p_{O_2} (1 - X_c)^{\frac{1}{2}}$	s ⁻¹	Di Blasi <i>et al</i> (2000)
$r_2 = 4,364 \exp\left(\frac{-29,844}{T_2}\right) c_{CO_2}$	s ⁻¹	Biggs <i>et al</i> (1997)
$\eta = 3 \times 10^8 \exp\left(\frac{-30,178}{T_2}\right)$	----	Monson <i>et al</i> (1995)
$k_3 = \frac{k_A p_{H_2O}}{1 + k_5 p_{H_2O} + k_6 p_{H_2}}$	s ⁻¹	Mühlen <i>et al</i> (1985)
$k_4 = 4.93 \times 10^3 \exp\left(\frac{-18,522}{T_2}\right)$	s ⁻¹ bar ⁻¹	Mühlen <i>et al</i> (1985)
$k_5 = 1.11 \times 10^1 \exp\left(\frac{-3,548}{T_2}\right)$	bar ⁻¹	Mühlen <i>et al</i> (1985)
$k_6 = 1.53 \times 10^{-9} \exp\left(\frac{25,161}{T_2}\right)$	bar ⁻¹	Mühlen <i>et al</i> (1985)

Tabla 3.3 Expresiones cinéticas para las reacciones Heterogéneas combustión gasificación.



3.10 Transferencia de calor

La rapidez de transferencia de calor entre la partícula sólida y la fase gaseosa es modelada con la siguiente ecuación:

$$q_{j \rightarrow i} = \frac{12.36r_2}{r_1 D_i} \rho_1 C_{p1} u_1 \text{Re}^{-0.575} \text{Pr}^{-\frac{2}{3}} (T_j - T_i) \dots \dots \dots (3.21)$$

Ecuación De Souza año 2004

Re = Número de Reynolds para la fase gaseosa

Pr=Número de Prandtl para la fase gaseosa

3.11 Transferencia de momentum

La transferencia de momentum entre el gas y las partículas del lecho móvil en la interfase sólido-gas es modelada, en dirección axial, mediante la siguiente ecuación: (Spalding and Zhubrin, 1998)

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{C_D \rho_1 (W_1 - W_2)}{0.8 D_i} \dots \dots \dots (3.22)$$

$$C_D = \frac{1.4D + 150\eta_1}{0.8D} \dots \dots \dots (3.23)$$

C_D = Coeficiente de arrastre

(W₁ - W₂) = Velocidad relativa entre la partícula y el gas.

η₁ = Viscosidad cinemática del gas.

D = Diámetro promedio de los sólidos en el lecho fijo.

3.12 Turbulencia

Para un estudio de partículas de gran tamaño y rápido calentamiento, como ocurre en los gasificadores de biomasa, requiere un modelo detallado de la partícula simple combinado un modelo del lecho empacado del reactor, que involucre balances de masa, energía, momentum y energía cinética turbulenta y su disipación.

El modelo RNG κ-ε es empleado para modelar las condiciones de turbulencia, el modelo RNG κ-ε se distingue del κ-ε original por valores de las constantes en la ecuaciones de balance de κ y ε y un término extra en el balance de la disipación turbulenta (ε). La manera de efectuar los balances principales en el modelo RNG κ-ε son similares a los balances del modelo κ-ε típico.



La viscosidad efectiva en la ecuación de balance es computada utilizando la forma de un número de Reynolds alto y es idéntica a la viscosidad turbulenta definida en el modelo κ - ε estándar, las diferencias se encuentran en el valor de la constante C_μ .

- modelo κ - ε estándar, $C_\mu = 0.09$,
- modelo RNG, $C_\mu = 0.0845$

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \dots\dots\dots (3.24)$$

Las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta κ y su disipación ε en el modelo RNG κ - ε son definidas en forma similar, utilizando la viscosidad efectiva a partir de la teoría RNG. Una rapidez media de esfuerzo, S , se utiliza en lugar de términos separados de fuente de turbulencia.

$$\frac{\partial(\rho_g \kappa)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\omega}_\kappa \mu_{eff} \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right) + \mu_t S^2 - \rho_g \varepsilon \dots\dots\dots (3.25)$$

$$\frac{\partial(\rho_g \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\omega}_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} \mu_t S^2 - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{\kappa} - R \dots\dots\dots (3.26)$$

donde $\overline{\omega}_\kappa, \overline{\omega}_\varepsilon$ son los recíprocos de los números de Prandtl para κ y ε , respectivamente.

$$C_{1\varepsilon} = 1.42$$

$$C_{2\varepsilon} = 1.68$$

Las anteriores constantes son derivadas analíticamente de la teoría RNG y son, respectivamente.

La mayor diferencia entre el modelo RNG κ - ε y el κ - ε estándar se encuentra en el balance de ε , donde aparece un nuevo término fuente, R . El término R en el modelo RNG κ - ε hace a la turbulencia sensible a la rapidez media de esfuerzo. Este término es función tanto de la energía cinética turbulenta y de su disipación. Lo anterior permite que el modelo responda a los efectos de esfuerzo y curvatura de las líneas de flujo, característica que no existe en el modelo κ - ε original. La inclusión de estos términos hace al modelo RNG κ - ε más adecuado para flujos en lechos fijos, en donde las líneas de flujo se curvan alrededor de las partículas.

3.13 Tamaño de partícula

La variación del tamaño de la partícula durante el proceso de combustión/gasificación de la biomasa, es modelado por un método desarrollado por Fueyo *et al*, el cual es una extensión del método “shadow” de Spalding. En este método utiliza un escalar adicional



de la fase sólida, Φ_s el cual representa el inverso de la fracción del sólido desaparecido debido a la transferencia de masa.

La variable Φ_s , es calculada de una ecuación de transporte

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 \Phi_s)}{\partial t} + \nabla(\rho_2 r_2 \Phi_s V_2) - \nabla(\Gamma_{r_2} \nabla r_2) = S_{\Phi_s} \dots\dots\dots (3.27)$$

En este trabajo únicamente se consideran las reacciones heterogéneas para los procesos de transferencia de masa, como contribuyentes a la reducción del tamaño de la partícula.

Después de que la variable Φ_s es calculada, el diámetro local de la partícula es:

$$D = D_i \Phi_s^{-1/3} \dots\dots\dots (3.28)$$

Donde

D_i = Diámetro inicial de la partícula,

D = Diámetro de la partícula.

3.14 Propiedades físicas

Diversas propiedades físicas, como densidad de la biomasa, propiedades termodinámicas y de transporte simulan el comportamiento de la gasificación de la biomasa en un lecho móvil y se calculan en función de la temperatura, presión y grado de descomposición de la biomasa que se encuentran disponibles en la literatura.

Propiedad	Correlación/Valor	Fuente
Capacidad específica de la madera	$Cp = 1112.0 + 4.85 (T - 273) \text{ (Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$	Koufopoulos <i>et al</i> (1991)
Capacidad específica del carbonizado	$Cp = 1003.2 + 2.09 (T - 273) \text{ (Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$	Koufopoulos <i>et al</i> (1991)
Conductividad térmica de la madera	$k_B = 0.13 + 0.0003 (T - 273) \text{ (Wm}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$	Koufopoulos <i>et al</i> (1991)
Conductividad térmica del carbonizado	$k_B = 0.08 + 0.0001 (T - 273) \text{ (Wm}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$	Koufopoulos <i>et al</i> (1991)
Conductividad térmica del aire	$k_g = 25.77 \times 10^{-3} (T - 273) \text{ (Wm}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$	Koufopoulos <i>et al</i> (1991)
Densidad inicial de la madera	$\rho_0 = 650 \text{ kgm}^{-3}$	Koufopoulos <i>et al</i> (1991)
Difusividad térmica inicial de la madera	$\delta = 1.79 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	Jalan <i>et al</i> (1999)
Porosidad inicial del lecho	$\varepsilon = 0.5$	Fan <i>et al</i> (1977)
Densidad del aire (298 K)	$\rho_{\text{air}} = 1.18 \text{ kgm}^{-3}$	Zheng <i>et al</i> (2001)
Viscosidad del aire	$\mu_{\text{air}} = 1.8 \times 10^{-5} \text{ Nm}^{-2}\text{s}^{-1}$	Zheng <i>et al</i> (2001)
Poder calorífico inferior de la biomasa	$\text{LHV} = 15 \text{ MJkg}^{-1}$	De Souza (2004)

Tabla 3.4- Valores y correlaciones utilizados en la simulación del modelo.



La densidad de la fase gaseosa se representa por el gas ideal (Eq. 3.29). Dependiendo del grado de volatilización, la densidad de la fase sólida cambia de la de la madera a la de carbonizado, incluyendo las cenizas.

$$\rho = \frac{P}{RT \sum_{k=1}^n \frac{y_k}{W_k}} \dots\dots\dots(3.29)$$

$$h_k = \Delta h_{form,k} + \int_{T^0}^T C_{p,k} dT \dots\dots\dots(3.30)$$

Donde

T^0 = Temperatura de referencia (298 K),

$C_{p,k}$ = Capacidad calorífica a presión constante k-ésima especie

$\Delta h_{form,k}$ = es la entalpía de formación de la k-ésima especie.

La entalpía y la capacidad calorífica del gas dependen de la temperatura y composición de este. La capacidad calorífica de las partículas es un promedio entre el carbonizado y la madera y se supone constante durante el proceso. La entalpía h_k considera ambas la entalpía térmica y la química (Eq. 3.30).

La entalpía de formación de la k-ésima especie es definida como el calor involucrado cuando se obtiene 1 kmol de sustancia a partir de sus elementos constituyentes en el estado estándar.

Para la biomasa la densidad y la capacidad calorífica se consideran constantes; y la temperatura se determina a partir de su entalpía.

3.15 Condiciones iniciales.

- Este modelo es aplicado a partículas medianas y gruesas de 5 μm a 5 cm correspondientes a una temperatura de 800 a 2000 K.
- La alimentación de las partículas de biomasa al reactor se consideraron secas.
- Se considero una operación en estado permanente tomando en cuenta las variables de operación como la rapidez de alimentación de la biomasa (A_f) y la cantidad de aire por cada kilogramo de biomasa alimentada (B_f) . La rapidez de alimentación de biomasa se varió en el intervalo 5-25 kg/h, para una relación de aire combustible (A_f/B_f) de 1.5.
- Se considera un gasificador de planta piloto (DI=0.50 m y altura de 0.50 m).



- Los componentes en la fase gaseosa como son las fracciones másicas de H₂O, H₂, CO, CO₂, CH₄, poseen un valor inicial de cero.
- El aire de alimentación se considero con la siguiente composición 77 % N₂ y 22 % de O₂ con una temperatura de 20 °C.
- Se manejó una presión dentro del gasificador de 0.98692 atm

3.16 Detalles numéricos

Se usa una malla 5x20 (radial-axial), donde los resultados son independientes del refinamiento de la malla.

El gasificador estratificado de flujos paralelos es considerado simétrico, simulado en coordenadas cilíndricas polares.

3.17 Volumen finito.

La solución al problema planteado en este trabajo recurre al método de volúmenes finitos puesto que a causa de términos no lineales en ecuaciones que rigen los problemas de flujo de fluidos como son las de continuidad, Navier Stokes y las ecuaciones de energía, los métodos analíticos dan muy pocas soluciones, en general estas soluciones son factibles solo si estas ecuaciones diferenciales parciales pueden hacerse lineales o porque los términos no lineales son eliminados de una manera natural o porque los términos no lineales son pequeños comparados con otros, de modo que pueden ser ignorados.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \text{div}(\rho v_i \phi) + \Gamma_{\phi} \text{grad} \phi = S_{\phi} \quad (3.1)$$

$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi)$ = Término transitorio (en nuestro caso este término tiende cero puesto que se trabaja a régimen permanente): El término temporal transitorio es el que recoge las variaciones locales en el tiempo de $\rho\Phi$ y representa por lo tanto la acumulación o disminución local de esa magnitud.

$\text{div}(\rho v_i \phi)$ = Término conectivo. Este es el responsable del transporte de la propiedad Φ entre dos puntos próximos del dominio por medio de la velocidad del fluido.

$\left(\Gamma_{\phi} \text{grad} \phi\right)$ = Término de difusión. Expresa la tendencia del fluido al equilibrio mediante la destrucción de los gradientes de la propiedad ϕ .



Los tres términos hasta ahora enumerados no son suficientes para representar con la generalidad requerida todas las ecuaciones de la mecánica de fluidos. Por esta razón se introduce un término adicional, llamado “fuente” en el que se incluyen los otros términos que no estén incluidos en los primeros tres de una ecuación determinada.

S_{ϕ} = Termino fuente

Finalmente, el término fuente S_{ϕ} representará las contribuciones a las ecuaciones de transporte tales como: variación de presiones en el tiempo, gradientes de presión, términos de producción o destrucción de especies químicas, fuerzas de gravedad o electromagnéticas, fuerzas de fricción o centrifugas, etc.

Γ_{ϕ} = coeficiente de difusión.

Método de volúmenes finitos se puede definir a grandes rasgos como un método numérico que considera un dominio del cual posteriormente es dividido en subdominios o volúmenes de control asociando a cada uno de estos en un punto nodal obteniendo una ecuación discretizada que relaciona los valores de cada variable ϕ para un cierto grupo de puntos nodales. Este método considera los siguientes tres pasos:

1. Integración formal de la ecuación que rige el fenómeno sobre todos los volúmenes de control.
2. Discretizar las ecuaciones diferenciales parciales. Las ecuaciones diferenciales parciales que rigen el problema deben ser remplazadas por un conjunto de ecuaciones algebraicas con los puntos/celdas de retícula y los niveles de tiempo como su dominio.
3. Solución de las ecuaciones algebraicas por un método iterativo.

La figura 3.1 representa la nomenclatura empleada para la discretización de las ecuaciones diferenciales.

Nomenclatura empleada para la integración sobre un volumen de control

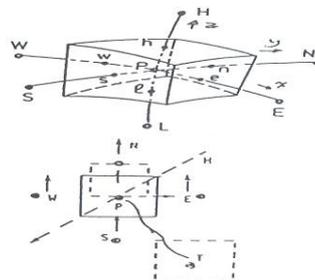


Figura 3.1 Nomenclatura para un volumen de control.

El método de volumen finito parte de la integración de la ecuación general de conservación en un volumen de control además de considerar la divergencia de Gauss la



cual relaciona integrales de volumen con integrales de superficie, de modo que podemos escribir la ecuación (3) como la ecuación (4)

$$\int_{vc} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{vc} \text{div}[\rho\phi u] dV = \int_{vc} \text{div}[\Gamma \text{grad}(\phi)] dV + \int_{vc} S_\phi dV \dots\dots\dots(3.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{vc} \rho\phi dV + \int_{sc} n \cdot [\rho\phi u] dV = \int_{sc} n \cdot [\Gamma \text{gra} d(\phi)] dV + \int_{vc} S_\phi dV \dots\dots\dots(3.33)$$

Como ya se mencionó anteriormente cuando se trabaja con problemas en estado permanente, el término transitorio desaparece pero para el caso donde los problemas dependen del tiempo, se integra una vez más con respecto al tiempo en un pequeño intervalo Dt.

La ecuación general de transporte en forma integrada queda de la siguiente forma:

$$\int_{\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{vc} \rho\phi dV \right) + \int_{\Delta t} \int_{sc} n \cdot [\rho\phi u] dV = \int_{\Delta t} \int_{sc} n \cdot [\Gamma \text{grad}(\phi)] dV + \int_{\Delta t} \int_{vc} S_\phi dV \quad (3.34)$$

Estas ecuaciones generales son las que se discretizan en el método de volumen finito para obtener ecuaciones algebraicas del siguiente tipo:

$$a_p \phi_p = a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_H \phi_H + a_L \phi_L + a_T \phi_T + B \dots\dots\dots (3.35)$$

La ecuación (3.35) la podemos expresar de la siguiente forma:

$$a_p \phi_T = \sum_{i,I=N,S,E,W,H,L} a_i \phi_I + a_T \phi_T + B \dots\dots\dots(3.36)$$

donde

- $a_p, a_T, \text{ etc.},$ son coeficientes;
- $B,$ es una representación de la fuente apropiada para ϕ en cada celda.

Los subíndices:

- P = Nodo típico sobre el cual se esta discretizando la ecuación;
- N = Nodo vecino al norte,
- S = Nodo vecino al sur,
- E = Nodo vecino al este,
- W = Nodo vecino al oeste,
- H = Nodo vecino alto,
- L = Nodo vecino bajo,
- T= Terminio referido al tiempo

Se resuelve el conjunto de ecuaciones algebraicas de volumen finito para todas las celdas y ϕ en cuestión de forma iterativa. En el transcurso de la discretización de las ecuaciones se consideran los valores discretos de las variables dependientes en un punto



concreto de la celda computacional. Es frecuente suponer que las variables escalares (como la presión, la entalpía, o las fracciones másicas) se encuentran definidas (o “almacenadas”) en el centro de la celda, mientras que los componentes de la velocidad correspondientes se encuentran desplazados en cada dirección a las caras de la celda. El tiempo también se discretiza donde las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T.

Las ecuaciones siguientes son términos de la ecuación discretizada (3.36). Definiendo los símbolos F , D y Pe como:

$$F = \tilde{\rho} \tilde{v}_i \dots\dots\dots (3.37)$$

$$D = \frac{\Gamma}{\delta_i} \dots\dots\dots (3.38)$$

$$Pe = \frac{F}{D} \dots\dots\dots (3.39)$$

donde

\tilde{v}_i = velocidad en la cara i ,

δ_i = distancia entre los nodos que incluyen la cara i ,

F = términos convectivo,

D = términos difusivo,

Pe = número de Peclet, este número es la relación entre la convección y difusión.

Los coeficientes a_i de la ecuación 3.36 se definen de la siguiente forma:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \dots\dots\dots (3.40)$$

donde D_i y F_i se definen de la siguiente forma

$$F_i = (\tilde{\rho} \tilde{v}_i)_i \Delta_i \dots\dots\dots (3.41)$$

$$D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{\delta_i} \dots\dots\dots (3.42)$$

$i = n, s, e, w$

donde

Δ_i = longitud de la cara i .

La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (3.40) depende del esquema empleado. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$, y para el sistema híbrido.

$$f(|Pe|) = \max(0, 1 - 0.5|Pe|) \dots\dots (3.43)$$



Para determinar el término D_i se requiere conocer el coeficiente de difusión Γ_i en la cara de la celda, el coeficiente de difusión no tiene que ser necesariamente una constante, sino probablemente función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo, la temperatura), y por lo tanto es necesario interpolarlo a la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Considerando la cara e , estas interpolaciones pueden ser de la siguiente forma:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2\delta x_e} \dots\dots\dots(3.44)$$

O también

$$\Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \dots\dots\dots(3.45)$$

Si se está trabajando con un problema a régimen transitorio su coeficiente se expresa de la siguiente forma:

$$a_T = \frac{\rho \Delta x \Delta y}{\Delta t} \dots\dots\dots(3.46)$$

El término fuente de la ecuación (3.36) se linealiza como: $S_\phi = S_{\phi,C} + S_{\phi,V} \phi_P$, donde el término $S_{\phi,V}$ se elige de acuerdo con la relación existente entre S_ϕ y ϕ , en caso de que exista una dependencia del primero por segundo. El objetivo de la linealización del término fuente es mejorar la convergencia de la solución.

Aclarando lo anterior el término B y a_T de la ecuación (3.36) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,C} \Delta x \Delta y + a_T \Phi_T \dots\dots\dots (3.47)$$

$$a_P = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,V} \Delta x \Delta y \dots\dots\dots (3.48)$$

La ecuación (3.36) es aplicada en cada celda del dominio, para cada ϕ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales en donde los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente de ϕ , por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal.

Puesto que para el problema que se resolvió no hay una solución analítica, el proceso de solución del sistema de ecuaciones es iterativo y durante éste, las ecuaciones en general no alcanzan una convergencia.

La diferencia numérica entre la parte izquierda y derecha de la ecuación se denomina residuo. Se dice entonces que cuando la suma de los errores disminuye con el proceso iterativo, se está logrando la convergencia.



La relajación es la técnica más usada para procurar la convergencia. La idea de esta técnica es disminuir la velocidad a la que el procesador de ecuaciones lineales procede, con el fin de evitar que grandes cambios a los valores de las variables introducidas durante el proceso iterativo causen la divergencia del mismo. El método de relajación es aplicable tanto para las variables dependientes como para las propiedades y fuentes. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal.

La relajación inercial (o de falso paso temporal) se emplea principalmente para velocidades y consiste en añadir a la ecuación algebraica un término fuente que es idéntico al que resulta de discretizar el término temporal de la ecuación de conservación.

$$\bar{S}_{\phi,v} = \frac{\rho_P V_P}{\Delta t_f} (\phi^{n-1} - \phi^n) \dots\dots\dots(3.49)$$

Donde V_P es el volumen de la celda P , Δt_f es el intervalo de tiempo falso y el superíndice n se refiere al número de iteración. (El numero de iteraciones que se empleo en este trabajo fue de 4 000)

La relajación lineal consiste simplemente en aceptar un valor para cada variable en cada celda que es una combinación lineal del valor pre-existente (resultado de la iteración anterior) y del valor proporcionado por el procesador de ecuaciones algebraicas. Este es el tipo de relajación empleado generalmente para la presión y densidad la cual está dada por la siguiente expresión:

$$\phi_p^n = \alpha \phi_p^{sol} + (1 - \alpha) \phi_p^{n-1} \dots\dots\dots(3.50)$$

Donde α es el factor de relajación, el cual, normalmente toma valores entre 0 y 1; y el superíndice *sol* se refiere al valor de la propiedad proporcionado por el procesador (*solver*) en la iteración actual. Nótese que al alcanzar la convergencia, $\phi_p^n = \phi_p^{n-1}$, con lo cual se demuestra que la relajación no cambia la solución final, sino sólo la velocidad a la que se alcanza

3.18 Resultados.

3.18.1 Composición del syngas.

El O_2 en el proceso de gasificación es consumido rápidamente por las reacciones de combustión del char (carbonizado) y de los compuestos volátiles, posteriormente, el char es consumido por las reacciones de gasificación con CO_2 y H_2O para producir CO e H_2 , la reacción de reformación con vapor de agua tiende a producir CO y H_2 . Una elevada concentración de CO y H_2 son minimizadas con las reacciones de reducción de CO y la reacción de oxidación de H_2 , además la presencia de estos componentes



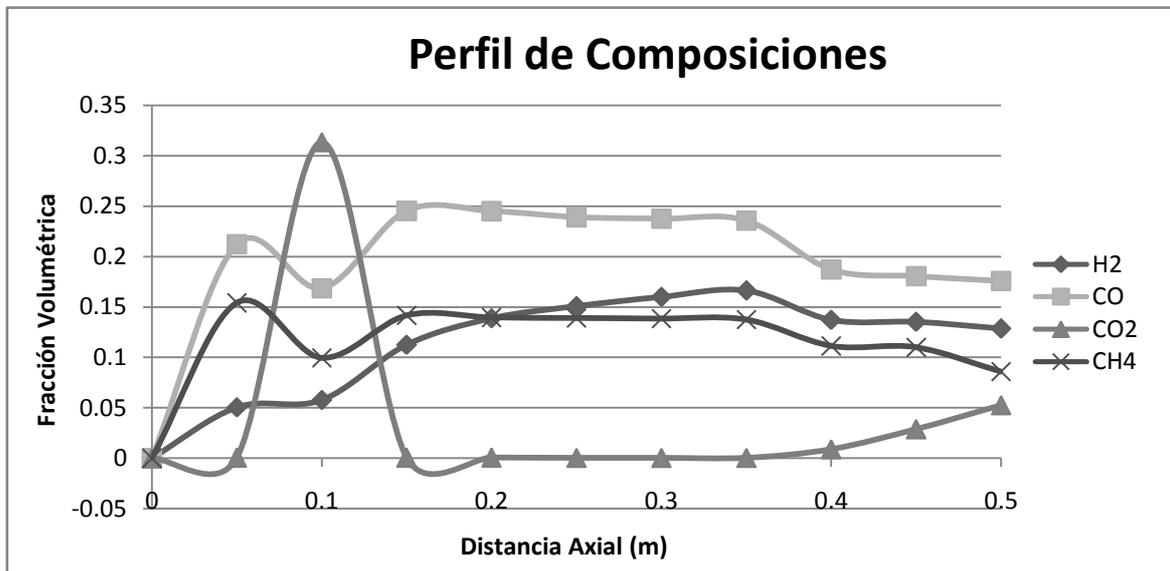
favorece la formación de CH₄ en el Syngas. Cabe aclarar que la composición del N₂ se obtuvo por balance.

En la tabla 3.4 se muestra la composición del syngas de diferentes autores los cuales son comparados con los obtenidos en este trabajo logrando una predicción satisfactoria.

	Chee (1987)	Senelwa (1997)	Jayah Datos experimentales (2003)	Modelo de D.L. Giltrap et al (2003)	Este Modelo
CO ₂	12	10	7	6	5.27
CO	23.7	24	20	23	17.58
CH ₄	2.3	3	3	10	8.6- 10.9
H ₂	14	13	19	11	12.85
N ₂	48	51	51	50	53.31

Tabla 3.4 Composición del syngas reportada en fracción volumen.

La siguiente gráfica muestra el comportamiento de los diferentes componentes a lo largo del gasificador, observando un notable incremento del CO₂ en la zona de oxidación este comportamiento es debido a las reacciones de combustión, una vez que estas limitan su presencia el CO₂ disminuye en el gasificador.



Grafica 3.2 Perfil de composición.

En las siguientes ilustraciones se muestra la fracción másica de componentes del syngas obtenidos del simulador PHOENICS, los datos que se muestra en cada figura de lado derecho son datos de composición a la salida del gasificador y valores promedio respectivamente.

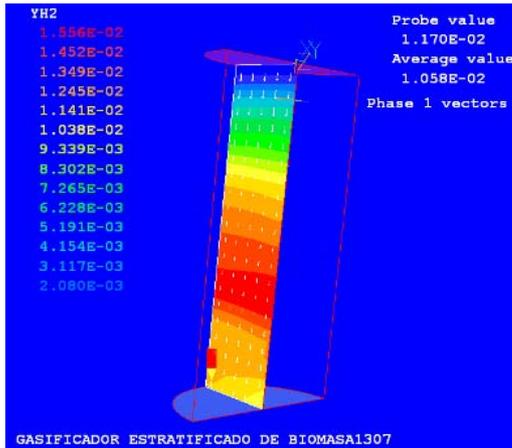


Figura 3.3 Fracción másica del H₂



Figura 3.4 Fracción másica del CH₄

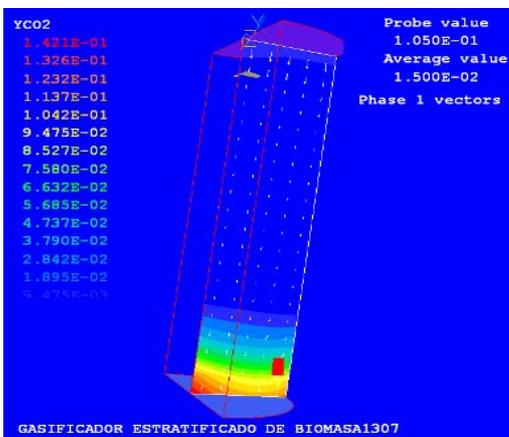


Figura 3.5 Fracción másica del CO₂

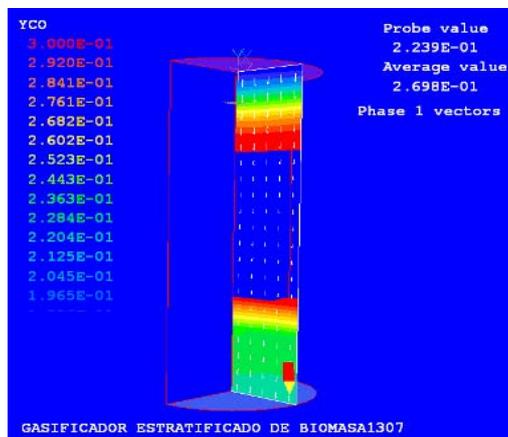
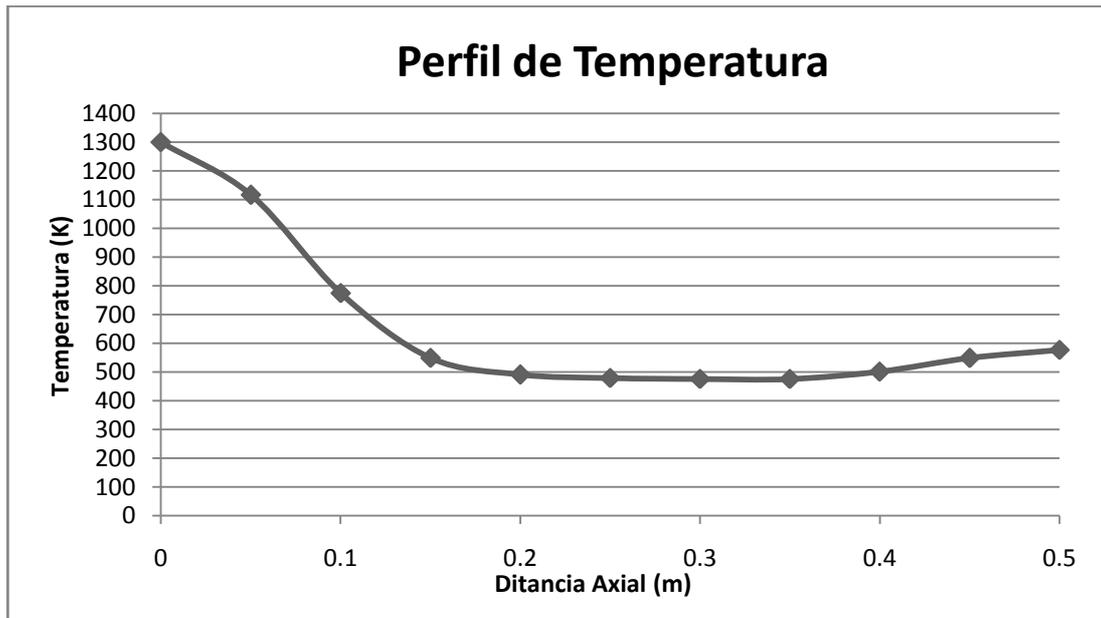


Figura 3.6 Fracción másica del CO

3.18.2 Perfil de temperaturas.

En la parte superior del lecho móvil se encuentra la zona de oxidación teniendo una temperatura de 1300 K hasta una temperatura 475 K donde las reacciones de reducción se vuelven considerablemente lentas disminuyendo la conversión del char, en esta misma zona la temperatura del gas alcanza una temperatura máxima, dicho fenómeno se debe a la combustión de los alquitranes y del char además de las reacciones exotérmicas, posteriormente se puede apreciar en descenso en la temperatura el cual es debido principalmente a las reacciones endotérmicas conjuntamente con la pérdida de calor a través de las paredes del gasificador.

A partir de la temperatura de 480 K se da un aumento en la temperatura de la fase gaseosa, cerca del fondo del lecho, debido a la reacción exotérmica de reducción de CO la cual causa un agotamiento de las concentraciones de CO y H₂, que son muy abundantes en esta región del dominio computacional. Dicho perfil indica la temperatura de salida del Syngas la cual se da a 576.6 K



Grafica 3.2 Perfil de Temperatura

3.18.3 Perfil de Velocidades.

El siguiente gráfico muestra el cambio de velocidades en la fase gaseosa (Velocidad 1) y en la fase sólida (velocidad 2). En este gráfico se puede observar como la velocidad en la fase gaseosa va incrementándose en el área de la zona de oxidación esto es debido a la combustión de los alquitranes y del char (carbonizado) que se da en las reacciones exotérmicas. La velocidad en la fase gaseosa alcanza un valor de 0.4247 m/s a la salida del reactor, el cual es ligeramente mayor a la velocidad en la fase sólida que alcanza un valor de 0.2945 m/s.

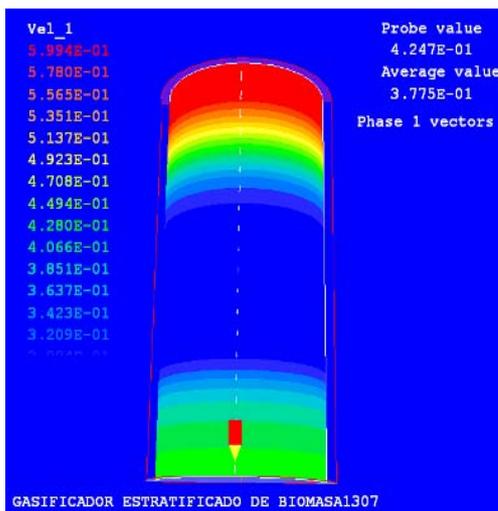


Figura 3.7 Velocidad de la fase gaseosa

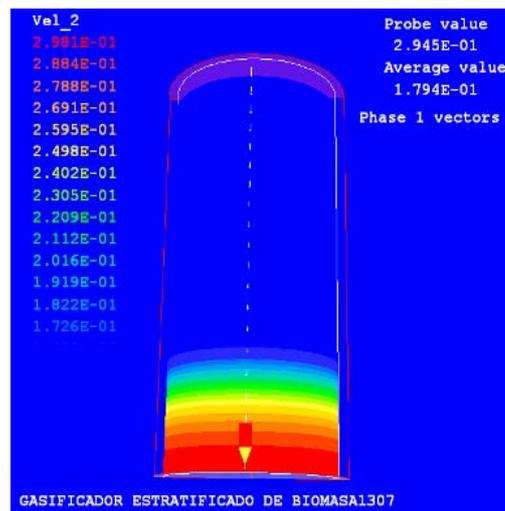
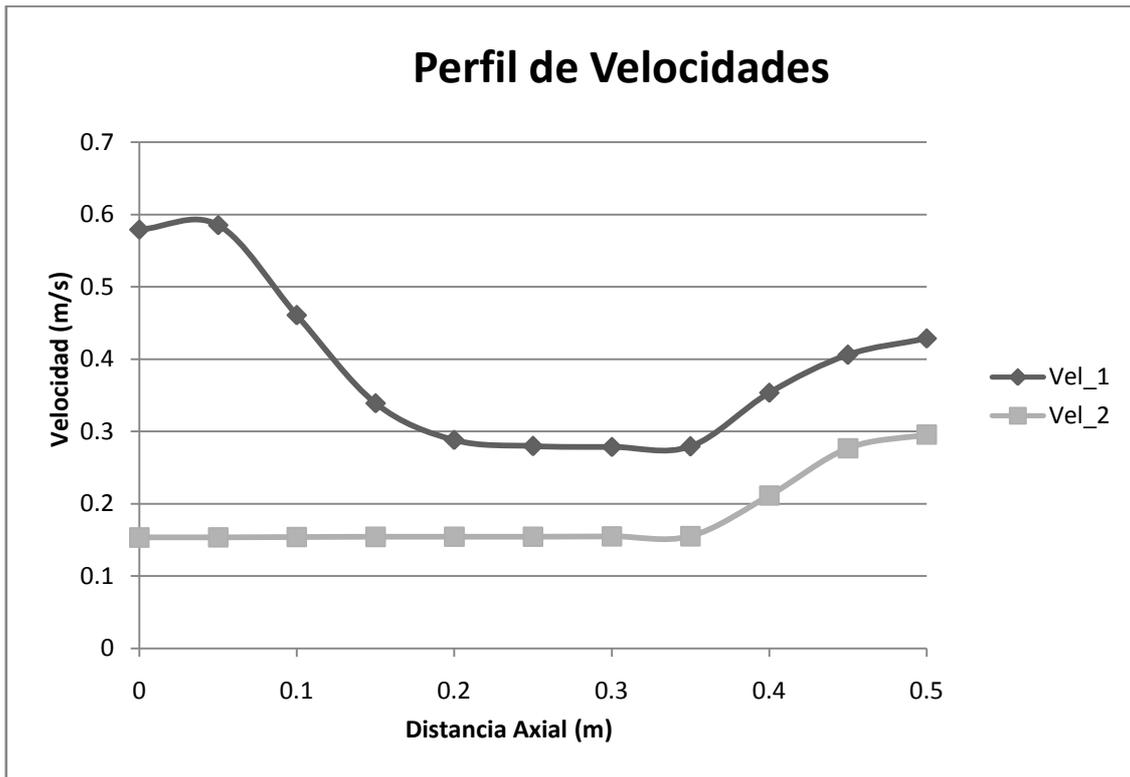


Figura 3.8 Velocidad de la fase sólida



Grafica 3.3 Perfil de Velocidades.

Conclusiones.

- La simulación numérica hecha con CFD PHOENICS 3.5.1 predice satisfactoriamente la composición del syngas, esto en vista de la comparación de este modelo con datos experimentales disponibles en la literatura y con otros modelos matemáticos que presentan diversos autores encontrando mayor similitud con los datos experimentales de [Jayah, 2003; Giltrap et al 2003].
- Se observó que tanto la pirólisis como la combustión de los volátiles se da en la parte superior del gasificador alrededor de 8 a 15 cm donde la mayor parte de del oxígeno es consumido por la reacciones de combustión.
- El perfil velocidades de fase gaseosa (Vel_1) es ligeramente mayor que la velocidad de la fase sólida (Vel_2) debido a las reacciones de combustión del carbonizado, teniendo una diferencia de 0.1289 m/s, lo cual es congruente con datos experimentales que se encuentran en la literatura.
- La temperatura de salida del gasificador es ligeramente baja posiblemente debido a las pérdidas de calor que se da en las paredes de este con el medio ambiente.



- Dentro de las limitaciones del modelo propuesto los datos predichos por este modelo y los datos experimentales disponibles en la literatura es cualitativamente satisfactoria en los puntos de composición del Syngas, perfil de temperaturas y perfil de velocidades.

ANEXO I

Introducción.

Se desarrollo un modelo numérico-experimental “1-D + 2-D”, unidimensional para la fase sólida en coordenadas esféricas y bidimensional para el flujo de la fase gaseosa a través del lecho móvil en coordenadas cilíndricas polares.

Para efectuar la simulación del modelo matemático, se utiliza un código CFD comercial, el PHOENICS 3.5.1, que utiliza el método de volumen finito para resolver las ecuaciones de balance de masa, energía, momentum y los componentes para ambas fases; de energía cinética turbulenta y su disipación para el flujo de la fase gaseosa a través del lecho móvil de biomasa.

PHOENICS 3.5.1 (Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Code Series) CFD proporciona un entorno preciso y amplio para la resolución y simulación de procesos que incluyan el tratamiento de flujos de fluidos, calor o transferencia de masa, reacciones químicas y/o fenómenos de combustión en aplicaciones de ingeniería y para el tratamiento de problemáticas medioambientales. **PHOENICS** es en la actualidad una aplicación líder y consolidada en las diferentes áreas en que se ha puesto en práctica, ya sea en la simulación compleja de fenómenos reales como en investigación básica y en formación de especialistas.



Anexo I

CFD PHOENICS

A.1 ¿Qué es CFD?

La dinámica de fluidos computacional (Computational Fluid Dynamics) o simplemente CFD es utilizado para obtener soluciones numéricas de problemas de flujo de fluidos mediante un equipo de computo. La llegada de las computadoras de alta velocidad y alta capacidad de almacenamiento han permitido que el CFD resuelva muchos problemas de flujo incluso los que sean compresibles o incompresibles, laminares o turbulentos, químicamente reactivos o no reactivos. De los métodos numéricos desarrollados que se ocupan de la ecuaciones que rigen los problemas de flujo de fluidos el método de volumen finito es el más utilizado.

A.1.1 Usos de CFD

- Es usado en el diseño de plantas de energía para alcanzar la máxima eficacia, y reducir las emisiones de contaminantes.
- Es utilizado por ingenieros químicos para maximizar los rendimientos de sus reactores y equipos de procesamiento.
- Los diseñadores de vehículos en tierra, aire y marina lo usan para lograr el máximo rendimiento con el mínimo costo.
- Los analistas de riesgo, y los ingenieros de seguridad lo utilizan para predecir la cantidad de daños a las estructuras.

El código CFD está basado en simulaciones de flujo que permiten:

- A oceanógrafos y meteorólogos a predecir vientos y corrientes de agua; hidrólogos y otros interesados con agua subterránea para pronosticar los efectos de los cambios de la superficie del terreno.
- A ingenieros químicos desarrollar estrategias de recuperación de petróleo, y la puesta en práctica del equipo.

Dentro de pocos años, es de esperar, los cirujanos realizarán operaciones que puedan afectar el flujo de los fluidos en el cuerpo humano (sangre, orina, el aire, el líquido en el cerebro) sólo después de que sus probables efectos han sido predicha por los métodos de CFD.

A.1.2 Predicciones CFD

CFD utiliza una **computadora** para resolver las ecuaciones matemáticas además utiliza la información sobre las circunstancias del problema en cuestión de que se trate.

Sus **componentes** son, por tanto:

- Conocimiento científico expresado matemáticamente.
- El código (es decir, software) que encarna este conocimiento y expresa el problema planteado en términos científicos.



- El equipo de computación que realiza los cálculos dictados por el software,
- El ser humano que inspecciona e interpreta sus resultados.

Actualmente hay diversos software desarrollados para la mecánica de fluidos computacional destacando PHOENICS que en la actualidad es una aplicación líder y consolidada en las diferentes áreas en que se ha puesto en práctica, ya sea en la simulación compleja de fenómenos reales como en investigación básica y en formación de especialistas. Son muchas las empresas que utilizan PHOENICS en busca de una ventaja competitiva en la investigación y desarrollo de los productos y procesos que trabajan con flujo de fluidos y transferencia de calor.

PHOENICS es una aplicación CFD (Computacional Fluid Dynamics) multipropósito pensada para la resolución de problemas complejos en el ámbito de la dinámica de fluidos. PHOENICS proporciona:

- Facilidad de uso: PHOENICS dispone de una interfaz de usuario 3D interactiva para el pre y post procesado de los modelos.
- Alto rendimiento : PHOENICS proporciona un extenso conjunto de aplicaciones que permiten solucionar todo tipo de problemas en ingeniería.
- Amplio conjunto de herramientas de modelado: PHOENICS incluye un gran número de herramientas con las que abordar cualquier problema en modelado, incluyendo reacciones químicas, mallados cartesianos y adaptados al objeto, seguimiento de partículas (particle tracking), flujos multifase, etc.
- Interconexión: Es posible interconectar la aplicación con otros programas por ejemplo, capturar entradas que hayan sido definidas por el usuario.
- Flexibilidad en la adquisición de las licencias: CHAM proporciona una amplia variedad de licencias multiplataforma para la adquisición de PHOENICS, incluyendo licencias perpetuas, de volumen, departamentales y red para empresas y Universidades.
- Ampliación: Facilita la entrada de datos definidos por usuario con funciones como "GROUND" e "IN-FORM"

A.2 Componentes de PHOENICS

PHOENICS realiza tres funciones:

1. **Definición del problema** (pre-procesamiento) en donde el usuario establece la situación que va a ser simulada y las preguntas que espera sean contestadas.
2. **Simulación** (procesamiento de datos), realizado mediante un proceso de computación, en la que las leyes científicas son aplicadas.
3. **Presentación** (post-procesamiento) de los resultados de la computación, mediante desplegados gráficos, tablas numéricas y otros medios.

Para realizar las funciones arriba mencionadas, PHOENICS, como muchos códigos CFD, tiene módulos de programas computacionales distintos o conjuntos de módulos.

Los tres módulos (conjuntos de) de PHOENICS son llamados (Figura A):



- 1.- SATELLITE (incorpora al editor y visor de realidad virtual).
- 2.- EARTH (el módulo resolvidor)
- 3.- PHOTON (incorpora al graficador AUTO PLOT).

El pre-procesador SATELLITE (se activa con el comando runsat)

Prepara los datos de entrada para la simulación y traduce las instrucciones del archivo Q1 a lenguaje entendible por el procesador central EARTH. Es decir, SATELLITE es un intérprete de las instrucciones proporcionadas por el usuario y crea un archivo de datos llamado EARDAT, para problemas de BFC (Body Fitted Coordinates) otro archivo llamado XYZ, ambos archivos contienen instrucciones que EARTH puede entender y obedecer.

SATELLITE puede recibir instrucciones del usuario en varias formas, como:

- Leyendo el archivo de instrucciones Q1, proporcionada por el usuario;
- Cargando un archivo de instrucciones de la Librería de PHOENICS;
- Recibiendo entradas desde el teclado o el ratón durante una sesión interactiva con el usuario.
- Algunas combinaciones de las anteriores.

SATELLITE tiene una subrutina codificada en Fortran llamada SATLIT, en la cual el usuario puede insertar sus propias secuencias codificadas en Fortran (estructurada en 24 grupos similar a Q1) y otra llamada MAIN, que permite el cambio de dimensiones de los arreglos (DIMENSION). Es necesaria la recopilación y la liga para que los cambios sean efectuados.

SATELLITE también proporciona acceso a:

- POLIS (PHOENICS On- Line Information System);
- A la Librería de archivos de entrada;
- A los tutoriales en línea.

Además, SATELLITE contiene a los archivos: SATCON. Que es leído por varios de los módulos ejecutables de PHOENICS para información de la ubicación y naturaleza de los archivos que son accedidos durante una corrida; SATEAR, archivo Fortran COMMON, que contiene variables utilizadas por SATELLITE y EARTH; SATGRD, archivo Fortran COMMON, que contiene variables utilizadas por SATELLITE y GROUND.

A.3 El procesador EARTH (se activa con el comando runear)

EARTH lee el archivo EARDAT proporcionado por SATELLITE y ejecuta las instrucciones correspondientes; genera un archivo de salida llamado RESULT, entendible por el usuario y también, un segundo archivo llamado PHI, que puede ser leído por los módulos de despliegado gráfico PHOTON y AUTO PLOT, por el módulo de manejo de archivos PINTO o por el propio EARTH, cuando inicia una nueva corrida.



Las partes del código fuente del programa central de PHOENICS, EARTH, que son accesibles directamente por el usuario son:

1. MAIN, utilizada para redimensionar parámetros:

El arreglo F (F-array), mediante:
PARAMETER (NFDIM=600000)

El máximo número de variables, que es preestablecido a 50
PARAMETER (NUMPHI=50)

El máximo número de PATCH es
PARAMETER (NPNAM=300)

La dimensión de datos para arreglos en GROUND
PARAMETER (NLG=50, NIG=50, NRG=100, NCG=10)

La dimensión de datos para arreglos en GREX
PARAMETER (NLSG=50, NISG=50, NRSNG=100, NCSG=10)

Los arreglos correspondientes en el archivo MAIN de GROUND y El archivo MAIN de SATELLITE, deben tener las mismas dimensiones.

Se tiene que recompilar el archivo GROUND.FTN y religar EARTH, para crear un nuevo módulo y los cambios se guarden.

2. GROUND, puede ser utilizada para establecimiento de códigos proporcionados por el usuario, para aplicaciones específicas del problema que se simula.
3. La subrutina GREX, que contiene la codificación básica para la simulación de problemas de flujo de fluidos.
4. Las subrutinas GX asociadas para calcular propiedades de los fluidos, de turbulencia, fricción, transferencia de calor, velocidades, entalpías, número de Prandtl, número de Reynolds, etc.

Post-procesador PHOTON (**PHOENICS Ou Tputo pti ON**)

Es un programa gráfico interactivo, escrito en Fortran, que puede ser usado para desplegar los resultados de la simulación de flujo de fluidos generados por PHOENICS o por otro código que produzca archivos en formato de PHOENICS, para mallas en coordenadas cartesianas, polares o BFC.

PHOTON lee los archivos PHI (o PHIDA) escritos por EARTH y, en respuesta a instrucciones desde el teclado, movimiento del ratón o del ambiente PHOTON, representa la malla y las trayectorias del flujo y a color en la pantalla.

PHOTON puede dibujar:



- Mallas o contornos de mallas, sobre el dominio computacional completo.
- Los campos vectoriales de las velocidades, fluxes de calor u otra cantidad.
- Gráficas de contornos para variables escalares, como temperatura, presión, concentraciones o energía cinética turbulenta y su disipación, etc.
- Líneas de flujo y trayectorias de partícula.

AUTOPLOT programa de computadora interactivo para generar gráficas de datos numéricos, mostrando la variación de una o más variables contra otra variable independiente. Permite ajustes de escalas, posiciones y anotaciones en las gráficas, para mayor claridad e impacto.

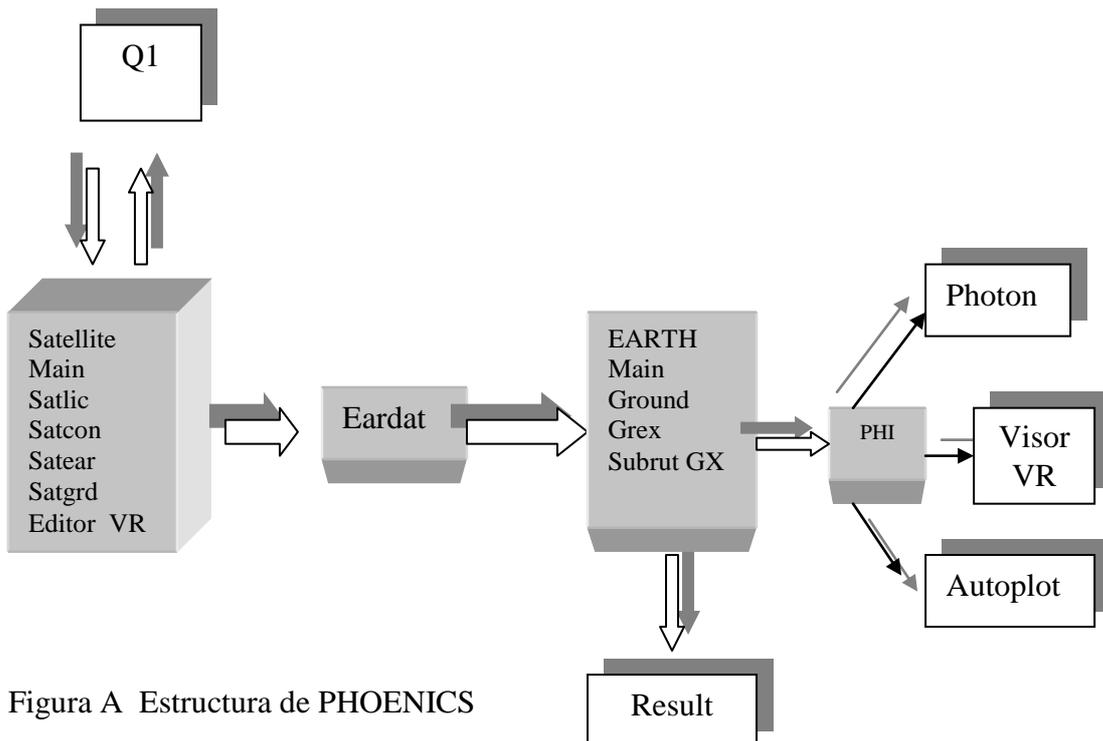


Figura A Estructura de PHOENICS

Otros módulos

Hay otros módulos que es apropiado mencionar:

1. Shape Maker. Es un programa ejecutable que puede ser usado para la creación de archivos correspondientes a una gran variedad de formas definidas matemáticamente. Estos archivos tienen un formato que es aceptado por el editor y el visor de Realidad Virtual. Es decir, facilita la creación de objetos, alrededor de los cuales se puede computar el flujo y que pueden desplegarse en la interface de realidad virtual. Los parámetros de las formas pueden ser longitud, radio de curvatura, número de caras, etc., que pueden establecerse en forma interactiva y guardada con la extensión .geo y el cuerpo resultante puede ser importado como un objeto.
2. AC3D. Es un programa para modelado en tres dimensiones, que produce archivos (con extensión .dat) compatibles con la Realidad Virtual de



PHOENICS; también, puede crear objetos, a partir de formas básicas (esferas cilindros, polígonos) o pueden ser importados de una gran variedad de formatos (incluyendo a Shapemaker, 3D Studio, DXF, LightWave, etc.).

3. Facet-Fixer, una utilidad que crea archivos con extensión .dat, utilizables en la interface de realidad virtual del usuario y posiblemente con archivos STL producidos por CAD y paquetes arquitectónicos.
4. El menú PLANT, que facilita la selección y creación de fórmulas que son traducidas a Fortran por la utilidad PLANT de SATELLITE.

Aún cuando hay varios paquetes comerciales que realizan muchas de las funciones de PHOENICS, este último tiene varios paquetes auxiliares para tópicos como

1. Espacio multicompartido (MUSES), que permite a varios fluidos fluir dentro del mismo espacio (SAFIR).
2. El traductor automático de Fortran (PLANT), que traduce, recompila y liga creando el nuevo ejecutable, a partir de datos introducidos en Q1, para diferentes opciones.
3. **Introducción de datos mediante Fórmulas (In-Form)**, que permite la comunicación entre Q1 y EARTH, sin códigos especiales (GROUND).
4. **Introducción de datos mediante el Editor de Realidad Virtual (VRE)**, que permite la introducción de datos de manera interactiva y en forma muy sencilla.
5. PARSOL, permite el uso de superficies curvas en coordenadas cartesianas o polares cilíndricas.
6. MOFOR, permite el manejo de objetos en movimiento a través de la malla cartesiana.
7. La opción parabólica.
8. Análisis simultáneo de fluido, calor y esfuerzos.
9. Refinamiento de la malla.
10. Transferencia de calor radiactivo.
11. Modelos de turbulencia LVEL y MFM.
12. Reacciones químicas.

COSP, el resolovedor inverso de problemas

A.4 Archivos de intercomunicación

Los cuatro archivos dentro de los cuadros sombreados de la Figura A son usados para la comunicación entre módulos, de la manera siguiente:

Q1, el archivo de datos de entrada accesible al usuario, que está escrito en PIL (PHOENICS Input Lenguaje), y es la expresión principal de lo que el usuario desea simular.

1.4.1 Estructura del archivo Q1

Es en el archivo Q1 donde el usuario establece las condiciones en que se realizará la simulación de su problema. Está estructurado en 24 grupos, en cada uno de estos grupos se establecen comandos y datos que son requeridos para la resolución numérica de las distintas variables del problema de la siguiente manera:



Grupo 1. Se establece el nombre de la corrida, con un máximo de 40 caracteres alfanuméricos.

Grupo 2. Si el régimen es transiente aquí se establece el periodo temporal y el tamaño de paso de tiempo. Si el régimen es estable el valor preestablecido es STEADY=T.

Grupo 3. Para establecer el tamaño del dominio computacional en dirección X (en metros para sistema cartesiano y en radianes para coordenadas cilíndricas polares) así como el número de regiones y celdas en esta dimensión.

Grupo 4. Aquí se establece el tamaño del dominio computacional en dirección Y (en metros para coordenadas cartesianas y la dimensión radial en metros para sistemas cilíndricos polares) así como el número de regiones y celdas en cada región en esta dirección.

Grupo 5. Se establece el tamaño del dominio computacional en dirección Z (en metros para sistemas cartesianos y en metros para coordenadas cilíndricas polares) así como el número de regiones y celdas en esta dirección. Ejemplo (ver anexo).

Grupo 6. Para establecimientos cuando se usan, sistema de coordenadas curvas “body fitted coordinates”.

Grupo 7. Aquí se definen los nombres de las variables, las variables almacenadas y las variables a resolver.

Grupo 8. Aquí se establecen los términos de la ecuación gobernante que se consideran en la resolución y las fuentes. 1) si la fuente es generada internamente por PHOENICS (Y) o es proporcionada por el usuario a través de “ground” (N), 2) si se considera el término convectivo en la ecuación de la variable a resolver (Y), 3) si se considera el término difusivo de la ecuación gobernante de la variable a resolver (Y), 4) si el régimen es transiente (Y), 5) si la variable pertenece a la fase gaseosa (Y), si existe transferencia en la interface de la variable (Y).

Grupo 9. Para establecer las propiedades de los fluidos como densidad, viscosidad laminar y turbulenta, temperaturas, temperatura de referencia (TEMP0), presión de referencia (PRESS0), número de Prandtl, cantidades auxiliares para el cálculo de calores específicos, etc.

Grupo 10. Para cantidades para transferencia entre las fases: factores de fricción (CFIP), coeficientes de transferencia de calor (QDOT), coeficientes de transferencia de masa (CMDOT) y cantidades relacionadas con estos coeficientes. Ejemplo (ver anexo)

Grupo 11. Para establecer los valores iniciales de cada variable almacenada o resuelta por PHOENICS.

Grupo 12. Patchwise ajusta los términos Parches para este grupo con los que se imprimen Patchwise.



Grupo 13. Aquí se establecen las condiciones de frontera. Flujos de las fases presentes, fracciones volumétricas, valores de entrada de cada variable a resolver, regiones de aplicación de estas condiciones mediante comandos PATCH y COVAL, fuentes para cada variable (PHI).

Grupo 14. Aquí se establece si el flujo es parabólico.

Grupo 15. Aquí se establece el número total de ciclos externos que barren el dominio computacional total (LSWEEP), el número de iteraciones hidrodinámicas (LITHYD), el valor de referencia para variación del valor de las variables de iteración a iteración (SELREF), el valor residual de referencia (RESFAC).

Grupo 16. Número de iteraciones para cada variable resuelta (LITER) y el valor para terminación de iteración (ENDIT). Ejemplo (ver anexo).

Grupo 17. Para establecer el tipo de relajación aplicada a la resolución: lineal LINRLX) o de falso paso de tiempo (FALSDT). Ejemplo (ver anexo).

Grupo 18. Aquí se establecen los límites de las variables. Ejemplo (ver anexo)

Grupo 19. Datos transmitidos a GROUND

Grupo 20. Para impresión preliminar

Grupo 21. Para impresión de variables

Grupo 22. Para establecer celda de Monitor y forma de presentación de datos, tamaño de gráfica.

Grupo 23. Field Print-Out & Plot Control

Grupo 24. Dumps For Restarts

A.5 Construcción del archivo Q1

Por lo expuesto en los 24 grupos anteriores, la construcción del archivo Q1, es la tarea principal y determinante, para el usuario de PHOENICS, de los resultados de la simulación, ya que si las condiciones de frontera no son las adecuadas, los resultados de la simulación pueden estar muy lejanos de la situación real que se quiso representar (la otra parte esencial es el archivo GROUND, sección). El archivo Q1 puede construirse:

a.- Tomándolo de la extensa librería de archivos de entrada (Input File Library), parte de la instalación de PHOENICS.

b.- Crearlo mediante un editor de texto, quizás modificando algún Q1 de la librería.

c.- Construido como parte de una sesión interactiva en SATELLITE, introduciendo comandos PIL a través del teclado.



d.- Generado, sin el uso de PIL, mediante el Editor VR, con su sistema asociado de menú.

EARDAT, un archivo ASCII, que expresa en forma entendible para EARTH lo que el usuario ha establecido mediante Q1.

PHI, archivo escrito por EARTH, en un formato que permite a PHOTON, AUTO PLOT y el visor VR, desplegar gráficamente los resultados de la simulación.

RESULT, que es un archivo ASCII que expresa los resultados en forma tabular y una gráfica de las variables simuladas.

Otros archivos de importancia, en orden alfabético son:

1.- CHAM:INI, en donde los usuarios pueden insertar decisiones acerca del modo de operación como tamaño de hoja, fuente, separación entre líneas, color de fondo de pantalla, inicio de ciclo externo (sweep), pausa, figuras, etc., que desean modificar muy raras veces.

2.- Los archivos CONFIGURATION son leídos por los distintos módulos ejecutables de PHOENICS para información de la ubicación y naturaleza de los archivos que deben ser accedidos durante la ejecución del programa. Hay un archivo CONFIGURATION para cada programa de PHOENICS. Se advierte a los usuarios que no hagan ninguna modificación en estos archivos.

3.-FACETDAT, que es creado por SATELLITE y contiene la información de la geometría de los objetos que son descritos mediante facetas.

4.- GROUND.HTM, un archivo Fortran que es accesible a los usuarios, y contiene espacios para la inserción de secuencias codificadas propias del usuario.

5.- PHOLOG.Guarda las secuencias durante una sesión de PHOTON, en caso de ser repetidas.

6.- PBCL.DAT.Es creado por EARTH y se usa para guardar información, útil para resultados gráficos, acerca de celdas parcialmente bloqueadas.

7.- Q1EAR.Es creado al final de una corrida de SATELLITE y guarda, en formato estandarizado, todos los datos del archivo Q1, para una corrida particular.

9.- XYZ, que contiene las coordenadas de todas las esquinas de las celdas de una malla de “body fitted coordinate”.

A.6 Modos de Operación

Los módulos de PHOENICS pueden ser operados de varias maneras, la elección depende de la preferencia del usuario, su experiencia, sus necesidades y circunstancias. Se puede operar con:

1. Comandos,
2. con Q1,
3. texto interactivo,



4. menú interactivo,
5. usando PLANT,
6. con codificación propia,
7. con entradas de CAD,
8. entradas con paquetes generadores de malla,
9. mezclados.

1.- El modo de comandos, se refiere a la introducción de comandos en el teclado de DOS o UNIX y solo se espera la ejecución del programa.

2.- El modo Q1 es rápido, certero, libre y permite explotar los diferentes comandos para ciclos, bloques “if-then-else”, PHOTON use ENDUSE, GO TO ...LABEL, READVU, MESH(), etc. La desventaja es que es necesario conocer el PIL (PHOENICS Input LANGUAGE) para alimentar las instrucciones para propiedades físicas, coeficientes de interface, condiciones de frontera, fuentes, formatos de salida e impresión, etc.

3.- El modo de texto interactivo, para correr en modo tal que una vez que el Q1 existente ha sido interpretado, el programa espera la entrada de más establecimientos PIL, mediante el teclado. Los nuevos establecimientos, si no contienen errores, son aceptados y añadidos o reemplazan a los existentes y son añadidos al final del archivo Q1. Este modo también permite la introducción, modificación o eliminación de líneas que no son inmediatamente interpretadas, para lo cual tiene un editor interno de Q1.

4.- El modo de Menú Interactivo, el segundo modo de especificación del problema en forma interactiva es vía el menú SATELLITE, que está asociada, algunas veces, con el Editor VR, que representa visualmente los datos que han sido aceptados. Este modo puede operarse: desde los comandos DOS o UNIX, desde el modo de texto interactivo mediante los comandos PIL apropiados, desde el Ambiente, haciendo “click” en el botón apropiado.

5.- El modo usando PLANT, para aquellos usuarios cuyas necesidades rebasan las utilidades proporcionadas por PHOENICS, el siguiente recurso es introducir fórmulas PLANT en el archivo Q1 y, así, permitir a SATELLITE: Interpretarlas, convertirlas en la secuencia Fortran equivalente y escribir el archivo GROUND correspondiente. Después de que el archivo GROUND es compilado, construido el nuevo EARTX.EXE, y la corrida ejecutada sin intervención posterior del usuario. Las Líneas PLANT pueden ser introducidas en el archivo Q1 en dos formas: editando directamente, lo que requiere conocimientos de la terminología y sintaxis de la formulación PLANT; mediante la interacción menú PLANT no disponible.

6.- El modo de codificación propia del usuario en Fortran. El usuario necesita aprender como los códigos GROUND interactúan con EARTH, apoyándose en los componentes abierto de PHOENICS que proporcionan muchos ejemplos que el usuario puede seguir (ejemplo GREX3, subrutinas GX...). Además PHOENICS está equipado con numerosas subrutinas de “servicio”, las cuales pueden ser llamadas dentro de la codificación del usuario.

A.7 Versiones de PHOENICS para Propósitos Especiales

La lista de programas para propósitos específicos es la siguiente:



ESTER. (Electrolytic SmelTER), permite simular los fenómenos que ocurren en los Fundidores electrolíticos de aluminio del tipo “Hall-cell”; involucran interacciones complejas de: una capa de burbujas de oxígeno en la vecindad del ánodo, una capa fluida superior de electrolito fundido, una capa fluida inferior de aluminio líquido, un contenedor tipo tina hecho de carbón, corrientes eléctricas y campos magnéticos y la fuerza gravitacional que asegura, usualmente, que el metal líquido no toque el ánodo.

FLAIR. Diseñado para proporcionar un ambiente integral de realidad virtual para el análisis, mediante CFD, del flujo de aire, transferencia de calor y la distribución de la contaminación (humo) dentro de los edificios y otros espacios cerrados. Este programa es ampliamente utilizado por ingenieros HVAC (calor, ventilación y aire acondicionado).

HOTBOX. Proporciona un ambiente integral de realidad virtual para el análisis del funcionamiento correcto del equipo electrónico, que debe mantenerse frío. Por lo tanto la predicción de temperaturas (especialmente temperaturas pico) es de gran importancia para los diseñadores.

ROSA. Los derrame de aceites en ríos y otras aguas naturales ocurre muy frecuentemente, causando daños severos al medio ambiente. ROSA es el programa especial de PHOENICS que simula el desarrollo y movimiento del derrame de aceite, ha sido validado en la ex Unión Soviética.

SAFIR. Los hornos de sople de oxígeno para fundición de mineral férrico y otros hornos de tiro de la industria siderúrgica involucran el flujo e interacción de (al menos) cuatro fases: El gas que se mueve hacia arriba (efluente), partículas de carbón o gotas de aceite arrastradas por el gas, partículas de coque y mineral férrico moviéndose hacia abajo y arrabio líquido y escorias moviéndose hacia abajo rápidamente. Este proceso es simulado por el programa SAFIR dentro del programa EC llamado OSIRIS.

TACT. Las torres de enfriamiento de tiro natural son componentes importantes de las estaciones de poder de carbón y combustóleo, donde un grado de diferencia en la temperatura del agua de enfriamiento, que las torres proporcionan, puede significar diferencias significativas en la eficiencia térmica de la estación. El programa de propósito especial TACT permite la predicción en torres de enfriamiento de tiro natural y tiro forzado de: temperatura del aire, humedad del aire, velocidad del viento y su dirección, dimensiones de la torre, altura, espesor y configuración del empaque y la distribución de la velocidad de flujo del agua.

A.8 Plataformas

- PHOENICS, Puede ser proporcionado para computadoras personales que tengan sistema operativo Windows/98/2000/NT o XP. Para estos sistemas PHOENICS emplea el compilador Fortran Digital/Compaq.
- Estaciones de trabajo UNIX y Plataformas Paralelas.



1.9 La Estructura de GROUND

PHOENICS tiene dos módulos Fortran accesibles para el usuario en programa MAIN de EARTH y la subrutina Ground-Station, cuyas funciones son: modificación de las dimensiones de los arreglos (MAIN) y la introducción, en Fortran de secuencias de codificación adicionales a las existentes en GREX o modificaciones de las mismas, para cálculos de variables de propiedades, fuentes, condiciones de frontera, velocidades de reacción cinéticas, de transporte, etc., que EARTH llama con localización apropiada, durante el proceso de resolución de las ecuaciones gobernantes para cada variable. Solo hay un programa MAIN en EARTH, sin embargo, puede haber tantas subrutinas GROUND como sean necesarias. Dos de estas subrutinas son GREX (Ground Examples), que es una Ground-Station ejemplo, proporcionada por PHOENICS, que contiene la codificación necesaria para realizar corridas de simulación de flujo de fluidos y GROUND, un módulo limpio en el que el usuario puede insertar su propia secuencia de codificación (Figura B).

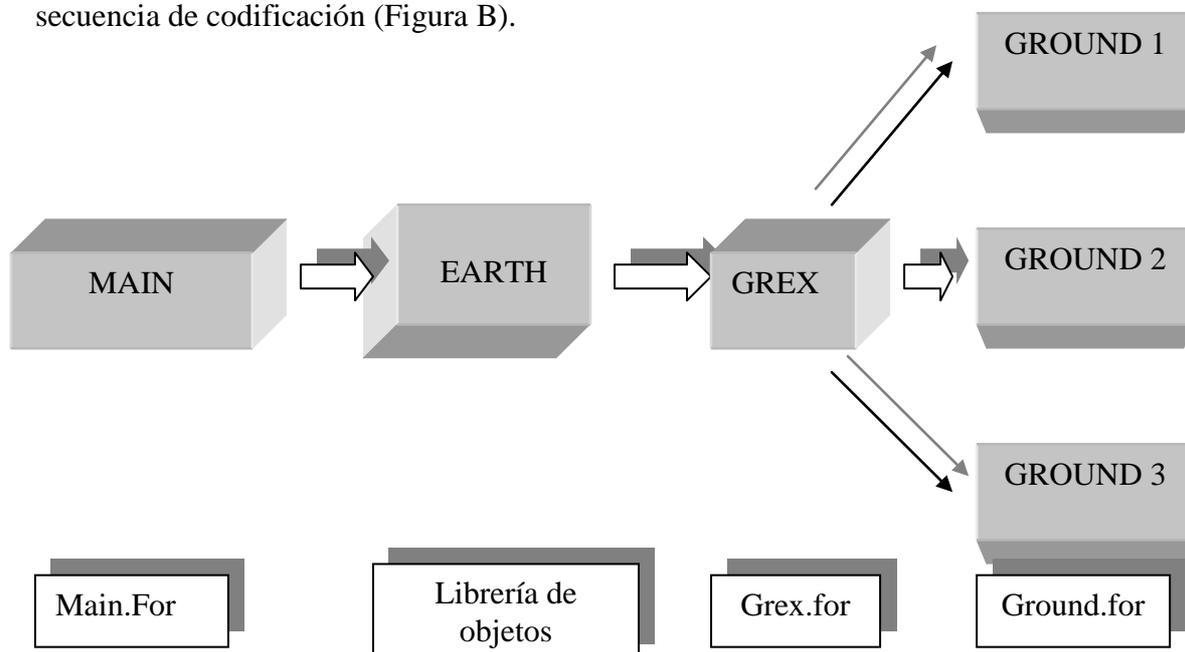


Figura B. Earth se encarga de llamar Grex y Grex llama a ground

Controlando a Ground Station.

GREX es llamado desde EARTH en etapas muy bien definidas durante el proceso de computo. Entonces, GREX actúa como una caja de unión, que determina que “ground stations” están activos y las llama. Pueden utilizarse tres variables PIL en el archivo Q1, para activar (desactivar) las “ground-stations”: La variable lógica USEGREX activa, cuando es verdadero (T), el uso de GREX. La variable lógica USEGRD activa, cuando es verdadera (T), el uso de GROUND. La forma limpia donde el usuario puede insertar sus secuencias de codificación. La variable de carácter NAMGRD, que permite la activación de otras “ground-station” diferentes a GREX o GROUND.

El Arreglo por grupos y Control de Flujo.

La subrutina “Ground-Station” está arreglada en grupos, con la misma estructura del archivo de entrada Q1 (ver Anexo). Estos grupos son visitados en tiempos específicos



durante el proceso computacional. Algunos de ellos son visitados siempre, otros, solamente cuando el usuario instruye a PHOENICS para que lo haga, mediante establecimientos en el archivo Q1. El grupo y la sección que debe ser visitada (o), es controlado en “ground” vía número de grupo (IGR) y el número de sección (ISC).

Los grupos y sus Funciones

Grupo 1 de GROUND es visitado siempre, al inicio de cada corrida. La sección 1 es utilizada para la inicialización de las variables locales y en general, para cualquier operación que deba ser ejecutada solamente al principio del proceso de cómputo.

Grupo 2 es visitado cuando el régimen es transiente (introduciendo valores para TLAST, intervalo de tiempo; DT, tamaño de paso de tiempo).

El grupo3, para establecer número de celdas y dimensiones del dominio en dirección X (angular para Coordenadas cilíndricas polares, radianes).

El grupo 4, para establecer número de celdas y dimensiones en dirección Y (radial para coordenadas cilíndricas polares, m).

El grupo 5, para establecer número de celdas i dimensiones en la dirección Z, m.
El grupo 6, para coordenadas curvilíneas.

El Grupo 7, Para definir variables almacenadas, resueltas y sus nombres.

El Grupo 8, para establecer términos a resolver en la ecuación gobernante y cambio de variables entre las fases.

El Grupo 9, para establecer códigos para el cálculo de propiedades de las fases como densidad, temperatura, capacidad calorífica. Como hay un gran número de propiedades este grupo es subdividido en varias secciones, una para cada propiedad. Cada sección es visitada, UNICAMENTE, instruyendo a PHOENICS para ello, normalmente mediante instrucciones en Q1 del tipo: Propiedad=GRNDn. Este grupo está dentro del “loop IZ” de EARTH, lo que significa que PHOENICS espera que los valores para toda la rebanada estén determinados aquí.

El Grupo 10, dedicado a los procesos de transferencia en la interface, la fricción interface, los coeficientes de transferencia de calor, la velocidad de transferencia de masa, se calculan aquí, en una sección separada y si la variable fue enviada a GRNDn en Q1.

El grupo 11, para establecer valores iniciales de las variables a resolver y almacenadas y porosidad del dominio computacional.

El grupo 13 para establecer condiciones de frontera, mediante los comandos PIL PATCH/COVAL.

Grupos 14, 15, 16, 17 y 18 similar a archivo Q1.



El grupo 19, es siempre visitado, puesto que varias llamadas especiales desde el interior de EARTH, que tienen lugar en etapas bien definidas durante el proceso computacional. Un uso común del grupo 19 es para calcular parámetros y velocidades de reacción, valores por diferencia, etc. El orden de llamado es el siguiente:

```
DO ISTEP=1, LSTEP  ciclo transiente
;  Visita Sec. 1: inicio de paso de tiempo
;  DO ISWEEP=1, LSWEEP  ciclo externo de iteración
;  ;  Visita Sec. 2: inicio de sweep
;  ;  DO IZ=1, NZ  ciclo de rebanada
;  ;  ;  Visita Sec. 3: inicio de rebanada IZ
;  ;  ;  DO ITHYD=1, LITHYD  ciclo hidrodinámico
;  !  ;  Visita Sec 4: inicio de iteración
;  ;  ;  ;  .....
;  ;  ;  ;  Visita Sec. 5 : fin de la iteración
;  ;  ;  END DO
;  ;  visita Sec. 6: fin de rebanada IZ
;  ;  END DO
;  ;  Visita Sec 7: fin de sweep
;  Visita Sec. 6: fin de paso de tiempo
END DO
```

El Grupo 20 (impresión de salida preliminar es visitado al principio de la corrida, después de visitar al Grupo 1, Sección 1. Los Grupos 23 y 24 son visitados al final de la corrida.

Grupos 21, 22, 23, y 24 similar a archivo Q1

A.10 Opciones de Comunicación entre Q1 y EARTH.

a) Codificación Propia del Usuario

La primera y más antigua, aunque muy aplicable actualmente es mediante la construcción, utilizando el “Ground” limpio, de secuencias de codificación, utilizando PIL, para cada propiedad, condición de frontera y otros parámetros necesarios en la simulación. Este es un procedimiento para expertos programadores de PHOENICS. El “ground” nuevo se tiene que compilar y ligar para crear el nuevo ejecutable. No olvidar que siempre se utilizará la subrutina GREX, la cual llamará a otras subrutinas “ground” activas.

b) La Utilidad PLANT

Una segunda opción para insertar codificación en el “GROUND” limpio, es mediante PLANT. Esta utilidad permite introducir fórmulas, siguiendo las reglas de Fortran, en el archivo Q1, para diversas propiedades, condiciones de frontera, parámetros cinéticos y de transporte, coeficientes de transferencia en la interface, etc.

PLANT extiende la capacidad de PHOENICS, proporcionando un lenguaje para el establecimiento de datos que definen a un problema, que requieren una codificación en Fortran para ser añadidos al GROUND.



El usuario inserta dentro del archivo Q1 unas pocas líneas, escritas en lenguaje con sintaxis de Fortran, que al ser interpretado por SATELLITE es suficiente para crear las mucho más largas secuencias de líneas Fortran, que la subrutina GROUND necesita, para expresar los establecimientos de datos que el usuario requiere. Después, PLANT compila automáticamente esta subrutina y liga a su archivo objeto con el ejecutable del revolvedor PHOENICS-EARTH. PLANT crea el código automáticamente, tan pronto como se completa la corrida de SATELLITE, requiriendo solamente que el archivo Q1 contenga la línea MOSG=T, donde la variable PIL MOSG es el acrónimo de (maker of special ground). La compilación (compile) necesaria de la subrutina GROUND, con su código Fortran implantado, la subsecuente liga (bldear) y la activación del módulo revolvedor, suceden automáticamente.

Usualmente, las relaciones no lineales son proporcionadas por PLANT, porque las relaciones lineales pueden ser introducidas usando PIL. Las relaciones codificadas son usadas normalmente en todo el dominio computacional. Aunque pueden estar restringidas a un subdominio específico y/o controladas por condiciones lógicas o relacionales, por los comandos REGION o PLACE o IF.

Sintaxis de los Establecimientos PLANT

El suscrito “labs”>PLANT lee las líneas de establecimientos en el archivo Q1 que empiezan con las etiquetas:

- {SCTS??} que significa paso de tiempo
- {SCXS??} que significa paso en dirección X
- {SCYS??} que significa paso en dirección Y
- {SCZS??} que significa paso en dirección Z
- {MXYZ??} que significa Hacer XYZ
- {SCUF??} que significa velocidad U1
- {SCUS??} que significa velocidad U2
- {SCVF??} que significa velocidad V1
- {SCVS??} que significa velocidad V2
- {SCWF??} que significa velocidad W1
- {SCWS??} que significa velocidad W2
- {PRPT??} que significa Propiedad
- {INIT??} que significa campos iniciales
- {SORC??} que significa fuente
- {SCnn??} que significa Grupo 19 sección nn.

Los signos de interrogación representan una secuencia de números (sección consecutiva) y van de 1 hasta 99, nn es el número de la sección del grupo 19 de “GROUND” hacia donde se envía el establecimiento (de 01 hasta 10, ver grupo 19).

Las líneas deben comenzar en la Columna 3 o subsecuentes, de modo que SATELLITE las tome como comentarios. El signo de dólar (\$) como carácter último en una línea, es interpretado como símbolo de continuación de la línea.



PLANT, también lee las líneas que contienen PATCH, COVAL, REGION, PLACE e IF.

PLANT continúa la lectura de las líneas entre PLANTGEGIN..... PLANTEND hasta el final del archivo Q1. Después, PLANT edita el archivo GROUD.FOR para incluir la codificación Fortran generada automáticamente y sin errores, requeridas para las expresiones y condiciones especificadas. Esta operación la ejecuta de acuerdo con las reglas de interacción de GROUND-EARTH. Posteriormente, el nuevo GROUND es compilado, un nuevo ejecutable debe ser creado, el nuevo EARTH debe correrse para efectuar los cálculos de la simulación del flujo, estas tres operaciones son ejecutadas automáticamente. Cualquier GROUND.FOR existente es copiado a GROUND.SAV y un nuevo GROUND.FOR limpio es utilizado como punto de partida de la edición. Una copia del código insertado está disponible en el archivo PLTEMP.

PLANT permite la especificación de expresiones en el archivo Q1 para:

- Temperaturas de las fases,
- escalas de longitud,
- calores específicos,
- densidades,
- compresibilidades,
- viscosidades cinemáticas laminares y turbulentas,
- número de Prandtl y/o difusividades,
- coeficientes de interface.

Estas cantidades pueden ser establecidas para todo el dominio computacional o para regiones espaciales y temporales especificadas por el usuario mediante los comandos REGION o PLACE. La condición lógica puede ser introducida por medio el comando IF.

Para introducir relaciones especiales de propiedades de los fluidos, el usuario debe proporcionar, en el Grupo 9 del archivo Q1, líneas que empiecen con la etiqueta: {PRPT

También, existen ejemplos de expresiones para el transporte en la interface, mediante {PRPT??}.

Las variables de inicio y porosidades, se establecen en la siguiente forma:

```
PATCH(INIT, INIVAL,1, NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
{INIT01> VAL=XG2D+YG2d
INIT ( INIT,C1,0.0,GRND)
```

Condiciones de Frontera y Fuentes no Lineales

PLANT facilita la construcción de Fuentes no lineales y condiciones de frontera, mediante fórmulas para computar el coeficiente (CO) y el Valor (VAL), celda por celda y barrido por barrido, durante el proceso de simulación. Se establecen en el archivo Q1 con líneas que empiezan con la etiqueta {SORC??>, Como los siguientes ejemplos:



Carbon-Char H₂O gasification

Reaction: $C(s) + H_2O \rightarrow CO + H_2$

* Sink of char, C (s), in a 2nd phase

PATCH(PLSR13,CELL,1,NX,1,NY,1,17,1,LSTEP)

{SORC53> VAL=-HIDT

COVAL(PLSR13,CHA2,FIXFLU,GRND)

* Sink/sources of 1st phase components

PATCH(PLSR14,CELL,1,NX,1,NY,1,17,1,LSTEP)

{SORC54> VAL=28./12.*HIDT

COVAL(PLSR14,YCO,FIXFLU,GRND)

{SORC55> VAL=2./12.*HIDT

COVAL(PLSR14,YH2,FIXFLU,GRND)

{SORC56> VAL=-18./12.*HIDT

COVAL(PLSR14,YH2O,FIXFLU,GRND)

PLANT, también permite la introducción de códigos dentro de las secciones del Grupo 19 de GROUND, permitiendo la re-cálculo de variables selectas y preparación de salidas especiales. Estas pueden aplicarse para todo el dominio o una región específica, utilizando REGION o PLACE. o pueden ser controladas condicionalmente, por medio del comando IF. Para introducir cálculos especiales, el usuario debe proporcionar, en cualquier lugar del archivo Q1, líneas de establecimiento que empiecen con:

- {SC01??} que significa Grupo 19, Sección 1 (inicio de paso de tiempo)
- {SC02??} que significa Grupo 19, Sección 2 (Inicio de ciclo exterior o sweep)
- {SC03??} que significa Grupo 19, Sección 3 (Inicio de rebanada IZ)
- {SC04??} que significa Grupo 19, sección 4 (Inicio de iteración)
- {SC05??} que significa Grupo 19, sección 5 (Fin de iteración)
- {SC06??} que significa Grupo 19, sección 6 (fin de rebanada IZ)
- {SC07??} que significa Grupo 19, Sección 7 (fin de ciclo exterior)
- {SC08??} que significa Grupo 19, Sección 8 (fin de paso de tiempo)
- {SC09??} que significa Grupo 19, sección 9 (Inicio de la solución)
- {SC10??} que significa Grupo 19, Sección 10 (Fin de la solución)

Cuando el código resultante es plantado en la sección 6, por ejemplo, corresponde al final de todas las operaciones sobre la rebanada IZ, esto permite al usuario la construcción de arreglos propios e imprimirlos gráficamente o revisarlos en la pantalla. Ejemplos extraídos del anexo

1) ** Diffusion H₂O --> C

<SC0308> HIKD=2.0*NUSS*2.208e-5*12./8314./AMAX1(300.,TMP2)/SIZE

** Kinetic

<SC0309> HIKC=9.35E+04/EXP(13832./AMAX1(300.,TMP2))

** Harmonic blending

<SC0310> HIKT=1./(1./HIKD+1./HIKC)

2) # Steam reforming reaction

<SC0905> SRRE=4.*DEN1*EP/KE*AMIN1(YCH4,16./18.*YH2O)

<SC0951> SRRK=3.21E2*DEN1/EXP(468/TMP1)*YH2O**1.3*YCH4



<SC0952> $SRRT=0.5/(1./SRRE+1./SRRK)*VOL*DEN1$

3) # Ash contents of 2nd phase

<SC0605> $ASH2=1.-CHA2-COL2$

4) # Nitrogen contents of 1st phase

<SC0606> $YN2=1.-YCH4-YO2-YCO-YCO2-YH2O-YH2$

También pueden establecerse mediante PLANT líneas para residuos referenciales, valores de relajación, límites de variables, sumas globales y de salida.

c) IN-FORM (Introduction of FOR Mulae)

La tercera y más reciente opción para la introducción de datos en PHOENICS es IN-FORM (INtroduction of FORMulae), que no requiere de una codificación Fortran para comunicarse desde el archivo Q1 con EARTH. Mediante datos especiales (SPEDAT) se establecen en el archivo Q1 los requerimientos de la simulación y SATELLITE, mediante el archivo EARDAT, los hace interpretables para EARTH.

ANEXO II



Anexo II

Q1

```
TALK=T;RUN( 1, 1)
```

```
*****
```

```
Q1 created by VDI menu, Version 3.5, Date 05/06/03
```

```
CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core
```

```
*****
```

```
Echo DISPLAY / USE settings
```

```
PHOTON USE
```

```
p
```

```
2 2 0.9
```

```
up z
```

```
use patgeo
```

```
vec x 3 sh
```

```
pause;cl
```

```
use patgeo
```

```
con tmp1 z 1 fil;.001
```

```
con tmp1 x 2 fil;.001
```

```
con tmp1 x 4 fil;.001
```

```
con tmp1 z m fil;.001
```

```
con tmp1 z 10 fil;.001
```

```
vec x 3
```

```
msg(Contornos de la temperatura del gas
```

```
pause;cl
```

```
use patgeo
```

```
con yhcn z 1 fil;.001
```

```
con yhcn x 2 fil;.001
```

```
con yhcn x 4 fil;.001
```

```
con yhcn z m fil;.001
```

```
con yhcn z 10 fil;.001
```

```
vec x 3
```

```
msg(Fracción masa de HCN
```

```
pause;cl
```

```
use patgeo
```

```
con ynox z 1 fil;.001
```

```
con ynox x 2 fil;.001
```

```
con ynox x 4 fil;.001
```

```
con ynox z m fil;.001
```

```
con ynox z 10 fil;.001
```

```
vec x 3
```

```
msg(Fracción masa de NOX
```

```
pause;cl
```

```
use patgeo
```

```
con tmp2 z 1 fil;.001
```

```
con tmp2 x 2 fil;.001
```



```
con tmp2 x 4 fil;.001
con tmp2 z m fil;.001
con tmp2 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(temperatura de contorno s-lido
pause;cl

use patgeo
con VRAT z 1 fil;.001
con VRAT x 2 fil;.001
con VRAT x 4 fil;.001
con VRAT z m fil;.001
con VRAT z 10 fil;.001
vec x 3
msg(índice de volatilización-n, kg/s
pause;cl

use patgeo
con VCOM z 1 fil;.001
con VCOM x 2 fil;.001
con VCOM x 4 fil;.001
con VCOM z m fil;.001
con VCOM z 10 fil;.001
vec x 3
msg(índice de volatilización, CH4, Combustión, kg/s
pause;cl

use patgeo
con CCOM z 1 fil;.001
con CCOM x 2 fil;.001
con CCOM x 4 fil;.001
con CCOM z m fil;.001
con CCOM z 10 fil;.001
vec x 3
msg(índice de combustión, kg/s
pause;cl

use patgeo
con BURN z 1 fil;.001
con BURN x 2 fil;.001
con BURN x 4 fil;.001
con BURN z m fil;.001
con BURN z 10 fil;.001
vec x 3
msg(índice de quemado de Char kg/s
pause;cl

use patgeo
con YCH4 z 1 fil;.001
con YCH4 x 2 fil;.001
con YCH4 x 4 fil;.001
con YCH4 z m fil;.001
con YCH4 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Volátiles, CH4, Fracción masa
pause;cl
```



```
use patgeo
con YCO2 z 1 fil;.001
con YCO2 x 2 fil;.001
con YCO2 x 4 fil;.001
con YCO2 z m fil;.001
con YCO2 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(fracción masa de CO2
pause;cl
use patgeo
con YCO z 1 fil;.001
con YCO x 2 fil;.001
con YCO x 4 fil;.001
con YCO z m fil;.001
con YCO z 10 fil;.001
vec x 3
msg(fracción masa de CO
pause;cl
use patgeo
con YH2O z 1 fil;.001
con YH2O x 2 fil;.001
con YH2O x 4 fil;.001
con YH2O z m fil;.001
con YH2O z 10 fil;.001
vec x 3
msg(fracción masa de H2O
pause;cl
use patgeo
con YO2 z 1 fil;.001
con YO2 x 2 fil;.001
con YO2 x 4 fil;.001
con YO2 z m fil;.001
con YO2 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Fracción masa de O2
pause;cl
use patgeo
con YN2 z 1 fil;.001
con YN2 x 2 fil;.001
con YN2 x 4 fil;.001
con YN2 z m fil;.001
con YN2 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Fracción masa de N2

pause;cl
use patgeo
con COL2 z 1 fil;.001
con COL2 x 2 fil;.001
con COL2 x 4 fil;.001
con COL2 z m fil;.001
con COL2 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(COAL contenido en la partícula
pause;cl
use patgeo
```



```
con CHA2 z 1 fil;.001
con CHA2 x 2 fil;.001
con CHA2 x 4 fil;.001
con CHA2 z m fil;.001
con CHA2 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(CHAR contenido en la partícula
pause;cl
use patgeo
con ASH2 z 1 fil;.001
con ASH2 x 2 fil;.001
con ASH2 x 4 fil;.001
con ASH2 z m fil;.001
con ASH2 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(ASH contenido en la partícula
pause;cl
use patgeo
con R2 z 1 fil;.001
con R2 x 2 fil;.001
con R2 x 4 fil;.001
con R2 z m fil;.001
con R2 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Fracciones en volumen de partículas
pause;cl
use patgeo
con VREL z 1 fil;.001
con VREL x 2 fil;.001
con VREL x 4 fil;.001
con VREL z m fil;.001
con VREL z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Velocidad relativa de las partículas
pause;cl
use patgeo
con SIZE z 1 fil;.001
con SIZE x 2 fil;.001
con SIZE x 4 fil;.001
con SIZE z m fil;.001
con SIZE z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Diámetro de las partículas
pause;cl
use patgeo
con REYN z 1 fil;.001
con REYN x 2 fil;.001
con REYN x 4 fil;.001
con REYN z m fil;.001
con REYN z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Número de Reynolds de las partículas
pause;cl
use patgeo
con CD z 1 fil;.001
con CD x 2 fil;.001
```



```

con CD x 4 fil;.001
con CD z m fil;.001
con CD z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Coeficiente de arrastre de partículas
pause;cl
use patgeo
con NUSS z 1 fil;.001
con NUSS x 2 fil;.001
con NUSS x 4 fil;.001
con NUSS z m fil;.001
con NUSS z 10 fil;.001
vec x 3
msg(numero de Nusselt de las partículas
pause;cl
use patgeo
con HCOF z 1 fil;.001
con HCOF x 2 fil;.001
con HCOF x 4 fil;.001
con HCOF z m fil;.001
con HCOF z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Interfase del coeficiente de transmisión de calor
pause;cl
use patgeo
con DEN1 z 1 fil;.001
con DEN1 x 2 fil;.001
con DEN1 x 4 fil;.001
con DEN1 z m fil;.001

con DEN1 z 10 fil;.001
vec x 3
msg(densidad de gas
pause;cl
use patgeo
con EPKE z 1 fil;.001
con EPKE x 2 fil;.001
con EPKE x 4 fil;.001
con EPKE z m fil;.001
con EPKE z 10 fil;.001
vec x 3
msg(Escala reciproca del tiempo. 1/s
pause;cl
ENDUSE
DISPLAY

```

Biomasa Seca.

1 Cinética de los volatiles que son liberados;
 2 Combustión de:

* Volatiles, CH₄, by EBU with a provision for kinetic ;
 * Char, C(s), by harmonic blend of kinetic and diffusion and
 * Carbon monoxide, CO, by harmonic blend of kinetic and EBU.
 3 Shift Reaction, steam reforming reaction, CO reduction reaction
 4 Thermal NOX and



5 Formaciones de combustible de NOX.
6 Radiosity model for radiating particles

```

ENDDIS
*****
IRUNN   =           1 ;LIBREF =           0
*****

Grupo 1. Run Title
TEXT(GASIFICADOR ESTRATIFICADO DE BIOMASA1307)
*****

Grupo 2. Transience
STEADY  =           T
*****

Groups 3, 4, 5 Grid Information
* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
RSET(M,1,5,20)
* Cylindrical-polar grid
CARTES=F
*****

Grupo 6. Body-Fitted coordinates
*****

Grupo 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED
ONEPHS  =           F
* Non-default variable names
NAME( 78) =AMIN ; NAME( 79) =AMAX
NAME( 80) =XXX  ; NAME( 81) =YN2
NAME( 82) =ASH2 ; NAME( 83) =SIZE
NAME( 84) =APRJ ; NAME( 85) =REYN
NAME( 86) =CD   ; NAME( 87) =VREL
NAME( 88) =NUSS ; NAME( 89) =TMP2
NAME( 90) =TMP1 ; NAME( 91) =CFIP
NAME( 92) =CMDO ; NAME( 93) =EL1
NAME( 94) =ENUT ; NAME( 95) =EPKE
NAME( 96) =YNOX ; NAME( 97) =YHCN
NAME( 98) =CHA2 ; NAME( 99) =COL2
NAME(100) =YCH4 ; NAME(101) =YO2
NAME(102) =YCO  ; NAME(103) =YCO2
NAME(104) =YH2O ; NAME(105) =YH2
NAME(106) =CRAD ; NAME(107) =RNOX
NAME(108) =MOX  ; NAME(109) =FK1
NAME(110) =MCCO ; NAME(111) =WATE
NAME(112) =WATK ; NAME(113) =RH2O
NAME(114) =RH21 ; NAME(115) =HID2
NAME(116) =HID  ; NAME(117) =HID1
NAME(118) =HIKT ; NAME(119) =HIKC
NAME(120) =HIKD ; NAME(121) =GAKT
NAME(122) =GAKC ; NAME(123) =GAKD
NAME(124) =GAST ; NAME(125) =HIDT
NAME(126) =CORT ; NAME(127) =CORK
NAME(128) =CORE ; NAME(129) =SCRT
NAME(130) =SCRK ; NAME(131) =SCRE
NAME(132) =SRRT ; NAME(133) =SRRK
NAME(134) =SRRE ; NAME(135) =BRN2
NAME(136) =BRN1 ; NAME(137) =BURN
NAME(139) =KC   ; NAME(140) =KD
NAME(141) =WMIX ; NAME(142) =CCOK

```



```

NAME(143) =CCOD ; NAME(144) =CCOM
NAME(145) =VCOK ; NAME(146) =VCOD
NAME(147) =VCOM ; NAME(148) =VRAT
NAME(149) =HCOF ; NAME(150) =DEN1
  * lista de variables a resolver
SOLVE(P1 ,U1 ,U2 ,V1 ,V2 ,W1 ,W2 ,R1 )
SOLVE(R2 ,RS ,H1 ,H2 ,YNOX,YHCN,CHA2,COL2)
SOLVE(YCH4,YO2 ,YCO ,YCO2,YH2O,YH2 ,CRAD)
  * lista de variables almacenadas
STORE(DEN1,HCOF,VRAT,VCOM,VCOD,VCOK,CCOM,CCOD)
STORE(CCOK,WMIX,KD ,KC ,BURN,BRN1,BRN2,SRRE)
STORE(SRRK,SRRT,SCRE,SCRK,SCRT,CORE,CORK,CORT)
STORE(HIDT,GAST,GAKD,GAKC,GAKT,HIKD,HIKC,HIKT)
STORE(HID1,HID ,HID2,RH21,RH2O,WATK,WATE,MCCO)
STORE(FK1 ,MOX ,RNOX,EPKE,ENUT,EL1 ,CMDO,CFIP)
STORE(TMP1,TMP2,NUSS,VREL,CD ,REYN,APRJ,SIZE)
STORE(ASH2,YN2 ,XXX ,AMAX,AMIN)
  * Additional solver options
SOLUTN(P1 ,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(R1 ,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(R2 ,Y,Y,N,Y,N,Y)
TURMOD(KEMODL)

*****
Grupo 8. Términos y Dispositivos
TERMS (H1 ,N,Y,Y,Y,Y,Y)
TERMS (H2 ,N,Y,Y,Y,N,Y)
TERMS (YNOX,N,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (YHCN,N,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (CHA2,N,Y,Y,Y,N,N)
TERMS (COL2,N,Y,Y,Y,N,N)
TERMS (YCH4,N,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (YO2 ,N,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (YCO ,N,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (YCO2,N,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (YH2O,N,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (YH2 ,N,Y,Y,Y,Y,N)
TERMS (CRAD,N,N,Y,Y,Y,N)
NEWRH1 = T
*****
Grupo 9. Propiedades
PRESS0 = 1.000000E+05
RHO1 = GRND
RHO1A = 0.000000E+00 ;RHO1B = 3.496503E-03
RHO1C = 7.142857E-01
ENUL = 1.000000E-05
CP1 = 1.050000E+03
TMP1 = GRND
RHO2 = 6.500000E+02
RHO2A = 7.000000E-01 ;RHO2B = 0.000000E+00
RHO2C = 0.000000E+00
CP2 = 1.800000E+03
TMP2 = GRND
DRH1DP = GRND5
PRNDTL(R1 ) = 1.000000E+09 ;PRNDTL(R2 ) = 1.000000E+09
PRNDTL(CRAD) = GRND

```



```

PRT (R1 ) = 1.000000E+09 ;PRT (R2 ) = 1.000000E+09
PRT (EP ) = 1.314000E+00 ;PRT (CRAD) = 1.000000E+09
*****
Grupo 10. Interfase de proceso de transferencia
CFIPS = GRND7
RLOLIM = 1.000000E-09 ;CMDOT = GRND
CFIPA = 1.000000E-09 ;CFIPB = 2.500000E-02
CFIPC = 1.000000E+02 ;CFIPD = 0.000000E+00
CMDTA = 1.287200E+07 ;CMDTB = 1.467480E+06
CMDTC = 7.355000E+06 ;CMDTD = -1.209000E+07
CINT (H1 ) = 1.000000E-20 ;CINT (H2 ) = 1.000000E-20
*****
Echo PLANT settings
PLANTBEGIN
NAMSAT=MOSG
PRNDTL(CRAD)=GRND
<PRPT04> LAMPR(CRAD)=:ENUL:*DEN1*3./4.*(0.5+5.e-1*6.*R2/SIZE)

* Interfase de transferencia de masa
VRAT-volatile release; BURN-char burning
<PRPT01> INTMDT=VRAT+BURN+GAST+HIDT
* Phase temperatures
<PRPT02> TEMP1=H1/(1059.+0.25*(TMP1-300.))
<PRPT03> TEMP2=H2/1112.
STORE(DEN1)
<PRPT05> DEN1=WMIX*(P1+PRESS0)/8314./TMP1
=====
* Devolatilization relacionados con las fuentes y los sumideros

# Reacci-n: 1kg Coal -> Ykg Vol + (1-Y)kg Char
PATCH(PLSR1,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
** Coal
<SORC01> VAL=-VRAT/RHO2A
COVAL(PLSR1,COL2, FIXFLU, GRND)
** Char
<SORC02> VAL=VRAT*(1.-RHO2A)/RHO2A
COVAL(PLSR1,CHA2, FIXFLU, GRND)

=====
CH4-Vol+tiles de oxidaci-n
* YCH4 supply via volatile release
PATCH(PLSR5,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
<SORC03> VAL=VRAT*1.0
COVAL(PLSR5,YCH4, FIXFLU, GRND)

Reacci-n: 2CH4 + 3O2 -> 2CO +4H2O

PATCH(PLSR6,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
<SORC04> CO=96./32.*VCOM/(YO2+tiny)
COVAL(PLSR6,YO2, GRND, 0.0)
<SORC05> CO=VCOM/(YCH4+tiny)
COVAL(PLSR6,YCH4, GRND, 0.0)
<SORC06> VAL=72./32.*VCOM
COVAL(PLSR6,YH2O, FIXFLU, GRND)
<SORC07> VAL=56./32.*VCOM
COVAL(PLSR6,YCO, FIXFLU, GRND)

```



```

=====
      Oxidaci-nde Carbon-Char
      Reacci-n:  C(s) + (x+1)/2*O2 -> xCO2 + (1-x)CO
      * Sink of char,C(s), in a 2nd phase
      PATCH(PLSR8,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
      <SORC08> VAL=-BURN
      COVAL(PLSR8,CHA2,FIXFLU,GRND)
      * Sumideros y fuentes de la 1 » fase componentes
      PATCH(PLSR9,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
      <SORC09> VAL=44./12.*XXX*BURN
      COVAL(PLSR9,YCO2,FIXFLU,GRND)
      <SORC10> VAL=28./12.*(1.-XXX)*BURN
      COVAL(PLSR9,YCO,FIXFLU,GRND)
      <SORC11> VAL=-32./12.*(1.+XXX)/2.*BURN
      COVAL(PLSR9,YO2,FIXFLU,GRND)
=====
      Oxidaci-n de mon-xido de carbono
      Reaction:  2CO + O2 -> 2CO2
      PATCH(PLSR7,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
      <SORC12> CO=CCOM/(YCO+tiny)
      COVAL(PLSR7,YCO,GRND,0.0)
      <SORC13> CO=CCOM*32./56./(YO2+tiny)
      COVAL(PLSR7,YO2,GRND,0.0)
      <SORC14> VAL=CCOM*88./56.
      COVAL(PLSR7,YCO2,FIXFLU,GRND)
=====
      Reformaci-n de la reacci-n de vapor
      # CH4 + H2O = CO + 3H2
      PATCH(PLSR20,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
      <SORC15> CO=SRRT/(YCH4+TINY)
      COVAL(PLSR20,YCH4,GRND,0.0)
      <SORC16> CO=SRRT*18./16./(YH2O+TINY)
      COVAL(PLSR20,YH2O,GRND,0.0)
      <SORC17> VAL=SRRT*28./16.
      COVAL(PLSR20,YCO,FIXFLU,GRND)
      <SORC18> VAL=SRRT*6./16.
      COVAL(PLSR20,YH2,FIXFLU,GRND)
      Shift Conversion Reaction
      # CO + H2O = CO2 + H2
      PATCH(PLSR30,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
      <SORC19> CO=SCRT/(YCO+TINY)
      COVAL(PLSR30,YCO,GRND,0.0)
      <SORC20> CO=SCRT*18./28.
      COVAL(PLSR30,YH2O,GRND,0.0)
      <SORC21> VAL=SCRT*44./28.
      COVAL(PLSR30,YCO2,FIXFLU,GRND)
      <SORC22> VAL=SCRT*2./28.
      COVAL(PLSR30,YH2,FIXFLU,GRND)
      Reacci-n de reducci-n de mon-xido de carbono
      # CO + 3H2 = CH4 + H2O
      PATCH(PLSR40,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
      <SORC23> CO=CORT/(YCO+TINY)
      COVAL(PLSR40,YCO,GRND,0.0)
      <SORC24> CO=CORT*6./28.
      COVAL(PLSR40,YH2,GRND,0.0)
      <SORC25> VAL=CORT*16./28.

```



```

COVAL (PLSR40, YCH4, FIXFLU, GRND)
  <SORC26> VAL=CORT*18./28.
COVAL (PLSR40, YH2O, FIXFLU, GRND)
  *Carbon-Char CO2 gasification
  Reaction:  C(s)  + CO2 -> 2CO
  * Sink of char,C(s), in a 2nd phase
PATCH (PLSR11, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, 15, 1, LSTEP)
  {SORC50> VAL=-GAST
COVAL (PLSR11, CHA2, FIXFLU, GRND)
  * Sink/sources of 1st phase components
PATCH (PLSR12, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, 15, 1, LSTEP)
  {SORC51> VAL=56./12.*GAST
COVAL (PLSR12, YCO, FIXFLU, GRND)
  {SORC52> VAL=-44./12.*GAST
COVAL (PLSR12, YCO2, FIXFLU, GRND)
  *****
      Carbon-Char H2O gasification
      Reaction:  C(s)  + H2O -> CO + H2
      * Sink of char,C(s), in a 2nd phase
PATCH (PLSR13, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, 15, 1, LSTEP)
  {SORC53> VAL=-HIDT
COVAL (PLSR13, CHA2, FIXFLU, GRND)
  * Sink/sources of 1st phase components
PATCH (PLSR14, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, 14, 1, LSTEP)
  {SORC54> VAL=28./12.*HIDT
COVAL (PLSR14, YCO, FIXFLU, GRND)
  {SORC55> VAL=2./12.*HIDT
COVAL (PLSR14, YH2, FIXFLU, GRND)
  {SORC56> VAL=-18./12.*HIDT
COVAL (PLSR14, YH2O, FIXFLU, GRND)

Oxidaci-n de hidr-geo
  # H2 + 0.5O2 = H2O
PATCH (PLSR50, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
  <SORC63> CO=RH2O/(YH2+TINY)
COVAL (PLSR50, YH2, GRND, 0.0)
  <SORC64> CO=RH2O*16./2.
COVAL (PLSR50, YO2, GRND, 0.0)
  <SORC65> VAL=RH2O*18./2.
COVAL (PLSR50, YH2O, FIXFLU, GRND)

  * Entalp'a de las fuentes debido a los calores de la combusti-n
# Volatiles
PATCH (PLSR3, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
  <SORC27> VAL=VCOM*5.5e7+CCOM*7.45e6
COVAL (PLSR3, H1, FIXFLU, GRND)
  # Char
PATCH (PLSR10, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
  <SORC28> VAL=BURN*(XXX*3.28e7+(1.-XXX)*9.21e6)
COVAL (PLSR10, H1, FIXFLU, GRND)
  * Fuentes entalp'a debido a la reacci-n de los Heat
PATCH (PLSR21, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
  <SORC29> VAL=SRRT*CMDTA
COVAL (PLSR21, H1, FIXFLU, GRND)
PATCH (PLSR31, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)

```



```

<SORC30> VAL=SCRT*CMDTB
COVAL (PLSR31,H1, FIXFLU, GRND)

PATCH (PLSR42,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  <SORC31> VAL=CORT*CMDTC
COVAL (PLSR42,H1, FIXFLU, GRND)
  # CO2 Gasification
PATCH (PLSR15,CELL,1,NX,1,NY,1,15,1,LSTEP)
  {SORC60> VAL=-GAST*1.438E+07
COVAL (PLSR15,H1, FIXFLU, GRND)
  # H2O Gasification
PATCH (PLSR16,CELL,1,NX,1,NY,1,15,1,LSTEP)
  {SORC61> VAL=-HIDT*1.091E+07
COVAL (PLSR16,H1, FIXFLU, GRND)

  # oxidaci-n de hidrogeno
PATCH (PLSR51,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  <SORC57> VAL=RH2O*CMDTD
COVAL (PLSR51,H1, FIXFLU, GRND)

PATCH (THERMNOX,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,1)
  <SORC97> VAL=RNOX
COVAL (THERMNOX,YNOX, FIXFLU, GRND)

PATCH (FUELHCN,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  <SORC98> VAL=27./18.*(1.e-2*VRAT+1.e-2*BURN)
COVAL (FUELHCN,YHCN, FIXFLU, GRND)

PATCH (FUELNOX,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  <SORC99> CO=3.e12*YHCN/EXP(2.5e8/(8314.*AMAX1(300.,TMP1)))
  <SORC99> VAL=0.0333*YO2
COVAL (FUELNOX,YNOX, GRND, GRND)

PATCH (NOXRED,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  <SORC96> CO=6.*R2/SIZE*40./EXP(1.5e8/(8314.*AMAX1(300.,TMP2)))
COVAL (NOXRED,YNOX, GRND, 0.0)

  * Enthalpy sources due to interphase heat transfer
PATCH (PLSR4,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  <SORC32> CO=HCOF/(1059.+0.25*(TMP1-300.))
  <SORC32> VAL=H2*(1059.+0.25*(TMP1-300.)) /1112.
COVAL (PLSR4,H1, GRND, GRND)
  <SORC33> CO=HCOF/1112.
  <SORC33> VAL=1112./(1059.+0.25*(TMP1-300.)) *H1
COVAL (PLSR4,H2, GRND, GRND)

  * Enthalpy sources due to radiation
PATCH (RADSOR,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  <SORC95> VAL=4.*0.5*(CRAD-5.68e-8*TMP1**4)
COVAL (RADSOR,H1, FIXFLU, GRND)
  <SORC93> VAL=4.*5.e-1*6.*R2/SIZE*(CRAD-5.68e-8*TMP2**4)
COVAL (RADSOR,H2, FIXFLU, GRND)
  * Radiosity source
PATCH (RDIOSITY,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  <SORC94> CO=4.*(5.e-1*6.*R2/SIZE+0.5)

```



```

<SORC94> VAL=5.68e-8*(5.e-1*6.*R2/SIZE*TMP2**4+0.5*TMP1**4 )/      $
      (5.E-1*6.*R2/SIZE+0.5)
COVAL (RDIOSITY, CRAD, GRND, GRND)
=====
* Sources to counter the transfer to phase 1

PATCH (PLSR90, CELL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
<SORC37> VAL=CMDO*COL2
COVAL (PLSR90, COL2, FIXFLU, GRND)
<SORC38> VAL=CMDO*CHA2
COVAL (PLSR90, CHA2, FIXFLU, GRND)
=====

store (HCOF, VRAT, VCOM, VCOD, VCOK, CCOM, CCOD, CCOK, WMIX, KD, KC, KT, BURN)
store (BRN1, BRN2, SRRE, SRRK, SRRT, SCRE, SCRK, SCRT, CORE, CORK, CORT)
STORE (HIDT, GAST, GAKD, GAKC, GAKT, HIKD, HIKC, HIKT, HID1, HID2, HIDT)
STORE (RH21, RH2O, WATK, WATE)
# Char burning rate constants:
** masa molecular de la mezcla
<SC0301> WMIX=28.8
** Difusi-n
<SC0302> KD=1.55*NUSS*1.78e-5*12./8314./AMAX1(300., TMP2)/SIZE
** Kinetic
<SC0303> KC=0.1309/EXP(26850./4./AMAX1(300., TMP2))
** Harmonic blending
<SC0304> KT=1./(1./KD+1./KC)
<SC0305> GAKD=2.0*NUSS*1.38e-5*12./8314./AMAX1(300., TMP2)/SIZE
** Kinetic
<SC0306> GAKC=3.4E+07/EXP(13531./AMAX1(300., TMP2))
** Harmonic blending
<SC0307> GAKT=1./(1./GAKD+1./GAKC)
** Diffusion H2O --> C
<SC0308> HIKD=2.0*NUSS*2.208e-5*12./8314./AMAX1(300., TMP2)/SIZE
** Kinetic
<SC0309> HIKC=9.35E+04/EXP(13832./AMAX1(300., TMP2))
** Harmonic blending
<SC0310> HIKT=1./(1./HIKD+1./HIKC)

# Rates:

# Volatile release, kg/s
<SC0901> VRAT=1.44e3*RHO2A*COL2/EXP((8860./2)/AMAX1(300., TMP2))* $
      RHO2*R2*VOL*RHO2A

# Volatile combustion, kg/s
** EBU
<SC0902> VCOD=4.*EPKE*AMIN1(YCH4, 32.*YO2/96.)
** Kinetic
<SC0921> VCOK=1.15e13*DEN1*YO2**1.3/EXP(24444./AMAX1(300., TMP1))/ $
      (YCH4**0.3+TINY)*YO2**0.8*DEN1
** Harmonic blending
<SC0922> VCOM=0.5/(1./VCOD+1./VCOK)*DEN1

# Carbon monoxide, CO, combustion, kg/s
** EBU

```



```

<SC0903> CCOD=4.*EPKE*AMIN1 (YCO,32.*YO2/56.)
      ** Kinetic
<SC0931> CCOK=5.42e13*DEN1*YCO*YO2**0.25*YH2O**0.5/
      EXP(15152./AMAX1(300.,TMP1))
      ** Harmonic blending
<SC0932> CCOM=0.5/(1./CCOD+1./CCOK)*DEN1*VOL

      # Char,C, burning out, kg/s
<SC0904> BRN1=3./SIZE*KT*(P1+PRESS0)*YO2*WMIX/32.*VOL
<SC0941> BRN2=2.*DEN1*VOL*EPKE*AMIN1 (CHA2*MASS2/MASS1,
      12./(32.*(1.+XXX)/2.)*YO2)
<SC0942> BURN=1./(1./BRN1+1./BRN2)
      # CO/CO2 of C-combustion
store(MCCO)
<SC0943> MCCO=2500.*EXP(-6249./AMAX1(300.,TMP2))
<SC0944> XXX=1./(1.+44./28.*MCCO)
      # Steam reforming reaction
<SC0905> SRRE=4.*DEN1*EP/KE*AMIN1 (YCH4,16./18.*YH2O)
<SC0951> SRRK=3.21E2*DEN1/EXP(468/TMP1)*YH2O**1.3*YCH4
<SC0952> SRRT=0.5/(1./SRRE+1./SRRK)*VOL*DEN1
      # Shift Conversion Reaction
<SC0906> SCRE=4.*DEN1*EP/KE*AMIN1 (YCO,28./18.*YH2O)
<SC0961> SCRK=3.21E2*DEN1/EXP(468/TMP1)*YH2O**1.3*YCO
<SC0962> SCRT=AMIN1 (SCRE,SCRK)*VOL*DEN1
      # Carbon Monoxide Reduction Reaction
<SC0907> CORE=4.*DEN1*EP/KE*AMIN1 (YCO,28./6.*YH2O)
<SC0971> CORK=3.21E2*DEN1/EXP(468/TMP1)*YH2**1.3*YCO
<SC0972> CORT=0.5/(1./CORE+1./CORK)*VOL*DEN1

<SC0975> RH21=5.42E9*DEN1/EXP(15152/(TMP1+TINY))*YH2
<SC0976> WATK=RH21*(YO2+TINY)**0.25*YH2O**0.5
{SC0977> WATE=4.0*DEN1*EP/KE*AMIN1 (YH2,YO2/8.0)
{SC0978> RH2O=AMIN1 (WATK,WATE)

      #Char,C, gasificaci-n con agua
{SC0950> HIDT=3.0/SIZE*HIKT*(P1+PRESS0)*YH2O*WMIX/18.*VOL
{SC0953> HID=2.*DEN1*VOL*EPKE
{SC0954> HID2=HID*AMIN1 (CHA2*MASS2/MASS1,12./(18.*YH2O))
{SC0945> GAST=3.0/SIZE*GAKT*(P1+PRESS0)*YCO2*WMIX/44.*VOL
      # Interphase heat transfer coefficient
<SC0908> NUSS=2.+0.65*REYN**0.5
<SC0909> HCOF=3.*0.0458*NUSS/SIZE**2.

      # Contenido de ceniza de la 2 » fase
<SC0605> ASH2=1.-CHA2-COL2

      # El nitr-eno contenido de la 1 » fase
<SC0606> YN2=1.-YCH4-YO2-YCO-YCO2-YH2O-YH2
store(FK1,MOX,RNOX)
      *** Reaction constant
<SC0910> FK1=1.8e8*EXP(-38370./AMAX1(TMP1,300.))
      *** Mole O atom concentration
<SC0911> MOX=3.97e5*(YO2*DEN1/32./AMAX1(TMP1,300.))**0.5
      *EXP(-31090./AMAX1(TMP1,300.))
      *** NOX reaction rate

```



<SC0912> RNOX=30.*2.*FK1*MOX*YN2*DEN1/28.

PLANTEND

Grupo 11. Initialise Var/Porosity Fields

```

FIINIT(R1 ) = 5.000000E-01 ;FIINIT(R2 ) = 5.000000E-01
FIINIT(RS ) = 5.000000E-01 ;FIINIT(KE ) = 2.500000E-01
FIINIT(EP ) = 2.050000E+00 ;FIINIT(H1 ) = 1.056851E+06
FIINIT(H2 ) = 1.800000E+06 ;FIINIT(AMIN) = 1.001000E-10
FIINIT(AMAX) = 1.001000E-10 ;FIINIT(XXX ) = 1.001000E-10
FIINIT(YN2 ) = 1.001000E-10 ;FIINIT(ASH2) = 1.001000E-10
FIINIT(SIZE) = 1.001000E-10 ;FIINIT(APRJ) = 1.001000E-10
FIINIT(REYN) = 1.001000E-10 ;FIINIT(CD ) = 1.001000E-10
FIINIT(VREL) = 1.001000E-10 ;FIINIT(NUSS) = 1.001000E-10
FIINIT(TMP2) = 1.001000E-10 ;FIINIT(TMP1) = 1.001000E-10
FIINIT(CFIP) = 1.001000E-10 ;FIINIT(CMDO) = 1.001000E-10
FIINIT(EL1 ) = 1.001000E-10 ;FIINIT(ENUT) = 1.001000E-10
FIINIT(EPKE) = 1.001000E-10 ;FIINIT(YNOX) = 0.000000E+00
FIINIT(YHCN) = 0.000000E+00 ;FIINIT(CHA2) = 0.000000E+00
FIINIT(COL2) = 8.000000E-01 ;FIINIT(YCH4) = 0.000000E+00
FIINIT(YO2 ) = 2.320000E-01 ;FIINIT(YCO ) = 0.000000E+00
FIINIT(YCO2) = 0.000000E+00 ;FIINIT(YH2O) = 0.000000E+00
FIINIT(YH2 ) = 1.001000E-10 ;FIINIT(CRAD) = 0.000000E+00
FIINIT(RNOX) = 1.001000E-10 ;FIINIT(MOX ) = 1.001000E-10
FIINIT(FK1 ) = 1.001000E-10 ;FIINIT(MCCO) = 1.001000E-10
FIINIT(WATE) = 1.001000E-10 ;FIINIT(WATK) = 1.001000E-10
FIINIT(RH2O) = 1.001000E-10 ;FIINIT(RH21) = 1.001000E-10
FIINIT(HID2) = 1.001000E-10 ;FIINIT(HID ) = 1.001000E-10
FIINIT(HID1) = 1.001000E-10 ;FIINIT(HIKT) = 1.001000E-10
FIINIT(HIKC) = 1.001000E-10 ;FIINIT(HIKD) = 1.001000E-10
FIINIT(GAKT) = 1.001000E-10 ;FIINIT(GAKC) = 1.001000E-10
FIINIT(GAKD) = 1.001000E-10 ;FIINIT(GAST) = 1.001000E-10
FIINIT(HIDT) = 1.001000E-10 ;FIINIT(CORT) = 1.001000E-10
FIINIT(CORK) = 1.001000E-10 ;FIINIT(CORE) = 1.001000E-10
FIINIT(SCRT) = 1.001000E-10 ;FIINIT(SCRK) = 1.001000E-10
FIINIT(SCRE) = 1.001000E-10 ;FIINIT(SRRT) = 1.001000E-10
FIINIT(SRRK) = 1.001000E-10 ;FIINIT(SRRE) = 1.001000E-10
FIINIT(BRN2) = 1.001000E-10 ;FIINIT(BRN1) = 1.001000E-10
FIINIT(BURN) = 1.001000E-10 ;FIINIT(KC ) = 1.001000E-10
FIINIT(KD ) = 1.001000E-10 ;FIINIT(WMIX) = 1.001000E-10
FIINIT(CCOK) = 1.001000E-10 ;FIINIT(CCOD) = 1.001000E-10
FIINIT(CCOM) = 1.001000E-10 ;FIINIT(VCOK) = 1.001000E-10
FIINIT(VCOD) = 1.001000E-10 ;FIINIT(VCOM) = 1.001000E-10
FIINIT(VRAT) = 1.001000E-10 ;FIINIT(HCOF) = 1.001000E-10
FIINIT(DEN1) = 1.001000E-10

```

No PATCHes Utilizados para este Grupo

INIADD = F

Grupo 12. Convecci-n y difusi-n de los ajustes

No PATCHes Utilizados para este Grupo

Group 13. Boundary & Special Sources

PATCH (IN1 ,HIGH ,1,0,0,0,0,0,1,1)



COVAL (IN1 ,CRAD, 1.000000E+00, 1.420000E+02)

Group 14. Aguas abajo de la presi-n PARAB

Grupo 15. Finaliza Sweeps

LSWEEP = 4000

RESFAC = 1.000000E-03

Grupo 16. Termino de las iteraciones

LITER (R1) = 1 ;LITER (R2) = 1

LITER (RS) = 1

Grupo 17. Relajaci-n

RELAX(P1 ,LINRLX, 5.000000E-01)

RELAX(U1 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(U2 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(V1 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(V2 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(W1 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(W2 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(R1 ,LINRLX, 5.000000E-01)

RELAX(R2 ,LINRLX, 5.000000E-01)

RELAX(KE ,LINRLX, 2.000000E-01)

RELAX(EP ,LINRLX, 2.000000E-01)

RELAX(H1 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(H2 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(CMDO,LINRLX, 3.000000E-01)

RELAX(YNOX,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(YHCN,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(CHA2,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(COL2,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(YCH4,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(YO2 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(YCO ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(YCO2,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(YH2O,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(YH2 ,FALSDT, 1.000000E-02)

RELAX(DEN1,LINRLX, 1.000000E-01)

KELIN = 3

Grupo 18. Limites

VARMAX(P1) = 1.000000E+05 ;VARMIN(P1) = -1.000000E+05

VARMAX(U1) = 1.000000E+00 ;VARMIN(U1) = -1.000000E+00

VARMAX(U2) = 1.000000E+00 ;VARMIN(U2) = -1.000000E+00

VARMAX(V1) = 1.000000E+00 ;VARMIN(V1) = -1.000000E+00

VARMAX(V2) = 1.000000E+00 ;VARMIN(V2) = -1.000000E+00

VARMAX(W1) = 1.000000E+00 ;VARMIN(W1) = -1.000000E+00

VARMAX(W2) = 1.000000E+00 ;VARMIN(W2) = -1.000000E+00

VARMAX(R1) = 1.000000E+00 ;VARMIN(R1) = 1.000000E-06

VARMAX(R2) = 1.000000E+00 ;VARMIN(R2) = 1.000000E-09

VARMAX(H1) = 1.000000E+07 ;VARMIN(H1) = 0.000000E+00

VARMAX(H2) = 1.000000E+06 ;VARMIN(H2) = 0.000000E+00

VARMAX(YN2) = 1.000000E+00 ;VARMIN(YN2) = 0.000000E+00

VARMAX(ASH2) = 1.000000E+00 ;VARMIN(ASH2) = 0.000000E+00

VARMAX(TMP2) = 1.300000E+03 ;VARMIN(TMP2) = 3.000000E+02



```

VARMAX (TMP1) = 1.300000E+03 ;VARMIN (TMP1) = 3.000000E+02
VARMAX (CMDO) = 1.000000E+10 ;VARMIN (CMDO) = 0.000000E+00
VARMAX (YNOX) = 1.000000E+00 ;VARMIN (YNOX) = 0.000000E+00
VARMAX (YHCN) = 1.000000E+00 ;VARMIN (YHCN) = 0.000000E+00
VARMAX (CHA2) = 1.200000E-01 ;VARMIN (CHA2) = 0.000000E+00
VARMAX (COL2) = 1.000000E+00 ;VARMIN (COL2) = 0.000000E+00
VARMAX (YCH4) = 1.000000E-01 ;VARMIN (YCH4) = 0.000000E+00
VARMAX (YO2 ) = 1.000000E+00 ;VARMIN (YO2 ) = 0.000000E+00
VARMAX (YCO ) = 3.000000E-01 ;VARMIN (YCO ) = 0.000000E+00
VARMAX (YCO2) = 1.000000E+00 ;VARMIN (YCO2) = 0.000000E+00
VARMAX (YH2O) = 1.000000E+00 ;VARMIN (YH2O) = 0.000000E+00
VARMAX (YH2 ) = 2.000000E-01 ;VARMIN (YH2 ) = 0.000000E+00
VARMAX (CCOM) = 1.000000E+10 ;VARMIN (CCOM) = 0.000000E+00
VARMAX (VCOM) = 1.000000E+10 ;VARMIN (VCOM) = 0.000000E+00
VARMAX (DEN1) = 1.500000E+00 ;VARMIN (DEN1) = 0.000000E+00
*****
  Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
USEGRD = T ;USEGRX = T
NAMSAT =MOSG
GENK = T
ASAP = T
SPEDAT (SET,OBJNAM,!OB1,C,INLET)
SPEDAT (SET,IGESTYPE,!OB1,C,INLET)
SPEDAT (SET,OBJNAM,^OB2,C,OUTLET)
SPEDAT (SET,IGESTYPE,^OB2,C,OUTLET)
*****
  Grupo 20. Impresi-n preliminar
ECHO = T
*****
  Grupo 21. Copia impresa de las Variables
OUTPUT (P1 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT (U1 ,Y,Y,Y,N,Y,Y)
OUTPUT (U2 ,Y,Y,Y,N,Y,Y)
OUTPUT (V1 ,Y,Y,Y,N,Y,Y)
OUTPUT (V2 ,Y,Y,Y,N,Y,Y)
OUTPUT (W1 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT (W2 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT (R1 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT (R2 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
*****
  Grupo 22. Monitor de impresi-n
IXMON = 1 ;IYMON = 5 ;IZMON = 20
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = -1
*****
  Grupo 23. Campo de impresi-n de trama y control
NPRINT = 100000
NZPRIN = 1
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000
  No PATCHes usados por este grupo
*****
  Group 24. Vertederos para reinicia
NOWIPE = T

GVIEW (P,-1.000000E+00,0.000000E+00,0.000000E+00)

```



```

GVVIEW (UP,0.000000E+00,1.000000E+00,0.000000E+00)

> DOM,      SIZE,          3.141590E+00, 1.250000E-01, 5.000000E-01
> DOM,      MONIT,        1.570800E+00, 1.125000E-01, 4.875000E-01
> DOM,      SCALE,        1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM,      SNAPSIZ,      1.000000E-02
> GRID,     RSET_Y_1,      1, 1.000000E+00
> GRID,     RSET_Y_2,      4, 1.000000E+00
> GRID,     RSET_Z_1,      2, 1.000000E+00
> GRID,     RSET_Z_2,     18, 1.000000E+00

> OBJ,      NAME,         IN1
> OBJ,      POSITION,      0.000000E+00, 0.000000E+00, 5.000000E-02
> OBJ,      SIZE,         3.141590E+00, 2.500000E-02, 0.000000E+00
> OBJ,      CLIPART,      poldef
> OBJ,      ROTATION24,    1
> OBJ,      TYPE,         USER_DEFINED

> OBJ,      NAME,         OB1
> OBJ,      POSITION,      0.000000E+00, 0.000000E+00, 5.000000E-01
> OBJ,      SIZE,         3.141590E+00, 1.250000E-01, 0.000000E+00
> OBJ,      CLIPART,      polcubet
> OBJ,      ROTATION24,    1
> OBJ,      TYPE,         OUTLET
> OBJ,      PRESSURE,      0.000000E+00
> OBJ,      TEMPERATURE,   SAME
> OBJ,      COEFFICIENT,   1.000000E+00
> OBJ,      TEMPERATURE-2, SAME
> OBJ,      COEFFICIENT-2, 1.000000E+04
> OBJ,      TURBULENCE,    0.000000E+00, 0.000000E+00

> OBJ,      NAME,         ^OB2
> OBJ,      POSITION,      0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ,      SIZE,         3.141590E+00, 1.250000E-01, 0.000000E+00
> OBJ,      CLIPART,      polcu5t
> OBJ,      ROTATION24,    1
> OBJ,      TYPE,         INLET
> OBJ,      DENSITY,       7.726666E-01
> OBJ,      DENSITY-2,     6.666667E-01
> OBJ,      VELOCITY,      0.000000E+00, 0.000000E+00, 1.527889E-01
> OBJ,      VELOCITY-2,    0.000000E+00, 0.000000E+00, 1.527889E-01
> OBJ,      TEMPERATURE,   5.545000E+05
> OBJ,      TEMPERATURE-2, 6.000000E+05
> OBJ,      INLET_COL2,    8.000000E-01
> OBJ,      INLET_YO2,     2.320000E-01
> OBJ,      KE_IN,         1.125720E-04
> OBJ,      EP_IN,         1.569900E-05
STOP

```



Bibliografía

1. Anil Khadse, Mohammed Qayyumi, Sanjay Mahajani and Preeti Aghalayam, Underground coal gasification: A new clean coal utilization technique for India, Energy ju.ne 2007
2. Bain, R. Biomass gasification overview. U.S department of energy by midwest research institute, Battelle. (NREL), 2004.
3. Bridgwater, A.V., The technical and economic feasibility of biomass gasification for power generation. Fuel Vol. 76, No. 5, pp. 631-653, 1995.
4. Bryden, K.; Ragland K. M.; Riland, C. J., “ Modelling thermally thick pyrolysis of wood”, Biomass and Bioenergy, Vol 22, pp 41-53(2002)
5. De Souza-Santos M., Solid Fuels Combustion and Gasification, Modeling, Simulation, and Equipment Operation, Marcel Dekker, Inc., 2004, USA.
6. De Souza-Santos M.L., (1989). Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers. Fuel, Vol. 68 pp 1507-1521.
7. Devi, L.; Ptasiński, K.J. and Janssen, F.J.J.G. A review of the primary measures for tar elimination in biomass gasification processes. Biomass and Bioenergy 24, 125-140, 2003.
8. Di Blasi C. Analysis of convection and secondary reaction effects within porous solid fuels undergoing pyrolysis. Combustion Science and Technology 1993;90:315-40
9. Fueyo N. (1996). Mecánica de fluidos computacional para Ingeniería. Área de Mecánica de Fluidos, Centro Politécnico Superior, Universidad de Zaragoza
10. Gil, J.; Corella, J.; Aznar, M.P and Caballero, M.A. Biomass gasification in atmospheric and bubbling fluidized bed: effect of the type of gasifying agent on the product distribution. Biomass and Bioenergy 17, 389-403, 1999.
11. Higman, ; Van Der Burgt, Gasification, ed. Silver USA 2003
12. LADE. Manual de Gasificación, Organización Latinoamericana de Energía (UNESCO), (1997).



13. Li, X.T.; Grace, J.R; Lim, C.J.; Watkinson, A.P.; Chen, H.P. and Kim, J.R. Biomass gasification in a circulating fluidized bed. *Biomass and Bioenergy* 26, 171-193, 2004.
14. Neeft, J.P.A.; Knoef, H.A.M. and Onaji, P. Behaviour of tar in biomass gasification systems. Tar related problems and their solutions. Report EWAB9919, Utrecht, 1999.
15. Ochoa J. S , "Simulación Numérica del Proceso de gasificación para la utilización del carbón o coque de petróleo. Tesis Maestría, Facultad de ingeniería UNAM, México.
16. Padban, N. PFB Air gasification of biomass. Investigation of product formation and problematic issues related to ammonia, tar and alkali. KFS AB, Lund University, 2000.
17. Rogner, HH; Popescu, A. An introduction to energy. *World Energy Assessment: Energy and the challenge of sustainability*. 2000.
18. Schenk, E. P. van Doorn, J., Biomass gasification Research in fixed bed and fluidized bed reactors, *Gasification and Pyrolysis of Biomass*, Stuttgart, April 1997.
19. The PHOENICS Reference Manual, CHAM TR-200, UK, (1993).
20. USA, Department of Energy, DOE/GO-10098-474, (2000).
21. Warnecke, R., Gasification of biomass: comparison of fixed bed and fluidized bed gasifier. *Biomass and Bioenergy* 18, 489-497, 2000.
22. Xavier Elias, Enric Velo; *Tratamiento y valorización energética de residuos*, Ediciones Diaz de Santos, Madrid 2005.
23. Yamashita, k; Barreto, L. Biomass gasification for the co-production of Fischer Tropsch liquids and electricity. IR-04-047, 2004.
24. Zienkiewicz, O. C. & Taylor, R. L. (1989), *The Finite Element Method*, McGraw-Hill.

Internet

www.btgworld.com

<http://www.iaea.org/>

<http://www.rembio.org/>



<http://www.sener.gob.mx/>

<http://archivo.greenpeace.org/Clima/Prokioto.htm>

<http://www.cham.co.uk/>

http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/d_docs/tr001/tr001.htm

<http://www.cham.co.uk/website/new/cfdintro.htm>