



# Predicción de la composición de gases en un gasificador *downdraft* a partir de residuos de madera de Algarrobo: Un enfoque matemático

## Prediction of gas composition in a *downdraft* gasifier from carob wood waste: A mathematical approach

Elbis d'Espaux Shelton

Universidad de las Ciencias Informáticas  
Cuba

(Recibido 21 de julio de 2024, para publicación 11 de octubre de 2024)

**Resumen** – En este trabajo se presentan las herramientas para el desarrollo de un modelo matemático que favorece el cálculo de los procesos termoquímicos que ocurren en el interior de un gasificador *downdraft* y que permite predecir la composición de los gases generados a la salida del reactor usando residuos de madera de Algarrobo a partir de la composición termofísica de la biomasa, la temperatura del lecho y otras propiedades. Para ello se vale del planteamiento de las ecuaciones de balance de energía y de especies empleándose el método de numérico de diferencias finitas con lo cual se logra mayor precisión de la composición del gas generado. Esto permitirá elevar la calidad del gas que se produce teniendo en cuenta el aumento de su valor calórico y la disminución de su contenido de alquitrán, a partir del control de la cinética de las reacciones y considerando además el tamaño de la biomasa.

**Palabras clave** – Biomasa, gasificador *downdraft*, gas generado, modelación matemática.

**Abstract** – This work presents the tools for the development of a mathematical model that favors the calculation of the thermochemical processes that occur inside a *downdraft* gasifier and that allows predicting the composition of the gases generated at the exit of the reactor using wood waste of Carob tree from the thermophysical composition of the biomass, the bed temperature and other properties. To do this, it uses the approach of the energy and species balance equations, using the finite difference numerical method, which achieves greater precision in the composition of the gas generated. This will allow the quality of the gas produced to be raised taking into account the increase in its caloric value and the decrease in its tar content are taken into account, based on the control of the kinetics of the reactions and also considering the size of the biomass.

**Keywords** – Biomass, *Downdraft* Gasifier, Generated Gas, Mathematical Modeling.

### 1. INTRODUCCIÓN

Las investigaciones generales en el área de gasificación de biomasa incluyen el estudio de la cinética de la pirólisis o la gasificación de biomazas seleccionadas. La composición del gas resultante depende del gasificador que se tenga, de las características particulares de la biomasa empleada y de las condiciones de operación y diseño del gasificador. Por ello las investigaciones continúan, se experimentan y modelan modificaciones constructivas a los gasificadores existentes, se optimizan parámetros de operación con el objetivo fundamental de elevar la calidad del gas que se produce en varias direcciones: aumentar su valor calórico, disminuir su contenido de alquitrán, obtener combustibles de mayor calidad y otros materiales.

La gasificación de biomasa es un proceso complejo que involucra la transferencia simultánea de calor y masa. Desarrollar un extenso programa de pruebas experimentales para evaluar la influencia de cada parámetro en los resultados obtenidos es poco práctico y requiere una gran cantidad de tiempo, recursos,

personal calificado y dinero. Es esencial determinar las condiciones óptimas de operación del equipo para obtener gases combustibles con un alto poder calorífico y buenas características de limpieza (bajo contenido de alquitranes).

Para una biomasa específica, no se conoce la composición del gas a obtener ni la eficiencia del proceso en un gasificador tipo *downdraft*, a partir de condiciones específicas del gasificador como la temperatura del lecho y las características termofísicas de la biomasa, al diseñar o evaluar una instalación de gasificación. Predecir las propiedades de los gases generados en un gasificador implica el uso de modelos teóricos y herramientas de simulación pues no siempre se tienen los analizadores de gases.

Actualmente, existe una tendencia creciente hacia el uso de la modelación de la gasificación para describir este proceso sin necesidad de realizar experimentos, los cuales pueden ser costosos. Por ello, en este trabajo se desarrolla un modelo matemático que permite predecir con mayor precisión la composición del gas generado en un gasificador *downdraft* utilizando residuos de madera, mediante el control de las variables que intervienen en el proceso.

Los modelos matemáticos reportados en la literatura revisada, que analizan el comportamiento de un gasificador a escala de laboratorio aplicando el balance de masa y energía y la minimización de la energía libre de Gibbs, no pronostican satisfactoriamente la composición de los gases generados en la gasificación de biomasa a través del control de las variables del proceso, lo que introduce errores en la estimación, cálculo y diseño de estas instalaciones.

En el presente trabajo se proporcionan las herramientas necesarias para analizar el desarrollo de un modelo matemático que permite calcular los procesos termoquímicos que ocurren dentro de un gasificador *downdraft* y determinar los perfiles de temperatura. El modelo se basa en el planteamiento de las ecuaciones de balance de energía y de especies, empleando el método de los volúmenes de control. Para ello, se utilizó el método numérico de diferencias finitas mediante la discretización de las ecuaciones de balance determinadas en el proceso analizado.

Se espera desarrollar un modelo que pueda predecir con mayor precisión la composición del gas generado durante el proceso de gasificación. Esto permitiría obtener un gas con mayor poder calorífico, mediante el control de la cinética de las reacciones y teniendo en cuenta la formación de alquitrán, la generación de hidrocarburos y el tamaño de la biomasa. Además, se realizará una valoración económica de las ventajas de aplicar la gasificación para producir energía eléctrica en lugar de utilizar combustibles convencionales.

La modelación de la gasificación es una alternativa económica para diseñar un gasificador, ya que permite describir el proceso y predecir la composición de los gases generados sin necesidad de realizar experimentos costosos, que a menudo requieren equipos difíciles de adquirir [1].

La gasificación convierte un flujo sólido en un combustible gaseoso o líquido que puede ser quemado para liberar energía o utilizado en la producción de sustancias químicas valiosas. Este proceso es una opción viable para sustituir una parte significativa de los combustibles fósiles, ya que utiliza un agente gasificante para reorganizar la estructura molecular de la biomasa y convertirla en un combustible útil con una mayor relación hidrógeno-carbono (H/C) [2].

La calidad del gas producido depende de varios factores, incluyendo las características del flujo de gas, el agente gasificante utilizado, el tipo de biomasa y el diseño del reactor, así como los parámetros de operación [3].

El proceso de gasificación involucra fenómenos complejos, como la transferencia de masa y energía en un sistema reactivo heterogéneo. Esto incluye etapas como el secado y la devolatilización del combustible, seguidas de la oxidación de los volátiles y el carbón, lo que provoca cambios en el diámetro de las partículas y pérdidas de presión en el lecho [4].

Los gasificadores, que son los reactores donde se lleva a cabo la gasificación, son adecuados para la producción de energía a pequeña y mediana escala. Sin embargo, debido a sus características, es difícil mantener una temperatura de operación uniforme dentro del reactor, lo que hace impredecible la composición del producto final [5].

A medida que la biomasa atraviesa el reactor, experimenta diversas transformaciones hasta su completa devolatilización. Durante este proceso, la biomasa se descompone en gas y otros subproductos que son desechados al final del proceso. Estas transformaciones incluyen la transferencia de masa y energía, así como reacciones químicas complejas que convierten los componentes sólidos de la biomasa en gases combustibles y subproductos no deseados.

La importancia de comprender estas transformaciones radica en la optimización del proceso de gasificación. Al controlar las variables que influyen en la descomposición de la biomasa, como la temperatura y la composición del agente gasificante, es posible mejorar la eficiencia del reactor y la calidad del gas producido. Además, minimizar la generación de subproductos desechables contribuye a un proceso más limpio y sostenible.

La mayoría de los sistemas, ya sean térmicos, mecánicos, hidráulicos, entre otros, se modelan matemáticamente mediante ecuaciones diferenciales parciales y ordinarias, las cuales generalmente requieren soluciones numéricas. Estas ecuaciones se derivan de los balances de masa, cantidad de movimiento, energía y especies (en presencia de reacciones químicas) del sistema que se desea modelar.

El propósito de este trabajo es desarrollar un modelo matemático que permita predecir con mayor precisión la composición del gas generado en un gasificador *downdraft* utilizando residuos de madera de Algarrobo. Esto se logrará mediante el control de las variables que influyen en el proceso.

El uso de modelos matemáticos en este contexto es fundamental debido a que permiten una predicción más precisa de los resultados del proceso de gasificación, lo que puede mejorar la eficiencia del sistema y la calidad del gas producido. Al utilizar modelos matemáticos, se pueden reducir los costos asociados con la experimentación física, que a menudo requiere equipos costosos y tiempo considerable. Mediante el control de variables clave, como la temperatura y la composición del agente gasificante, es posible optimizar el proceso de gasificación para obtener un gas con mayor poder calorífico y menor contenido de impurezas. La modelación matemática contribuye a un proceso más limpio y sostenible, minimizando la generación de subproductos no deseados y mejorando la eficiencia energética.

## 2. MÉTODOS Y METODOLOGÍA

El proceso de gasificación se modela utilizando ecuaciones diferenciales para describir los fenómenos de combustión y las reacciones químicas involucradas. Se identifican las especies gaseosas presentes en el proceso, tales como CO (monóxido de carbono), CO<sub>2</sub> (dióxido de carbono), H<sub>2</sub> (hidrógeno), CH<sub>4</sub> (metano), N<sub>2</sub> (nitrógeno), O<sub>2</sub> (oxígeno), alquitranes, agua y otros productos de gasificación.

Para cada especie involucrada, se formulan las ecuaciones de balance de masa, y para describir los cambios energéticos en el reactor de gasificación, se desarrollan las ecuaciones de balance de energía. Estas ecuaciones diferenciales se integran para obtener soluciones que describen cómo varían las concentraciones de las especies y la energía en el gasificador a lo largo del tiempo y el espacio.

Dentro del gasificador de lecho fijo, los procesos de transformación de la biomasa ocurren de manera independiente y secuencial a medida que la biomasa fluye a través del gasificador y su temperatura aumenta. Estos procesos, que incluyen dos fases, pueden modelarse de manera independiente y luego integrarse en el desarrollo del modelo general [6].

La metodología para determinar la composición del gas generado se basa en el uso del método de los volúmenes de control. Este método aplica los balances de masa, energía y cantidad de movimiento para cada volumen de control, permitiendo una discretización de las ecuaciones diferenciales sin necesidad de conocer previamente las formulaciones específicas para cada volumen [7]. Este enfoque no solo requiere un menor manejo matemático, sino que también facilita una mayor comprensión de los fenómenos físicos presentes.

Posteriormente, se aplica el método numérico más adecuado para cada volumen de control, siendo los elementos finitos y, dentro de estos, el método de diferencias finitas, los más utilizados. Este encauce permite una modelación precisa y eficiente del proceso de gasificación, optimizando el diseño y operación del gasificador.

### 2.1. Ecuaciones para los balances de especies y energía en las fases gaseosa y sólida

Es importante considerar que las propiedades de la fase sólida no afectan las propiedades de la fase gaseosa, salvo en lo que respecta a la dispersión. Con esto se aclara la independencia de las fases en la mayoría de los aspectos, lo que es crucial para entender el comportamiento del sistema.

El desarrollo de las ecuaciones de balance de especies en la dirección radial, bajo la suposición de una velocidad constante en tubo vacío a lo largo de la sección transversal del reactor, proporciona una base sólida para el análisis matemático del proceso de gasificación.

Al utilizar coordenadas cilíndricas para formular las ecuaciones de balance de energía y masa, se aprovecha la geometría del reactor, lo que facilita la modelación. Este enfoque elimina la complejidad adicional de las raíces cuadradas, haciendo el modelo más manejable y comprensible. La representación en coordenadas cilíndricas es particularmente útil para describir fenómenos en sistemas con simetría radial, como es el caso del reactor de gasificación.

La Fig. 1, que muestra el sistema de coordenadas utilizado, ayuda a visualizar y entender mejor la disposición espacial de las variables y los parámetros del modelo. Esto no solo mejora la precisión del modelo, sino que también facilita su interpretación y aplicación práctica.

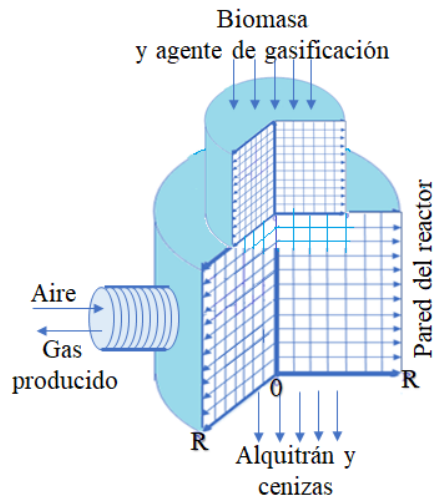


Fig. 1. Representación en coordenadas cilíndricas. Fuente: Elaboración propia.

En las ecuaciones de balance de la fase gaseosa, se asume que la presión total dentro del gasificador permanece constante y es igual a la presión atmosférica. Esta suposición simplifica significativamente los cálculos, ya que elimina la necesidad de considerar variaciones de presión que podrían complicar el modelo.

El balance de energía de esta fase se simplifica aún más al suponer que la transferencia de calor por dispersión en la dirección axial es despreciable. Esta suposición se basa en el hecho de que la transferencia de calor por dispersión es mucho menor que la transferencia de calor por convección, debido al alto flujo de gas. En un gasificador, el flujo de gas es generalmente elevado, lo que implica que la convección domina el proceso de transferencia de calor. Esto justifica la simplificación del modelo al ignorar la dispersión.

Además, se considera que la velocidad de los gases en la dirección radial es despreciable. Esto significa que la transferencia de calor por convección en esa dirección también es despreciable. Al eliminar la necesidad de considerar la transferencia de calor en la dirección radial, el modelo se simplifica aún más, permitiendo un análisis más directo y manejable del sistema. Esto es válido en sistemas donde el flujo principal es axial y las variaciones radiales son mínimas.

Estas suposiciones permiten desarrollar un modelo más manejable y menos complejo, facilitando el análisis y la interpretación de los resultados. Al centrarse en los mecanismos dominantes de transferencia de calor, se obtiene un modelo que es tanto preciso como práctico para aplicaciones ingenieriles. La ecuación general de balance de energía para la fase gaseosa es:

$$(cC_{p,m})^g \frac{\partial T^g}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_{r,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{ax,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} \right) + (cC_{p,m})^g w_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r} - (cC_{p,m})^g w_{ax}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h_{GP} A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^g \quad (1)$$

donde  $(cC_{p,m})^g$  corresponde a los gases albergados en los poros de la fase sólida,  $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_{r,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial r} \right)$  es la transferencia de calor por dispersión en la dirección radial,  $\frac{\partial}{\partial z} \left( D_{ax,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} \right)$  es transferencia de calor por dispersión en la dirección axial,  $(cC_{p,m})^g w_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r}$  la transferencia de calor por convección en la dirección radial,  $(cC_{p,m})^g w_{ax}^g \frac{\partial T^g}{\partial z}$  es transferencia de calor por convección en la dirección axial,  $c$  es la concentración total de la fase gaseosa,  $C_{p,m}$  la capacidad calorífica del gas,  $\frac{h_{GP} A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s)$  la transferencia de calor por convección entre la fase sólida y gaseosa teniendo en cuenta la porosidad del lecho. Este término es crucial para la resolución simultánea de la ecuación en ambas fases [6],  $q_{th}^g$  refiere la generación de calor por las reacciones químicas al interior del reactor en la fase gaseosa y  $A_{esp}$  es el área específica de transferencia, que representa el área de transferencia de calor entre las fases sólida y gaseosa por unidad de volumen.

$$q_{th}^g = \sum_{j=1}^n \Delta h_{r,m} r_{v,i} \quad (2)$$

$$A_{esp} = \frac{A_p n_p}{V_{total}} \quad (3)$$

$$A_p = \pi d_p^2 \quad (4)$$

$$n_p = \frac{V^s}{V_p} \quad (5)$$

El término  $\Delta h_{r,m}$  representa la entalpía de reacción de la fase gaseosa, mientras que  $r_{v,i}$  denota la velocidad de reacción. El área superficial de las partículas es  $A_p$ , se considera para partículas esféricas.

Utilizando el sistema de coordenadas, se pueden establecer las condiciones de frontera. En el punto medio del gasificador, el gradiente de temperatura desaparece debido a la simetría térmica, por tanto, se tiene  $r=0$  lo cual significa que  $\frac{\partial T^g}{\partial r} = 0$ .

La transferencia de calor por convección entre la pared y el gas en la pared del gasificador cuando  $r=R$  significa que:

$$\lambda_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r} = h_{wG} (T_w - T_R^g) \quad (6)$$

A la entrada del gasificador la fase gaseosa se encuentra a una temperatura establecida  $z=0$  que significa  $T^g = T_0$ .

A la salida del gasificador no se presenta transferencia de calor.  $z=L$  significa que  $\frac{\partial T^g}{\partial z} = 0$

Como condición inicial se tiene que la temperatura de la fase gaseosa es conocida,  $t=0$  significa que  $T_{m,n}^g = T_{in}^g$ .

La ecuación de balance de especies para cada componente  $i$  de la fase gaseosa es:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_{i,r} \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{i,ax} \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) + \frac{\partial (w_r^g c_i)}{\partial r} - \frac{\partial (w_{ax}^g c_i)}{\partial z} - \frac{\beta A_{esp}}{\varepsilon_b} (c_i^g - c_{i,sup}^s) \quad (7)$$

donde  $\frac{\partial c_i}{\partial t}$  representa la concentración para cada especie,  $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_{i,r} \frac{\partial c_i}{\partial r} \right)$  es transferencia de masa por dispersión en la dirección radial,  $D_{i,r}$  es la constante de difusión másica en esa dirección. Además se tiene  $\frac{\partial}{\partial z} \left( D_{i,ax} \frac{\partial c_i}{\partial z} \right)$  como la transferencia de masa por dispersión en la dirección axial,  $D_{i,ax}$  es la constante de difusión másica en esa dirección,  $\frac{\partial (w_r^g c_i)}{\partial r}$  es la transferencia de masa convección en la dirección radial,  $\frac{\partial (w_{ax}^g c_i)}{\partial z}$  transferencia de masa por convección en la dirección axial y  $\frac{\beta A_{esp}}{\varepsilon_b} (c_i^g - c_{i,sup}^s)$  es la transferencia de masa por convección entre la fase sólida y gaseosa teniendo en cuenta la porosidad del lecho.

En el balance de especies, se asume que la transferencia de masa por dispersión en la dirección axial es despreciable debido a que es significativamente menor que la transferencia por convección, la cual es

dominante debido al alto flujo de gas, lo que justifica la simplificación del modelo al ignorar la dispersión axial.

Además, se considera que la velocidad de los gases en la dirección radial es insignificante, lo que implica que la transferencia de masa por convección en esa dirección también es despreciable. Esto es razonable en muchos sistemas donde el flujo principal es axial y las variaciones radiales son mínimas. En el punto medio del gasificador, la simetría del equipo asegura que el gradiente de concentración desaparezca. Esta condición de frontera es crucial para simplificar el análisis.

Al centrarse en los mecanismos dominantes de transferencia de masa, se obtiene un modelo que es tanto preciso como práctico.

A la entrada del reactor la fase gaseosa se encuentra con una composición de entrada establecida  $z=0$  que significa que  $c_i^g = c_{i,in}^g$  y a la salida del gasificador no se presenta transferencia de calor por tanto  $z=L$  significa que  $\frac{\partial c_i^g}{\partial z} = 0$ .

La ecuación general del balance de energía para la fase sólida es:

$$(cC_{p,m})_e^s \frac{\partial T^s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \right) + (cC_{p,m})_e^s w_r^s \frac{\partial T^s}{\partial r} - (cC_{p,m})_e^s w_{ax}^s \frac{\partial T^s}{\partial z} - \frac{h_{GPA_{esp}}}{1 - \varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^s \quad (8)$$

donde  $(cC_{p,m})_e^s \frac{\partial T^s}{\partial t}$  representa la acumulación,  $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right)$  transferencia de calor por conducción en la dirección radial efectiva,  $\frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \right)$  es transferencia de calor por conducción en la dirección axial efectiva,  $(cC_{p,m})_e^s w_r^s \frac{\partial T^s}{\partial r}$  transferencia de calor por convección en la dirección radial,  $(cC_{p,m})_e^s w_{ax}^s \frac{\partial T^s}{\partial z}$  es la transferencia de calor por convección en la dirección axial,  $\frac{h_{GPA_{esp}}}{1 - \varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s)$  es la transferencia de calor de fase sólida a gaseosa teniendo en cuenta la porosidad del lecho y  $q_{th}^s$  representa la generación debido a las reacciones químicas al interior del reactor en la fase sólida, consumo energético.

En el balance de energía de la fase sólida, se asume que la transferencia de calor en la dirección radial ocurre únicamente por conducción, ya que no hay flujo de partículas en esa dirección. Esto es razonable en muchos sistemas donde las partículas están confinadas y no se mueven radialmente, lo que hace que la conducción sea el único mecanismo de transferencia de calor en esa dirección.

En la dirección axial, la transferencia de calor se produce tanto por conducción como por convección, debido a que, además de la conducción a través del material sólido, el movimiento de las partículas y el flujo de gas pueden contribuir significativamente a la transferencia de calor, obteniendo la ecuación:

$$(cC_{p,m})_e^s \frac{\partial T^s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \right) - (cC_{p,m})_e^s w_{ax}^s \frac{\partial T^s}{\partial z} - \frac{h_{GPA_{esp}}}{1 - \varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^s \quad (9)$$

Al considerar solo la conducción en la dirección radial y tanto la conducción como la convección en la dirección axial, se obtiene un modelo que refleja adecuadamente los mecanismos dominantes de transferencia de calor en cada dirección.

En el punto medio del gasificador, el gradiente de temperatura desaparece debido a la simetría del equipo,  $r=0$  significa que  $\frac{\partial T^s}{\partial r} = 0$ .

La transferencia de calor por conducción y radiación entre la pared y las partículas, en la pared del gasificador se manifiesta cuando  $r=R$  como  $\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} = (h_{WP} + h_{rad,WP})(T_W - T_R^s)$  siendo este término la transferencia de calor por conducción y radiación entre la pared y las partículas.

A la entrada del gasificador la biomasa se encuentra con la temperatura del ambiente circundante, o sea  $z=0$  significa que  $T^s = T_{amb}$ .

A la salida del gasificador no se presenta transferencia de calor,  $z=L$  significa que  $\frac{\partial T^e}{\partial z} = 0$ .

La condición inicial es que la temperatura de la fase sólida es conocida,  $t=0$  significa que  $T_{m,n}^s = T_0^s$ .

Según referencia [6], el balance de especies para la fase gaseosa contenida en los poros de la fase sólida se simplifica en la siguiente expresión:

$$r_{v,i} = \frac{\varepsilon_b}{1 - \varepsilon_b} \beta A_{esp} (c_i^g - c_{i,sup}^s) \quad (10)$$

Esta ecuación representa la transferencia de masa entre la fase gaseosa y los gases contenidos en los poros de la fase sólida y es válida suponiendo que no existen gradientes de concentración al interior de las partículas, es decir cuando la fase sólida se considera homogénea.

Para la condición inicial se tiene que la composición de la fase gaseosa contenida en los poros de la fase sólida es conocida e igual a la del agente de gasificación empleado.

## 2.2. Descripción de la metodología empleada

Los métodos de elementos finitos son una herramienta muy útil para resolver problemas complejos de transferencia de calor, permitiendo aproximar soluciones de ecuaciones diferenciales. Entre estos métodos se encuentra el de diferencias finitas, que se aplica en la modelación de gasificadores downdraft para resolver ecuaciones diferenciales parciales que describen el proceso de gasificación. A continuación, se presentan los pasos generales para su aplicación:

1. Se divide el espacio en intervalos finitos, creando una malla que cubre el dominio del problema. Cada nodo en la malla se conoce como un punto de control.
2. Se utilizan las ecuaciones del modelo para describir el comportamiento del proceso de gasificación. Estas ecuaciones se aplican a cada nodo en la malla y a cada intervalo de tiempo.
3. Las ecuaciones se discretizan, reemplazando las derivadas parciales por diferencias finitas, lo que transforma las ecuaciones en sistemas de ecuaciones algebraicas.
4. Se resuelve el sistema de ecuaciones algebraicas utilizando el método de Gauss para las matrices y el método de Newton. De este modo, se obtienen la temperatura y la composición del gas.
5. Finalmente, se comparan los resultados numéricos con datos experimentales para validar la precisión del modelo.

## 3. RESULTADOS

Conocer las propiedades físicas y químicas de la biomasa en sus fases sólida y gaseosa es fundamental para cualquier modelo de transferencia de calor y masa. Estas propiedades influyen directamente en el comportamiento del sistema y en la precisión de las predicciones del modelo. Además, es esencial conocer los coeficientes de transferencia de calor y masa en función de la temperatura y la composición, por lo que es crucial tener estos datos para realizar cálculos precisos por la variación que pueden ocasionar. Estos coeficientes determinan la eficiencia de los procesos de transferencia de energía y materia dentro del sistema.

### 3.1. Análisis Termogravimétrico de la biomasa

Se utilizó residuo de madera de Algarrobo debido a la disponibilidad de datos cinéticos de reacción y pruebas experimentales para validar el modelo [8].

Inicialmente, para cuantificar la producción de gas, se caracterizó la biomasa. El algarrobo, un árbol común de madera dura, es ampliamente utilizado para producir carbón de alta calidad. Las características de esta biomasa se obtuvieron mediante termogravimetría en el laboratorio especializado de la Universidad de Hasselt en Bélgica.

Las experiencias se desarrollaron en un equipo estándar TGA (Modelo TG-v5.2B) a presión atmosférica y en atmósfera de Nitrógeno,  $m = 10.32$  mg. Luego de tener tabulados los resultados se realizó un procesamiento estadístico de la data para caracterizarla utilizando el programa Statistica 12.0 [9], resultando:

Pérdida total de masa: 98,44 %  
 Contenido de cenizas: 1,56%  
 Humedad: 12%.

La biomasa presenta excelentes características para emplear como combustible por su bajo contenido en cenizas y de humedad en la calidad de las fracciones orgánicas analizadas. Este resultado se visualiza en la Fig. 2.

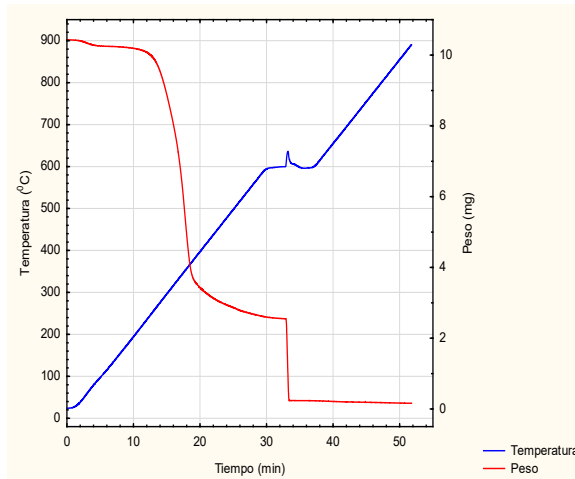


Fig. 2. Devolatilización del Algarrobo.  
Fuente: Elaboración propia.

Las variables independientes en el sistema son la presión y la temperatura, ya que, al ser intensivas, no dependen entre sí en el modelo presentado. Además, las propiedades del sólido también son independientes, pues dependen únicamente del material del sólido, cuya condición no se evalúa en este modelo.

Las variables dependientes incluyen la entalpía de reacción de la fase gaseosa, las propiedades del gas, la velocidad del gas y el coeficiente de película, ya que todas dependen del cálculo de la temperatura para determinar su valor.

Se determinó que el modelo tiene un grado de libertad, lo que significa algebraicamente que el sistema tiene infinitas soluciones. Sin embargo, como el modelo requiere una suposición inicial para la temperatura, es necesario calcularla para obtener las demás condiciones del modelo y realizar las iteraciones necesarias hasta que el modelo converja. Por lo tanto, la solución final depende de la suposición inicial de la temperatura, refiriéndose a un problema con condiciones iniciales.

Hacer una suposición para una variable desconocida en un sistema con un grado de libertad reduce el sistema a cero grados de libertad, llevando el modelo matemático a tener una única solución que cumple con la condición básica para su resolución.

El proceso finaliza cuando los cambios en las variables calculadas son tan pequeños que se considera que se ha alcanzado el estado estacionario. El error se calcula como la diferencia entre los valores absolutos de cada variable en cada iteración.

Las ecuaciones discretizadas se cumplen cuando los residuos calculados para cada nodo, en ambas fases, son cero. Sin embargo, los errores de redondeo entre iteraciones impiden que estos valores sean exactamente cero. Con una máquina de precisión infinita, se alcanzaría un residuo nulo después de cierto número de iteraciones. En la práctica, al trabajar con variables definidas con doble precisión, el residuo disminuirá entre iteraciones hasta estabilizarse en un valor muy pequeño ( $10^{-15}$ - $10^{-16}$ ). Se puede afirmar que el método iterativo convergerá en un momento determinado cuando todos los residuos calculados sean menores a un valor previamente establecido.

En este estudio, la solución se fijó con una precisión de 3 cifras decimales, lo que significa que las iteraciones se detienen cuando el error es menor que 0.0005.

### 3.2. Discretización de las ecuaciones

Para una validación teórica, es fundamental discretizar las ecuaciones utilizando el método de volúmenes de control y el método de diferencias finitas. La discretización es esencial porque transforma las ecuaciones diferenciales continuas en un sistema de ecuaciones algebraicas que pueden resolverse numéricamente y el



método de los volúmenes de control es particularmente útil porque conserva las propiedades físicas del sistema dentro de cada volumen de control.

Al aplicar el método de diferencias finitas, se aproximan las derivadas mediante diferencias entre los valores de la variable dependiente en los nodos de la malla, lo cual facilita la evaluación de las integrales resultantes al especificar perfiles de variación de la variable dependiente entre los puntos de la malla.

La solución obtenida del sistema de ecuaciones discretizadas es exacta en el sentido de que satisface las ecuaciones originales dentro de los límites de la discretización. Además, esta solución es independiente del tamaño de la malla, lo que significa que, aunque una malla más fina puede proporcionar una mayor precisión, la validez de la solución no depende del tamaño de la malla utilizada. Esto asegura que el modelo sea robusto y confiable para diferentes configuraciones de malla.

Este enfoque permite analizar cada tipo de nodo en la malla de manera detallada, como se muestra en la Fig. 3.

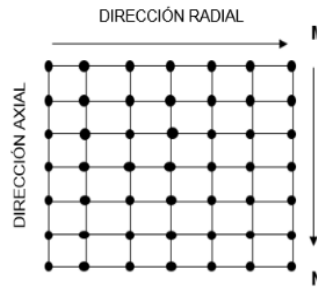


Fig. 3. Malla bidimensional para resolver las ecuaciones discretizadas. Fuente: Elaboración propia.

Se definen los nodos superiores como aquellos donde  $np=0$ ,  $0 \leq mp \leq m$ . En estos nodos la temperatura de las fases sólida y gaseosa se mantiene constante e igual a la temperatura ambiente. Esta condición es crucial para simplificar el modelo y asegurar que las condiciones de frontera sean manejables.

La discretización de la ecuación de balance de masa para la fase gaseosa se realiza de manera similar a las ecuaciones de balance de energía. Este enfoque es necesario porque permite transformar las ecuaciones diferenciales continuas en un sistema de ecuaciones algebraicas que pueden resolverse numéricamente teniendo en cuenta las ecuaciones de balance y condiciones de frontera planteadas.

$$\begin{aligned} & \frac{D_{r,th}^g}{r} \frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} + S(T) \left[ \frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} \right]^2 + D_{r,th}^g \left[ \frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m-1,n}}{\Delta r^2} \right]^2 \\ & + \frac{T_{m-1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} - (cC_{p,m})^g w_{ax}^g \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta z} - \frac{h_{GP} A_{esp}}{\epsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) \\ & - q_{th}^g \end{aligned} \quad (11)$$

Análogamente para la fase sólida la ecuación queda:

$$\begin{aligned} & \frac{\lambda_e^s}{r} \frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} + \lambda_e^s \frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m-1,n}}{\Delta r^2} + \lambda_e^s \frac{T_{m,n+1} - 2T_{m,n} + T_{m,n-1}}{\Delta z^2} \\ & - (cC_{p,m})_e^s w_{ax}^s \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta z} - \frac{h_{GP} A_{esp}}{1 - \epsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^g \end{aligned} \quad (12)$$

Este procedimiento se aplica a todas las ecuaciones diferenciales, generando una matriz. La matriz de temperatura en cada posición se calcula mediante las ecuaciones obtenidas en el balance de energía utilizando la discretización. Este proceso se repite y se analiza el cambio de temperatura entre iteraciones hasta que la desviación, definida por una función de error, sea menor al error prefijado. En ese punto, se detienen las iteraciones.

Para resolver las ecuaciones discretizadas, se utiliza el método de Gauss. En este método, cada nodo se visita en un orden específico y se calcula el nuevo valor de la variable de interés a partir de las ecuaciones

discretizadas. El cálculo del nuevo valor para un nodo específico requiere conocer los valores de sus nodos vecinos (norte, sur, este, oeste, de la otra fase y del tiempo anterior). Para los nodos vecinos que ya han sido visitados durante la iteración actual, se utiliza el valor de la variable de esa iteración. Sin embargo, para los nodos vecinos que aún no han sido visitados, se utiliza el valor de la iteración anterior. Este método requiere almacenar los campos de variables de la iteración actual ( $t + 1$ ) y los valores del instante de tiempo anterior ( $t$ ) para cada una de las fases.

Este enfoque permite manejar grandes sistemas de ecuaciones y garantiza que las soluciones converjan a valores precisos, siempre que el error sea menor al valor prefijado. Además, el almacenamiento de los campos de variables de iteraciones actuales y anteriores asegura que el método sea capaz de manejar las complejidades de los sistemas multiescala.

### 3.3. Parámetros y condiciones de operación del gasificador

Los parámetros empleados para las simulaciones se seleccionaron considerando las condiciones de operación de un gasificador de prueba existente en el laboratorio de la UNESP en Sao Paulo. Este equipo de prueba incluye un reactor tubular de acero calentado indirectamente, con un diámetro interno de 8,25 cm. El reactor está dividido en dos zonas: una de secado y pirólisis, y otra de gasificación.

La zona de secado y pirólisis se calienta mediante un intercambiador de calor tubular, por el cual fluye aire que se precalienta a través de un horno eléctrico que también calienta la zona de gasificación. Este horno puede alcanzar una temperatura máxima de 1400 K. La zona de secado y pirólisis tiene una longitud de 0,5 m, mientras que la zona de gasificación mide 1,0 m, dando una longitud total del reactor de 1,5 m.

Por la parte superior del reactor se introduce nitrógeno, que se utiliza como gas de barrido, y biomasa de manera continua, en función de la pérdida de masa del sólido presente en su interior. Los gases generados salen por la parte inferior del reactor para su posterior análisis.

### 3.4. Suposiciones para las simulaciones basadas en las condiciones de operación del reactor de prueba

Para las simulaciones, se hicieron las siguientes suposiciones basadas en las condiciones de operación del reactor de prueba:

1. **Dimensiones del gasificador:** El gasificador tiene un diámetro  $D=8,25$  cm y una longitud  $L = 1,5$  m.
2. **Condición inicial:** Al inicio del proceso, el reactor está lleno de biomasa.
3. **Tipo de biomasa:** Se utiliza madera de Algarrobo, cuyo contenido de humedad se determinó en un 12%. Esta madera se humedece previamente hasta alcanzar el valor establecido para aumentar la concentración de aire, que se emplea como agente de gasificación.
4. **Temperaturas de entrada:** En las dos fases sólida y gaseosa son iguales y constantes, fijadas en  $T=300$  K.
5. **Temperatura de la pared del gasificador:** La temperatura inicial de la pared es 300 K, y esta varía tanto con el tiempo como con la posición.
6. **Velocidad de la fase sólida:** A la salida del reactor es nula.
7. **Diámetro de las partículas:** El diámetro inicial de las partículas, consideradas de forma esférica, es de  $dp=0,02$  m.

Al definir parámetros específicos y condiciones iniciales, se asegura que los resultados de las simulaciones sean precisos y replicables y permiten una mejor comprensión de cómo varían las condiciones dentro del gasificador a lo largo del tiempo y del espacio. En la Fig. 4 se muestra la relación entre la temperatura axial y la longitud del gasificador, que se utilizó para la validación.

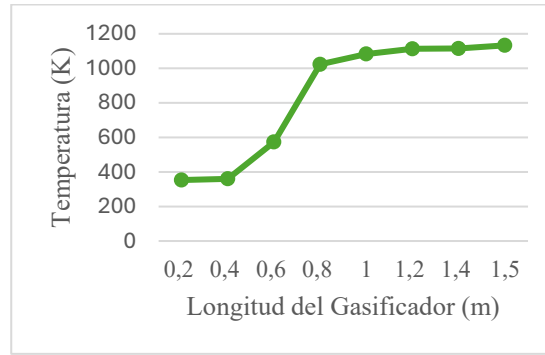


Fig. 4. Relación de la Temperatura axial ( $R/2$ ) y longitud del gasificador.  
Fuente: Elaboración propia.

Uno de los resultados arrojados por el modelo logrado se muestra en la Fig. 5 y es la relación de la temperatura axial ( $R/2$ ) y longitud del gasificador.

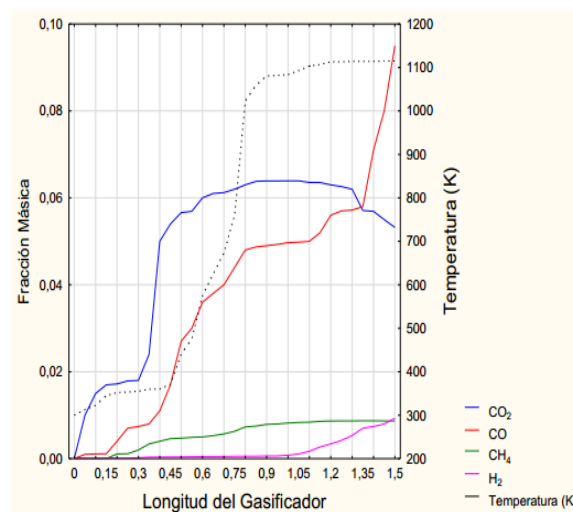


Fig. 5. Composición del gas producto para  $r=R/2$ .  
Fuente: Elaboración propia.

Se muestra la fracción molar de los diferentes componentes gaseosos formados que son el CO, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>, se encuentra el consumo de biomasa y la formación de fase volátil en donde se puede observar la influencia de la temperatura para  $r=R/2$ .

La disminución de la fracción molar de la biomasa facilita las reacciones de gasificación, lo que a su vez incrementa la conversión de hidrógeno (H<sub>2</sub>). Como resultado, se observa un aumento en la concentración de hidrógeno en el gas de síntesis, lo cual es altamente deseable para aplicaciones energéticas y químicas.

Utilizando el modelo, es posible predecir y optimizar este comportamiento en cualquier punto del gasificador, lo cual permite ajustar las condiciones operativas para maximizar la eficiencia del proceso y la producción de hidrógeno, mejorando así la viabilidad y sostenibilidad del sistema de gasificación.

#### 4. CONCLUSIONES

La modelación del proceso de gasificación utilizando la metodología de los volúmenes de control y los elementos finitos resultó ser una estrategia robusta y precisa. Al discretizar las ecuaciones diferenciales mediante diferencias finitas, se logra una descripción detallada de los fenómenos físicos y químicos

involucrados. Esto permitió analizar la dinámica del proceso al permitir dar seguimiento a la evolución de las variables a lo largo del tiempo y el espacio dentro del gasificador.

Se pudo determinar los perfiles de temperatura en diferentes puntos del sistema.

El modelo permite predecir la composición del gas generado sin necesidad de un analizador de gases, facilitando el control y la optimización del proceso. Permite ajustar parámetros operativos en tiempo real para mejorar la eficiencia y la producción de hidrógeno.

Este modelo no solo mejora la precisión en la descripción de los fenómenos, sino que también proporciona una herramienta valiosa para la optimización y control del proceso de gasificación

## AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue realizado gracias a los datos ofrecidos por los laboratorios de la Universidad Hasselt de Bélgica en colaboración con el Centro de Estudios de Energías Renovables de la Universidad de Oriente y la ejecución se realizó gracias al Proyecto CAPES-MES, en especial al grupo de investigación que coordina el Profesor Dr. José Luz Silveira, de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Estadual Paulista en Brasil.

## REFERENCIAS

- [1] A. Caballero-Chavarría, M.P. Rojas-Soto, M.M. Villalobos-Barquero, A. Davis-Barquero, “Simulación de gasificación de biomasa enriquecida con hidrocarburos”, *Tecnología en marcha*, 32, 60-70 (2019)
- [2] E.R. Gutiérrez-Gualotuña, J.A. Soria-Amancha, P.M. Tafur-Escanta, N. Rodríguez-Trujillo, “Modelos matemáticos de los parámetros energéticos de desempeño de gasificadores tipo downdraft mediante técnicas de regresión”, *Científica*, 23(1665-0654), 69-81 (2019)
- [3] L.I. Cristian, *Diseño del proceso de gasificación para los combustibles sólidos recuperados procedentes de una planta de tratamiento mecánico biológico*, 92 (2019)
- [4] M.R. Muñoz, «Evaluación de un proceso factible para la producción de syngas,» *Memoria Presentación de resultados de investigación Zafra*, 390-398 (2019 – 2020)
- [5] J.d.L. Briseño Escalante, C. Felipe Mendoza , F. López Sánchez, E. Lima Muñoz , “Valorización energética de los residuos sólidos mediante la tecnología de gasificación por plasma”, *Revista Tendencias en Docencia e Investigación en Química*, 6(191), 6 (2020)
- [6] P. Vicente, F. Albesa, M. Condori, “Estudio Experimental de Gasificación en un gasificador Downdraft prototipo”, *ASADES*, 4, 06.151-06.161 (2016)
- [7] P.A. Acosta Camargo, L.A. Chipatecua Hernández, “Modelación del Proceso de Gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto”, *Fundación Universidad de América*, vol. BOGOTÁ D.C. (2018)
- [8] C.A. Estrada Martínez, “Modelado unidimensional y multipartícula del proceso de gasificación de biomasa lignocelulósica en una planta industrial”, *Universidad de Valladolid* (2015)
- [9] E. d'Espaux Shelton, J.R. Copa Rey, J. Luz Silveira, “Characterization of the Syngas obtained from Carob Tree Wood to Run an Internal Combustion Engine”, *XI Latin-American Congress on Electricity Generation and Transmission*, Sao Paulo, Brasil (2015)