



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA ELÉCTRICA – CONTROL

REDUCCIÓN DE ORDEN EN MODELOS PARA REACTORES DE GASIFICACIÓN

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:
LUIS ALBERTO CANALES MEZA

TUTOR
DR. LUIS AGUSTÍN ÁLVAREZ-ICAZA LONGORIA, II-UNAM

MÉXICO, D.F. NOVIEMBRE 2013

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Maya Ortíz Paul Rolando

Secretario: Dr. Álvarez Calderón Jesús

Vocal: Dr. Álvarez-Icaza Longoria Luis Agustín

1er Suplente: Dr. Vicente y Rodríguez William

2o Suplente: Dr. Schaum Alexander

Lugar donde se realizó la tesis: INSTITUTO DE INGENIERÍA, UNAM

TUTOR DE TESIS:

DR. LUIS AGUSTÍN ÁLVAREZ-ICAZA LONGORIA

FIRMA

Índice general

Índice de figuras	I
Índice de tablas	III
1. Introducción	4
1.1. Clasificación de los gasificadores	5
1.2. Descripción del proceso de gasificación	9
1.2.1. Pirólisis	10
1.2.2. Combustión	10
1.2.3. Gasificación	11
1.3. Motivación	13
1.4. Objetivo	13
1.5. Contenido	13
2. Modelado y control de una clase de gasificadores	16
2.1. Estado del arte	16
2.2. Modelo dinámico de una clase de gasificadores	21
2.3. Métodos para la reducción de orden del modelo dinámico	24
2.3.1. Matriz estequiométrica	25
2.3.2. Perturbaciones singulares	26
2.4. Representación del modelo como un TRCTA	29
3. Malla espacial para modelos de gasificadores	31
3.1. Tipos de mallas	31
3.2. Planteamiento del problema	33
3.3. Método de factor de ponderación para la selección de una malla espacial	34
3.4. Tolerancia	37
4. Resultados	39
4.1. Caso de estudio	40
4.2. Aplicación del método de distribución espacial por factor de ponderación	45
4.3. Comportamiento espacial del modelo reducido	48
4.4. Comportamiento temporal del modelo reducido	51
5. Conclusiones	57

II

A. Ecuaciones constitutivas de la cinética química	59
B. Transferencia de masa, calor y propiedades de transporte del sistema.	62
C. Modelo TRCTA	66
D. Parámetros de cinética química, entalpías de reacción, composición de hidrocarburos y propiedades de transporte	67

Índice de figuras

1.1. Diagrama esquemático de un gasificador a) contracorriente y b) concurrente mostrando las reacciones que ocurren en cada zona.	7
1.2. a) Lecho fijo de partículas a través del cual el gas fluye. b) Lecho fluidizado burbujeante mostrando la circulación del gas alrededor de las burbujas. c) Lecho fluidizado turbulento. d) Lecho de transporte.	8
2.1. Reactor de gasificación de carbonizado equipado con dispositivos de medición, T :Temperatura	17
2.2. Gasificador ALSTOM con variables de salida y controladores PID por presión y temperatura.	19
2.3. Gasificador de lecho fijo y flujos paralelos.	23
2.4. Analogía entre discretización espacial de la malla y TRCTA con flujos de retromezclado.	29
4.1. Soluciones en estado estacionario presentados en Badillo et. al (2012), $n_\beta = 12$, $n_\pi = 3$	41
4.2. Solución en estado estacionario nominal y bandas de incertidumbre provocadas por variación paramétrica, $n_\beta = 12$	42
4.3. Errores en estado estacionario para la solución propuesta en Badillo et. al (2012) contra las bandas de incertidumbre provocadas por variación paramétrica con $n_\beta = 12$ y $n_\pi = 3$	43
4.4. Error ρ como función de n_π para mallas generadas de manera uniforme, mallas utilizadas en Badillo et. al (2012) y mallas obtenidas con el método de factor de ponderación contra las bandas de incertidumbre (líneas punteadas).	44
4.5. Curva generada por los vectores Δ_t y z_Δ y área total A_T , $N_\Pi = 14$	45
4.6. Aplicación del método de factor de ponderación para colocación de nodos para la iteración 1.	46
4.7. Aplicación del método de factor de ponderación para colocación de nodos para la iteración 2.	47
4.8. Aplicación del método de factor de ponderación para colocación de nodos para la iteración 5.	47
4.9. Soluciones en estado estacionario utilizando la malla obtenida a través del método de factor de ponderación $n_\beta = 12$, $n_\pi = 5$	49

4.10. Errores en estado estacionario para la solución utilizando la malla obtenida a través del método de factor de ponderación $n_\beta = 12$, $n_\pi = 5$ contra las bandas de incertidumbre (líneas punteadas).	50
4.11. Respuesta en el tiempo para el segundo nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de las bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.	52
4.12. Respuesta en el tiempo para el tercer nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de la bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.	53
4.13. Respuesta en el tiempo para el cuarto nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de la bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.	54
4.14. Respuesta en el tiempo para el quinto nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de la bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.	55
4.15. Respuesta en el tiempo para el sexto nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de la bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.	56

Índice de tablas

1.1. Procesos presentes en un gasificador.	9
1.2. Tabla de fuentes de las especies químicas contaminantes presentes en los gasificadores.	12
4.1. Valores a la salida del reactor de algunas variables involucradas. Resultados presentados en la literatura.	48
D.1. Características a la entrada de aire y biomasa, propiedades del lecho y dimensiones del reactor.	67
D.2. Tabla de parámetros de cinética química y entalpías de reacción.	68
D.3. Coeficientes estequiométricos $s_{i,j}$ para las componentes i de las fases gaseosa y sólida en las reacciones \mathcal{R}_j involucradas en el proceso de gasificación.	69

Resumen

La transformación de un combustible sólido carbonoso a un combustible gaseoso (gas de síntesis) ha provocado gran interés como una alternativa para la generación y conversión de energía, debido a la necesidad de incorporar más sistemas energéticos basados en combustibles renovables y sustentables. Con el propósito de interpretar matemáticamente dicha conversión en la actualidad los estudios realizados por Amundson y Arri (1978) y Caram y Fuentes (1982), para gasificación de carbón y de acuerdo con el modelado estándar de reactores químicos, más la discretización del espacio por diferencias finitas, son retomados y aplicados en los procesos de gasificación de biomasa. El resultado reciente de Nájera (2012) para un reactor tubular exotérmico, de un solo componente y temperatura, en donde el ordenamiento del conjunto resultante de ecuaciones diferenciales algebraicas obtenidas de la discretización espacial por diferencias finitas del modelo distribuido produce un modelo que representa un tren de reactores continuos de tanque agitado (TRCTA) interconectados. En este trabajo, donde los volúmenes de cada tanque son considerados iguales ($V_1 = V_2 = \dots = V_N$), el análisis de esta representación exhibe un comportamiento cualitativo similar (multiplicidad de estados de equilibrio, fenómenos bifurcación) al que presenta un gasificador de lecho móvil. En el modelo distribuido multicomponente de un gasificador llevado a la representación de TRCTA presentado por Badillo et al. (2012), además de consideraciones estequiométricas la fase gaseosa se encuentra en estado cuasi-estacionario. Se obtiene reducción significativa en el orden del sistema discretizado al considerar volúmenes distintos. El número de tanques y sus volúmenes se eligen en función del objetivo de modelado y de manera heurística. En este trabajo se da un primer paso hacia la obtención de manera sistemática del número y volumen de los tanques del TRCTA para el modelo que representa la dinámica de un reactor tubular de gasificación. Se desarrolla un método de elección de los volúmenes. La reducción en el número de tanques es motivada por la conveniencia de obtener un modelo de menor dimensión que represente el fenómeno original dentro de una banda de incertidumbre paramétrica predeterminada. Estos modelos de menor dimensión pueden ser utilizados para el diseño del equipo, determinación de la colocación de sensores, control y optimización del proceso. La propuesta del método está basada en la generación de un vector que concentra las variaciones de las variables significativas a lo largo del reactor para un instante de tiempo. La asignación de los volúmenes de cada tanque del TRCTA es determinada por el área contenida bajo este vector y una cobertura espacial apropiada. El método es sencillo e intuitivo. La aplicación del método es presentada para un caso de estudio, donde se concluye que para representar el comportamiento nominal del sistema, con un error de aproximación establecido del 4%, son necesarios 5 tanques para el TRCTA.

Capítulo 1

Introducción

La gasificación es un conjunto de procesos en los que una fuente de carbono sólida o líquida reacciona con oxígeno y vapor de agua produciendo un gas combustible que puede ser empleado en diversas aplicaciones. Un reactor de gasificación, o también llamado gasificador, es esencialmente un reactor en donde tienen lugar procesos físicos y químicos complejos y un combustible sólido (biomasa, carbón mineral, residuos sólidos, etc.) es secado, calentado, pirolizado, parcialmente oxidado y reducido dentro del reactor cuando fluye a través de él. Aunque hay una superposición considerable, muchos fabricantes de estos equipos consideran que cada proceso puede ser visto como ocupando una zona separada en la que tienen lugar cada una de las reacciones químicas y térmicas. Lo interesante de estos reactores es que una vez que el combustible sólido ha pasado a través del reactor bajo ciertas condiciones, este puede ser convertido a un combustible gaseoso llamado *gas de síntesis*, compuesto en su mayoría por monóxido de carbono, dióxido de carbono, vapor de agua, metano e hidrógeno. De esta manera es que el proceso de gasificación resulta atractivo debido a que es posible utilizar materiales de escaso valor comercial para que a partir de la energía calórica del gas de síntesis sea posible generar energía eléctrica con alta eficiencia y baja producción de gases de efecto invernadero a un costo capital relativamente bajo.

De forma general Badillo (2009) define un gasificador como un reactor de conversión termoquímica en donde una fuente de carbono sólida/líquida reacciona con un agente oxidante (O_2 puro o aire) y un agente gasificante (CO_2 , H_2O , H_2) produciendo un combustible gaseoso con una composición química simple (H_2 , CO , CO_2 principalmente) un valor calórico utilizable ($5 - 10MJ/kg$) y de fácil manejo conocido como *gas de síntesis*.

Los orígenes del proceso de gasificación se sitúan en Francia e Inglaterra en el siglo XIX donde se empleaba para la producción de un gas combustible cuyo uso era doméstico. Durante la Primera Guerra Mundial su uso se extendió hacia la fabricación de motores alimentados por biomasa o carbón para vehículos automotores, barcos, trenes y generadores de energía eléctrica de pequeña escala. Sin embargo, la llegada de combustibles fósiles relativamente de menor costo y fácil procesamiento y adecuación para su uso final desplazaron a los gasificadores de la industria energética. En el inicio de la segunda Guerra Mundial surgió un interés por formas alternativas de producir combustibles, retomando el uso de gasificadores

en la industria automotriz. Un caso destacable de este hecho surgió en Suecia, donde en 1943 alrededor del 90 % de los vehículos contaban con un motor basado en gasificador. En el periodo de posguerra, la baja en los precios de la gasolina motivó el abandono del desarrollo de tecnologías de gasificación por parte de la industria automotriz (Reed y Das 1988).

No obstante, debido a la problemática actual relacionada con los combustibles derivados del petróleo, las tecnologías de gasificación han sido redescubiertas recientemente como una fuente de energía alternativa que ofrece ventajas sobre la combustión o quemado directo de combustibles fósiles como la gasolina y el carbón. En la práctica es posible convertir del 60 % al 90 % de la energía contenida en la biomasa a energía en forma de gas.

Considerando que la principal fuente de contaminación del aire es derivada de la quema de combustibles fósiles (boilers, motores, reactores u otros dispositivos) que producen emisiones de gases contaminantes como: Óxidos de azufre (SO_2), Óxidos de Nitrogeno (Óxido Nítrico (NO) y Dióxido de Nitrógeno (N_2O)), Óxidos de Carbono (Monóxido de Carbono (CO) y Dióxido de Carbono (CO_2)), Mercurio (Hg) y compuestos volátiles orgánicos, para los gasificadores existen mecanismos para la reducción de emisiones de gases con efecto adverso al medio ambiente (Tabla 1.2), esto permite cumplir con los niveles de emisiones contaminantes (Basu 2006). En la actualidad, existe una tendencia en los diferentes campos de generación de energía en la que se busca incrementar la eficiencia termodinámica de la plantas agregando calor a temperaturas y presiones de operación altas, basado en que existe una correlación clara entre el aumento en la eficiencia y la reducción de emisiones y gases de efecto invernadero, por lo que los procesos de gasificación tienen un gran futuro como una fuente de generación de energía alternativa.

1.1. Clasificación de los gasificadores

En la literatura existen diversas formas de clasificar los gasificadores, algunas de las más comunes se enlistan a continuación (Badillo 2009):

- **Fuente de energía térmica del proceso de gasificación:** *Directa*, cuando la fuente de energía térmica principal es el calor producido en la oxidación parcial del combustible sólido. *Indirecta*, cuando la energía calórica es proporcionada por una fuente externa funcionando como intercambiador de calor.
- **Estado termodinámico de operación:** Basado en el punto crítico de operación definido como el valor de la temperatura y presión cuando un líquido tiene la misma densidad que su fase gaseosa correspondiente. *Subcrítico*, la presión y temperatura del gasificador se encuentran abajo del punto crítico del agente gasificante dominante: vapor de agua (Presión de 220.9(bar) y temperatura de 374°C). *Supercrítico*, la presión y temperatura del gasificador se encuentra por encima del punto crítico.
- **Movimiento relativo de los gases y el combustible sólido.** *Flujos paralelos (downdraft o concurrent)*, la fase sólida y la fase gaseosa se desplazan de forma des-

cedente. *Flujos contracorriente (updraft o countercurrent)*, la fase sólida se desplaza de forma descendente mientras que los gases lo hacen en sentido ascendente.

Caram y Fuentes (1982) mencionan que el gasificador de flujos en contracorriente puede ofrecer alta eficiencia térmica y de conversión del carbonizado, baja contaminación de gases con sólidos, y es capaz de operar en elevadas presiones. Sin embargo, algunas desventajas son la baja capacidad, una pobre adaptabilidad a diferentes tipos de combustible sólido y contaminación de gases por alquitranes. La principal limitación de esta configuración son las altas temperaturas impuestas por la fusión de cenizas además de las grandes cantidades de vapor de agua necesarias para controlar la zona de combustión produciendo un decremento de la eficiencia térmica.

Aunque el significado los términos “contracorriente” y “paralelos” parecieran ser triviales, en la práctica, las diferencias radican en que los gasificadores contracorriente toleran alta humedad en el combustible alimentado, lo que produce ventajas para producir gas que será utilizado directamente en un quemador, sin embargo, esta clase de gasificador produce de 5% a 20% de alquitranes, lo que significa que el gas de síntesis producido es inapropiado en el uso de motores de combustión. Por otro lado, los gasificadores de flujos concurrentes regularmente producen menos del 1% de alquitranes, reflejándose en la pureza del gas de síntesis y favoreciendo su uso en motores de combustión.

En el gasificador de flujos a contracorriente (Fig. 1.1a), la biomasa entra a través de un sello de aire en la cima del reactor y desciende dentro de una corriente de gas caliente. En la sección de pirólisis, el gas caliente piroliza la biomasa produciendo alquitranes, carbonizado y algunos gases, en la zona de reducción el carbonizado reacciona con el CO_2 y el H_2O para producir CO y H_2 , finalmente, bajo la zona de reducción el aire entrante quema el carbonizado para producir CO_2 y calor. Cabe mencionar, que la combustión hacia CO_2 es exotérmica, y el calor producido en el gas es absorbido en las reacciones endotérmicas de pirólisis y reducción.

En el caso de los gasificadores de flujos paralelos (Fig. 1.1b), el aire contacta el carbonizado y pasa la zona de combustión para después tener contacto con la biomasa que será pirolizada. El calor provocado por la combustión mantiene la zona de pirólisis. Al final de la zona de pirólisis, los gases consisten muchas veces de CO_2 , H_2O , CO y H_2 produciendo la mayor parte de los gases combustibles generados durante la gasificación de corriente descendente y al mismo tiempo consume 99% de los alquitranes. Aunque el gasificador de lecho fijo y flujos concurrentes es ampliamente usado, la principal desventaja es que no puede ser llevado a grandes escalas debido a que el aire entrando en los lados del reactor sería incapaz de penetrar a lo largo del diámetro del lecho.

- Tipo de agente oxidante utilizado.** *Aire*, el medio de gasificación y reactivo oxidante es el aire. Este tipo de gasificación produce un gas de síntesis de bajo valor calórico (de 3 a 6 (MJ/m^3)) debido al alto contenido de disolventes como el nitrógeno en el aire. *Oxígeno*, El reactivo oxidante y medio de gasificación es oxígeno puro por lo que el gas de síntesis producido posee un mayor valor calórico comparado con el

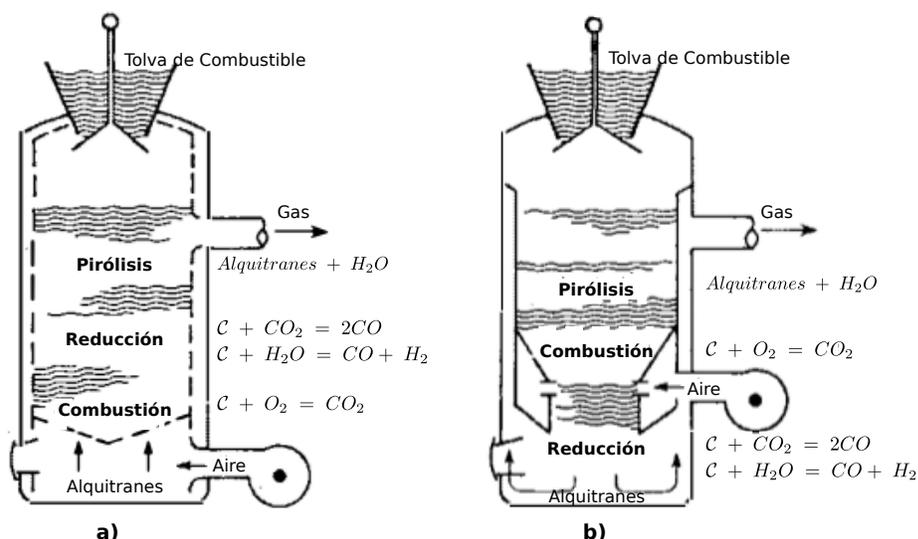


Figura 1.1: Diagrama esquemático de un gasificador a) contracorriente y b) concurrente mostrando las reacciones que ocurren en cada zona.

gasificador de aire (de 10 a 12 (MJ/m^3)). Aire/Vapor de agua y Oxígeno/Vapor de agua, en ambos casos podría agregarse vapor de agua para regular la velocidad de reacción de oxidación.

Basu (2006) considera otra clasificación ligada al estado de fluidización definido como la operación a través de la cual los sólidos finos (fase sólida) se comportan como en un estado líquido a través del contacto con la fase gaseosa formando un "lecho". Una propiedad de este lecho es que la fuerza de gravedad sobre las partículas fluidizadas es compensada con el arrastre del flujo ascendente del gas, manteniendo las partículas en una condición semisuspendida y mostrando un comportamiento similar a un líquido con las siguientes características:

- La presión estática a alguna altura es aproximadamente igual a la del peso del lecho sólido por unidad de área transversal en ese nivel.
- Un objeto más denso que el lecho se hundirá, mientras que uno más ligero flotará sobre el lecho.
- Los sólidos del lecho podrán ser drenados como un líquido.
- El lecho en la parte superior mantiene un nivel horizontal y también toma la forma del contenedor.
- Las partículas están bien mezcladas y el lecho mantiene una temperatura cercanamente uniforme cuando se calienta.

Bajo el criterio de fluidización, los gasificadores pueden ser clasificados dependiendo de la velocidad a la que fluye la fase gaseosa a través de la fase sólida (Basu 2006), conforme la velocidad de la fase gaseosa aumenta se pueden tener los siguientes tipos de gasificadores:

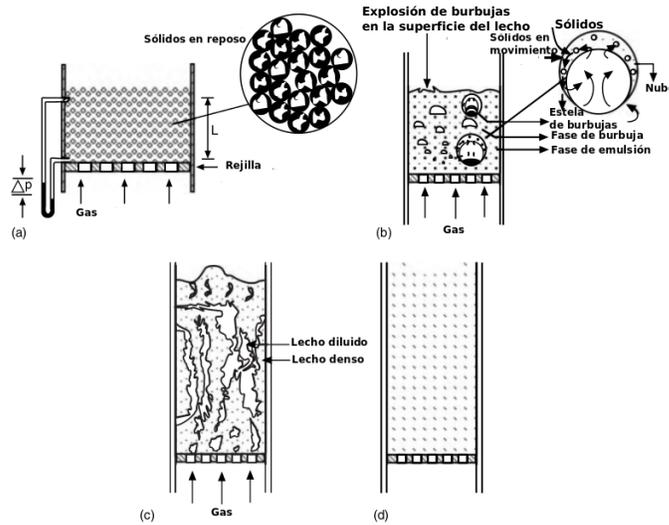


Figura 1.2: a) Lecho fijo de partículas a través del cual el gas fluye. b) Lecho fluidizado burbujeante mostrando la circulación del gas alrededor de las burbujas. c) Lecho fluidizado turbulento. d) Lecho de transporte.

Lecho fijo o empaquetado. Se refiere a un lecho de partículas sólidas reposando sobre la rejilla, a través del cual el gas fluye (Fig. 1.2a). Las partículas no se mueven entre sí y el gas fluye a través del lecho empaquetado de sólidos ejerciendo una fuerza de arrastre sobre las partículas y causando una caída de presión a través del lecho.

Lecho fluidizado burbujeante. Cuando se incrementa la velocidad superficial de la fase gaseosa en el lecho fijo, la caída de presión aumenta hasta que la velocidad superficial del gas alcanza un valor crítico conocido como *velocidad mínima de fluidización* (V_{mf}) y la fuerza de arrastre del gas es igual al peso de las partículas menos la fuerza que suspende las partículas en un estado incipiente de fluidización (Fig. 1.2b). Al elevar la velocidad superficial del gas por encima de a velocidad mínima de fluidización hasta un punto conocido como *velocidad mínima de burbujeo* (V_{mb}) el exceso del gas en la suspensión del sólido genera burbujas.

Lecho turbulento. Cuando la velocidad de la fase gaseosa a través de un lecho fluidizado burbujeante alcanza la velocidad mínima de burbujeo, el lecho comienza a expandirse y un incremento sostenido en la velocidad de la fase gaseosa podría eventualmente inducir un cambio en la expansión del lecho, iniciando una transición al nuevo régimen de lecho turbulento. En este régimen las burbujas pierden su identidad debido a la rápida fusión y a su rompimiento. Esto resulta en una violenta actividad y rápida expansión (Fig. 1.2c).

Lecho rápido. Es una suspensión sólido-gas de alta velocidad mantenida con una velocidad del gas fluidizante superior a la velocidad terminal de las partículas individuales. En este estado hidrodinámico las partículas tienen una tasa de reflujo hacia la base del reactor que garantiza un nivel de uniformidad espacial de la temperatura en el gasificador. Este régimen hidrodinámico se caracteriza por la formación de aglomerados de partículas que circulan a lo largo de la suspensión promoviendo un buen transporte de calor y masa. Esta condición se presenta cuando la cantidad de sólidos aglomerados aumenta, acumulándose en la columna y provocando una obstrucción del flujo del gas que se ve reflejado en un incremento abrupto en la presión. La velocidad correspondiente a la caída de presión mínima en el lecho sólido-gas para una tasa de circulación de sólidos (velocidad de la partícula) dada es denotada como *velocidad de transporte*. Esta velocidad constituye un punto de transición entre el régimen de transporte neumático y régimen de fluidización rápida.

Lecho de transporte. Existe migración de gran cantidad de partículas fuera del gasificador debido a la acción de la fuerza de arrastre del flujo de gas saliente. El lecho fluidizado y el transporte neumático o de flujo por arrastre son regímenes integrantes de esta categoría.

En Reed y Das (1988) se menciona que los gasificadores más importantes son los de lecho fijo en su configuración de flujos contracorriente y flujos paralelo. Aunque los gasificadores son equipos relativamente sencillos en sus mecanismos de alimentación y purificación del gas los principios termodinámicos que dictan la temperatura, suministro de aire y otras variables no son triviales.

1.2. Descripción del proceso de gasificación

Basu (2006) menciona que en un gasificador se llevan a cabo diferentes procesos fisicoquímicos a diferentes rangos de temperatura (Tabla 1.1).

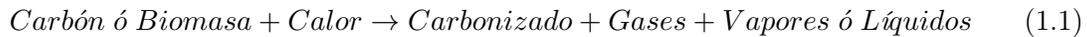
1. Secado	$> 420 K$
2. Pirólisis (devolatilización)	$420 - 970 K$
3. Combustión	$970 - 1770 K$
4. Reducción	$1070 - 1370 K$

Tabla 1.1: Procesos presentes en un gasificador.

Los procesos 1,2 y 4 absorben el calor proveniente del proceso *exotérmico* de combustión. En el proceso de secado, la humedad en el combustible sólido se evapora. El proceso de pirólisis separa el vapor de agua, líquidos orgánicos y gases no condensables del carbonizado (carbón sólido del combustible). El proceso de combustión oxida el combustible mientras que el proceso de gasificación lo reduce a gases combustibles en una reacción endotérmica.

1.2.1. Pirólisis

El proceso de pirólisis o devolatilización consta de una serie de complejos eventos físicos y químicos, el cual comienza lentamente a una temperatura menor a los $620^\circ K$, acelerándose casi instantáneamente a $970^\circ K$. La composición de los productos es función de la temperatura, presión y composición del gas durante la devolatilización. Este proceso es iniciado alrededor de los $500^\circ K$, cuando los componentes (lignina en la biomasa o volátiles en el carbón) son térmicamente inestables y se desprenden del combustible sólido evaporándose con otros componentes volátiles. De manera general, el proceso se puede representar por la siguiente reacción:



El carbón y biomasa están compuestos de coque o cenizas, monóxido de carbono (CO), metano (CH_4), humedad (H_2O) y dióxido de carbono (CO_2), mientras que los líquidos o vapores producidos son principalmente alquitranes. Debido a la viscosidad de los alquitranes, estos representan un desafío para los componentes de los equipos de gasificación como filtros, motores, etc. El proceso de pirólisis principalmente genera tres productos:

1. Gases ligeros como: H_2 , CO , CO_2 , H_2O , CH_4 .
2. Alquitranes (T), un líquido viscoso y corrosivo compuesto por moléculas pesadas.
3. Carbonizado (C), un residuo sólido principalmente conteniendo Carbón.

Di Blasi (2008) afirma que en la literatura se suele simplificar la red de reacciones de la pirólisis de biomasa en dos reacciones químicas secuenciales:

1. Pirólisis del combustible sólido (pirólisis primaria).
2. Descomposición térmica de los alquitranes (pirólisis secundaria).

1.2.2. Combustión

La oxidación o combustión del carbonizado es una de las reacciones más importantes que se llevan a cabo dentro de un gasificador ya que esta provee la energía térmica necesaria para las reacciones endotérmicas, con base en la reacción de los combustibles presentes y el oxígeno suministrado al gasificador. Esta reacción da como resultado la formación de CO_2 y H_2O los cuales generan la reducción del carbonizado producido de la pirólisis. Una de las reacciones de combustión es la oxidación del carbonizado produciendo el dióxido de carbono.



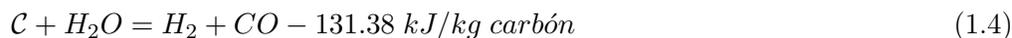
La otra reacción de combustión es la oxidación del hidrógeno en forma de combustible para producir vapor de agua.



1.2.3. Gasificación

La gasificación involucra una serie de reacciones endotérmicas a través del calor producido en las reacciones de combustión. La gasificación produce gases combustibles tales como hidrógeno, monóxido de carbono y metano a través de cuatro reacciones principales:

- **Water-Gas Reaction.** Es la oxidación parcial del carbón con el vapor de agua. El vapor de agua reacciona con el carbonizado caliente de acuerdo a la reacción agua-gas heterogénea.



- **Boudouard Reaction.** El dióxido de carbono presente en el gasificador reacciona con el carbonizado para producir CO de acuerdo a la siguiente reacción endotérmica, conocida como la *reacción de Boudouard*:



- **Shift conversion.** El valor calórico del hidrógeno es más alto que el del monóxido de carbono. Por lo tanto, la reducción del vapor de agua con monóxido de carbono produce hidrógeno:



Esta reacción endotérmica, conocida como *water-gas shift*, resulta en un incremento en la relación de hidrógeno con el monóxido de carbono en el gas, y es empleada en la fabricación del gas de síntesis.

- **Methanation.** El metano podría también formarse en el gasificador a través de la siguiente reacción:



Esta reacción puede ser acelerada por un catalizador basado en níquel. La formación de metano es preferida especialmente cuando los productos de la gasificación serán usados como alimentación para otros procesos químicos.

El apéndice A muestra a detalle las ecuaciones constitutivas para las especies químicas que intervienen en las reacciones consideradas en este trabajo.

Especies	Fuentes	Mecanismos de reducción de la emisión
Dióxido Sulfúrico (SO_2) y sus derivados	<ul style="list-style-type: none"> · Productos de la reacciones de pirólisis. El azufre liberado es oxidado a temperaturas dentro del rango de 800 – 900°C produciendo Dióxido de Azufre. · Reacciones de sulfuración del SO_2. La materia mineral o inorgánica del combustible sólido puede contener Óxido de Calcio CaO que absorbe parte del SO_2 con ayuda del Oxígeno produciendo Sulfato de Calcio $CaSO_4$. · Reacciones de oxidación del SO_2. Parte del SO_2 es oxidado en Trióxido de Azufre SO_3 a temperaturas y presiones altas que a su vez reacciona con la humedad y forma. Ácido Sulfúrico H_2SO_4. 	<ul style="list-style-type: none"> · Absorción de Dióxido de azufre por piedra Caliza ($CaCO_3$) o Dolomita ($CaCO_3 \cdot MgCO_3$) en dos pasos de reacción: Calcinación y Sulfatación. Su desempeño está en función de las variables operacionales del reactor: temperatura y presión de combustión, la densidad del lecho, tiempo de residencia del gas (determinado por la altura del reactor), tiempo de residencia del sólido, porosidad y tamaño de partícula absorbente.
Óxidos de Nitrógeno (NO y NO_2)	<ul style="list-style-type: none"> · Reacciones de oxidación del Nitrógeno proveniente del aire. La reacción de oxidación del Nitrógeno atmosférico se presenta de manera significativa a temperaturas por arriba de 1540°C. · Reacciones de oxidación del Nitrógeno de enlace contenido en el combustible sólido liberado por el procesos de pirólisis en dos formas: 1) El Nitrógeno unido al carbonizado, el cual es oxidado por medio de una serie de reacciones en NO_x. 2) El Nitrógeno volátil que aparece como Amoniaco es reducido en NO_x por medio de un conjunto de reacciones en paralelo con la intervención del Óxido de Calcio (CaO), piedra caliza $CaCO_4$ y carbonizado como catalizadores. 	<ul style="list-style-type: none"> · Disminución de la temperatura de combustión. · Introducción de un contraflujo de aire adicional al flujo primario entrante de aire. · Inyección de Amoniaco al reactor en la zona de recirculación de sólidos. · Disminución de exceso de aire alimentado. · Inyección de amoniaco en el reactor por medio de un reductor catalítico en flujo descendente.
Óxido Nitroso (N_2O)	<ul style="list-style-type: none"> · Reacción de reducción del Óxido Nítrico por el carbonizado. · Oxidación directa del Nitrógeno del carbonizado en temperaturas de combustión. · La combustión intermedia del volátil Cianuro de Hidrógeno HCN proveniente del Nitrogeno volátil liberado por las reacciones de pirólisis ha demostrado ser una fuente muy importante de la formación del N_2O. Una vez oxidado el HCN el producto intermedio es un Cianato NCO que reacciona con el Monóxido de Nitrogeno NO para formar N_2O y CO. Emisión significativa en el rango de temperaturas de combustión 800 – 900°C. 	<ul style="list-style-type: none"> · Control de la velocidad de devolatilización. · Aumentar las temperaturas de combustión en el ciclón de un reactor de lecho fluidizado. · Distribuir la alimentación del aire en dos flujos. · La presencia de piedra caliza calcinada CaO. · Combustibles sólidos con alto contenido de volátiles como la biomasa.
Mercurio (Hg)	<ul style="list-style-type: none"> · Es un gas volátil proveniente de la pirólisis. 	<ul style="list-style-type: none"> · Inyección de absorbente en el flujo entrante de aire (Carbón activado, Bromina, Polisulfuro). · Oxidación electro-catalítica (reducción de emisiones de NO_x, SO_2, partículas y Mercurio). Compuesto por 3 componentes: reactor de descarga, depurador de gases basado en Amoniaco y un precipitador electrostático. · Remoción del Mercurio del combustible previa combustión.
Óxidos de Carbono (CO y CO_2)	<ul style="list-style-type: none"> · Reacciones de pirólisis. · Reacciones de oxidación de especies volátiles. · Reacciones de oxidación y gasificación del carbonizado. · Reacción de calcinación del proceso de absorción de SO_2 por piedra caliza. 	<ul style="list-style-type: none"> · Aumento de la temperatura de combustión. · Reducción de la cantidad de absorción de Azufre alimentada por medio de rehidratación del mismo vapor de agua.

Tabla 1.2: Tabla de fuentes de las especies químicas contaminantes presentes en los gasificadores.

1.3. Motivación

La problemática actual en la disposición de combustibles ha provocado un gran interés en las tecnologías de gasificación como una fuente de energía alternativa. Como reflejo de esta situación, diversos investigadores presentan en la literatura abierta modelos matemáticos que representan el comportamiento dinámico espacial y temporal para diferentes configuraciones o tipos de gasificadores. Aún existe, sin embargo, un vacío considerable en las formas de controlar el desempeño del reactor, ya que la dinámica de los fenómenos fisicoquímicos no es totalmente entendida y empleada para lograr la autonomía del proceso, principalmente por la alta dimensionalidad del modelo matemático. Por este motivo, lo que se busca en este trabajo es proponer una metodología sistemática para reducir el orden del modelo matemático considerando como grado de libertad la asignación del número de tanques y su volumen en la representación de un reactor de gasificador descrito por un tren de reactores continuos de tanque agitado (TRCTA), tal que, la estructura del modelo reducido sirva para mejorar el diseño de los esquemas de control de las variables críticas del proceso, las condiciones operacionales, la eficiencia del proceso, la seguridad y la posición de los elementos de medición en el reactor.

1.4. Objetivo

Con la idea de utilizar modelos matemáticos reducidos para el análisis de sistemas y el desarrollo de esquemas de control basados en modelo, el objetivo de este trabajo es proponer una metodología para la asignación del número mínimo de tanques y el volumen correspondiente de un tren de reactores continuos de tanque agitado (TRCTA), que logre reproducir cualitativa y cuantitativamente la dinámica espacial del modelo dinámico de un gasificador de biomasa de lecho fijo.

1.5. Contenido

En el capítulo 2 se presenta el estado del arte del proceso de gasificación, se exponen las diferentes formas en las que el proceso se ha modelado, así como las herramientas utilizadas para resolver el problema de control del proceso. Se plantean algunas razones por las cuales el proceso de gasificación no se ha consolidado en las áreas de generación eléctrica. En la sección 2.2 se describe el modelo dinámico distribuido de una clase de gasificadores, así como las herramientas de análisis estequiométrico y de perturbaciones singulares aplicadas a este modelo original. Finalmente, en la sección 2.4 se presenta el modelo en el cual se basa este trabajo.

El capítulo 3 muestra algunos algoritmos de elección de malla existentes en la literatura, así como estudios previos dirigidos al reactor de gasificación (sección 3.1). En la sección 3.3 se presenta el método de colocación de nodos por factor de ponderación que da solución al problema planteado en la sección 3.2. Por último, se presenta una ecuación que relacio-

na el error de aproximación del modelo reducido con el número de nodos de la malla espacial.

Finalmente, el capítulo 4 presenta el caso de estudio, al que será aplicado el método de factor de ponderación (sección 4.1). La sección 4.2 describe a detalle la aplicación del método de factor de ponderación dando como resultado la malla espacial para el modelo reducido. En la sección 4.3 se presentan los perfiles espaciales de las variables involucradas en el proceso de gasificación comparadas con el modelo nominal. Finalmente, en la sección 4.4 se compara el comportamiento transitorio del modelo reducido con el modelo nominal. En el capítulo final se presentan las conclusiones de este trabajo.

Capítulo 2

Modelado y control de una clase de gasificadores

En la actualidad el proceso de gasificación de biomasa no se ha consolidado como una tecnología madura, ya que en la mayoría de los mercados no puede competir con los otros métodos de conversión de energía. En Ruiz et al. (2013) se habla de los obstáculos que no han permitido el desarrollo definitivo de esta tecnología para convertirse en una forma atractiva de generar electricidad. En la sección 2.1 se da una breve introducción acerca de la actualidad del proceso de gasificación, así como de las dificultades aún existentes relacionadas con el control del proceso. La sección 2.2 describe el modelo presentado en Badillo et al. (2012) así como las herramientas utilizadas para la reducción de orden y rigidez del modelo original. Finalmente en la última sección se presenta el modelo reducido del gasificador en estudio.

2.1. Estado del arte

Al día de hoy, los procesos de gasificación integrados a ciclos combinados (IGCC) están siendo ampliamente usados alrededor del mundo. Una planta demostrativa de 250 *MW* se construye en Tianjin, China. En la India, Andhra Pradesh Power Generation Corporation Ltd en asociación con Bharat Heavy Electricals Limited instalaron una planta de IGCC de 125 *MW* en Vijayawada. En EU plantas de IGCC 262 *MW* y 250 *MW* fueron puestas en marcha en Indiana y Florida, respectivamente. Este tipo de prototipos han sido útiles para entender la física del proceso y diseño de sistemas de control (Yun 2012). El rendimiento de una planta generación eléctrica basada en un gasificador de flujos paralelos conectado a la red ha sido insatisfactoria, operando sólo 70 *h* sobre 1000 *h* presupuestadas (Dasappa et al. 2011).

Dentro de un enfoque de modelado de gasificadores orientados al diseño de estrategias de control, Gobel et al. (2007) modela un gasificador de lecho fijo de dos etapas para carbón mineral con flujos descendentes, donde en la primera etapa se desarrolla únicamente el calentamiento, secado y pirólisis del combustible sólido y en la segunda etapa se llevan a cabo las reacciones de combustión parcial de volátiles y carbonizado y la gasificación del carbo-

nizado. La estrategia de control propuesta ofrece una reducción del transitorio de la altura del lecho ante cambios en las condiciones operacionales del reactor. Esta estrategia consiste en cambiar de forma simultánea la entrada de aire y la entrada de biomasa, provocando una mejora considerable del transitorio, de 3 *min* si cambia la carga de 100 % a 50 % respecto a 20 *horas* de transitorio si sólo aumenta el flujo de un elemento (biomasa, aire ó vapor de agua) de manera proporcional al cambio de carga.

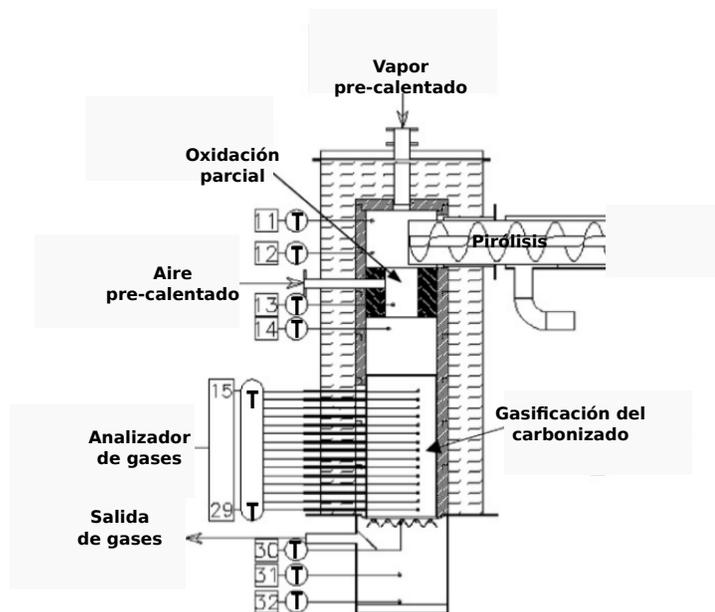


Figura 2.1: Reactor de gasificación de carbonizado equipado con dispositivos de medición, **T**:Temperatura

Por otro lado, el reactor estudiado por Gobel et al. (2007) (Fig. 2.1) muestra que las mediciones a lo largo del reactor en requieren más de 30 dispositivos lo que en principio elevaría el costo y mantenimiento de estos equipos y la elección de los puntos considerados para realizar una estrategia de control no estarían bien definidos o bien podrían ser excesivos.

Un trabajo de interés es el realizado por Baldea y Daoutidis (2007), donde se menciona que existen tres desafíos importantes para la implementación de leyes de control de reactores tubulares:

- Las temperaturas a la salida y en algunos puntos a lo largo del reactor están comúnmente disponibles. Sin embargo, las mediciones de la composición solo están disponibles a la salida del reactor y son regularmente medidas en intervalos de tiempo relativamente largos, limitando el uso de estas para algoritmos de control.
- Las entradas que pueden ser manipuladas regularmente incluyen la velocidad de entrada de los reactantes y su composición, siendo esta última más difícil de emplear para

un caso práctico. La adición de una camisa de enfriamiento representa una opción, pero el uso de esta podría producir una distribución radial irregular de la temperatura en el reactor.

- La rigidez del modelo y su tamaño impiden la implementación práctica de controladores basados en modelo.

A la luz de estos hechos se implementa un controlador proporcional, que usa la velocidad de entrada del combustible como la señal a manipular. Se asume que es posible medir dos temperaturas: la temperatura más alta (temperatura "pico") a lo largo del reactor y la temperatura a la salida del reactor. Se diseñan dos leyes de control para cada una de las salidas concluyendo que la implementada con la temperatura "pico" estabiliza el reactor alrededor de un estado de ignición tomando como perturbación el cambio de velocidad de uno de los reactivos. Por otro lado, la segunda ley de control propuesta con base a la temperatura a la salida del reactor no logra estabilizar la operación del reactor en un estado de ignición. Se explica que el pobre desempeño del segundo controlador se debe al hecho de que la migración de la ola de calor hacia la salida del reactor se manifiesta inicialmente a través de una pequeña disminución de la temperatura, seguida de un aumento durante un período prolongado de tiempo de la temperatura en la salida del reactor seguida de un descenso de la temperatura agudo que corresponde con la extinción del reactor.

En Septiembre de 1997 GEC ALSTHOM Mechanical Engineering Center (ahora ALSTOM Energy Technology Center), lanzó un desafío abierto a la comunidad de control de cerca de 20 instituciones interesadas. El desafío consistió en evaluar y comparar algoritmos de control sobre una planta real de gasificación (Fig. 2.2). El desafío incluía tres modelos lineales (alrededor de tres puntos de operación) obtenidos de un modelo no lineal desarrollado por ALSTOM. Físicamente el gasificador tiene 4 entradas principales que pueden ser manipuladas para controlar el proceso:

- Flujo de aire
- Flujo de vapor
- Flujo de carbón
- Extracción de carbonizado

El controlador debe de ajustar estas entradas para regular las principales variables de salida del gasificador, las cuales son:

- Temperatura del gas
- Presión del gas
- Valor calorífico del gas
- Masa del lecho

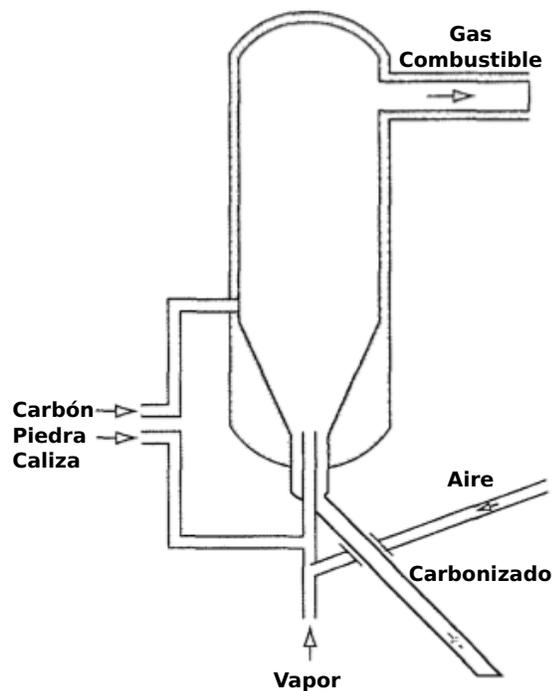


Figura 2.2: Gasificador ALSTOM con variables de salida y controladores PID por presión y temperatura.

Los controladores propuestos se presentan en Dixon (1999) donde se listan los siguientes:

- Control PI en términos de la parte proporcional e integral multivariable que se seleccionan por medio de ajuste óptimo.
- Control predictivo basado en modelo, basado sobre las herramientas de MATLAB (Model Predictive Control Toolbox).
- Control predictivo con un lazo interno óptimo cuadrático lineal, que está supervisado por un lazo de control predictivo exterior que incorpora el manejo de restricciones y acción integral para dar seguimiento libre de offset.
- Controles H-infinito en formas variadas para solucionar el problema de sensibilidad paramétrica.
- Control por modos deslizantes, plantea el problema de pasar de un punto de operación a otro y diseña una superficie de deslizamiento tal que un solo controlador pueda operar a través de toda la envolvente.

Mientras todas las soluciones presentadas alcanzan un éxito razonable, ninguna de ellas logra cumplir con todos los criterios de desempeño para los diferentes puntos de operación.

Esto deja ver que las entradas de control tienen un impacto considerable sobre la complejidad del sistema (Dixon 1999). Considerando que se trata de un reactor tubular, se puede ver que la elección de la posición y cantidad de mediciones (salidas) necesarias para proponer algoritmos de control juega un papel importante.

Paes (2005) modela un gasificador de flujos a contracorriente con lecho fijo por medio de ecuaciones diferenciales parciales lineales unidimensionales dinámicas para las especies químicas, masa total y la temperatura de cada fase termodinámica (sólido-gas).

Con base en simulaciones en lazo abierto del modelo dinámico obtenido se establecen los objetivos de control:

- **Control de seguridad de operación.** Un control de temperatura del gas de síntesis a la salida del gasificador (restricción: $T_{g,salida} \leq 600K$) y de las temperaturas máximas y mínimas del gas dentro del gasificador (restricción: $1300 \leq T_{g,maxima} \leq 1600K$).
- **Control del flujo másico del gas de síntesis.** El flujo másico saliente del gas de síntesis es variable y es deseable que sea regulado para el acoplamiento adecuado del gasificador con otros dispositivos.
- **Control de la concentración de gases volátiles (provenientes de la pirólisis) contaminantes en el gas de síntesis.**

Finalmente, propone un controlador lineal PI en cascada de dos lazos con un control de flujo másico saliente de gas donde la señal de control se dirige al controlador de temperatura. Se concluye que sólo se puede lograr un control efectivo de 3 de las 4 variables de interés con una variable de control: la temperatura máxima del reactor, la temperatura del gas de síntesis, el flujo saliente de gas y la concentración del gas de pirólisis.

Ruiz et al. (2013) concluye que en primer lugar, es complicado elegir el gasificador adecuado para un determinado tamaño de planta de generación eléctrica ya que existe una muy amplia gama de diseños y montajes, muchos de los cuales se encuentran todavía en fase de investigación, aunado a que la biomasa no tiene el mismo comportamiento estable que los combustibles fósiles.

Además, la operación de la planta es más compleja y sensible a numerosos parámetros, los cuales se pueden producir inestabilidades de funcionamiento. El régimen de funcionamiento de una planta depende de variables que no siempre pueden ser controladas, principalmente la uniformidad y disponibilidad de la biomasa. En este estudio las conclusiones son las siguientes:

- Los parámetros de mayor impacto en el proceso de gasificación son la temperatura y la reacción de gasificación. El control de estos parámetros asegura *i)* un gas de síntesis con un aceptable contenido de alquitranes y *ii)* reducción de los efectos de producción de cenizas causadas por las altas temperaturas en el reactor.

- El contenido de humedad de la biomasa es un parámetro de funcionamiento que reduce la eficiencia de gasificación, ya que parte de la energía se utiliza para el secado de la biomasa. Además, el contenido de humedad por encima del 15 % lleva a variaciones en la concentración de los componentes del gas de síntesis generado, y por lo tanto en su poder calorífico, haciendo así, el proceso inestable. Procesos de preparación de biomasa anteriores, tales como pirólisis, pueden ayudar a proporcionar el combustible con regularidad energética. Una estimación de los costes energéticos de los procesos anteriores tendría que realizarse para evaluar la viabilidad.
- La presencia de alquitranes en el gas de síntesis generado es uno de las principales barreras tecnológicas para el desarrollo de la gasificación.
- Una vez que el gas de síntesis se ha obtenido, es difícil y costoso asegurarse de que cumple las condiciones ideales necesarias.

Finalmente, considerando que las principales cuestiones que se plantean en el diseño de una planta de generación eléctrica basada en gasificación son dirigidas hacia el gasificador, su funcionamiento, el tratamiento y adaptación del gas de síntesis generado, sin olvidar la importancia en la preparación de la biomasa, la gasificación parece ser una tecnología rígida, ya que requiere una adaptación completa del combustible para ser procesado y, una vez que este se ha logrado y los parámetros de funcionamiento han sido sintonizados, la flexibilidad que permite el proceso es poca. Esto significa que cualquier variación en las características específicas de la biomasa tendrán consecuencias no deseadas para el proceso de gasificación, tales como inestabilidad en el funcionamiento, pérdida de rendimiento, problemas de escalamiento, etc. De lo anterior, se destaca la importancia de obtener un modelo dinámico que permita utilizar herramientas de teoría de control con el fin de mejorar el desempeño y ofrecer autonomía y adaptabilidad al proceso de gasificación.

2.2. Modelo dinámico de una clase de gasificadores

Los gasificadores son considerados como sistemas termodinámicos abiertos (alimentación continua de flujos másicos de aire y combustible sólido) en los que se producen fenómenos de transporte de masa, energía, cantidad de movimiento y especies químicas principalmente. Así, el modelo utilizado en el presente trabajo toma como punto de partida las leyes de conservación de las diferentes variables de transporte. Con base en esto, Di Blasi (2000) plantea el modelo de un gasificador de lecho fijo y flujos descendentes. Estas unidades son utilizadas para procesos de pequeña escala ($< 500\text{kWe}$) ya que producen un gas de síntesis más limpio comparado con los gasificadores de lecho fijo y flujos contracorriente. Ambas fases fluyen a través del reactor de forma descendente llevándose a cabo los procesos descritos en la sección 1.2 (figura 2.3). Las consideraciones realizadas en el método de modelado son las siguientes:

1. Modelo Euleriano de dos fases (flujo de fases separados).
2. La pirólisis de la biomasa (pirólisis primaria), la descomposición térmica de los alquitranes (pirólisis secundaria), las reacciones heterogéneas de combustión y gasificación

del carbonizado, la combustión de los gases (volátiles) y la reacción de separación del CO_2 con agua (water-gas shift reacción) se realizan a una velocidad finita.

3. Se incluye la transferencia de masa entre las partículas sólidas y el gas, la transferencia de calor entre fases y la transferencia de calor con las paredes del reactor para ambas fases mediante los coeficientes de transferencia incluidos en las ecuaciones de transporte.
4. La velocidad de la fase gaseosa es calculada de la ecuación de continuidad y la densidad de la ley del gas ideal. El flujo másico del sólido es obtenido de la ecuación de masa del carbonizado.
5. La caída de presión en el reactor se considera uniforme.
6. Las reacciones heterogéneas de combustión y gasificación del carbonizado son descritas mediante un modelo de contracción de partícula con núcleo inerte en un proceso isotérmico.
7. La pirólisis se considera como un proceso que no modifica la estructura del lecho sino su densidad, la cual es obtenida de la ecuación de balance de masa del carbonizado.
8. No existe equilibrio térmico entre las fases en las zonas de combustión y pirólisis.
9. Hay transferencia de calor por radiación en el lecho poroso.
10. Flujos de masa de las dos fases variantes en el tiempo.
11. Las partículas de combustible sólido alimentadas son del mismo tamaño y de forma esférica.
12. La hidrodinámica es mucho más rápida que los procesos de intercambio de energía y masa.
13. El modelo de turbulencia se incluye en las propiedades de transporte de masa y energía de los coeficientes de transferencia de masa y energía entre fases.

Tomando las consideraciones anteriores Badillo et al. (2012) propone un modelo dinámico, donde a diferencia de lo mencionado anteriormente, las temperaturas de ambas fases son agrupadas. El modelo presentado, basado en primeros principios, está formado por balances de masa de las componentes químicas y balances de energía de cada una de las fases, la fase gaseosa (C_g) considera como especies químicas el oxígeno (O_2), hidrógeno (H_2), monóxido de carbono (CO), bióxido de carbono (CO_2), vapor de agua (H_2O), metano (CH_4), alquitranes (T) y nitrógeno (N_2), mientras que la fase sólida (C_s) está constituida por biomasa (B) y carbonizado (C) que representan el combustible sólido crudo y el combustible sólido carbonizado respectivamente.

Así, la descripción de la dinámica espacial y temporal del reactor tubular, en términos de la red de reacciones descritas en la sección 1.1, está dada por el siguiente conjunto de

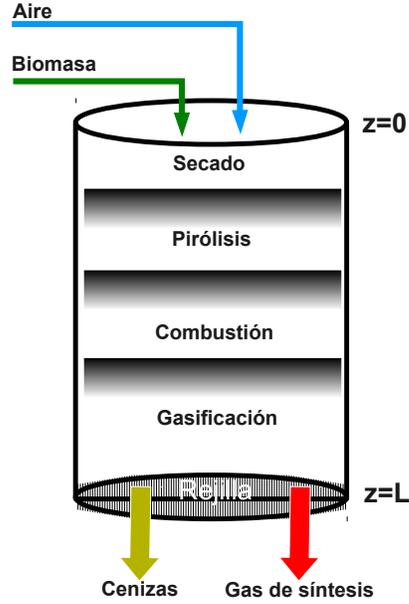


Figura 2.3: Gasificador de lecho fijo y flujos paralelos.

ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) sobre un dominio espacial ($0 \leq Z \leq L$) y temporal ($t' > 0$):

$$\partial_{t'} \mathbf{A}_{gi} = -\partial_Z(\mathbf{A}_{gi} u_g) + \partial_Z(\mathcal{D}_{\mathcal{M}} \partial_Z \mathbf{A}_{gi}) + \mathcal{G}_{gi} \quad (2.1)$$

$$\partial_{t'} \mathbf{A}_{si} = -\partial_Z(\mathbf{A}_{si} u_s) + \mathcal{G}_{si} \quad (2.2)$$

$$\partial_{t'} \mathcal{T} = -\partial_Z(\mathcal{T} u_H) + \partial_Z(\mathcal{D}_{\mathcal{H}} \partial_Z \mathcal{T}) + \mathcal{Q}_{\mathcal{T}} \quad (2.3)$$

$$\mathcal{G}_{\pi i} = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^{\pi} \mathcal{R}_j \quad \pi = g, s \quad (2.4)$$

$$\mathcal{Q}_{\mathcal{T}} = \left[\frac{Q_R - Q_w}{C_s C_p^s} \right] \quad (2.5)$$

$$Q_R = -\sum_{j=1}^m \Delta H_j \mathcal{R}_j \quad Q_w = \mathcal{A}_v h_w [\mathcal{T} - \mathcal{T}_w] \quad \mathcal{A}_v = \frac{4}{D_R}$$

$$u_H = u_s + \left[\frac{C_p^g C_g}{C_p^s C_s} \right] u_g \quad \mathcal{D}_{\mathcal{H}} = \frac{\lambda_s^{eff} + \lambda_g^{eff}}{C_s C_p^s} \quad C_{\pi} = \sum_{i=1}^{N_{\pi}} \mathbf{A}_{\pi i}$$

$$\mathbf{A}_g = [A_{O_2} \quad A_{H_2} \quad A_{CO} \quad A_{CO_2} \quad A_{CH_4} \quad A_{H_2O} \quad A_T \quad A_{N_2}]$$

$$\mathbf{A}_s = [A_B \quad A_C]$$

donde $\mathbf{A}_{\pi i}$ es la concentración molar por unidad de volumen de la i -ésima componente en la fase π , \mathcal{T} es la temperatura de ambas fases, $\mathcal{G}_{\pi i}$ es la tasa de generación por unidad de volumen del componente i en la fase π , Q_R es la tasa de generación de calor por unidad de volumen, \mathcal{R}_j y ΔH_j son la tasa de reacción y el cambio de entalpía de la j -ésima reacción respectivamente, $s_{i,j}^\pi$ es el coeficiente estequiométrico del i -ésimo componente en la j -ésima reacción de la fase π , u_π representa la velocidad convectiva de la fase π , u_H es el coeficiente de convección de calor, \mathcal{D}_M y \mathcal{D}_H son el coeficiente de dispersión de la fase gas y el coeficiente de difusión de calor respectivamente, C_π y C_p^π es la concentración molar total y el calor específico de la fase π , respectivamente, h_w es el coeficiente de transferencia de calor de la pared del reactor y D_R es el diámetro interno del reactor. Los términos de reacción para la generación de las componentes gaseosas y sólidas se presentan en el Apéndice A, los términos de generación de calor se presentan en el Apéndice B.

De acuerdo al flujo relativo de alimentación de la fase sólida y la fase gaseosa para un gasificador de flujos paralelos y descendentes, las condiciones de frontera en la cima del reactor ($Z = 0$) para las componentes químicas y la entalpía de ambas fases son:

$$\mathcal{D}_M \partial_Z \mathbf{A}_{gi}(t, 0) = u_g(t, 0) [\mathbf{A}_{gi}(t, 0) - \mathbf{A}_{gi,e}] \quad (2.6)$$

$$\mathbf{A}_{si}(t, 0) u_s(t, 0) = \mathbf{A}_{si,e} u_{s,e} \quad (2.7)$$

$$\mathcal{D}_H \partial_Z \mathcal{T}(t, 0) = u_H(t, 0) [\mathcal{T}(t, 0) - \mathcal{T}_e] \quad (2.8)$$

donde $\mathbf{A}_{\pi,e}$ son las concentraciones de alimentación de la i -ésima componente de la fase π y \mathcal{T}_e es el promedio de las temperaturas de alimentación de las fases sólido y gas. En el fondo del reactor ($Z = L$) se establecen condiciones tipo von Neumann:

$$\partial_Z \mathbf{A}_{gi}(t, L) = 0 \quad (2.9)$$

$$\partial_Z \mathbf{A}_{si}(t, L) = 0 \quad (2.10)$$

$$\partial_Z \mathcal{T}(t, L) = 0 \quad (2.11)$$

2.3. Métodos para la reducción de orden del modelo dinámico

El modelo en ecuaciones diferenciales parciales (2.1)-(2.3) es un sistema dinámico de dimensión infinita cuya utilidad en control es limitada. Bajo esta limitación y con el objetivo de reducir la dimensión del sistema, Badillo et al. (2012) desarrolla un modelo dinámico de bajo orden utilizando métodos para la reducción de dicho modelo los cuales se enumeran a continuación:

1. Simplificación de la dinámica de algunas componentes gaseosas basada en consideraciones estequiométricas. Se realiza un análisis del rango de la matriz de coeficientes estequiométricos de las componentes de la fase gas para determinar el número de reacciones independientes existentes en la cinética química del modelo.

2. Método de reducción de orden no lineal basado en el método de perturbaciones singulares. Se obtiene una forma estándar de perturbaciones singulares del modelo dinámico distribuido de los reactores de gasificación de lecho fijo mediante una normalización de sus variables conservativas.
3. Método de agrupamiento del modelo distribuido de un gasificador representado mediante una interconexión en serie de CSTR's no isotérmicos con flujos bidireccionales mediante una discretización espacial del modelo utilizando diferencias finitas.

2.3.1. Matriz estequiométrica

Basado en el análisis algebraico de la matriz estequiométrica, Badillo et al. (2012) deduce que las cinéticas de reacción sólo afectan un subconjunto del total de especies de cada fase llamadas componentes clave y el resto de las componentes constituye el conjunto de invariantes de reacción del sistema, es decir, aquellas componentes con balances de masa asociados cuyo término fuente es cero.

Considerando la red con j reacciones, N_π componentes totales, n_π^R componentes reactivos y n_π^I componentes inertes ($N_\pi = n_\pi^R + n_\pi^I$) (Aris 1965) y representando la tasa de generación molar, ecuación (2.4), en forma matricial se tiene:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_\pi(\mathbf{A}, \mathcal{T}) &= \mathbf{S}_\pi \mathcal{R}(\mathbf{A}, \mathcal{T}) & (2.12) \\
 \mathcal{G}_\pi(\mathbf{A}, \mathcal{T}) &= \left[\mathcal{G}_1^\pi \quad \mathcal{G}_2^\pi \quad \cdots \quad \mathcal{G}_{n_\pi^R}^\pi \right]^T \\
 \mathcal{R}(\mathbf{A}, \mathcal{T}) &= \left[\mathcal{R}_1 \quad \mathcal{R}_2 \quad \cdots \quad \mathcal{R}_j \right]^T \\
 \mathbf{S}_\pi &= [s_{i,j}^\pi] \quad \dim(\mathbf{S}_\pi) = (n_\pi^R, j) \quad \text{rank}(\mathbf{S}_\pi) = N_\pi \leq j \quad l_\pi = n_\pi^R - N_\pi \\
 \mathbf{S} &= \begin{bmatrix} \mathbf{S}_g \\ \mathbf{S}_s \end{bmatrix} \quad \text{rank}(\mathbf{S}) = N_r \leq j \quad l_r = n_g^R + n_s^R - N_r
 \end{aligned}$$

\mathbf{S}_π es la matriz estequiométrica de la fase π , considerando únicamente los componentes reactivos, N_r es el número de reacciones independientes y l_r es el número de concentraciones invariantes en el sentido de combinaciones lineales de los componentes cuya dinámica depende solo de los mecanismos de transporte y no de las tasas de reacción no lineal.

En términos de la factorización por rango y la reducción por escalón, la matriz estequiométrica (\mathbf{S}_π) puede ser expresada en la forma

$$\mathbf{S}_\pi = \mathcal{S}_\pi \mathcal{M}_\pi \quad \dim(\mathcal{S}_\pi) = (n_\pi^R, N_\pi) \quad \dim(\mathcal{M}_\pi) = (N_\pi, j) \quad (2.13)$$

donde \mathcal{S}_π son las columnas linealmente independientes de \mathbf{S}_π y \mathcal{M}_π es formada por los N_π

renglones diferentes de cero de la reducción por escalón de la matriz \mathbf{S}_π . De esta forma el vector de tasas de generación

$$\mathcal{G}_\pi(\mathbf{A}, \mathcal{T}) = \mathcal{S}_\pi \mathcal{N}_\pi(\mathbf{A}, \mathcal{T}) \quad \mathcal{N}_\pi(\mathbf{A}, \mathcal{T}) = \mathcal{M}_\pi \mathcal{R}(\mathbf{A}, \mathcal{T}) \quad (2.14)$$

es escrito en términos del vector \mathcal{N}_π con tasas de reacción independientes según la estequiometría de la matriz \mathbf{S}_π . De esta forma la matriz \mathcal{S}_π determina un cambio de coordenadas lineal de las concentraciones

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\pi &= \begin{bmatrix} \mathbf{W}_\pi \\ \mathbf{E}_\pi \end{bmatrix} = P_\pi \mathbf{A}_\pi = \mathbf{C}_\pi & P_\pi &= \begin{bmatrix} \mathcal{V}_\pi & 0_{n_\pi^R \times n_\pi^I} \\ 0_{n_\pi^R \times n_\pi^I}^T & I_{n_\pi^I} \end{bmatrix} & \mathcal{V}_\pi &= \begin{bmatrix} \mathcal{S}_\pi^+ \\ L_\pi^T \end{bmatrix} \\ \mathbf{W}_\pi &= [W_1^\pi \quad W_2^\pi \quad \cdots \quad W_{N_\pi}^\pi]^T & \mathbf{E}_\pi &= [\mathcal{E}_\pi \quad \mathcal{I}_\pi]^T \\ \mathcal{E}_\pi &= [\mathcal{E}_1^\pi \quad \mathcal{E}_2^\pi \quad \cdots \quad \mathcal{E}_{l_\pi}^\pi] & \mathcal{I}_\pi &= [\mathcal{I}_1^\pi \quad \mathcal{I}_2^\pi \quad \cdots \quad \mathcal{I}_{n_\pi^I}^\pi] \end{aligned} \quad (2.15)$$

\mathbf{W}_π contiene las concentraciones clave y \mathbf{E}_π contiene las concentraciones invariantes (\mathcal{E}_π) más las inertes (\mathcal{I}_π) para la fase π , \mathbf{C}_π es el cambio de coordenadas de la concentración de la fase π , $I_{n_\pi^I}$ es la matriz identidad de dimensión n_π^I , $0_{n_\pi^R \times n_\pi^I}$ es la matriz de ceros de dimensión $n_\pi^R \times n_\pi^I$, \mathcal{S}^+ es la matriz pseudo-inversa de \mathcal{S}_π y L_π es la matriz cuyos l_π renglones producen el espacio nulo de \mathcal{S}_π^T . De esta forma, el cambio en las tasas de reacción para las concentraciones principales (\mathbf{W}_π) e invariantes está dado por (\mathcal{E}_π):

$$\mathcal{F}_\pi(\mathbf{C}, \mathcal{T}) = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{W}}_\pi \\ \dot{\mathbf{E}}_\pi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{S}_\pi^+ \mathcal{G}_\pi(\mathbf{A}, \mathcal{T}) \\ L_\pi^T \mathcal{G}_\pi(\mathbf{A}, \mathcal{T}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{M}_\pi \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathcal{T}) \\ L_\pi^T \mathcal{S}_\pi \mathcal{N}_\pi(\mathbf{A}, \mathcal{T}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_\pi(\mathbf{C}, \mathcal{T}) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

Con el cambio de coordenadas se agrupan los términos de reacción y se reduce la dependencia de las tasas de reacción no lineales del modelo.

$$\partial_{t'} \mathcal{A}_{gi} = -\partial_Z(\mathcal{A}_{gi} u_g) + \partial_Z(\mathcal{D}_{\mathcal{M}} \partial_Z \mathcal{A}_{gi}) + \mathcal{F}_{gi} \quad (2.17)$$

$$\partial_{t'} \mathcal{A}_{si} = -\partial_Z(\mathcal{A}_{si} u_s) + \mathcal{F}_{si} \quad (2.18)$$

$$\partial_{t'} \mathcal{T} = -\partial_Z(\mathcal{T} u_H) + \partial_Z(\mathcal{D}_{\mathcal{H}} \partial_Z \mathcal{T}) + \mathcal{Q}_{\mathcal{T}} \quad (2.19)$$

2.3.2. Perturbaciones singulares

La esencia de la teoría considerada en esta sección es que la discontinuidad de las soluciones causada por las perturbaciones singulares puede evitarse si se analizan en escalas de tiempo diferentes. Esta aproximación con múltiples escalas de tiempo es un rasgo distintivo

del método de las perturbaciones singulares (Khalil 2002). de Bajo un análisis análogo al desarrollado por Baldea y Daoutidis (2007), Badillo et al. (2012) lleva acabo la reducción del reactor de lecho fijo y flujos paralelos considerando las diferencias de densidad, velocidad de flujo y capacidad calórica entre la fase sólida y la fase gaseosa y basado en el método de perturbaciones singulares obtiene un modelo cuasiestacionario distribuido a partir del modelo de gasificador (2.17)-(2.19). Se introducen en el modelo las variables y números adimensionales:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{\pi i} &= \frac{A_{\pi i}}{C_{\pi 0}} & z &= \frac{Z}{L} & v_{\pi} &= \frac{u_{\pi}}{u_{\pi 0}} & \Gamma &= \frac{\mathcal{T}}{\mathcal{T}_0} \\
\Gamma_w &= \frac{\mathcal{T}_w}{\mathcal{T}_0} & t &= \frac{u_{s0} t'}{L} & K_M &= \frac{C_{g0} u_{g0}}{C_{s0} u_{s0}} & K_T &= \frac{C_{g0} u_{g0}}{C_s u_{s0}} \\
D_M &= \frac{\mathcal{D}_{\mathcal{M}}}{\mathcal{D}_{\mathcal{M}0}} & D_H &= \frac{\mathcal{D}_{\mathcal{H}}}{\mathcal{D}_{\mathcal{H}0}} & \mathcal{D}_{\mathcal{H}0} &= \frac{\lambda_0}{C_s C_p^s} & St_w &= \frac{L h_w \mathcal{A}_v}{C_s C_p^s u_{s0}} \\
Pe_M &= \frac{L u_{g0}}{\mathcal{D}_{\mathcal{M}0}} & Pe_H &= \frac{L u_{s0}}{\mathcal{D}_{\mathcal{H}0}} & Da_j &= \frac{L \mathcal{R}_j 0}{u_{g0} C_{g0}} & B_j &= \frac{\Delta H_j}{C_p^s \mathcal{T}_0}
\end{aligned}$$

Pe_M y Pe_H son los números de Peclet de la masa de gas y de calor, respectivamente, St_w es el número de Stanton de pared, Da_j y B_j es el número de Damkholer o el aumento de temperatura adiabática para la j -ésima reacción. De esta manera, la forma adimensional del modelo distribuido del gasificador es obtenida.

$$\varepsilon \partial_t \Lambda_{gi} = -\partial_z(\Lambda_{gi} v_g) + \frac{1}{Pe_M} \partial_z(D_M \partial_z \Lambda_{gi}) + \mathbf{f}_{gi}(\Lambda, \Gamma) \quad (2.20)$$

$$\partial_t \Lambda_{si} = -\partial_z(\Lambda_{si} v_s) + \mathbf{f}_{si}(\Lambda, \Gamma) \quad (2.21)$$

$$\partial_t \Gamma = -\partial_z(\Gamma v_H) + \frac{1}{Pe_H} \partial_z(D_H \partial_z \Gamma) + Q_{\Gamma} \quad (2.22)$$

$$\mathbf{f}_g(\Lambda, \Gamma) = \mathcal{M}_g Da \mathbf{f}(\Lambda, \Gamma) \quad (2.23)$$

$$\mathbf{f}_s(\Lambda, \Gamma) = K_M \mathcal{M}_s Da \mathbf{f}(\Lambda, \Gamma) \quad (2.24)$$

$$Q_{\Gamma}(\Lambda, \Gamma) = -St_w [\Gamma - \Gamma_w] - K_M B_r^T Da \mathbf{f}(\Lambda, \Gamma) \quad (2.25)$$

$$\mathbf{f}(\Lambda, \Gamma) = [f_1 \quad f_2 \quad \cdots \quad f_{N_R}]$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}_j(\Lambda, \Gamma) &= \frac{\mathcal{R}_j(C, \mathcal{T})}{\mathcal{R}(C_{g0}, \mathcal{T}_0)} & v_H &= v_s + K_M \left[\frac{c_p^g c_g}{c_p^s c_s} \right] v_g \\
\varepsilon &= \frac{u_s}{u_g} & u_g &\gg u_s & \varepsilon &\rightarrow 0
\end{aligned} \quad (2.26)$$

con condiciones de frontera en la cima del reactor ($z = 0$)

$$\frac{D_M}{Pe_M} \partial_z \Lambda_{gi}(t, 0) = v_g [\Lambda_{gi}(t, 0) - \Lambda_{gi,e}] \quad (2.27)$$

$$\Lambda_{si}(t, 0) v_s(t, 0) = \Lambda_{si,e} v_{s,e} \quad (2.28)$$

$$\frac{D_H}{Pe_H} \partial_z \Gamma(t, 0) = v_H [\Gamma(t, 0) - \Gamma_e] \quad (2.29)$$

y en la parte baja del reactor ($z = 1$)

$$\partial_z \Lambda_{gi}(t, 1) = 0 \quad (2.30)$$

$$\partial_z \Lambda_{si}(t, 1) = 0 \quad (2.31)$$

$$\partial_z \Gamma(t, 1) = 0 \quad (2.32)$$

El modelo normalizado dado por las ecuaciones (2.20)-(2.22) constituye la forma estándar de perturbaciones singulares del modelo distribuido del gasificador en estudio ya que evidencia una separación de las escalas de tiempo de forma adimensional del modelo distribuido del gasificador cuando se considera que $\varepsilon \rightarrow 0$. En consecuencia, las variables rápidas del sistema son las concentraciones gaseosas. Por otro lado, la escala lenta y dominante del sistema está descrita por los balances de masa de los componentes sólidos y la temperatura en el modelo de orden reducido. La ecuación (2.20) se encuentra es estado cuasiestacionario y su comportamiento está determinado por el comportamiento dinámico de la variables lentas. Finalmente, haciendo esta consideración el comportamiento del reactor en estudio está descrito por las ecuaciones (2.33)-(2.35).

$$0 = -\partial_z (\Lambda_{gi} \cdot \mathbf{v}_g) + \frac{1}{Pe_M} \partial_z (D_M \cdot \partial_z \Lambda_{gi}) + f_{gi}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) \quad (2.33)$$

$$\partial_t \Lambda_{si} = -\partial_z (\Lambda_{si} \cdot \mathbf{v}_s) + f_{si}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) \quad (2.34)$$

$$\partial_t \mathbf{\Gamma} = -\partial_z (\mathbf{\Gamma} \cdot \mathbf{v}_H) + \frac{1}{Pe_H} \partial_z (D_H \cdot \partial_z \mathbf{\Gamma}) + Q_{\mathbf{\Gamma}} \quad (2.35)$$

$$f_g(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) = \mathcal{M}_g \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{f}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) \quad (2.36)$$

$$f_s(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma})_s = K_M \mathcal{M}_s \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{f}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) \quad (2.37)$$

$$Q_{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) = -St_w [\Gamma - \Gamma_w] - K_M \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{f}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) \quad (2.38)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) = [\mathbf{f}_1 \quad \mathbf{f}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{f}_{N_R}]$$

$$\mathbf{f}_j(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) = \frac{\mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathcal{T})}{\mathcal{R}(\mathbf{C}_{g0}, \mathcal{T}_0)} \quad \mathbf{v}_H = \mathbf{v}_s + K_M \begin{bmatrix} c_p^g & c_g \\ c_p^s & c_s \end{bmatrix} \mathbf{v}_s \quad (2.39)$$

con condiciones de frontera en la cima del reactor ($z = 0$)

$$\frac{D_M}{Pe_M} \partial_z \Lambda_{gi}(t, 0) = \mathbf{v}_g [\Lambda_{gi}(t, 0) - \Lambda_{gi,e}] \quad (2.40)$$

$$\Lambda_{si}(t, 0) \cdot \mathbf{v}_s(t, 0) = \Lambda_{si,e} \cdot \mathbf{v}_{s,e} \quad (2.41)$$

$$\frac{D_H}{Pe_H} \partial_z \Gamma(t, 0) = \mathbf{v}_H [\Gamma(t, 0) - \Gamma_e] \quad (2.42)$$

y en la parte baja del reactor ($z = 1$)

$$\partial_z \Lambda_{gi}(t, 1) = 0 \quad (2.43)$$

$$\partial_z \Lambda_{si}(t, 1) = 0 \quad (2.44)$$

$$\partial_z \Gamma(t, 1) = 0 \quad (2.45)$$

Finalmente, el modelo distribuido presentado anteriormente es una versión reducida del modelo original, con menos ecuaciones dinámicas: $N_s + 1$ ecuaciones diferenciales parciales y N_g ecuaciones diferenciales ordinarias.

2.4. Representación del modelo como un TRCTA

Siguiendo el agrupamiento de reactores tubulares de Coste et al. (1961), Deans y Lapidus (1960) y recientes estudios de Nájera (2012) el ordenamiento del conjunto de ecuaciones diferenciales y algebraicas obtenidas de la discretización del modelo distribuido (2.33)-(2.35) produce el modelo de N reactores continuos de tanque agitado (TRCTA) con volúmenes V_1, V_2, \dots, V_N como describe la figura (2.4).

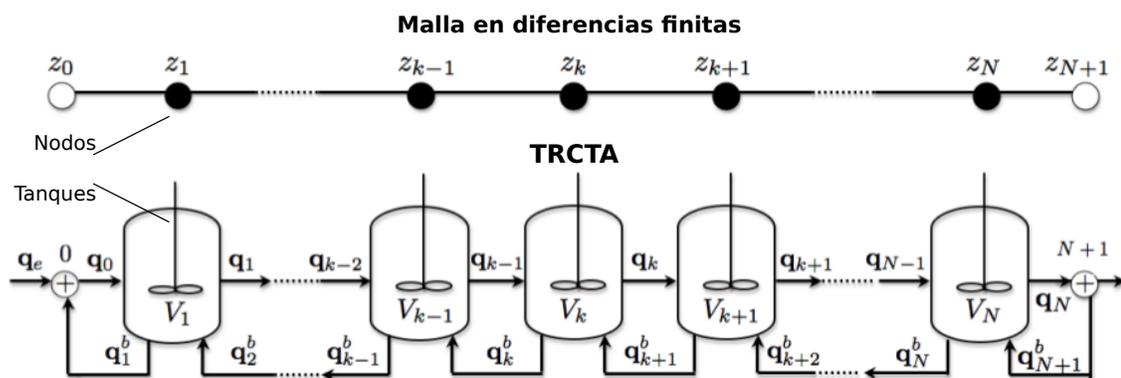


Figura 2.4: Analogía entre discretización espacial de la malla y TRCTA con flujos de retromezclado.

Las velocidades convectivas (\mathbf{v}_H y \mathbf{v}_π) y los coeficientes de difusión (D_H y D_M) del reactor tubular (2.33)-(2.35) están relacionados con los vectores de flujo hacia adelante (\mathbf{q}_k) y

flujos de retromezclado (\mathbf{q}_k^b) del conjunto de ecuaciones del TRCTA que se muestra en el Apéndice C.

Por otro lado, la asignación de volúmenes tal y como lo muestra la figura 2.4 se realiza mediante la siguiente ecuación:

$$V_R = L A_R = \sum_{k=1}^N V_k \quad V_k = \Delta_{z,k} A_R \quad (2.46)$$

donde V_k y V_R son el volumen del k -ésimo tanque y del reactor tubular respectivamente, L es la longitud del reactor y A_R su sección transversal y $\Delta_{z,k}$ es la distancia entre los nodos k y $k - 1$ de la discretización de la malla espacial. Para mayores detalles consultar Badillo et al. (2012)

Capítulo 3

Malla espacial para modelos de gasificadores

En los capítulos anteriores se ha hablado acerca del modelo dinámico del reactor de gasificación de flujos concurrentes mencionando los procesos y reacciones que rigen su comportamiento espacial y temporal. También se han mencionado los métodos bajo los cuales se ha buscado la reducción de orden y rigidez del modelo con el objetivo de que este modelo pueda ser utilizado tanto en el análisis del sistema, como en el diseño del control del proceso. Sin embargo, el sistema de ecuaciones que representa el comportamiento del reactor tubular como TRCTA es un modelo en el que el número de tanques y su volumen pueden considerarse como grados de libertad tales que la dimensión final sea considerablemente menor a la de un modelo de referencia. La elección del número de tanques, y su volumen, es esencial si lo que se busca es reducir el número de variables que se considerarán en la ley de control y lleva a pensar inmediatamente en donde serán colocados los sensores a lo largo del reactor tomando en cuenta las zonas donde existan mayores cambios y sin dejar de lado el cubrir todo el largo del reactor. Así, lo que se busca, en principio, es elegir el número de tanques y su volumen tales que reproduzcan una solución aproximada a una solución de referencia con un error aceptable.

Sin pérdida de generalidad, las herramientas de discretización analizadas en la sección (2.4) aluden a la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales, las cuales son llevadas a la forma de un sistema de ecuaciones definidas sobre un dominio discretizado. A partir de esta sección se toma en cuenta el análisis en términos de mallas y nodos, bien conocido en la literatura, que es relacionado intrínsecamente con la representación del TRCTA a través de (2.4).

3.1. Tipos de mallas

Dentro de la literatura se ha probado que existen mejoras significativas en la aproximación y eficiencia de la solución de ecuaciones diferenciales parciales si en la discretización se concentran puntos de una malla en las zonas de mayor cambio de la solución. Huang et al. (1994) menciona que para una solución numérica de ecuaciones diferenciales, los métodos

de mallas adaptables se pueden dividir en dos categorías, las estáticas y las dinámicas. Para los métodos estáticos de redistribución de nodos, la posibilidad de agregar nuevos nodos y la interpolación de variables dependientes de una malla anterior a una nueva se realizan en un tiempo fijo. Para los métodos dinámicos, o métodos de malla móvil, se emplea una ecuación que involucra la velocidad de los nodos, para mover una malla que conserva el número de nodos fijo de tal manera que los nodos permanecen concentrados en regiones de rápida variación de la solución. Estos métodos han recibido diversas críticas debido a su complejidad y sensibilidad con respecto a ciertos parámetros de entrada definidos por el usuario.

Hay que considerar que los principales desarrollos en métodos de mallas móviles se basan en la formulación satisfactoria de la ecuación de malla y muchas veces esta es difícil de obtener de manera consistente y confiable. Adicionalmente a la capacidad de concentrar un suficiente número de puntos en regiones de rápida variación de la solución, una ecuación de malla satisfactoria debería de ser simple, fácil de programar y razonablemente insensible a la elección de sus parámetros. Por otro lado, la construcción de la ecuación de malla móvil muchas veces debe ser guiada más por principios matemáticos que por argumentos físicos.

Otras formas típicas para distribuir los nodos dentro de una malla espacial son las presentados por Romero y Alvarez-Icaza (2011):

- **Distribución uniforme:** Se entiende por una malla uniforme a aquella que tiene el mismo tamaño de paso.

$$z_2 - z_1 = z_3 - z_2 = \dots = z_N - z_{N-1}$$

- **Distribución de Chebyshev-Gauss-Lobatto:** Los puntos internos de la malla llegan a estar más cercanos a los límites del dominio de acuerdo con la siguiente relación

$$z_i = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{i-1}{N-1} \pi \right) \quad i = 2, \dots, N-1$$

- **Las raíces de los polinomios de Legendre:** En este caso, los polinomios asociados de Legendre se deducen de forma recursiva

$$P_{n+1}(\bar{z}) = \frac{(2n+1)\bar{z}P_n(\bar{z}) - nP_{n-1}(\bar{z})}{n+1}$$

con $P_0 = 1$ y $P_1 = \bar{z}$. Las raíces de estos polinomios $\bar{z} \in (-1, 1)$. Para desplazar las raíces a un dominio de $z \in (0, 1)$ se aplica la transformación $\bar{z} = 2z - 1$.

Aunque estos métodos de distribución han sido muy utilizados y dado resultados satisfactorios como en (Romero y Alvarez-Icaza 2010), la desventaja se presenta en la ausencia del modelo del sistema físico para la elección de las coordenadas de la malla.

Un caso más cercano al relacionado con esta trabajo y a la discretización espacial no uniforme de gasificadores es el presentado en Badillo et al. (2012), en donde las coordenadas

elegidas dan resultados satisfactorios. El procedimiento es heurístico y el número de nodos y su separación ($z_1 = 0, z_2, z_3, \dots, z_N = 1$) son escogidos con un procedimiento de dos pasos de sintonización, de acuerdo a los objetivos del modelo y resumido en el siguiente enunciado:

"Primero, los nodos son ajustados de forma uniforme, y el número de estos es aumentado hasta obtener un comportamiento adecuado, con respecto a los requerimientos del modelo. Con base en la forma del perfil obtenido, el segundo paso consiste en decrementar el número de nodos y ajustar las distancias entre ellos y así obtener un modelo de bajo orden con una malla no uniforme."

Considerando las aportaciones señaladas anteriormente el propósito de este capítulo será definir de manera práctica la selección de una malla espacial tan pequeña como sea posible que capture los perfiles espaciales de los estados del reactor de gasificación dentro de una banda de error preestablecida.

3.2. Planteamiento del problema

Considerar el sistema de ecuaciones

$$0 = -\partial_z(\mathbf{\Lambda}_{gi} \cdot \mathbf{v}_g) + \frac{1}{Pe_M} \partial_z(D_M \cdot \partial_z \mathbf{\Lambda}_{gi}) + f_{gi}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) \quad (3.1)$$

$$\partial_t \mathbf{\Lambda}_{si} = -\partial_z(\mathbf{\Lambda}_{si} \cdot \mathbf{v}_s) + f_{si}(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Gamma}) \quad (3.2)$$

$$\partial_t \mathbf{\Gamma} = -\partial_z(\mathbf{\Gamma} \cdot \mathbf{v}_H) + \frac{1}{Pe_H} \partial_z(D_H \cdot \partial_z \mathbf{\Gamma}) + Q_\Gamma \quad (3.3)$$

con un dominio espacial $0 \leq z \leq 1$, condiciones de frontera en la cima del reactor ($z = 0$)

$$\frac{D_M}{Pe_M} \partial_z \mathbf{\Lambda}_{gi}(t, 0) = \mathbf{v}_g [\mathbf{\Lambda}_{gi}(t, 0) - \mathbf{\Lambda}_{gi,e}] \quad (3.4)$$

$$\mathbf{\Lambda}_{si}(t, 0) \cdot \mathbf{v}_s(t, 0) = \mathbf{\Lambda}_{si,e} \cdot \mathbf{v}_{s,e} \quad (3.5)$$

$$\frac{D_H}{Pe_H} \partial_z \mathbf{\Gamma}(t, 0) = \mathbf{v}_H [\mathbf{\Gamma}(t, 0) - \mathbf{\Gamma}_e] \quad (3.6)$$

y en la parte baja del reactor ($z = 1$)

$$\partial_z \mathbf{\Lambda}_{gi}(t, 1) = 0 \quad (3.7)$$

$$\partial_z \mathbf{\Lambda}_{si}(t, 1) = 0 \quad (3.8)$$

$$\partial_z \mathbf{\Gamma}(t, 1) = 0 \quad (3.9)$$

donde se asume que existe una solución aislada $[\mathbf{\Lambda}_{\text{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\text{si}}, \mathbf{\Gamma}]_{\beta}$ considerando una malla espacial de referencia $\beta : 0 = z_{\beta,1} < z_{\beta,2} < \dots < z_{\beta,N_{\beta-1}} < z_{\beta,N_{\beta}} = 1$.

El **problema de selección de malla** es: dado el sistema (3.1)-(3.3) y un error de tolerancia ρ , encontrar una malla

$$\pi : 0 = z_{\pi,1} < z_{\pi,2} < \dots < z_{\pi,N_{\pi-1}} < z_{\pi,N_{\pi}} = 1 \quad (3.10)$$

tal que $N_{\pi} < N_{\beta}$ y el error en la solución $[\mathbf{\Lambda}_{\text{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\text{si}}, \mathbf{\Gamma}]_{\pi}$ como una aproximación de $[\mathbf{\Lambda}_{\text{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\text{si}}, \mathbf{\Gamma}]_{\beta}$ es menor que ρ .

3.3. Método de factor de ponderación para la selección de una malla espacial

El método propuesto en este trabajo está basado en la obtención de un vector general de cambios que logra concentrar las variaciones, sobre el dominio espacial, de las variables de estado para un instante de tiempo t . Estas variaciones se evalúan sobre la malla espacial de referencia. Para buscar la malla reducida se busca un compromiso entre el vector de cambios y la cobertura apropiada de todo el dominio espacial. Se trata de evitar que, al considerar solamente los cambios, cuando estos son abruptos, se descuide la cobertura del dominio espacial por la malla reducida. La solución es un método recursivo que realiza este balance. Al definir cada punto de la solución espacial, a partir de un extremo del reactor, se pondera entre los cambios de las variables y la longitud del reactor que falta por cubrir a través de una mezcla convexa. El factor de ponderación para la misma es la relación entre el área de los cambios, a partir del último nodo asignado y evaluado sobre la solución de referencia, y el área total que inducen los cambios de las variables para la solución de referencia. El método se describe a continuación:

1. Vector general de cambios: Como primer paso en este método de de asignación de nodos, los perfiles espaciales de la solución de referencia $[\mathbf{\Lambda}_{\text{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\text{si}}, \mathbf{\Gamma}]_{\beta}$ para el instate de tiempo t se colocan en la matriz de agrupamiento \mathbf{p}_t (3.11), es decir, cada renglón de esta matriz representa la solución a lo largo del reactor para los n estados en el instante de tiempo t :

$$\mathbf{p}(n, N_\beta)_t = [\Lambda_{\mathbf{g}i}, \Lambda_{\mathbf{s}i}, \Gamma]_{\beta,t} = \begin{bmatrix} \Lambda_{\mathbf{g}1,1} & \Lambda_{\mathbf{g}1,2} & \cdots & \Lambda_{\mathbf{g}1,N_\Pi} \\ \Lambda_{\mathbf{g}2,1} & \Lambda_{\mathbf{g}2,2} & \cdots & \Lambda_{\mathbf{g}2,N_\Pi} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda_{\mathbf{N}_\mathbf{g},1} & \Lambda_{\mathbf{N}_\mathbf{g},2} & \cdots & \Lambda_{\mathbf{N}_\mathbf{g},N_\Pi} \\ \Lambda_{\mathbf{s}1,1} & \Lambda_{\mathbf{s}1,2} & \cdots & \Lambda_{\mathbf{s}1,N_\Pi} \\ \Lambda_{\mathbf{s}2,1} & \Lambda_{\mathbf{s}2,2} & \cdots & \Lambda_{\mathbf{s}2,N_\Pi} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda_{\mathbf{N}_\mathbf{s},1} & \Lambda_{\mathbf{N}_\mathbf{s},2} & \cdots & \Lambda_{\mathbf{N}_\mathbf{s},N_\Pi} \\ \Gamma_1 & \Gamma_2 & \cdots & \Gamma_{N_\Pi} \end{bmatrix}_{\beta,t} \quad (3.11)$$

Con el propósito de capturar la dinámica espacial para el instante de tiempo t , se genera la matriz de variación $\bar{\delta}_t$ que representa los cambios de las variables a lo largo del reactor, cada elemento de la matriz $\bar{\delta}_t$ es obtenido de la siguiente forma (3.12):

$$\bar{\delta}_t(l, k) = \frac{\delta_t(l, k)}{N_{t,l}}, \quad \delta_t(l, k) = | \mathbf{p}_t(l, k+1) - \mathbf{p}_t(l, k) |, \quad N_{t,l} = \| \delta_t(l) \| \quad (3.12)$$

$$l = 1, 2, \dots, n, \quad k = 1, 2, \dots, N_\beta - 1$$

donde $N_{t,l}$ representa la norma 2 de la solución a lo largo del reactor para el estado l y los elementos $\delta_t(l, k)$ normalizados ($\bar{\delta}_t(l, k)$) dan el mismo peso a la solución para cada estado.

Una vez obtenida la matriz de variación $\bar{\delta}_t(l, k)$ se calcula: *i*) el vector general de cambios Δ_t (3.13) que concentra las variaciones a lo largo del reactor para las variables del espacio de estados en el instante de tiempo t y *ii*) su vector en el espacio z_Δ correspondiente:

$$\Delta_t(k) = \sum_{l=1}^n \bar{\delta}_t(l, k), \quad z_{\Delta,k} = z_{\beta,k} + | z_{\beta,k+1} - z_{\beta,k} | \quad (3.13)$$

$$k = 1, 2, \dots, N_\beta - 1$$

El objetivo del cálculo de los vectores Δ_t y z_Δ es utilizar el área bajo la curva generada

por estos dos vectores. Al considerar que esta contiene información disponible en la que se pueden observar de forma clara las variaciones que ocurren a lo largo del reactor.

Los siguientes pasos (2-4) ayudarán a la elección o aproximación de los $n_\pi - 1$ nodos internos ($z_{\pi,2} < \dots < z_{\pi,N_\pi-1}$) considerando que los nodos frontera, $z_{\pi,1} = 0$ y $z_{\pi,N_\pi} = 1$, son nodos fijos ($N_\pi = n_\pi + 2$). Cabe mencionar que este método es implementado de forma recursiva, y los pasos (2-3) deberán ejecutarse para las iteraciones $i = 1, 2, \dots, n_\pi - 1$ mientras que para $i = n_\pi$ únicamente se ejecutará el paso (4).

2. Nodo interno $z_{\pi,i+1}$: Mediante la distribución del área bajo la curva generada por los vectores Δ_t y z_Δ el criterio se reduce a la búsqueda de la posición de los nodos internos de la malla π tal que se cumpla la igualdad (3.14). Puede considerarse la interpolación de los vectores Δ_t y z_Δ cuando la resolución de la malla de referencia β no permita que se cumpla la igualdad:

$$\int_{z_{s,i}}^{z_{\pi,i+1}} \Delta_t(z_\Delta) dz_\Delta = \frac{A_B}{2} \quad A_B = \frac{A_R}{j} \quad j = n_\pi - i + 1 \quad (3.14)$$

$$A_R = \int_{z_{s,i}}^{z_{\Delta,N_\beta-1}} \Delta_t(z_\Delta) dz_\Delta \quad z_\pi, z_s \in z_\Delta$$

donde z_s es la posición de inicio para la búsqueda de z_π , A_R es el área restante bajo la curva desde $\Delta_t(z_{s,i})$ hasta $\Delta_t(z_{\Delta,N_\beta-1})$, A_B es la distribución homogénea del área restante por cada iteración y $\frac{A_B}{2}$ permite encontrar el “centroide” $z_{\pi,i+1}$ de A_B que corresponde con el límite superior de la integral (3.14). Para el caso de la iteración $i = 1$ $z_{s,1} = 0$.

3. Nodo de inicio $z_{s,i+1}$: El cálculo de la posición de inicio $z_{s,i+1}$ se desarrolla mediante la distribución de una malla uniforme (3.15), con un número j de nodos internos en el dominio de interés, es decir:

$$z_{u,i} = [z_{s,i} \quad z_{s,i} + v_i \quad z_{s,i} + 2v_i \quad \dots \quad z_{s,i} + jv_i \quad 1] \quad (3.15)$$

$$v_i = \frac{1 - z_{s,i}}{j} \quad j = n_\pi - i + 1$$

en donde para la iteración $i = 1$ $z_{s,1} = 0$. Con el área A_n contenida entre los nodos $z_{s,i}$ hasta $z_{s,i} + 2v_i$ y el área bajo la curva total (A_T) entre los vectores Δ_t y z_Δ se determina el factor de ponderación que servirá para calcular la posición de inicio $z_{s,i+1}$ (3.16):

$$z_{s,i+1} = f_{p,i} z_{\pi,i+1} + (1 - f_{p,i}) (z_{s,i} + v_i) \quad (3.16)$$

$$f_{p,i} = \frac{A_n}{A_T} \quad A_n = \int_{z_{s,i}}^{z_{s,i}+2v_i} \Delta_t(z_\Delta) dz_\Delta$$

donde f_p , es un factor que muestra la información contenida en A_n con respecto al área total A_T . El primer término de (3.16) tiene el propósito de ponderar el peso de $z_{\pi,i+1}$ que representa los cambios en las variable ssignificativas y el segundo término pesa la distribución espacial uniforme $z_{u,i}$. Ambos términos tienen el propósito de balancear los avances de z_s .

4. Nodo z_{π,n_π} : Conociendo la condición de frontera en $z = 1$ es necesario que el nodo z_{π,n_π} quede lo más cercano a este límite por lo que el nodo z_{π,n_π} es elegido de manera uniforme bajo la siguiente relación (3.17):

$$z_{\pi,n_\pi} = \frac{1 - z_{s,n_\pi}}{2} \quad (3.17)$$

cabe mencionar que este último paso está enfocado a compensar la última zona del reactor, ya que para los casos en que $N_\pi \ll N_\beta$ la asignación de n_π mediante los pasos (2-3) no logra cubrir lo largo del reactor.

3.4. Tolerancia

Para completar la solución del problema de selección de malla se probó el método propuesto en la sección anterior para diferentes mallas de referencia con n_β nodos internos ($N_\beta = n_\beta + 2$) y variando también el número de nodos internos para la malla reducida (n_π), con la malla espacial que produce el método de asignación por factor de ponderación. El resultado de analizó para encontrar el tamaño del error de aproximación ρ como una función de n_β y n_π . La función encontrada es:

$$[n_\pi^2 + c(n_\beta) n_\pi + d(n_\beta)] \rho(n_\beta, n_\pi) \approx a(n_\beta) n_\pi + b(n_\beta) \quad (3.18)$$

$$a(n_\beta) = -1651 n_\beta^{-4.061} + 0.1861$$

$$b(n_\beta) = 2.346 \times 10^{-10} n_\beta^{6.99} + 0.01475$$

$$c(n_\beta) = 3.486 \times 10^{-8} n_\beta^{6.12} - 1.674$$

$$d(n_\beta) = 3.45 \times 10^{-7} n_\beta^{5.559} + 1.831$$

El error de aproximación ρ está definido como el promedio del valor absoluto de las diferencias entre los elementos de la solución de referencia $[\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{si}}, \mathbf{\Gamma}]_\beta$ y la solución aproximada $[\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{si}}, \mathbf{\Gamma}]_\pi$. Como ambas soluciones tienen diferente número de nodos y colocación espacial, la solución de referencia se interpoló sobre los puntos más cercanos de la colocación espacial de la solución aproximada. La relación (3.18) puede ser utilizada de manera directa, si lo que se busca es saber el error de aproximación dado un número de nodos internos n_π , y de manera indirecta, si lo que se busca es conocer el número de nodos internos n_π necesarios dado el error de aproximación ρ . En ambos casos será necesario conocer el número de nodos de la malla de referencia n_β .

Capítulo 4

Resultados

En los capítulos anteriores se ha hablado acerca del proceso de gasificación y la red de reacciones que interviene en estos complejos sucesos de conversión termoquímica, los cuales, tienen como propósito convertir un combustible sólido a un combustible en fase gaseosa. También se ha dejado ver de manera clara algunos motivos por los cuales el proceso no ha sido consolidado como una herramienta convincente para la generación de energía eléctrica alternativa. Se ha detallado el modelo dinámico que representa física, matemática y químicamente el proceso de gasificación, el cual incluye dinámica temporal y espacial, y que bajo estas condiciones las herramientas de control son limitadas, debido principalmente al alto orden del modelo en el espacio y que la elección de los nodos de discretización en el dominio espacial sigue siendo un tema poco estudiado. Asimismo, se han descrito algunas de las formas bajo las cuales el modelo en ecuaciones diferenciales parciales ha logrado acercarse a los dominios de la teoría de control.

Anteriormente, también se han descrito algunos métodos de elección de mallas de discretización, en donde para este caso los métodos de elección de malla van dirigidos hacia el dominio espacial, con el propósito de reducir la dimensión del sistema en ecuaciones diferenciales parciales. También se ha propuesto el método de elección de malla por factor de ponderación que permite la elección ó aproximación de los nodos sobre una malla en un dominio espacial de interés.

Para este capítulo final el método de elección de nodos por factor de ponderación es llevado a cabo. El caso de estudio es presentado en la sección 4.1, mientras que los pasos descritos en la sección 3.3 son presentados en la segunda parte de este capítulo. Finalmente en la sección 4.3 se muestran los resultados en estado estacionario a lo largo del reactor para el modelo reducido del reactor en estudio comparado con el modelo de referencia y la sección 4.4 muestra el comportamiento dinámico en el tiempo de algunos de los nodos que conforman la malla espacial del modelo reducido.

4.1. Caso de estudio

De acuerdo a las simulaciones y experimentos reportados en gasificadores de flujos paralelos y lecho fijo (Di Blasi (2000), Rogel (2007), etc.), estos presentan dos modos de funcionamiento: estabilización en la cima del reactor (zona de pirólisis) y estabilización en la parte inferior del reactor (zona de combustión). En el trabajo realizado por Badillo et al. (2012), la malla de referencia Π cuenta con $N_{\Pi} = 14$ nodos para representar el comportamiento del reactor tubular con una precisión similar a la de los estudios realizados anteriormente. El modelado propuesto se aplicó con el siguiente objetivo: aproximación en la cima del reactor, ya que es el modo más eficaz de funcionamiento (Di Blasi 2000), con el menor número posible de nodos internos de la malla espacial y descripción similar a la de los estudios anteriores. Utilizando los pasos de sintonización descritos en la sección 3.1 se concluye que es posible reproducir estos perfiles, en estado estacionario y con un error de aproximación aceptable, con una malla $\pi = 0, 0.08, 0.2, 0.7, 1$ (Fig. 4.1), donde claramente se observa que dos de los tres nodos internos están colocados en la zona de mayor variación.

Para este caso de estudio se ha considerado la misma malla de referencia ($n_{\beta} = 12$). Con el propósito de justificar la elección del error de aproximación ρ y la aplicación del método en forma indirecta (sección 3.4), a partir de la solución nominal se generó un conjunto de soluciones obtenidas al variar, uno a uno, algunos parámetros críticos relacionados con los términos de reacción. En el apéndice D se muestran dichos términos que corresponden con aquellos en los que se indica un porcentaje de variación. Estas soluciones se muestran en la Fig. 4.2 como líneas punteadas.

Los resultados presentados por Badillo et al. (2012) (Fig. 4.1) reflejan un comportamiento muy cercano a la solución nominal. Asimismo, al observar los errores de esta aproximación dentro de las bandas de incertidumbre (Fig. 4.3), es posible ver que la solución, en estado estacionario, no llega a estar dentro de las bandas de incertidumbre propuestas en este trabajo.

Por otro lado, la Fig. 4.4 muestra los errores obtenidos para mallas distribuidas uniformemente (sección 3.1), mallas en Badillo et al. (2012) y mallas obtenidas mediante el método de factor de ponderación (sección 3.3). Las curvas presentadas relacionan los errores ρ como función del valor $n_{\pi} \in [1, 11]$ y la malla de referencia de $n_{\beta} = 12$. Se observa claramente que los errores disminuyen conforme el valor de n_{π} aumenta, sin embargo, es evidente que el error ρ para la malla uniforme y la malla obtenida con el método de factor de ponderación presentan un comportamiento distinto, donde este último muestra mayor eficiencia en su convergencia al error $\rho = 0$. Así, para el caso de estudio y conforme a lo mostrado en la Fig. 4.4 el valor de $n_{\pi} = 5$ es el número de nodos internos requeridos para cumplir con los objetivos de encontrar una malla π tal que la solución $[\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{si}}, \mathbf{\Gamma}]_{\pi}$ sea una aproximación al comportamiento nominal $[\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{si}}, \mathbf{\Gamma}]_{\beta}$ dentro de las bandas de incertidumbre establecidas.

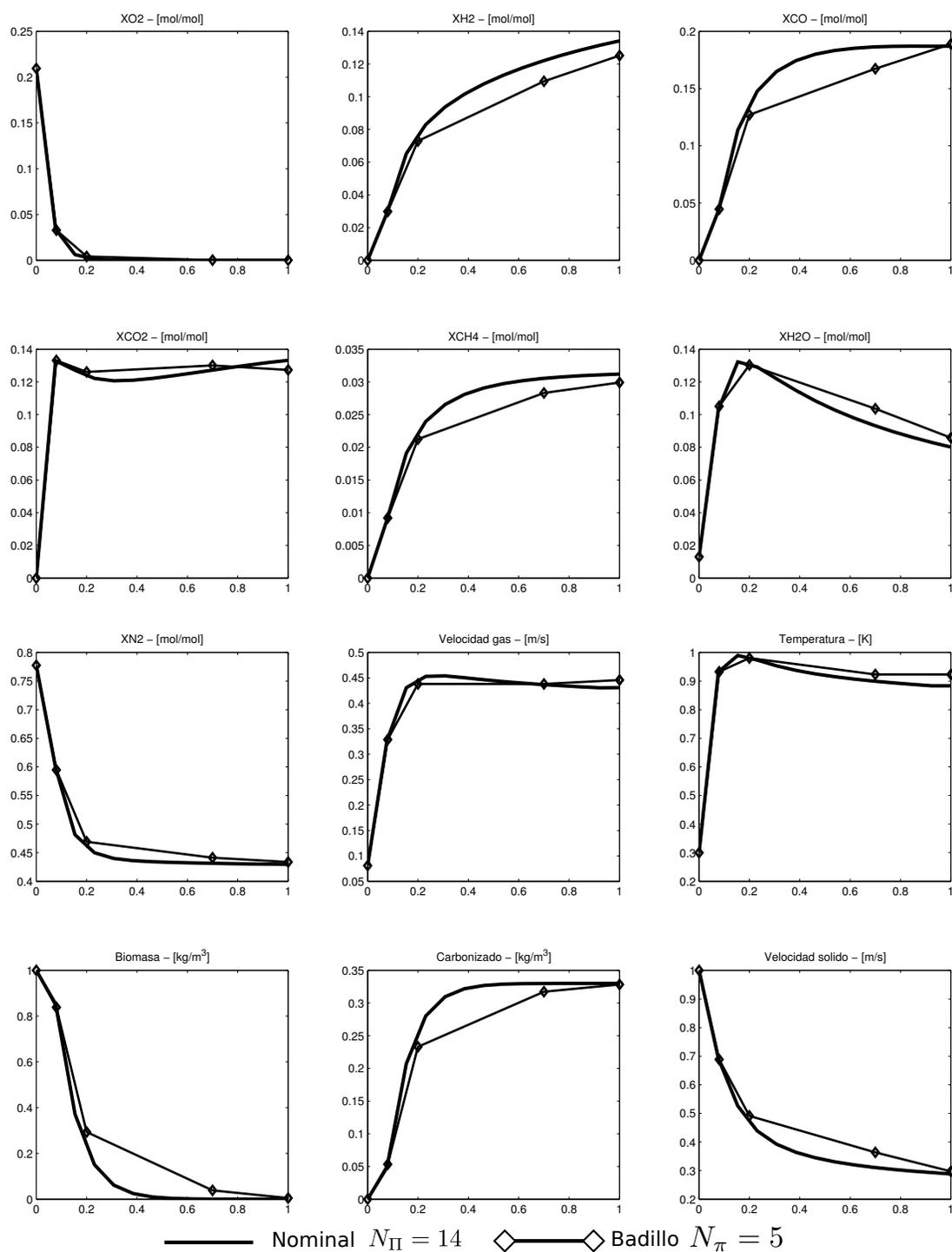


Figura 4.1: Soluciones en estado estacionario presentados en Badillo et. al (2012), $n_{\beta} = 12$, $n_{\pi} = 3$.

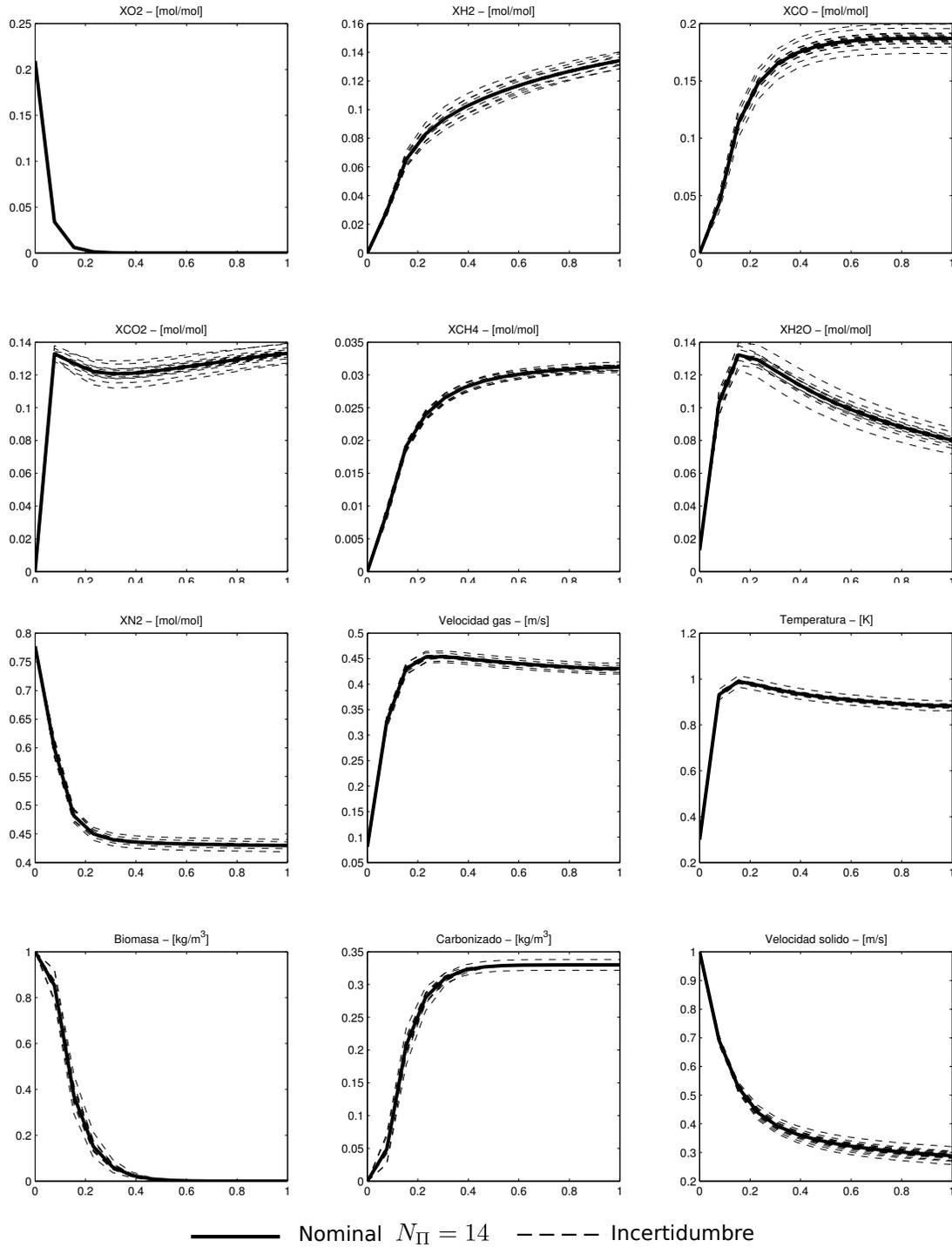


Figura 4.2: Solución en estado estacionario nominal y bandas de incertidumbre provocadas por variación paramétrica, $n_{\beta} = 12$.

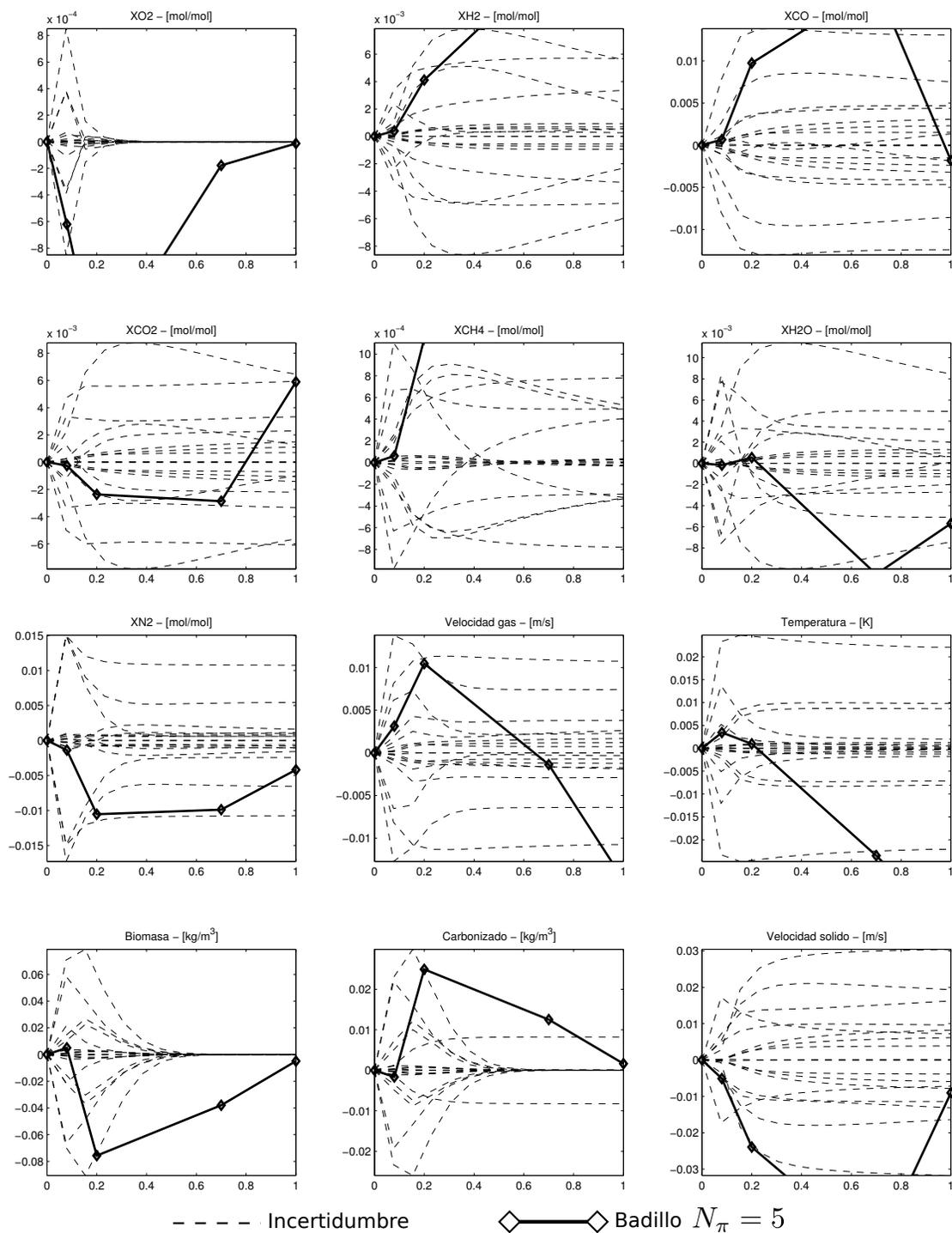


Figura 4.3: Errores en estado estacionario para la solución propuesta en Badillo et. al (2012) contra las bandas de incertidumbre provocadas por variación paramétrica con $n_{\beta} = 12$ y $n_{\pi} = 3$

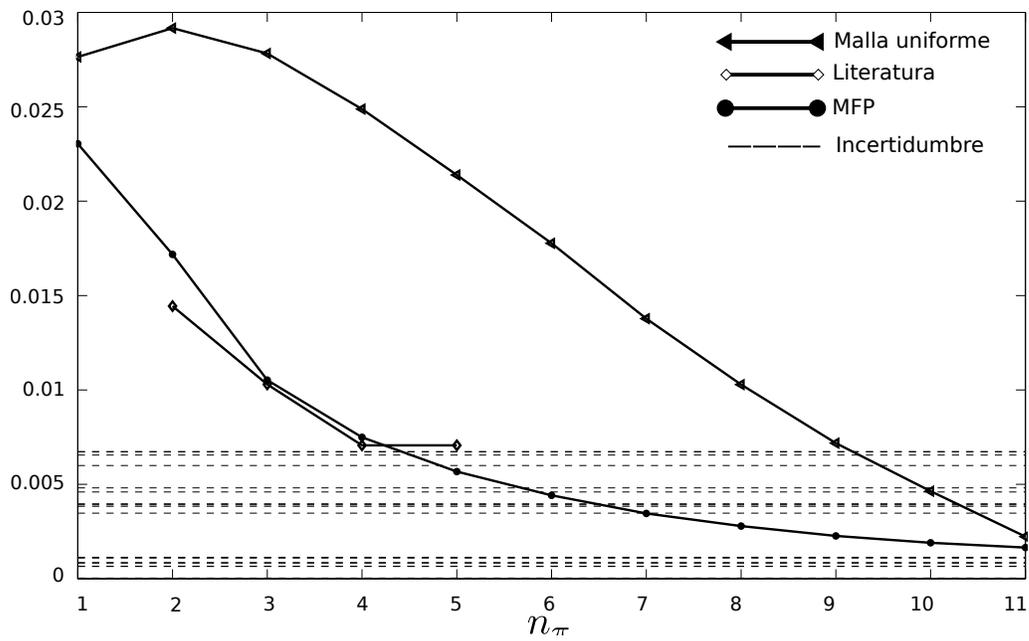


Figura 4.4: Error ρ como función de n_π para mallas generadas de manera uniforme, mallas utilizadas en Badillo et. al (2012) y mallas obtenidas con el método de factor de ponderación contra las bandas de incertidumbre (líneas punteadas).

4.2. Aplicación del método de distribución espacial por factor de ponderación

En la sección 4.1, se concluyó que para obtener una aproximación aceptable en relación a una solución nominal de referencia con una malla espacial uniforme de $n_\beta = 12$ nodos y un error ρ que considera unas bandas de incertidumbre generadas por la variabilidad paramétrica de los términos de reacción, es necesario una malla de $n_\pi = 5$ nodos internos. Para tal caso de estudio y siguiendo los pasos presentados en la sección 3.3, sabemos que es necesario obtener los vectores Δ_t y z_Δ así como el área bajo la curva (A_T) generada por estos dos vectores (Fig. 4.5).

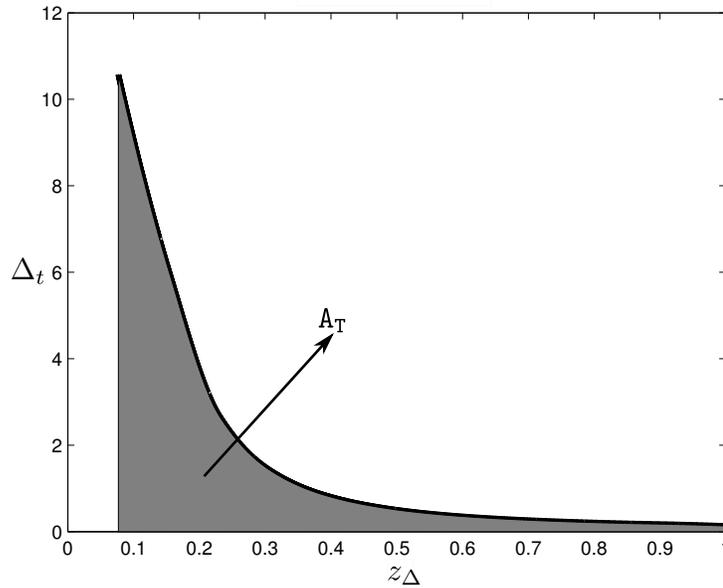


Figura 4.5: Curva generada por los vectores Δ_t y z_Δ y área total A_T , $N_\Pi = 14$

Una vez obtenidos los vectores Δ_t y z_Δ , para la primera iteración, donde el área restante es igual al área total ($A_R = A_T$) (Fig. 4.6a), de acuerdo al método se sabe que lo que se pretende es buscar la posición, dentro del vector z_Δ , posiblemente interpolado, $z_{\pi,2}$ tal que se cumpla con la igualdad 3.14 (Fig. 4.6 b), la figura muestra, tal y como se comentó en la descripción del método la posición de inicio de búsqueda $z_{s,1} = 0$ en esta iteración. Continuando con la aplicación del método, se determinan las posiciones $z_{s,1} + v_1$ y $z_{s,1} + 2v_1$ (Ec. 3.15), y se calcula el área contenida entre estos nodos (A_n) (Fig. 4.6c). Finalmente con ayuda del área de nodo A_n y el área total A_T se calcula el valor del factor de ponderación y la posición de inicio para la segunda iteración $z_{s,2}$ (Ec. 3.16) (Fig. 4.6d).

Así mismo, la aplicación del método para la iteración 2, nos dará la posición del nodo $z_{\pi,3}$ para la malla reducida π y la posición de inicio para la iteración 3 ($z_{s,3}$) (Fig. 4.7). En este caso, el área restante (A_R) (Fig. 4.7 a), será desde $\Delta_t(z_{s,2})$ hasta $\Delta_t(z_{\Delta, N_{\Pi-1}})$, y nuevamente

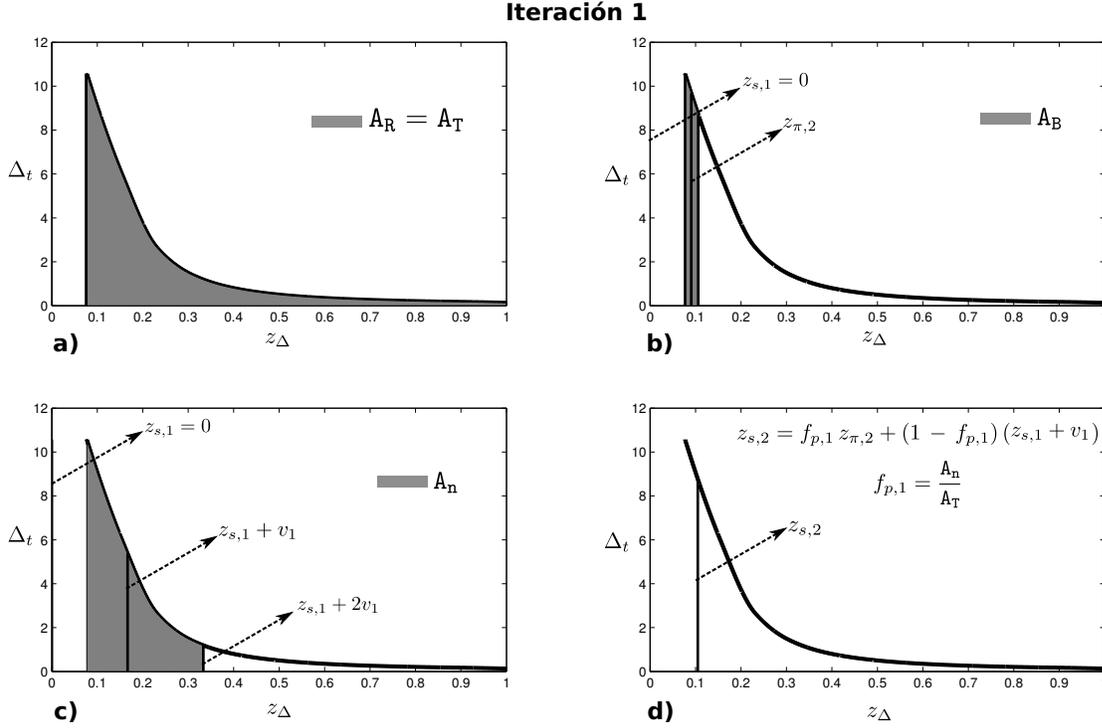


Figura 4.6: Aplicación del método de factor de ponderación para colocación de nodos para la iteración 1.

lo que se pretende es buscar la posición de $z_{\pi,3}$ tal que se cumpla con la igualdad 3.14 (Fig. 4.7 b). Continuando con la aplicación del método, se determinan las posiciones $z_{s,2} + v_2$ y $z_{s,2} + 2v_2$ (Ec. 3.15) y se calcula el área contenida entre estos nodos (A_n) (Fig. 4.7c) donde finalmente con ayuda del área de nodo A_n y el área total A_T se calcula el valor del factor de ponderación y la posición de inicio para la tercera iteración $z_{s,3}$ (Ec. 3.16) (Fig. 4.7d).

Una vez que han sido colocados $n_\pi - 1$ nodos con el criterio de distribución de área y cumplidas las iteraciones para $i = 1, \dots, 4$, tal y como se menciona en la descripción del método propuesto (Sección 3.3), para la iteración $i = 5 = n_\pi$, con el fin de cubrir lo largo del reactor y conociendo la condición de frontera del comportamiento espacial del sistema (Ec. 3.7-3.9), una vez conocido el valor de $z_{s,5}$ el valor de $z_{\pi,6}$ será determinado con la ecuación (3.17) (Fig. 4.8) y finalmente $z_{\pi,7} = z_{\beta,N_\beta} = 1$.

La aplicación del método de colocación de nodos por factor de ponderación ha permitido obtener una malla espacial $\pi = 0, 0.09, 0.16, 0.24, 0.42, 0.77, 1$, las simulaciones de la solución en estado estacionario utilizando esta malla son mostradas en la sección (4.3).

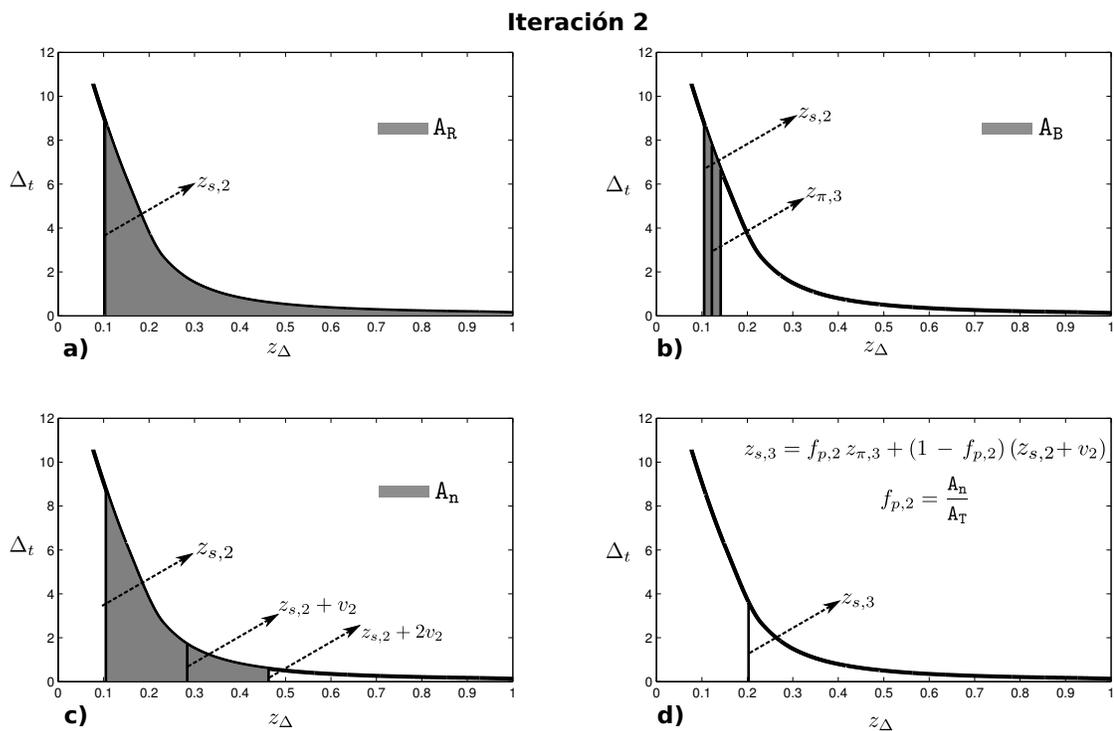


Figura 4.7: Aplicación del método de factor de ponderación para colocación de nodos para la iteración 2.

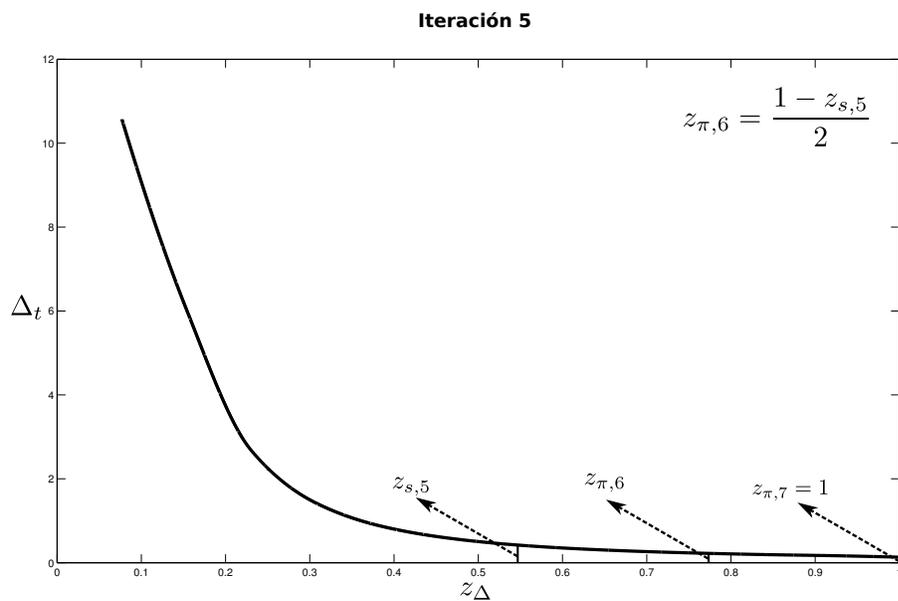


Figura 4.8: Aplicación del método de factor de ponderación para colocación de nodos para la iteración 5.

4.3. Comportamiento espacial del modelo reducido

Utilizando la malla espacial no uniforme obtenida en la sección anterior mediante el método de factor de ponderación, se ha obtenido la solución en estado estacionario del reactor de gasificación descrito por ecuaciones diferenciales parciales.

La Fig. 4.9 muestra la solución nominal $[\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{si}}, \mathbf{\Gamma}]_{\beta}$, considerando β como una malla uniforme con $n_{\beta} = 12$. Junto con la solución nominal, se presenta la solución aproximada $[\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{gi}}, \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{si}}, \mathbf{\Gamma}]_{\pi}$, con $\pi = 0, 0.09, 0.16, 0.24, 0.42, 0.77, 1, n_{\pi} = 5$. Las graficas muestran de manera evidente que, la solución aproximada representa cualitativa y cuantitativamente el comportamiento espacial del reactor de gasificación.

Por otro lado, la Fig. (4.10) muestra el error de la banda de incertidumbre considerada en este trabajo. Se puede observar que el error de aproximación del modelo reducido comparado con la solución nominal, cae en su totalidad dentro de la banda de incertidumbre que se ha puesto como objetivo.

Finalmente, la Tabla 4.1 muestra los valores de las componentes gaseosas a la salida del reactor, los resultados son comparados con los presentados anteriormente en Di Blasi (2000), Rogel (2007), Badillo et al. (2012).

Tabla 4.1: Valores a la salida del reactor de algunas variables involucradas. Resultados presentados en la literatura.

Variable	Di Blasi (2000)	Rogel (2007)	Badillo et al. (2012)	Este estudio
$\%X_{CO}$	18.5 – 20.3	20 – 28	18.4	18.13
$\%X_{H_2}$	9.8 – 16.8	5.45 – 10	12.8	12.79
$\%X_{CO_2}$	9.4 – 15.3	9.78 – 10.75	14	13.13
$\%X_{CH_4}$	2.4 – 4.5	4 – 7	3.5	3
$\%X_{H_2O}$	8.8	10.5 – 11	8	8.6
$\%X_{N_2}$	43 – 60	46.9 – 47.2	43.5	43.37
$\mathcal{T} K$	810 – 942	741	900	902

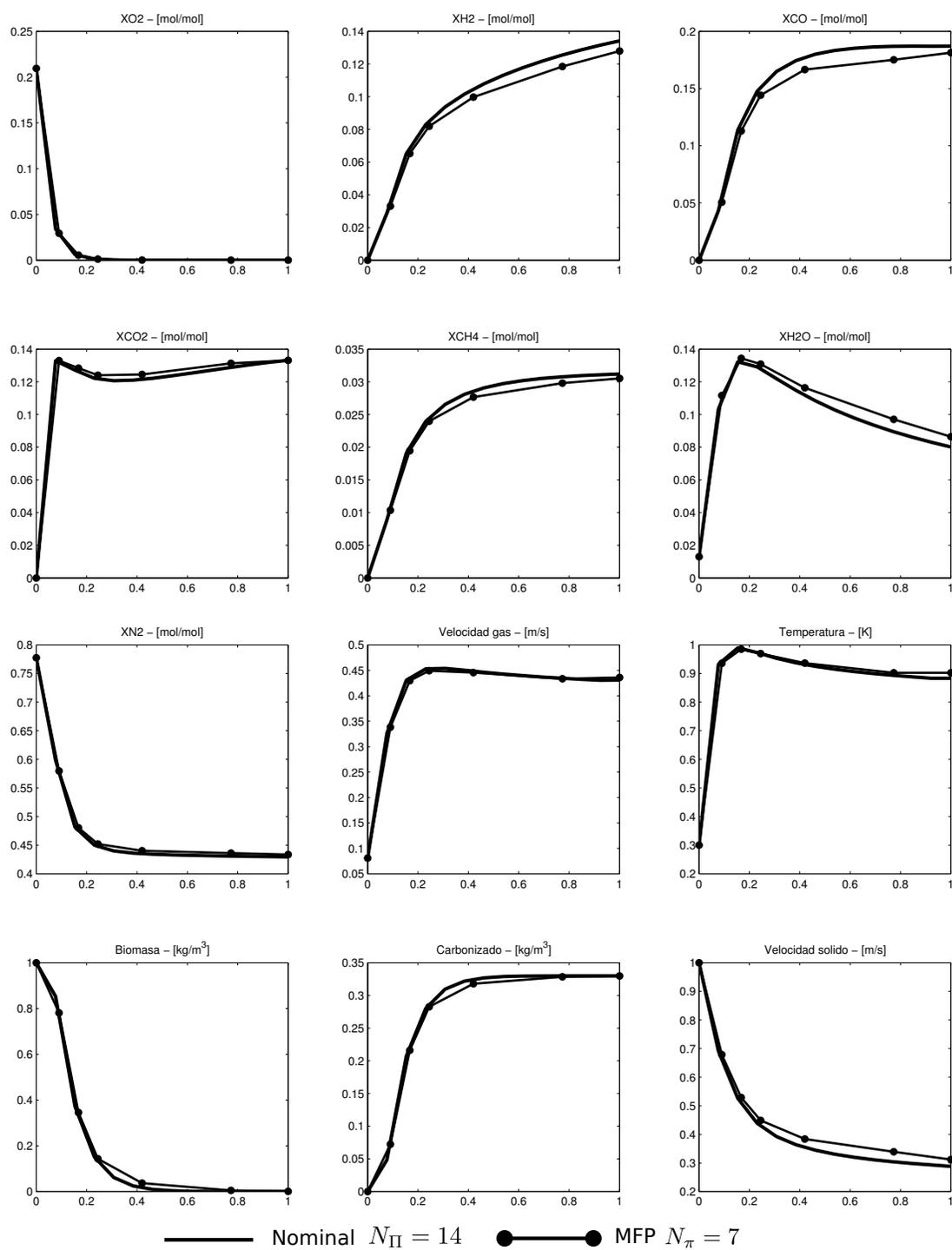


Figura 4.9: Soluciones en estado estacionario utilizando la malla obtenida a través del método de factor de ponderación $n_{\beta} = 12$, $n_{\pi} = 5$.

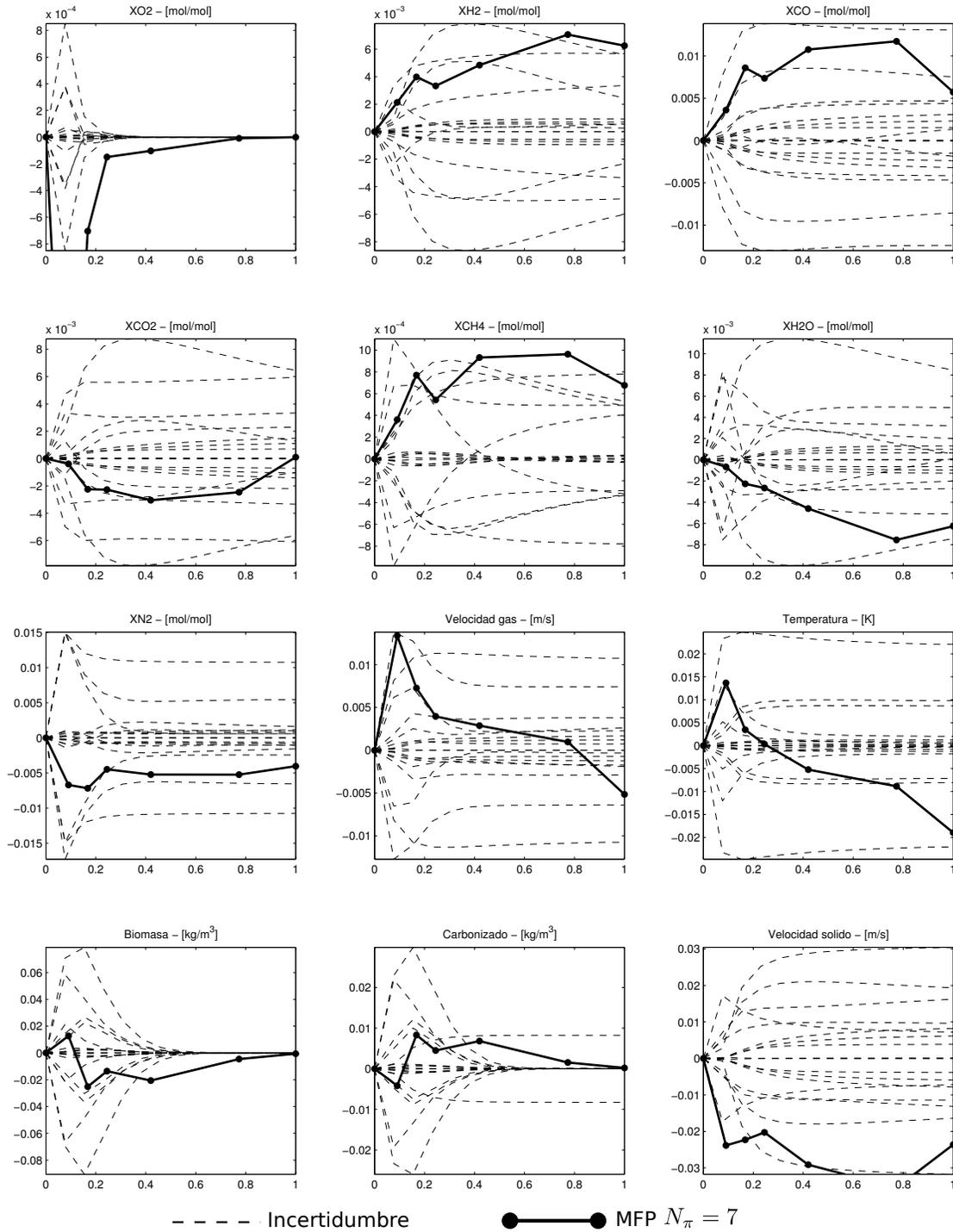


Figura 4.10: Errores en estado estacionario para la solución utilizando la malla obtenida a través del método de factor de ponderación $n_\beta = 12$, $n_\pi = 5$ contra las bandas de incertidumbre (líneas punteadas).

4.4. Comportamiento temporal del modelo reducido

El método de factor de ponderación permite la elección de una malla espacial, una vez que la solución para un instante de tiempo t es conocida. Para el caso de estudio y en este trabajo nos hemos ocupado sobre el instante de tiempo en el que el reactor de gasificación ha llegado a un estado estacionario conocido como zona de estabilización en la cima del reactor. Sin embargo, la versatilidad del método nos permite pensar que este puede ser aplicado para diferentes instantes de tiempo ó para el dominio temporal completo, teniendo así un método de malla móvil o adaptable en el tiempo.

Se llevó a cabo la evaluación del comportamiento dinámico del modelo reducido, es decir, la evolución en el tiempo de los nodos obtenidos para el instante de tiempo t (sección 4.2). Considerando la respuesta transitoria de estos nodos mediante la elección de una condición inicial cercana al modo de estabilización en la cima del reactor ($\mathcal{T} = 700 \text{ K}$, $\mathbf{A}_B = 5 \text{ kmol/m}^3$, $\mathbf{A}_C = 1.7 \text{ kmol/m}^3$). Las repuestas correspondientes para los nodos 2, 3, 4, 5 y 6 de la malla π se presentan en las Figs. (4.11)-(4.15) respectivamente.

Al observar los resultados se puede decir que en términos de tiempo (16 *min aprox*) y sobreimpulso el comportamiento transitorio del modelo reducido se asemeja cualitativamente a la solución nominal, es decir, las trayectorias en el tiempo de las soluciones del modelo reducido siguen la misma dirección que las del modelo nominal, y cuantitativamente las trayectorias se encuentran dentro de la banda de incertidumbre propuesta en este trabajo.

Con base en lo anterior, se puede decir que la elección de una malla espacial, en donde los nodos que la integran sean correctamente elegidos, la aplicación de métodos de malla móvil puede ser evitada, así, la única malla obtenida en este trabajo servirá, para que el modelo reducido sea utilizado para diseñar esquemas de control de las variables críticas del proceso; tal que, las condiciones operacionales, la eficiencia del proceso, la seguridad, el diseño y la posición de los elementos de medición en el reactor se vean favorecidas.

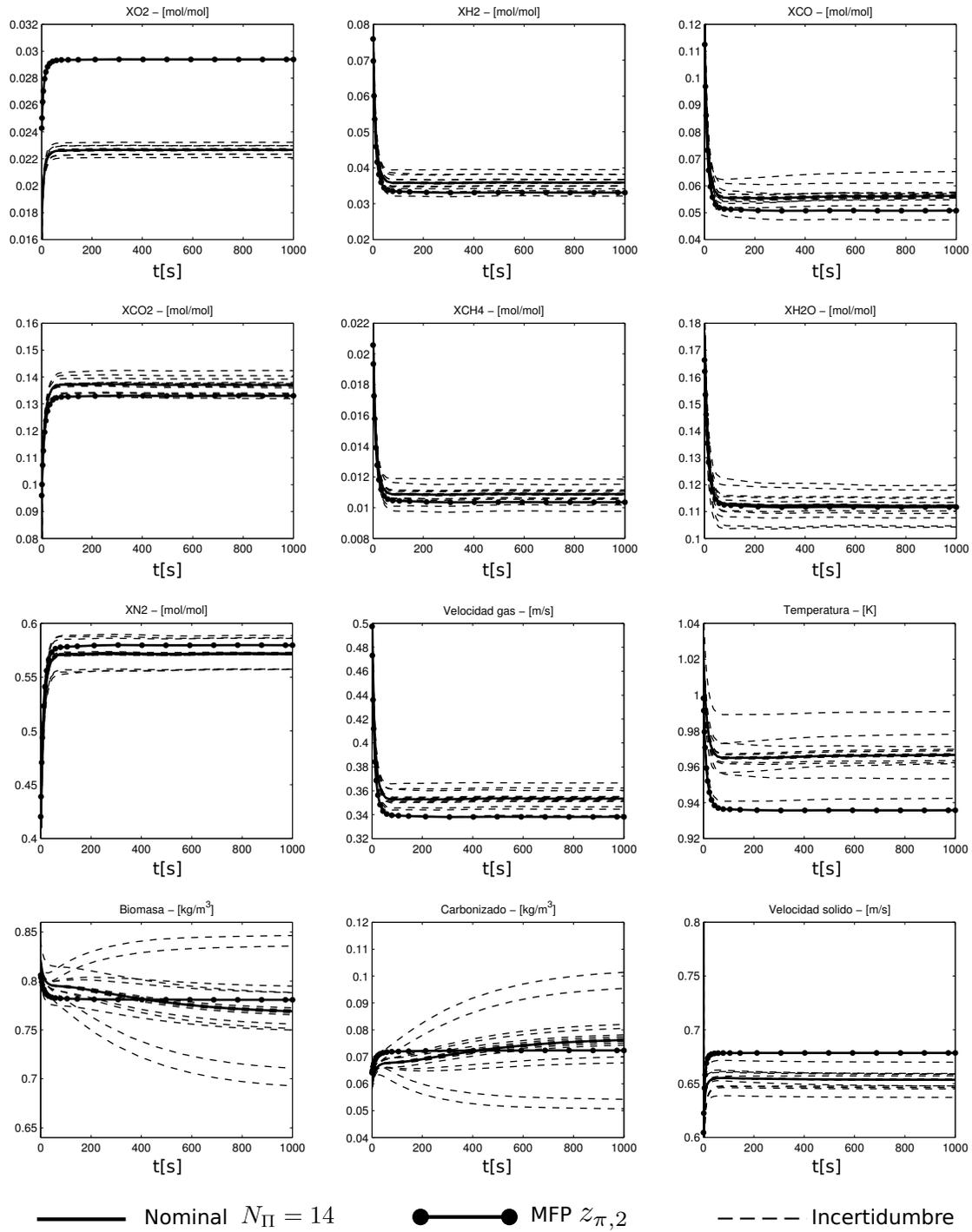


Figura 4.11: Respuesta en el tiempo para el segundo nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de las bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.

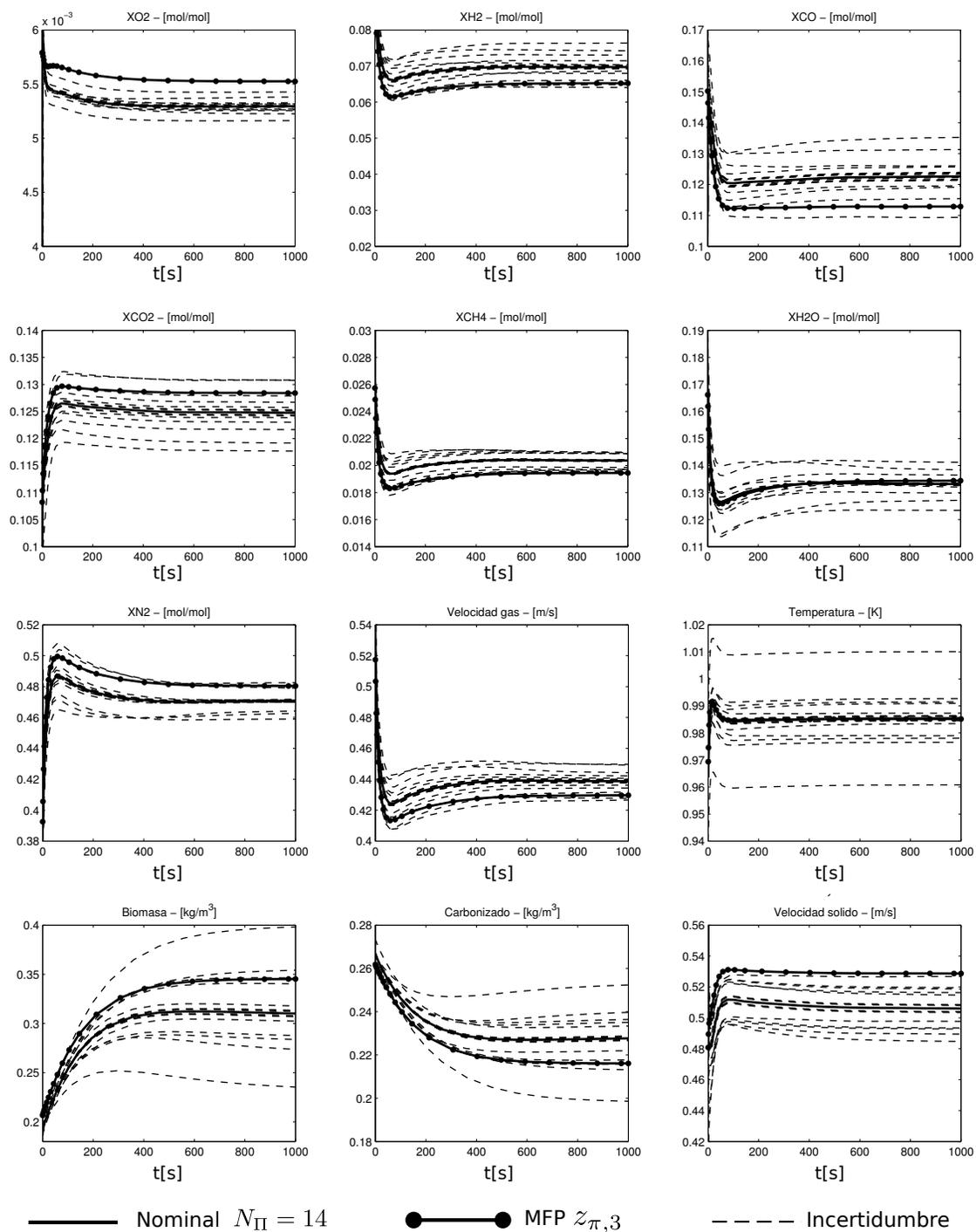


Figura 4.12: Respuesta en el tiempo para el tercer nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de la bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.

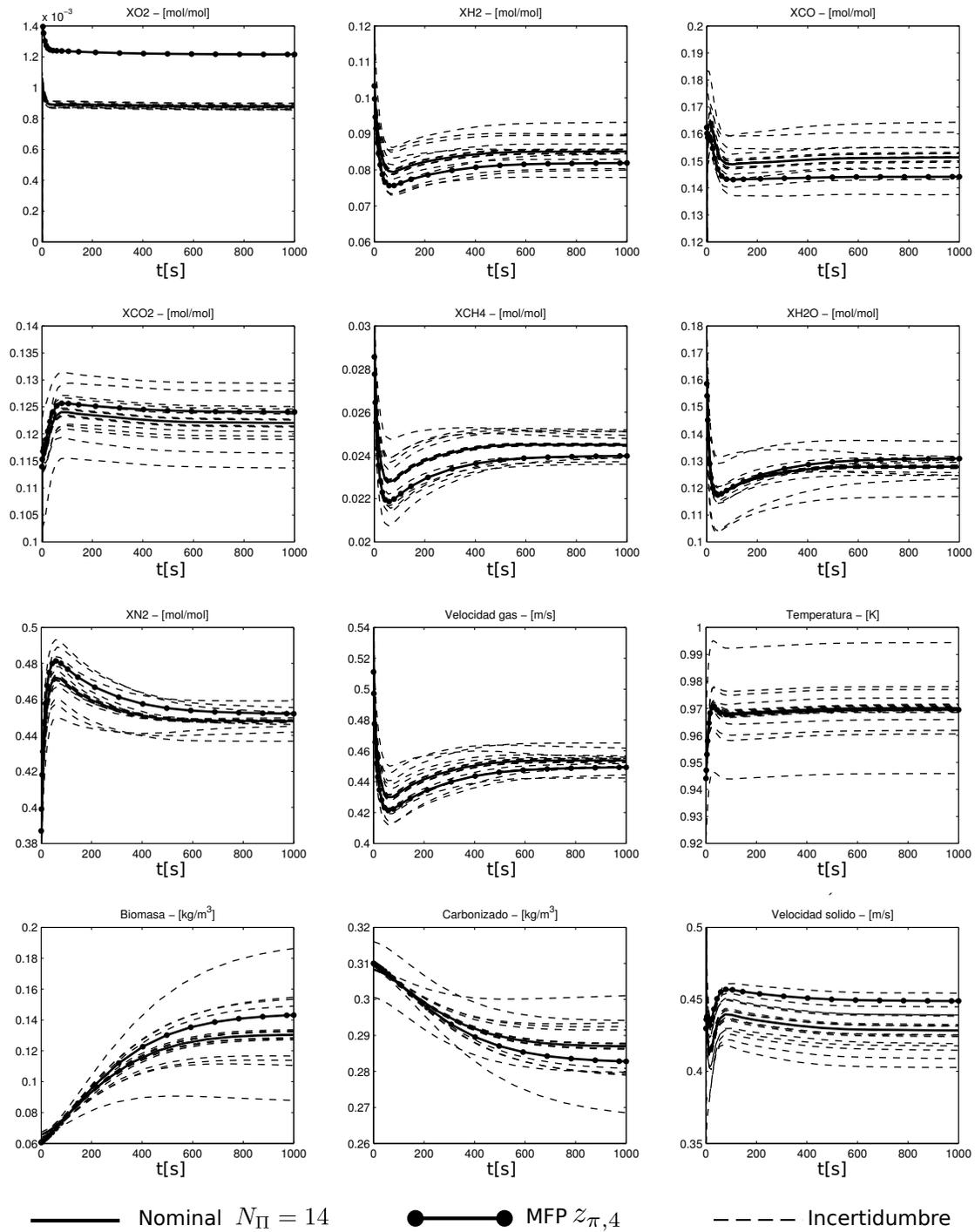


Figura 4.13: Respuesta en el tiempo para el cuarto nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de la bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.

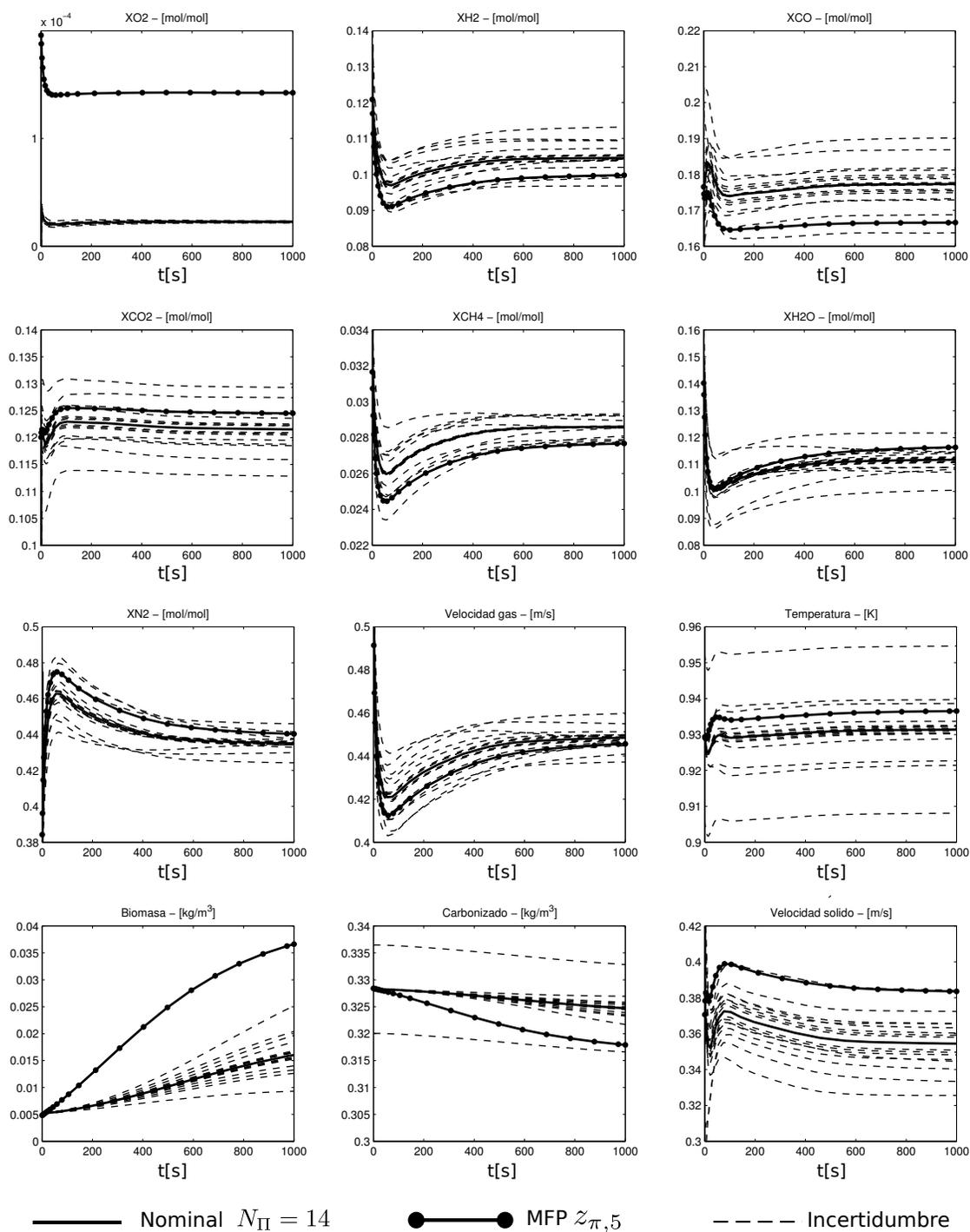


Figura 4.14: Respuesta en el tiempo para el quinto nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de la bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.

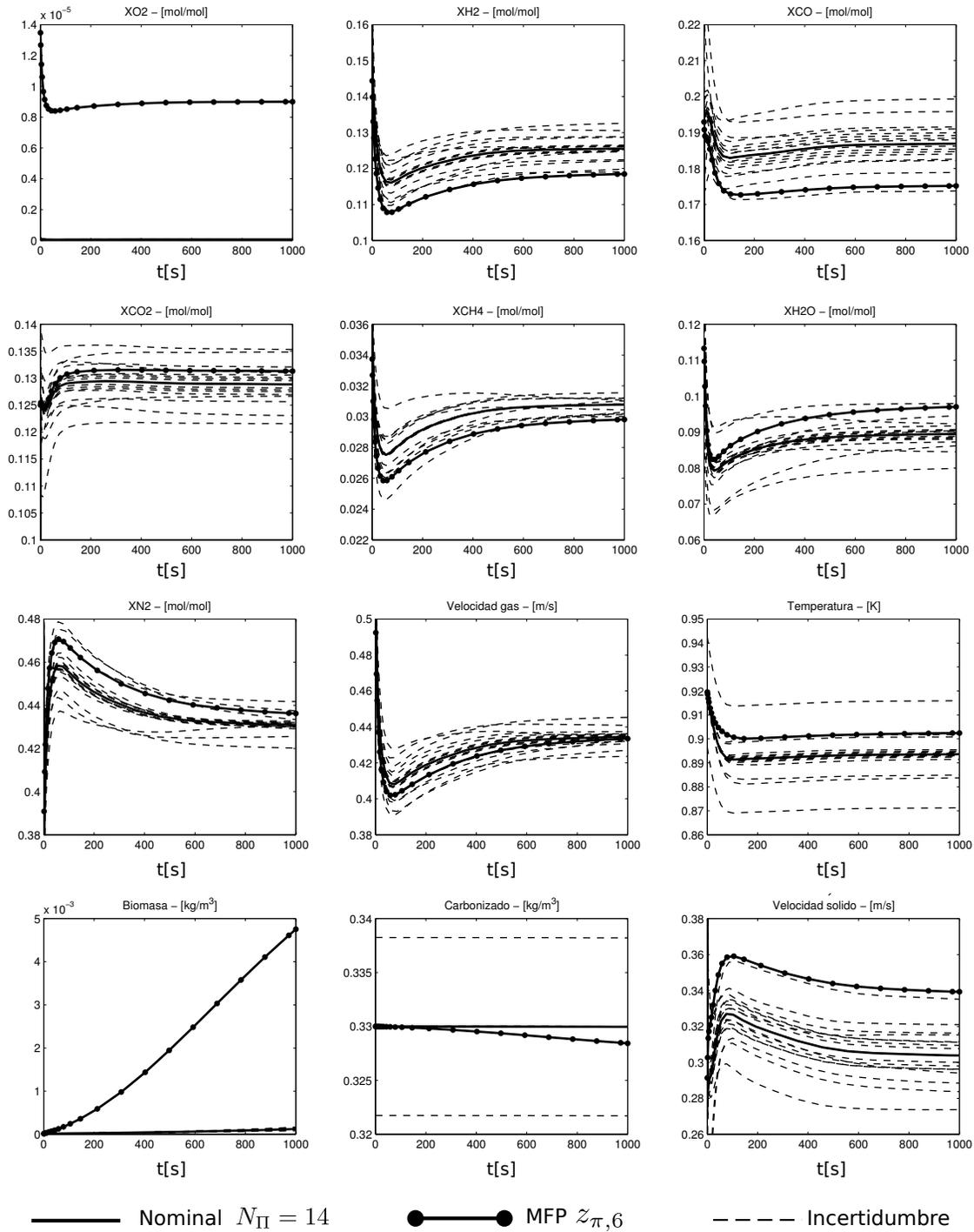


Figura 4.15: Respuesta en el tiempo para el sexto nodo del modelo reducido contra respuesta en el tiempo de la bandas de incertidumbre consideradas en este trabajo.

Capítulo 5

Conclusiones

Con el propósito de reducir el orden del modelo en ecuaciones diferenciales parciales de un gasificador de flujos paralelos y lecho fijo, una herramienta para la elección ó aproximación de nodos sobre un dominio espacial es propuesta en este trabajo. La aplicación del método de elección de nodos por factor de ponderación servirá para:

- Reducir el orden de la malla espacial con el propósito de utilizar herramientas de teoría de control y promover la autonomía, adaptabilidad, eficiencia y seguridad del proceso.
- La colocación de los nodos ayudará análogamente a la posición de los elementos de medición a lo largo del reactor.
- La función que relaciona los valores del error ρ , n_{Π} y n_{π} (sección 3.4) ayudará a la aproximación del número de nodos requeridos para minimizar un error en la aproximación del modelo reducido ó dará el valor error ρ aproximado dado un número de nodos n_{π} .

El comportamiento dinámico espacial nominal del reactor de gasificación puede ser descrito, dada una precisión requerida, por un modelo reducido de 5 nodos internos. Los valores de las variables a la salida del reactor se asemejan a los resultados presentados anteriormente por Di Blasi (2000), Rogel (2007), Badillo et al. (2012).

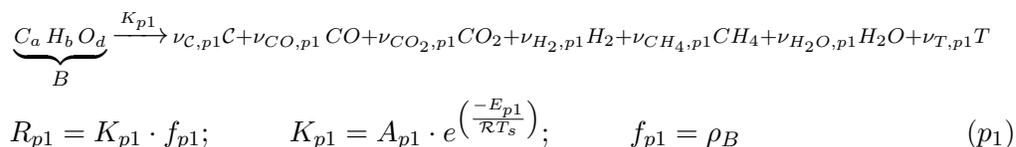
El método puede utilizarse como una herramienta de malla móvil, sin embargo, los resultados del comportamiento dinámico temporal indican que en este caso de estudio el modelo reducido se asemeja cualitativamente a la solución nominal y cuantitativamente las trayectorias se encuentran dentro de la banda de incertidumbre propuesta en este trabajo.

La elección de una malla espacial en donde los nodos que la integran sean correctamente elegidos puede evitar, la aplicación de métodos de malla móvil. Con la malla espacial obtenida en este trabajo el modelo reducido es un buen prospecto para ser utilizado como una aproximación del comportamiento nominal del sistema.

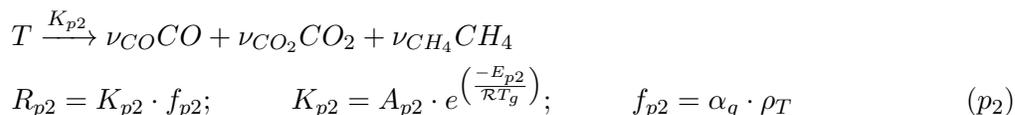
Apéndice A

Ecuaciones constitutivas de la cinética química

- Pirólisis primaria o devolatilización de la biomasa. La descomposición térmica de la biomasa (B) es representada por un submodelo de una reacción global tipo Arrhenius, los coeficientes estequiométricos del carbonizado (C), los volátiles (CO , CO_2 , H_2 , CH_4 , H_2O) y los alquitranes (T) son especificados experimentalmente.

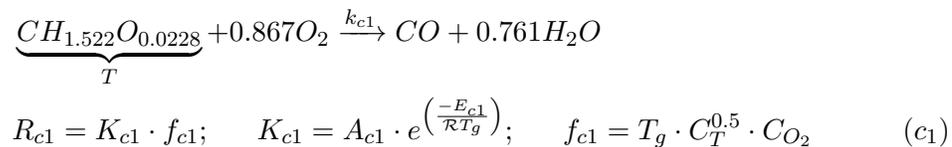


- Pirólisis secundaria. La descomposición térmica de los alquitranes (T) es modelada con una reacción global con cinética tipo Arrhenius.

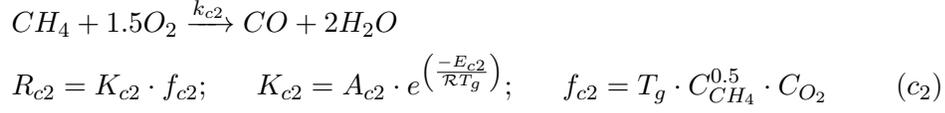


- Combustión de volátiles (reacciones homogéneas). El modelo incorpora reacciones homogéneas de oxidación de cuatro especies de la fase gaseosa.

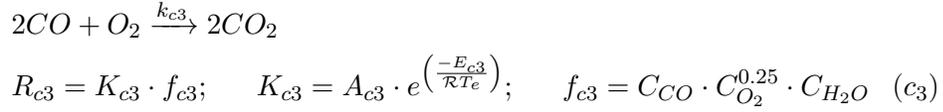
- *Oxidación de los alquitranes en fase vapor.* Los alquitranes son modelados por el hidrocarburo $T = CH_{1.522}O_{0.0228}$.



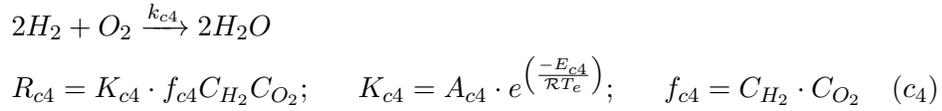
- Oxidación del metano (CH_4)



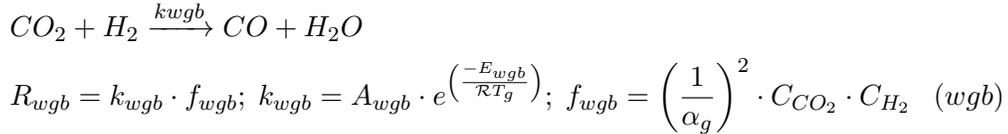
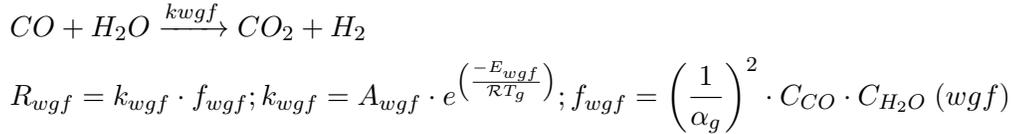
- Oxidación del Monóxido de Carbono (CO)



- Oxidación del Hidrógeno (H_2)



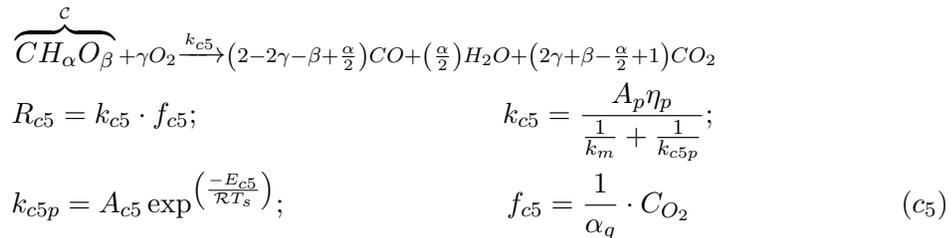
- Reacción de separación del CO_2 con vapor de agua (reversible).



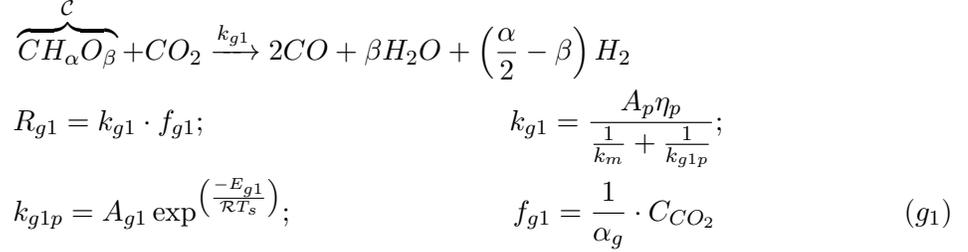
$$R_{wg} = R_{wgf} - R_{wgb} \quad (wf)$$

- Combustión y gasificación del carbonizado. En este estudio se emplea el modelo de contracción de núcleo no reactivo para representar las reacciones heterogéneas que ocurren en el gasificador. Este proceso químico es formado por 4 reacciones en las que el carbonizado es considerado como un hidrocarburo sólido $\mathcal{C} = CH_\alpha O_\beta$:

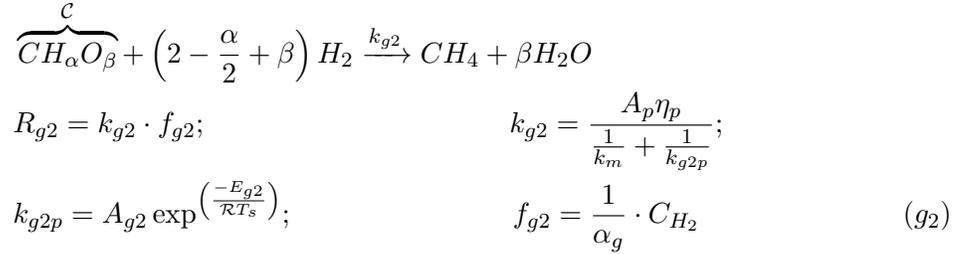
- Oxidación parcial del carbonizado



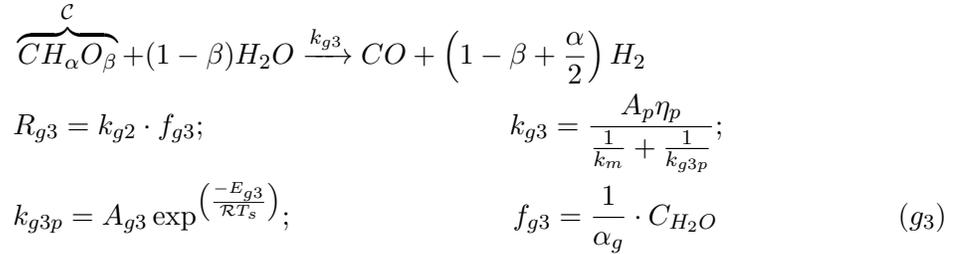
- Gasificación del carbonizado por medio de Dióxido de Carbono (CO_2)



- Gasificación del carbonizado por medio de Hidrógeno (H_2)



- Gasificación del carbonizado por medio de vapor de agua (H_2O)



Por simplicidad el carbonizado \mathcal{C} es tratado como carbono atómico por lo que $\alpha = 0$, $\beta = 0$ y $\gamma = 1$. Los coeficientes de transferencia de masa entre fase y de transferencia de calor son presentados en el apéndice B.

Apéndice B

Transferencia de masa, calor y propiedades de transporte del sistema.

Coefficientes de transferencia de masa en la interfase. Son deducidos a partir de modelos de transporte de masa difusivos y describen el intercambio de masa entre la fase gaseosa y la superficie de la fase sólida por medio de una capa estacionaria delgada e hipotética conocidos como modelos de capa límite.

$$k_m = \frac{2.06v_g}{\alpha_g} Re^{-0.575} Sc^{-2/3}; \quad k_m \leq k_m^* \quad (\text{B.1})$$

$$Re = \frac{d_p \rho_g v_g}{\mu_g}; \quad Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g D_g} \quad (\text{B.2})$$

donde k_m^* es un límite correctivo propuesto por Di Blasi (2000) que evita que el coeficiente provoque valores de temperaturas incongruentes y ρ_g es obtenida mediante la ley de gas ideal.

Coefficientes de transporte de calor en la interfase. Las ecuaciones constitutivas de transferencia de calor son obtenidas a partir balances de transferencia de calor puramente convectivos en una interfase debido a que se supone que la fase gaseosa forma una capa estacionaria paralela a la superficie de contacto de la fase sólida.

$$A_{sg} = \eta_p A_p \quad (\text{B.3})$$

$$h_{sg} = \zeta \frac{2.06 C_{pg} p_g v_g}{\alpha_g} Re^{-0.575} Pr^{-2/3} \quad (\text{B.4})$$

$$Pr = \frac{C_{pg} \mu_g}{\lambda_g} \quad (\text{B.5})$$

donde ζ es un factor correctivo para tomar en cuenta los efectos de transferencia de calor no estacionarios en sistema reactivos. A_p es el área de la partícula de carbonizado y η_p es la densidad de número de partículas definida como el número de partículas de la fase

sólida por unidad de volumen total, k_m es el coeficiente de transferencia de masa difusivo correspondiente al transporte de la especie reactante a través de la capa de la fase gaseosa que se forma alrededor de la partícula. La densidad de número de partículas η_p , el tamaño de la partícula d_p , el área de la superficie del núcleo no reactivo de la partícula A_p y su relación con el volumen de la misma V_p están dados por las siguientes expresiones:

$$\eta_p = \frac{\alpha_s}{V_p} \quad (\text{B.6})$$

$$d_u = X^{1/3} d_{p0} \quad \Rightarrow \quad X = \left(\frac{d_u}{d_{p0}} \right)^3 \quad (\text{B.7})$$

$$X = \frac{v_s}{v_{s0}} \quad (\text{B.8})$$

$$d_p = [(1 - \chi_{ash})d_u^3 + \chi_{ash}d_{p0}^3]^{1/3} \quad (\text{B.9})$$

$$d_p = 2r_c; \quad A_p = 4\pi r_c^2; \quad V_p = \frac{4}{3}\pi r_c^3 \Rightarrow V_p = A_p \frac{r_c}{3} = A_p \frac{d_p}{6} \quad (\text{B.10})$$

$$A_p \eta_p = \frac{6\alpha_s}{d_p} \quad (\text{B.11})$$

Coefficientes de pérdida de calor en las paredes del reactor.

- *Fase gaseosa.*

$$A_{gw} = \frac{4}{D} \quad (\text{B.12})$$

$$h_{gw} = h_w \cdot \frac{k_{rg}}{k_{rg} + k_{rs}} \quad (\text{B.13})$$

- *Fase sólida.*

$$A_{sw} = \frac{4}{D} \quad (\text{B.14})$$

$$h_{sw} = h_w \cdot \frac{k_{rs}}{k_{rg} + k_{rs}} \quad (\text{B.15})$$

$$h_w = 2.44 \cdot k_r^0 \cdot D_R^{-4/3} + 0.033 k_g \cdot Pr \cdot Re \cdot d_p^{-1} \quad (\text{B.16})$$

$$k_r^0 = k_g \cdot \epsilon \left(1 + \frac{d_p \cdot h_{rv}}{k_g} \right) + \frac{k_g(1 - \epsilon)}{\left(\frac{1}{\psi} + \frac{h_{rs} \cdot d_p}{k_s} \right)^{-1} + \frac{2}{3\kappa}} \quad (\text{B.17})$$

$$k_{rg} = k_g \left[\epsilon \left(1 + \frac{d_p \cdot h_{rv}}{k_g} \right) + \frac{0.14 \cdot Pr \cdot Re}{1 + 46 \left(\frac{d_p}{D} \right)^2} \right] \quad (\text{B.18})$$

$$k_{rs} = k_g \frac{1 - \epsilon}{\left(\frac{1}{\psi} + \frac{h_{rs} \cdot d_p}{k_s} \right)^{-1} + \frac{2}{3\kappa}} \quad (\text{B.19})$$

$$h_{rv} = \frac{4\sigma \cdot T_g^3}{1 + \frac{\epsilon}{2(1-\epsilon)} \left(\frac{1-e_m}{e_m} \right)} \quad (\text{B.20})$$

$$h_{rs} = 4\sigma \cdot T_s^3 \left(\frac{e_m}{2 - \epsilon} \right) \quad (\text{B.21})$$

$$\kappa = \frac{k_s}{k_g} \quad (\text{B.22})$$

Las ecuaciones que determinan el parámetro de empaquetamiento ψ están dadas por Hobbs et al. (1992).

Propiedades de transporte del sistema.

- *Fase gaseosa.* La viscosidad y la conductividad térmica efectiva del gas son definidas por Purnomo et al. (1990):

$$\lambda_g^{eff} = \lambda_g = k_g = 4.8 \times 10^{-4} T_g^{0.717} \quad (\text{B.23})$$

$$\mu_g = 1.98 \times 10^{-5} \left(\frac{T_g}{300} \right)^{2/3} \quad (\text{B.24})$$

Las difusividades efectivas $D_{gi}^{eff} = D_{gi}$ se calculan de acuerdo a la correlación de Fuller según Reid et al. (1987):

$$D_{gi}^{eff} = D_{gi} = \frac{0.00143 T^{1.75}}{PW_{gi} \left[(\sum \nu)_i^{1/3} + (\sum \nu)_g^{1/3} \right]^2} \quad (\text{B.25})$$

$$W_{gi} = 2 \left[\frac{1}{W_i} + \frac{1}{W_g} \right]^{-1} \quad (\text{B.26})$$

$$(\text{B.27})$$

La correlación obtenida por Koufopoulos et al. (1991) de la capacidad específica del gas para reactores de lecho fijo es utilizada como referencia:

$$C_{pg} = 1005 + (T_g - 300) \quad (\text{B.28})$$

- *Fase sólida.* La conductividad térmica efectiva de la fase sólida es modelada por la correlación dada en Goldman et al. (1984):

$$\lambda_s^{eff} = d_p \lambda_{rg} + \frac{\lambda_s}{\frac{\lambda_s}{d_p \lambda_{rs}} + 1.43(1 - 2\alpha_g)} \quad (\text{B.29})$$

$$\lambda_{rg} = 4\sigma\epsilon_g T_g^3; \quad \epsilon_g = 0.05 \quad (\text{B.30})$$

$$\lambda_{rs} = 4\sigma\epsilon_s T_s^3; \quad \epsilon_s = 0.85 \quad (\text{B.31})$$

$$\lambda_s = k_s = 0.0013 + 0.05 \left(\frac{T_s}{1000} \right) + 0.63 \left(\frac{T_s}{1000} \right)^2 \quad (\text{B.32})$$

$$(\text{B.33})$$

Apéndice C

Modelo TRCTA

Apéndice D

Parámetros de cinética química, entalpías de reacción, composición de hidrocarburos y propiedades de transporte

Constantes y propiedades del lecho	Valor (Unidades)
Densidad de la biomasa entrante	$\rho_{B0} = \rho_{s0} = 200(kg/m^3)$
Densidad del aire entrante	$\rho_{aire} = \rho_{g0} = 1.18(kg/m^3)$
Porosidad del lecho	$\epsilon = 0.5$
Altura del reactor	$0.5(m)$
Diámetro interno del reactor	$D = 0.45(m)$
Tamaño de la partícula inicial	$d_{p0} = 0.01(m)$
Contenido de cenizas	$\chi_{ash} = 0.105$
Factores de corrección para coeficientes de transferencia	$\zeta = 1/2 \quad k_m^* = 0.045(m/s)$
Temperatura de los flujos entrantes	$T_{s0} = T_{g0} = 300(K)$
Presión de operación	$P_0 = 1(atm)$
Composición molar del gas a la entrada (aire)	$X_{O_2} = 0.2095, X_{H_2} = 0, X_{CO} = 0,$ $X_{CO_2} = 0, X_{CH_4} = 0, X_{H_2O} =$ $0.013, X_{N_2} = 0.7775, X_T = 0$
Composición de la biomasa	$\nu_C = 0.33, \nu_T = 0.19, \nu_{CO} = 0.075,$ $\nu_{CO_2} = 0.13, \nu_{CH_4} = 0.015, \nu_{H_2} =$ $0.01, \nu_{H_2O} = 0.25$
Composición de los alquitranes	$\nu_{CO} = 0.5, \nu_{CO_2} = 0.3, \nu_{CH_4} = 0.2$

Tabla D.1: Características a la entrada de aire y biomasa, propiedades del lecho y dimensiones del reactor.

Párametro (Unidades)	Valor(Incertidumbre)	Referencia
Pirólisis		
$A_{p1}(s^{-1})$	1.516×10^3	Roberts (1970)
$E_{p1}(kJ/mol)$	105 ($\pm 2\%$)	Roberts (1970)
$\Delta H_{p1}(kJ/kg)$	-420 ($\pm 5\%$)	Di Blasi (1996)
$A_{p2}(s^{-1})$	4.28×10^{-6}	Liden et al. (1988)
$E_{p2}(kJ/mol)$	107	Liden et al. (1988)
$\Delta H_{p2}(kJ/kg)$	42	Di Blasi (1996)
Combustión del Carbonizado		
$A_{c5}(s^{-1})$	5.67×10^9	Kashiwagi y Nambu (1992)
$E_{c5}(kJ/mol)$	160 ($\pm 2\%$)	Kashiwagi y Nambu (1992)
$\Delta H_{c5}(kJ/kg)$	2.5×10^4 ($\pm 5\%$)	Kashiwagi y Nambu (1992)
Gasificación del Carbonizado		
$A_{g1}(m/s)$	7.92×10^8	Groenveld y van Swaaij (1980)
$E_{g1}(kJ/mol)$	218($\pm 2\%$)	Groenveld y van Swaaij (1980)
$\Delta H_{g1}(kJ/kmol)$	172.6×10^3 ($\pm 5\%$)	Bryden y Ragland (1996)
$A_{g2}(m/s)$	7.92×10^5	Groenveld y van Swaaij (1980)
$E_{g2}(kJ/mol)$	218	Groenveld y van Swaaij (1980)
$\Delta H_{g2}(kJ/kmol)$	-74.93×10^3	Bryden y Ragland (1996)
$A_{g3}(m/s)$	7.92×10^8	Groenveld y van Swaaij (1980)
$E_{g3}(kJ/mol)$	218($\pm 2\%$)	Groenveld y van Swaaij (1980)
$\Delta H_{g3}(kJ/kmol)$	131.4×10^3 ($\pm 5\%$)	Bryden y Ragland (1996)
Separación de gas por agua		
A_E-	0.0265	Yoon et al. (1978)
$E_E(kJ/mol)$	65.8	Yoon et al. (1978)
$A_{wg}(m^3/mol \cdot s)$	2.78	de Souza-Santos (2005)
$E_{wg}(kJ/mol)$	12.6	de Souza-Santos (2005)
$\Delta H_{wg}(kJ/mol)$	41.2×10^3	Biba et al. (1978)
Combustión de volátiles		
$A_{c1}((m^3/mol)/sK)$	9.2×10^4	Bryden y Ragland (1996)
$E_{c1}(kJ/mol)$	80.5	Bryden y Ragland (1996)
$\Delta H_{c1}(kJ/kg)$	-17473	Bryden y Ragland (1996)
$A_{c2}((m^3/mol)/sK)$	9.2×10^4	Bryden y Ragland (1996)
$E_{c2}(kJ/mol)$	80.5	Bryden y Ragland (1996)
$\Delta H_{c2}(kJ/kg)$	-50190	Bryden y Ragland (1996)
$A_{c3}((cm^3/mol)^{3/4}/s)$	3.98×10^{14}	Cooper y Hallett (2000)
$E_{c3}(kJ/mol)$	125.6	Cooper y Hallett (2000)
$\Delta H_{c3}(kJ/kg)$	-10107	Bryden y Ragland (1996)
$A_{c4}((m^3/mol)/sK)$	$q \times 10^8$	Di Blasi (2000)
$E_{c4}(kJ/mol)$	84	Di Blasi (2000)
$\Delta H_{c4}(kJ/kg)$	-142919	Bryden y Ragland (1996)

Tabla D.2: Tabla de parámetros de cinética química y entalpías de reacción.

$i \backslash \mathcal{R}_j$	p_1	p_2	c_5	g_1	g_2	g_3	wg	c_1	c_2	c_3	c_4	Fase π
O_2	-	-	-1	-	-	-	-	-0.8670	-1.5	-1	-1	Gas
H_2	0.0975	-	-	-	-2	1	1	-	-	-	-2	
CO	0.0526	0.2495	-	2	-	1	-1	1	1	-2	-	
CO_2	0.0581	0.0953	1	-1	-	-	1	-	-	2	-	
H_2O	0.2727	-	-	-	-	-1	-1	0.7610	1	-	1	
CH_4	0.0184	0.1742	-	-	1	-	-	-	-1	-	-	
N_2	-	-	-	-	1	-	-	-	-	-	-	
T_2	0.2672	-	-	-	-	-	-	-1	-	-	-	
B_2	-1	-1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	Sólida
C	0.5400	-	-1	-1	-1	-1	-	-	-	-	-	

Tabla D.3: Coeficientes estequiométricos $s_{i,j}$ para las componentes i de las fases gaseosa y sólida en las reacciones \mathcal{R}_j involucradas en el proceso de gasificación.

Referencias

- Amundson, N. R. y L. E. Arri (1978). Char gasification in a countercurrent reactor. *AIChE Journal* 24, 87–101.
- Aris, R. (1965). Introduction to the analysis of reactors. *Prentice-Hall*.
- Badillo, U. (2009). *Modelado orientado al control de gasificadores. Tesis de Maestría, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.*
- Badillo, U., L. Alvarez-Icaza, y J. Alvarez (2012). *Model design of a class of packed bed tubular gasification reactors.* Chemical Engineering Science, –.
- Baldea, M. y P. Daoutidis (2007). *Dynamics and control of autothermal reactors for the production of hydrogen.* Chemical Engineering Science 62, 3218–3230.
- Basu, P. (2006). *Combustion and gasification in fluidized beds.* Taylor and Francis.
- Biba, V., J. Macak, E. Klose, y J. Malecha (1978). Mathematical model for the gasification of coal under pressure. *Industrial and Engineering Chemical Process Design and Development* 17, 92.
- Bryden, K. M. y K. W. Ragland (1996). *Numerical modeling of a deep, fixed bed combustor.* Energy and Fuels 10, 269–275.
- Caram, H. S. y C. Fuentes (1982). Simplified model for a countercurrent char gasifier. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals* 21, 464–472.
- Cooper, J. y W. Hallett (2000). *A numerical model for packed-bed combustion of char particles.* Chemical Engineering Science 55, 4451–4460.
- Coste, J., D. Rudd, y N. R. Amundson (1961). Taylor diffusion in tabular reactors. *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 39, 149–151.
- Dasappa, S., D. Subbukrishna, K. Suresh, P. Paul, y G. Prabhu (2011). *Operational experience on a grid connected 100 kwe biomass gasification power plant in Karnataka, India.* Energy for Sustainable Development 15, 231 – 239.
- de Souza-Santos, M. L. (2005). *Solid Fuels Combustion and Gasification.* Marcel Dekker Inc.
- Deans, H. A. y L. Lapidus (1960). A computational model predicting and correlating the behavior of fixed bed reactors. *AIChE Journal* 6, 663–668.
- Di Blasi, C. (1996). *Heat, momentum and mass transport through a shrinking biomass particle exposed to thermal radiation.* Chemical Engineering Science 51, 1121 – 1132.

- Di Blasi, C. (2000). Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical Engineering Science* 55, 2931–2944.
- Di Blasi, C. (2008). Modeling chemical and physical process of wood and biomass pyrolysis. *Progress in Energy and Combustion Science* 34, 47–90.
- Dixon, R. (1999). Advanced gasifier control. *Computing and Control Engineering Journal* 10, 93–96.
- Gobel, B., U. Henriksen, J. T. K., Q. B., y H. N. (2007). The development of a computer model for a fixed bed gasifier and its use for optimization and control. *Bioresource Technology* 98, 2043–2052.
- Goldman, J., A. Xieu, A. Oko, R. Milne, y R. Essenhigh (1984). A comparison of predictions and experiment in the gasification of anthracite in air and oxygen-enriched/steam mixtures. en *Proceedings of the 20th International Symposium on Combustion*, pp. 1365–1372.
- Groenveld, M. J. y W. P. M. van Swaaij (1980). Gasification of char particles with CO_2 and H_2O . *Chemical Engineering Science* 35, 307–313.
- Hobbs, M. L., P. Radulovic, y L. Douglas Smoot (1992). Modeling fixed-bed coal gasifiers. *Advanced Combustion Engineering Research Center* 38, 681–701.
- Huang, W., Y. Ren, y R. D. Russell (1994). Moving mesh methods based on moving mesh partial differential equations. *Journal of Computational Physics* 113, 279–290.
- Kashiwagi, T. y H. Nambu (1992). Global kinetic constants for thermal oxidative degradation of a cellulosic paper. *Combustion and Flame* 88, 345–368.
- Khalil, H. K. (2002). *Nonlinear Systems*. Prentice Hall.
- Koufopoulos, C., N. Papayannakos, G. Maschio, y A. Lucchesi (1991). Modelling of the pyrolysis of biomass particles. Studies on kinetics, thermal and heat transfer effects. *Canadian Journal of Chemical Engineering* 69, 907–915.
- Liden, A., F. Berruti, y S. D. (1988). A kinetic model for the production of liquids from the flash pyrolysis of biomass. *Chemical Engineering Communications* 65, 207.
- Nájera, I. (2012). Modelado y control de una clase de reactores tubulares exotérmicos. Tesis de Maestría, Universidad Autónoma Metropolitana.
- Paes, T. (2005). *Modeling for control of a biomass gasifier*. Tesis doctoral, Technische universiteit eindhoven.
- Purnomo, D., J. Aerts, y K. Ragland (1990). Pressurized downdraft combustion of wood-chips. en *Proceeding of 23rd International Symposium on Combustion*, pp. 1025–1032.
- Reed, T. B. y A. Das (1988). *Handbook of Biomass Downdraft Gasifier Engine Systems*. Solar Technical Information Program.
- Reid, R., J. M. Prausnitz, y B. E. Poling (1987). *The properties of gases and liquids*, Fourth ed.. McGraw-Hill.
- Roberts, A. (1970). A review of kinetics data for the pyrolysis of wood and related substances. *Combustion and Flame* 14, 261–272.

- Rogel, A. R. (2007). Estudio numérico experimental de un gasificador estratificado que opera con biomasa, utilizando CFD. *Tesis doctoral, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.*
- Romero, A. y L. Alvarez-Icaza (2010, September). *Reduced order dynamical model for supercapacitors.* en 7th International Conference on electrical Engineering, Computing Science and Automatic Control, *Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México*, pp. –.
- Romero, A. y L. Alvarez-Icaza (2011). *Comparison of discretization methods applied to the single-particle model of lithium-ion batteries.* *Journal of Power Sources* 196, 10267–10279.
- Ruiz, J. A., M. C. Juárez, M. P. Morales, P. Muñoz, y M. A. Mendivil (2013). Biomass gasification for electricity generation: Review of current technology barriers. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 18, 174 – 183.
- Yoon, H., J. Wei, y M. M. Denn (1978). *A model for moving bed coal gasification reactors.* *AIChE* 24, 885–903.
- Yun, Y. (2012). *Gasification for practical Applications.* INTECH.