



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

ANÁLISIS DINÁMICO Y CARACTERIZACIÓN
DE REACTORES DE GASIFICACIÓN

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

PRESENTA:
OSCAR ARMANDO HERNÁNDEZ TORRES

TUTORES PRINCIPALES

DR. LUIS AGUSTÍN ÁLVAREZ-ICAZA LONGORIA, II-UNAM
DR. JESÚS ÁLVAREZ CALDERÓN, UAMI

MÉXICO, D. F. ENERO 2016

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Moreno Pérez Jaime Alberto
Secretario: Dr. Vicente y Rodríguez William
Vocal: Dr. Álvarez Icaza Longoria Luis A.
1er. Suplente: Dr. Álvarez Calderón Jesús
2o. Suplente: Dr. Palacio Pérez Arturo

La tesis se realizó en el Instituto de Ingeniería, UNAM.

TUTORES DE TESIS:

Dr. Luis Agustín Álvarez-Icaza Longoria

Dr. Jesús Álvarez Calderón

Agradecimientos

- A la Universidad Nacional Autónoma de México y al Instituto de Ingeniería, por las instalaciones, materiales y equipo facilitado para desarrollar este trabajo de investigación.
- Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por la subvención económica otorgada para la realización de los estudios de maestría.
- A mis directores de tesis, el Dr. Luis Agustin Álvarez y el Dr. Jesús Álvarez; por sus conocimientos, orientación y observaciones hechas a lo largo de la realización de este trabajo.
- A los miembros del jurado por su tiempo e interés para revisar este trabajo de tesis, así como sus valiosas observaciones.
- A mi familia, principalmente a mis padres Ana Patricia Torres y Oscar Hernández, así como a mis hermanos Lizbeth, Nayeli, Eduardo y Daniel, por ser ejemplos a seguir, estar conmigo en cada momento y apoyarme en cada uno de mis sueños.
- A mis compañeros y amigos de la comunidad de Control por compartir sus conocimientos, experiencias y ocurrencias, por formar parte de esta grata etapa de mi vida.
- A mis amig@s que siempre han estado a mi lado en los momentos importantes, por el tiempo y sus consejos compartidos.

Resumen

En la siguiente tesis se expone una metodología experimental no destructiva que permite identificar el grado de dispersión (el inverso del número de Peclet) que se presenta en el interior de una clase de reactores de gasificación. Esta metodología que, en principio está basada en una técnica de trazadores o variables que se miden a la salida del reactor, es ampliamente utilizada en el área de Ingeniería Química para reactores donde el estado de agregación de la materia es líquido. Sin embargo, el caso de estudio presente en este trabajo es el de una clase de reactores donde el estado de agregación de la materia que predomina es el estado gaseoso, por lo cual se toma como punto de partida dicho método para proponer una segunda y definitiva metodología basada en métricas estadísticas de manera que, en conjunto son capaces de identificar el grado de dispersión ante incertidumbre paramétrica. Finalmente, mediante simulación se demuestra que es posible estimar el número de Peclet de forma experimental con un error medio cuadrático del 3% con excepción de la entalpía de reacción del carbonizado.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Etapas del proceso de gasificación	1
1.1.1. Precalentamiento y secado.	1
1.1.2. Pirólisis o devolatilización.	1
1.1.3. Combustión.	2
1.1.4. Reducción.	2
1.2. Clasificación de gasificadores	2
1.2.1. Régimen hidrodinámico de operación (Basu, 2006)	3
1.3. Motivación	6
1.4. Objetivo	7
1.5. Estructura de la tesis	7
2. Modelado de gasificadores de lecho móvil	9
2.1. Reactores de flujo a contracorriente en operación ascendente	9
2.2. Reactores de flujos concurrentes/paralelos en operación descendente	10
2.3. Preliminares del modelo de estudio	11
2.3.1. Modelo en parámetros distribuidos	12
2.3.2. Estequiometría del modelo	13
2.3.3. Cambio lineal de coordenadas de concentraciones	14
2.3.4. Método de perturbaciones singulares	15
2.4. Modelo dinámico en parámetros concentrados	18
2.4.1. Modelo de N RCTAs con retromezclado de un gasificador	19
2.5. Descripción del modelo reducido del reactor	22
3. Análisis dinámico de un reactor de gasificación	25
3.1. Estabilidad estructural	26
3.1.1. Estabilidad estructural de Andronov	26
3.2. Teoría de bifurcaciones	26
3.2.1. Bifurcación nodo-silla o punto límite	27
3.2.2. Bifurcación de Hopf-Andronov	27
3.2.3. Ejemplo: Dinámica no lineal de un reactor de tanque agitado	27
3.3. Estudio cualitativo de un reactor de gasificación para diversos P_{eH}	30
3.3.1. Número de Peclet $P_{eH} = 2$	31
3.3.2. Número de Peclet $P_{eH} = 3.84$	33
3.3.3. Relación entre P_{eH} y número de tanques	35

4. Estrategias experimentales para determinar el número de Peclet	39
4.1. Método de trazadores para una clase de reactores	39
4.1.1. Métodos experimentales no destructivos para medir E	40
4.2. Modelo de dispersión (Levenspiel, 2011)	42
4.2.1. Dispersión longitudinal	43
4.2.2. Pequeñas desviaciones a partir del flujo pistón, $D/uL < 0.01$	43
4.2.3. Grandes desviaciones con respecto al modelo de flujo pistón, $D/uL > 0.01$	44
4.3. Técnica de trazadores para una clase de reactores	46
4.4. Análisis mediante métricas de forma	50
5. Análisis de resultados	57
5.1. Conclusiones	57
5.2. Trabajo futuro	58
A. Operadores de transporte	59
B. Sistemas topológicamente equivalentes	61
Bibliografía	63

Índice de figuras

1.1. Diagrama de un gasificador a) contracorriente y b) concurrente mostrando las reacciones que ocurren en cada zona.	5
2.1. Discretización de un reactor tubular en N volúmenes V_k	19
2.2. Representación de un tren con N tanques interconectados en cascada con flujos de retromezclado.	21
2.3. Perfil espacial de cuatro estados obtenido a partir del modelo de estudio (2.29) para un caso de 6 y 8 tanques interconectados con volumen idéntico.	24
3.1. Esquema simple de un reactor de tanque agitado y flujo continuo.	27
3.2. Plano de fase del CSTR.	28
3.3. Gráfica de la dependencia de los estados con el parámetro τ_c	29
3.4. Diagramas de bifurcación de la temperatura e hidrógeno para un caso de 3 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 2$	31
3.5. Diagramas de bifurcación de la temperatura e hidrógeno para un caso de 4 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 2$	31
3.6. Puntos de equilibrio para un caso de 3 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 2$	32
3.7. Puntos de equilibrio para un caso de 4 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 2$	33
3.8. Diagramas de bifurcación de la temperatura e hidrógeno para un caso de 6 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 3.84$	33
3.9. Diagramas de bifurcación de la temperatura e hidrógeno para un caso de 8 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 3.84$	34
3.10. Puntos de equilibrio para un caso de 6 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 3.84$	34
3.11. Puntos de equilibrio para un caso de 8 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 3.84$	35
4.1. Distribución de tiempos de residencia E	40
4.2. Relación entre curva E y E_θ	41
4.3. Experimento con rastreador escalón.	41
4.4. Relación entre las curvas E y F	42
4.5. Relación entre D/uL y la curva adimensional E_θ para pequeña dispersión.	44
4.6. Relación entre D/uL y la curva adimensional E_θ para gran dispersión.	45
4.7. Curvas de los tiempos de residencia obtenidas para tres distintos números de Peclet para un pulso de entrada $\Delta T_e = 300 [K]$ y con una duración de $\Delta t = 5 [seg]$ (arriba) y un $\Delta t = 30 [seg]$ (abajo).	47

4.8. Curvas de los tiempos de residencia obtenidas para tres distintos números de Peclet para un pulso de entrada $\Delta T_e = 700 [K]$ y con una duración de $\Delta t = 5 [seg]$ (arriba) y un $\Delta t = 30 [seg]$ (abajo).	48
4.9. Curvas de error de estimación para un $P_{eH} = 10$. Región con error de estimación menor al 5% (derecha).	49
4.10. Curvas de error de estimación para un $P_{eH} = 8$. Región con error de estimación menor al 5% (derecha).	49
4.11. Métricas de forma para diversos números de Peclet ante la presencia de perturbaciones en algunos parámetros con un pulso de entrada de $T_e = 700 [K]$	52
4.12. Métricas de forma para diversos números de Peclet con un $T_e = 300 [K]$ (derecha) y un $T_e = 1100 [K]$ (izquierda) con perturbación en la entalpía de reacción del carbonizado.	53
4.13. Oblicuidad para número de Peclet estimado contra el real para una temperatura de $T_e = 700 [K]$ (izquierda) y un pulso $T_e = 1100 [K]$ (derecha).	54
4.14. Curtosidad para el número de Peclet estimado contra el real para una temperatura de $T_e = 700 [K]$ (izquierda) y un pulso $T_e = 1100 [K]$ (derecha).	54
4.15. Coeficiente de variación para el número de Peclet estimado contra el real para una temperatura de $T_e = 700 [K]$ (izquierda) y un pulso $T_e = 1100 [K]$ (derecha).	55
4.16. Gráficas de Error cuadrático medio correspondiente a la métrica del coeficiente de variación para un pulso $T_e = 700 [K]$ (izquierda) y un pulso $T_e = 1100 [K]$ (derecha).	55

Índice de tablas

1.1. Comparación de las características de los distintos tipos de gasificadores de acuerdo al modo de contacto entre el sólido y el gas.	4
3.1. Puntos de equilibrio del CSTR.	28
3.2. Comparación entre P_{eh} , N ^o tanques y PEE	36

Capítulo 1

Introducción

Un gasificador es definido por Badillo (2009) como un reactor termo-químico donde un combustible sólido/líquido (biomasa, residuos sólidos, carbón mineral, etc.) reacciona con un agente oxidante/gasificante (O_2 o aire) produciendo un combustible gaseoso con una composición simple (H_2 , CH_4 , CO , CO_2 principalmente), con un valor calórico utilizable (5-10MJ/kg) y de fácil manejo conocido como *gas de síntesis*.

La gasificación se compone por un conjunto de procesos que se describen a continuación.

1.1. Etapas del proceso de gasificación

1.1.1. Pre calentamiento y secado.

En esta etapa el combustible sólido es calentado por medio de una corriente de aire convectiva precalentada a una temperatura por arriba del punto de evaporación del agua con el fin de absorber la humedad que pueda contener la biomasa. Di Blasi (1998) prueba que en un rango de 363K-453K el secado resulta ser eficiente ya que se logra en un tiempo muy corto. Al final de este proceso la mayoría de la humedad contenida en la biomasa ha sido separada llevando el combustible a una temperatura cercana a la etapa de la pirólisis.

1.1.2. Pirólisis o devolatilización.

Durante el proceso de pirólisis se liberan los compuestos gaseosos que se generan en la biomasa debido a un calentamiento a temperaturas elevadas que rondan en un intervalo de 460K-970K. Esta reacción que ocurre entre el carbón ó biomasa y el calor suministrado al gasificador da como resultado tres productos:

- Alquitranes. Es un líquido viscoso, tóxico y corrosivo que está compuesto por moléculas pesadas.
- Gases permanentes o volátiles. Son gases simples como: CO , CO_2 , CH_4 , H_2O , H_2 .
- Carbonizado. Es un residuo sólido que contiene principalmente Carbón.

Sin embargo, para fines de simplificación y basándonos en la literatura podemos separar en dos reacciones químicas secuenciales la red de reacciones que ocurren en la pirólisis biomásica (Di Blasi, 2008).

- Pirólisis primaria. A una temperatura entre 673K-773K ocurre la descomposición térmica del combustible sólido en alquitranes, carbonizado y volátiles primarios.

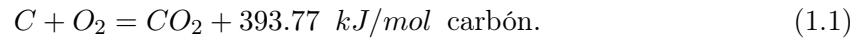
- Pirólisis secundaria. En un rango de temperaturas 773K-1123K se da lugar a la descomposición térmica de los alquitranes liberados en la pirólisis primaria.

La composición de los productos originados durante la devolatilización es función de la presión, temperatura y la velocidad del calentamiento. Variando estos parámetros, es posible favorecer la producción de alguno de los productos que más convenga.

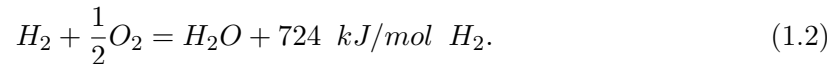
1.1.3. Combustión.

Con base en la reacción de los combustibles presentes y el oxígeno que se suministra al gasificador, la oxidación o combustión del carbonizado representa una de las etapas más importantes que ocurren dentro de un gasificador ya que es esta reacción la que provee la energía térmica necesaria para las reacciones endotérmicas. Existen dos reacciones que se dan durante este proceso:

- *Oxidación del carbonizado*, produce el dióxido de carbono.



- *Oxidación del hidrógeno en forma de combustible*, produce el vapor de agua.



1.1.4. Reducción.

También conocida como *gasificación*, es la etapa donde se lleva a cabo una serie de reacciones endotérmicas debido al calor producido en las reacciones de combustión. Badillo (2009) hace mención sobre dos de las reacciones de mayor interés:

- *Reacción de separación del CO_2 con agua (water-gas shift reaction)*. Es una reacción homogénea que representa la separación natural del CO_2 que se produce en el reactor.
- *Reacciones heterogéneas de gasificación del carbonizado*. Son reacciones de superficie entre la fase sólida y la fase gaseosa cuyos productos son gases de bajo peso molecular. Como consecuencia, la partícula de carbonizado transfiere masa a la fase gaseosa viéndose reflejada en una reducción de tamaño o en un aumento en su velocidad de desplazamiento.

1.2. Clasificación de gasificadores

Existe una amplia gama de tecnologías de gasificación de dos fases: de lecho empacado, fluidizado y de transporte. Badillo (2009) habla de las más importantes, resaltando la hidrodinámica de cada uno de ellas, esto es, la forma en que entran en contacto las dos fases y sus velocidades relativas de flujo.

Una clasificación importante que va ligada al estado de fluidización, es definida por Basu (2006) como la operación a través de la cual los sólidos finos (fase sólida) se comportan como en un estado líquido por medio del contacto con la fase gaseosa formando un *lecho*. La propiedad que destaca 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.

1.2.1. Régimen hidrodinámico de operación (Basu, 2006)

Dentro de esta clasificación se encuentran 5 tipos de gasificadores que a su vez están agrupados en 2 categorías según los regímenes de movimiento del lecho sólido-gas:

- **Etapa Cautiva.** Llamada así porque no existe una migración a gran escala de partículas con el flujo de gas fuera del gasificador.
 - *Lecho fijo o empaquetado.* Las partículas sólidas se encuentran sobre una rejilla perforada a través de la cual los gases fluyen provocando una fuerza de arrastre y produciendo una caída de presión cambiante a lo largo del lecho.
 - *Lecho fluidizado burbujeante.* Al incrementar la velocidad superficial del flujo de gas en el lecho fijo, existe un decremento de presión tal 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 la fuerza que suspende las partículas en un estado incipiente de fluidización. Al elevar la velocidad superficial del gas por encima de la V_{mf} hasta un punto conocido como *velocidad mínima de burbujeo* (V_{mb}) el exceso de gas en la suspensión del sólido genera burbujas.
 - *Lecho turbulento.* Si se incrementa la velocidad superficial del gas a través del lecho fluidizado burbujeante por arriba de la velocidad mínima de burbujeo, el lecho se expande debido al aumento de fracción de burbujas en la fase emulsionante. Esto ocasiona que la fase burbujeante se pierda a causa de la rápida coalescencia y ruptura masiva de burbujas iniciando una fase turbulenta en la que el lecho muestra una superficie difusa. Este lecho turbulento se caracteriza por tener fluctuaciones rápidas y violentas en la caída de presión a través del lecho, así como en la velocidad del gas.
- **Etapa de Transporte.** A diferencia de la etapa cautiva, aquí sí existe una migración a gran escala de partículas fuera del gasificador ocasionada por la fuerza de arrastre del flujo de gas saliente.
 - *Lecho rápido.* Las partículas tienen una tasa de reflujo hacia la base del reactor que garantiza escasamente una uniformidad espacial de la temperatura en el gasificador, es una suspensión sólido-gas de alta velocidad que se mantiene con una velocidad del gas fluidizante superior a la velocidad terminal de las partículas individuales. Este lecho 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, dicha condición se presenta cuando la cantidad de sólidos aglomerados aumenta. La velocidad del gas que determina la transición entre una fase cautiva como la de lecho turbulento y la fase de fluidización rápida es la **velocidad de obstrucción**, dicha 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 reflejada 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 los 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 el régimen de fluidización rápida.
 - *Lecho por arrastre.* Es el régimen hidrodinámico de mayor velocidad superficial del gas, menor tamaño de partícula promedio (combustible sólido en polvo fino), por lo cuál es el tipo con el tiempo de residencia de la partícula más corto. Este tipo de gasificadores se caracterizan por la fuerte demanda o consumo del reactivo oxidante, altas temperaturas

de operación y por la producción de un gas de síntesis de alta calidad, esto es, con baja concentración de metano, libre de alquitrán y un calor sensible elevado. Además, estos reactores logran una alta eficiencia térmica.

Uno de los criterios principales de clasificación de gasificadores que se encuentra en la literatura se basa en la forma en la que están en contacto la fase sólida y la fase gaseosa de acuerdo a la teoría de reactores químicos (Levenspiel, 1999). En resumen, se puede ver que todos los gasificadores que se emplean para la generación de energía pertenecen a una de las tres clases que se ilustran en la tabla (1.1).

Tabla 1.1: Comparación de las características de los distintos tipos de gasificadores de acuerdo al modo de contacto entre el sólido y el gas.

<i>Reactor</i> <i>Parámetro</i>	Lecho Fijo/Móvil	Lecho Fluidizado	Lecho de flujo de arrastre
<i>Tamaño de la partícula entrante de combustible.</i>	< 51mm	< 6mm	< 0.15mm
<i>Tolerancia a las partículas finas.</i>	Limitada	Buena	Excelente
<i>Tolerancia a las partículas gruesas.</i>	Muy buena	Buena	Pobre
<i>Temperatura de salida del gas de síntesis.</i>	450 – 650 °C	800 – 1000 °C	> 1260 °C
<i>Velocidad superficial.</i>	0.2m/s (Incinerador)	1 – 2m/s (Burbujeante) y 10 – 30m/s (Circulante)	27 – 45m/s
<i>Demanda de agente oxidante.</i>	Baja	Moderada	Alta
<i>Temperatura de combustión.</i>	1090 °C	800 – 1000 °C	> 1990 °C
<i>Demanda de vapor de agua.</i>	Alta	Moderada	Baja
<i>Eficiencia del gas frío.</i>	80 %	89.2 %	80 %
<i>Escala de producción de energía.</i>	Capacidad pequeña y mediana	Capacidad mediana	—
<i>Razón de apagado*.</i>	4:1	3:1	3:1
<i>Contenido de alquitranes en el gas de síntesis.</i>	Muy alto en gasificador ascendente y muy bajo en gasificador descendente	Bajo	Bajo
<i>Velocidad de encendido.</i>	Muy lenta	Rápida	Muy Rápida
<i>Capacidad de control.</i>	Moderada	Alta	Alta
<i>Problemas específicos asociados.</i>	Producción alta de alquitranes y bajo desempeño con partículas finas	Conversión de carbón baja	Enfriamiento del gas de síntesis
<i>Emisión de óxido nítrico (NO)</i>	400 – 600ppm	50 – 200ppm	400 – 600ppm

La *Razón de apagado* (*Turndown ratio*) se define como la razón del calor máximo (gas de síntesis con la mínima energía térmica) entregado por el gasificador antes de que se aleje de un punto de operación termodinámico deseable de acuerdo a la aplicación. Está estrechamente relacionado con la capacidad del gasificador para operar en un rango de variación amplio de demandas de energía de manera eficiente.

Observando los datos de la tabla 1.1 se tiene que los reactores de lecho fijo o empacado son los más utilizados para aplicaciones a pequeña escala ya que tienen un bajo costo, facilidad de construcción y lo más importante, presentan un buen compromiso entre la calidad del producto y la variabilidad en la composición del combustible sólido dando como resultado un desempeño aceptable.

Dentro de los gasificadores de lecho fijo, Reed *et al.* (1988) mencionan dos distintas configuraciones: los de flujo a *contracorriente* que toleran una alta humedad en el combustible alimentado lo que presenta una ventaja para producir gas que posteriormente se utiliza directamente en un quemador, sin embargo, este tipo de gasificador produce un gas de síntesis inapropiado para el uso de motores de combustión ya que llega a producir de un 5 % a 20 % de alquitranes; por otra parte los gasificadores de flujos *paralelos* producen en promedio menos del 1 % de alquitranes, consiguiendo una mayor pureza en el gas de síntesis y favoreciendo su uso para motores de combustión.

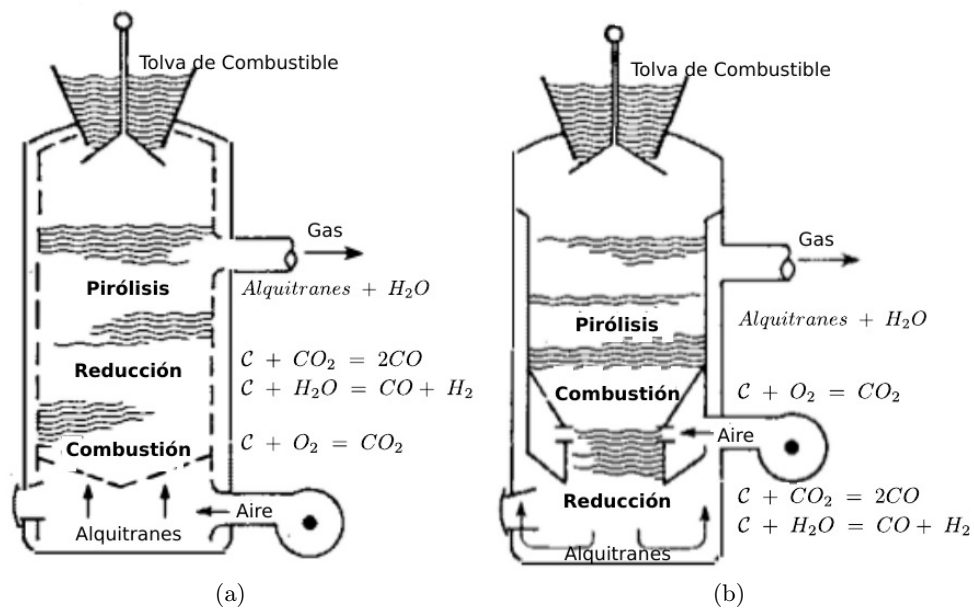


Figura 1.1: Diagrama de un gasificador a) contracorriente y b) concurrente mostrando las reacciones que ocurren en cada zona.

En los gasificadores de flujo a contracorriente (figura 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. Durante la sección de pirólisis el gas caliente piroliza la biomasa produciendo alquitranes, carbonizado y gases, en la zona de reducción el carbonizado reacciona con el CO_2 y H_2O para producir CO e H_2 , por último por debajo de la zona de reducción, el aire entrante quema el carbonizado para producir CO_2 y calor.

Para el tipo de gasificadores de flujos paralelos, el aire entra en contacto con el carbonizado para pasar a la zona de combustión y después entrar en contacto con la biomasa para ser pirolizada (figura 1.1b). El calor provocado por la combustión es el que mantiene la zona de pirólisis. Al final de la zona de pirólisis la mayoría de las veces los gases consisten en CO_2 , H_2O , H_2 y CO arrojando

como resultado gran parte de los gases combustibles generados durante la gasificación de corriente descendente y a su vez consumiendo un 99 % de los alquitranes.

Estos gasificadores son ampliamente usados, no obstante, su principal desventaja radica en que es imposible llevarlos a gran escala ya que el aire entrante en los lados del reactor es incapaz de penetrar a lo largo del diámetro del lecho.

1.3. Motivación

En la actualidad, debido a la preocupación y alto costo que implica seguir dependiendo de la energía producida por los combustibles fósiles y energías basadas en hidrocarburos, además del grave daño que ocasionan por la producción de gases de efecto invernadero, las tecnologías de gasificación generan un gran interés en la industria energética, ya que el poder utilizar materiales de escaso valor comercial como la biomasa (desechos de la industria maderera, subproductos agrícolas, desechos sólidos municipales, etc.), el carbón mineral y coque de petróleo, ofrecen ventajas sobre la combustión o quemado directo de combustibles fósiles como la gasolina y el carbón. En la práctica, los gasificadores que trabajan con biomasa son capaces de convertir del 60 % al 90 % de la energía contenida en la materia orgánica a energía en forma de gas, por este motivo es que en la industria el proceso de gasificación resulta atractivo debido al escaso valor comercial de los insumos para generar energía eléctrica con una eficiencia aceptable a un costo capital relativamente bajo.

Una de las razones por la cual se considera que los procesos de gasificación tienen futuro como fuentes de generación de energía alternativa es que existe una correlación clara entre el aumento en la eficiencia y la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero. Debido a esta característica, en los diferentes campos de generación de energía existe una tendencia en la que se busca incrementar la eficiencia termodinámica de las plantas agregando calor a temperaturas y presiones de operación altas.

Esta clase de reactores son estudiados mediante modelos eulerianos unidimensionales y bi-dimensionales de dos fases termodinámicas constituidos por ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) de conservación de masa y energía. Los modelos derivados son sistemas dinámicos en parámetros concentrados de alto orden con rigidez numérica considerable y alta sensibilidad paramétrica lo cual limita su aplicación en el diseño de esquemas de control y observación, debido al pobre desempeño de simulación numérica.

Por otra parte, visto el problema desde el punto de vista de modelado clásico de ingeniería de reactores (Deans y Lapidus, 1960a; Levenspiel, 1962) es posible reconstruir el comportamiento de un reactor tubular vacío o de lecho empacado con dispersión mediante la conexión en serie de N reactores continuos de tanque agitado (RCTAs) con un cierto grado de retromezclado, haciendo posible el análisis de estabilidad y multiplicidad de estados estacionarios de una forma más sencilla (Deckwer, 1974). La credibilidad de este método de modelado para reproducir el comportamiento no lineal de reactores tubulares exotérmicos con un número pequeño de RCTAs ha sido demostrada en Sinkule *et al.* (1974) y Deckwer (1974), así como en estudios recientes de modelado y control de reactores tubular exotérmicos con dispersión axial, (Nájera, 2012).

Badillo (2014) presenta un método de diseño de modelos dinámicos en parámetros concentrados de orden reducido con sentido físico, estructura simple y ajustable, capaz de ilustrar características fuertemente no lineales como la bifurcación y multiplicidad de estados estacionarios. Bajo esta idea, Canales (2013) desarrolla una metodología para la elección de una malla espacial de bajo orden que logra reproducir cualitativa y cuantitativamente la dinámica espacial del modelo dinámico de un gasificador de biomasa de lecho fijo.

Sin embargo, en los sistemas dinámicos termoquímicos como los gasificadores de lecho empacado y fijo, los fenómenos de transporte como convección y dispersión están acoplados con reacciones químicas y fenómenos de transferencia de calor que dan lugar a modelos con una alta

incertidumbre y sensibilidad paramétrica, complicando el desarrollo de controladores y observadores basados en modelo. Resulta entonces de gran importancia el contar con los coeficientes certeros de convección y dispersión térmica ya que de estos depende en gran parte el aprovechar al máximo el modelo dinámico en parámetros concentrados de orden reducido desarrollado por Badillo (2014) y Canales (2013).

1.4. Objetivo

Basados en el modelo dinámico en parámetros concentrados de orden reducido para gasificadores, se propone hacer un análisis extenso mediante teoría de bifurcaciones para encontrar los puntos estacionarios existentes para diversos números de Peclet y un número distinto de tanques interconectados. El propósito es observar y encontrar el mínimo número de tanques que logren representar la dinámica del modelo del reactor de gasificación y relacionarlo con el número de puntos estacionarios estructuralmente estables que se preservan al aumentar el número de tanques interconectados.

Como segunda parte del trabajo desarrollado se propone encontrar una metodología no destructiva que permita identificar el grado de dispersión (número de Peclet) presente para una clase de reactores de gasificación mediante la técnica de trazadores presentada en Levenspiel (2012). Con esto, se obtendría un modelo confiable capaz de reconstruir la dinámica de un gasificador de biomasa de lecho fijo y poder dar el paso a utilizar técnicas clásicas de control para analizar de forma experimental dichos gasificadores.

1.5. Estructura de la tesis

El presente trabajo contiene en el capítulo dos una breve introducción sobre la existencia de los principales modelos utilizados para representar la dinámica de una clase de reactores de gasificación, las ventajas y desventajas que presentan para el análisis de este trabajo. Después se describe de una forma detallada el tipo de modelado utilizado por Badillo (2014) en el que se basa esta tesis. Se mencionan los grados de libertad que posee tal modelo dinámico y cómo es esencial ajustar estos grados de libertad para poder encontrar el mínimo número de tanques necesarios para representar la dinámica completa del sistema con el menor grado de complejidad posible.

En el capítulo tres se explota el modelo de estudio mediante un análisis de bifurcaciones para encontrar la relación entre los puntos estacionarios presentes en el reactor, el grado de dispersión en el interior de dicho reactor y el número de tanques necesarios para lograr reproducir esta dinámica.

La importancia de conocer la dispersión que existe dentro del reactor de gasificación lleva a buscar distintas metodologías no destructivas para determinar de forma experimental el número de Peclet y así poder ajustar el modelo utilizado para posteriormente pensar en aplicar leyes de control. A lo largo del capítulo cuatro se revisan algunas de estas metodologías para estimar el número de Peclet, que están basadas en la presencia de trazadores o variables que se pueden medir a la salida del reactor.

Finalmente, en el capítulo cinco se presentan las conclusiones que se logran apreciar después de analizar los capítulos anteriores, así como también las limitaciones que tiene este trabajo y algunas posibles formas de mejorarlo como un trabajo futuro. En particular se menciona como diseñar las pruebas experimentales para la determinación del grado de dispersión existente en la planta piloto del reactor de gasificación propiedad del Instituto de Ingeniería.

Capítulo 2

Modelado de gasificadores de lecho móvil

El desarrollo de estrategias de control y monitoreo de procesos, en particular en los reactores de gasificación, resulta de gran importancia, pues la producción de combustibles fósiles va poco a poco en declive sin mencionar el costo e impacto ambiental que conlleva la obtención de los mismos. Así, poder obtener un buen rendimiento en la generación de energía eléctrica basada en gasificadores es primordial. No obstante, para conseguir este objetivo se necesita contar con un modelo dinámico capaz de describir el desempeño de una clase de reactores de gasificación con un grado de precisión y sensibilidad adecuados, además de presentar la complejidad mínima necesaria, esto es, contar con un modelo de orden reducido.

Como se mencionó en el capítulo anterior, una de las clases de gasificadores para aplicaciones a pequeña escala, bajo costo y desempeño aceptable son los gasificadores de lecho móvil. Para profundizar más en ellos, en las siguientes secciones se hablará de los distintos modelos dinámicos encontrados en la literatura para cada una de las categorías (flujo a contracorriente y flujos paralelos) así como las cualidades y desventajas que presentan; además se describe con detalle el modelo dinámico adoptado en este trabajo.

2.1. Reactores de flujo a contracorriente en operación ascendente

Tomando en consideración la dependencia axial espacial de las temperaturas y concentraciones de las fases del reactor de gasificación (sólido y gas), Amundson y Arri (1978) logran deducir un modelo en estado estacionario no lineal; por otra parte, Caram y Fuentes (1982) haciendo énfasis en los balances de energía de cada fase, obtuvieron un modelo simplificado de la estática del proceso. El análisis en conjunto de estos autores permitió establecer que el reactor de lecho empacado presurizado (20-24 atm) con flujos a contracorriente de tipo Lurgi exhibe las siguientes características:

- Una alta sensibilidad paramétrica con respecto a los flujos de alimentación.
- Para un determinado intervalo de valores de flujo entrante de sólido, presenta una multiplicidad de hasta cuatro conjuntos de perfiles espaciales en estado estacionario estable.
- Un frente de flama viajero en operación dinámica.

Otro modelo orientado a un gasificador de flujos a contracorriente con lecho fijo es propuesto por Paes (2005). El modelo está apoyado en ecuaciones diferenciales parciales lineales unidimensionales dinámicas para las especies químicas, masa total y la temperatura de cada fase termodinámica (sólido y gas), las características que tiene presentes para el modelado son:

- Tres reacciones químicas: pirólisis, combustión y gasificación.
- Cinemática euleriana para las variables de transporte de ambas fases.
- Proceso isobárico en el gasificador.
- Composición del gas de síntesis modelada de manera aproximada.
- Para la fase sólida sólo se considera la biomasa y el carbonizado producto de la pirólisis.
- El gasificador se divide en elementos cilíndricos con la misma área transversal.
- Las ecuaciones en derivadas parciales se discretizan sólo en la variable espacial (semidiscretización) originando un sistema dinámico de alto orden.

Además divide el modelado del reactor en dos etapas:

- ***Identificación de los parámetros y perfiles de variación del modelo estático unidimensional discretizado por el método de elemento finito (20 elementos)***. El resultado es un conjunto de perfiles de temperatura y concentración validados por experimentación.
- ***Modelo dinámico unidimensional semidiscretizado por elemento finito (40 elementos)***. Utilizando los coeficientes obtenidos del modelo estático predice la reducción de masa y volumen de la fase sólida por reacciones químicas heterogéneas de combustión, gasificación y pirólisis. Al final se obtiene un modelo con parámetros distribuidos compuesto por:
 - Una ecuación de conservación de la masa total de la fase gaseosa.
 - Cuatro ecuaciones de conservación de la concentración de las especies químicas de la fase gaseosa (CO , CO_2 , O_2 y gas).
 - Una ecuación de conservación para la temperatura de la fase gaseosa.
 - Una ecuación de conservación de la temperatura del sólido.
 - Una ecuación de la conservación de la concentración de carbonizado en la fase sólida.

2.2. Reactores de flujos concurrentes/paralelos en operación descendente

Dentro de los gasificadores de flujos paralelos, Gobel *et al.* (2007) modela un reactor en el que separa en dos etapas los procesos termoquímicos de gasificación. La primera es previa al reactor, en ella se lleva a cabo el calentamiento, secado y pirólisis del combustible sólido fuera del reactor y durante la segunda etapa se dan las reacciones de combustión parcial de volátiles y carbonizado y la gasificación del carbonizado. La obtención de este modelo se centra en valuar el desempeño del gasificador en lazo abierto e identificar una estrategia de control eficiente para mejorar el desempeño durante cambios en la condición de operación. Bajo ciertas suposiciones enumeradas en Badillo (2009), el modelo resultante logra predecir el comportamiento de las siguientes variables:

- Composición del gas a lo largo del lecho carbonizado.
- Volumen del gas a lo largo del lecho.
- Masa del carbonizado en el lecho y la altura del lecho.

- Temperatura del lecho carbonizado en función de la coordenada axial.
- Reactividad del carbonizado a lo largo del lecho y la reactividad promedio total.
- Eficiencia del gas frío de la planta.

De manera experimental, el proceso de gasificación en estado estacionario ha sido reportado por Reed y Markson (1985); Milligan (1994); Barrio *et al.* (2001), donde es importante destacar que:

- Bajo ciertas condiciones de operación, es posible encontrar tres puntos de equilibrio estables en estado estacionario. Estas propiedades son similares a las de los perfiles estacionarios estables del gasificador en contracorriente, al menos, de forma cualitativa.
- El reactor presenta un frente de reacción móvil semejante al de una flama de combustión viajera.
- La operación óptima en estado estacionario sólo se presenta para un rango reducido de valores de flujos a la entrada.
- La altura del lecho de carbonizado es la variable con el tiempo característico más largo del proceso ante cambios en la demanda de producto gaseoso.

Aunque los estudios recientes sobre estos modelos son adecuados para el diseño del proceso, presentan una gran desventaja ya que son de alta dimensión y presentan rigidez numérica alta, esto debido a la ausencia de una hipótesis de *estado cuasi-estacionario* (Gobel *et al.*, 2007) y de una partición de especies químicas *reactivas* y *no reactivas* basada en su estequiometría (Aris, 1965; Feinberg, 1977).

2.3. Preliminares del modelo de estudio

Con base en el enfoque de ingeniería de reactores químicos, una primera formulación para la obtención de esquemas de control de sistemas de procesos es posible si se parte de una ecuación de transporte generalizada (2.1), que surge de fenómenos de transporte y unifica las leyes de conservación de momento, energía y masa.

$$\underbrace{\partial_t \varphi}_{\text{Almacenamiento}} = \underbrace{-(\nabla \cdot \varphi \mathbf{U})}_{\text{Convección}} + \underbrace{\nabla \cdot D \nabla \varphi}_{\text{Dispersión}} + \underbrace{S(\varphi, \mathbf{r})}_{\text{Generación}}, \quad (2.1)$$

donde ∂_t denota la derivada parcial con respecto al tiempo t , φ es la variable que se conserva por unidad de volumen, \mathbf{U} es el vector de las velocidades de flujo convectivo, D es el *coeficiente de transporte de dispersión*, S es el término fuente generalizado y \mathbf{r} es el vector tridimensional del sistema de coordenadas espaciales adoptado de acuerdo a la geometría del gasificador, $\nabla \cdot$ y ∇ son los operadores de divergencia y gradiente en dichas coordenadas.

La dispersión longitudinal axial solo modela fenómenos de flujo de naturaleza estadística, es decir, fluctuaciones elementales de la velocidad, concentración y temperatura que se repiten muchas veces a lo largo del reactor. Bajo esta visión el coeficiente de dispersión D constituye un parámetro del modelo a determinar de acuerdo al tipo de lecho empacado del equipo y régimen de flujo, entre otras propiedades físicas del fluido. En resumen, el grado de mezclado en el patrón de flujo de una corriente en un reactor es modelado mediante el coeficiente de dispersión D .

2.3.1. Modelo en parámetros distribuidos

Basado en la estequiometría manejada por Aris (1965), se supone una conversión del combustible del estado sólido a gaseoso por medio de un conjunto de m reacciones, n_π^R componentes reactivos y n_π^I componentes inertes en la fase termodinámica π (sólida o gaseosa), (Badillo, 2014):

$$s_{1,j}^\pi \omega_1^\pi + \dots + s_{n_\pi^R,j}^\pi \omega_{n_\pi^R}^\pi = 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad \pi = g, s, \quad (2.2a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \Delta H_j, \quad n_\pi = n_\pi^R + n_\pi^I, \\ \mathbf{C} = [\mathbf{C}_g^T \quad \mathbf{C}_s^T]^T, \quad \mathbf{T} = [\mathbf{T}_s \quad \mathbf{T}_g]^T, \end{aligned} \quad (2.2b)$$

donde ω_i^π es la i -ésima componente de la fase π , $s_{i,j}^\pi$ es el coeficiente estequiométrico del i -ésimo componente ω_i^π en la j -ésima reacción de la fase π , \mathcal{R}_j es la j -ésima función de velocidad de reacción, \mathbf{T}_π es la temperatura de la fase π , ΔH_j es el cambio de entalpía de la j -ésima reacción y \mathbf{C} es el vector de concentraciones molares de ambas fases.

Como resultado de la red de reacción (2.2) y el modelo generalizado de dispersión (2.1), se tiene un modelo distribuido con dispersión formado por balances de masa y energía mostrado por el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales parciales sobre un dominio espacial axial ($0 \leq Z \leq L$) y temporal ($t' > 0$):

$$\partial_{t'} C_i^s = \Gamma_M^s \{C_i^s\} + \mathcal{G}_i^s(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad i = 1, \dots, n_s, \quad (2.3a)$$

$$\partial_{t'} C_i^g = \Gamma_M^g \{C_i^g\} + \mathcal{G}_i^g(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad i = 1, \dots, n_g, \quad (2.3b)$$

$$C_\pi C_p^\pi \partial_{t'} T_\pi = \Gamma_H^\pi \{T_\pi\} + Q_R^\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) - Q_{\pi w}(\mathbf{T}) \mp Q_{sg}(\mathbf{T}), \quad \pi = s, g, \quad (2.3c)$$

donde Γ_M^π (o Γ_H^π) es el operador de transporte convectivo-dispersivo de masa (o calor) para la fase π , C_π representa la concentración molar total de la fase π y C_p^π es el calor específico de la fase π . Además

$$\mathcal{G}_i^\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^\pi \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad i = 1, \dots, n_\pi^R, \quad (2.4a)$$

$$Q_R^\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = - \sum_{j=1}^{m_\pi} \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \pi = g, s, \quad (2.4b)$$

$$Q_{sg}(\mathbf{T}) = \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T}) [T_s - T_g], \quad \mathcal{A}_{sg} = \frac{6(1 - \alpha_g)}{d_p}, \quad (2.4c)$$

$$Q_{\pi w}(\mathbf{T}) = \mathcal{A}_v h_{\pi w}(\mathbf{T}) [T_s - T_g], \quad \mathcal{A}_v = \frac{4}{D_R}, \quad (2.4d)$$

siendo \mathcal{G}_i^π la i -ésima velocidad de generación (producción o consumo) de moles por unidad de volumen del componente en la fase π , Q_R^π es la velocidad de generación de calor por unidad de volumen del componente de la fase π debido a las reacciones, Q_{sg} es el término de transferencia de calor entre fases mientras que $Q_{\pi w}$ es la velocidad de intercambio de calor entre las paredes del reactor y la fase π . \mathcal{A}_{sg} es el área de transferencia de la partícula sólida con el gas por unidad de volumen, \mathcal{A}_v es el área de transferencia de calor de la pared del reactor por unidad de volumen, d_p es el diámetro de la partícula, D_R es el diámetro interno del reactor y α_π es la constante de fracción de masa para la fase π .

La velocidad del sólido está caracterizada por una ecuación de balance de masa que modela los cambios de volumen de las partículas por el consumo total del combustible sólido:

$$\partial_{t'} C_s + \partial_Z C_s u_s(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \alpha_s \sum_{j=1}^{m_s} \sum_{i=1}^{n_s} s_{i,j}^s \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}). \quad (2.5)$$

Por otra parte, la velocidad del flujo axial descendente del gas está representada por la ecuación de continuidad molar del gas:

$$\partial_{t'} C_g + \partial_z C_g u_g(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \alpha_g \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_g} s_{i,j}^g \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad (2.6)$$

donde u_g/u_s es la velocidad convectiva del gas/sólido. La concentración molar total del gas (C_g) y la densidad (ρ_g) son determinadas mediante la ley del gas ideal de acuerdo a la siguientes ecuaciones:

$$C_g = \frac{P_g}{UT}, \quad \rho_g = C_g W_g, \quad (2.7)$$

donde P_g , W_g son la presión y el peso molecular promedio de la fase de gas.

El presente modelo tiene algunas ventajas ya que presenta de 2 a 4 reacciones menos en comparación con estudios encontrados en la literatura, ésto tomando en cuenta las siguientes consideraciones físicoquímicas:

- La reacción de pirólisis secundaria de los alquitranes sucede instantáneamente, entonces es viable omitir esta cinética en las ecuaciones de balance.
- La reducción del carbonizado con H_2 es muy lenta para esta clase de gasificadores por lo que su efecto se puede despreciar en los balances del modelo global.
- Las reacciones de combustión de metano y alquitranes secundarios no tienen un aporte significativo en la cinética del proceso.

2.3.2. Estequiometría del modelo

Utilizando la estequiometría de la red de reacciones del modelo en cuestión, se busca el conjunto máximo de reacciones independientes a partir de una red de reacciones dada por el proceso de gasificación. Expresando de forma matricial el modelo en parámetros distribuidos del reactor (2.3) se tiene:

$$\partial_{t'} \mathbf{C}_s = \Gamma_M^s \{C_s\}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathbf{S}_s^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad (2.8a)$$

$$\partial_{t'} \mathbf{C}_g = \Gamma_M^g \{C_g\}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathbf{S}_g^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad (2.8b)$$

$$\mathbf{S}_s = [s_{i,j}^s], \quad \dim(\mathbf{S}_s) = (m, n_s^R), \quad (2.8c)$$

$$\mathbf{S}_g = [s_{i,j}^g], \quad \dim(\mathbf{S}_g) = (m, n_g^R), \quad (2.8d)$$

donde

$$\mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = [R_1 \quad R_2 \quad \dots \quad R_m]^T,$$

$$\partial_{t'} \mathbf{C} = \Gamma_M \{C\} + \mathbf{S}^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \Gamma_M \{C\} = \begin{bmatrix} \Gamma_M^s \{C_s\} \\ \Gamma_M^g \{C_g\} \end{bmatrix}, \quad (2.9a)$$

$$\mathbf{S}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_s^T \\ \mathbf{S}_g^T \end{bmatrix}, \quad \text{rank}(\mathbf{S}) = N_r \leq m, \quad n_s^R + n_g^R - N_r = I_r, \quad (2.9b)$$

donde \mathbf{S} es la matriz estequiométrica del sistema reactivo de ambas fases que indica las relaciones de dependencia lineal entre las reacciones y la interconexión de las reacciones sobre la dinámica de las concentraciones molares del gasificador.

Se busca una representación *reactiva-no reactiva* de los balances de masa del reactor formada por un conjunto de N_r combinaciones lineales de concentraciones de especies originales reactivas

e I_r balances de combinaciones lineales de concentraciones inertes tal que $N_r + I_r = n_s^R + n_g^R$. Una forma sencilla de encontrar el conjunto de N_r reacciones independientes es mediante el procedimiento de eliminación de Gauss-Jordan aplicado a la matriz estequiométrica \mathbf{S} y así obtener una representación escalonada reducida por filas (Aris, 1965; Feinberg, 1977). Utilizando este método se obtiene una representación truncada \mathcal{S} de la matriz estequiométrica con su correspondiente vector de velocidades de reacción \mathcal{N} en términos del conjunto de reacciones independientes.

$$\mathbf{S}^T = \mathcal{S}^T \mathcal{M}, \quad \mathcal{S} \in \mathfrak{R}^{N_r \times (n_s^R + n_g^R)}, \quad \mathcal{M} \in \mathfrak{R}^{N_r \times m}, \quad (2.10a)$$

$$\mathcal{S}^T = \begin{bmatrix} \mathcal{S}_s^T \\ \mathcal{S}_g^T \end{bmatrix}, \quad \mathcal{S}_\pi \in \mathfrak{R}^{N_r \times n_\pi^R}, \quad n_s^R + n_g^R - N_r = I_r, \quad (2.10b)$$

$$\text{rank}(\mathcal{S}_\pi) = N_\pi = \min(N_r, n_\pi^R),$$

donde \mathcal{M} está formada por las N_r filas distintas de cero de la forma escalonada reducida por filas de \mathbf{S} mientras que \mathcal{S} contiene las N_r columnas linealmente independientes \mathbf{S} . Finalmente el vector de velocidades de generación (2.4a) puede ser representado en términos del nuevo vector \mathcal{N} con las velocidades de reacción independientes estequiométricamente.

$$\mathcal{G}_\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \mathcal{S}_\pi^T \mathcal{N}(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \mathcal{N}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) := \mathcal{M} \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}). \quad (2.11)$$

2.3.3. Cambio lineal de coordenadas de concentraciones

Sí existe un número de componentes de la fase π mayor al número de reacciones de componentes de la misma fase ($n_\pi^R > N_\pi$), entonces existe un conjunto $n_\pi^R - N_\pi$ de combinaciones lineales de las n_π^R concentraciones existentes de las componentes de la fase π , esto es, un cambio de coordenadas de las concentraciones:

$$\mathbf{C}_\pi := \begin{bmatrix} \mathbf{W}_\pi \\ \mathbf{E}_\pi \end{bmatrix} = \mathbf{P}_\pi \mathbf{C}_\pi, \quad (2.12)$$

entonces las ecuaciones (2.8) pueden ser representados en la forma reactiva-no reactiva:

$$\partial_t \mathbf{W}_\pi = \Gamma_M^\pi \{ \mathbf{W}_\pi \}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathbf{R}_\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad (2.13a)$$

$$\partial_t \mathbf{E}_\pi = \Gamma_M^\pi \{ \mathbf{E}_\pi \}(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad (2.13b)$$

$$\mathbf{R}_\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \mathcal{P}_\pi^R \mathcal{S}_\pi^T \mathcal{N}(\mathbf{C}_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{T}), \quad (2.13c)$$

$$\mathbf{C} = [\mathbf{W}_s^T \quad \mathbf{E}_s^T \quad \mathbf{W}_g^T \quad \mathbf{E}_g^T]^T, \quad (2.13d)$$

$$\mathbf{C}_\pi = \mathbf{P}_s^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{W}_\pi \\ \mathbf{E}_\pi \end{bmatrix}, \quad (2.13e)$$

con

$$\mathbf{P}_\pi = \begin{bmatrix} \mathbb{T}_\pi & \mathbf{0}_{n_\pi^R \times n_\pi^I} \\ \mathbf{0}_{n_\pi^R \times n_\pi^I} & \mathbb{I}_{n_\pi^I} \end{bmatrix}, \quad \mathbb{T}_\pi = \begin{bmatrix} \mathcal{P}_\pi^R \\ \mathcal{P}_\pi^N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{S}_\pi^+ \\ \mathcal{L}_\pi \end{bmatrix}, \quad (2.14a)$$

$$\mathbf{W}_\pi = [W_1^\pi \quad W_2^\pi \quad \dots \quad W_{N_\pi}^\pi]^T, \quad \mathbf{E}_\pi = [\mathcal{E}_\pi^T \quad \mathcal{I}_\pi^T]^T, \quad (2.14b)$$

$$\mathcal{E}_\pi = [\mathcal{E}_1^\pi \quad \mathcal{E}_2^\pi \quad \dots \quad \mathcal{E}_{n_\pi^R - n_\pi}^\pi]^T, \quad \mathcal{I}_\pi = [\mathcal{I}_1^\pi \quad \mathcal{I}_2^\pi \quad \dots \quad \mathcal{I}_{n_\pi^I}^\pi]^T, \quad (2.14c)$$

\mathbf{W}_π contiene las concentraciones reactivas de la fase π y \mathbf{E}_π contiene el vector de concentraciones no reactivas (\mathcal{E}_π) más el vector de concentraciones inertes (\mathcal{I}_π), \mathbb{I} es la matriz identidad de dimensión n_π^I , $\mathbf{0}$ es una matriz de ceros de dimensión $n_\pi^R \times n_\pi^I$, mientras que \mathbb{T}_π contiene a las matrices de cambio de coordenadas de concentraciones correspondientes a las pseudo-componentes reactivas-no reactivas, respectivamente.

Mediante un cambio de coordenadas basado en la descomposición de valores singulares (DVS) es posible encontrar la partición del espacio de concentraciones reactivas y no-reativas (\mathcal{P}_π^R y \mathcal{P}_π^N). Aplicando este método se tiene

$$\mathcal{S}_\pi^T = \mathbf{U}_\pi \mathbf{\Sigma}_\pi \mathbf{V}_\pi^T, \quad (2.15)$$

donde \mathbf{U}_π (ó \mathbf{V}_π) es una matriz unitaria de dimensiones $n_\pi^R \times n_\pi^R$ (ó $n_\pi^R \times n_\pi^R$) cuyas columnas son los valores singulares izquierdos (o derechos) de \mathcal{S}_π^T , $\mathbf{\Sigma}_\pi$ es la matriz diagonal con los valores singulares de \mathcal{S}_π^T . Finalmente \mathcal{L}_π^T es construida a partir de las últimas I_r columnas de \mathbf{U}_π y \mathcal{S}_π^+ es obtenida de acuerdo a la expresión:

$$\mathcal{S}_\pi^+ = \mathbf{V}_\pi \mathbf{\Sigma}_\pi^+ \mathbf{U}_\pi^T, \quad (2.16)$$

siendo $\mathbf{\Sigma}_\pi^+$ la matriz pseudo-inversa de $\mathbf{\Sigma}_\pi$.

Con este análisis se obtiene una representación simplificada de la dinámica de las concentraciones, permitiendo observar el efecto individual de cada reacción independiente en la evolución temporal y espacial de la concentración de cada pseudo-especie reactiva. En resumen, los elementos contenidos en la matriz de transformación \mathcal{P}_π^R (ó \mathcal{S}_π^+) determinarán sobre que componentes originales existe un efecto predominante una cierta reacción independiente y sobre cuales su efecto es despreciable.

2.3.4. Método de perturbaciones singulares

Empleando el método de perturbaciones singulares se busca un modelo simplificado que conserve propiedades estructurales del modelo original, desechando la alta sensibilidad, rigidez numérica y el mal condicionamiento a errores en datos de entrada causada por la diferencia en las dimensiones de los parámetros y variables en las ecuaciones de balance del modelo completo. La reducción del modelo consiste en realizar un cambio de coordenadas de variables dependientes e independientes que lleve al sistema a la forma estándar de perturbaciones singulares, mostrando la separación de dos escalas de variación y el parámetro singular que la origina. La forma adimensional de un modelo de este tipo provee dos ventajas:

- Tener un modelo en términos de parámetros adimensionales que permite comparar el efecto de cada proceso físico-químico (transporte convectivo, dispersivo, reacciones, etc.) en el balance, así como el grado de interacción entre ellos pudiendo reconocer los términos significativos y despreciables de la ecuación de balance.
- Reducir el error de redondeo en la simulación numérica del modelo al homogeneizar las dimensiones de las variables y parámetros para tener operandos del mismo orden de magnitud.

Tomando en cuenta las diferencias de densidad, velocidad de flujo y capacidad calórica entre la fase sólida y la fase gaseosa, Badillo-Hernandez *et al.* (2013) normaliza las variables y parámetros del modelo distribuido de lecho empacado (2.3) de forma similar al estudio presentado por Baldea y Daoutidis (2007). Las ecuaciones significativas que surgen de este análisis son:

$$\begin{aligned} Da_j &= \frac{L\mathbf{R}_{j0}}{u_{g0}C_{g0}}, & Br_j &= \frac{\Delta H_j^r}{C_{p0}T_{g0}}, & K_M &= \frac{C_{g0}u_{g0}}{C_{s0}u_{s0}}, & \varepsilon &= \frac{u_{s0}}{u_{g0}}, \\ St_{gw} &= \frac{Lh_{gw0}\mathcal{A}_v}{C_{g0}C_{p0}u_{g0}}, & St_{sw} &= \frac{Lh_{sw0}\mathcal{A}_v}{C_{g0}C_{p0}u_{g0}}, & St_{sg} &= \frac{Lh_{sg0}\mathcal{A}_{sg}}{C_{g0}C_{p0}u_{g0}}, \\ Pe_M &= \frac{Lu_{g0}}{\mathcal{D}_{M0}}, & Pe_H^s &= \frac{Lu_{s0}}{\mathcal{D}_{H0}^s}, & Pe_H^g &= \frac{Lu_{g0}}{\mathcal{D}_{H0}^g}, \end{aligned} \quad (2.17a)$$

donde P_{e_M} es el número de Peclet de masa para la fase gaseosa, $P_{e_M^s}$ (o $P_{e_M^g}$) es el número de Peclet de calor de la fase sólida (o gaseosa), St_{sg} es el número de Stanton de intercambio de calor entre fases, St_{sw} (o St_{sw}) es el número de Stanton de intercambio de calor entre la pared del reactor y el sólido (o el gas) mientras que Da_j y B_{rj} son el número de Damkholer y el incremento adiabático de temperatura para la reacción j -ésima, respectivamente.

El parámetro de perturbación ε es un número adimensional definido como el cociente del tiempo característico de convección del gas y el tiempo de residencia característico del sólido, K_M es la relación característica entre el flujo convectivo de gas (aire) y el flujo convectivo del combustible sólido alimentado. Como resultado, la forma adimensional del modelo del reactor está dada por el siguiente sistema de EDPs en términos de los operadores de transporte definidos en el **Apéndice A**:

$$\partial_t \mathbf{c}_s = \tau_s^C \{ \mathbf{c}_s \} (\mathbf{c}, \eta) + \mathbf{r}_s (\mathbf{c}, \eta), \quad (2.18a)$$

$$\partial_t \eta_s = \tau_{Hs}^C \{ \eta_s \} (\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{P_{e_H^s}} \tau_{Hs}^D \{ \eta_s \} (\mathbf{c}, \eta) + \mathcal{Q}_{Ts} (\mathbf{c}, \eta), \quad (2.18b)$$

$$\varepsilon \partial_t \mathbf{c}_g = \tau_g^C \{ \mathbf{c}_g \} (\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{P_{e_M}} \tau_g^D \{ \mathbf{c}_g \} (\mathbf{c}, \eta) + \nabla_g (\mathbf{c}, \eta), \quad (2.18c)$$

$$\varepsilon \partial_t \eta_g = \tau_{Hg}^C \{ \eta_g \} (\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{P_{e_H^g}} \tau_{Hg}^D \{ \eta_g \} (\mathbf{c}, \eta) + \mathcal{Q}_{Tg} (\mathbf{c}, \eta), \quad (2.18d)$$

$$\mathbf{c} = [\mathbf{c}_s^T \quad \mathbf{c}_g^T]^T, \quad \mathbf{C}_\pi = \mathbf{C}_\pi C_{\pi 0}, \quad T_\pi = \eta_\pi T_{\pi 0}, \quad \pi = g, s, \quad (2.18e)$$

donde los términos fuente están dados por las siguientes expresiones:

$$\mathbf{r}_s (\mathbf{c}, \eta) = K_M \mathbf{S}_s^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r} (\mathbf{c}, \eta), \quad (2.19a)$$

$$\mathcal{Q}_{Ts} (\mathbf{c}, \eta) = \frac{K_M}{c_s c_p^s} [-St_{sg} h_{sg} (\eta) (\eta_s - \eta_g) - St_{sw} h_{sw} (\eta) (\eta_s - \eta_w)] - \frac{K_M}{c_s c_p^s} \left[\alpha_s \sum_{j=1}^{m_s} B_j Da_j r_j (\mathbf{c}, \eta) \right], \quad (2.19b)$$

$$\mathbf{r}_g (\mathbf{c}, \eta) = \mathbf{S}_g^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r} (\mathbf{c}, \eta), \quad (2.19c)$$

$$\mathcal{Q}_{Tg} (\mathbf{c}, \eta) = \frac{1}{c_g c_p^g} [St_{sg} h_{sg} (\eta) (\eta_s - \eta_g) - St_{gw} h_{gw} (\eta) (\eta_g - \eta_w)] - \frac{1}{c_g c_p^g} \left[\alpha_g \sum_{j=1}^{m_g} B_j Da_j r_j (\mathbf{c}, \eta) \right], \quad (2.19d)$$

las m reacciones se agrupan en m_s reacciones heterogéneas desarrolladas en la partícula y m_g reacciones homogéneas del gas, mientras que $\mathbf{D} \mathbf{a}$ es una matriz diagonal que contiene los m números Damkholer (Da_j).

El modelo normalizado (2.18) representa la forma estándar de perturbaciones singulares del modelo distribuido del gasificador de lecho empacado, donde $\varepsilon = \frac{u_{s0}}{u_{g0}} = O(10^{-3})$ es el parámetro singular pequeño del modelo. Con este modelo es posible identificar las distintas escalas de variación de los términos de transporte y de generación de las ecuaciones de balance. Por otra parte el modelo (2.18) evidencia una separación de las escalas de tiempo cuando se toma el límite si $\varepsilon \rightarrow 0$ del mismo, esto implica, que la escala de tiempo rápida del sistema aparezca como una capa límite inicial en las variables de temperatura del gas y concentraciones molares de los componentes del gas cuyo comportamiento está determinado por las ecuaciones (2.19c y 2.19d).

El modelo resultante permite identificar como variables rápidas a las concentraciones y temperatura (entalpía) del gas y como variables lentas a la temperatura y concentraciones de la fase sólida debido a la diferencia entre las densidades de la partícula sólida y el gas.

Modelo distribuido de orden reducido

Este modelo se origina por los balances de masa de las componentes sólidas y de la energía del sólido expresado en (2.20), que a su vez, se obtiene de despreciar el efecto de la perturbación ($\varepsilon = 0$) en el modelo adimensional (2.18).

En consecuencia, el modelo distribuido de orden reducido va a estar constituido por los balances de masa de las n_s componentes sólidas y el balance de energía de la partícula de un sistema de $n_s + 1$ EDPs sobre el dominio espacial axial ($0 < z < 1$) y temporal ($t > 0$):

$$\partial_t \bar{\mathbf{c}}_s = \tau_s^C \{\bar{\mathbf{c}}_s\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \mathbf{r}_s(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) := \mathbf{F}_s(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}, \bar{\eta}_s, \bar{\eta}_g), \quad (2.20a)$$

$$\partial_t \bar{\eta}_s = \tau_{H_s}^C \{\bar{\eta}_s\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \frac{1}{P_{e_H^s}} \tau_{H_s}^D \{\bar{\eta}_s\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \mathcal{Q}_{T_s}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) := \mathcal{F}_h(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}, \bar{\eta}_s, \bar{\eta}_g), \quad (2.20b)$$

y las condiciones de frontera e iniciales:

$$z = 0 : \quad \beta_s \{\bar{\mathbf{c}}_s\} = 0, \quad \beta_{H_s} \{\bar{\eta}_s\} = 0, \quad (2.20c)$$

$$z = 1 : \quad \partial_z \bar{\mathbf{c}}_s = 0, \quad \partial_z \bar{\eta}_s = 0, \quad (2.20d)$$

$$t = 0 : \quad \bar{\mathbf{c}}_s(z, 0) = \frac{\mathbf{C}_{sic}}{C_{s0}}, \quad \bar{\eta}_s(z, 0) = \frac{T_{sic}}{T_{s0}}. \quad (2.20e)$$

Como resultado el sistema dinámico (2.20a)-(2.20b) está acoplado con los balances de masa y energía del gas en estado estacionario modelados mediante el sistema de $n_g + 1$ ecuaciones algebraicas en el dominio espacial axial ($0 < z < 1$):

$$0 = \tau_g^C \{\bar{\mathbf{c}}_g\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \frac{1}{P_{e_M}} \tau_g^D \{\bar{\mathbf{c}}_g\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \mathbf{r}_g(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}), \quad (2.20f)$$

$$0 = \tau_{H_g}^C \{\bar{\eta}_g\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \frac{1}{P_{e_H^g}} \tau_{H_g}^D \{\bar{\eta}_g\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \mathcal{Q}_{T_g}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}), \quad (2.20g)$$

con condiciones de frontera:

$$z = 0 : \quad \beta_g \{\bar{\mathbf{c}}_g\} = 0, \quad \beta_{H_g} \{\bar{\eta}_g\} = 0, \quad (2.20h)$$

$$z = 1 : \quad \partial_z \bar{\mathbf{c}}_g = 0, \quad \partial_z \bar{\eta}_g = 0, \quad (2.20i)$$

La solución para el sistema de ecuaciones algebraicas define perfiles espaciales en estado estacionario de las concentraciones de las componentes del gas y su temperatura parametrizados en las variables lentas $\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s$; pasado un intervalo de tiempo y debido a la rápida variación (capa límite inicial), la dinámica va a estar determinada únicamente por el comportamiento de estas variables.

Finalmente, se considera que las condiciones iniciales correspondientes a las concentraciones y temperatura del gas convergen a su estado estacionario (2.20f)-(2.20g) a una velocidad infinita, por lo tanto, es posible eliminar dichas condiciones iniciales. Con base en la teoría de perturbaciones singulares, las variables de concentración y temperatura de ambas fases del modelo reducido ($\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}$) están relacionadas con las del modelo completo (\mathbf{c}, η) por medio de las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_s(z, t) &= \bar{\mathbf{c}}_s(z, t) + O(\varepsilon), & \forall t \in [0, t_1], \\ \eta_s(z, t) &= \bar{\eta}_s(z, t) + O(\varepsilon), & \forall t \in [0, t_1], \\ \mathbf{c}_g(z, t) &= \bar{\mathbf{c}}_g(z, t) + O(\varepsilon), & \forall t \in [t_\varepsilon, t_1], \\ \eta_g(z, t) &= \bar{\eta}_g(z, t) + O(\varepsilon), & \forall t \in [t_\varepsilon, t_1], \quad t_\varepsilon = O(\varepsilon) > 0. \end{aligned}$$

Modelo distribuido de capa límite

Intercambiando la escala de tiempo rápida $\tau = t/\varepsilon$ en el modelo distribuido (2.18), tendremos el siguiente sistema de EDPs:

$$\partial_\tau \mathbf{c}_s = \varepsilon \left[\tau_s^C \{ \mathbf{c}_s \}(\mathbf{c}, \eta) + \mathbf{r}_s(\mathbf{c}, \eta) \right], \quad (2.22a)$$

$$\partial_\tau \eta_s = \varepsilon \left[\tau_{Hs}^C \{ \eta_s \}(\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{P_{e_H^s}} \tau_{Hs}^D \{ \eta_s \}(\mathbf{c}, \eta) + \mathcal{Q}_{Ts}(\mathbf{c}, \eta) \right], \quad (2.22b)$$

$$\partial_\tau \mathbf{c}_g = \tau_g^C \{ \mathbf{c}_g \}(\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{P_{e_M}} \tau_g^D \{ \mathbf{c}_g \}(\mathbf{c}, \eta) + \nabla_g(\mathbf{c}, \eta), \quad (2.22c)$$

$$\partial_\tau \eta_g = \tau_{Hg}^C \{ \eta_g \}(\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{P_{e_H^g}} \tau_{Hg}^D \{ \eta_g \}(\mathbf{c}, \eta) + \mathcal{Q}_{Tg}(\mathbf{c}, \eta), \quad (2.22d)$$

despreciando el parámetro de perturbación $\varepsilon = 0$ se obtiene un modelo simplificado en la escala de tiempo rápida (2.22) del modelo original:

$$\partial_\tau \tilde{\mathbf{c}}_s = 0, \quad (2.23a)$$

$$\partial_\tau \tilde{\eta}_s = 0, \quad (2.23b)$$

$$\partial_\tau \tilde{\mathbf{c}}_g = \tau_g^C \{ \tilde{\mathbf{c}}_g \}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) + \frac{1}{P_{e_M}} \tau_g^D \{ \tilde{\mathbf{c}}_g \}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) + \nabla_g(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}), \quad (2.23c)$$

$$\partial_\tau \tilde{\eta}_g = \tau_{Hg}^C \{ \tilde{\eta}_g \}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) + \frac{1}{P_{e_H^g}} \tau_{Hg}^D \{ \tilde{\eta}_g \}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) + \mathcal{Q}_{Tg}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}), \quad (2.23d)$$

Observando el modelo (2.23), las variables lentas $\tilde{\mathbf{c}}_s$ y $\tilde{\eta}_s$ dependen únicamente de sus condiciones iniciales. Con esto se puede observar que no existe un acoplamiento entre las variables rápidas del gas ($\tilde{\mathbf{c}}_s$, $\tilde{\eta}_s$) y las variables lentas del estado sólido. Esto implica que el modelo de capa límite sólo esté relacionado con el comportamiento de la componente de rápida variación del modelo completo (2.18).

De esta manera, la hipótesis de estado cuasiestacionario para las variables de concentración y temperatura de especies de la fase del gas origina un modelo de orden reducido (2.20), esto es, una aproximación aceptable y simplificada del modelo original (2.18).

Con el fin de obtener un modelo aún más simplificado, Badillo-Hernandez *et al.* (2013) plantea la hipótesis de un equilibrio térmico entre fases, ésto fundamentado bajo la visión de que la velocidad de transferencia de calor entre fases es infinita, la cual se debe a la rápida transferencia de calor entre la partícula y el gas circundante en relación con el tiempo de residencia promedio del gas.

2.4. Modelo dinámico en parámetros concentrados

Debido a la necesidad de contar con un modelo dinámico finito, de bajo orden, simple y con sentido físico, Badillo-Hernandez *et al.* (2013) propone hallar un modelo en parámetros concentrados que sea capaz de reproducir el comportamiento del modelo distribuido descrito en la sección anterior. Existen varios métodos que logran aproximar el comportamiento de sistemas dinámicos de dimensión infinita a sistemas de dimensión finita. Uno de ellos es, de acuerdo al esquema de modelado clásico de ingeniería de reactores (Coste *et al.*, 1961; Levenspiel, 1962), proponer una configuración de un conjunto de N tanques interconectados en serie y/o cascada-retro-flujo que pueda representar el carácter distribuido de los sistemas de procesos.

Modelo de tanques en serie (MTS)

Se parte de la idea de que los tanques interconectados en serie tienen el mismo volumen, siendo de estructura simple y teniendo únicamente un parámetro de diseño que es el número de etapas o tanques N (Levenspiel y Bischoff, 1964), con esto se elimina el efecto de retroalimentación de masa y/o energía entre etapas. De esta manera se obtiene una expresión que establece una relación inversa entre el número de tanques (N) y el coeficiente de dispersión (D) dado un coeficiente de transporte convectivo fijo. Dado lo anterior, la ventaja de este tipo de modelos radica en que la solución numérica convencional del modelo distribuido de dispersión sólo son significativas para reactores con dispersión alta.

Modelo de tanques en serie con retroflujos (MTCR)

Los modelos de retromezclado consisten en dividir el reactor en regiones conectadas en serie o paralelo introduciendo flujos de retromezclado entre ellos, Levenspiel (1962) ha utilizado esta técnica de tanques (RCTAs) en serie para describir el comportamiento de sistemas reales como gasificadores de lecho empacado.

A diferencia del anterior, este modelo agrega efectos de retromezclado entre cada tanque mediante retro-flujos en sentido contrario al flujo principal (Hartland y Mecklenburgh, 1966). Las principales ventajas que ofrece este método son:

- Mayor flexibilidad ya que se agrega como grado de libertad al retro-flujo Q_R .
- La convergencia del parámetro de retromezclado del modelo de N tanques con retro-flujo al parámetro de dispersión es rápida ($\frac{1}{N^2}$).
- Con un ajuste adecuado del parámetro de retro-flujo, se necesitan un mínimo de tanques interconectados.

2.4.1. Modelo de N RCTAs con retromezclado de un gasificador

La discretización espacial del reactor debe realizarse utilizando cualquier método numérico capaz de preservar el mecanismo de transporte convectivo-dispersivo con interacción a vecinos inmediatos, es decir, las dinámicas de las variables (temperaturas y concentraciones) en el k -ésimo nodo de la malla espacial deben depender solamente de las variables de nodos vecinos ($k + 1$ y $k - 1$) y de sí mismas.

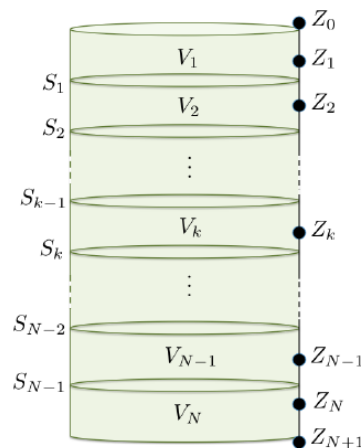


Figura 2.1: Discretización de un reactor tubular en N volúmenes V_k .

El punto de partida de los esquemas de discretización espacial consiste en la partición axial de la geometría tubular del reactor de gasificación con volumen V_R de acuerdo a la figura 2.1. Se muestra la malla espacial axial con $N + 2$ nodos con ubicaciones en Z_k , así como los N volúmenes (subcilindros) discretos V_k definidos por las ubicaciones axiales S_{k-1} y S_k de las superficies de frontera A_{k-1} y A_k , respectivamente.

De forma general, dada una malla espacial con una distribución de ubicaciones de nodos Z_k es posible asignar un conjunto de ubicaciones axiales S_k para las superficies de frontera A_k y por lo tanto, seleccionar el tamaño de los volúmenes de V_k que corresponden a dicha malla espacial:

$$V_R = LA_R, \quad V_k = h_k(Z_{k-1}, Z_k, Z_{k+1})A_R, \quad (2.24)$$

$$h_k = S_k(Z_k, Z_{k+1}) - S_{k-1}(Z_{k-1}, Z_k) = \Delta S_k, \quad (2.25)$$

donde V_R es el volumen del reactor tubular, A_R es el área circular de la sección transversal del reactor tubular, V_k es el volumen del k -ésimo subcilindro y h_k es la altura del k -ésimo subcilindro en términos de las ubicaciones de los nodos vecinos.

De esta manera, el reactor de gasificación de lecho móvil es modelado en dimensión finita por la siguiente representación en espacio de estados de un tren de N RCTAs con retomezclado:

Primer RCTA ($k = 1$)

$$V_1 \dot{\mathbf{C}}_{s,1} = q_e^{Ms} \mathbf{C}_{s,e} - q_1^{Ms} \mathbf{C}_{s,1} + \mathcal{G}_s(\mathbf{C}_1, \mathbf{T}_1) V_1, \quad (2.26a)$$

$$V_1 \dot{T}_{s,1} = \left(\frac{C_{s,0} C_{p,0}^s}{C_{s,1} C_{p,1}^s} \right) (q_e^{Hs} T_{se} - q_{out,1}^{Hs} T_{s,1}) + q_1^{b,Hs} T_{s,2} + \frac{Q^s(\mathbf{C}_1, \mathbf{T}_1) V_1}{C_{s,1} C_{p,1}^s}, \quad (2.26b)$$

$$V_1 \dot{\mathbf{C}}_{g,1} = q_e^{Mg} \mathbf{C}_{g,e} - q_1^{Mg} \mathbf{C}_{g,1} + q_1^{b,Mg} \mathbf{C}_{g,2} + \mathcal{G}_g(\mathbf{C}_1, \mathbf{T}_1) V_1, \quad (2.26c)$$

$$V_1 \dot{T}_{g,1} = \left(\frac{C_{g,0} C_{p,0}^g}{C_{g,1} C_{p,1}^g} \right) (q_e^{Hg} T_{ge} - q_{out,1}^{Hg} T_{g,1}) + q_1^{b,Hg} T_{g,2} + \frac{Q^g(\mathbf{C}_1, \mathbf{T}_1) V_1}{C_{g,1} C_{p,1}^g}, \quad (2.26d)$$

RCTAs interiores ($2 \leq k \leq N - 1$)

$$V_k \dot{\mathbf{C}}_{s,k} = q_{k-1}^{Ms} \mathbf{C}_{s,k-1} - q_k^{Ms} \mathbf{C}_{s,k} + \mathcal{G}_s(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k, \quad (2.26e)$$

$$V_k \dot{T}_{s,k} = \left(\frac{C_{s,k-1} C_{p,k-1}^s}{C_{s,k} C_{p,k}^s} \right) (q_{k-1}^{Hs} T_{s,k-1} - q_{out,k}^{Hs} T_{s,k}) + q_k^{b,Hs} T_{s,k+1} \quad (2.26f)$$

$$- \left(\frac{C_{s,k-1} C_{p,k-1}^s}{C_{s,k} C_{p,k}^s} \right) q_{k-1}^{b,Hs} T_{s,k} + \frac{Q^s(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k}{C_{s,k} C_{p,k}^s}, \quad (2.26g)$$

$$V_k \dot{\mathbf{C}}_{g,k} = q_{k-1}^{Mg} \mathbf{C}_{g,k-1} - q_k^{Mg} \mathbf{C}_{g,k} + q_k^{b,Mg} \mathbf{C}_{g,k+1} - q_{k-1}^{b,Mg} \mathbf{C}_{g,k} + \mathcal{G}_g(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k, \quad (2.26h)$$

$$V_k \dot{T}_{g,k} = \left(\frac{C_{g,k-1} C_{p,k-1}^g}{C_{g,k} C_{p,k}^g} \right) (q_{k-1}^{Hg} T_{g,k-1} - q_{out,k}^{Hg} T_{g,k}) + q_k^{b,Hg} T_{g,k+1} \quad (2.26i)$$

$$- \left(\frac{C_{g,k-1} C_{p,k-1}^g}{C_{g,k} C_{p,k}^g} \right) q_{k-1}^{b,Hg} T_{g,k} + \frac{Q^g(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k}{C_{g,k} C_{p,k}^g}, \quad (2.26j)$$

Último RCTA ($K = N$)

$$V_N \dot{\mathbf{C}}_{s,N} = q_{N-1}^{Ms} \mathbf{C}_{s,N-1} - q_N^{Ms} \mathbf{C}_{s,N} + \mathcal{G}_s(\mathbf{C}_N, \mathbf{T}_N) V_N, \quad (2.26k)$$

$$V_N \dot{T}_{s,N} = \left(\frac{C_{s,N-1} C_{p,N-1}^s}{C_{s,N} C_{p,N}^s} \right) q_{N-1}^{Hs} (T_{s,N-1} - T_{s,N}) + \frac{Q^s(\mathbf{C}_N, \mathbf{T}_N) V_N}{C_{s,N} C_{p,N}^s}, \quad (2.26l)$$

$$V_N \dot{\mathbf{C}}_{g,N} = q_{N-1}^{Mg} \mathbf{C}_{g,N-1} - \left(q_N^{Mg} - q_N^{b,Mg} \right) \mathbf{C}_{g,N} - q_{N-1}^{b,Mg} \mathbf{C}_{g,N} + \mathcal{G}_g(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k, \quad (2.26m)$$

$$V_N \dot{T}_{g,N} = \left(\frac{C_{g,N-1} C_{p,N-1}^g}{C_{g,N} C_{p,N}^g} \right) q_{N-1}^{Hg} (T_{g,N-1} - T_{g,N}) + \frac{Q^g(\mathbf{C}_N, \mathbf{T}_N) V_N}{C_{s,N} C_{p,N}^s}, \quad (2.26n)$$

con

$$q_{out,k}^{H\pi} = \left(q_{k-1}^{H\pi} - q_{k-1}^{b,H\pi} \right) + \left(\frac{C_{\pi,k} C_{p,k}^\pi}{C_{\pi,k-1} C_{p,k-1}^\pi} \right) q_k^{b,H\pi}, \quad \pi = s, g, \quad (2.27a)$$

$$\mathbf{q}_e = \begin{bmatrix} q_e^{Ms} \\ q_e^{Hs} \\ q_e^{Mg} \\ q_e^{Hg} \\ q_e \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_k = \begin{bmatrix} q_k^{Ms} \\ q_k^{Hs} \\ q_k^{Mg} \\ q_k^{Hg} \\ q_k \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_k^b = \begin{bmatrix} q_k^{b,Ms} \\ q_k^{b,Hs} \\ q_k^{b,Mg} \\ q_k^{b,Hg} \\ q_k \end{bmatrix}, \quad (2.27b)$$

$$V_R = LA_R, \quad V_k = \Delta Z_k A_k, \quad A_k = A_R, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (2.27c)$$

donde \mathbf{q}_e es un vector de entrada del reactor que contiene los flujos de masa $q_e^{M\pi}$ y calor $q_e^{H\pi}$ de la fase sólida (o gaseosa), \mathbf{q}_k (o \mathbf{q}_k^b) es el vector que contiene los flujos hacia adelante (o de retromezclado) de masa y calor para las fases sólida y de gas del tanque k -ésimo, V_k (o V_R) es el volumen del k -ésimo tanque (o del reactor tubular) mientras que A_R es el área circular de la sección transversal, ΔZ_k es la distancia axial entre el k -ésimo y el $(k-1)$ -ésimo nodos de la malla de discretización espacial. Finalmente, las velocidades convectivas (u_s y u_g) y los coeficientes de dispersión (\mathcal{D}_M , \mathcal{D}_H^s , \mathcal{D}_H^g) del reactor tubular de gasificación se relacionan con los elementos de los vectores de flujo hacia adelante (\mathbf{q}_k) y de retromezclado (\mathbf{q}_k^b) del conjunto de RCTAs (ver figura 2.2).

$$\mathbf{q}_k = \mathbf{q}_k^C + \mathbf{q}_k^D, \quad \mathbf{q}_k^b = \mathbf{q}_k^D. \quad (2.28)$$

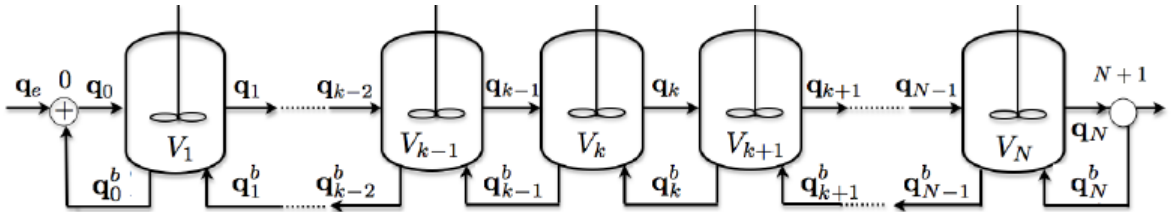


Figura 2.2: Representación de un tren con N tanques interconectados en cascada con flujos de retromezclado.

Se puede observar que el modelo en parámetros distribuidos (2.20) toma en cuenta dos tipos de transporte fundamentales: convectivo y dispersivo. Si la dispersión es muy baja en relación con el transporte convectivo entonces el tren de RCTAs se reduce a una conexión en serie de RCTAs convencional con una dirección de flujo axial dominante. Es importante señalar que en el diagrama de procesos de la figura 2.2, las flechas representan flujos compuestos (materia y energía de ambas fases) transportados de un tanque a otro a través de una interfaz.

En conclusión, el sistema dinámico resultante posee las siguientes características:

- Interconexión en cascada de N subsistemas químicos de parámetros concentrados conocidos (TRCTAs) con interacción baja.
- El TRCTA con retromezclado puede representarse como una estructura de modelo que tiene como parámetros de diseño al número de RCTAs N , sus volúmenes V_k , sus flujos hacia adelante \mathbf{q}_k y sus retro-flujos \mathbf{q}_k^b . Es decir, en función de la precisión requerida por el objetivo de modelado y la incertidumbre típica del sistema específico, uno puede sintonizar dichos parámetros de forma independiente a las ecuaciones (2.27), (2.28).
- El modelo consiste en $M = N \times (n_s + n_g + 2)$ EDOs correspondientes a las ecuaciones de balance de las temperaturas y concentraciones de las componentes de sólido y gas.

2.5. Descripción del modelo reducido del reactor

Por último se presenta la versión final y reducida del modelo de un reactor tubular de dos fases con convección y dispersión como un tren de N RCTAs (TRCTA) con interacciones de dos vías (en dirección del flujo del sólido y en contracorriente); específicamente, la interconexión hacia atrás toma en cuenta los efectos de retromezclado del calor y la masa en el reactor causados por la dispersión. En esta sección se presenta el modelo dinámico reducido para reactores tubulares de gasificación así como la recreación de algunos perfiles espaciales para un caso de 6 y 8 tanques interconectados a fin de mostrar el método de modelado utilizado en este trabajo.

Para llegar a el modelo reducido, se parte del modelo dinámico en parámetros distribuidos de orden reducido interpretado como un tren de N RCTAs con cierto grado de retromezclado. Después se aplica el análisis estequiométrico de la red de reacción y de acuerdo a la hipótesis de estado cuasi-estacionario para el gas debido a la velocidad de reacción y la hipótesis de equilibrio térmico entre las fases, se obtiene el modelo de N - RCTAs en cascada con retromezclado del gasificador. El modelo dinámico (2.29) desarrollado por Badillo (2014) tiene como grados de libertad el número de RCTAs y el volumen de cada uno de ellos y como se verá en los capítulos posteriores, el objetivo es encontrar el mínimo número de tanques necesarios para poder representar la dinámica del sistema y en particular determinar el grado de dispersión presente para una clase de reactores.

Primer RCTA ($k = 1$)

$$\mathcal{V}_1 \dot{\mathbf{w}}_{s,1} = q_e^{Ms} \mathbf{w}_{s,e} - q_1^{Ms} \mathbf{w}_{s,1} + K_M \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} r_1 \mathcal{V}_1, \quad (2.29a)$$

$$\mathcal{V}_1 \dot{\mathbf{e}}_{s,1} = q_e^{Ms} \mathbf{e}_{s,e} - q_1^{Ms} \mathbf{e}_{s,1}, \quad (2.29b)$$

$$\mathcal{V}_1 \dot{\eta}_1 = \left(\frac{c_{s,0} c_{p,0}^s}{c_{s,1} c_{p,1}^s} \right) (q_e^H \eta_e - q_{out,1}^H \eta_1) - \left(\frac{1}{c_{s,1} c_{p,1}^s} \right) K_M \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} r_1 \mathcal{V}_1 + q_1^{b,H} \eta_2 \quad (2.29c)$$

$$- \left(\frac{1}{c_{s,1} c_{p,1}^s} \right) K_M St_w h_w (\eta_1) [\eta_1 - \eta_w] \mathcal{V}_1, \quad (2.29d)$$

$$0 = q_e^{Mg} \mathbf{w}_{g,e} - q_1^{Mg} \mathbf{w}_{g,1} + q_1^{b,Mg} \mathbf{w}_{g,2} + \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} r_1 \mathcal{V}_1, \quad (2.29e)$$

$$0 = q_e^{Mg} \mathbf{e}_{g,e} - q_1^{Mg} \mathbf{e}_{g,1} + q_1^{b,Mg} \mathbf{e}_{g,2}, \quad (2.29f)$$

RCTAs interiores ($2 \leq k \leq N - 1$)

$$\mathcal{V}_k \dot{\mathbf{w}}_{s,k} = q_{k-1}^{Ms} \mathbf{w}_{s,k-1} - q_k^{Ms} \mathbf{w}_{s,k} + K_M \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} r_k \mathcal{V}_k, \quad (2.29g)$$

$$\mathcal{V}_k \dot{\mathbf{e}}_{s,k} = q_{k-1}^{Ms} \mathbf{e}_{s,k-1} - q_k^{Ms} \mathbf{e}_{s,k}, \quad (2.29h)$$

$$\mathcal{V}_k \dot{\eta}_k = \left(\frac{c_{s,k-1} c_{p,k-1}^s}{c_{s,k} c_{p,k}^s} \right) (q_{k-1}^H \eta_{k-1} - q_{out,k}^H \eta_k) - \left(\frac{1}{c_{s,k} c_{p,k}^s} \right) K_M \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} r_k \mathcal{V}_k \quad (2.29i)$$

$$+ q_k^{b,H} \eta_{k+1} - q_{k-1}^{b,H} \eta_k - \left(\frac{1}{c_{s,k} c_{p,k}^s} \right) K_M St_w h_w(\eta_k) [\eta_k - \eta_w] \mathcal{V}_k, \quad (2.29j)$$

$$0 = q_{k-1}^{Mg} \mathbf{w}_{g,k-1} - q_k^{Mg} \mathbf{w}_{g,k} + q_k^{b,Mg} \mathbf{w}_{g,k+1} - q_{k-1}^{b,Mg} \mathbf{w}_{g,k} + \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} r_k \mathcal{V}_k, \quad (2.29k)$$

$$0 = q_{k-1}^{Mg} \mathbf{e}_{g,k-1} - q_k^{Mg} \mathbf{e}_{g,k} + q_{k+1}^{b,Mg} \mathbf{e}_{g,k+1} - q_k^{b,Mg} \mathbf{e}_{g,k}, \quad (2.29l)$$

Último RCTA ($K = N$)

$$\mathcal{V}_N \dot{\mathbf{w}}_{s,N} = q_{N-1}^{Ms} \mathbf{w}_{s,N-1} - q_N^{Ms} \mathbf{w}_{s,N} + K_M \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} r_N \mathcal{V}_N, \quad (2.29m)$$

$$\mathcal{V}_N \dot{\mathbf{e}}_{s,N} = q_{N-1}^{Ms} \mathbf{e}_{s,N-1} - q_N^{Ms} \mathbf{e}_{s,N}, \quad (2.29n)$$

$$\mathcal{V}_N \dot{\eta}_N = \left(\frac{c_{s,N-1} c_{p,N-1}^s}{c_{s,N} c_{p,N}^s} \right) q_{N-1}^H (\eta_{N-1} - \eta_N) - \left(\frac{1}{c_{s,N} c_{p,N}^s} \right) K_M \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} r_N \mathcal{V}_N \quad (2.29ñ)$$

$$- \left(\frac{1}{c_{s,N} c_{p,N}^s} \right) K_M St_w h_w(\eta_N) [\eta_N - \eta_w] \mathcal{V}_N, \quad (2.29o)$$

$$0 = q_{N-1}^{Mg} \mathbf{w}_{g,N-1} - (q_N^{Mg} - q_N^{b,Mg}) \mathbf{w}_{g,N} + \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} r_N \mathcal{V}_N - q_{N-1}^{b,Mg} \mathbf{w}_{g,N} \quad (2.29p)$$

$$0 = q_{N-1}^{Mg} \mathbf{e}_{g,N-1} - (q_N^{Mg} - q_N^{b,Mg}) \mathbf{e}_{g,N} - q_{N-1}^{b,Mg} \mathbf{e}_{g,N}, \quad (2.29q)$$

donde

$$q_{out,k}^H = (q_{k-1}^H - q_{k-1}^{b,H}) + \left(\frac{c_{s,k} c_{p,k}^s}{c_{s,k-1} c_{p,k-1}^s} \right) q_k^{b,H}, \quad (2.30a)$$

$$\mathbf{q}_e = \begin{bmatrix} q_e^{Ms} \\ q_e^H \\ q_e^{Mg} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_k = \begin{bmatrix} q_k^{Ms} \\ q_k^H \\ q_k^{Mg} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_k^b = \begin{bmatrix} q_k^{b,Mg} \\ q_k^{b,H} \\ q_k^{b,Mg} \end{bmatrix}, \quad (2.30b)$$

$$\mathcal{V}_k = \frac{V_k}{V_R} = \frac{\Delta z_k A_k}{L A_R} = \Delta z_k \mathcal{A}_k, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (2.30c)$$

$\mathbf{w}_{s,k}$, $\mathbf{e}_{s,k}$, $\mathbf{w}_{g,k}$, $\mathbf{e}_{g,k}$ son los valores instantáneos de las concentraciones adimensionales de las pseudo-especies sólidas y gaseosas y η_k es el valor instantáneo de la temperatura adimensional en el k -ésimo nodo de la malla espacial a lo largo del gasificador. \mathcal{V}_k es el volumen adimensional del k -ésimo RCTA, Δz_k es la distancia adimensional entre el k -ésimo y el $k - 1$ -ésimo nodo de la malla espacial, $\mathcal{A}_k = A_R$ es el área transversal adimensional del k -ésimo RCTA.

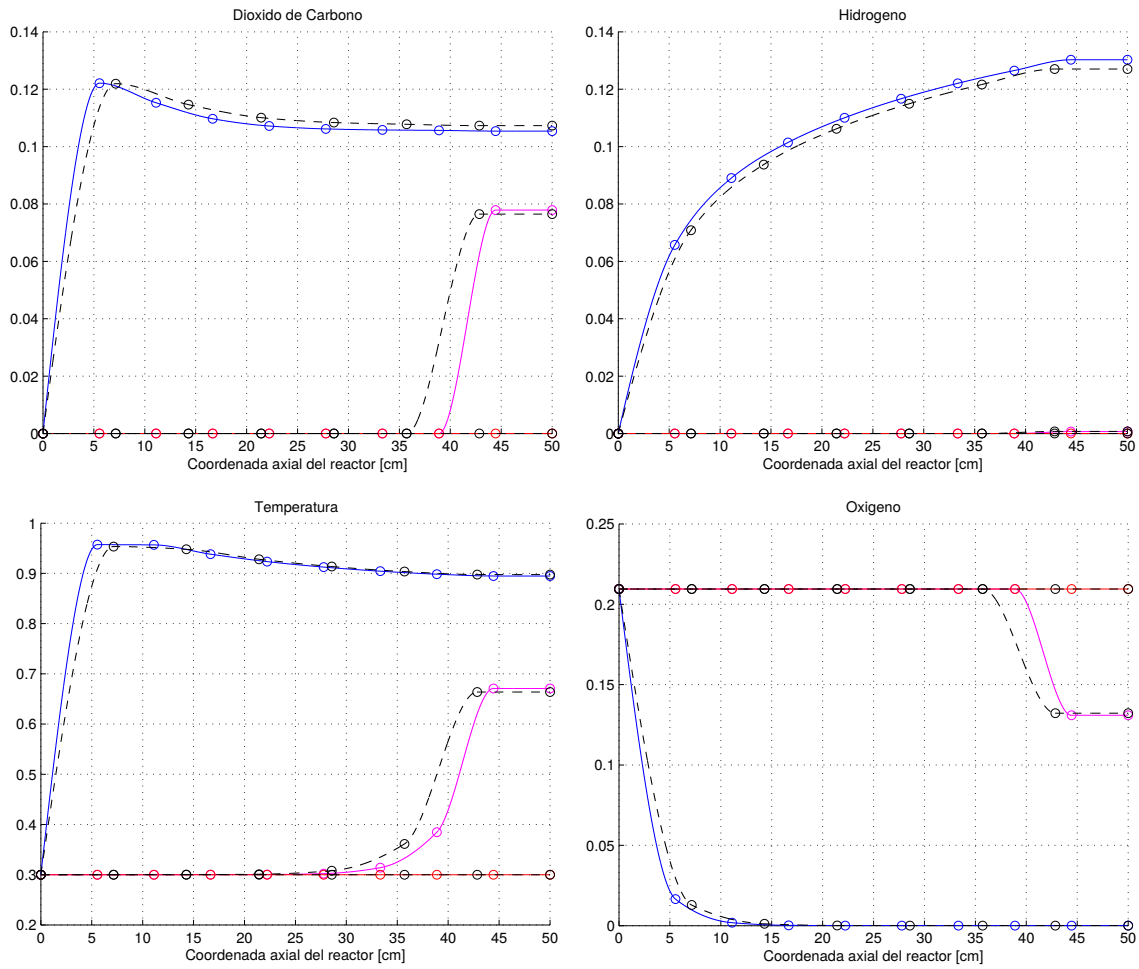


Figura 2.3: Perfil espacial de cuatro estados obtenido a partir del modelo de estudio (2.29) para un caso de 6 y 8 tanques interconectados con volumen idéntico.

A fin de ilustrar el método de modelado, en la figura 2.3 se muestra el perfil espacial de cuatro de los trece estados del modelo dinámico de reactor de gasificación, para el caso de 8 (línea sólida) y 6 (línea punteada) tanques interconectados, es estas gráficas se pueden observar tres distintos estados estacionarios, los cuales corresponden a un punto de extinción, un punto de encendido y un punto intermedio entre ellos, el cual resulta ser un punto silla.

Capítulo 3

Análisis dinámico de un reactor de gasificación

En este capítulo se realiza un análisis cualitativo del comportamiento de los sistemas dinámicos asociados a los reactores de gasificación. Entre las características buscadas se encuentran los estados estacionarios y los ciclos límite, los cuales son los conjuntos invariantes más simples que determinan la topología de las soluciones del sistema en el espacio de estados. El objetivo de este análisis consiste en encontrar propiedades cualitativas que determinen la evolución de la respuesta ante cambios pequeños en los parámetros. Los motivos principales para analizar el comportamiento cualitativo del sistema son la incertidumbre paramétrica, dinámicas rápidas despreciadas en el modelo reducido debido a la hipótesis de estado cuasi-estacionario, entre otras suposiciones simplificantes de modelado.

La teoría de bifurcación de sistemas dinámicos no lineales constituye la base conceptual del análisis sistemático del comportamiento no local del gasificador de biomasa, por consecuencia, se lleva a cabo un análisis del efecto del flujo de alimentación de aire en el comportamiento estático y dinámico del reactor de gasificación de biomasa mediante el esquema de modelado de N -RCTAs.

Uno de los objetivos más importantes al analizar sistemas dinámicos es poder clasificar y comparar sistemas basados en relaciones de equivalencia. Así, resulta necesario introducir algunas definiciones que ayudarán en la comprensión del análisis dinámico del reactor de gasificación en cuestión.

Dados los sistemas

$$\dot{x} = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (3.1)$$

y

$$\dot{x} = g(x), \quad x \in \mathbb{R}^n. \quad (3.2)$$

Sea x_0 un punto de equilibrio del sistema (3.1) donde f es suave; sea $A = \frac{df}{dx}$ la matriz Jacobiana de f evaluada en x_0 . Sean n_-, n_0, n_+ el número de valores propios de A con parte real negativa, cero y positiva respectivamente (Kuznetsov, 2013).

Definición 3.1. Un punto de equilibrio se llama *hiperbólico* si *no* existe un eigenvalor con $\text{Re}\lambda = 0$ ($n_0 = 0$), esto es, si *no* hay valores propios sobre el eje imaginario. Un punto de equilibrio hiperbólico es llamado *silla-hiperbólico* si $n_-, n_+ \neq 0$.

3.1. Estabilidad estructural

Definición 3.2. La distancia entre (3.1) y (3.2) en una región cerrada $U \subset \mathbb{R}^n$ es un número positivo d_1 dado por:

$$d_1 = \sup_{x \in U} \left\{ \|f(x) - g(x)\| + \left\| \frac{df(x)}{dx} - \frac{dg(x)}{dx} \right\| \right\}. \quad (3.3)$$

Los sistemas son ϵ -cercanos en U si $d_1 \leq \epsilon$.

Definición 3.3. El sistema (3.1) se dice que es *estrictamente estructuralmente estable* en la región U si existe un $\epsilon > 0$ tal que para cualquier sistema (3.2) que sea ϵ -cercano al sistema original, es decir, que $d_1(f, g) < \epsilon$, se cumple que f y g sean *topológicamente equivalentes* (ver **Apéndice B**) en U (Kuznetsov, 2013).

Al considerarse fija la región U , una pequeña perturbación al sistema podría provocar que el sistema no fuera estructuralmente estable, esto es, que existen sistemas que tienen puntos de equilibrio hiperbólicos o ciclos límite que tocan la frontera de U y de acuerdo a la definición anterior, son estructuralmente inestables ya que bajo pequeñas perturbaciones del sistema el punto de equilibrio o los ciclos límite quedan fuera de la región U , por lo cual ya no serían topológicamente equivalentes. Para atacar este problema hay dos opciones: a) considerar el sistema dinámico de forma global; para sistemas en \mathbb{R}^n resulta complicado ya que la distancia entre cualquiera de dos sistemas puede ser infinita si el supremo en d_1 se toma sobre todo \mathbb{R}^n . b) una segunda opción es seguir trabajando con regiones acotadas, entonces es necesario definir otro tipo de estabilidad estructural.

3.1.1. Estabilidad estructural de Andronov

Definición 3.4. Un sistema (3.1) definido en una región $D \subset \mathbb{R}^n$ es *estructuralmente estable en el sentido de Andronov* en una región $D_0 \subset D$ si para cualquier sistema (3.2) suficientemente ϵ -cercano en D existen regiones $U, V \subset D$, tal que (3.1) es *topológicamente equivalente* en U a (3.2) en V (Kuznetsov, 2013).

Básicamente la definición anterior implica una preservación de la estabilidad de un estado estacionario (EE) del proceso ante variaciones de parámetros del sistema en un rango de valores pequeños.

El reactor de gasificación puede exhibir un comportamiento en estado estacionario cualitativamente diferente ante cambios pequeños en los parámetros de alimentación. Dicho sistema se dice que es estructuralmente inestable y el cambio cualitativo en su comportamiento se conoce como bifurcación.

3.2. Teoría de bifurcaciones

Sea un nuevo sistema de la forma

$$\dot{x} = f(x, \alpha), \quad (3.4)$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$ y $\alpha \in \mathbb{R}^m$ representan los estados y los parámetros respectivamente; consideremos el retrato de fase del sistema cuando varía el vector de parámetros α . Existen dos posibilidades: que el sistema permanezca topológicamente equivalente al sistema original o no (ver **Apéndice B**).

Definición 3.5. La aparición de retratos de fase no equivalentes topológicamente bajo la variación de parámetros se llama *bifurcación*.

Definición 3.6. Un *diagrama de bifurcación* de un sistema dinámico es una estratificación de su espacio de parámetros inducida por la equivalencia topológica junto con los retratos de fase representativos de cada estrato.

De acuerdo con las definiciones anteriores, una bifurcación es un cambio cualitativo en el retrato de fase cuando un parámetro alcanza o sobrepasa a un cierto valor crítico. En particular, llamaremos bifurcación de un punto de equilibrio el caso donde este cambio consiste en la aparición de nuevos puntos de equilibrio que al alejarse el parámetro del valor crítico, se alejan del punto en cuestión, en resumen, podemos concluir que el punto de equilibrio se escinde bajo el cambio del parámetro.

3.2.1. Bifurcación nodo-silla o punto límite

También conocida como *bifurcación de fold*. Un estado estacionario tipo nodo estable evoluciona a un tipo silla lo cual genera multiplicidad de estados estacionarios. El punto de bifurcación ocurre cuando algún $\lambda_{i,j} = 0$.

3.2.2. Bifurcación de Hopf-Andronov

Un estado estacionario tipo foco estable se vuelve inestable y se genera un ciclo límite (oscilación periódica persistente). El punto de bifurcación ocurre cuando alguna pareja $\lambda_{i,j} = \pm j\omega_i$.

3.2.3. Ejemplo: Dinámica no lineal de un reactor de tanque agitado

Un reactor CSTR (Continuos Stirred Tank Reactor) es un tipo de reactor químico ideal básico empleado para modelar el comportamiento de las variables de interés de gran cantidad de procesos químicos encontrados en la literatura de ingeniería de procesos. Para este ejemplo se modela un reactor de tipo tanque agitado, el cual cuenta con una camisa de intercambio de calor que recubre la superficie exterior del recipiente. Debido a que la reacción que se origina en el interior del reactor es exotérmica, la camisa cumple la función de enfriar el reactor y regular la temperatura interior del tanque (ver figura 3.1).

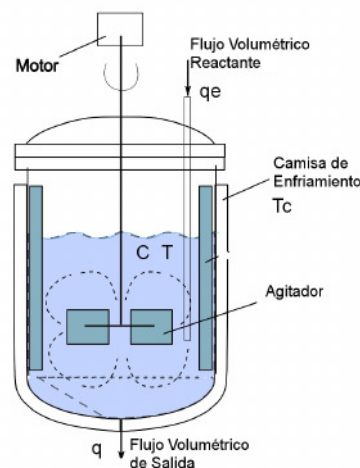


Figura 3.1: Esquema simple de un reactor de tanque agitado y flujo continuo.

Un modelo dinámico simplificado de un reactor de tanque agitado y flujo continuo (CSTR) no isotérmico, con una reacción exotérmica de primer orden e intercambio de calor con el exterior queda representado por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales proveniente de un análisis de balances de masa y energía (Aris y Amundson, 1958b):

$$\frac{dc}{dt} = \theta(c_{in} - c) - r(c, \tau), \quad c(0) = c_0, \quad (3.5a)$$

$$\frac{d\tau}{dt} = \theta(\tau_{in} - \tau) + \delta r(c, \tau) - v(\tau - \tau_c), \quad \tau(0) = \tau_0, \quad (3.5b)$$

donde c_{in} es la concentración de entrada, c es la concentración total, τ_{in} es la temperatura de entrada, τ_c es la temperatura de la camisa y τ es la temperatura de salida. Tomando en consideración los siguientes parámetros:

$$c_{in} = \theta = v = \delta = 1, \quad \tau_{in} = \tau_c = 1.75, \quad (3.5c)$$

$$r(c, \tau) = ce^{k-\epsilon/\tau}, \quad k = \ln(K) = 25, \quad \epsilon = 50. \quad (3.5d)$$

Este sistema tiene los siguientes puntos de equilibrio

Punto de equilibrio		Tipo	Valores característicos	
$\tau = 1.768$	$c = 0.9638$	Nodo estable	$\lambda_1 = -1.1083$	$\lambda_2 = -1.3482$
$\tau = 2$	$c = 0.5$	Punto silla	$\lambda_1 = -0.75$	$\lambda_2 = 3$
$\tau = 2.2$	$c = 0.0885$	Foco estable	$\lambda_{1,2} = -1.9659 \pm 3.0601j$	

Tabla 3.1: Puntos de equilibrio del CSTR.

En la figura 3.2 se presenta el plano de fase de este tipo de reactor para una temperatura en la camisa normalizada de $\tau_c = 1.75$, en dicha figura se pueden observar los tres puntos de equilibrio que presenta el sistema.

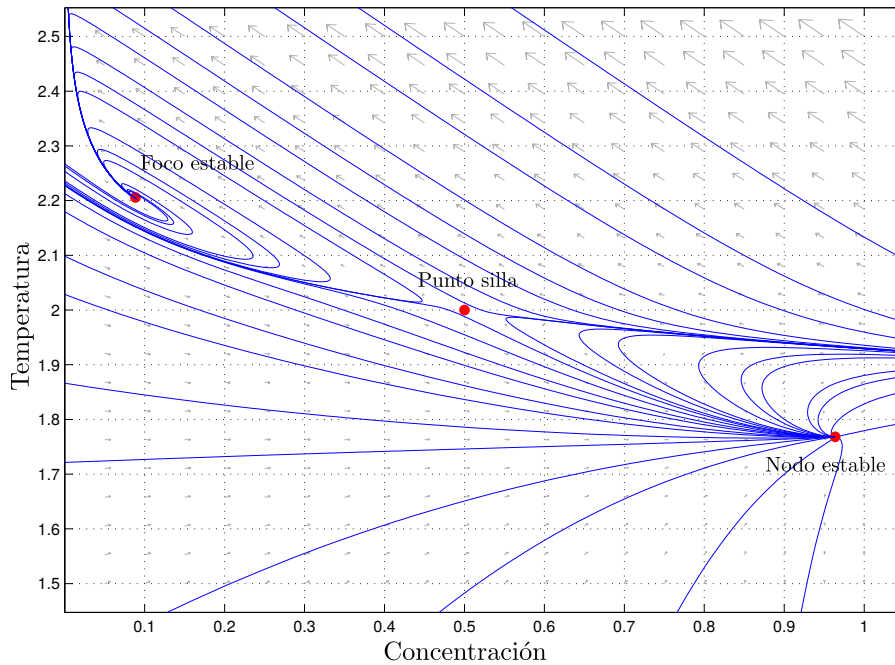


Figura 3.2: Plano de fase del CSTR.

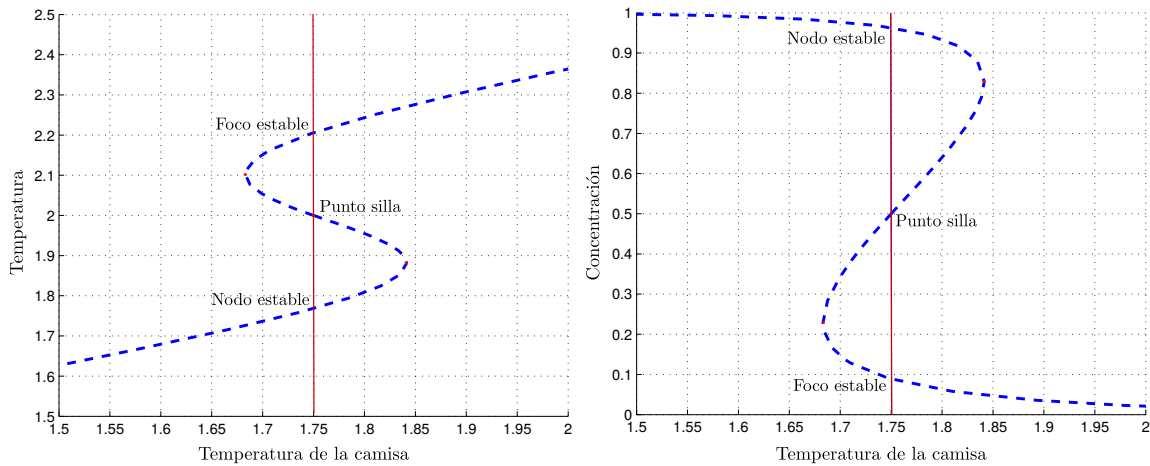


Figura 3.3: Gráfica de la dependencia de los estados con el parámetro τ_c .

Posteriormente se realiza un análisis de bifurcaciones de este modelo dinámico simple tomando como variación el parámetro de la temperatura de la camisa τ_c . En la figura 3.3 se puede observar el cambio que sufren los puntos de equilibrio al ir variando el parámetro τ_c , la línea vertical que aparece en $\tau_c = 1.75$ es simplemente para mostrar los tres puntos de equilibrio existentes en ese momento. A medida que se va variando el parámetro elegido, es posible observar como el sistema pasa de tener tres puntos de equilibrio a sólo dos de ellos, es decir, dos puntos de equilibrio se unen para formar uno; además de que variaciones mayores inducen un sólo punto de equilibrio.

En conclusión, con el análisis de bifurcaciones será posible obtener información de nuestro modelo de estudio (2.29) acerca de los cambios cualitativos que ocurren en el comportamiento tanto dinámico como en estado estacionario al variar un conjunto de parámetros del sistema dinámico.

Badillo (2014) hace un estudio no lineal basado en bifurcaciones del modelo (2.29) de N -RCTAs para un reactor de gasificación, en el trabajo se concluye que el número de puntos de equilibrio encontrados al variar el número de tanques interconectados en serie corresponde a una relación de $2n + 1$, siendo n el número de tanques a considerar en el modelo. Es importante mencionar que mientras más tanques se agreguen al modelo más complejo se hace el análisis y la carga computacional (se incrementan 3 EDOs por tanque), por otro lado, la aparición de un mayor número de puntos estacionarios puede que no represente ninguna relevancia física ya que hasta el momento en la literatura, se tienen reportados de forma experimental 3 puntos de equilibrio (2 estables y 1 inestable).

Algunas de las conclusiones a las que se llega en Badillo (2014) tras realizar un análisis mediante teoría de bifurcaciones para un número de Peclet $P_{eH} = 1.72$ se enumeran a continuación:

- El tren de N -RCTAs con retro-mezclado de calor correspondiente a un número de Peclet $P_{eH} = 1.72$ presenta una multiplicidad máxima de 5 estados estacionarios (3 estables y 2 inestables).
- Sólo el estado estacionario de reacción estabilizada en la cima y el estado de extinción son estructuralmente estables.
- Con base en este análisis es posible analizar, capturar y completar la descripción de características esenciales del comportamiento estático y dinámico complejo no lineal exhibido por el reactor de gasificación mediante un modelo mínimo de N -RCTAs.

3.3. Estudio cualitativo de un reactor de gasificación para diversos P_{eH}

Con la idea de contar con el mínimo número de tanques que logren representar la dinámica del modelo del reactor de gasificación y relacionarlo con el número de puntos estacionarios estructuralmente estables que se preservan al aumentar el número de tanques interconectados, se hace un análisis exhaustivo haciendo uso de la teoría de bifurcaciones mediante la ayuda de MATCONT de Matlab. El análisis realizado se basa en las siguientes consideraciones:

- El parámetro a variar que se eligió es la relación aire-combustible ya que para la parte experimental, el gas de síntesis liberado producto de la combustión dentro del reactor es enviado a un motor de combustión el cual está conectado a un generador eléctrico.
- Debido a que en la literatura se tienen reportados números de Peclet que van del orden de 2 a 10, se toman algunos casos representativos dentro de este intervalo con el fin de encontrar el número de tanques donde se llega a preservar el número mínimo de puntos estacionarios estructuralmente estables.
- Al final, dependiendo del número de Peclet trabajado, se busca concluir qué número de reactores interconectados es necesario para poder representar la dinámica global del reactor de gasificación.

En las siguientes sub-secciones se presentan los resultados obtenidos para tres distintos números de Peclet. Con la finalidad de aclarar el procedimiento que se realizó en cada uno de los casos, se enumera una lista de pasos que se llevó a cabo para encontrar los distintos puntos estacionarios existentes así como los diagramas de bifurcación de cada uno de estos.

1. Se fija el número de Peclet a trabajar.
2. Se establece el número de tanques a interconectar en el modelo (2.29).
3. Dadas unas condiciones iniciales y de frontera, se resuelve el sistema (2.29) para encontrar el punto de equilibrio correspondiente.
4. Se procede a utilizar el programa MATCONT de Matlab, se establece el parámetro a variar (en este estudio el parámetro es la relación aire-combustible W_{ab}) y se procede a encontrar el diagrama de bifurcación correspondiente.
5. Finalizado el diagrama de bifurcaciones, se localiza el nuevo punto de equilibrio correspondiente al mismo parámetro sobre en valor de W_{ab} predeterminado.
6. Se perturba (por arriba o por abajo) el punto de equilibrio encontrado y se renombra como el nuevo vector de condiciones iniciales.
7. Dado el nuevo vector de condiciones iniciales, se resuelve nuevamente el modelo (2.29); si se encuentra un nuevo punto de equilibrio entonces se regresa el proceso desde el paso 4, si el punto estacionario corresponde a uno de los encontrados anteriormente se prosigue al siguiente paso.
8. Una vez encontrados todos los puntos estacionarios existentes, lo siguiente es graficarlos y obtener conclusiones.

3.3.1. Número de Peclet $P_{eH} = 2$

Fijando el número de Peclet en 2 (coeficiente de dispersión $\mathbb{D}_H = 0.5$), se toma el modelo (2.29) con $n = 3$ tanques interconectados y se procede a encontrar los puntos estacionarios existentes mediante la teoría de bifurcaciones. En la figura 3.4 se tienen los diagramas de bifurcación para el caso de la temperatura y el hidrógeno (ambas gráficas se ilustran de forma adimensional) contra la relación aire-combustible. Como se mencionó anteriormente, el parámetro a variar en el sistema (2.29) es W_{ab} , en particular nos interesan los puntos estacionarios que surjan dentro de una región cercana a $W_{ab} = 1.5$ ya que este es el índice donde opera el motor de combustión que está conectado al reactor de gasificación de nuestro caso de estudio. En las gráficas se puede observar que, trazando una línea vertical sobre $W_{ab} = 1.5$ existen 6 puntos que cruzan por tal línea (considerando el de extinción en total son 7 PE), lo cual cumple con lo establecido en Badillo (2014).

Con el fin de esclarecer las bifurcaciones que se originan al variar el parámetro W_{ab} , se hace un zoom de algunas regiones en ambas gráficas. Por otra parte, de las mismas gráficas se puede identificar que existe un mayor número de puntos estacionarios para algunas regiones o valores del parámetro en variación; sin embargo como se ha mencionado antes, en este análisis y los posteriores únicamente nos concentraremos en las regiones cercanas al parámetro $W_{ab} = 1.5$ ya que son los que representan un interés práctico.

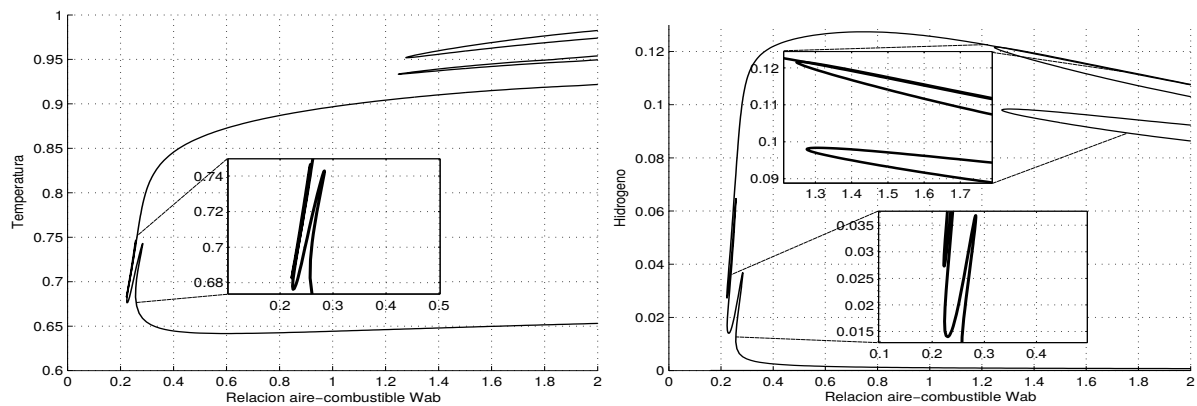


Figura 3.4: Diagramas de bifurcación de la temperatura e hidrógeno para un caso de 3 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 2$

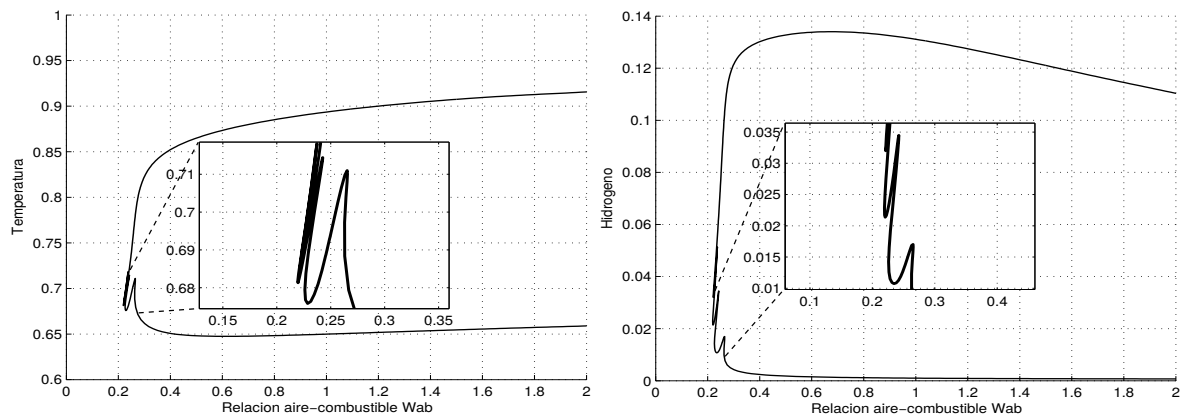


Figura 3.5: Diagramas de bifurcación de la temperatura e hidrógeno para un caso de 4 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 2$

Para el caso en que se toman 4-RCTAs el diagrama de bifurcaciones presenta un cambio con respecto al de tres tanques, al incrementar en uno el número de tanques interconectados se esperaría que los puntos estacionarios encontrados fueran 9 (dos más que el anterior), sin embargo como se puede observar en la figura 3.5 los PEs resultantes son únicamente tres (considerando el punto estacionario de apagado). Lo anterior nos dice que llegando a un cierto número de tanques interconectados, los puntos de equilibrio van a disminuir y, si se observa desde el lado práctico se puede concluir que a partir de este punto se sabe el número mínimo de tanques a interconectar suficientes para poder representar la dinámica global del sistema.

En la figura 3.6 se pueden apreciar los perfiles espaciales correspondientes a los puntos de equilibrio para el caso de tres tanques interconectados con un número de $P_{eH} = 2$, en esta gráfica se presentan los perfiles espaciales de la temperatura, hidrógeno, dióxido de carbono y oxígeno; en líneas punteadas se tienen los puntos de equilibrio inestables y en línea continua los estables. Como es obvio, la solución numérica del sistema de ecuaciones arrojadas del modelo (2.29) siempre nos da como resultado PEs estables y al hacer el análisis de bifurcaciones llegamos a los PEs inestables. Con $n = 3$ se mantiene el número de puntos estacionarios $2n + 1 = 7$.

Cuando se utilizan 4 tanques interconectados (figura 3.7) el número de puntos estacionarios encontrados es únicamente tres: el de encendido y el de extinción que resultan ser puntos estacionarios estables, y un punto silla que es el punto intermedio entre el de encendido y el de extinción. Si se comparan los perfiles que aparecen en azul de las figuras 3.6 y 3.7, es posible observar 3 PEs de los cuales se tiene uno inestable (punto silla) y dos estables (encendido y extinción) que se mantienen tras aumentar el número de tanques a interconectar, de estos PEs dos mantienen una propiedad *estructuralmente estable*.

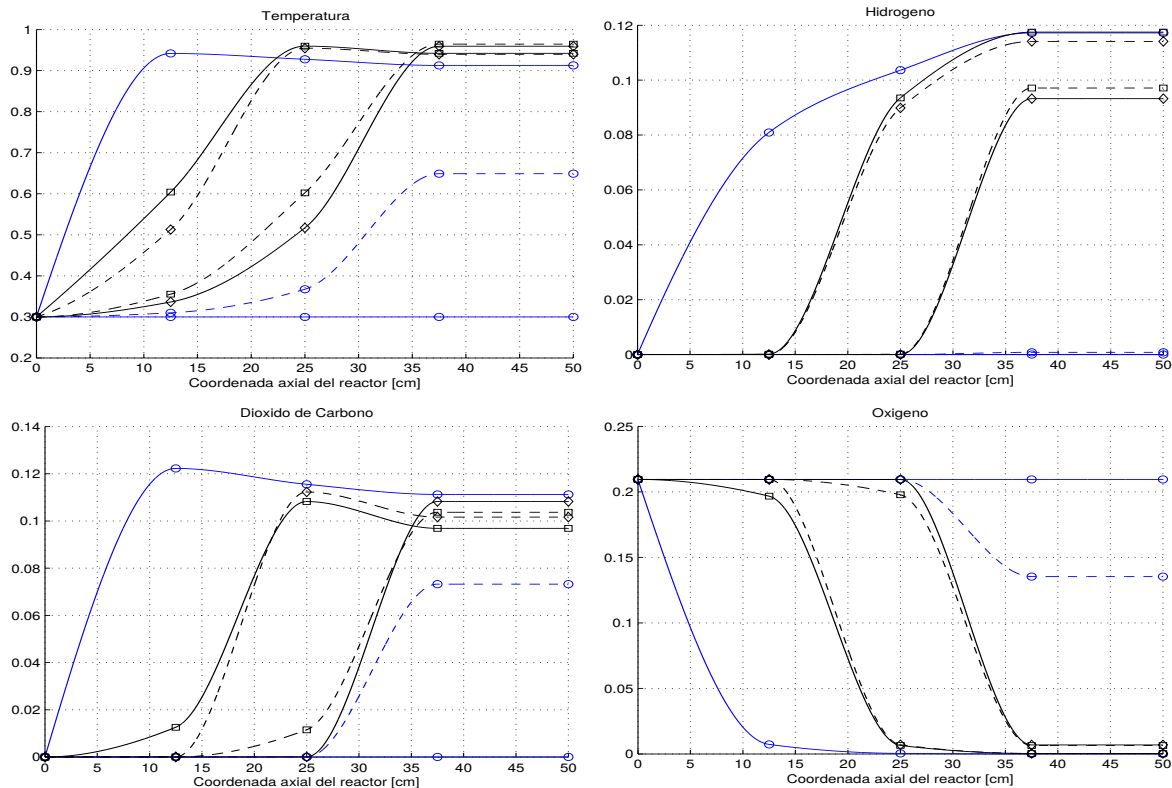


Figura 3.6: Puntos de equilibrio para un caso de 3 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 2$

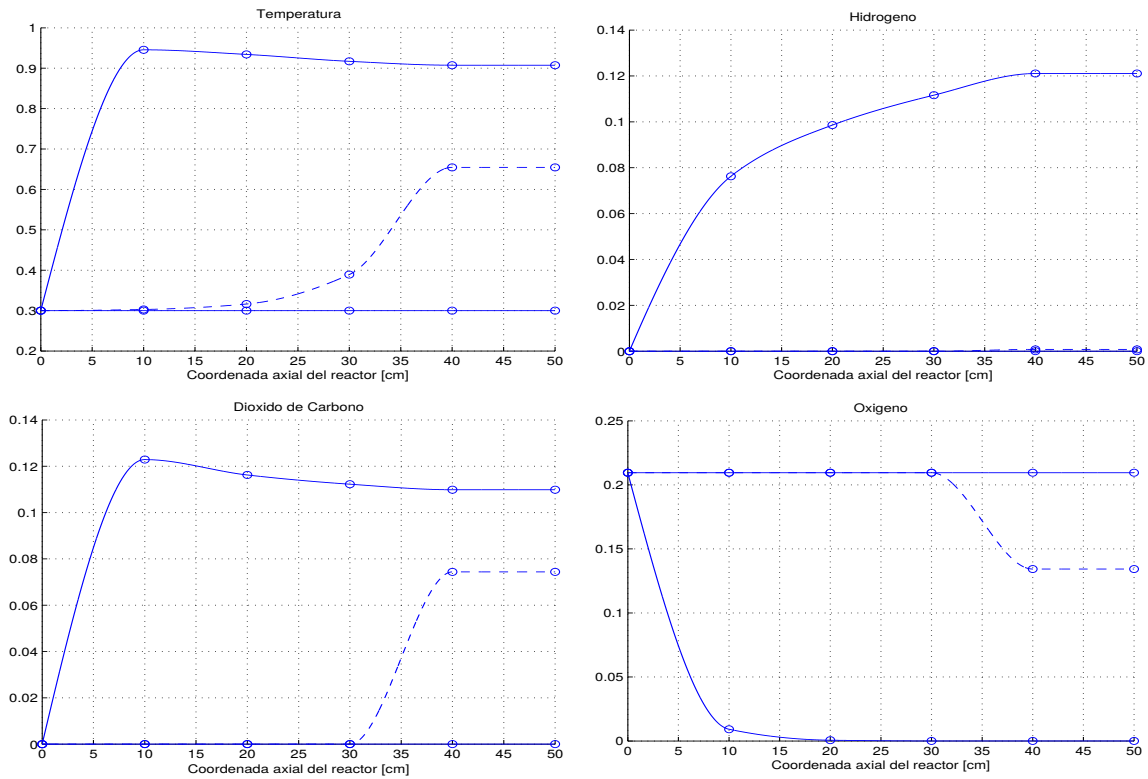


Figura 3.7: Puntos de equilibrio para un caso de 4 tanques interconectados en serie con $P_{eH} = 2$

3.3.2. Número de Peclet $P_{eH} = 3.84$

Posteriormente se propone cambiar el número de Peclet y realizar un análisis similar al anterior, es decir, obtener los puntos estacionarios para un número determinado de RCTAs con ayuda del programa de bifurcaciones MATCONT de Matlab. La finalidad de esto es ir incrementando el número de tanques interconectados hasta encontrar los puntos estructuralmente estables (2) hallados en el caso anterior y comparar el número de RCTAs entre ambos casos. Inicialmente se manejan 3 tanques y se van incrementando hasta que se rompa la regla de $2n + 1$ puntos estacionarios y entonces llegar únicamente a 3 puntos de equilibrio.

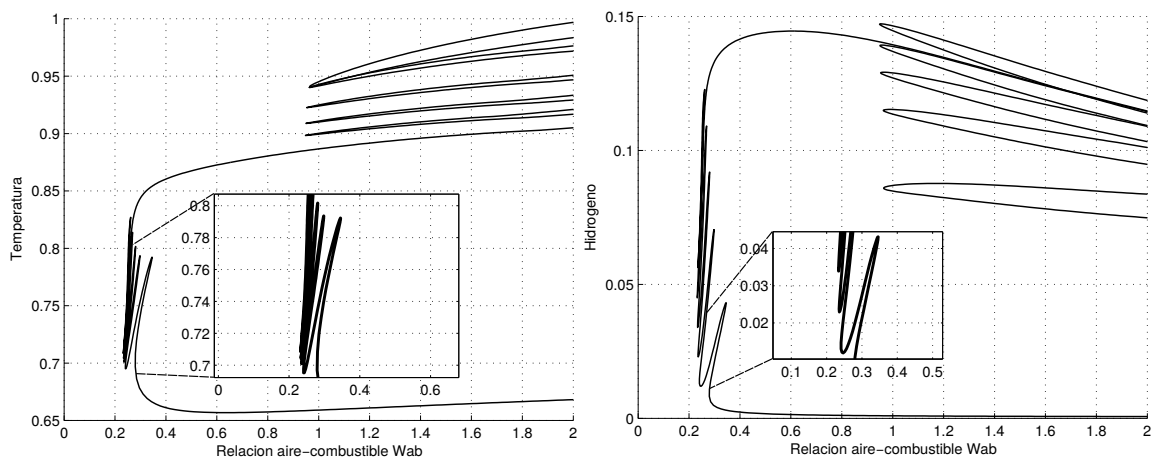


Figura 3.8: Diagramas de bifurcación de la temperatura e hidrógeno para un caso de 6 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 3.84$.

En la gráfica 3.8 se observa el diagrama de bifurcaciones correspondiente al tanque de salida de una red de 6-RCTAs con número de $P_{eH} = 3.84$. Como se puede ver, para un caso de seis tanques los PEs hallados son trece, mientras que para el caso de ocho tanques (figura 3.9) los PEs vuelven a ser tres tal y como ocurrió en el caso en que el número de $P_{eH} = 2$. Es importante mencionar que el diagrama de bifurcaciones generado para el caso de un número de $P_{eH} = 3.84$ es muy similar al del caso anterior y al de otros números de Peclet. Es por esta razón que en los casos posteriores se toma la libertad de omitir tales diagramas.

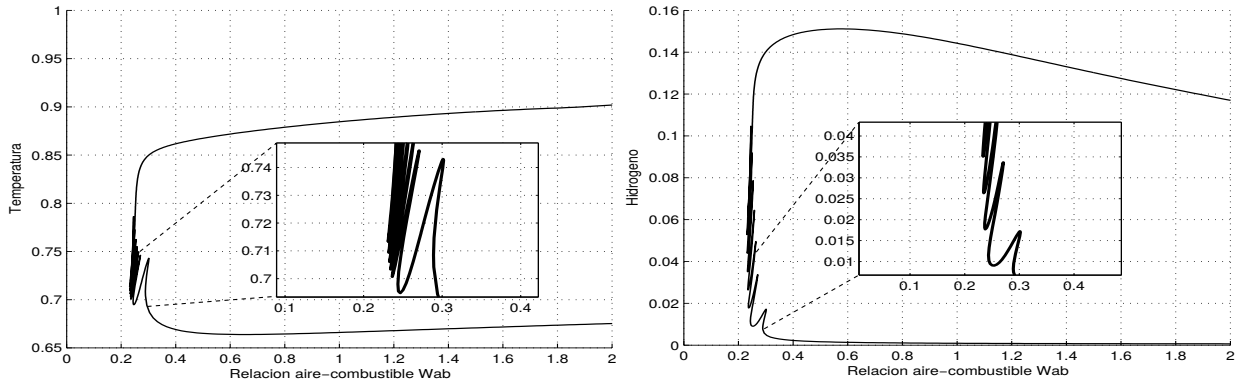


Figura 3.9: Diagramas de bifurcación de la temperatura e hidrógeno para un caso de 8 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 3.84$.

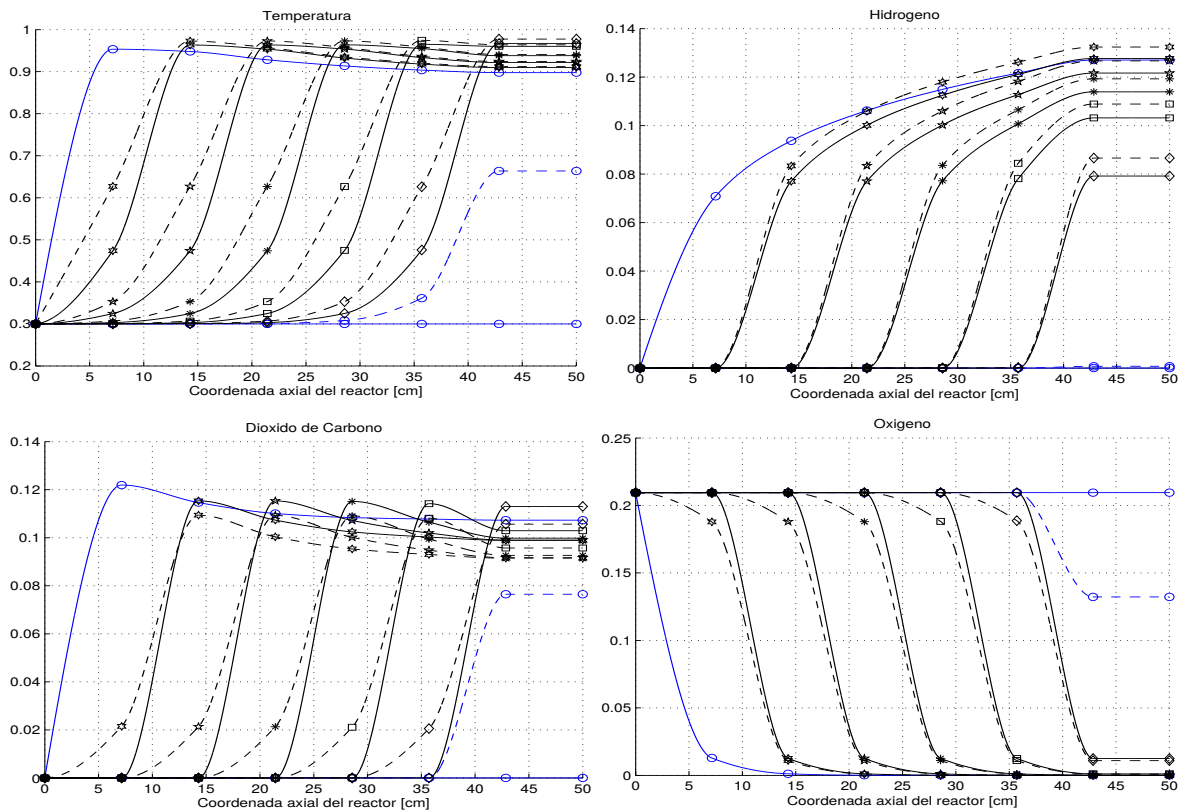


Figura 3.10: Puntos de equilibrio para un caso de 6 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 3.84$

En la gráfica 3.10 se ilustran los diagramas espaciales para el caso de 6-RCTAs con un número de Peclet $P_{eH} = 3.84$, en ella se puede observar que existen 13 PEs, por otro lado en la figura 3.11 se aumenta el número de tanques en serie a $n = 8$ y es en este número donde se logran ver los puntos de equilibrio estructuralmente estables observados para el caso de un $P_{eH} = 2$, a partir de aquí, si se sigue aumentando el número de tanques interconectados se mantendrán los mismos puntos de equilibrio (2 estables y uno inestable).

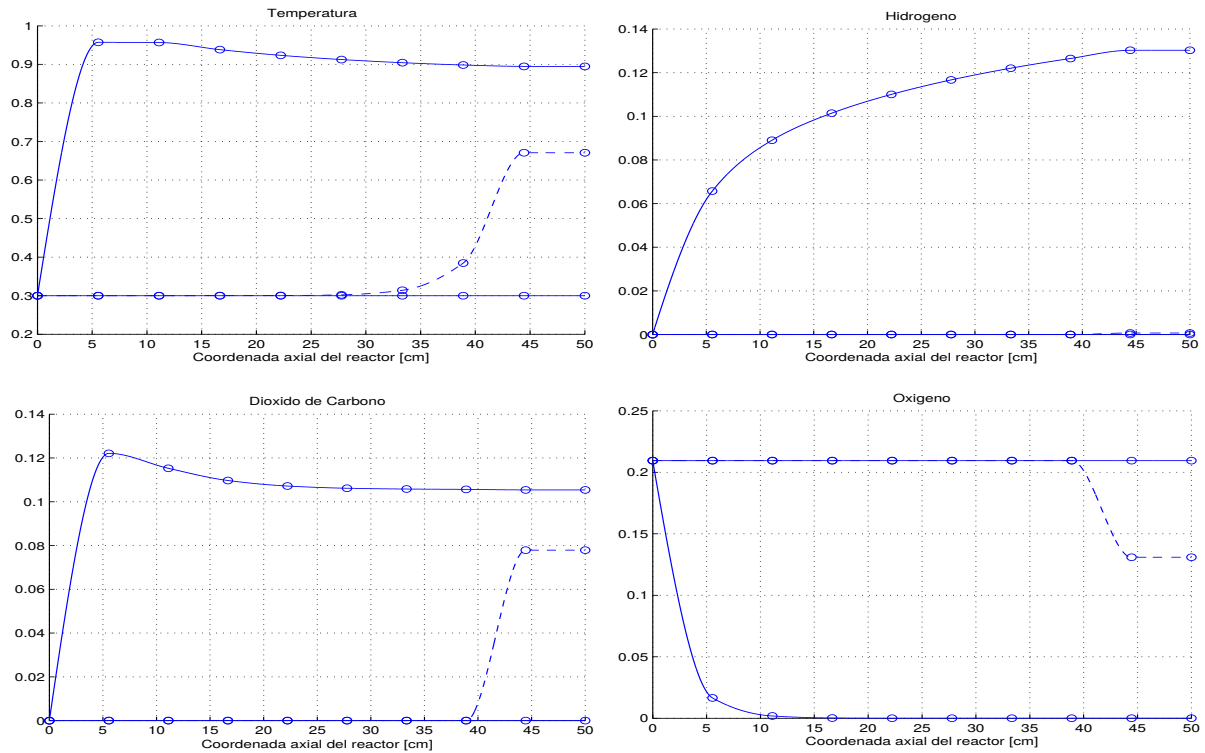


Figura 3.11: Puntos de equilibrio para un caso de 8 tanques interconectados en serie con un $P_{eH} = 3.84$

3.3.3. Relación entre P_{eH} y número de tanques

Vanderveen *et al.* (1968) estudia un modelo de celdas de un reactor catalítico de lecho empacado de dos fases con una reacción fuertemente exotérmica análogo al modelo de N -RCTAs estudiado en este trabajo. En dicho modelo, se observa un fenómeno de multiplicidad de un número infinito de EEs que de forma similar según Liu y Amundson (1962), se presenta también en reactores tubulares de dos fases sin dispersión. Al considerar la dispersión térmica y además incorporar un nivel suficiente de la misma al modelo distribuido puramente convectivo de reactores de lecho empacado, se soluciona el problema de multiplicidad infinita de EEs tanto en el modelo distribuido de dispersión como en el modelo en parámetros concentrados de N -RCTAs (Eigenberger, 1972). Así mismo, Eigenberger (1972) menciona dos posibles fenómenos físicos que dan origen a la presencia de múltiples estados estacionarios exhibido por los reactores de lecho empacado de dos fases bajo ciertas condiciones de operación:

- El efecto de retroalimentación de energía que tiene el transporte de calor por dispersión en el modelo distribuido del reactor o el retro-mezclado de calor en el modelo de N -RCTAs, el cual implica siempre un flujo de calor en sentido contrario al movimiento o flujo de lecho empacado (van Heerden, 1958).

- Los mecanismos de transporte de masa y energía intrapartícula y extrapartícula hacen posible que el frente de flama de combustión en la partícula del sólido tenga multiplicidad de ubicaciones estables e inestables: dentro de ella o en la superficie de la partícula de carbonizado para una concentración de oxígeno y temperaturas fijas en la atmósfera gaseosa que rodea a la partícula porosa (Amundson y Arri, 1978).

La idea e importancia de considerar la dispersión térmica se ve reforzada en Milligan (1994) y Hla (2004), donde atribuyen la intensidad de dicho fenómeno principalmente a la transferencia de calor por radiación de las partículas de carbonizado incandescentes en la zona de combustión hacia las partículas vecinas en la zonas de secado, pirólisis y de reducción de gasificadores de lecho empacado de biomasa con flujos descendentes. A pesar de ello, la influencia de la dispersión en la estática y dinámica del proceso de gasificación de biomasa no ha sido analizada en términos de aspectos prácticos de operación como la estabilidad, el encendido y el apagado del reactor.

La multiplicidad de PEs implica que el frente de reacción discontinuo exotérmico puede estabilizarse en cualquier posición axial a lo largo del reactor para un flujo entrante constante de reactantes al variar las condiciones iniciales de operación, un fenómeno que no se observa experimentalmente en reactores de lecho empacados autotérmicos donde siempre existe un acoplamiento de calor importante entre las partículas encendidas.

Es por todo lo anterior, que se realizó un análisis de bifurcaciones complementario al realizado en Badillo (2014) pero visto de una forma *no-local* y con una mayor dispersión térmica y retro-mezclado correspondientes al valor típico de conductividad térmica efectiva para gasificadores de lecho empacado con el objetivo de descartar el comportamiento no lineal sin relevancia física.

Durante el análisis realizado en las secciones anteriores, se observó particularmente el número de tanques interconectados en cascada y la variación de la dispersión térmica (número de Peclet) y cómo estas dos variaciones dan origen a cierto número de puntos estacionarios. En general, dado un número de Peclet y para un cierto número de tanques siempre se encontró $2n + 1$ PEs (Badillo, 2014), de los cuales $n + 1$ resultaron ser estables (Varma, 1980). Dependiendo de la dispersión asignada al modelo (2.29), después de un número n_r de tanques interconectados en serie se llega a únicamente 3 PEs de los cuales dos son estructuralmente estables y uno estructuralmente inestable. A partir de este número n_r , si se aumenta la red de RCTAs siempre se conservarían los mismos tres PEs, lo cual nos dice que con un n_r de RCTAs es suficiente para obtener la dinámica global del sistema.

Nº Tanques	P_{eh}			
	1.92	2.13	3.84	6.4
2	5	5	5	5
3	7	7	7	7
4	3	3	9	9
5	3	3	11	11
6	3	3	13	13
7	3	3	15	15
8	3	3	3	17
9	3	3	3	19
10	3	3	3	21
11	3	3	3	3

Tabla 3.2: Comparación entre P_{eh} , Nº tanques y PEE

En la tabla (3.2) se resume el análisis realizado durante este capítulo. En ella se puede

observar, para distintos valores de Peclet dentro de un intervalo de $1.92 < P_{eH} < 6.4$ y un N número de tanques interconectados en serie, los puntos de equilibrio encontrados y el n_r tanques suficientes para obtener la dinámica global del sistema.

Es fundamental hacer énfasis que los n_r tanques suficientes para lograrlo dependen del número de Peclet o de la dispersión que exista en el reactor de biomasa de estudio, concluyendo así la importancia que tiene para el modelo (2.29) el contar con un número de P_{eH} adecuado y entonces poder aplicar conceptos de la Teoría de Control tanto teóricos como prácticos para los reactores de gasificación. Finalmente tras este análisis realizado en este capítulo, es claro ver la importancia de conocer el número de Peclet presente de forma física en nuestro reactor de gasificación de estudio, motivación del siguiente capítulo presentado en este trabajo.

Capítulo 4

Estrategias experimentales para determinar el número de Peclet

La importancia de conocer la dispersión que existe dentro del reactor de gasificación lleva a buscar distintas metodologías no destructivas para determinar de forma experimental el número de Peclet y así poder ajustar el modelo utilizado en este trabajo antes de pensar en aplicar leyes de control. En este capítulo se revisan distintos métodos basados en la presencia de trazadores o variables que se pueden medir a la salida del reactor con el fin de determinar el comportamiento del reactor y así poder estimar el número de Peclet.

En las siguientes dos secciones se describe un método comúnmente utilizado en la Ingeniería Química para determinar el grado de dispersión presente en reactores de tanque agitado y flujo pistón. Es importante destacar que la metodología expuesta en Levenspiel (2011) está aplicada para reacciones donde el estado de agregación de la materia es líquido y que nuestro caso de estudio está referido a reacciones donde el estado de agregación de la materia es principalmente gas, por lo cual el propósito es llevar la metodología de trazadores para una clase de reactores desarrollada en Levenspiel (2011) al caso de estudio presentado en este trabajo y verificar la viabilidad de la misma.

4.1. Método de trazadores para una clase de reactores

Distribución de tiempos de residencia, RTD

Un factor que influye en el rendimiento de un reactor es la recirculación de flujo que pueda existir a través de él. Contar con una representación de la distribución de velocidades del fluido, podría ayudar en principio, a predecir el comportamiento del reactor.

Para estimular el sistema se considera solamente el flujo en estado estacionario del fluido a través de un recipiente, sin reacción y sin cambios de densidad.

La RTD se define a partir de la función $E(t)$ que satisface

$$\int_0^{\infty} E(t)dt = 1 \quad [\text{adim}], \quad (4.1)$$

donde la integral es denominada como la normalización de la distribución (Levenspiel, 2011).

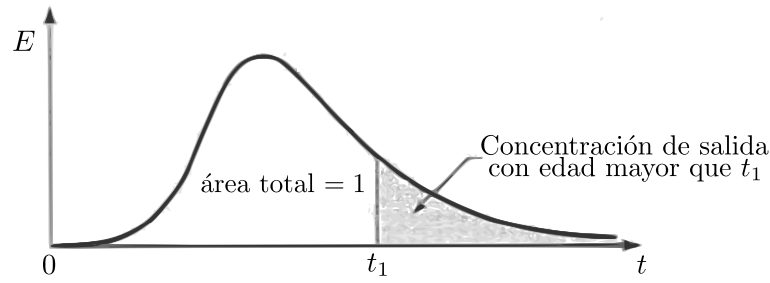


Figura 4.1: Distribución de tiempos de residencia E .

La curva E , que se ejemplifica en la figura 4.1, es la distribución que se necesita para tener en cuenta el flujo no ideal. Una restricción presente en esta curva E es que el fluido sólo entra y sale una vez del recipiente, lo cual excluye la existencia de remolinos en dirección contraria a la dirección del flujo.

De acuerdo con este principio, se tienen dos condiciones de frontera a tomar en cuenta para el análisis de estos reactores mediante esta técnica de trazadores; **condiciones de frontera de recipientes cerrados** que es cuando *no* existe flujo o remolinos en dirección contraria al flujo en la entrada o salida del recipiente y, **condiciones de frontera de recipientes abiertos** que ocurre cuando los elementos del fluido cruzan más de una vez los límites del sistema.

4.1.1. Métodos experimentales no destructivos para medir E

El mecanismo principal de estos métodos es excitar al sistema mediante técnicas no destructivas y observar a la salida el comportamiento generado por tales entradas. Existen varias alternativas experimentales para lograrlo, entre las formas más sencillas se encuentran los experimentos con entradas impulso y escalón.

Respuesta al impulso

Se considera un sistema de volumen V [m^3] a través del cual fluyen v [m^3/s] de fluido, se introducen M unidades de rastreador (pulso) en la corriente de entrada al recipiente y se mide la concentración (en el tiempo) del rastreador que abandona el recipiente. A esta curva de salida se le denomina curva C ; entonces el área bajo la curva queda determinada por la ecuación:

$$A = \int_0^{\infty} C dt \cong \sum_i C_i \Delta t_i = \frac{M}{v} \quad \left[\frac{kg \cdot s}{m^3} \right], \quad (4.2)$$

mientras que el tiempo medio de la curva C es de la forma

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} t C dt}{\int_0^{\infty} C dt} \cong \frac{\sum_i t_i C_i \Delta t_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} = \frac{V}{v} \quad [s]. \quad (4.3)$$

Para encontrar la curva E simplemente se dividen las lecturas de concentración por M/v

$$E = \frac{C}{M/v}. \quad (4.4)$$

Multiplicando el tiempo promedio de residencia por la curva E se obtiene otra función RTD (ver figura 4.2):

$$E_{\theta} = \bar{t} E = \frac{V}{v} \frac{C}{M/v} = \frac{V}{M} C, \quad (4.5)$$

donde E_θ queda en unidades adimensionales. Es importante mencionar que la relación que existe entre C y las curvas E sólo se cumple con exactitud para condiciones frontera de recipientes cerrados.

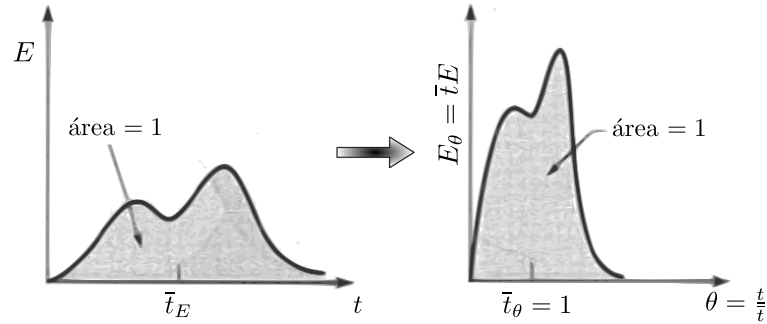


Figura 4.2: Relación entre curva E y E_θ .

Respuesta al escalón

Para la respuesta del sistema ante una entrada escalón, se considera un flujo volumétrico v [m^3/s] de una corriente de fluido que pasa a través de un recipiente de volumen V . En un tiempo $t = 0$ se cambia de fluido ordinario a un fluido con una concentración de rastreador $C_{max} = \left[\frac{kg \text{ ó } mol}{m^3} \right]$ y se mide la concentración a la salida C_{escal} contra el tiempo t , es decir,

$$C_{max} = \frac{\dot{m}}{v} \quad \left[\frac{kg}{m^3} \right], \quad (4.6a)$$

$$C_{max} \bar{t} = \frac{\dot{m}V}{v^2} \quad \left[\frac{kg \cdot s}{m^3} \right], \quad (4.6b)$$

donde \dot{m} es el flujo del trazador y

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{C_{max}} t dC_{escal}}{\int_0^{C_{max}} dC_{escal}} = \frac{1}{C_{max}} \int_0^{C_{max}} t dC_{escal}. \quad (4.6c)$$

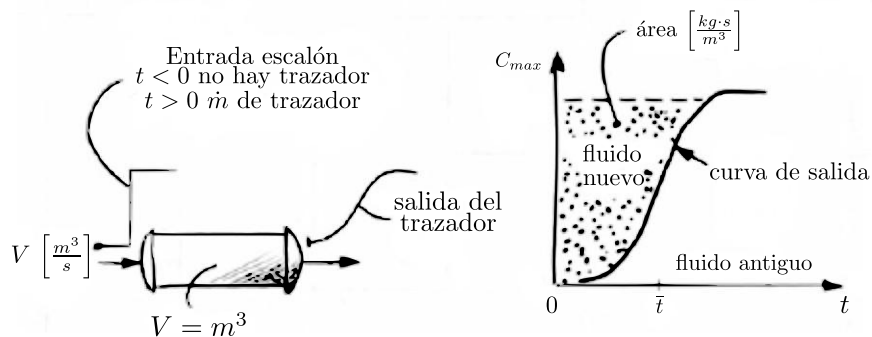


Figura 4.3: Experimento con rastreador escalón.

La forma adimensional de la curva C_{escal} es llamada curva F y se obtiene aumentando la concentración desde cero hasta la unidad (figura 4.3). Las curvas E y F guardan una relación entre sí, esto es, para cualquier instante de tiempo t

$$F = \int_0^t E dt, \quad (4.7)$$

o en forma diferencial

$$\frac{dF}{dt} = E, \quad (4.8)$$

esta equivalencia se puede ver en la figura 4.4

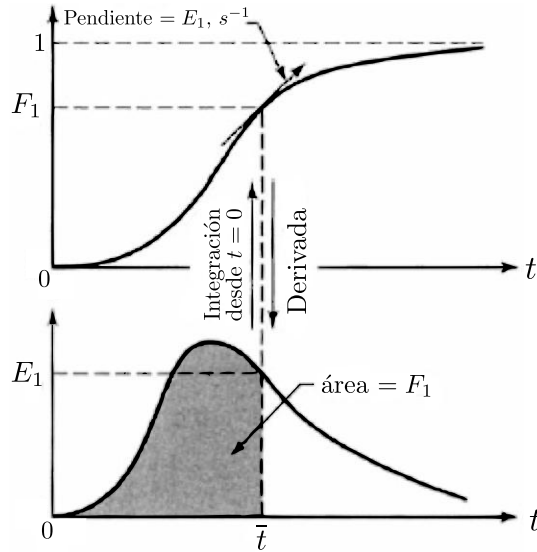


Figura 4.4: Relación entre las curvas E y F .

4.2. Modelo de dispersión (Levenspiel, 2011)

Existen distintos tipos de modelos para representar el flujo en reactores reales, esto depende a qué tipo de flujo se acerque más el reactor, flujo pistón o tanque agitado e incluso un intermedio entre estos. Si se analiza el patrón de flujo pistón con pequeñas desviaciones se tienen dos modelos para analizar las curvas RTD: el modelo de dispersión y el modelo de tanques en serie. Ambos se aplican para flujo laminar en tubos muy largos, chimeneas de hornos, flujo en lechos empacados (analizado en este trabajo), flujo turbulento en tuberías, etc.

El considerar un fluido en flujo pistón el cual tiene un cierto grado de retomezclado, cuya magnitud es independiente de la posición dentro del recipiente implica que no existen zonas muertas, ni grandes desviaciones o cortocircuitos de fluido dentro del recipiente. A este modelo se le conoce como flujo disperso en pistón o simplemente, *modelo de dispersión*. Si las condiciones de intermezclado varían, la predicción de este modelo oscilará entre el flujo pistón ideal y el de tanque agitado. Este proceso de mezcla implica una redistribución de materia ya sea por deslizamiento o formación de remolinos dentro del contenedor; al repetirse un número considerable de veces este proceso durante el flujo del fluido, se considera que estas perturbaciones son de naturaleza estadística, lo cual es un fenómeno similar al que ocurre en la difusión molecular.

Por lo tanto, apoyados de la ecuación diferencial que rige la difusión molecular en una dirección x , es decir, analizando la ley de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C, \quad (4.9)$$

se puede obtener una ecuación que caracterice el grado de retomezclado del fluido que circula en dirección x

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (4.10)$$

donde D se denomina *coeficiente de dispersión longitudinal* o *axial*.

Realizando una transformación (Levenspiel, 1999) de la ecuación (4.10) se llega a la expresión

$$\frac{\partial C}{\partial \theta} = \left(\frac{D}{uL} \right) \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial C}{\partial z}, \quad (4.11)$$

donde u es la velocidad de flujo, L es la longitud del reactor, $z = (ut + x)/L$ y $\theta = t/\bar{t} = tu/L$. A el grupo adimensional $\frac{D}{uL}$ se le conoce como número de dispersión del recipiente y mide el grado de dispersión axial que existe a lo largo del reactor.

4.2.1. Dispersión longitudinal

Al introducir un impulso ideal de rastreador dentro de un reactor, el impulso se esparcirá conforme pasa a través del recipiente; a esta acción se le denomina dispersión o dispersión longitudinal, esto para distinguirla de la difusión molecular. El coeficiente de dispersión D representa la difusión general del proceso:

- Un valor grande de D indica una rápida dispersión de la curva del rastreador.
- Un valor pequeño de D indica una dispersión lenta.
- $D = 0$ nos dice que no hay dispersión, por lo cual se estaría hablando de un flujo pistón ideal.

Como ya se mencionó anteriormente, $D/uL = Bo = 1/Pe$ es el número de dispersión que comúnmente es denominado por los químicos como el número de Bodenstein. Por otra parte, $uL/D = Pe$ es conocido por los ingenieros como el número de Peclet.

Mediante el registro de las distintas curvas de trazador obtenidas a la salida del reactor se busca evaluar D o D/uL ; en particular para cada curva de salida obtenida se mide:

- \bar{t} : tiempo medio de la curva de salida.
- σ^2 : varianza o el cuadrado de la desviación estándar, una medida de dispersión de la curva de salida.

4.2.2. Pequeñas desviaciones a partir del flujo pistón, $D/uL < 0.01$

Si se impone un impulso ideal a un fluido en circulación, la dispersión existente dentro del reactor modifica este impulso; para grados de dispersión pequeños, esto es $D/uL < 0.01$, el ensanchamiento de la curva de rastreador no cambia significativamente en cuanto a forma tras su paso por el punto de medición. Bajo estas condiciones, la solución a la ecuación (4.11) queda de la forma

$$C = \frac{1}{2\sqrt{\pi(D/uL)}} \exp \left[-\frac{(1-\theta)^2}{4(D/uL)} \right], \quad (4.12)$$

la cual forma una familia de curvas gaussianas también llamadas curvas de distribución normal (figura 4.5).

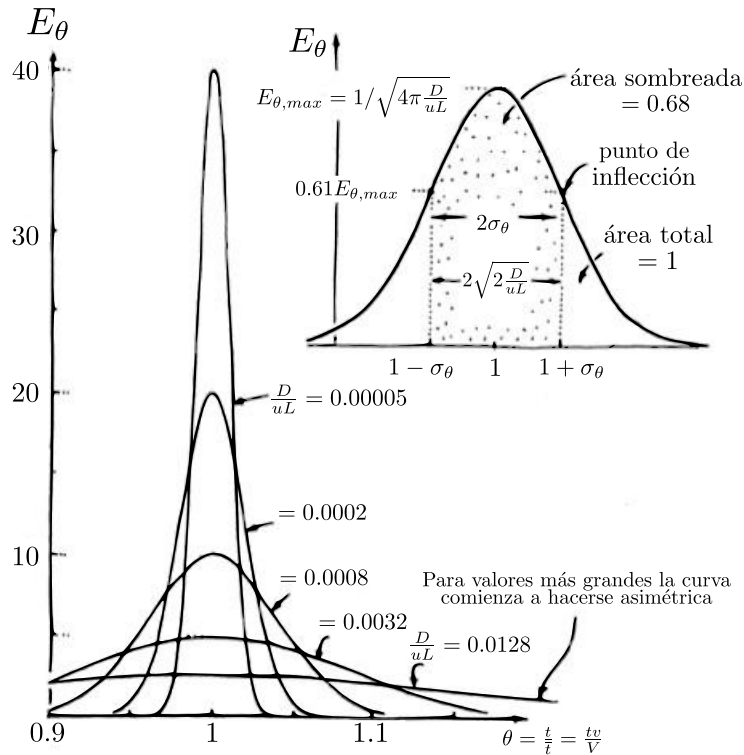


Figura 4.5: Relación entre D/uL y la curva adimensional E_θ para pequeña dispersión.

Es importante recordar que el desarrollo de este trabajo está orientado a determinar de forma convincente el grado de dispersión existente en una clase de reactores, es decir, estimar el número de Peclet lo cual permitirá ajustar el modelo de estudio y dejar como una segunda etapa el desarrollo para poder llevarlo a cabo de forma experimental. Resulta entonces de gran importancia conocer un valor aproximado del grado de dispersión presente en los reactores de gasificación. Los reportes experimentales sobre el número de Peclet encontrados en la literatura mencionan un intervalo de $2 \leq Pe \leq 10$; esto quiere decir que el coeficiente de dispersión ronda entre $0.5 \geq D/uL \geq 0.1$, que en este contexto habla de grandes desviaciones respecto al flujo pistón ideal.

4.2.3. Grandes desviaciones con respecto al modelo de flujo pistón, $D/uL > 0.01$

La curva E generada para este tipo de desviaciones se vuelve asimétrica (ver figura 4.6) y para este tipo de curvas surge un problema adicional que ocurre tanto en la entrada como en la salida del recipiente y que afecta la forma de la curva medida en la salida. Esto genera dos condiciones de frontera: la primera donde no se afecta el flujo al pasar a través de la entrada y salida del contenedor (condición de frontera abierta) y la segunda cuando se tiene un comportamiento de flujo pistón fuera de las fronteras del sistema (condición de frontera cerrada); estas dos condiciones de frontera dan origen a cuatro combinaciones: reactor cerrado E , cerrado abierto E_{co} , abierto cerrado E_{oc} y abierto E_{oo} . Para los cuatro casos se puede obtener información sobre el D/uL a partir de los parámetros arrojados por las formas de las curvas del rastreador, aunque cada condición de frontera tiene su propia metodología.

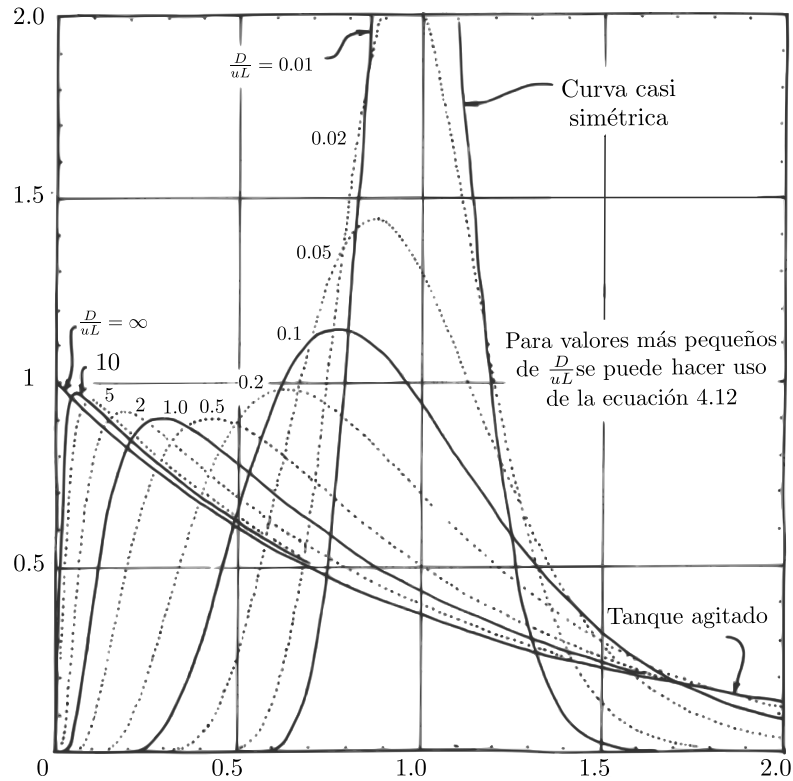


Figura 4.6: Relación entre D/uL y la curva adimensional E_θ para gran dispersión.

Recipiente cerrado.

No existe una expresión analítica para determinar la curva E ; sin embargo se puede construir la curva por métodos numéricos valuando su media y varianza por medio de las siguientes ecuaciones (Van der Laan: 1958):

$$\bar{t}_E = \bar{t} = \frac{V}{v} \quad \text{ó} \quad \bar{\theta}_E = \frac{\bar{t}_E}{t} = \frac{\bar{t}_E v}{V} = 1, \quad (4.13a)$$

$$\sigma_\theta^2 = \frac{\sigma_t^2}{\bar{t}^2} = 2 \left(\frac{D}{uL} \right) - 2 \left(\frac{D}{uL} \right)^2 \left[1 - \exp^{-uL/D} \right]. \quad (4.13b)$$

Recipiente abierto-cerrado y cerrado-abierto.

Al igual que en el caso de recipientes cerrados, a través de medir la media y varianza de las curvas de trazador es posible encontrar la dispersión existente dentro del reactor mediante las siguientes ecuaciones (Van der Laan:1958):

$$\bar{\theta}_{E_{oc}} = 1 + \left(\frac{D}{uL} \right) \quad \bar{t}_{E_{oc}} = \frac{V}{v} \left(1 + \frac{D}{uL} \right), \quad (4.14a)$$

$$\sigma_{\theta_{oc}}^2 = \frac{\sigma_{t,oc}^2}{\bar{t}^2} = \frac{\sigma_{t,oc}^2}{(V/v)^2} = 2 \left(\frac{D}{uL} \right) + 3 \left(\frac{D}{uL} \right)^2. \quad (4.14b)$$

Recipiente abierto.

Esta es la condición más utilizada y accesible experimentalmente hablando. Las expresiones analíticas están dadas por las siguientes ecuaciones (Levenspiel y Smith, 1957):

$$E_{\theta,oo} = \frac{1}{\sqrt{4\pi(D/uL)\theta}} \exp \left[-\frac{(1-\theta)^2}{4\theta(D/uL)} \right], \quad (4.15a)$$

$$E_{oo} = \frac{u}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left[-\frac{(L-ut)^2}{4Dt} \right], \quad (4.15b)$$

$$\bar{\theta}_{E_{oo}} = \frac{\bar{t}E_{oo}}{\bar{t}} = 1 + 2 \left(\frac{D}{uL} \right), \quad \bar{t}_{E_{oo}} = \frac{V}{v} \left(1 + 2 \frac{D}{uL} \right), \quad (4.15c)$$

$$\sigma_{\theta,oo}^2 = \frac{\sigma_{t,oo}^2}{\bar{t}^2} = 2 \left(\frac{D}{uL} \right) + 8 \left(\frac{D}{uL} \right)^2. \quad (4.15d)$$

Para calcular el coeficiente de dispersión se hace coincidir la curva del rastreador medida o la σ^2 medida con la teórica, hacer esto no habla necesariamente de que sea la mejor forma. Por otro lado, se debe tener cuidado en elegir las condiciones de frontera adecuadas del reactor para no hacer cálculos erróneos. La literatura sobre este campo resulta muy extensa y no muy clara en relación a las suposiciones establecidas.

4.3. Técnica de trazadores para una clase de reactores

Teniendo definidos los conceptos necesarios para identificar el grado de dispersión existente dentro de un reactor de gasificación, se toma el modelo de estudio (2.29) para realizar un primer análisis mediante simulación. El primer paso a realizar es determinar las condiciones de frontera para un reactor de gasificación de lecho empacado y con esto, elegir las ecuaciones que se adaptan al mismo. En general, el procedimiento que se llevó a cabo para este primer experimento es el siguiente:

- Llevar al reactor de gasificación a un estado estacionario (punto de encendido).
- Suministrar un pulso en un tiempo t_0 de aire caliente a flujo constante a distintas temperaturas ΔT y de distinta duración.
- Observar y tomar lectura a la salida del reactor de la curva generada por el pulso.
- Tomar el tiempo medio y la varianza (\bar{t} , σ^2).
- Calcular los tiempos de residencia del rastreador.
- De acuerdo a la condición de frontera que se ajusta a nuestro modelo se elige la ecuación correspondiente, posteriormente se encuentra la solución para el coeficiente de dispersión.
- Comparar el D/uL obtenido mediante simulación con respecto al usado teóricamente

Como se ha mencionado el objetivo es encontrar una metodología que nos permita estimar el número de Peclet presente en un reactor de gasificación con la mínima incertidumbre posible. Como una primera aproximación y haciendo uso de la estructura del modelo (2.29) de estudio, se puede aprovechar el conocimiento que se tiene sobre los parámetros que influyen en la determinación de la dispersión existente a lo largo del reactor, es decir, tenemos el conocimiento de qué número de Peclet se está utilizando para realizar el análisis transitorio del modelo (2.29). En consecuencia lo que se tiene que verificar es que, una vez estando el sistema en un punto estacionario e introducirle

un pulso de aire caliente (incremento de temperatura), medir la curva de trazador generada y obtener su media y varianza que como hemos visto en los apartados anteriores son suficientes para poder determinar la dispersión dentro del recipiente; una vez obtenidas estas lecturas es posible generar las curvas de tiempo de residencias y comparar los resultados obtenidos mediante estas gráficas con los datos teóricos, los cuáles se utilizan en el modelo (2.29).

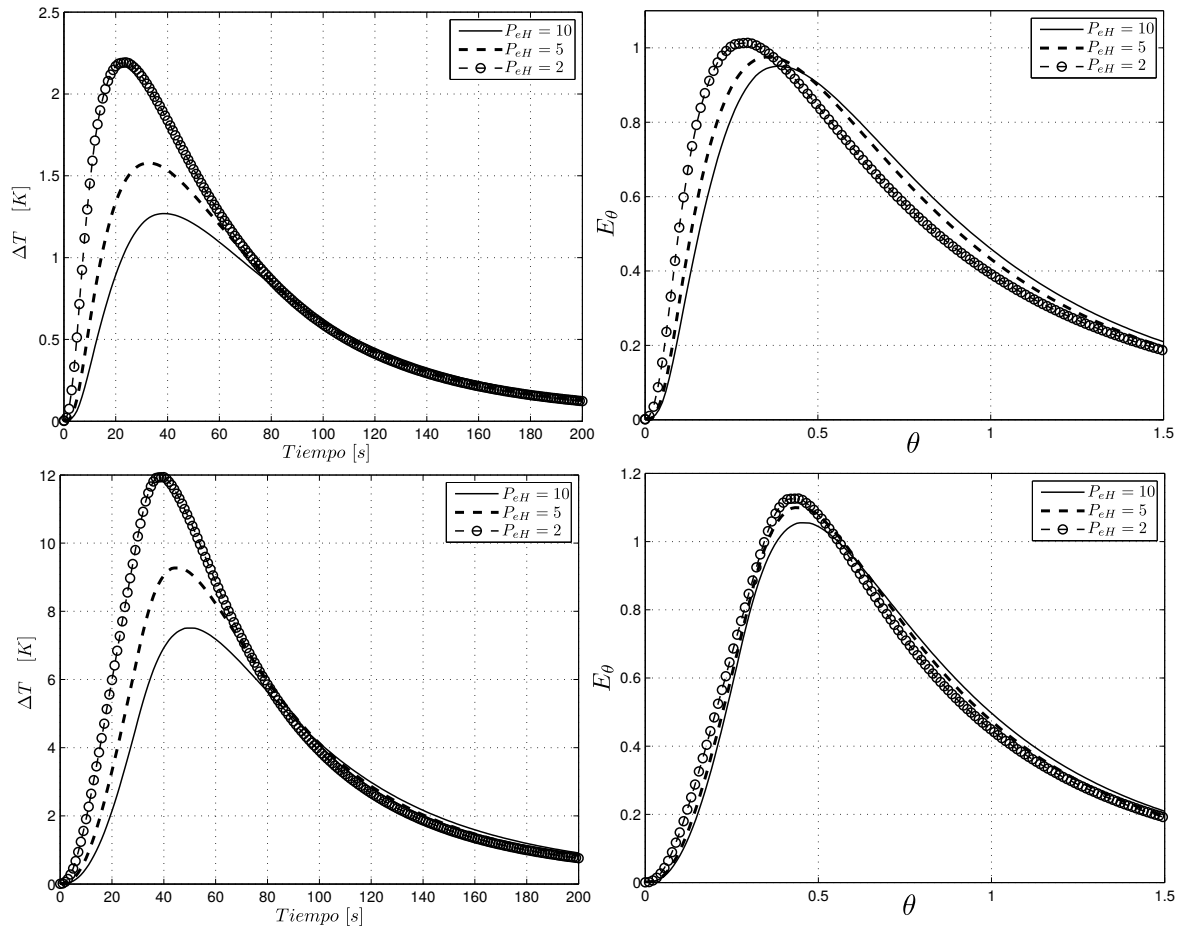


Figura 4.7: Curvas de los tiempos de residencia obtenidas para tres distintos números de Peclet para un pulso de entrada $\Delta T_e = 300 [K]$ y con una duración de $\Delta t = 5 [seg]$ (arriba) y un $\Delta t = 30 [seg]$ (abajo).

En la figura 4.7 se observan los resultados obtenidos de un primer análisis de las curvas de tiempos de residencia. El análisis se realizó para tres distintos números de Peclet (2, 5, 10) para los cuales, una vez teniendo el sistema en el punto de operación deseado (punto de equilibrio de encendido), se le introdujo un $\Delta T_e = 300 [K]$ en un tiempo t_0 , a la izquierda de la figura (superior e inferior) se muestra el ΔT generado por el pulso de excitación al sistema, es decir

$$\Delta T = \Delta T_s - \Delta T_{pe},$$

donde ΔT_s es la temperatura registrada a la salida del reactor después de introducir el pulso rastreador, mientras que ΔT_{pe} es la temperatura alcanzada durante el punto estacionario de encendido. Con el fin de observar el comportamiento de estas distintas curvas se varió el tiempo de duración de cada pulso, en la parte superior de la figura 4.7 se tiene el caso de un pulso de duración $\Delta t = 5 [seg]$ y en la parte inferior se encuentra el registro para un pulso de duración $\Delta t = 30 [seg]$.

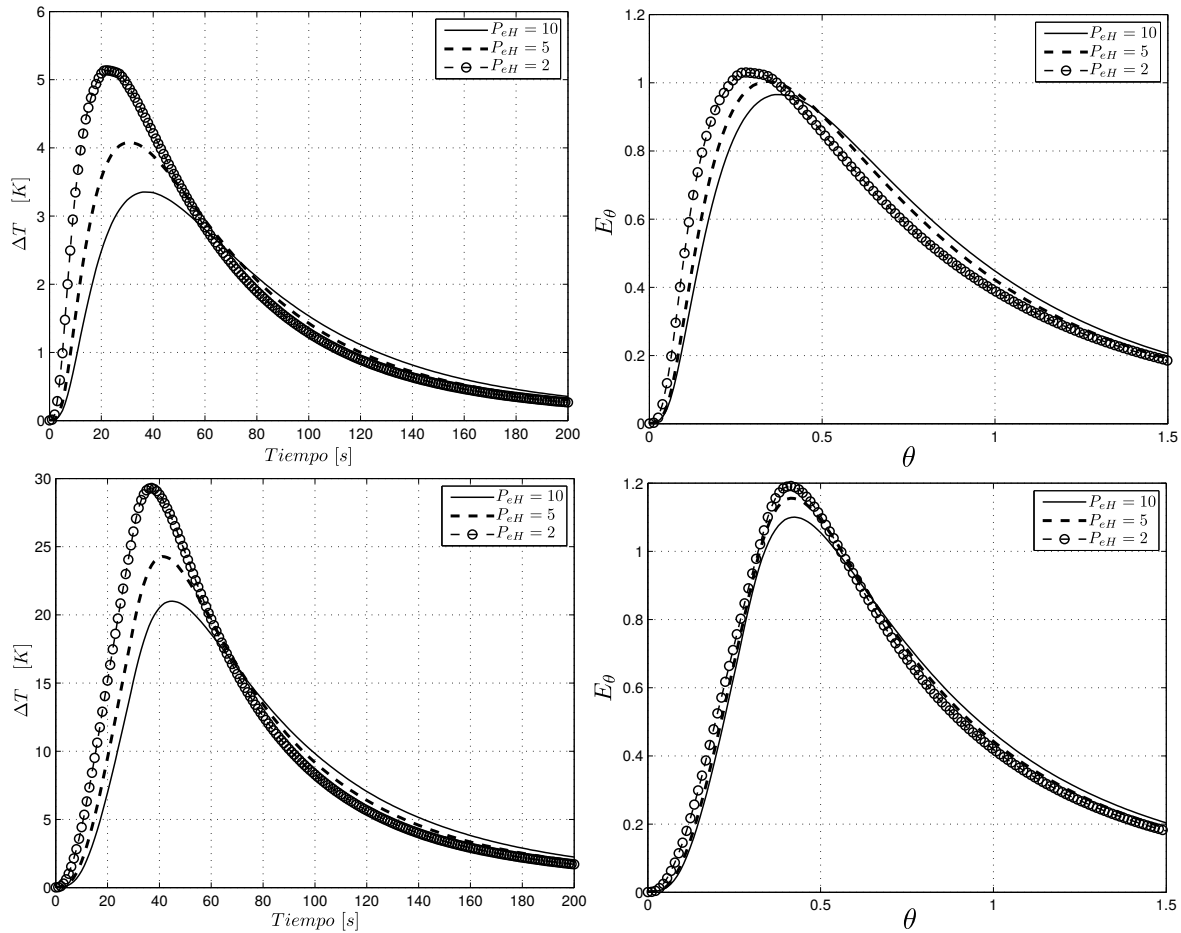


Figura 4.8: Curvas de los tiempos de residencia obtenidas para tres distintos números de Peclet para un pulso de entrada $\Delta T_e = 700 [K]$ y con una duración de $\Delta t = 5 [seg]$ (arriba) y un $\Delta t = 30 [seg]$ (abajo).

Para la figura 4.8 el análisis es similar, con la única diferencia de que el pulso de entrada del rastreador es $\Delta T_e = 700 [K]$, de igual forma se presenta el caso con una duración del pulso de $\Delta t = 5 [seg]$ (arriba) y de $\Delta t = 30 [seg]$ (abajo).

Observando detenidamente las figuras 4.7 y 4.8 se puede comprobar que las curvas son asimétricas tal como se esperaba y que su forma no presenta un gran cambio entre distintos números de Peclet, lo que también ocurre si se incrementa la temperatura de dicho pulso. Por otra parte, los cambios de duración en los pulsos rastreadores si representan un cambio significativo en estas curvas tanto en la amplitud registrada ΔT , como en la forma de las curvas E_θ generadas; esto tiene sentido ya que la propuesta inicial es introducir un impulso ideal, lo cual no es posible y mientras más tiempo se prolongue el pulso más se altera este principio.

Una vez obtenidas las gráficas E_θ , la media \bar{t} y la varianza σ , se procede a calcular el número de Peclet P_{eH} experimental y compararlo con el utilizado teóricamente, finalmente se calcula el error de estimación del mismo.

Del primer análisis del comportamiento de las curvas de trazador y de los errores de estimación del número de Peclet se encontró, entonces, que el tiempo de duración del pulso si repercute en el resultado. Otro aspecto que influye es el tiempo de lectura que se toma a la salida después de introducir el pulso. Al ser un proceso lento, el tiempo que toma la salida a regresar a su estado estacionario original es muy largo. Este tiempo afecta a la media y a la varianza y por ende,

también la estimación de la dispersión existente en el reactor.

Por consiguiente, en un segundo análisis se modificaron tres variables y se observaron los resultados para tres distintos números de Peclet. Una primera variable fue la temperatura del pulso de entrada que se varió para cuatro distintos valores: 300, 700, 1100 y 1500 [K]; con la variación de la temperatura se comprobó lo que ya se había observado en las figuras 4.7 y 4.8, esto es, que el resultado de las curvas de trazador se modificaba considerablemente. La segunda variable fue el intervalo de duración del pulso de entrada, el cual se fue variando desde 5 hasta 150 [seg]; se corroboró que la duración de este pulso sí afecta la estimación del número de P_{eH} . Una última variable que se decidió variar está relacionada con el área de la curva que se toma de la lectura a la salida del reactor, esto es, se optó por despreciar las últimas regiones de las curvas de salida. Esta decisión se tomó tras observar que la temperatura después de un cierto tiempo no llega a ser cero pero sí es una temperatura mínima y al incrementarse el tiempo de observación se modifica la media de la curva y por ende el cálculo de estimación de la dispersión.

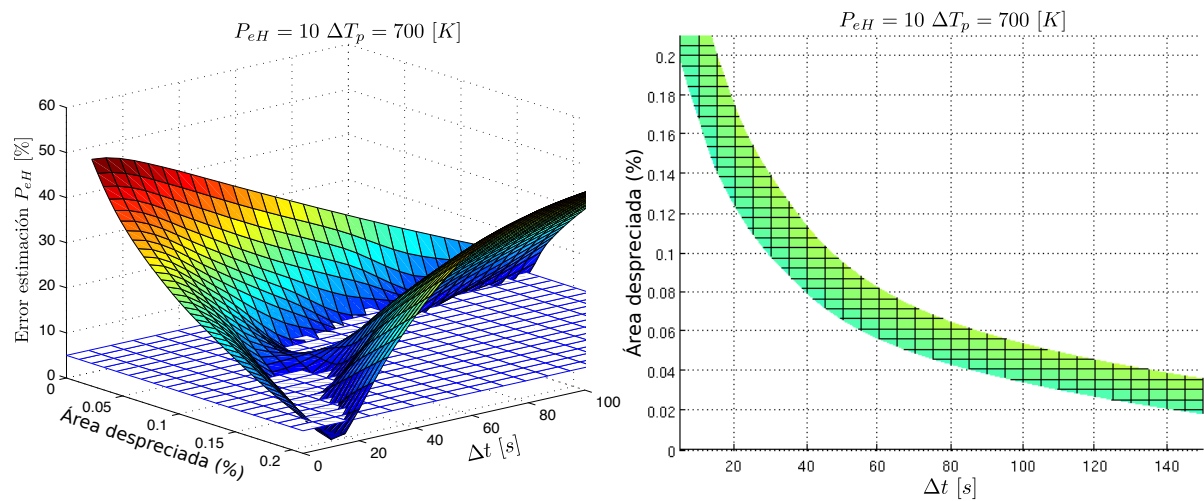


Figura 4.9: Curvas de error de estimación para un $P_{eH} = 10$. Región con error de estimación menor al 5% (derecha).

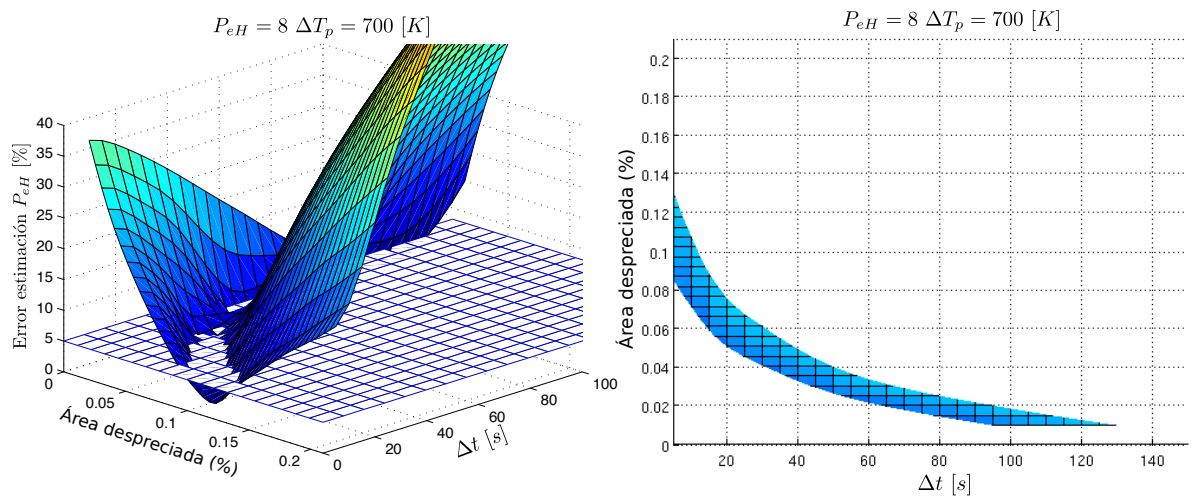


Figura 4.10: Curvas de error de estimación para un $P_{eH} = 8$. Región con error de estimación menor al 5% (derecha).

Se realizó un largo almacenamiento de datos con la finalidad de poder contar con datos suficientes para representar los resultados obtenidos en algunas gráficas que permitieran mostrar las hipótesis mencionadas anteriormente. Para la estimación de la dispersión, se mide la media y la varianza, posteriormente se utiliza la ecuación (4.14) para encontrar el número de Peclet y compararlo con el valor teórico. Estos primeros resultados se presentan en las figuras 4.9 y 4.10, donde se presenta el error de estimación para un $P_{eH} = 10$ y un $\Delta T_e = 700$ [K] (lado izquierdo figura 4.9) y de igual forma el caso del error de estimación para un $P_{eH} = 8$ y un $\Delta T_e = 700$ [K] (lado izquierdo figura 4.10). En ambas gráficas se observan algunos valles los cuales corresponden a la región de estimación del error menor al 5%, del lado derecho de ambas figuras se puede apreciar con mayor claridad estas regiones de estimación. Estas regiones indican las combinaciones plausibles de longitudes de pulsos y área despreciada que producen una correcta estimación del número de Peclet.

4.4. Análisis mediante métricas de forma

Tras seguir una metodología similar a lo que expone Levenspiel (2011) y tal como se puede observar en la sección anterior, los resultados no resultan concluyentes para poder determinar el grado de dispersión dentro de un reactor al menos para nuestro modelo de estudio (2.29) y esto se debe principalmente a que la curva obtenida tiene una forma parabólica además de que influyen distintas variables. El mencionar que los resultados anteriores no son concluyentes no quiere decir que el método no sirva, simplemente hay que ajustarlo aún más.

Como se ha visto anteriormente, debido al grado de dispersión esperado, las curvas de trazador mantienen una estructura asimétrica y es justamente esta propiedad, la que se propone explotar en esta sección para refinar aún más los resultados. Para este análisis es bueno mencionar algunas medidas de estadística inferencial y recordar algunas otras básicas mencionadas anteriormente.

El valor medio de una variable localiza el centro de una distribución en el siguiente sentido: si se considera el eje de las x como una barra de densidad variable y se supone que la densidad en cualquier punto viene dada por $f(x)$, puede verse mediante cálculos elementales que el valor $x = \mu_1$ es el centro de gravedad de la barra, por lo tanto, la media se considera como un valor central de la variable. Por esta razón se dice que la media es un parámetro de posición, ya que indica dónde está situado el centro de la distribución (en el sentido de centro de gravedad) sobre el eje de las x .

Varianza

La varianza de una distribución o el segundo momento con respecto a la media $\mu_2 = \sigma^2$, es una medida de su dispersión o esparcimiento. Si la mayor parte del área limitada por la curva está próxima a la media, la varianza será pequeña; mientras que si el área se extiende sobre un recorrido considerable, la varianza será grande. La raíz cuadrada positiva de la varianza σ , recibe el nombre de desviación estándar o desviación típica.

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2, \quad (4.16)$$

donde N es el total de elementos en la distribución, x_i es el i -ésimo elemento y \bar{x} es la media.

Oblicuidad

El tercer momento μ_3 respecto a la media se denomina a veces medida de asimetría o deformación. El objetivo de la medida de asimetría es, sin necesidad de dibujar la distribución de frecuencias, estudiar la deformación horizontal de los valores de la variable respecto al valor central de la media. Dependiendo del valor de la oblicuidad se sabe que:

- Si $obl < 0$, la mayoría de los datos se encuentran a la izquierda de la media.
- Si $obl > 0$, entonces la mayoría de los datos se encuentran a la derecha de la media.
- Si $obl = 0$, la muestra corresponde a una distribución normal con una simetría perfecta.

$$Oblic = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i - \bar{x}}{\sigma} \right)^3 = \frac{\mu_3}{\sigma^3}, \quad (4.17)$$

donde σ es la desviación estándar.

Curtosidad

El concepto de curtosis o apuntamiento de Fischer pretende comparar la curva de una distribución con la curva de la variable normal en función de la cantidad de valores extremos de la distribución. Basándose en el dato de que una distribución normal cumple con

$$\frac{\mu_4}{\sigma^4} = 3, \quad (4.18)$$

el coeficiente de curtosis se puede definir de la forma

$$k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i - \bar{x}}{\sigma} \right)^4 = \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3, \quad (4.19)$$

donde se ha sustraído la curtosis de la distribución normal para que el coeficiente tenga un valor de cero para una distribución normal y sirva como referencia de apuntamiento.

Coefficiente de variación

Es la relación entre la desviación estándar y su media

$$coefv = \frac{\sigma}{\mu}. \quad (4.20)$$

Estas medidas de forma pretenden estudiar la concentración de la variable hacia uno de sus extremos; el conjunto de todos los momentos determina la distribución en general. Con estas métricas de forma y el análisis realizado en la sección anterior es posible obtener nuevas conclusiones sobre la dispersión existente en el interior del reactor. Además, se incluye el comportamiento de la estimación de la dispersión ante variación de algunos parámetros. Esta decisión se toma bajo el razonamiento de que al realizar las pruebas experimentales, no se conoce con certeza los coeficientes de algunos parámetros. Entonces, es necesario realizar el análisis de la estimación del Peclet ante la presencia de perturbaciones en los parámetros que más repercutan al mismo. Basados en los parámetros elegidos en el estudio de Canales (2013), se toman tres de ellos: la energía de activación de la pirólisis E_{p1} , el diámetro inicial de la partícula d_{p0} , y la entalpía de reacción del carbonizado ΔH_{c5} . Los parámetros mencionados anteriormente, se eligen debido a que son los que principalmente pueden provocar una estimación errónea del número de Peclet. En consecuencia,

se decide perturbar dichos coeficientes dentro de un rango considerable y observar como afecta los resultados obtenidos.

En la gráfica 4.11 se presentan las métricas de forma obtenidas tanto sin perturbación como con un cierto porcentaje de perturbación para cada parámetro, a la izquierda se observan las gráficas de la perturbación correspondientes a la E_{p1} y d_{p0} ; en este caso la estimación tiene una banda de incertidumbre relativamente pequeña. Sin embargo, para cuando se perturba la ΔH_{c5} (lado derecho, figura 4.11) la banda de incertidumbre crece demasiado lo cual habla de una mala estimación de la dispersión del reactor. El estudio está realizado para un rango del número de Peclet de 2 – 10 con un pulso de entrada $T_e = 700$ [K] y una duración de 30 [seg].

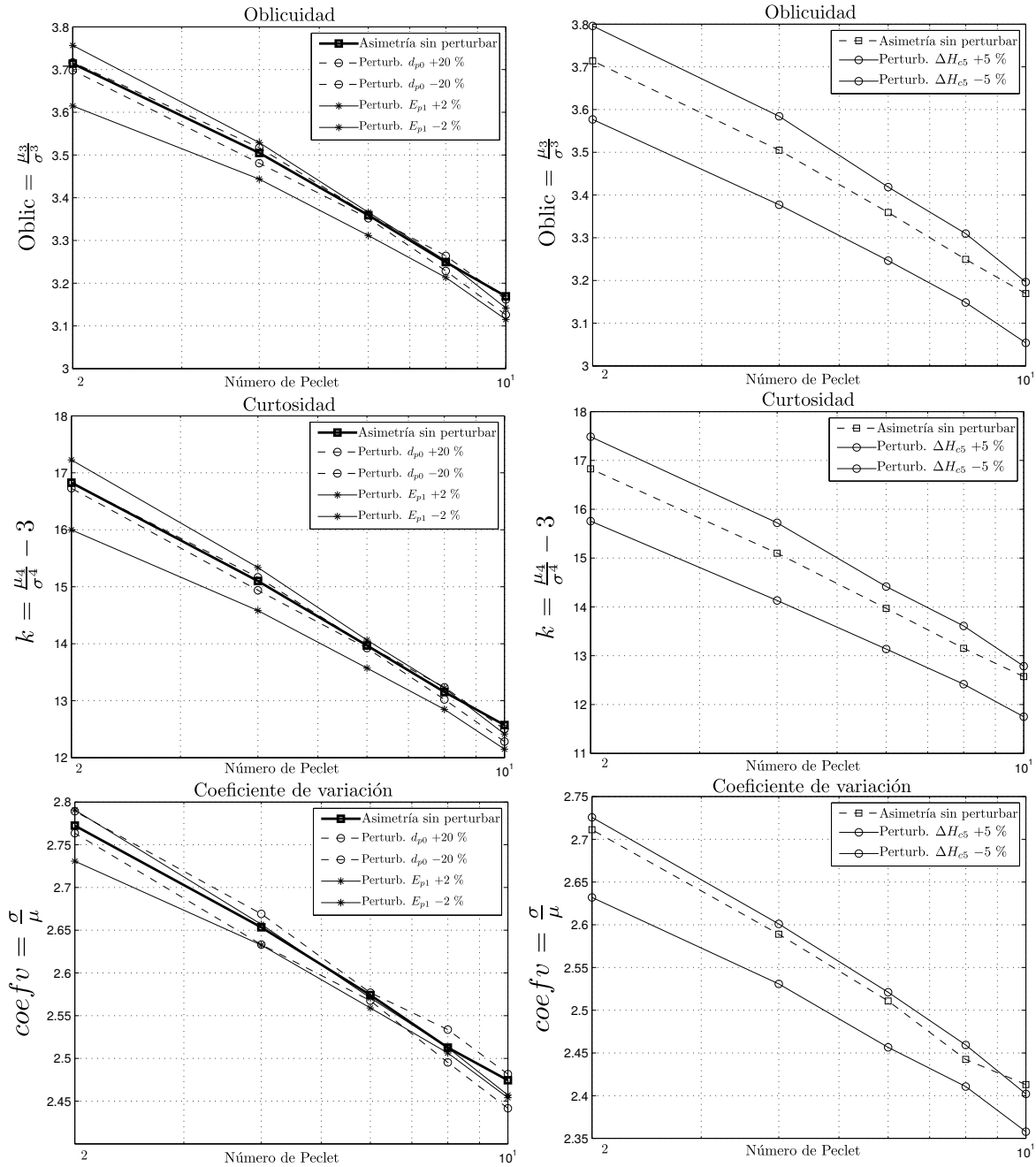


Figura 4.11: Métricas de forma para diversos números de Peclet ante la presencia de perturbaciones en algunos parámetros con un pulso de entrada de $T_e = 700$ [K].

Como consecuencia de los resultados de la figura 4.11, se decide analizar más a detalle el caso del parámetro de la entalpía de reacción del carbonizado. Para esto se realizan nuevas pruebas variando la temperatura de entrada del pulso de trazador y observar si existe un cambio en la banda de incertidumbre de estimación, los resultados se pueden ver en la figura 4.12 donde efectivamente, se comprueba que al aumentar la temperatura de entrada del pulso T_e la banda de incertidumbre disminuye, la duración del pulso en ambos casos es de 30 [seg].

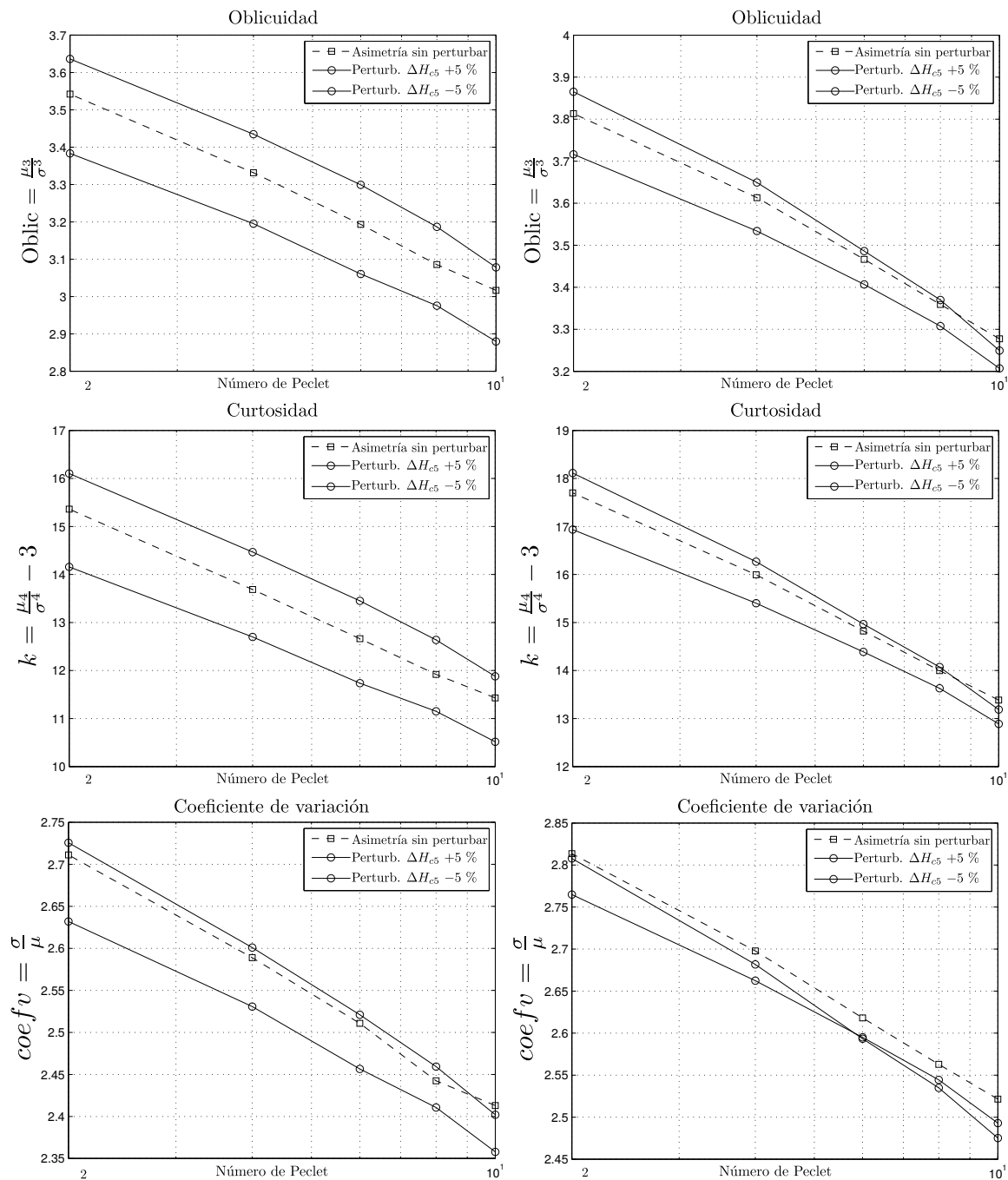


Figura 4.12: Métricas de forma para diversos números de Peclet con un $T_e = 300$ [K] (derecha) y un $T_e = 1100$ [K] (izquierda) con perturbación en la entalpía de reacción del carbonizado.

De las gráficas correspondientes a las figuras 4.11 y 4.12, se puede ver que la métrica que

contiene la banda de incertidumbre más pequeña es la del coeficiente de variación, $coefv = \frac{\sigma}{\mu}$. Otra forma de observar estos resultados se muestra en las figuras 4.13, 4.14 y 4.15, donde se graficaron las métricas para el número de Peclet estimado contra el real, así para el caso ideal (en ausencia de perturbación) se observa claramente una línea con pendiente $m = 1$ y ordenada en el origen (recta en color negro); mientras que, en color azul se pueden observar las rectas resultantes de perturbar el parámetro del diámetro de la partícula y en color rojo se tienen las rectas generadas tras perturbar el parámetro de la energía de activación de la pirólisis.

En estas gráficas se decide omitir las rectas resultantes de la perturbación de la entalpía de reacción del carbonizado ya que como se puede observar en la figura 4.12 y más aún en la gráfica del error medio cuadrático (figura 4.16), la banda de incertidumbre es mayor en comparación con la de los otros parámetros.

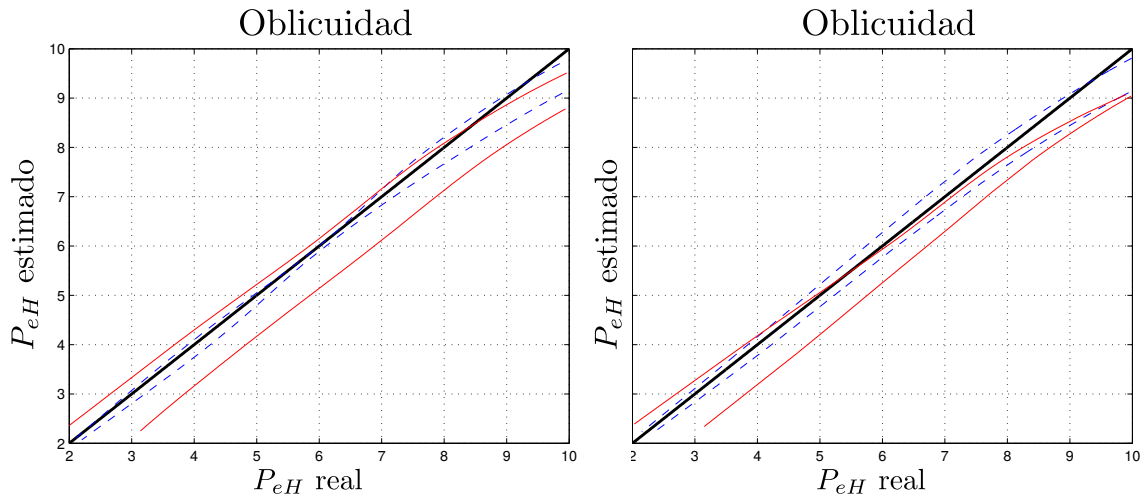


Figura 4.13: Oblicuidad para número de Peclet estimado contra el real para una temperatura de $T_e = 700 [K]$ (izquierda) y un pulso $T_e = 1100 [K]$ (derecha).

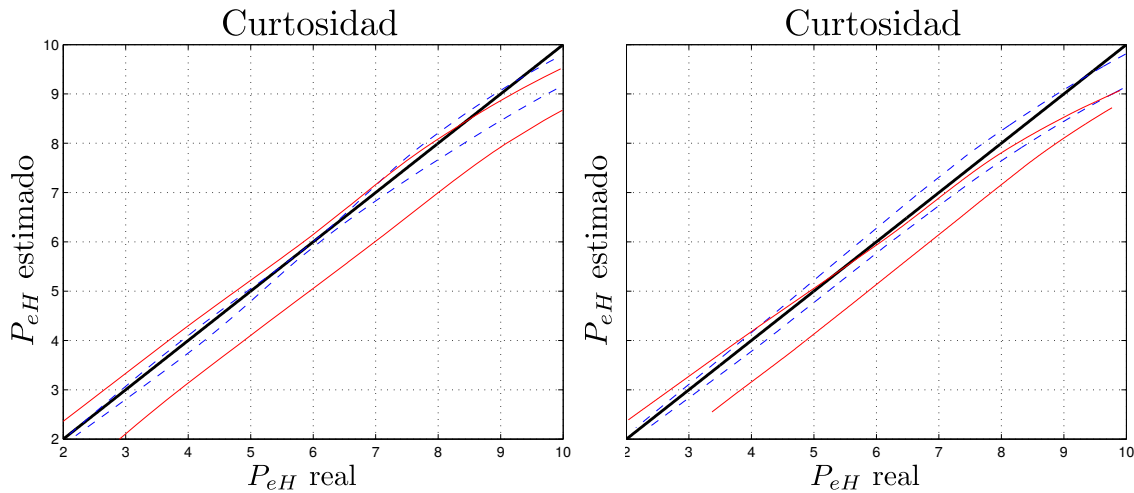


Figura 4.14: Curtosidad para el número de Peclet estimado contra el real para una temperatura de $T_e = 700 [K]$ (izquierda) y un pulso $T_e = 1100 [K]$ (derecha).

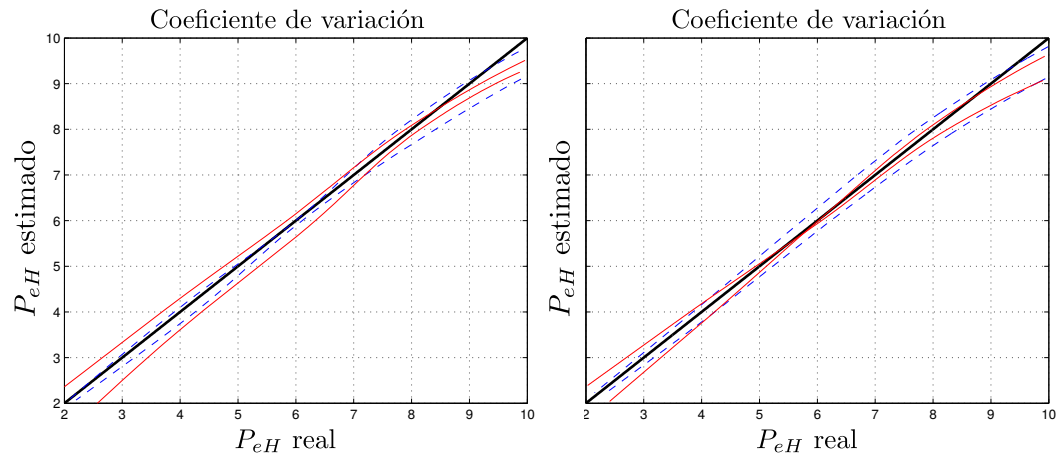


Figura 4.15: Coeficiente de variación para el número de Peclet estimado contra el real para una temperatura de $T_e = 700$ [K] (izquierda) y un pulso $T_e = 1100$ [K] (derecha).

Nuevamente, de las figuras anteriores (4.13, 4.14 y 4.15) se tiene que la métrica que nos ayuda a mantener una banda de incertidumbre mínima es el coeficiente de variación por lo cual, para tener una idea de que tan plausible es la estimación del número de Peclet, es conveniente representar estos resultados en una gráfica del error en función del número de Peclet. Para esto, se toma como curva *idealizada* aquella que no está sujeta a alguna perturbación, dejando a las curvas restantes como unas aproximaciones de la curva ideal. Posteriormente se calcula el error medio cuadrático entre cada curva de aproximación y la curva sin perturbar.

En la figura 4.16 se pueden observar estos errores para cada una de las tres perturbaciones, a la izquierda se tiene el error para un pulso de excitación de $T_e = 700$ [K] donde se observa que los parámetros d_{p0} y E_{p1} mantienen un error por debajo del 3 %, mientras que para la entalpía de reacción del carbonizado ΔH_{c5} , el error se presenta en un intervalo de 35 – 40 %. Por otro lado cuando el pulso de entrada se aumenta a una temperatura de $T_e = 1100$ [K] el intervalo de error para ΔH_{c5} baja considerablemente hasta 9 – 12 % en promedio. Sin embargo, a pesar de aumentar la temperatura del pulso de excitación no es posible disminuir el error de estimación más allá del 10 % para algunas regiones del número de pecllet, lo cual nos dice que para poder mejorar estos resultados sería de gran importancia tener un conocimiento previo de la entalpía de reacción del carbonizado.

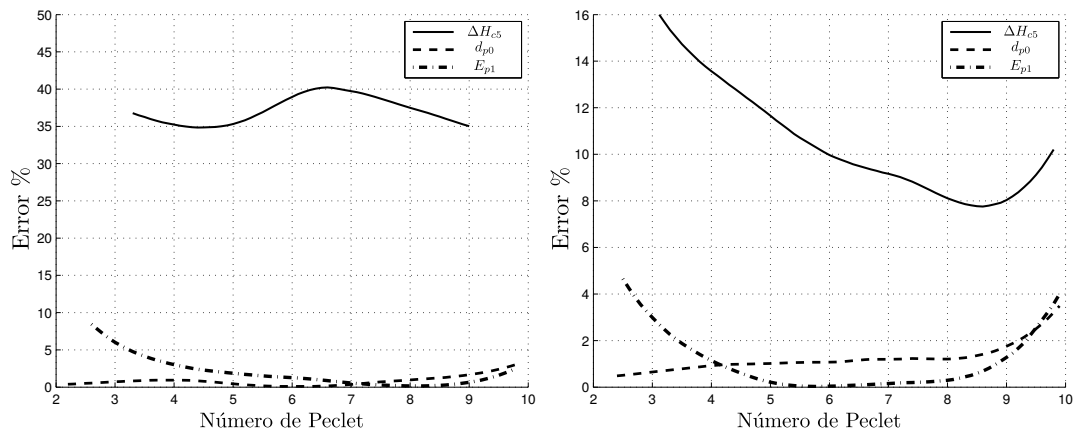


Figura 4.16: Gráficas de Error cuadrático medio correspondiente a la métrica del coeficiente de variación para un pulso $T_e = 700$ [K] (izquierda) y un pulso $T_e = 1100$ [K] (derecha).

Capítulo 5

Análisis de resultados

5.1. Conclusiones

Mediante un análisis de bifurcaciones de un modelo dinámico para reactores de gasificación, se encontraron los distintos estados estacionarios existentes para una diversidad de números de Peclet y un número distinto de tanques interconectados, además se verificó que siempre se llega al mismo número de puntos estacionarios estructuralmente estables. En consecuencia, se comprobó que es posible reconstruir la dinámica del reactor de gasificación con un mínimo de tanques interconectados y lo más importante, que el número de tanques suficientes para lograrlo está ligado con el grado de dispersión existente dentro del reactor.

Con la finalidad de realizar pruebas experimentales para la validación y caracterización de una planta piloto de un reactor de gasificación de biomasa, se diseñó una metodología experimental no destructiva basada en la técnica de trazadores descrita en Levenspiel (2011). Este método bajo ciertas condiciones expuestas en el capítulo cuatro arrojó como primeros resultados una estimación admisible sobre el número de Peclet, sin embargo, ante incertidumbre paramétrica no es posible asegurar el buen funcionamiento del mismo.

Posteriormente y, aprovechando la constante aparición de las curvas asimétricas debidas al grado de dispersión esperado para este tipo de reactores al inyectar la curva de trazador, se diseñó una segunda metodología basada en métricas estadísticas de forma que, en conjunto, son capaces de identificar el grado de dispersión presente para una clase de reactores. Dicha metodología fue probada ante incertidumbre paramétrica y se demostró mediante simulación que el número de Peclet es robustamente identificable con un error medio cuadrático del 3% a excepción de la entalpía de reacción del carbonizado.

Se observó que el parámetro de la entalpía de reacción del carbonizado, ΔH_{c5} , es el que influye más en la buena estimación de la dispersión dentro del reactor, lo cual resulta ser una limitación para poder obtener resultados más robustos ante incertidumbre paramétrica y reducir el error de la estimación del número de Peclet.

Por otra parte, teniendo una estimación plausible del grado de dispersión, es posible plantearse un número de tanques a interconectar que sea capaz de reconstruir la dinámica del reactor de gasificación y entonces, comenzar a utilizar técnicas clásicas de control con el modelo reducido resultante. Finalmente, en la siguiente sección se plantean una serie de problemas abiertos y tareas a futuro relacionadas con este trabajo.

5.2. Trabajo futuro

Basados en el modelo dinámico en parámetros concentrados de orden reducido para gasificadores desarrollado por Badillo (2014) y Canales (2013), el trabajo desarrollado en esta tesis representa una adaptación entre el modelo teórico y las cuestiones prácticas que se pudiesen presentar ante diversos eventos. El contenido de este trabajo es una primera etapa para obtener la validación experimental del modelo de estudio con respecto a una planta piloto. Para esto, se diseñó una metodología que en su segunda etapa, requiere de un planteamiento de cómo adecuar la planta piloto de gasificación para poder desarrollar las pruebas experimentales. Por lo anterior, se sugieren a continuación un conjunto de posibles acciones que pudieran mejorar la robustez del modelo de estudio:

- Con el fin de reducir la banda de incertidumbre de la estimación del número de Peclet, tiene sentido plantear alguna alternativa de cómo conocer un aproximado de la entalpía de reacción del carbonizado ya sea en ó fuera de línea.
- Como se observó al final del capítulo cuatro, una posible elección para disminuir el efecto de la incertidumbre de la entalpía de reacción del carbonizado, es aumentar la temperatura del pulso de excitación a la entrada del reactor, lo cual nos lleva al planteamiento de qué tanta temperatura es posible inyectar al reactor sin que este sufra efectos no deseados.
- Con fundamento en que para determinar el grado de dispersión, se observa el comportamiento de la curva de salida ante la presencia de una excitación (tiempos de residencia), una posible interrogante es observar que sucede durante la transición del punto de operación (encendido) al punto de extinción (apagado), esto claramente cuando se decide apagar el proceso del reactor, es decir, observar si durante la transición de apagado del proceso, se puede recuperar información del grado de dispersión del sistema.
- Una vez determinado el grado de dispersión, se puede utilizar el conocimiento adquirido para ajustar el modelo de estudio y entonces contar con un modelo de bajo orden suficiente para representar la dinámica global del sistema y así proponer algunas metodologías para monitoreo y control del proceso.

Con todo lo anterior, se obtendría un modelo dinámico en parámetros concentrados de bajo orden confiable capaz de reconstruir la dinámica de un gasificador de biomasa de lecho fijo y así poder analizar de forma experimental dichos gasificadores.

Apéndice A

Operadores de transporte

Los operadores de transporte del sistema (2.18) de EDPs son:

$$\tau_g^C\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (v_g(\mathbf{c}, \eta)\mathbf{x}), \quad (\text{A.1a})$$

$$\tau_g^D\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := \partial_z (D_M(\mathbf{c}, \eta)\partial_z\mathbf{x}), \quad (\text{A.1b})$$

$$\tau_s^C\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (v_s(\mathbf{c}, \eta)\mathbf{x}), \quad (\text{A.1c})$$

$$\tau_{H_s}^C\{\eta_s\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (v_s(\mathbf{c}, \eta)\eta_s), \quad (\text{A.1d})$$

$$\tau_{H_g}^C\{\eta_g\}(\mathbf{c}, \eta) := \frac{1}{c_g c_p^g} [-\partial_z (v_g(\mathbf{c}, \eta)c_g c_p^g(\eta_g - \eta_0)) + \partial_z [v_g(\mathbf{c}, \eta)c_g c_p^g] (\eta_g - \eta_0)], \quad (\text{A.1e})$$

$$\tau_{H_g}^D\{\eta_g\}(\mathbf{c}, \eta) := \frac{1}{c_g c_p^g} \partial_z (c_g c_p^g D_{H_g}(\mathbf{c}, \eta)\partial_z\eta_g), \quad (\text{A.1f})$$

$$\tau_{H_s}^C\{\eta_s\}(\mathbf{c}, \eta) := \frac{1}{c_s c_p^s} [-\partial_z (v_s(\mathbf{c}, \eta)c_s c_p^s(\eta_s - \eta_0)) + \partial_z [v_s(\mathbf{c}, \eta)c_s c_p^s] (\eta_s - \eta_0)], \quad (\text{A.1g})$$

$$\tau_{H_s}^D\{\eta_s\}(\mathbf{c}, \eta) := \frac{1}{c_s c_p^s} \partial_z (c_s c_p^s D_{H_s}(\mathbf{c}, \eta)\partial_z\eta_s), \quad (\text{A.1h})$$

mientras que los operadores de frontera espacial están dados por las siguientes expresiones:

$$\beta_g\{\mathbf{x}\} := \frac{D_M}{P_{e_M}} \partial_z \mathbf{x} - v_g [\mathbf{x} - \mathbf{x}_e], \quad (\text{A.2a})$$

$$\beta_s\{\mathbf{x}\} := \mathbf{x} - \mathbf{x}_e, \quad (\text{A.2b})$$

$$\beta_{H_g}\{\eta_g\} := \frac{D_H^g}{P_{e_H}^g} \partial_z \eta_g - u_g [\eta_g - \eta_e], \quad (\text{A.2c})$$

$$\beta_{H_s}\{\eta_s\} := \frac{D_H^s}{P_{e_H}^s} \partial_z \eta_s - u_s [\eta_s - \eta_e]. \quad (\text{A.2d})$$

Apéndice B

Sistemas topológicamente equivalentes

Definición B.1. Sean T_1 y T_2 dos espacios métricos, y f un mapeo de T_1 a T_2 ; entonces f es un *homeomorfismo* si se cumple lo siguiente:

- f es una función biyectiva
- f es continua
- su función inversa f^{-1} , es continua

Definición B.2. Se dice que dos sistemas dinámicos $\{T_1, \mathbb{R}^n, \varphi^t\}$ y $\{T_2, \mathbb{R}^n, \psi^t\}$ son *topológicamente equivalentes*, si existe un homeomorfismo $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ que mapea las órbitas del primer sistema a las órbitas del segundo sistema conservando la dirección del tiempo, esto es, que el comportamiento en términos de estabilidad de los puntos de equilibrio de ambos sistemas es el mismo.

Sean los sistemas m -paramétricos

$$\dot{x} = f(x, \alpha), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad \alpha \in \mathbb{R}^m \quad (\text{B.1a})$$

y

$$\dot{y} = g(y, \beta), \quad y \in \mathbb{R}^n, \quad \beta \in \mathbb{R}^m, \quad (\text{B.1b})$$

donde f y g son funciones suaves.

Definición B.3. El sistema dinámico (B.1a) es *localmente equivalentemente topológicamente* cerca de un punto de equilibrio x_0 al sistema dinámico (B.1b) cerca de un punto de equilibrio y_0 si,

- Existe un homeomorfismo en el espacio de parámetros $p(\alpha) : W_0 \subset \mathbb{R}^m \rightarrow p(W_0) \subset \mathbb{R}^m$, definido en una vecindad pequeña W_0 de $\alpha = 0$, $p(0) = 0$;
- Existe un homeomorfismo (que depende de los parámetros) definido en una vecindad pequeña U_α de $x = 0$, $h_0(0) = 0$, que envía órbitas del sistema (B.1a) restringido a U_α en órbitas del sistema (B.1b) restringido a $h_\alpha(U_\alpha)$, preservando la dirección del tiempo.

Bibliografía

- Amundson, Neal R y Arri, Luis Ernesto (1978). Char gasification in a countercurrent reactor. *AIChE Journal*, **24**(1), pp. 87–101.
- Anaya, J. M. García (2014). *Estudio de la dinámica de un reactor tubular para producir gas de síntesis a partir de material orgánico*. Tesis de maestría, Facultad de Química UNAM.
- Aris, Rutherford (1965). *Introduction to the analysis of chemical reactors*. Prentice-Hall.
- Aris, Rutherford y Amundson, Neal R (1958a). An analysis of chemical reactor stability and control—I: The possibility of local control, with perfect or imperfect control mechanisms. *Chemical Engineering Science*, **7**(3), pp. 121–131.
- Aris, Rutherford y Amundson, Neal R (1958b). An analysis of chemical reactor stability and control—II: The evolution of proportional control. *Chemical Engineering Science*, **7**(3), pp. 132–147.
- Badillo, Ulises. (2009). *Modelado orientado al control de gasificadores*. Tesis de maestría, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.
- Badillo, Ulises (2014). *Modelado, Observación y Control de Reactores de Gasificación*. Tesis doctoral, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.
- Badillo-Hernandez, Ulises; Alvarez-Icaza, Luis y Alvarez, Jesus (2013). Model design of a class of moving-bed tubular gasification reactors. *Chemical Engineering Science*, **101**, pp. 674–685.
- Baldea, Michael y Daoutidis, Prodromos (2007). Dynamics and control of autothermal reactors for the production of hydrogen. *Chemical engineering science*, **62**(12), pp. 3218–3230.
- Barrio, M; Hustad, JE y Fossum, M (2001). A Small-Scale Stratified Downdraft Gasifier Coupled to a Gas Engine for Combined Heat and Power Production. *Progress in thermochemical biomass conversion*, pp. 426–440.
- Basu, P (1999). Combustion of coal in circulating fluidized-bed boilers: a review. *Chemical Engineering Science*, **54**(22), pp. 5547–5557.
- Basu, Prabir (2006). *Combustion and gasification in fluidized beds*. CRC press.
- Canales, L. (2013). *Reducción de orden en modelos para reactores de gasificación*. Tesis de maestría, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.
- Caram, Hugo S y Fuentes, Carmelo (1982). Simplified model for a countercurrent char gasifier. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **21**(4), pp. 464–472.
- Coste, Joseph; Rudd, Dale y Amundson, Neal R (1961). Taylor diffusion in tubular reactors. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **39**(4), pp. 149–151.
- Dasappa, S; Subbukrishna, DN; Suresh, KC; Paul, PJ y Prabhu, GS (2011). Operational experience on a grid connected 100kWe biomass gasification power plant in Karnataka, India. *Energy for Sustainable Development*, **15**(3), pp. 231–239.

- Deans, HA y Lapidus, Leon (1960a). A computational model for predicting and correlating the behavior of fixed-bed reactors: I. Derivation of model for nonreactive systems. *AIChE Journal*, **6(4)**, pp. 656–663.
- Deans, HA y Lapidus, Leon (1960b). A computational model for predicting and correlating the behavior of fixed-bed reactors: II. Extension to chemically reactive systems. *AIChE Journal*, **6(4)**, pp. 663–668.
- Deckwer, Wolf-Dieter (1974). The backflow cell model—applied to non-isothermal reactors. *The Chemical Engineering Journal*, **8(2)**, pp. 135–144.
- Di Blasi, Colomba (1996). Heat, momentum and mass transport through a shrinking biomass particle exposed to thermal radiation. *Chemical Engineering Science*, **51(7)**, pp. 1121–1132.
- Di Blasi, Colomba (1998). Multi-phase moisture transfer in the high-temperature drying of wood particles. *Chemical Engineering Science*, **53(2)**, pp. 353–366.
- Di Blasi, Colomba (2008). Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis. *Progress in Energy and Combustion Science*, **34(1)**, pp. 47–90.
- Eigenberger, Gerhart (1972). On the dynamic behavior of the catalytic fixed-bed reactor in the region of multiple steady states—I. The influence of heat conduction in two phase models. *Chemical Engineering Science*, **27(11)**, pp. 1909–1915.
- Feinberg, Martin (1977). Mathematical Aspects of Mass Action Kinetics. *Chemical Reactor Theory: A Review*, pp. 1–78.
- Gobel, Benny; Henriksen, Ulrik; Jensen, Torben Kvist; Qvale, Bjorn y Houbak, Niels (2007). The development of a computer model for a fixed bed gasifier and its use for optimization and control. *Bioresource Technology*, **98(10)**, pp. 2043–2052.
- Hartland, S y Mecklenburgh, JC (1966). A comparison of differential and stagewise counter current extraction with backmixing. *Chemical Engineering Science*, **21(12)**, pp. 1209–1229.
- Hla, San Shwe (2004). *A theoretical and experimental study on a stratified downdraft biomass gasifier*. PhD thesis, University of Melbourne.
- Kuznetsov, Yuri A (2013). *Elements of applied bifurcation theory*. volumen 112. Springer Science and Business Media.
- Levenspiel, O. (1962). *Chemical reaction engineering: an introduction to the design of chemical reactors*. John Wiley and Sons.
- Levenspiel, O. (1999). *Chemical Reaction Engineering*. John Wiley and Sons.
- Levenspiel, Octave (2011). *Tracer Technology: Modeling the Flow of Fluids*. volumen 96. Springer Science and Business Media.
- Levenspiel, Octave y Bischoff, K (1964). Patterns of flow in chemical process vessels. *Advances Chemical Engineering. Academic Press*, **4**.
- Levenspiel, Octave y Smith, W.K. (1957). Notes on the diffusion-type model for the longitudinal mixing of fluids in flow. *Chemical Engineering Science*, **6(4–5)**, pp. 227 – 235. ISSN 0009-2509.
- Liu, Shean-lin y Amundson, NR (1962). Stability of adiabatic packed bed reactors. An elementary treatment. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **1(3)**, pp. 200–208.
- Milligan, Jimmy B (1994). *Downdraft gasification of biomass*. Tesis doctoral, Aston University.
- Montgomery, Douglas C y Runger, George C (2010). *Applied statistics and probability for engineers*. John Wiley and Sons.

- Montgomery, Douglas C; Runger, George C y Hubele, Norma F (2009). *Engineering statistics*. John Wiley and Sons.
- Nájera, Israel (2012). *Modelado y control de una clase de reactores tubulares exotérmicos*. Tesis de maestría, Universidad Autónoma Metropolitana.
- Paes, Thijs (2005). *Modeling for control of a biomass gasifier*. Tesis doctoral, Thesis of Eindhoven University of Technology.
- Reed, TBDA; Reed, Thomas B; Das, Agua y Das, A (1988). *Handbook of biomass downdraft gasifier engine systems*. Biomass Energy Foundation.
- Reed, Thomas B y Markson, Mike (1985). Biomass gasification reaction velocities. *Fundamentals of Thermochemical Biomass Conversion, Elsevier*, **951**.
- Sinkule, J; Hlavacek, V; Votruba, J y Tvrđik, I (1974). Modeling of chemical reactors—XXIX mixing-cell model for packed bed reactors. Steady state considerations. Problems of multiplicity. *Chemical Engineering Science*, **29(3)**, pp. 689–696.
- van Heerden, Chem (1958). The character of the stationary state of exothermic processes. *Chemical Engineering Science*, **8(1)**, pp. 133–145.
- Vanderveen, John W; Luss, Dan y Amundson, Neal R (1968). Stability of adiabatic packed bed reactors. Effect of flow variations and coupling between the particles. *AIChE Journal*, **14(4)**, pp. 636–643.
- Varma, Arvind (1980). On the number and stability of steady states of a sequence of continuous-flow stirred tank reactors. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **19(3)**, pp. 316–319.