



Facultad de Ciencias Químicas

Carrera de Ingeniería Química

“Simulación de la gasificación catalítica de biomasa de banano en la producción de hidrógeno; a partir de un reactor de lecho fijo, mediante ANSYS estudiantil”

Trabajo de titulación previo a la
obtención del título de Ingeniera
Química

Autoras:

Jessica Mayli Gaona Cumbicos

CI: 0706116852

Correo electrónico: jessicamayli98@gmail.com

Kelly Dayanna Naula Duchi

CI: 0105823058

Correo electrónico: kenna.nla@gmail.com

Directora:

Lourdes Elizabeth Jara Cobos

CI: 0103146155

Cuenca, Ecuador

22 de noviembre de 2022

Resumen

La gasificación de la biomasa despierta un constante interés en el campo de la energía sostenible, usándola como una alternativa frente a la tecnología de combustión tradicional, sobre todo por la reducción en la emisión de polvo y gases tóxicos. En la gasificación se realiza una conversión termoquímica de material orgánico, biomasa, obteniéndose un producto gaseoso de gran interés conocido como gas de síntesis. El enfoque actual sobre energías sustentables está dirigido a la obtención de bioetanol a partir de compuestos orgánicos que generalmente provienen de residuos; sin embargo, existe un amplio campo de estudio en redirigir el curso del producto sacarificado hasta la gasificación para elevar las eficiencias energéticas, así como el uso de catalizadores para favorecer la velocidad de reacción y obtención del gas de interés.

Por lo tanto, el objetivo de esta investigación fue la simulación de un proceso de gasificación de biomasa de banano y condiciones de operación del sistema durante el proceso. Mediante Ansys estudiantil, se establecieron las condiciones operativas de temperaturas y velocidades del fluido, cuyos valores fueron adoptados en la simulación de la reacción gasificación. De esta manera se obtuvo una temperatura de operación de 604.05 °C dentro del reactor a presión atmosférica, la temperatura del agente gasificante fue de 226.85 °C. Se desarrolló el modelo matemático de la reacción a través de la cinética de reacción tomando como referencia el estudio cinético a base de glucosa mediante el mecanismo Langmuir-Hinshelwood, el mismo que implica la adsorción de los reactivos, reacción superficial catalítica y desorción de los productos de las reacciones dominantes: la reacción del cambio de agua-gas (WGS), las reacción inversa del reformado seco de metano (RDRM) y las reacciones de reformado de metano con vapor (SRM), con las cuales se obtuvo el modelo que describe la evolución del flujo molar con respecto al tiempo y coordenada Z de los principales productos, es decir, hidrógeno (H_2), metano (CH_4), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO_2) y agua (H_2O). Los resultados del flujo molar con respecto al tiempo considerando 25 s de reacción fueron 0.16 mol/s de H_2 , 0.08 mol/s de CO, 0.16 mol/s de CO_2 , 0.12 mol/ de CH_4 y 0.10 mol/s de H_2O . Los resultados respecto a eje longitudinal Z, pese a haber trabajado a una presión de 2 bares, no presentaron variación en cuanto al comportamiento de la curva. También se analizó la relación H_2/CO que presentó un valor de 2.2 para ambos casos.

Palabras clave: Simulación. Biomasa. Gasificación. Glucosa. Temperatura.

Abstract

Biomass gasification technology is of constant interest in the field of sustainable energy, being used as an alternative to traditional combustion technology, especially due to the reduction in the emission of dust and toxic gases. In gasification, thermochemical conversion of organic material, biomass, is carried out, obtaining a gaseous product of great interest known as synthesis gas. The current focus on sustainable energies is aimed at obtaining bioethanol from organic compounds that generally come from waste; however, there is a wide field of study in redirecting the course of the saccharified product to gasification to increase energy efficiencies, as well as the use of catalysts to favor the reaction rate and obtain the gas of interest.

Therefore, this research's objective was to simulate a banana biomass gasification process and system operating conditions during the process. Using Ansys students, the operating conditions of temperatures and fluid velocities were established, whose values were adopted in the simulation of the gasification reaction. In this way, an operating temperature of 604.05 °C was obtained inside the reactor at atmospheric pressure; the temperature of the gasifying agent was 226.85 °C. The mathematical model of the reaction was developed through the reaction kinetics taking as reference the kinetic study based on glucose using the Langmuir-Hinshelwood mechanism, which involves the adsorption of the reactants, catalytic surface reaction. desorption of the products of the dominant reactions: the water-gas shift reaction (WGS), the reverse dry methane reforming reaction (RDRM) and the steam methane reforming reactions (SRM), with which the model describing the evolution of the molar flux with respect to time and Z-coordinate of the main products, i.e. hydrogen (H₂), methane (CH₄), carbon monoxide (CO), carbon dioxide (CO₂) and water (H₂O), was obtained. The results of the molar flux concerning time considering 25 s of reaction were 0.16 mol/s of H₂, 0.08 mol/s of CO, 0.16 mol/s of CO₂, 0.12 mol/ of CH₄ and 0.10 mol/s of H₂O, the molar fluxes concerning the longitudinal axis Z with a varying pressure of 2 bars, did not vary in comparison with the previous ones. The H₂/CO ratio was also analyzed and showed a value of 2.2 for both cases.

Keywords: Simulation. Biomass. Gasification. Glucose. Temperature.

ÍNDICE

Resumen.....	2
Abstract.....	3
ÍNDICE.....	4
ÍNDICE DE TABLAS.....	8
ÍNDICE DE FIGURAS	9
NOMENCLATURA	14
DEDICATORIA	16
AGRADECIMIENTOS	18
CAPITULO 1: INTRODUCCIÓN	19
OBJETIVOS.....	21
OBJETIVO GENERAL.....	21
OBJETIVOS ESPECÍFICOS	21
CAPÍTULO 2: MARCO TEÓRICO	22
2.1. Biomasa.....	22
2.2. Tipos de biomasa	22
2.2.1. Plantaciones energéticas.....	22
2.2.1. Residuos forestales.....	23
2.2.1. Residuos agropecuarios	23
2.2.1. Residuos industriales	23
2.2.1. Residuos urbanos	23
2.3. Biomasa como fuente de energía	23
2.3.1. Conversión bioquímica.....	24
2.3.1. Conversión térmica	24
2.4. Biomasa de banano.....	25
2.4.1. Biomasa de banano en Ecuador	26
2.5. Composición de la biomasa	26
2.5.1. Lignina	26
2.5.2 Celulosa.....	27
2.5.3 Hemicelulosa.....	28
2.5.4 Composición de la biomasa de banano	28
2.6. Glucosa como especie modelo de biomasa	29
2.7. Gasificación	29
2.8. Agentes Gasificantes.....	31
2.8.1. Aire u Oxígeno	31
2.8.1. Vapor de agua.....	31

2.8.1.	Agua supercrítica	32
2.9.	Parámetros que influyen en la gasificación	32
2.9.1.	Características de la biomasa.....	32
2.9.1.	Humedad	32
2.9.1.	Temperatura.....	33
2.9.1.	Presión de trabajo	33
2.9.1.	Agentes gasificantes	33
2.9.1.	Catalizador	34
2.9.1.	Tiempo de residencia.....	34
2.10.	Tipos de gasificadores.....	34
2.10.1.	Gasificador de lecho fijo	34
2.10.1.	Gasificador de lecho fluidizado	36
2.10.1.	Gasificador de flujo arrastrado	36
2.11.	Efecto del catalizador en la reacción.....	37
2.11.1.	Catalizadores de metales alcalinos.....	37
2.11.1.	Catalizadores de metales alcalino-térreos.....	38
2.11.1.	Catalizadores de metales de transición	38
2.12.	Simulación numérica.....	38
2.12.1.	Solución analítica	39
2.12.1.	Solución numérica	39
2.13.	Etapas de la simulación.....	39
2.13.1.	Pre-proceso	39
2.13.1.1.	Modelo geométrico	39
2.13.1.2.	Condiciones de contorno	39
2.13.1.3.	Mallado.....	40
2.13.1.	Proceso.....	40
2.13.1.	Post-Proceso	40
2.14.	Solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes.....	40
CAPITULO 3: MODELACIÓN Y SIMULACIÓN		42
3.1.	Desarrollo del modelo cinético	42
3.1.1.	Reformado de metano con vapor	43
3.1.2.	Reacción de cambio de gas de agua	44
3.1.3.	Reformado Inverso en seco de metano	45
3.1.4.	Ecuaciones para la determinación de las constantes de velocidad y constantes de velocidad de equilibrio	46

3.1.5.	Modelo cinético para la evolución del número de moles con respecto al tiempo	47
3.1.5.1.	Determinación del número de moles de cada componente	48
3.1.6.	Modelo cinético para la evolución del flujo molar con respecto al eje axial Z	48
3.1.6.1.	Determinación del flujo molar de cada componente	49
3.1.6.2.	Determinación del área transversal y porosidad del lecho catalítico	49
3.2.	Simulación	51
3.2.1.	Transferencia de calor a través de la geometría modelo, el aislante	52
3.2.1.1.	Mallado	53
3.2.1.2.	Refinamiento de malla	54
3.2.1.3.	Condiciones de contorno	57
3.2.2.	Flujo del agente gasificante	59
3.2.2.1.	Diseño de la geometría	59
3.2.2.2.	Mallado	59
3.2.2.3.	Pre-proceso (CFX-Pre)	60
3.2.2.4.	Post-proceso (CFD)	64
3.2.3.	Flujo a través de la biomasa y el catalizador	65
3.2.3.1.	Diseño de la geometría representativa del catalizador	66
3.2.3.2.	Mallado de la geometría	66
3.2.3.3.	Pre-Proceso (CFX-Pre)	66
3.2.3.4.	Post-proceso (CFD-Post)	76
CAPITULO 4: RESULTADOS Y DISCUSIÓN		79
4.1.	Distribución de la temperatura a través del sistema	79
4.1.1.	Modelo unidimensional de la distribución de temperatura	79
4.1.2.	Modelo tridimensional de la distribución de temperatura	80
4.1.2.1.	Temperatura en el aislante del horno	80
4.1.2.2.	Temperatura en el aire dentro del horno	82
4.1.2.3.	Temperatura en el reactor	83
4.1.3.	Cambio de temperatura del agente gasificante	85
4.2.	Comportamiento del fluido dentro del reactor	85
4.2.1.	Velocidad a través del reactor	85
4.2.2.	Temperatura a través del reactor	86
4.2.3.	Caída de presión a través del reactor	88
4.3.	Simulación de la reacción de gasificación	89
4.3.1.	Evolución del número de moles con respecto al tiempo	89

4.3.2. Evolución del número de moles con respecto al eje longitudinal	91
CONCLUSIONES	94
RECOMENDACIONES	95
REFERENCIAS	96
ANEXOS	102

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Composición de lignina, celulosa y hemicelulosa de la biomasa del banano, en base seca.	28
Tabla 2. Descomposición de la biomasa (materia lignocelulósica)	31
Tabla 3. Reacciones que intervienen en el proceso de gasificación de biomasa	42
Tabla 4. Parámetros cinéticos para el modelo	50
Tabla 5. Asignación del material.....	53
Tabla 6. Configuración para el método de malla tetraédrico	54
Tabla 7. Configuración para el refinamiento de la malla.....	54
Tabla 8. Configuración de la visualización de la geometría.....	56
Tabla 9. Configuración de los parámetros del Global Mesh	56
Tabla 10. Configuración en los ajustes del Prism Meshing Parameter	56
Tabla 11. Configuración en los parámetros de Compute.....	57
Tabla 12. Configuración en los ajustes de temperatura.....	58
Tabla 13. Configuración en los ajustes de convección	58
Tabla 14. Configuración para los ajustes del dominio Vapor.....	60
Tabla 15. Configuración para los ajustes del límite de entrada Inlet.....	61
Tabla 16. Configuración para los ajustes del límite de Salida Outlet	61
Tabla 17. Propiedades del agua y dimensiones de la tubería	63
Tabla 18. Configuración para los ajustes del límite predeterminado Housing	63
Tabla 19. Ajustes de los valores iniciales.....	63
Tabla 20. Configuración para los ajustes plano de corte	64
Tabla 21. Configuración para los ajustes de la polilínea.....	65
Tabla 22. Configuración para los ajustes del contorno	65
Tabla 23. Configuración para los ajustes de la región compuesta.....	68
Tabla 24. Configuración para los ajustes del dominio Pipes	68
Tabla 25. Configuración para los ajustes del dominio Housing	70
Tabla 26. Configuración para los ajustes del límite de entrada Inlet.....	72
Tabla 27. Configuración para los ajustes del límite de entrada Outlet.....	73
Tabla 28. Propiedades del agua y dimensiones del lecho.....	73
Tabla 29. Configuración para los ajustes del límite predeterminado Housing	74
Tabla 30. Ajustes de los valores iniciales.....	75
Tabla 31. Ajustes del control del solucionador	75
Tabla 32. Configuración para los ajustes plano de corte	76
Tabla 33. Configuración para los ajustes de la polilínea.....	76
Tabla 34. Configuración para los ajustes del contorno	77
Tabla 35. Configuración para los ajustes del gráfico de presión vs el eje Z	77
Tabla 36. Número de nodos en las mallas del aislante dentro del horno.....	81
Tabla 37. Número de nodos en las mallas del aire dentro del horno	83
Tabla 38. Número de nodos en las mallas del reactor del horno	84

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Producción mundial de banano en el año 2020	26
Figura 2. Estructura de la lignina.....	27
Figura 3. Estructura de la celulosa.....	27
Figura 4. Estructura de la hemicelulosa.....	28
Figura 5. Etapas del proceso de gasificación	30
Figura 6. Gasificadores de lecho fijo (a) Tiro descendente (b) Tiro ascendente.	35
Figura 7. Gasificador de lecho fluidizado	36
Figura 8. Gasificador de flujo arrastrado.....	37
Figura 9. Esquema general del sistema de gasificación de biomasa	51
Figura 10. Geometría del aislante del horno.....	53
Figura 11. Malla de la geometría del aislante	54
Figura 12. Malla generada a través de método tetraédrico con refinamiento.....	55
Figura 13. Malla generada en ICEM CFD.....	57
Figura 14. Superficies de las geometrías: a) Caras internas. b) Caras externas	59
Figura 15. Malla del agente gasificante	59
Figura 16. Regiones de la malla del agente gasificante	60
Figura 17. Geometría del flujo a través de la biomasa y catalizador	66
Figura 18. Malla del fluido en el reactor	66
Figura 19. Malla de la geometría. a) Regiones de la mallada para las tuberías y bridas. b) Ubicación de las regiones de la malla en las tuberías y bridas	67
Figura 20. Regiones de la malla del catalizador.	67
Figura 21. Región compuesta Cat.....	68
Figura 22. Distribución de temperatura del modelo unidimensional a) A través del aislante. b) A través del aire del reactor. c) A través del reactor	79
Figura 23. Distribución de temperatura a través del aislante del horno.....	80
Figura 24. Distribución de temperatura en el aislante a) Refinamiento simple b) Refinamiento en	81
Figura 25. Distribución de temperatura en el aire del horno	82
Figura 26. Distribución de temperatura en el aire del horno a) Refinamiento simple b) Refinamiento en ICEM CFD.....	82
Figura 27. Distribución de temperatura a través del reactor	83
Figura 28. Distribución de temperatura en el reactor a) Refinamiento simple b) Refinamiento ICEM CFD.....	84
Figura 29. Temperatura del agente gasificante a través de la tubería.....	85
Figura 30. Comportamiento de la velocidad del fluido.....	86
Figura 31. Velocidad del fluido a través de la coordenada Z	86
Figura 32. Distribución de temperatura del fluido	87
Figura 33. Variación de temperatura con respecto al eje Z.....	87
Figura 34. Variación de la presión a través del reactor	88
Figura 35. Caída de presión con respecto al eje Z.....	88
Figura 36. Evolución del comportamiento de flujos molares resultantes de la reacción de gasificación de glucosa a través del tiempo. a) Flujo de Hidrógeno b) Flujo de monóxido de carbono b) Flujo de dióxido de carbono d) Flujo de metano e) Flujo de agua.	89
Figura 37. Relación Hidrógeno/Monóxido de Carbono con respecto al tiempo.....	91
Figura 38. Evolución del comportamiento de flujos a través del eje axial z. a) Flujo de Hidrógeno b) Flujo de monóxido de carbono c) Flujo de dióxido de carbono d) Flujo de metano e) Flujo de agua.	92
Figura 39. Relación Hidrógeno/Monóxido de Carbono con respecto al eje Z	92

Cláusula de licencia y autorización para publicación en el Repositorio Institucional

Jessica Mayli Gaona Cumbicos en calidad de autora y titular de los derechos morales y patrimoniales del trabajo de titulación “Simulación de la gasificación catalítica de biomasa de banano en la producción de hidrógeno; a partir de un reactor de lecho fijo, mediante ANSYS estudiantil”, de conformidad con el Art. 114 del CÓDIGO ORGÁNICO DE LA ECONOMÍA SOCIAL DE LOS CONOCIMIENTOS, CREATIVIDAD E INNOVACIÓN reconozco a favor de la Universidad de Cuenca una licencia gratuita, intransferible y no exclusiva para el uso no comercial de la obra, con fines estrictamente académicos.

Asimismo, autorizo a la Universidad de Cuenca para que realice la publicación de este trabajo de titulación en el repositorio institucional, de conformidad a lo dispuesto en el Art. 144 de la Ley Orgánica de Educación Superior.

Cuenca, 22 de noviembre de 2022



Jessica Mayli Gaona Cumbicos

C.I: 0706116852

Cláusula de Propiedad Intelectual

Jessica Mayli Gaona Cumbicos autora del trabajo de titulación “Simulación de la gasificación catalítica de biomasa de banano en la producción de hidrógeno; a partir de un reactor de lecho fijo, mediante ANSYS estudiantil”, certifico que todas las ideas, opiniones y contenidos expuestos en la presente investigación son de exclusiva responsabilidad de su autora.

Cuenca, 22 de noviembre de 2022



Jessica Mayli Gaona Cumbicos

C.I: 0706116852

Cláusula de licencia y autorización para publicación en el Repositorio Institucional

Kelly Dayanna Naula Duchi en calidad de autora y titular de los derechos morales y patrimoniales del trabajo de titulación “Simulación de la gasificación catalítica de biomasa de banano en la producción de hidrógeno; a partir de un reactor de lecho fijo, mediante ANSYS estudiantil”, de conformidad con el Art. 114 del CÓDIGO ORGÁNICO DE LA ECONOMÍA SOCIAL DE LOS CONOCIMIENTOS, CREATIVIDAD E INNOVACIÓN reconozco a favor de la Universidad de Cuenca una licencia gratuita, intransferible y no exclusiva para el uso no comercial de la obra, con fines estrictamente académicos.

Asimismo, autorizo a la Universidad de Cuenca para que realice la publicación de este trabajo de titulación en el repositorio institucional, de conformidad a lo dispuesto en el Art. 144 de la Ley Orgánica de Educación Superior.

Cuenca, 22 de noviembre de 2022



Kelly Dayanna Naula Duchi

C.I: 0105823058

Cláusula de Propiedad Intelectual

Kelly Dayanna Naula Duchi autora del trabajo de titulación "Simulación de la gasificación catalítica de biomasa de banano en la producción de hidrógeno; a partir de un reactor de lecho fijo, mediante ANSYS estudiantil", certifico que todas las ideas, opiniones y contenidos expuestos en la presente investigación son de exclusiva responsabilidad de su autora.

Cuenca, 22 de noviembre de 2022



Kelly Dayanna Naula Duchi

C.I: 0105823058

NOMENCLATURA

K_{SRM}	Constante de velocidad de reacción concentrada para SRM
K_{H_2}	Constante de velocidad de adsorción del Hidrógeno
K_{H_2O}	Constante de velocidad de adsorción del Agua
K_{CO}	Constante de velocidad de adsorción del Monóxido de Carbono
K_{CO_2}	Constante de velocidad de adsorción del Dióxido de Carbono
K_{CH_4}	Constante de velocidad de adsorción del Metano
P_{H_2}	Presión del Hidrógeno
P_{H_2O}	Presión del Agua
P_{CO}	Presión del Monóxido de Carbono
P_{CO_2}	Presión del Dióxido de Carbono
P_{CH_4}	Presión del Metano
k_j	Constante de velocidad para la j-ésima reacción
k_j^0	Factor pre-exponencial para la j-ésima reacción
E_a	Energía de activación para la j-ésima reacción
T	Temperatura de reacción
T_0	Temperatura estándar
R	Constante de los gases ideales
k_i	Constante de velocidad de adsorción del componente i
k_i^0	Factor pre-exponencial para el componente i
ΔH_i^{ads}	Calor de adsorción para el componente i del catalizador
r_{SRM}	Velocidad de reacción para el cambio de agua-gas
r_{WGS}	Velocidad de reacción para el reformado de metano con vapor
r_{RDRM}	Velocidad de reacción para el reformado en seco de metano
$v_{i,j}$	Coeficiente estequiométrico del componente i en la j-ésima reacción
$\forall$	Volumen
$\frac{dn_i}{dt}$	Evolución de los moles del componente i con respecto al tiempo
m_{cat}	Masa del catalizador
m	Masa del reactivo
ρ	Densidad del reactivo.
n	Número de moles
PM	Peso molecular
$\frac{d\dot{n}_i}{d\forall}$	Variación del flujo molar con respecto al volumen del reactor

$\frac{d\dot{n}_i}{dZ}$	Variación del flujo molar con respecto al eje longitudinal
A_c	Área transversal
ε	Porosidad del lecho
$\dot{m}$	Flujo másico
$\dot{n}$	Flujo molar de cada componente
t	Tiempo de reacción
D	Diámetro interno del reactor
V_{lecho}	Volumen del lecho
r	Radio del lecho
h	Altura del lecho
V_{Tsf}	Volumen total de las esferas
r_{sf}	Radio de las esferas
N°	Número de esferas empaquetadas en el lecho catalítico
K_Q	Coefficiente de la resistencia cuadrática
$\frac{\partial p}{\partial x_i}$	Gradiente de la caída de presión en la dirección de i
U_i	Velocidad local en la dirección i
V_0	Velocidad superficial o ficticia
μ	Viscosidad dinámica del fluido
ϕ_s	Factor de forma
D_p	Diámetro de partícula
Q	Caudal volumétrico
σ	Densidad del área superficial
Re	Número de Reynolds

DEDICATORIA

A mis padres, Teresa y Gonzalo, quienes han sido un pilar fundamental en mi vida, por su amor, paciencia y comprensión entregados día a día. Ustedes, han sabido guiarme y motivarme para poder superarme cada día y seguir adelante sobre todo en momentos de flaqueza y debilidad. Gracias a su enorme esfuerzo he podido culminar esta etapa universitaria.

A mi hermano, Emerson, con el cual he compartido momentos maravillosos de mi vida que me han llenado de alegría, quien me protege y ha sabido animarme con sus ocurrencias.

En especial a mi abuelitos, Isabel y Víctor, por su corazón noble, su sabiduría y enseñanzas vitales para la vida. Son mi gran modelo a seguir y que pretendo ser por sus valores y principios, gracias a ustedes soy la persona en la que me he convertido.

A mi amiga y compañera de tesis, Kelly, por su paciencia y comprensión a lo largo de este proyecto y me ha brindado su amistad.

Jéssica

DEDICATORIA

A mis padres, por acompañarme cada día durante este largo camino, por la tolerancia en cada día de preparación académica, la ayuda aligerando cargas físicas y emocionales; y por enseñarme a encontrar mi propia interpretación de familia. Son mi ejemplo de que las acciones, el trabajo duro y el esfuerzo conducen al éxito.

Por el tiempo y el espacio, por la paciencia en las pausas inesperadas y momentos de incertidumbre. No fueron las palabras, fue la emoción, la intensidad y el aliento; uno de mis lugares seguros es riendo con ustedes, Justhyn y Edison.

A Celia, mi abuelita, mi mamá. Incluso si no puede presenciarlo, por cada noche de cuidado y tarde de alegría. Sin necesidad de palabras, demostró su apoyo incondicional y fe ilimitada hasta el final de sus días.

Por dejarme en claro que no existe tal cosa como una pregunta tonta, solo una muy graciosa. Por ayudarme a consolidar mi propio lenguaje personal de cariño. En los buenos tiempos y los difíciles también; incluso con una recepción mala y un mensaje a través de una pantalla, todo va mejor de la mano de un amigo. Para Ariana, Michelle, Alessandra, Elizabeth, Dan, Samuel y especialmente a Jéssica.

Kelly

AGRADECIMIENTOS

Padres, hermanos y familia especiales en nuestras vidas por ser los autores principales en nuestro crecimiento personal. Su apoyo, comprensión y amor, dado de manera incondicional, nos ha permitido culminar esta etapa.

Expresamos una especial gratitud a nuestra directora de tesis, Ing. Lourdes Jara por su apoyo, predisposición, comprensión, orientación científica y valiosa asesoría durante el desarrollo de este proyecto para concluirlo con éxito.

Una sincera gratitud al Ing. Paúl Álvarez e Ing. William Mejía por sus invaluable asesorías, que a través del aporte de sus conocimientos ayudaron de manera significativa en la realización de este trabajo.

De igual manera, a nuestros docentes por el afán de transmitirnos sus conocimientos y dedicación, que nos ha permitido lograr importantes objetivos y por ayudarnos a llegar al punto en el cual nos encontramos.

A nuestros amigos y compañeros, quienes nos acompañaron en el transcurso de toda esta etapa compartiendo muchos momentos de felicidad y tristeza, que llevaremos siempre presente.

Y a todo aquel que falte, que quizá no se encuentre en ninguna categoría o no recordamos, que de alguna manera estuvieron a nuestro lado, que nos han enseñado y han dado ánimos.

Kelly y Jéssica

CAPITULO 1: INTRODUCCIÓN

La biomasa constituye una de las fuentes de energía más prometedoras siendo considerada como una alternativa a las convencionales. La capacidad de transformación de la biomasa a energía en forma de gas, juega un papel importante para reducir la dependencia en el uso de combustibles fósiles. Gracias a esta primicia, el pilar principal y el eje en el cual giran varias investigaciones, es en la producción de energía renovable haciendo uso de esta materia prima (Durazno & Alberto, 2018). La energía puede ser generada mediante combustión directa, cocción, pirólisis, digestión anaeróbica y gasificación. Por medio de estas tecnologías se puede lograr obtener un recurso energético mucho más eficiente al reducir las emisiones de gases de efecto invernadero (Velázquez Martí, 2018).

Una de las tecnologías más usadas actualmente, es la gasificación de biomasa, la cual consiste en un proceso termoquímico en el que, a ciertas condiciones de temperatura y con la presencia de un agente gasificante, generalmente vapor de agua; permite obtener un gas de interés con elevado poder calorífico. En síntesis, se realiza primero la hidrólisis de la biomasa, seguida de la gasificación en presencia de catalizadores (Bhushan et al., 2019).

Debido a su disponibilidad de biomasa de banano y a que Ecuador se encuentra en el ranking mundial de países exportadores de banano, es de entender que dicha industria genera grandes cantidades de residuos que pueden ser usados como materia prima para la gasificación (Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación (FAO), 2020). Sin embargo, la principal limitante de este proceso, es la generación de alquitranes y su baja eficiencia energética. La solución a dicho problema es el uso de catalizadores y mediante el uso de reactores de lecho fijo que son los que mejor evitan dichas barreras (Bhushan et al., 2019). En este tipo de reactor, la velocidad de fluidización de materia prima se mantiene por sobre la velocidad del agente gasificante; quedando el material “inmóvil” dentro del reactor (Boujjat et al., 2019).

Un grupo de investigación de la Universidad Autónoma de Zacatecas, ha trabajado con gasificaciones usando compuestos modelos que se obtienen de la biomasa, estos son glucosa y lignina, en dichos estudios proponen modelos cinéticos y termodinámicos que involucran únicamente balances elementales de Carbono, Oxígeno, Hidrógeno y demás hidrocarburos siempre y cuando cumplan C_6 (Cruz, 2018), con esto se dejan sentadas bases para análisis de gasificaciones de glucosa aislada pero proveniente de biomasa.

Dicho estudio se puede llevar a cabo con el uso de software especializado en el que se simula el proceso con condiciones próximas a las reales sin necesidad de hacer uso físico de materias primas o recursos. El presente trabajo tiene como objetivo la simulación del proceso de gasificación de biomasa mediante el uso de dos herramientas. Ansys, el cual es un software que permite estudiar el comportamiento térmico, fluido-dinámico dentro del proceso de gasificación de biomasa haciendo uso de dinámica de fluidos computacional y además facilita otras herramientas tales como el análisis térmico para observar la distribución de temperatura a través de un sistema (Esquivel & Randal, 2017). Por otra parte, Python, el cual es un software de acceso libre especializado en la resolución de ecuaciones diferenciales específicas para algún tipo de reacción, permite estudiar la conversión de la materia prima en sus productos. Y es gracias al uso en conjunto de estas dos herramientas, que es posible determinar condiciones operativas que permiten la generación del gas de síntesis usando compuestos modelos que optimizan el proceso.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Simular el proceso de gasificación catalítica de biomasa de banano en la producción de hidrógeno; en un reactor de lecho fijo, mediante el Software Ansys.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Modelar el reactor y el proceso de obtención de gas de síntesis mediante Ansys.
- Validar el modelo matemático basándose en resultados de trabajos previos publicados.
- Determinar los parámetros de entrada que optimizan la producción de hidrógeno.

2.1. Biomasa

La biomasa es la materia orgánica no fosilizada proveniente de residuos de plantas o animales; cultivos agrícolas y materiales de desecho, desechos biogénicos y estiércol animal o aguas residuales humanas. Esta supone una buena fuente de energía ya que resulta principalmente de residuos de materia usada convencionalmente a gran escala. Cuando esta materia es transformada en combustible, el resultado se denomina biocombustible (Velázquez Martí, 2018).

La biomasa constituye una fuente de energía solar que se origina de la absorción de CO₂ realizada por las plantas para luego ser convertida en materia vegetal (Aydin, 2019). Las tres fases principales de la biomasa son: materia fluida, materia orgánica y materia inorgánica.

La materia orgánica es aquella fase sólida que puede ser no cristalina, como la celulosa, hemicelulosa, lignina y algunos extractos. Y cristalina como los oxalatos minerales. La materia inorgánica, al igual que la orgánica, se encuentra en estado sólido y puede ser cristalina, semicristalina y amorfa. Por último, la materia fluida es aquella que se encuentra de manera gaseosa o líquida (Gamboa, 2021).

2.2. Tipos de biomasa

La biomasa puede presentarse o generarse de diversas maneras, puede provenir de las transformaciones naturales, de los cultivos y cosechas e inclusive de las transformaciones o residuos industriales, siempre y cuando exista la presencia de materia orgánica (Nuñez, 2012).

2.2.1. Plantaciones energéticas

Las plantaciones energéticas son aquellas plantaciones como árboles o plantas que han sido cultivadas con el único propósito de generar energía. Generalmente los árboles y plantas son de crecimiento rápido de bajo mantenimiento, donde la tierra de cultivo no necesita de un gran valor productivo. El tiempo de cosecha puede variar entre los tres y diez años. Además, este tipo de cultivos pueden ayudar al control de la degradación y la erosión de los suelos (Nuñez, 2012).

Entre los cultivos agrícolas empleados en la producción de energía se puede citar los siguientes: caña de azúcar, maíz, trigo, sorgo, palma de aceite, soya o girasol, otras plantas como las algas son empleadas en la generación de combustibles líquidos (etanol

y biodiesel). Cabe recalcar que, para que las plantaciones energéticas resulten rentables, deben ir a la par con la producción agrícola paralela de maíz, caña de azúcar, etc., puesto que para la generación de energía a gran escala es necesario grandes extensiones de tierra (Nuñez, 2012).

2.2.1. Residuos forestales

Una importante fuente de biomasa, es aquella que proviene a partir de los residuos forestales, debido a que por cada árbol talado alrededor del 20% es aprovechado económicamente, el 40% es convertido en aserrín, astillas y corteza, mientras que el otro 40% se convierte en residuos forestales, es decir, ramas y raíces. Los desechos resultantes suelen ser usados para la generación de calor, combustión o en la producción de vapor (BUN-CA, 2002; Nuñez, 2012).

2.2.1. Residuos agropecuarios

Son aquellas plantaciones que no poseen fines alimentarios. Generan alrededor de 60% de residuos, este valor puede variar entre 20% y 40% de residuos cuando se utilizan en diferentes procesos. Muchos de estos residuos son dejados en el campo, provenientes del arroz, café, caña de azúcar, etc., (BUN-CA, 2002; Nuñez, 2012).

2.2.1. Residuos industriales

La actividad industrial puede generar grandes cantidades de residuos, siendo la industria alimenticia una de las más importantes, este tipo de biomasa resulta de los residuos de diferentes tipos de carnes, vegetales, pudiendo estar en estado sólido o líquido, las cuales poseen un elevado contenido de carbohidratos y azúcares que pueden ser aprovechados para la producción de combustibles gaseosos. Además, también pueden presentarse residuos en forma de grasas y aceites (Nuñez, 2012).

2.2.1. Residuos urbanos

Estos residuos constituyen una biomasa de diferentes fuentes tales como: residuos alimenticios, papel, cartón, madera y aguas negras, constituidas principalmente por materia orgánica que pueden ser empleadas en la generación de energía y evitar la contaminación ambiental que estas pueden generar al momento de su descomposición. Alrededor del 80% de los estos residuos pueden ser aprovechados para la producción de energía (Nuñez, 2012).

2.3. Biomasa como fuente de energía

Actualmente, la biomasa residual constituye una fuente importante de energía renovable con peso elevado sobre la canasta energética mundial. Según Wang et al., (2020), aproximadamente la mitad de la energía renovable usada en el año 2017, provino de

energía moderna, esto representa el 12,4% del consumo total de energía. Las aplicaciones de la energía obtenida de las distintas tecnológicas de conversión varían debido a diferentes factores. Dentro de estos factores se encuentran la masa, densidad, volumen, origen y disponibilidad (Karac, 2017).

Según pronósticos de La Agencia Internacional de Energía, en el periodo de 2018-2023, se estima que la energía obtenida a través de la biomasa presenta una tasa de crecimiento del 30%; este crecimiento puede ser explicado debido al interés que despierta con respecto a sus numerosas ventajas sobre los otros tipos de energía. Algunas de estas ventajas son, la reducción a la dependencia de uso de combustibles fósiles, la energía obtenida de la biomasa es la única que puede ser convertida en combustible líquido, es abundante, renovable y fácil de producir, pero su principal atractivo radica en que se concibe como “Carbono neutral”, es decir, las emisiones netas de gases de efecto invernadero, equivalen a cero (Wang et al., 2020).

La conversión de la biomasa hasta la generación de energía puede tomar diferentes rutas. Las principales son bioquímica y térmica (Mousa et al., 2017).

2.3.1. Conversión bioquímica

Ocurre debido a la acción de bacterias o enzimas, se caracteriza por ser un proceso lento, cuya ventaja se da en la mínima cantidad de energía necesaria para la conversión. Los principales productos que resultan de este proceso son el metano, dióxido de carbono y residuos sólidos de carbono (Dayton & Foust, 2020).

2.3.1. Conversión térmica

Esta conversión se logra a través de diferentes procesos, tales como la pirólisis, licuefacción, gasificación o combustión (Mousa et al., 2017).

- **Pirólisis:** De esta reacción los productos resultantes son carbón vegetal, bioaceite y gas pirolítico. El principal producto de interés es el bioaceite compuesto de alcoholes, cetonas, aldehídos, fenoles, éteres y ésteres, azúcar, furanos, alquenos, nitrógeno y demás compuesto de oxígeno; se obtiene con rendimientos del 50% al 70% en peso.

El gas pirolítico está compuesto de CO, CO₂, NO_x, SO_x, etc. llegando a alcanzar rendimientos del 13% al 25% en peso. Por último, el carbón vegetal obtiene rendimientos del 12% al 15% en peso (Hu & Gholizadeh, 2019).

- **Licuefacción:** Esta tecnología es usada para convertir biomasa lignocelulósica sólida en líquida. Consiste en licuar directamente la biomasa con solventes afines como agua, fenol, alcoholes bajos en carbono, sulfolano, entre otros líquidos iónicos. Los

productos obtenidos son glucósidos, ácido levulínico, levulinato de etilo, alcohol furfurílico, furfural y algunos compuestos aromáticos. Alcanza rendimientos del 30% al 50% (Guo et al., 2019).

- **Combustión:** Consiste en la oxidación de los componentes de la biomasa a elevadas temperaturas con una cantidad determinada de oxígeno para que pueda darse la reacción. Es una de las tecnologías de conversión menos preferidas debido al reto que conlleva el control de emisiones de NO_x que se producen al combustionar directamente la biomasa. El costo de acondicionamiento (desnitrificación) de biomasa e implementación de sistemas de control de emisiones, también influyen considerablemente el uso de esta tecnología de manera frecuente (Mladenović et al., 2018).
- **Gasificación:** La gasificación, al igual que la combustión, se lleva a cabo a elevadas temperaturas y en presencia de oxígeno que generalmente proviene del aire (agente gasificante); el producto que se espera obtener es el gas de síntesis compuesto principalmente de hidrógeno y monóxido de carbono. Para poder llevar a cabo este proceso se requieren conocer, sus etapas, la configuración y tamaño del gasificador, características de la materia prima y los parámetros de operación (Mazaheri et al., 2019).

2.4. Biomasa de banano

El banano pertenece al orden Zingiberales, de la familia Musaceae y género Musa, es una planta herbácea perenne de gran tamaño entre 3 a 7 metros de altura. Durante el proceso de siembra y cosecha de banano se generan grandes cantidades de desechos, los mismos que no son empleados de manera óptima. Aproximadamente el 30% de la biomasa del racimo de banano es aprovechada, mientras que, la parte restante es desechada para procesos de compostaje o considerada como contaminante al ser eliminada en cuerpos de agua, generando así un problema ambiental (Palacios & Zalamea, 2016).

De la cosecha de la planta de banano se genera un aproximado del 88% en peso de residuos agrícolas, siendo el tronco, es decir, el pseudotallo, el principal residuo. Uno de los principales componentes de estos residuos es la celulosa, la misma que puede ser empleada para la generación de energía. Además, la biomasa tiene un gran potencial en la absorción de metales de aguas y suelos contaminados, por lo que se convierte en una amenaza o gran desafío debido a la demanda energética que se origina para la generación de los combustibles gaseosos y la recuperación de los metales pesados adsorbidos (A. Kumar & Reddy, 2020).

2.4.1. Biomasa de banano en Ecuador

Según la Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación (FAO), 2020, en dicho año, 140 países alrededor de todo el mundo produjeron aproximadamente 119,8 millones de toneladas de banano. India encabeza la lista con alrededor de 31 millones de toneladas de la producción mundial, le siguen China, Indonesia, Brasil y Ecuador que ocupó el quinto lugar con cerca de 6 millones de toneladas.

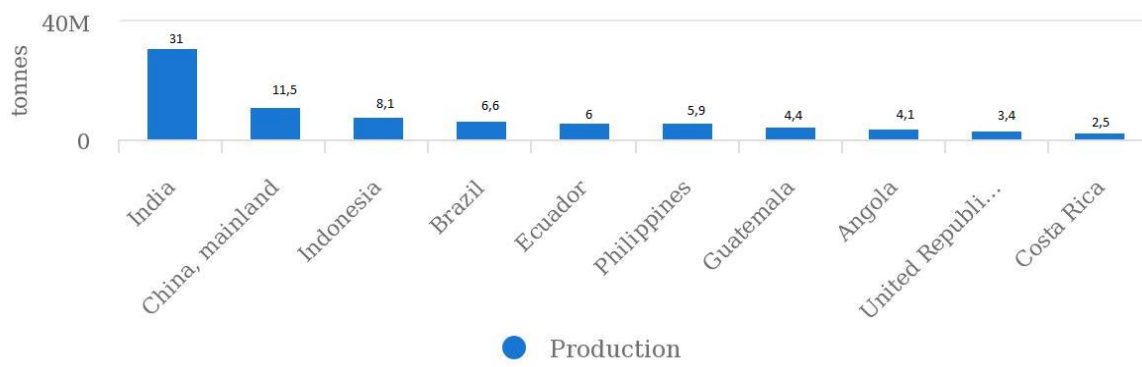


Figura 1. Producción mundial de banano en el año 2020

Fuente: (Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación (FAO), 2020).

Al ser uno de los principales productores de banano a nivel mundial, Ecuador genera una gran cantidad de residuos.

En el Ecuador se generan alrededor de 350141 toneladas métricas de residuos lignocelulósicos libres de agua provenientes de las plantaciones de banano. Debido a la gran cantidad de residuos generados del banano se han enfocado investigaciones con la finalidad de aprovechar la biomasa del banano para diferentes aplicaciones en cuestiones energéticas alternas (Palacios & Zalamea, 2016).

2.5. Composición de la biomasa

La composición química de la biomasa es una red compleja formada por tres biopolímeros estructurales (Lignina, celulosa y hemicelulosa) además de otros componentes orgánicos que son llamados extractivos (Dayton & Foust, 2020).

2.5.1. Lignina

La lignina es una compleja estructura compuesta de polímeros reticulados formados por moléculas fenólicas. Los principales alcoholes por los que está compuesto son p-cumarilo, coniferilo y sinapilo (Kumar & Dixit, 2021). Su peso molecular es bastante elevado y por estas mismas propiedades es capaz de otorgarle a la pared celular el

soporte estructural, impermeabilidad y resistencia contra la degradación microbiana (Bhushan et al., 2019b).

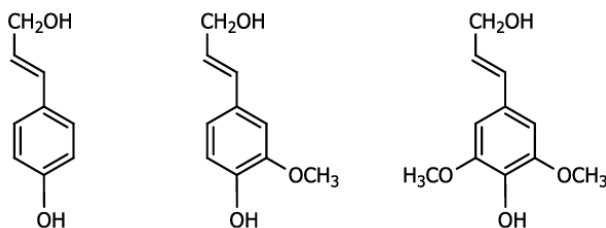


Figura 2. Estructura de la lignina

Fuente: (Chávez, 2013).

La lignina brinda resistencia e hidrofobicidad a las paredes celulares de las plantas protegiéndolas de la degradación microbiana. Es el segundo componente más abundante y comprende aproximadamente el 30% del carbono orgánico no fósil de la naturaleza (Bakker et al., 2020); su principal aplicación como fuente renovable es en la obtención de adhesivos y revestimientos (Megashah et al., 2019).

2.5.2 Celulosa

Es el componente que se encuentra en mayor proporción, se trata de un polímero formado por unidades de β D-glucosa unidas por enlaces covalentes; su composición da como resultado una estructura ordenada y compacta en la que se forman fibrillas mediante puentes de hidrógeno y fuerzas de Van Der Waals. No se trata de una estructura completamente cristalina ya que dichas fibrillas son amorfas y entrelazadas, quitándole esa propiedad ya que entre sus microporos ocurre la penetración de moléculas pequeñas (Flores-Velázquez et al., 2020).

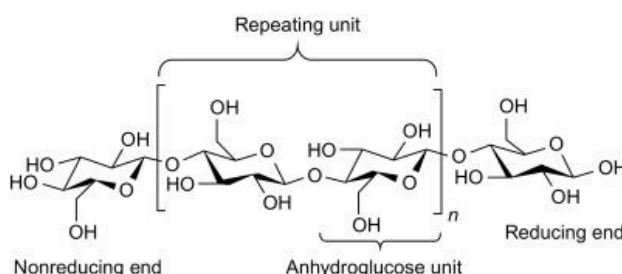


Figura 3. Estructura de la celulosa

Fuente: (Abu Ghali & Dahman, 2017).

La celulosa posee propiedades biodegradables y se encuentra fácilmente disponible (Ai et al., 2021). No es digerible por los seres humanos, suele usarse de alimento para algunos herbívoros. Algunos protozoos que habitan en el intestino de los insectos, también son capaces de digerir la celulosa. Sin embargo, el uso industrial que posee es

la producción de papel y fibras, como base para la producción de plásticos y en las películas fotográficas (Bhushan et al., 2019b).

2.5.3 Hemicelulosa

La hemicelulosa es un polisacárido que se caracteriza por su relativa irregularidad macromolecular (Bajpai, 2018). Esto significa que posee una mayor presencia de unidades monoméricas y ramificaciones. Es el segundo componente de mayor abundancia en la estructura vegetal y se diferencia de la celulosa debido a que consta de varios monosacáridos de pentosas y hexosas, tales como manosa, xilosa, galactosa, fructosa, arabinosa y ácido glucorónico/galacturónico. La proporción en la que cada uno se encuentra depende del tipo de biomasa (Reinoso et al., 2017).

La biodegradación, degradación térmica y absorción de humedad de la fibra, es atribuida a la presencia de hemicelulosa que se encuentra en las paredes celulares primarias (Patel & Parsania, 2018). El principal factor a controlar son los residuos de ácido que le conceden una alta capacidad hidrofílica haciendo que se le facilite la absorción en agua, por lo tanto, la vuelve más propensa a la aparición de microorganismos (Naheed et al., 2021).

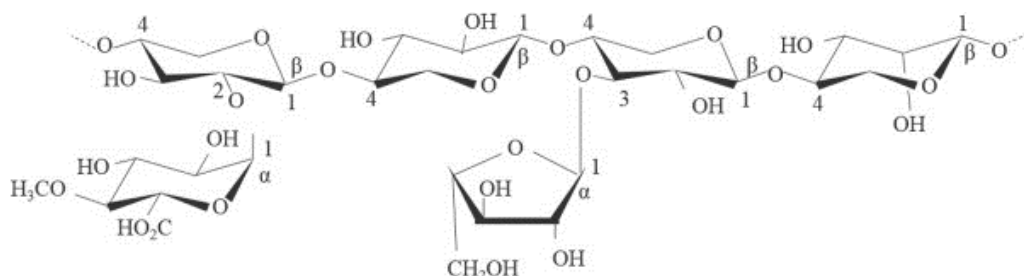


Figura 4. Estructura de la hemicelulosa

Fuente: (Machmudah et al., 2017).

2.5.4 Composición de la biomasa de banano

En la tabla 1, se especifica el porcentaje de Lignina, Celulosa y Hemicelulosa de los de banano.

Tabla 1. Composición de lignina, celulosa y hemicelulosa de la biomasa del banano, en base seca.

Residuo de banano	Lignina (%)	Celulosa (%)	Hemicelulosa (%)
Hojas	8,5	36,3	27,39
Pseudotallo	5,2	35,3	24,9
Raquis	9,85	30,6	15,7

Fuente: (Palacios & Zalamea, 2016).

2.6. Glucosa como especie modelo de biomasa

La glucosa es uno de los componentes de la celulosa, se trata de un monosacárido de fórmula química y unidad repetitiva $C_6H_{12}O_6$ (Gurung & Jialal, 2019). Como se muestra en la Tabla 1, la celulosa es el principal componente que estructura la biomasa, estos contenidos varían, llegando a alcanzar hasta un 50.3% dependiendo de la parte de la planta que se utilice (Cruz, 2018). Al presentar la biomasa una característica potencial como fuente de energía renovable, la mayoría de autores se enfocan en la producción de bioetanol a fin de fomentar un modelo económico energético sustentable y principalmente sostenible con el medio ambiente (Llangari, 2018).

La glucosa se obtiene del desdoblamiento de la molécula de celulosa a través de la hidrólisis complementado a pretratamientos enzimáticos. Es por ello que, Cruz I. (2018) en su estudio “Producción de hidrógeno a través de la gasificación de glucosa usando catalizadores de $\gamma-Al_2O_3$ con Ni, Ce y La e interpretación de resultados usando un modelo No-estequiométrico”, propone el uso de glucosa como modelo de biomasa manejando parámetros de operación basados en un modelo de equilibrio de gasificación de biomasa.

2.7. Gasificación

El hidrógeno es un combustible gaseoso limpio, posee un alto poder calorífico (120 MJ/Kg), el mismo que resulta en agua mediante la combustión, convirtiéndolo de esta manera en una energía sustentable para el medio ambiente. Se ha evidenciado que el uso de hidrógeno como alternativa para la disminución de emisiones es una de las más prometedoras, siendo aún más favorable cuando este se obtiene a partir de fuentes renovables, como por ejemplo la biomasa o agua. Generalmente, la forma convencional para la obtención o producción de hidrógeno se da mediante el reformado con vapor, oxidación parcial (gasificación) o la pirólisis de fuentes fósiles o renovables y también mediante la electrólisis del agua. Sin embargo, esta última presenta una alta demanda energética por lo que no es comúnmente empleada (Rodríguez Correa & Kruse, 2018).

La gasificación es la oxidación térmica parcial, que tiene como objetivo convertir la biomasa con una alta proporción de productos gaseosos tales como dióxido de carbono (CO_2), agua (H_2O), monóxido de carbono (CO), Hidrógeno (H_2), metano (CH_4), entre otros hidrocarburos gaseosos. Además, durante el proceso resultan pequeñas cantidades de carbón en forma sólido, cenizas y otros compuestos condensables como alquitranes y aceite. Las propiedades de la biomasa, materias primas y las condiciones de operación influyen significativamente en la formación de dichos productos. Mediante

el uso de un agente gasificante es posible realizar la oxidación parcial de la biomasa (Tacuri, 2021). Este método es considerado como el más eficiente para convertir la biomasa en combustible gaseoso (Yu et al., 2021).

En el proceso de gasificación de biomasa se pueden distinguir dos etapas de acuerdo a la evolución o formación de los productos. En la etapa I se forma carbón con altos contenidos de H_2 y O_2 , junto con el craqueo de sustancias volátiles. A medida que la temperatura aumenta, el carbón vegetal es convertido en carbón fijo, el mismo que reacciona con el agente gasificante para dar lugar a la formación de gas de síntesis en la etapa II (Yu et al., 2021).

Generalmente un proceso de gasificación está constituido de diferentes pasos, tales como, secado, descomposición térmica o pirólisis, combustión parcial de algunos gases, vapores y carbón y finalmente se da la gasificación de los productos de descomposición como se muestra en la figura 5.

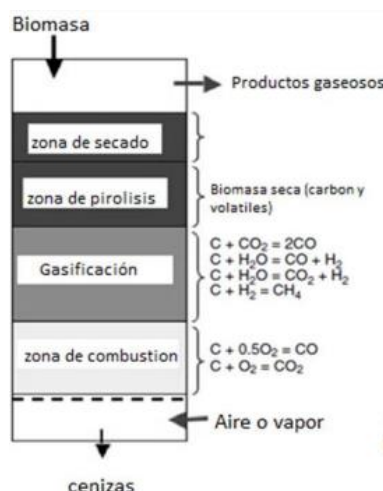


Figura 5. Etapas del proceso de gasificación

Fuente: (Barriga, 2013)

Existen diversos tipos de biomasa cuya composición varía de acuerdo a la fuente de la cual proviene. Por ello, aquellas que presentan un mayor contenido de celulosa y hemicelulosa generan mayores concentraciones de CO y CO_2 en el producto, mientras que elevados contenidos de lignina generan mayores concentraciones de metano (CH_4) (Yu et al., 2021).

En la tabla 2 se muestra la degradación de la biomasa en términos de materia lignocelulósica en función de la temperatura, como se puede observar la descomposición de la materia comienza a los 373 K (100 °C) con la eliminación de la humedad contenida.

Tabla 2. Descomposición de la biomasa (materia lignocelulósica)

Zona	Intervalo de temperatura	Tipo de materia
I	<373 K	Evolución de la humedad
II	373 – 523 K	Tiene lugar al inicio de la descomposición de extractables y descomposición de la hemicelulosa.
III	523 – 633 K	Descomposición de la celulosa.
IV	633 – 733 K	Descomposición de la lignina.
V	>733 K	Oxidación del carbón fijo.

Fuente: (Flores Guamán, 2022).

2.8. Agentes Gasificantes

En las reacciones de gasificación, los agentes gasificantes juegan un papel clave, los mismos poseen diferentes reactividades y composición. Generalmente en el proceso se emplean vapor de agua, aire u oxígeno (O_2), dióxido de carbono (CO_2) o sus mezclas y agua supercrítica. La selección del tipo de gasificante a emplear va a depender de la composición requerida en el gas de síntesis y el consumo energético.

2.8.1. Aire u Oxígeno

El aire comúnmente es el más empleado debido a su fácil disponibilidad y bajos costos; sin embargo, por su contenido de nitrógeno provoca una disminución en el poder calorífico del gas de síntesis. Por ello es recomendable el uso de aire rico en oxígeno con la finalidad de obtener un gas de síntesis con un poder calorífico (Situmorang et al., 2020).

Es determinante la cantidad de oxígeno que se requiere para que la reacción se lleve cabo de manera deseada. Cuando el oxígeno que reacciona se encuentra en cantidades limitadas, favorece la formación en mayor cantidad de CO; sin embargo, si dicha cantidad excede cierto límite a medida que aumenta, dominará el consumo de CO (Shahbaz et al., 2020).

2.8.1. Vapor de agua

El vapor permite obtener durante el proceso de gasificación mayores contenidos de hidrógeno y menos alquitrán. Para procesos con este gasificante es necesario más energía, la misma que es requerida para las reacciones endotérmicas dadas en las reacciones de vapor primarias y secundarias y durante la reacción de gas de agua. Para mejorar la velocidad de reacción durante el proceso, se suele realizar una mezcla aire-

vapor, para que las oxidaciones parciales exotérmicas otorguen energía a las reacciones endotérmicas (Situmorang et al., 2020).

2.8.1. Agua supercrítica

El agua supercrítica se encuentra a una temperatura superior a 374 °C con presiones mayores a 22,1 MPa, presenta una alta solubilidad, reactividad y difusividad, disuelve la materia orgánica y productos gaseosos. Las reacciones involucradas en el proceso de gasificación pueden llevarse a cabo en atmósferas a bajas temperatura sin la necesidad de emplear un catalizador, evitando así la formación de NO_x y SO_x (Zhang et al., 2019).

Los productos obtenidos son principalmente el hidrógeno y dióxido de carbono, durante el proceso se dan altas tasas de conversión, dependiendo de factores tales como la materia prima, el tipo de catalizador, el diseño del reactor o las condiciones de operación del sistema. Los hidrocarburos de cadena corta (etano, propano, propeno) y el monóxido de carbono se forman en pequeñas cantidades (Rodríguez Correa & Kruse, 2018).

2.9. Parámetros que influyen en la gasificación

Entre los parámetros que influyen en el proceso de gasificación están las características de la biomasa y el agente gasificante, la concentración de la biomasa, el tiempo de residencia, la temperatura de gasificación, catalizador de la reacción y la presión del reactor (Zhang et al., 2019).

2.9.1. Características de la biomasa

Además de los principales componentes de la biomasa (lignina, celulosa y hemicelulosa), posee un cierto contenido de minerales como K, Mg, Mn, Na, Ca, Cu, Co Si y Zn. Estos se encuentran formando sales y óxidos (carbonatos, fosfatos, sulfatos y cloruros). El factor determinante de estos minerales, se observa durante la reacción de gasificación ya que algunos de ellos pueden actuar como catalizadores. De la misma forma, la composición mineralógica puede llegar a limitar la temperatura de trabajo al actuar sobre la temperatura de fusibilidad de cenizas (Acevedo Juan & Arenas, 2019).

2.9.1. Humedad

La humedad que alberga la estructura de cada planta, depende de cómo ésta es absorbida desde la tierra y distribuida. Parte de ella se desplaza hacia las hojas mediante las secciones estrechas de las mismas. La humedad influye directamente sobre el estado de descomposición de la biomasa, si el contenido de humedad de la biomasa aumenta, la tasa de descomposición se reduce (Singh Siwal et al., 2020). El proceso de gasificación se realiza cuando la biomasa ha sido secada para reducir su humedad hasta menos del 15% (Shahbaz et al., 2020).

El contenido de humedad viene expresado como el porcentaje de la masa total de la biomasa, convirtiéndolo en un parámetro de control bastante importante cuando se trata de fines energéticos ya que tiene una influencia notoria en la eficiencia de conversión y poder calorífico (Sánchez et al., 2019).

2.9.1. Temperatura

Es uno de los factores más importantes a considerar dentro del proceso de gasificación ya que de esta depende la desvolatilización en todas las etapas del proceso y en la composición final del gas de síntesis. A medida que aumenta la temperatura, aumenta la conversión debido a la presencia de materia volátil que mejora la capacidad de conversión de la materia sólida en gas. A medida que se eleva la temperatura, también aumenta la formación de productos gaseosos a partir de los sólidos, esto debido a que, durante el proceso mejoran los procesos de gasificación de carbón, reformado de metano y el agrietamiento de alquitrán. Por el contrario, a temperaturas bajas, se produce metano que aumenta el contenido del mismo en el producto (Shahbaz et al., 2020).

2.9.1. Presión de trabajo

La selección de la presión de trabajo se realiza dependiendo de los requerimientos del proceso y del equipo. Generalmente se realizan a la presión cercana a los 180 bar. A medida que aumenta la presión, la reacción de metanización se ve favorecida, esto hace que la formación de alquitrán se de en menores cantidades y la fracción de hidrocarburo aromático predomine. La presión también influye sobre los rendimientos de los gases obtenidos; esto debido a que afecta la aceleración de la cinética de desplazamiento agua/gas, también aumenta el tiempo de residencia de los gases en las partículas provocando el craqueo de los alquitranes favoreciendo las reacciones solido/gas.

La presión demasiado alta disminuye la producción de H_2 , esto debido a que el equilibrio químico se ve desplazada hacia los reactivos (Acevedo Juan & Arenas, 2019).

2.9.1. Agentes gasificantes

La elección de gasificante resulta crucial en la composición final de gas de síntesis. El agente gasificante puede ser aire, oxígeno, vapor o una mezcla de oxígeno y vapor. El uso de alguno de ellos dependerá de la accesibilidad. Se debe tener en consideración ciertos aspectos para elegir, por ejemplo, si bien el aire es el agente más conveniente, el gas producto presenta contenidos altos de nitrógeno que hacen que el poder calorífico disminuya. Lo mismo ocurre con los demás agentes, si bien mejora cierto aspecto,

puede ser contradictorio con el objetivo que se busca alcanzar. La elección dependerá de requerimientos específicos para un sistema en específico (Xu et al., 2018).

2.9.1. Catalizador

El catalizador es una sustancia química que se adiciona a la reacción en pequeñas cantidades logrando así aumentar la tasa de equilibrio; sin embargo, la sustancia no reacciona químicamente con ninguno de los otros componentes que intervienen en la reacción. El catalizador facilita una alternativa al mecanismo de reacción que suele implicar un estado de transición con comportamientos energéticos distintos.

Las reacciones tienen lugar en la superficie del catalizador, ya que es ahí donde se genera los sitios activos. Según Ram & Mondal, 2022, el uso de catalizadores influye de manera positiva en la producción de hidrógeno gaseoso a la par con la mejora de su poder calorífico. Los catalizadores más usados son aquellos a base de Cu, Fe, Ni y Zn. Los costos que se generan durante la preparación del catalizador y el inconveniente de “ensuciamiento” por la saturación de los poros, suelen ser elevados por lo que hay que analizar muchos más factores a fondo para su elección.

2.9.1. Tiempo de residencia

El tiempo de residencia es importante para que la reacción se realice completamente. La reacción requiere de los tiempos de reacción y de equilibrio. Dicho tiempo de residencia empieza con una reacción lenta hasta que después de transcurrido ya por el tiempo necesario, la reacción empieza a progresar más deliberadamente. Para lograr un mayor control sobre las tasas de flujo de masa, las recomendaciones son trabajar con tiempo de residencia mucho más cortos o largos siempre y cuando la relación con la temperatura sea equivalente (Shahbaz et al., 2020).

2.10. Tipos de gasificadores

El gasificador es el recipiente en donde se lleva a cabo las reacciones durante el proceso de gasificación. La elección del tipo de gasificador depende de las propiedades de la biomasa, los requerimientos del producto y el agente gasificante a emplear. Comúnmente se emplean tres tipos de gasificadores para la biomasa, entre ellos están, el gasificador de lecho fijo, gasificador de lecho fluidizado y el gasificador de flujo arrastrado (Situmorang et al., 2020).

2.10.1. Gasificador de lecho fijo

El gasificador de lecho fijo es uno de los más económicos, se ajusta a procesos de gasificación a pequeña escala, este tipo de reactores pueden ser de tiro ascendente o de tiro descendente. En el caso de los de tiro ascendente, el agente gasificante ingresa

desde la zona inferior mientras que la biomasa es introducida desde la parte superior, es decir, en dirección contracorriente, además posee una alta eficiencia térmica con una alta tolerancia en el contenido de humedad de la biomasa de hasta el 60% en base húmeda, también acepta un alto rango de tolerancia en el tamaño de la partícula pudiendo ser de 5 a 100 mm. Sin embargo, presenta la desventaja de generar más alquitrán, debido a que la zona de pirólisis fluye hacia la zona más fría lo que evita alcanzar las temperaturas más altas, impidiendo la formación de gases de síntesis (Situmorang et al., 2020).

Por otra parte, el gasificador de tiro descendente es diferente al anterior por la forma en la que se introduce el agente gasificante al reactor, pueden ser introducidos desde la parte superior o por los lados, y a su vez la biomasa ingresa desde la parte superior, teniendo así una misma dirección de corriente. La producción de alquitrán es baja, puesto que los productos de desvolatilización llegan a la zona de oxidación a elevadas temperaturas. No obstante, la transferencia de calor entre la zona caliente y fría es muy pobre. Por lo tanto, no acepta biomazas con altos contenidos de humedad, cuyo valor de tolerancia debe ser menor al 30%. Los tiempos de residencia deben ser cortos, ya que la fuerza de arrastre y la gravedad provoca que la biomasa descienda con mayor rapidez. Además, presenta baja eficiencia en la conversión de carbono a comparación del tiro ascendente. Durante la reacción existe la posibilidad de darse la formación de canalizaciones y formaciones de puente, por ello el tamaño de partícula debe ser uniforme y encontrarse entre un rango de 40 a 100 mm (Situmorang et al., 2020).

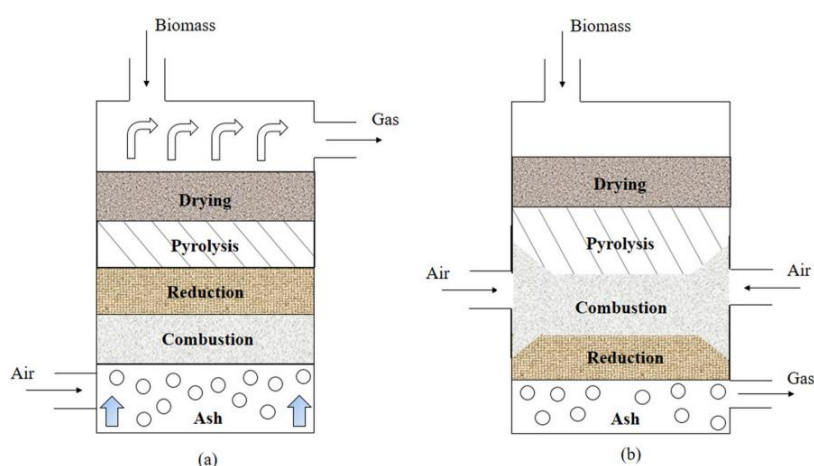


Figura 6. Gasificadores de lecho fijo (a) Tiro descendente (b) Tiro ascendente.

Fuente: (Situmorang et al., 2020)

2.10.1. Gasificador de lecho fluidizado

El gasificador de lecho fluidizado presenta una mejor transferencia de calor, mayor capacidad de mezcla y distribución de temperatura más uniforme, obteniendo una mayor eficacia y conversión de la biomasa. Para procesos de gasificación en este tipo de reactores deben generarse temperaturas elevadas, entre 800 a 1000 °C (Situmorang et al., 2020).

Es posible escalar este proceso de manera continua y obtener elevadas eficiencias. El gasificador de lecho fluidizado presenta conversiones de hasta el 95% con un tamaño de partículas inferior a 20 mm (Situmorang et al., 2020).

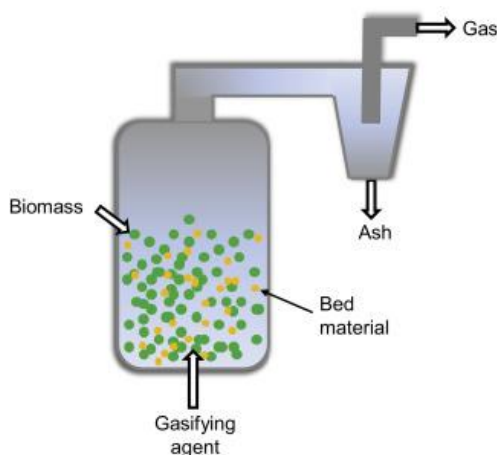


Figura 7. Gasificador de lecho fluidizado

Fuente: (Bermudez et al., 2016).

2.10.1. Gasificador de flujo arrastrado

Es ideal para partículas muy finas, que van desde 75 a 100 μm , con temperatura de 1400 a 1800 °C y elevadas presiones que oscilan entre 20 a 70 bares con la finalidad de descomponer totalmente el alquitrán para dar lugar a gas de síntesis. Los tiempos de residencia son relativamente cortos, de 1 a 5 s. Por las condiciones de operación y biomasa la conversión de carbono puede ser casi del 100%. Sin embargo, sus costos de inversión y operación son elevados (Situmorang et al., 2020).

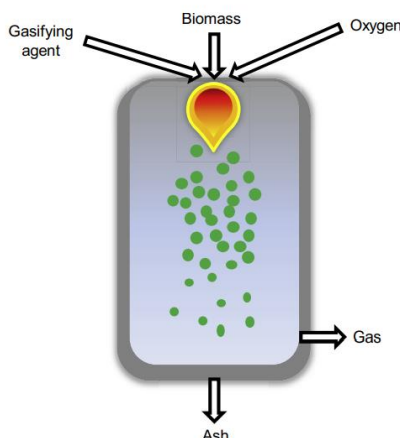


Figura 8. Gasificador de flujo arrastrado

Fuente: (Bermudez et al., 2016).

2.11. Efecto del catalizador en la reacción

En las reacciones químicas, la catálisis juega un papel importante en las transformaciones químicas, gracias a que modifica la velocidad de una reacción química sin que se vea afectada su posición de equilibrio. En los procesos de gasificación el uso de catalizadores permite la eliminación del alquitrán en el gas de síntesis, reduce los contenidos de metano o cualquier otro gas que no es de interés e incrementa la producción de hidrógeno (H_2). El tipo de catalizador a usar en la reacción debe ser seleccionado en función de su efectividad, resistencia a la desactivación, su facilidad de regeneración y costo. Además, pueden ser empleados en la reacción post-gasificación e in-situ. Los catalizadores para la gasificación se clasifican acorde a su composición: alcalinos, alcalino-térreos y de transición (Serna, 2019).

2.11.1. Catalizadores de metales alcalinos

Tienen la función de eliminar el alquitrán para la obtención de un gas de síntesis de mejor calidad. Pueden ser adicionados de forma directa en la biomasa a través de un mezclado seco o mediante impregnación húmeda. Entre los catalizadores de metales alcalinos se encuentran el carbonato de potasio y el carbonato de sodio, considerados como catalizadores primarios, es decir, en reacciones in-situ. Este tipo de catalizadores son más activos en la gasificación, debido a que la actividad de los metales alcalino es mejor a medida que aumenta su peso atómico. Además, su actividad catalítica está relacionada con la capacidad de donar electrones, en base a esto el orden de la actividad catalítica es de $K > N > Li$ (Serna, 2019).

2.11.1. Catalizadores de metales alcalino-térreos

Los catalizadores de metales alcalino-térreos pueden ser utilizados como catalizadores primarios o secundarios, siendo este último introducido a un reactor aguas abajo. Generalmente suele usarse la dolomita por su eficacia en la eliminación de alquitrán y al ser económicamente rentable, ya que no hay necesidad de regenerarla gracias a su fácil disponibilidad y abundancia. Los catalizadores a base de calcio mejoran la conversión agua-gas y reformado de metano con vapor, provocan la ruptura de alquitrán, absorbe otras especies como el azufre, disminuyendo así la liberación de ácido sulfhídrico (H_2S) en el gas de síntesis. En biomasas con altas concentraciones de nitrógeno, genera la formación de N_2 inerte para la reacción (Serna, 2019).

2.11.1. Catalizadores de metales de transición

Entre los catalizadores de metales de transición se encuentra el níquel, empleado aguas abajo del catalizador, es decir, en un reactor secundario a una temperatura de 740 °C, el mismo que genera un aumento en el contenido de hidrógeno y monóxido de carbono en el gas de síntesis, provocando la disminución de hidrocarburos y metano. El níquel evita la liberación de compuestos de azufre durante la fase de vapor. Cuando la reacción es dada a bajas temperaturas, la metanización se ve favorecida termodinámicamente. Además, el níquel presenta la desventaja al momento de su desactivación en la superficie de carbono, por lo que es necesario combinarlo con algún soporte para mejorar su rendimiento (Serna, 2019).

2.12. Simulación numérica

En los últimos años la simulación numérica se ha convertido en una herramienta fundamental en diseños de productos, predicción de procesos técnicos e industriales, así como su optimización, de esta manera resulta una alternativa barata en la investigación de productos y procesos sobre todo cuando la experimentación es muy compleja, peligrosa o representa costos elevados (Laín Beatove, 2014). La simulación numérica o simulación digital emplea herramientas matemáticas para modelar, simular o predecir el comportamiento de fenómenos mecánicos, estructurales, termodinámicos, productos y procesos de la ingeniería y de las ciencias aplicadas.

La utilización de simulaciones numéricas en el estudio de ecuaciones se requiere conocer sobre los métodos numéricos, algoritmos que se pueden emplear y de los procesos fundamentales que van incluidos en la simulación. Por lo que, para estudiar un problema es importante realizar una planificación del modelo matemático y algoritmos determinados para la resolución de dicho modelo (Millán et al., 2011).

2.12.1. Solución analítica

La solución analítica permite una mejor comprensión sobre el comportamiento de ciertos fenómenos puesto que puede ser empleada en todo instante de tiempo. En el caso de ecuaciones diferenciales, la solución analítica se basa en la resolución a través de expresiones matemáticas explícitas mediante distintas técnicas, tales como la separación de variables, transformadas de Laplace, el uso de factores integrantes, etc. Por lo que, al sustituir valores de una variable independiente se logra obtener los valores de la función incógnita (Ortiz Moctezuma, 2015).

2.12.1. Solución numérica

Se basa en la resolución numérica de ecuaciones diferenciales, empleando métodos numéricos a través de una computadora digital. Para ello, es posible emplear un lenguaje de programación que permitan el uso de operaciones matemáticas numéricas o un software especializado, con interfaces diseñadas para un sistema en específico (Ortiz Moctezuma, 2015).

2.13. Etapas de la simulación

2.13.1. Pre-proceso

Es la etapa en la que se definen los objetivos de la simulación, dichos objetivos comprenden desde la definición del sistema, la evaluación de la disponibilidad de datos, es decir, las condiciones de contorno y el mallado (Laín & García, 2015). Dentro de esta etapa también se encuentra la asignación de materiales, propiedades y acondicionamiento previo como la evaluación de posibles simplificaciones para garantizar buenas aproximaciones de resultados (Antonio et al., 2017).

2.13.1.1. Modelo geométrico

El modelo geométrico es la representación gráfica del sistema en el que se trabaja, la construcción de él facilita la caracterización del sistema sobre el que se trabaja, facilita la medición de ciertos parámetros y características de ciertas partes. Estos modelos se construyen suficientemente detallados o representaciones generales; sobre él se colocarán las condiciones de contorno, esto se realiza construyendo la geometría con medidas reales en 3D y en un software especializado (Espinilla, 2019).

2.13.1.2. Condiciones de contorno

También conocidos como valores de contorno, son aquellos que se usan para definir adecuadamente el problema sobre el que se requiera trabajar. Pequeños cambios en ellos pueden influir también de manera significativa en la solución (Sancho Ávila, 2018). Según Cabrera et al., (2021), una condición de contorno, es la información que se tiene

de la solución en la frontera de una región que está definida, es decir, la información que se encuentra en los límites del sistema que se está modelando a través del software.

2.13.1.3. Mallado

Una vez terminada la geometría e identificadas las condiciones de contorno con las que se cuenta, la geometría se subdivide en pequeñas regiones que en conjunto forman lo que se conoce con el nombre de malla (*Mesh*). La malla está formada por nodos y aristas que en conjunto y unidos forman una superficie.

Por lo general, el software en el que se trabaja, divide de manera automática la geometría en múltiples y pequeñas áreas lo más regulares posibles. El resultado es una malla regular hexaédrica, aunque también puede ser tetraédrica, piramidal o híbrida. Existen diferentes tipos de mallas dependiendo la forma y distribución de cada elemento (Lozada et al., 2018). Si bien el mallado por defecto, la red que se forma no sigue ninguna dirección específica, exige menores recursos computacionales y menos tiempo de resolución de la simulación (Martínez, 2019).

2.13.1. Proceso

También conocida como etapa de cálculo, consiste en evaluar la convergencia de la solución. Para ello, previamente se trabaja en el desarrollo del modelo matemático cuyas condiciones se ajusten a todo el proceso (Cabrera et al., 2021).

2.13.1. Post-Proceso

Consiste en la etapa de análisis de resultados y validación de datos, aquí se obtienen resultados específicos. Los valores y soluciones obtenidas se comparan con otros ya existentes. Estos análisis dependen del tipo de sistema con el que se trabaje y a la solución hacia la que se apunte. Hace uso y extrae; las tablas, animaciones, tendencias extraídas, sirven como soporte para dicho análisis (Parrilla & García, 2019).

2.14. Solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier Stokes son un conjunto de ecuaciones que permiten describir los procesos de impulso, calor, movimiento de un fluido y transferencia de masas. Además, existen otros procesos tales como la combustión que pueden resolverse con la ayuda de las ecuaciones de Navier Stokes (Carrera, 2019).

Las ecuaciones de Navier-Stokes están constituidas por un sistema de ecuaciones en derivadas parciales no lineales, las mismas que describen el movimiento de un fluido y de cualquier fenómeno en el que intervenga algún fluido. Dichas ecuaciones son obtenidas a partir de principios de la conservación de la mecánica y termodinámica a un

volumen de fluido. Para la obtención de las ecuaciones en su forma diferencial, se realizan consideraciones físico matemáticas, como el análisis y relación de los esfuerzos tangenciales y el gradiente de velocidad, con la finalidad de obtener resultados o la solución a un problema (Romero et al., 2019).

El programa ANSYS-CFX se basa en la resolución de las ecuaciones de Navier Stokes en función del fluido y de otros términos adicionales sobre un modelo o diseño tridimensional asistido por computadora. Esta metodología permite colocar condiciones de contorno para obtener información de todas las variables en gran cantidad de puntos del espacio, lo cual es complicado de llevar a cabo en modelos físicos (Carrera, 2019).

De forma generalizada la ecuación de Navier Stokes queda de la siguiente manera:

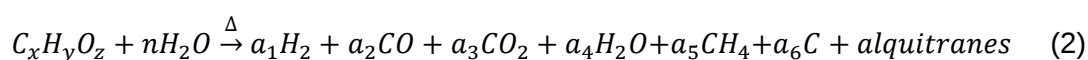
$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho(\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} = -\nabla P + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{u} \quad (1)$$

Donde ρ es la densidad, $\frac{\partial \vec{u}}{\partial t}$ es la derivada de la velocidad en el tiempo, $\vec{u}$ es la velocidad, ∇P es el gradiente de la presión y μ es la viscosidad. Por lo tanto, la ecuación está dada por $\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t}$ como la derivada total, el gradiente de presión $-\nabla P$, las fuerzas externas que actúan sobre el fluido $\rho \vec{g}$, la difusión $\mu \nabla^2 \vec{u}$.

3.1. Desarrollo del modelo cinético

El modelo cinético de la reacción de gasificación de biomasa, describe los mecanismos de todo el sistema a través de procesos de adsorción, desorción durante la activación de los reactivos, reacción superficial y desorción de los productos, mediante el mecanismo de Langmuir-Hinshelwood, con la finalidad de considerar los componentes que reaccionan a lo largo del tiempo (Adamu & Hossain, 2018).

Durante el proceso de gasificación, la macromolécula de biomasa se transforma en una serie de productos, entre los principales se encuentran el hidrógeno H_2 , monóxido de carbono CO , dióxido de carbono CO_2 , metano CH_4 , agua H_2O , y en menores cantidades coque y alquitranes (Adamu & Hossain, 2018a). Para representar dicha reacción, se hace uso de la siguiente fórmula general:



En la ecuación (2) las cantidades de cada uno de los productos dependen de las condiciones de operación durante la reacción, tipo de biomasa, actividad y selectividad del catalizador. Los productos gaseosos a lo largo de la reacción vuelven a reaccionar para dar lugar a la distribución final del gas de síntesis (Adamu & Hossain, 2018).

La gasificación de biomasa conlleva una serie de reacciones químicas que tienen lugar mediante el secado, la descomposición de las partículas, oxidación y reducción. La biomasa puede representarse como C , en la tabla 3, se muestran las principales reacciones que se llevan a cabo durante el proceso.

Tabla 3. Reacciones que intervienen en el proceso de gasificación de biomasa

Reacción	Ecuación		Entalpía de reacción (kJ/mol)
Cambio de gas de agua	$CO + H_2O \leftrightarrow H_2 + CO_2$	(3)	$\Delta H^\circ = -41.2$
Reformado de metano con vapor	$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2$	(4)	$\Delta H^\circ = 206.0$
Reformado en seco de metano	$CH_4 + CO_2 \leftrightarrow 2CO + 2H_2$	(5)	$\Delta H^\circ = 247.0$
Gasificación de coque	$C + H_2O \leftrightarrow CO + H_2$	(6)	$\Delta H^\circ = 131.3$
Reacción inversa de Boudouard	$C + CO_2 \leftrightarrow 2CO$	(7)	$\Delta H^\circ = 172.5$
Reacción de hidrogenación	$C + 2H_2 \leftrightarrow CH_4$	(8)	$\Delta H^\circ = -74.5$

Fuente: (Adamu & Hossain, 2018)

De acuerdo a Adamu & Hossain (2018) el modelo de Lagmuir-Hinshelwood puede ser aplicado para modelar una reacción de gasificación catalítica de biomasa, siempre y

cuando se establezcan suposiciones y aproximaciones adecuadas. Por lo tanto, para el modelo cinético se realizan las siguientes suposiciones:

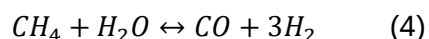
- I. La biomasa se convierte en CO, CO₂, H₂ y CH₄, con trazas de coque y alquitrán.
- II. El CO, CO₂, H₂, CH₄ y H₂O, son adsorbidos en la superficie del catalizador, las cuales reaccionan hasta que se desorben y para formar parte del producto.
- III. Las reacciones dominantes en la reacción son el cambio de agua-gas (WGS), el reformado seco de metano (DRM) y las reacciones de reformado de metano con vapor (SRM).

Para que la suposición (i) sea verdadera durante la reacción, la presión del reactor no debe superar los 57 psi y los principales productos generados deben ser el CO, CO₂, H₂, CH₄.

En el caso de la suposición (iii), el valor de las energías de activación de la reacción de Bourdouard y metanización deben ser mayores a las SRM, WGS, y reformado de seco de metano inversa (RDRM).

3.1.1. Reformado de metano con vapor

De acuerdo a la investigación realizada por Adamu & Hossain (2018), el reformado de metano con vapor (SRM) se representa con la siguiente reacción general:



El metano presente en la reacción proviene de las reacciones anteriores entre la biomasa C, agua H₂O e hidrógeno H₂, como se puede observar en las ecuaciones 6 y 8 de la tabla 3. Por lo tanto, el metano formado de dichas reacciones continúa reaccionando con el agente gasificante presente en el sistema, es decir, el vapor de agua.

El mecanismo de adsorción/reacción/desorción se da de la siguiente manera:

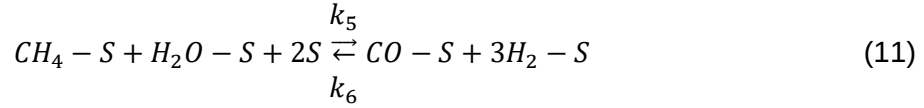
1. Adsorción de metano en el sitio activo del catalizador:



2. Adsorción de vapor en el sitio activo del catalizador:



3. Reacción superficial en el sitio activo del catalizador:



4. Desorción de CO en la superficie del catalizador:



5. Desorción de H₂ de la superficie del catalizador:



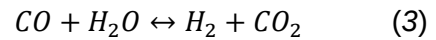
Considerando un pseudo-estado estacionario se plantea la siguiente ecuación para describir el mecanismo de adsorción:

$$r_{SRM} = \frac{k_{SRM}P_{CH_4}P_{H_2O}}{(1+K_{H_2}P_{H_2}+K_{H_2O}P_{H_2O}+K_{CO}P_{CO}+K_{CO_2}P_{CO_2}+K_{CH_4}P_{CH_4})^4} \times \left(1 - \frac{P_{CO}P_{H_2}^3}{K_{SRM}P_{CH_4}P_{H_2O}}\right) \quad (14)$$

Donde el valor de K_{SRM} es la constante de velocidad de equilibrio de la reacción SRM, k_{SRM} es la constante de velocidad de reacción concentrada para SRM, $K_{H_2,H_2O,CO,CO_2,CH_4}$ es la constante de velocidad de adsorción de cada componente y $P_{H_2,H_2O,CO,CO_2,CH_4}$ es la presión para cada componente.

3.1.2. Reacción de cambio de gas de agua

Según, Adamu & Hossain (2018), para el cambio total de gas de agua se representa con la reacción general:



El monóxido de carbono CO, proviene de las reacciones de la biomasa C, el agente gasificante H₂O y dióxido de carbono CO₂, como se muestran en la ecuación 6 y 7 de la tabla 3. Además, existen otras fuentes que aportan más cantidades de CO al sistema, como es el caso de las reacciones de las ecuaciones 4 y 5.

Para el proceso de adsorción/reacción/desorción se describe con el siguiente mecanismo de reacciones:

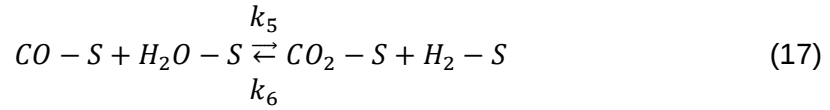
1. Adsorción de CO en el sitio activo del catalizador:



2. Adsorción de vapor en el sitio activo del catalizador:



3. Reacción superficial en el sitio activo del catalizador:



4. Desorción de CO₂ de la superficie del catalizador:



5. Desorción de H₂ de la superficie del catalizador:



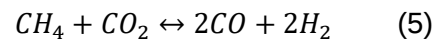
Considerando un pseudo-estado estacionario se plantea la siguiente ecuación para describir el mecanismo de adsorción:

$$r_{WGS} = \frac{k_{WGS}P_{CO}P_{H_2O}}{(1+K_{H_2}P_{H_2}+K_{H_2O}P_{H_2O}+K_{CO}P_{CO}+K_{CO_2}P_{CO_2}+K_{CH_4}P_{CH_4})^2} \times \left(1 - \frac{P_{CO_2}P_{H_2}}{K_{WGS}P_{CO}P_{H_2O}}\right) \quad (20)$$

Donde el valor de K_{WGS} es la constante de velocidad de equilibrio de la reacción WGS, k_{WGS} es la constante de velocidad de reacción concentrada para WGS, $K_{H_2,H_2O,CO,CO_2,CH_4}$ es la constante de velocidad de adsorción de cada componente y $P_{H_2,H_2O,CO,CO_2,CH_4}$ es la presión para cada componente.

3.1.3. Reformado Inverso en seco de metano

De acuerdo a Adamu & Hossain (2018), la reacción general para el reformado inverso en seco del metano:



De la misma manera que en las reacciones anteriores SRM y WGS, las fuentes de los reactivos en la reacción RDRM, provienen de los productos generados de las reacciones presentadas en la tabla 3.

Para el proceso de adsorción/reacción/desorción se describe con el siguiente mecanismo de reacciones:

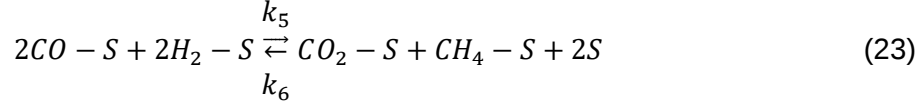
1. Adsorción de CO en el sitio activo del catalizador:



2. Adsorción de vapor en el sitio activo del catalizador:



3. Reacción superficial en el sitio activo del catalizador:



4. Desorción de CO₂ de la superficie del catalizador:



5. Desorción de CH₄ de la superficie del catalizador:



Considerando un pseudo-estado estacionario se plantea la siguiente ecuación para describir el mecanismo de adsorción:

$$r_{RDRM} = \frac{k_{RDRM} P_{CO}^2 P_{H_2}^2}{(1 + K_{H_2} P_{H_2} + K_{H_2O} P_{H_2O} + K_{CO} P_{CO} + K_{CO_2} P_{CO_2} + K_{CH_4} P_{CH_4})^4} \times \left(1 - \frac{P_{CO_2} P_{CH_4}}{K_{RDRM} P_{CO}^2 P_{H_2}^2} \right) \quad (26)$$

Donde el valor de K_{RDRM} es la constante de velocidad de equilibrio para la reacción RDRM, k_{RDRM} es la constante de velocidad de reacción concentrada para RDRM, $K_{H_2, H_2O, CO, CO_2, CH_4}$ es la constante de velocidad de adsorción de cada componente y $P_{H_2, H_2O, CO, CO_2, CH_4}$ es la presión para cada componente.

3.1.4. Ecuaciones para la determinación de las constantes de velocidad y constantes de velocidad de equilibrio

Las constantes de velocidad de reacción pueden ser obtenidas mediante la ecuación de Arrhenius, como se indica en la ecuación (27).

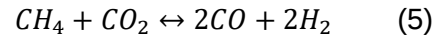
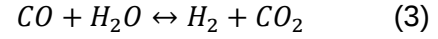
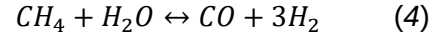
$$k_j = k_j^0 \exp \left[-\frac{E_a}{RT} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (27)$$

Donde k_j corresponde a la constante de velocidad para la j-ésima reacción, k_j^0 corresponde al factor pre-exponencial para la j-ésima reacción, E_a es la energía de activación para la j-ésima reacción, T es la temperatura de reacción, T_0 es la temperatura estándar y R es la constante de los gases ideales.

$$K_i = K_i^0 \exp \left[-\frac{\Delta H_i^{ads}}{RT} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (28)$$

Donde k_i corresponde a la constante de velocidad de adsorción del componente i , k_i^0 corresponde al factor pre-exponencial para el componente i , ΔH_i^{ads} es el calor de adsorción para el componente i del catalizador, T es la temperatura de reacción y T_0 es la temperatura estándar y R es la constante de los gases ideales.

3.1.5. Modelo cinético para la evolución del número de moles con respecto al tiempo



Una vez definidas las ecuaciones cinéticas para la determinación de las velocidades de reacción r_{SRM} , r_{WGS} y r_{RDRM} se estableció el modelo cinético que rige al proceso de gasificación con la finalidad de observar la evolución de cada componente a través del tiempo, para ello se empleó la ecuación de tasa aditiva para especies componentes de las reacciones SRM, WGS y RDRM (Adamu & Hossain, 2018).

$$R_c = \sum_j^{n_i} v_{i,j} r_j \quad (29)$$

Donde $v_{i,j}$ es el coeficiente estequiométrico del componente i en la j -ésima reacción.

Por lo tanto, en base a las ecuaciones presentadas con anterioridad, se desarrollaron las ecuaciones cinéticas para cada componente, las mismas que quedan de la siguiente manera:

$$\frac{V}{RT} \frac{dP_{H_2}}{dt} = \frac{dn_{H_2}}{dt} = R_{H_2} = (r_{WGS} + 3r_{SRM} - 2r_{RDRM}) * m_{cat} \quad (30)$$

$$\frac{V}{RT} \frac{dP_{CO}}{dt} = \frac{dn_{CO}}{dt} = R_{CO} = (-r_{WGS} + r_{SRM} - 2r_{RDRM}) * m_{cat} \quad (31)$$

$$\frac{V}{RT} \frac{dP_{CO_2}}{dt} = \frac{dn_{CO_2}}{dt} = R_{CO_2} = (r_{WGS} + r_{RDRM}) * m_{cat} \quad (32)$$

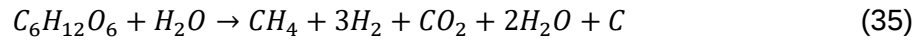
$$\frac{V}{RT} \frac{dP_{CH_4}}{dt} = \frac{dn_{CH_4}}{dt} = R_{CH_4} = (-r_{SRM} + r_{RDRM}) * m_{cat} \quad (33)$$

$$\frac{V}{RT} \frac{dP_{H_2O}}{dt} = \frac{dn_{H_2O}}{dt} = R_{H_2O} = (-r_{WGS} - r_{RDRM}) * m_{cat} \quad (34)$$

Donde V es el volumen, R es la constante de los gases ideales, T es la temperatura de reacción, $\frac{dn_i}{dt}$ corresponde a la evolución de los moles del componente i con respecto al tiempo durante la reacción de gasificación y m_{cat} corresponde a la masa del catalizador.

3.1.5.1. Determinación del número de moles de cada componente

Para la determinación del número de moles de cada componente se empleó la siguiente fórmula general en base a la ecuación (2), adaptada para el presente estudio.



A partir de la ecuación general, se tomó como referencia una solución de 1.5 mL con una concentración del 15% de glucosa en agua de acuerdo a la investigación realizada por Adamu & Hossain (2018), con lo cual se determinó el número de moles y masa de la glucosa y el agua con las siguientes ecuaciones.

$$m = V * \rho \quad (36)$$

Donde m es la masa del reactivo, V es la masa del reactivo y ρ es la densidad del reactivo.

$$n = \frac{m}{PM} \quad (37)$$

Donde n es el número de moles y PM es el peso molecular.

Mediante la fórmula general, se identificó el reactivo limitante con la finalidad de obtener el número de moles y masa de cada uno de los productos.

3.1.6. Modelo cinético para la evolución del flujo molar con respecto al eje axial Z

Partiendo de las reacciones SRM, WGS, DRDRM, se obtuvo las ecuaciones cinéticas de la variación del número de moles con respecto al eje Z. Sin embargo, con anterioridad se partió desde la variación del flujo molar con respecto al volumen del reactor ($\frac{d\dot{n}_i}{dV}$). Por lo tanto, se desarrollaron las ecuaciones cinéticas para cada componente de la siguiente manera:

$$\frac{d\dot{n}_{H_2}}{dV} = R_{H_2} = (r_{WGS} + 3r_{SRM} - 2r_{RDRM}) \quad (38)$$

$$\frac{d\dot{n}_{CO}}{dV} = R_{CO} = (-r_{WGS} + r_{SRM} - 2r_{RDRM}) \quad (39)$$

$$\frac{d\dot{n}_{CO_2}}{dV} = R_{CO_2} = (r_{WGS} + r_{RDRM}) \quad (40)$$

$$\frac{d\dot{n}_{CH_4}}{dV} = R_{CH_4} = (-r_{SRM} + r_{RDRM}) \quad (41)$$

$$\frac{d\dot{n}_{H_2O}}{dV} = R_{H_2O} = (-r_{WGS} - r_{RDRM}) \quad (42)$$

Con la finalidad de realizar el cambio con respecto al eje axial Z, se define a $\frac{d\dot{n}_i}{dV}$ con la ecuación (43).

$$\frac{d\dot{n}}{dV} = \frac{d\dot{n}}{dz} \cdot \frac{dz}{dV} \quad (43)$$

Donde:

$$\frac{dz}{dV} = \frac{1}{A_c(1-\varepsilon)} \quad (44)$$

Reemplazando la ecuación (44) en la ecuación (43) se obtiene:

$$\frac{d\dot{n}}{dV} = \frac{d\dot{n}}{dz} \cdot \frac{1}{A_c(1-\varepsilon)} \quad (45)$$

Despejando dV :

$$A_c(1-\varepsilon) \frac{d\dot{n}}{dV} = \frac{d\dot{n}}{dz} \quad (46)$$

$$dV = A_c(1-\varepsilon) dz \quad (47)$$

Por lo tanto, reemplazando el valor dV en las ecuaciones cinéticas, se obtuvo la evolución del flujo molar del componente i con respecto a z ($\frac{d\dot{n}_i}{dz}$).

$$\frac{d\dot{n}_{H_2}}{dz} = R_{H_2} = (r_{WGS} + 3r_{SRM} - 2r_{RDRM}) * A_c(1-\varepsilon) \quad (48)$$

$$\frac{d\dot{n}_{CO}}{dz} = R_{CO} = (-r_{WGS} + r_{SRM} - 2r_{RDRM}) * A_c(1-\varepsilon) \quad (49)$$

$$\frac{d\dot{n}_{CO_2}}{dz} = R_{CO_2} = (r_{WGS} + r_{RDRM}) * A_c(1-\varepsilon) \quad (50)$$

$$\frac{d\dot{n}_{CH_4}}{dz} = R_{CH_4} = (-r_{SRM} + r_{RDRM}) * A_c(1-\varepsilon) \quad (51)$$

$$\frac{d\dot{n}_{H_2O}}{dz} = R_{H_2O} = (-r_{WGS} - r_{RDRM}) * A_c(1-\varepsilon) \quad (52)$$

3.1.6.1. Determinación del flujo molar de cada componente

Una vez obtenidos el número de moles y masa de cada uno de los productos se determinó el flujo molar considerando un tiempo de reacción de 25 segundos de acuerdo a Adamu & Hossain (2018). Para ello se aplicó la ecuación (53):

$$\dot{n} = \frac{m}{t} \quad (53)$$

Donde $\dot{n}$ es el flujo molar de cada componente, m es a masa de cada componente y t es el tiempo de reacción.

3.1.6.2. Determinación del área transversal y porosidad del lecho catalítico

El área transversal se determinó mediante las especificaciones del diseño del reactor realizado por Tacuri (2020), el cual posee un diámetro interno de 3 cm. Por lo tanto, se aplicó la ecuación (54).

$$A_c = \frac{\pi D^2}{4} \quad (54)$$

Donde A_c es el área transversal, D es el diámetro interno del reactor.

La porosidad correspondiente al lecho catalítico, se determinó mediante el diseño del lecho con esferas de 1 mm empaquetadas en un diámetro de 3 cm a una altura de 10 mm. Las ecuaciones empleadas para la determinación de la porosidad son las siguientes:

$$V_{lecho} = \pi r^2 h \quad (55)$$

Donde V_{lecho} es el volumen del lecho, r y h corresponden al radio y altura del lecho respectivamente.

$$V_{Tef} = \frac{4}{3} \pi r_{esf}^3 * N^o \quad (56)$$

Donde V_{Tef} es el volumen total de las esferas y r_{esf} es el radio de las esferas, N^o es el número de esferas empaquetadas en el lecho catalítico.

Por lo tanto, la porosidad (ε) se calculó con la ecuación (57).

$$\varepsilon = \frac{V_{lecho} - V_{Tef}}{V_{lecho}} \quad (57)$$

De acuerdo al estudio realizado por Adamu & Hossain (2018), los parámetros cinéticos empleados en las ecuaciones se establecen en la tabla 4.

Tabla 4. Parámetros cinéticos para el modelo

Parámetros	Unidad	Valor
K_{SRM}	-	0.0799
K_{WGS}	-	3.640
K_{RDRM}	-	45.500
k_{SRM}^0	(mmol/gcat.s.bar ²)	4.13e ⁻²
k_{WGS}^0	(mmol/gcat.s.bar ²)	7.76e ⁻²
k_{RDRM}^0	(mmol/gcat.s.bar ²)	3.57e ⁻²
E_{SRM}	(kJ/mol)	4.23
E_{WGS}	(kJ/mol)	20.02
E_{RDRM}	(kJ/mol)	7.90
$\Delta H_{H_2}^{ads}$	(kJ/mol)	0.13
ΔH_{CO}^{ads}	(kJ/mol)	0.14
$\Delta H_{CO_2}^{ads}$	(kJ/mol)	2.06e ⁻⁹
$\Delta H_{CH_4}^{ads}$	(kJ/mol)	0.050
$\Delta H_{H_2O}^{ads}$	(kJ/mol)	0.14

$K_{H_2}^0$	(bar ⁻¹)	1.11e ⁻⁵
K_{CO}^0	(bar ⁻¹)	1.10e ⁻⁵
$K_{CO_2}^0$	(bar ⁻¹)	1.73e ⁻⁵
$K_{CH_4}^0$	(bar ⁻¹)	1.11e ⁻⁵
$K_{H_2O}^0$	(bar ⁻¹)	1.10e ⁻⁵
R	kJ/mol.K	8.314e ⁻³
T	K	877.7
T_0	K	298

Fuente: (Adamu & Hossain, 2018)

Las ecuaciones definidas de los modelos cinéticos de los productos principales de la reacción de gasificación con respecto al tiempo y eje longitudinal obtenidas con anterioridad fueron resueltas mediante el uso de Python con los parámetros indicados en la tabla 4. Además, se consideró una masa catalítica de 3.92 g, un diámetro de reactor de 0.03 m como indica la investigación de Tacuri, (2021) en su estudio “Diseño y desarrollo de reactor de lecho fijo catalítico para la gasificación de biomasa de banano en la producción de hidrógeno”.

3.2. Simulación

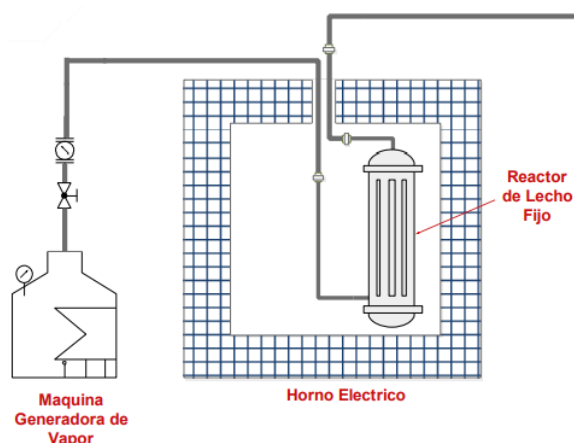


Figura 9. Esquema general del sistema de gasificación de biomasa

Fuente: (Tacuri, 2021)

La simulación se realiza en dos fases. La primera fase consistió en establecer las condiciones de operación basados en el modelo de gasificación de biomasa propuesto por Tacuri (2021) en su trabajo “Diseño y desarrollo de reactor de lecho fijo catalítico para la gasificación de biomasa de banano en la producción de hidrógeno” El modelo se puede observar en la figura 9. En esta sección se realizó la simulación de la

transferencia de calor a través del horno y tubería de entrada con vapor para determinar temperaturas de trabajo.

La segunda fase consistió en adoptar las condiciones de operación obtenidas en la simulación de la fase 1 con las condiciones globales generales e implementarlas a la gasificación de la glucosa con el modelo cinético base presentado por Adamu & Hossain, (2018) en su estudio “Kinetics of Steam Gasification of Glucose as a Biomass Surrogate over Ni/Ce–Mesoporous Al_2O_3 in a Fluidized Bed Reactor”. Esto se realiza con el objetivo de que la simulación adquiera replicabilidad y demuestre su adaptabilidad, ya que el análisis elemental de biomasa o la composición de la misma difiere dependiendo del tipo de fuente de la cual proviene la biomasa. Sin embargo; todos los tipos de biomasa tienen determinado contenido de glucosa en su composición; generalmente puede alcanzar hasta una concentración del 50.3%, por lo tanto, se asumió su fórmula química para el desarrollo del modelo cinético y en la formula global de la ecuación (35) (Cruz, 2018).

3.2.1. Transferencia de calor a través de la geometría modelo, el aislante

ANSYS WORKBENCH proporciona una serie de herramientas para realizar análisis térmicos de ingeniería. Para ello es necesario definir condiciones de contorno, una estructura con un mallado bien definido y de manera óptima, condiciones térmicas y materiales. Para estudiar la distribución de calor en todo el sistema para la reacción de gasificación de biomasa se empleó el análisis térmico de estado estacionario (Steady-State Thermal). Dicha función permite trabajar con la geometría, mallado de la misma, tipo de material y el estudio térmico, en este caso del aislante del horno.

Además, Ansys posee una extensa biblioteca de diferentes materiales con sus respectivos propiedades y características, de acuerdo a los requerimientos de la simulación. También, permite añadir nuevos materiales con las características de las mismas, entre las más importantes, la densidad, la conductividad térmica, viscosidad ccinémática, calor específico, etc.

Como primer paso se genera un sistema base en el módulo de trabajo, importando las geometrías, definiendo materiales y generando mallas; una vez hecho, se establecen condiciones de contorno para dar lugar a la simulación.

Los pasos de la simulación se describen a continuación usando como modelo el proceso aplicado a la geometría del aislante. En el caso de las demás geometrías, el protocolo a seguir es el mismo variando en materiales y condiciones de contorno.

- En el Toolbox de Ansys Workbench se seleccionó el paquete Steady-State Thermal.
- En el Steady-State Thermal, con clic derecho en la opción Geometry > Import Geometry se ingresó la geometría a la simulación.
- Para ingresar a la información de la geometría, al mallado, asignación de las condiciones térmicas para la geometría etc., se accedió en la opción Model del Steady-State Thermal.
- La designación del material se realizó como se indica en la tabla (5).

Tabla 5. Asignación del material

Tab	Setting	Value
Geometry	Material	
	> Assignment	E-glass ^(a)
a. Corresponde al material de fibra de vidrio, empleado como aislante en los hornos.		

Fuente: Propia

- Se generó mallado por defecto de la geometría modelo (aislante), mediante clic derecho en Mesh > Generate Mesh.

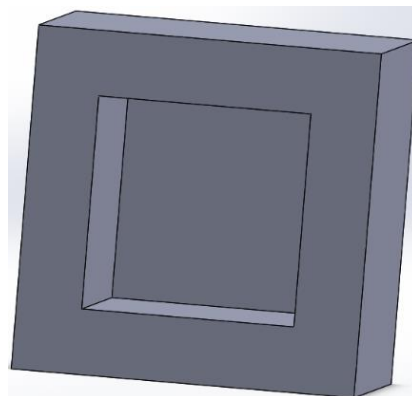


Figura 10. Geometría del aislante del horno

Fuente: Propia

3.2.1.1. Mallado

El mallado por defecto, generó una malla bastante sencilla constituida por triángulos y tetraedros, de tipo no estructurada recomendada para geometrías complejas, es decir, la red no posee un tipo de dirección referente, son menos precisas y requieren menor consumo de memoria computacional y menor tiempo de cálculo (Yupa, 2016).

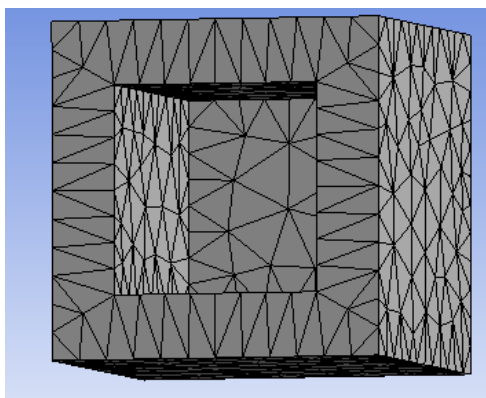


Figura 11. Malla de la geometría del aislante

Fuente: Propia

3.2.1.2. Refinamiento de malla

La mayoría de herramientas de discretización, genera mallas de manera automática, siendo necesarios únicamente ciertos parámetros como el tipo de elemento o la longitud del elemento. Dichos programas suelen arrojar como resultado mallas altamente irregulares. El refinamiento de malla permite hacer un análisis de comportamiento de los elementos cuando estos tienen un orden distinto de aproximación, presentando en la mayoría de los casos, una mayor estabilidad (Cerdeira, 2014).

3.2.1.2.1. Refinamiento simple

Con la finalidad de obtener un mallado más compacto y de mejor calidad, se empleó el método de tetraedros y un refinamiento de la malla. A continuación, se presentan los pasos a realizar:

- Clic derecho en la opción Mesh > Insert > Method.
- La configuración del método de mallado, se ajustó como se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 6. Configuración para el método de malla tetraédrico

Tab	Setting	Value
Scope	Geometry	Aislante
Definition	Method	Tetrahedrons

Fuente: Propia

- Clic derecho en la opción Mesh > Insert > Refinement.
- Se configuró el refinamiento de la malla como se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 7. Configuración para el refinamiento de la malla

Tab	Setting	Value
Scope	Geometry	Todas las caras de la geometría

La malla generada a través del método tetrédrico con refinamiento queda de la siguiente forma, generando un mayor número de nodos que permite que se encuentren más compactos para mejorar la calidad y precisión en los cálculos y resultados de la simulación. En la Figura 12, se puede presenta la malla ya generada.

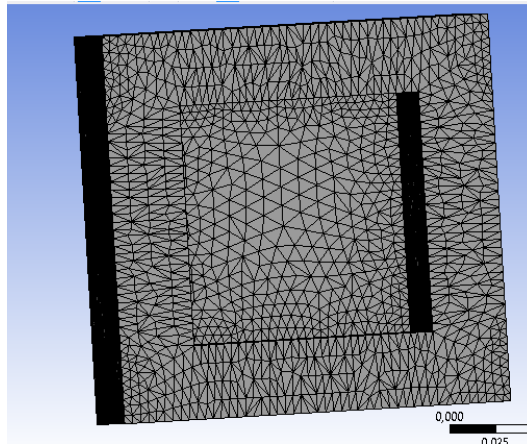


Figura 12. Malla generada a través de método tetraédrico con refinamiento

Fuente: Propia

3.2.1.2.2. Refinamiento en ICEM CFD

ICEM CFD es un paquete de generación de cuadrículas computacionales, específica para geometrías compleja, este paquete puede generar mallas estructuradas de bloques múltiples y mallas hexaédricas no estructuradas. En el caso de geometrías definidas como rectilíneas, el módulo del paquete hace una generación semiautomática con elementos no estructurados y elementos tetraédricos. En el caso de geometrías que impliquen curvas o formas cilíndricas, se realiza refinamiento con pirámides y prismas para zonas específicas dentro de la geometría (Wulf et al., 1995).

Dentro del módulo ICEM CFD:

- Clic derecho en la opción File > Import Model
- Seleccionar el formato en el que se desea importar y dar click derecho en Apply. (extensiones recomendadas .iges y .step.)
- La configuración de la geometría para visualización es:

Tabla 8. Configuración de la visualización de la geometría

Tab	Setting	Value
Geometry	Subsets	Cleared
	Points	Selected
	Curves	Selected
	Surfaces	Selected

Fuente: Propia

- Clic derecho en la opción Mesh > Global Mesh Setup > Global Mesh parameters
- Verificar que los parámetros se encuentren en sus valores por defecto.

Tabla 9. Configuración de los parámetros del Global Mesh

Tab	Setting	Value
Global Mesh Size	Scale factor	1.0
	Seed Suize	5.0
Volume Meshing Parameters	Mesh type	Tetra/Mixed
	Mesh Method	Robust (Octree)
	Edge criterion	0.2

Fuente: Propia

- Clic derecho en la opción Part Mesh Setup > prism
- Marcar las partes en las que se desea precisar el mallado (generalmente curvas)
- Clic en Apply.
- Clic derecho en la opción Mesh > Global Mesh Setup > Global Mesh parameters.

Tabla 10. Configuración en los ajustes del Prism Meshing Parameter

Tab	Setting	Value
Prism Meshing Parameters	Growwth law	Exponential
	Initial height	0.0399999
	Height ratio	1.3
	Number of layers	10
	Total Height	1.70478

Fuente: Propia

- Clic derecho en la opción Compute Mesh > Compute
- Verificar que los parámetros se encuentren en sus valores por defecto.

Tabla 11. Configuración en los parámetros de Compute

Tab	Setting	Value
Volume Mesh	Mesh Type	Tetra/mixed
Tetra/Mixed Mesh	Mesh Method	Robust (Octree)
	Create Prism Layers	Selected

Fuente: Propia

- Clic derecho en compute.

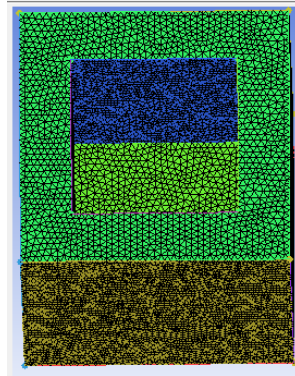


Figura 13. Malla generada en ICEM CFD

Fuente: Propia

Una vez listas las configuraciones se ejecutan los parámetros, el tiempo de mallado dependerá del tipo de refinamiento, tamaño de malla y zonas que cuenten refinamiento especial.

3.2.1.3. Condiciones de contorno

Para conocer cómo se da la distribución de temperatura en el aislante se empleó dos herramientas, temperatura y convección, las cuales intervienen en el sistema planteado. Donde la temperatura es a la cual se calentó internamente el aislante del horno, y la convección corresponde a la generada por el ambiente a través de las paredes externas del horno. En la temperatura se seleccionó las superficies o caras de la geometría en las cuales se encuentra la fuente de calor y también se especificó el valor de dicha temperatura, siendo este de 640 °C. Con esta opción la simulación permitió determinar cómo se dio la conducción a través de la pared del aislante.

En la configuración de convección se establecieron las caras que se ven afectadas, el coeficiente de convección y la temperatura ambiente a la cual están expuesta las caras. En este caso la convección se dio a través del aire y las paredes del horno, por lo que, las caras que presentan convección son aquellas que están en contacto con el exterior, con un coeficiente de transferencia de calor por convección de 5 W/m².°C cuyo valor

corresponde a la convección natural del aire, el sistema se encontró expuesto a una temperatura ambiente de 22 °C, dicho valor corresponde a la temperatura del aire para lugares cerrados, debido a que las paredes externas del horno estaban expuestas al medio ambiente.

Finalmente, para obtener y visualizar los resultados en la opción solución se encuentran los parámetros que pueden ser calculados, en este caso es de interés la distribución de temperatura de la geometría. Una vez introducidos los datos necesarios se dio lugar a la solución del problema.

Las condiciones térmicas en la simulación se ingresaron de la siguiente manera:

- En Steady-State Thermal (A5) click derecho > Insert > Temperature.
- La configuración en los ajustes de temperatura se estableció como se indica en la tabla 12.

Tabla 12. Configuración en los ajustes de temperatura

Tab	Setting	Value
Scope	Geometry	Caras internas del aislante. Figura 14.a)
Definition	Magnitude	640 °C

Fuente: Propia

- En Steady-State Thermal (A5) click derecho > Insert > Convection
- La configuración en los ajustes de convección se estableció como se indica en la tabla 13.

Tabla 13. Configuración en los ajustes de convección

Tab	Setting	Value
Scope	Geometry	Caras externas del aislante. Figura 14.b)
Definition	Film Coefficient	5 W/m ² .C
	Ambient Temperature	22 °C

Fuente: Propia

- En Solution (A6) clic derecho > Insert > Thermal > Temperature, en esta sección se mostrará los resultados de la simulación en la geometría aplicada.
- Finalmente, se seleccionó Solver, para realizar los cálculos y obtener los resultados.

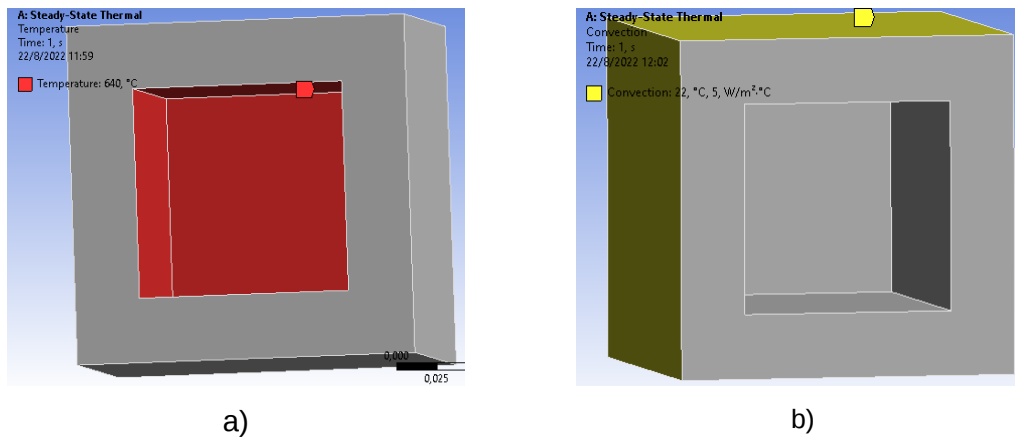


Figura 14. Superficies de las geometrías: a) Caras internas. b) Caras externas

Fuente: Propia

3.2.2. Flujo del agente gasificante

El agua, empleada como agente gasificante en el proceso de gasificación ingresó al sistema a través de una tubería a una temperatura de 76.7 °C mientras la temperatura del horno se mantenía a 350 °C. Por lo tanto, la transferencia de calor se dio durante el paso del agua a través de la tubería, para estos casos la función indicada para estudiar este tipo de comportamientos es el CFX.

3.2.2.1. Diseño de la geometría.

La geometría del agente gasificante se adaptó a la de la tubería, es decir, un tubo de 9,25 mm de diámetro y una longitud de 17 cm, dicho valor es el que recorre desde la entrada al horno hasta llegar al reactor.

3.2.2.2. Mallado

La geometría fue importada en la función Mesh, en la cual se generó la malla mediante el método tetraédrico y un refinamiento. La malla resultante se puede observar en la Figura 15, la misma que estuvo constituida por 16870 nodos.

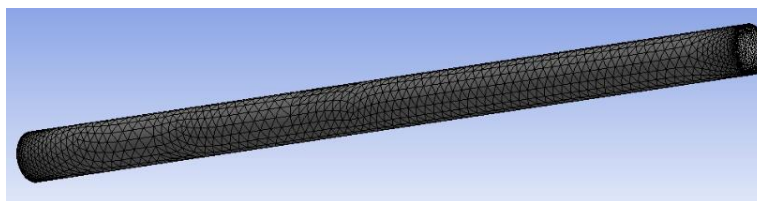


Figura 15. Malla del agente gasificante

Fuente: Propia

3.2.2.3. Pre-proceso (CFX-Pre)

Esta etapa consistió en el ingreso de información que rige el proceso de transferencia de calor, es decir, condiciones de entrada, condiciones térmicas, características del fluido como velocidades, flujos másicos, etc.

Para facilitar la identificación de las regiones de la geometría para la localización en la creación del dominio, de los límites de entrada y salida se nombró a la zona 1 como Inlet y la zona 2 como Outlet, mientras que toda la malla de la geometría se denominó como B111.



Figura 16. Regiones de la malla del agente gasificante

Fuente: Propia

3.2.2.3.1. Creación del dominio fluido

Se aplicó un modelo de transferencia de calor de energía térmica y un flujo laminar de acuerdo a los resultados de anexo 10. Para ello, se creó un dominio de fluido de toda la geometría, con los siguientes pasos. Además, los datos ingresados se muestran en la tabla 14.

- Se creó un dominio en Insert > Domain.
- En el cuadro Insertar Dominio, se colocó el nombre Vapor
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 14. Configuración para los ajustes del dominio Vapor

Tab	Setting	Value
Basic Settings	Location and Type	
	> Location	B111
	Location and Type	Fluid Domain
	> Domain Type	
	Fluid and Particle Definitions	
	> Fluid 1	
	> Material	Agua
	Domain Models	
	> Pressure	

> **Reference Pressure** 1 atm

Fluid Models Multiphase
 > Homogeneous Model (Selected)
 Heat Transfer
 > **Option** Thermal Energy

Fuente: Propia

3.2.2.3.2. Creación el límite de entrada

- Se creó un nuevo límite en Insert > Boundary > denominado Inlet.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 15. Configuración para los ajustes del límite de entrada Inlet

Tab	Setting	Value
Basic Settings	Boundary Type	Inlet
	Location	Inlet
Boundary Details	Mass and Momentum	
	> Normal Speed	0.00645 m/s
	Heat Transfer	
	> Static Temperature	76.7 °C

Fuente: Propia

3.2.2.3.3. Creación el límite de salida

- Se creó un nuevo límite en Insert > Boundary > denominado Outlet.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 16. Configuración para los ajustes del límite de Salida Outlet

Tab	Setting	Value
Basic Settings	Boundary Type	Outlet
	Location	Outlet
Boundary Details	Mass and Momentum	
	> Normal Speed	0.00645 m/s

Fuente: Propia

3.2.2.3.4. Edición del límite predeterminado Vapor

Para la simulación de la transferencia de calor a través del dominio Vapor, se modificó algunos valores que se establecieron de manera automática.

La determinación del coeficiente de transferencia de calor se determinó a través de las fórmulas correspondiente a la convección interna forzada para el flujo de un líquido con una temperatura superficial constante, en este caso se consideró que el agente gasificante tenía una temperatura de 76,7 °C, con una temperatura superficial de 350 °C. Las fórmulas empleadas fueron las siguientes:

$$Re = \frac{V_1 * D}{\nu} \quad (58)$$

Donde Re es el número de Reynolds, V_1 es la velocidad del agua, D es el diámetro interno del tubo y ν la viscosidad dinámica del fluido.

Al tratarse de una geometría cilíndrica de acuerdo con la Transferencia de calor y masa de Cengel A. Para tubos circulares el número de Nusselt presenta un valor de 3,66.

$$h = \frac{k}{D} * Nu \quad (59)$$

Donde h es el coeficiente de transferencia de calor, k es la conductividad térmica, y Nu es el número de Nusselt.

Con la finalidad de dar validez a la simulación se calculó la temperatura de salida del fluido, que posteriormente se comparó con la temperatura de salida en la simulación. La temperatura de salida fue calculada de la siguiente manera:

$$As = \pi * D * L \quad (60)$$

Donde As es el área lateral de la tubería y L es la longitud de la tubería.

$$\dot{m} = \rho_{agua} * A_{c1} * V_1 \quad (61)$$

Donde $\dot{m}$ es el flujo másico, ρ_{agua} es la densidad del agua, A_{c1} es el área transversal de la tubería.

$$Te = Ts - (Ts - Ti)e^{-\frac{As * h}{\dot{m} * Cp}} \quad (62)$$

Donde Te es la temperatura de salida, Ts es la temperatura superficial, Ti es la temperatura de entrada y Cp es el calor específico.

Los parámetros usados en las fórmulas corresponden a los del agua a una temperatura media de 213.35 °C. A continuación, se presenta una tabla con los valores necesarios para la aplicación de las fórmulas:

Tabla 17. Propiedades del agua y dimensiones de la tubería

Parámetros	Unidad	Valor
Densidad	Kg/m ³	840.300
Conductividad térmica	W/m.°C	0.650
Calor específico	J/kg.°C	4610.000
Diámetro interno	M	0.030
Longitud de la tubería	M	0.066
Velocidad del agua	m/s	6.45*10 ⁻³
Temperatura superficial	°C	350.000 °C
Temperatura interna	°C	76.700 °C
Área	m ²	6.72*10 ⁻⁵
Viscosidad cinemática	m ² /s	1.45*10 ⁻⁷

Fuente: (Cengel, 2007; Tacuri, 2021)

Una vez definidos los parámetros, se ingresó los datos en la simulación como se indica adelante.

- En el Outline, en Vapor Default > Edit.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 18. Configuración para los ajustes del límite predeterminado Housing

Tab	Setting	Value
Boundary Details	Heat Transfer	
	> Option	Heat Transfer Coefficient
	Heat Transfer	
	> Heat Trans. Coeff.	250.86 W m ⁻² K ^{-1(d)}
	Heat Transfer	
	> Outside Temperature	350 °C

Fuente: Propia

3.2.2.3.5. Configuración de valores iniciales

Los valores iniciales se establecieron de la siguiente manera:

- En Insert > Global Initialiation.
- La configuración para los ajustes fue:

Tabla 19. Ajustes de los valores iniciales

Tab	Setting	Value
Global Settings	Initial Conditions	

> Cartesian Velocity	
> Option	Automatic with Value
Initial Conditions	
> Cartesian Velocity	
> U	0 m s ⁻¹
Initial Conditions	
> Cartesian Velocity	
> V	0 m s ⁻¹
Initial Conditions	
> Cartesian Velocity	
> W	0.00645 m.s ⁻¹

Fuente: Propia

3.2.2.4. Post-proceso (CFD)

3.2.2.4.1. Creación de un plano de corte

Es importante la creación de un plano, puesto que para otros gráficos de contorno y vectoriales requieren un localizador de plano de corte. El plano fue creado como se indica a continuación:

- En Insert > Location > Plane denominado Plane 1.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 20. Configuración para los ajustes plano de corte

Tab	Setting	Value
Geometry	Definition	
	> Method	ZX Plane
	Definition	
	> X	0 m
Color	Mode	Variable
	Variable	Temperature
	Range	Global

Fuente: Propia

3.2.2.4.2. Creación de una polilínea

La polilínea es necesaria para la creación del gráfico de la caída de presión que se presenta más adelante. Para la creación de la polilínea se empleó el método de intersección de límite, el cual crea la polilínea a partir de la línea de intersección entre un objeto de límite y una ubicación, es decir, una pared y un plano, sus puntos son la línea de intersección que corta el borde de la malla de superficie.

- En Insert > Location > Polyline denominado Polyline 1.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 21. Configuración para los ajustes de la polilínea

Tab	Setting	Value
Geometry	Method	Boundary Intersection
	Boundary List	Vapor Default
	Intersect With	Plane 1
Color	Mode	Constant
	Color	Yellow
Render	Line Width	3

Fuente: Propia

3.2.2.4.3. Creación de un contorno de temperatura

También se creó contornos para observar el cambio de temperatura que presenta el agente gasificante cuando atraviesa la tubería, con la ayuda del plano creado con anterioridad.

- En Insert > Contour denominado Contour 1.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 22. Configuración para los ajustes del contorno

Tab	Setting	Value
Geometry	Locations	Plano 1
	Variable	Temperature
	Range	Global
	# of Contours	30
Render	Show Contour Bands	(Cleared)

Fuente: Propia

3.2.3. Flujo a través de la biomasa y el catalizador

Para determinar el comportamiento del flujo dentro del reactor, es necesario el uso de la herramienta CFX, el cual es un paquete de software de dinámica de fluidos computacional (CFD) que permite modelar en estados estacionarios y transitorios, flujos laminares, turbulentos, subsónicos, transónicos y supersónicos, transferencia de calor y radiación térmica, flotabilidad, flujos no newtonianos, transporte de componentes escalares que no reaccionan, flujos multifásicos, combustión, etc. ANSYS-CFX consta

de tres módulos: pre-proceso (CFX-Pre), solución (CFX-Solver) y post-proceso (CFD-Post).

3.2.3.1. Diseño de la geometría representativa del catalizador

En este caso se empleó una geometría que consta del catalizador/biomasa y la entrada y salida del flujo como se puede observar en la Figura 17, donde el diámetro del catalizador/biomasa es de 3 cm correspondiente al diámetro interno del reactor y una altura de 6.6 cm, la entrada y salida del fluido a través de las tuberías, cuyo diámetro fue de 9.25 mm, correspondiente a las tuberías de acero inoxidable de $\frac{1}{4}$.



Figura 17. Geometría del flujo a través de la biomasa y catalizador

Fuente: Propia

3.2.3.2. Mallado de la geometría

Previo al uso del CFX, se importó la geometría y se generó el mallado con la herramienta Mesh, como se lo realizó anteriormente con las otras geometrías, aplicando el método tetraédrico y refinamiento. Por lo tanto, el mallado presentó 62028 número de nodos.

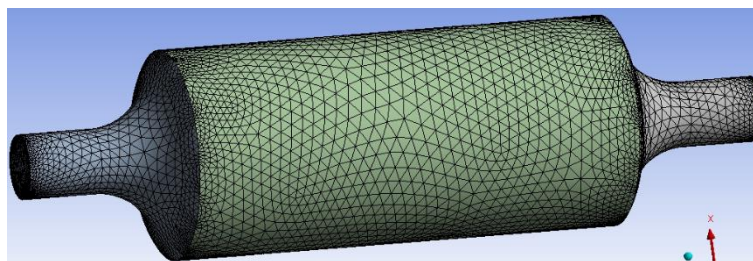


Figura 18. Malla del fluido en el reactor

Fuente: Propia

3.2.3.3. Pre-Proceso (CFX-Pre)

Se inició el pre-proceso del CFX, en donde la información de la geometría y mallado se transfirió al CFX, el mismo que posee las siguientes opciones: el Setup donde encuentra la información de la malla, ingreso de datos y condiciones de entrada y salida para la simulación, etc. La opción Solution permite dar inicio a la etapa CFX-Solver y Result corresponde a la etapa CFD-Post.

En la figura 19 a) la región B163 corresponde a la salida de la brida y tubería y B322 corresponde a la entrada de la tubería y brida. Para facilitar la identificación de las

superficies en el ingreso de datos, se identificó a las regiones de la siguiente manera:

1) PipeEnd 2, 2) PipeEnd, 3) FlangeEnd 2 y 4) FlangeEnd.

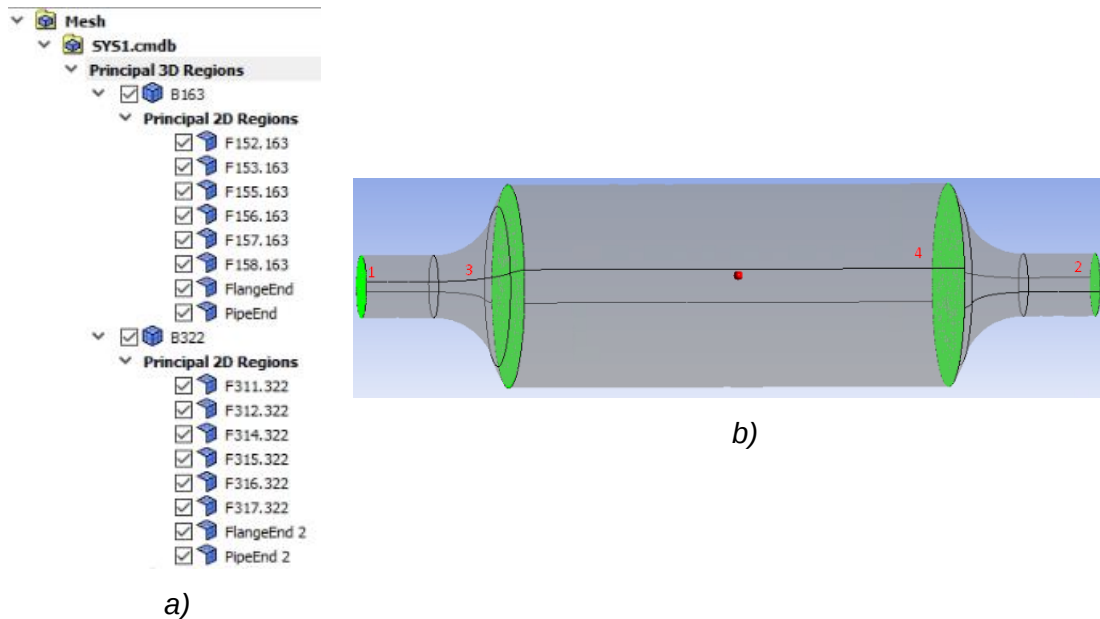


Figura 19. Malla de la geometría. a) Regiones de la mallada para las tuberías y bridas. b)

Ubicación de las regiones de la malla en las tuberías y bridas

Fuente: Propia

En la Figura 20, se identificó las regiones del catalizador denominado como Live, donde 1 corresponde a Inlet y 2 a Outlet, Housing 1 y 2 son las caras laterales del cilindro.

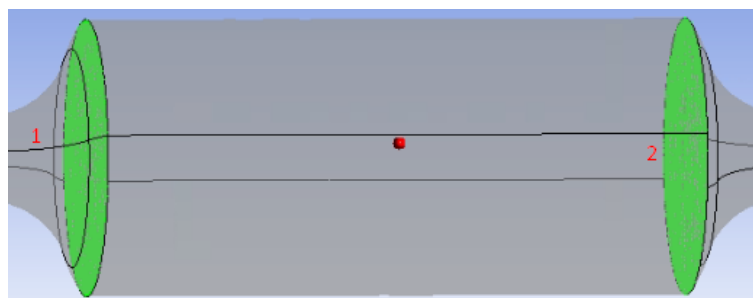


Figura 20. Regiones de la malla del catalizador.

Fuente: Propia

3.2.3.3.1. Creación de una sola región para las mallas de las tuberías y bridas

Las regiones B163 y B322, formaron parte de una sola región como se observa en la Figura 21. Para la creación de una región compuesta se logró con los siguientes pasos:

- Insert > Regions > Composite Region
- En cuadro de Insertar Región, se nombró como Cat y aceptar.
- Para la configuración de la región compuesta se siguió las indicaciones de la tabla:

Tabla 23. Configuración para los ajustes de la región compuesta

Tab	Setting	Value
Basic Settings	Dimension (Filter)	3D
	Region List	B163, B322

Fuente: Propia

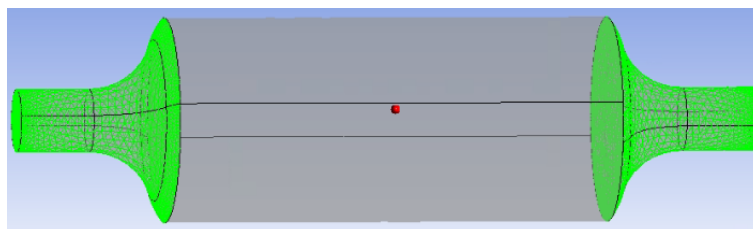


Figura 21. Región compuesta Cat

Fuente: Propia

3.2.3.3.2. Creación del dominio fluido

Para la simulación se empleó un modelo de transferencia de calor de energía térmica y un flujo laminar. Se creó un dominio de fluido con la región compuesta Cat, con los siguientes pasos. Además, los datos ingresados se muestran en la tabla 24.

- Se creó un dominio en Insert > Domain.
- En el cuadro Insertar Dominio, se colocó el nombre Pipes.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 24. Configuración para los ajustes del dominio Pipes

Tab	Setting	Value
Basic Settings	Location and Type	
	> Location	Cat
	Location and Type	Fluid Domain
	> Domain Type	
	Fluid and Particle Definitions	Añadir nuevos fluidos denominados Fluid 1, 2, 3 y 4.
	Fluid and Particle Definitions	
	> Fluid 1	
	> Material	Vapor de agua
	> Fluid 2	
	> Material	Dióxido de carbono
	> Fluid 3	

	> Material	Hidrógeno
	> Fluid 4	
	> Material	Monóxido de carbono
	Domain Models	
	> Pressure	
	> Reference Pressure	1 atm
Fluid Models	Multiphase	
	> Homogeneous Model	(Selected)
	Heat Transfer	
	> Option	Thermal Energy

Fuente: Propia

3.2.3.3.3. Creación del dominio poroso

La estructura del catalizador se modeló mediante la creación de un dominio poroso, para ello se determinó algunos parámetros tales como la caída de presión, el coeficiente de resistencia cuadrática y la densidad del área superficial.

La resistencia direccional a lo largo de la corriente está alineada con el eje Z, cuyo valor se determinó con la ecuación (62).

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = -K_Q |V| V_i \quad (63)$$

Donde K_Q es el coeficiente de la resistencia cuadrática, U_i es la velocidad local en la dirección i , $\frac{\partial p}{\partial x_i}$ es el gradiente de la caída de presión en la dirección de i .

La caída de presión se calculó mediante la ecuación de Ergun, empleada comúnmente para medios porosos.

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{150 V_0 \mu}{\phi_s^2 D_p^2} * \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + \frac{1,75 \rho V_0^2}{\phi_s D_p} * \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \quad (64)$$

Donde V_0 es la velocidad superficial o ficticia, μ es la viscosidad dinámica del fluido, ε es la porosidad, ρ es la densidad del fluido, ϕ_s es el factor de forma y D_p es el diámetro de partícula. Los valores de densidad y viscosidad dinámica del fluido fueron 0.2992 kg/m^3 y $2.5859 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$, respectivamente.

La velocidad superficial o ficticia corresponde a la velocidad del lecho catalítico, es decir, el cociente entre el caudal (Q) y el área transversal del lecho (A_c):

$$V_0 = \frac{Q}{A_c} \quad (65)$$

Otro dato necesario para la simulación es la densidad del área superficial, para obtener dicho valor se emplea la ecuación (65).

$$\sigma = \frac{A_c \varepsilon}{v} \quad (66)$$

Donde σ es la densidad del área superficial, A_c al área del catalizador, ε la porosidad del lecho catalítico y v es el volumen del lecho.

Los pasos para la creación del dominio son los siguientes:

- Se creó un nuevo dominio en Insert > Domain
- En el cuadro de Insertar dominio, se colocó el nombre de Housing.
- La configuración de los ajustes para el dominio poroso se encuentra en la tabla 25:

Tabla 25. Configuración para los ajustes del dominio Housing

Tab	Setting	Value
Basic	Location and Type	
Settings	> Location	LIVE
	Location and Type	
	> Domain Type	Porous Domain
	Fluid and Particle Definitions	
	> Fluid 1	
	> Material	Vapor de agua
	> Fluid 2	
	> Material	Dióxido de carbono
	> Fluid 3	
	> Material	Hidrógeno
	> Fluid 4	
	> Material	Monóxido de carbono
	Solid Definitions	(Añadir un nuevo sólido) Nickel
	Solid Definitions	
	> Nickel	
	> Material	Nickel
	Domain Model	
	> Pressure	
	> Reference Pressure	1 atm

Fluid	Heat Transfer	
Models	> Option	Thermal Energy
Solid	Heat Transfer	
Models	> Option	Thermal Energy
Porosity	Volume Porosity	
Settings	> Option	Value
	Volume Porosity	
	> Volume Porosity	0.46 ^(a)
	Loss Model	Directional Loss
	> Option	
	Loss Model	Superficial ^(b)
	> Loss Velocity Type	
	Loss Model	
	> Directional Loss	
	> Streakwise Direction	
	> Option	Cartesian Components
	Loss Model	
	> Directional Loss	
	> Streakwise Direction	
	> X Component	0
	Loss Model	
	> Directional Loss	
	> Streakwise Direction	
	> Y Component	0
	Loss Model	
	> Directional Loss	
	> Streakwise Direction	
	> Z Component	-1
	Loss Model	
	> Directional Loss	
	> Streakwise Loss	
	> Option	Linear and Quadratic Coeffs
	Loss Model	
	> Directional Loss	
	> Streakwise Loss	

> Quadratic Resistance Coefficient	(Selected)
Loss Model	
> Directional Loss	
> Streamwise Loss	
> Quadratic Coefficient	0 kg m ⁻⁴ (c)
Loss Model	
> Directional Loss	
> Transverse Loss	Streamwise Coeff Multiplier
> Option	
Loss Model	
> Directional Loss	
> Transverse Loss	
> Multiplier	10 ^(d)
Fluid Solid Area Density	
> Interfacial Area Den	7.67 m ⁻¹
Fluid Solid Heat Transfer	
> Heat Trans. Coeff.	250 W m ⁻² K ⁻¹ (e)

- Es la porosidad calculada en el anexo 2.
- Es la velocidad a la que viajaría el flujo si la porosidad del dominio fuera el 100%, es menor a la velocidad real.
- Valor definido en el anexo 8.
- Valor predeterminado para la pérdida transversal.
- Coefficiente de transferencia de calor para vapor sobrecalentado (convección forzada) (Cengel, 2007).

Fuente: Propia

3.2.3.3.4. Creación el límite de entrada

Los pasos realizados en la simulación para el límite de entrada fueron los siguientes:

- Se creó un nuevo límite en Insert > Boundary > Pipes denominado Inlet.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 26. Configuración para los ajustes del límite de entrada Inlet

Tab	Setting	Value
Basic Settings	Boundary Type	Inlet
	Location	PipeEnd 2
Boundary Details	Mass and Momentum	

> Normal Speedd	0.00645 m/s
Heat Transfer	
> Static Temperature	76.7 °C

Fuente: Propia

3.2.3.3.5. Creación del límite de salida

- Se creó un nuevo límite en Insert > Boundary > Pipes denominado Outlet.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 27. Configuración para los ajustes del límite de entrada Outlet

Tab	Setting	Value
Basic Settings	Boundary Type	Outlet
	Location	PipeEnd
Boundary Details	Mass and Momentum	
	> Option	Static Pressure
	Mass and Momentum	
	> Relative Pressure	0 Pa.

Fuente: Propia

Las superficies exteriores restantes se crearon de forma automáticamente a los límites predeterminados: Housing Default y Pipes Default.

3.2.3.3.6. Edición del límite predeterminado Housing

Para la simulación de la transferencia de calor a través del dominio Housing, se modificó algunos valores que se establecieron por defecto.

De la misma manera que se realizó en la simulación del agente gasificante y el calculó el coeficiente de transferencia de calor, considerando los parámetros que se encuentran en la tabla 28, cuyas propiedades del agua fueron tomadas a una temperatura media de 431.85 °C.

Tabla 28. Propiedades del agua y dimensiones del lecho

Parámetros	Unidad	Valor
Densidad	Kg/m ³	0.313
Conductividad térmica	W/m.°C	0.059
Calor específico	J/kg.°C	2088.614
Diámetro interno	m	0.030
Longitud del lecho	m	0.066
Velocidad del agua	m/s	1.33*10 ⁻³

Temperatura superficial	°C	637.200 °C
Temperatura interna	°C	226.500 °C
Área	m ²	7.07*10 ⁻⁴
Viscosidad cinemática	m ² /s	8.3013

Fuente: (Cengel, 2007; Tacuri, 2021)

Los datos para la región de Housing Default se modificaron de la siguiente manera:

- En el Outline, en Housing Default > Edit
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 29. Configuración para los ajustes del límite predeterminado Housing

Tab	Setting	Value
Boundary Details	Heat Transfer	
	> Option	Wall Heat Transfer Coefficient
	Heat Transfer	
	> Heat Trans. Coeff.	7.198 W m ⁻² k ^{-1(a)}
Solid Values	Heat Transfer	
	> Outside Temperature	637.2 °C
	Boundary Conditions	
	> Nickel	
	> Heat Transfer	
	> Option	Heat Transfer Coefficient
	Boundary Conditions	
	> Nickel	
	> Heat Transfer	
	> Heat Trans. Coeff.	7.198W m ⁻² k ^{-1(a)}
	Boundary Conditions	
	> Nickel	
	> Heat Transfer	
	> Outside Temperature	637.2 °C

a. Valor determinado en anexo 11.

Fuente: Propia

3.2.3.3.7. Configuración de valores iniciales.

Suponiendo que la velocidad inicial es la que se dará a través de la carcasa, y al considerar un flujo incompresible con la aplicación de la conservación de masa la

velocidad aproximada será el correspondiente a la V_2 , la misma que fue determinada con la ecuación (69).

$$V_2 = \frac{Q}{A_c * \varepsilon} \quad (67)$$

Los valores iniciales se establecieron de la siguiente manera:

- En Insert > Global Initialiation.
- La configuración para los ajustes fue:

Tabla 30. Ajustes de los valores iniciales

Tab	Setting	Value
Global Settings	Initial Conditions	
	> Cartesian Velocity	
	> Option	Automatic with Value
	Initial Conditions	
	> Cartesian Velocity	
	> U	0 m s ⁻¹
	Initial Conditions	
	> Cartesian Velocity	
	> V	0 m s ⁻¹
	Initial Conditions	
	> Cartesian Velocity	
	> W	0.00133m.s ⁻¹

Fuente: Propia

3.2.3.3.8. Configuración del control del solucionador

- En Insert > Solver > Solver Control
- Se realizó los siguientes ajustes:

Tabla 31. Ajustes del control del solucionador

Tab	Setting	Value
Basic Settings	Convergence Control	
	> Fluid Timescale Control	
	> Timescale Control	Physical Timescale
	Convergence Control	
	> Fluid Timescale Control	
	> Physical Timescale	0.04 s

Fuente: Propia

Una vez ingresada toda la información necesaria en el pre-proceso, se dio inicio a la solución de la simulación en la opción Define Run, el proceso de resolución se llevó a cabo por CFX-Solver.

3.2.3.4. Post-proceso (CFD-Post)

En esta etapa se muestran los resultados de la simulación, donde fue posible analizar la distribución de temperatura, presión y velocidad. Para ello se crearon planos, polilíneas, superficies, vectores en el plano, contornos, gráficos.

3.2.3.4.1. Creación de un plano de corte.

El plano fue creado como se indica a continuación:

- En Insert > Location > Plane denominado Plane 1.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 32. Configuración para los ajustes plano de corte

Tab	Setting	Value
Geometry	Definition	
	> Method	YZ Plane
	Definition	
	> X	-0.012 m
Color	Mode	Variable
	Variable	Temperature ^a
	Range	Global

a. Se puede seleccionar otras variables como presión, temperatura, velocidades, fracciones volumétricas, etc.

Fuente: Propia

3.2.3.4.2. Creación de una polilínea

- En Insert > Location > Polyline denominado Polyline 1.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 33. Configuración para los ajustes de la polilínea

Tab	Setting	Value
Geometry	Method	Boundary Intersection
	Boundary List	Housing Default, Pipes Default
	Intersect With	Plane
Color	Mode	Constant

	Color	Yellow
Render	Line Width	3

Fuente: Propia

3.2.3.4.3. Creación de un contorno de presión

Se crearon contornos para observar la caída de presión a través del cuerpo catalítico, con la ayuda del plano creado con anterioridad.

- En Insert > Contour denominado Contour 1.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 34. Configuración para los ajustes del contorno

Tab	Setting	Value
Geometry	Locations	Plano 1
	Variable	Pressure ^a
	Range	Global
	# of Contours	30
Render	Show Contour Bands	(Cleared)

a. Se puede seleccionar otras variables como presión, temperatura, velocidades, fracciones volumétricas, etc.

Fuente: Propia

3.2.3.4.4. Creación de gráficos de presión versus la coordenada Z.

Para analizar la caída de presión a través del catalizador se creó un gráfico de la presión vs la coordenada Z. Además, se puede crear otros gráficos con otras variables.

- En Insert > Chart denominado Chart 1.
- La configuración de los ajustes fue:

Tabla 35. Configuración para los ajustes del gráfico de presión vs el eje Z

Tab	Setting	Value
General	Title	Caída de presión a través del catalizador
Data Series	Name	Caída de presión
	Data Source	
	> Location	Polyline 1
X Axis	Data Selection	
	> Variable	Z
Y Axis	Data Selection	

Line Display	> Variable	Pressure ^a
	Pressure Drop	(Selected)
	Line Display	
	> Line Style	None
Chart Display	Line Display	
	> Symbols	Rectangle
	Sizes	
	> Symbol	3

a. Se pueden crear otros gráficos cambiando la variable a temperatura, velocidad o presión con respecto a la coordenada Z.

Fuente: Propia

4.1. Distribución de la temperatura a través del sistema

4.1.1. Modelo unidimensional de la distribución de temperatura.

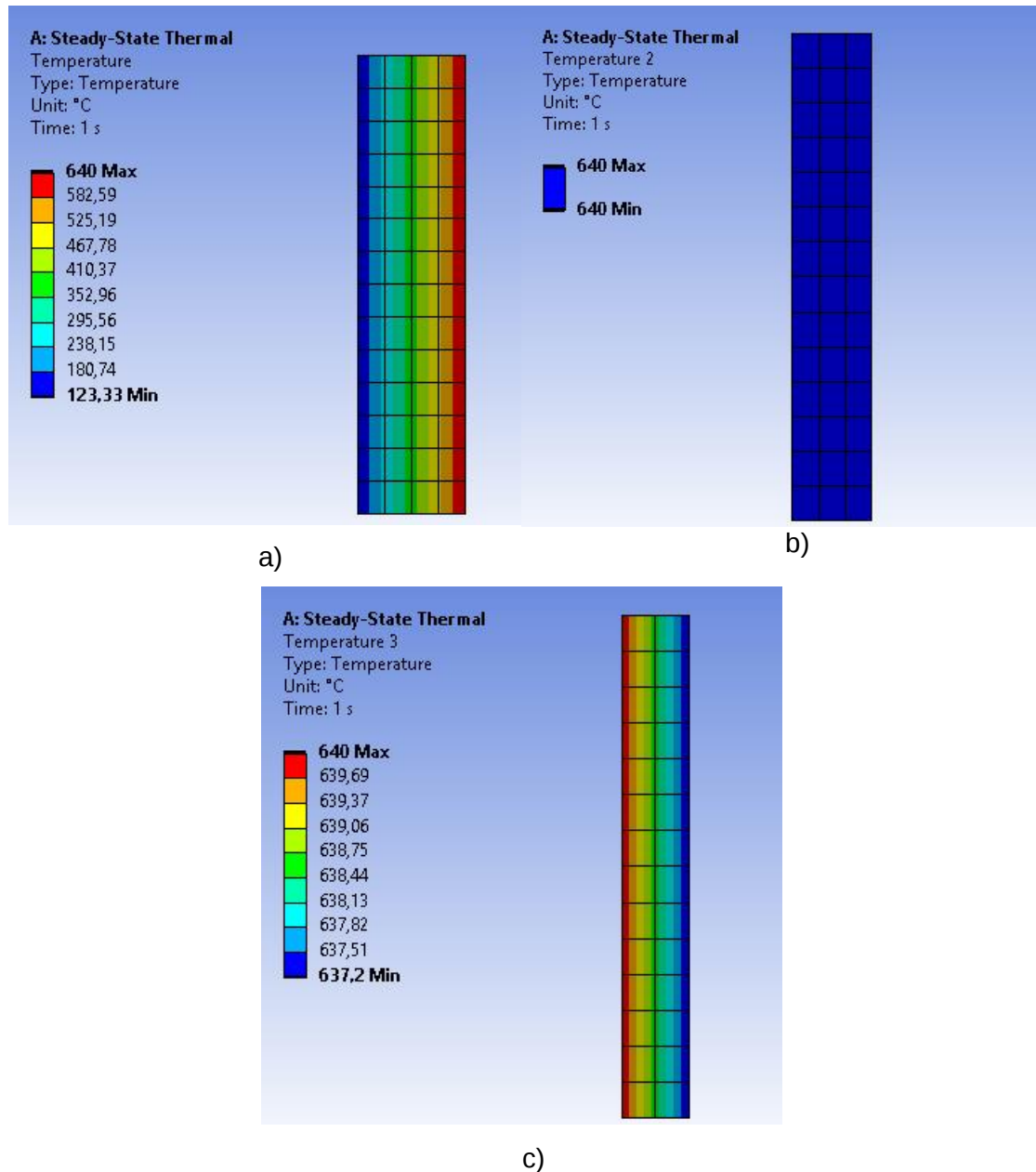


Figura 22. Distribución de temperatura del modelo unidimensional a) A través del aislante. b) A través del aire del reactor. c) A través del reactor

Fuente: Propia

En la figura 22 a), b), c) se observa la distribución de temperatura a través del modelo unidimensional de la estructura original, representado por placas. Se obtuvieron resultados para la distribución en cada sistema, el aislante, entre el aire y el reactor y a través de las paredes del reactor. La distribución de calor está representada por un

esquema de colores que adopta el patrón de arcoíris; la zona de mayor temperatura se indica por el color rojo disminuyendo hasta la de menor temperatura representada por el color azul.

Mediante los resultados obtenidos de la solución matemática anexo 1, se puede comprobar que la simulación se lleva de manera correcta, pues la variación en la temperatura obtenida en los dos métodos, es nula.

4.1.2. Modelo tridimensional de la distribución de temperatura.

4.1.2.1. Temperatura en el aislante del horno.

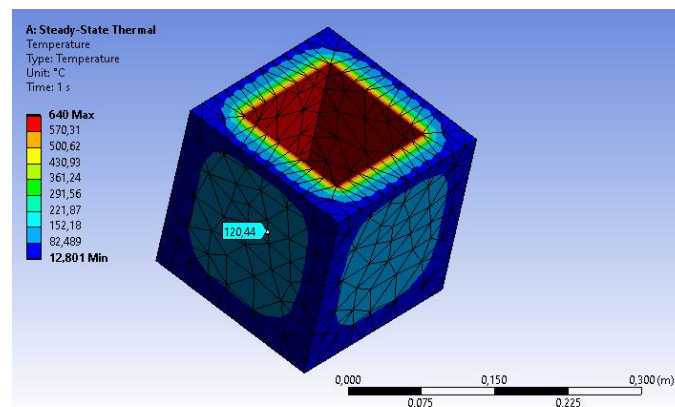


Figura 23. Distribución de temperatura a través del aislante del horno

Fuente: Propia

El calor transferido por conducción a través del aislante se presenta en la Figura 23. La distribución de calor se llevó a cabo debido a una diferencia de temperatura desde la zona de mayor temperatura hacia la zona de menor temperatura. El aire del horno se calentó hasta 640 °C, representados por el color rojo más intenso, las paredes del aislante se encuentran en convección con el aire del ambiente a una temperatura de 22 °C, con un coeficiente de transferencia de calor por convección de $5 \frac{W}{m^2 \cdot K}$. Además, al tratarse de un material aislante su conductividad térmica es de $0.04 \frac{W}{m \cdot K}$; esto hace que, en la superficie de las paredes externas, la temperatura alcance alrededor de 120 °C, intentado conservar el calor. Estos resultados coinciden con los del modelo unidimensional mostrados en la Figura 22.a) y los resultados calculados matemáticamente mostrados en el anexo 1.

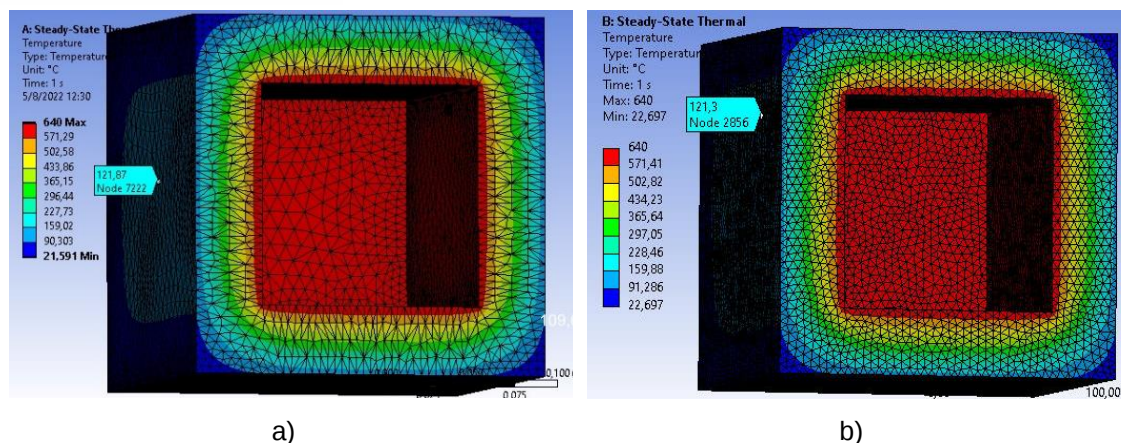


Figura 24. Distribución de temperatura en el aislante a) Refinamiento simple b) Refinamiento en ICEM CFD

Fuente: Propia

Tabla 36. Número de nodos en las mallas del aislante dentro del horno

Tipo de refinamiento	Nº de nodos
Por defecto	3865
Simple	48206
ICEM CFD	127425

Fuente: Propia

En la Figura 23.a) se observa la transferencia de calor a través de la estructura con refinamiento simple, tal y como lo muestra la tabla 36, el número de nodos se incrementó hasta 48206; en este caso, la temperatura de la superficie en la pared del aislante, tuvo apenas una variación de 1 °C llegando a ser de aproximadamente 121 °C. En la Figura 24.b) se encuentra la malla obtenida del refinamiento en ICEM CFD, el número de nodos aumentó hasta 127425, en este caso, la variación en la temperatura de la pared del aislante es apenas de 0.47 de diferencia. Esta pequeña variación, en relación con el incremento en el número de nodos, nos permite observar que, aunque el refinamiento se vuelva más regular, la variación en la forma en la que se distribuye el calor, no es significativa. Lo que nos indica que, para este caso la calidad de la malla no influye significativamente en los resultados obtenidos.

4.1.2.2. Temperatura en el aire dentro del horno.

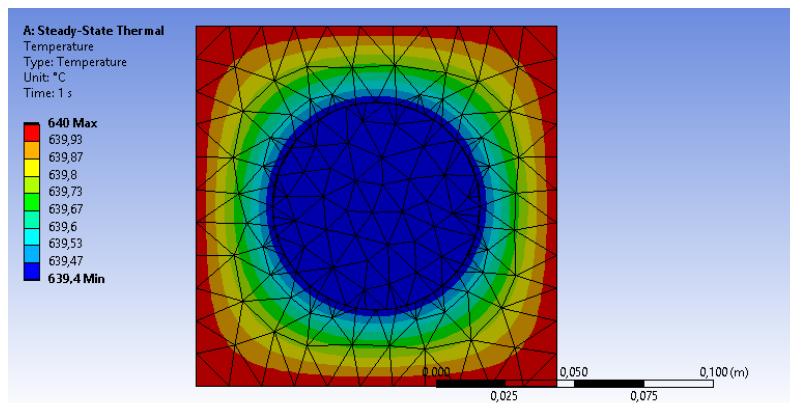


Figura 25. Distribución de temperatura en el aire del horno

Fuente: Propia

La distribución de calor a través del aire del horno se presenta en la Figura 25. El aire del horno se calentó hasta 640 °C, representado por el color rojo; el color azul representa la zona de contacto entre el aire y el reactor. El calor se transfirió en este sistema mediante convección del aire caliente hacia las paredes del reactor, con un coeficiente de transferencia de calor por convección de $30 \frac{W}{m^2 \cdot K}$. La conductividad térmica del acero es de $60.5 \frac{W}{m \cdot K}$; razón por la cual, la temperatura en la zona que representa la superficie del reactor, alcanza los 639.41 °C; misma que presenta Tacuri, (2021) en su trabajo “Diseño y desarrollo de reactor lecho fijo catalítico para gasificación de biomasa de banano en la producción de hidrógeno”.

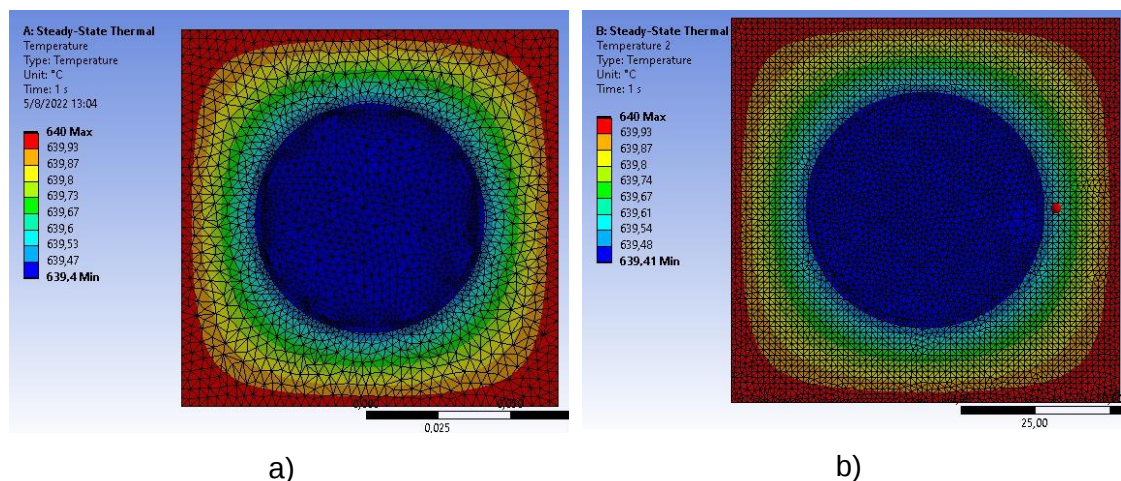


Figura 26. Distribución de temperatura en el aire del horno a) Refinamiento simple b)

Refinamiento en ICEM CFD

Fuente: Propia

Tabla 37. Número de nodos en las mallas del aire dentro del horno

Tipo de refinamiento	N° de nodos
Por defecto	5452
Simple	64659
ICEM CFD	210734

Fuente: Propia

Usando un refinamiento simple, como se muestra en la Figura 26.a) y en la tabla 37 el número de nodos se incrementó hasta 64659; por otra parte, usando el módulo especial para mallado ICEM CFD, se logró incrementar la cantidad de nodos hasta 210734, esto se muestra en la Figura 26.b) y tabla 37. La diferencia en uniformidad de mallado, es fácilmente visible, los elementos se acomodan a la estructura general generando el aumento en el número de nodos. La temperatura establecida del aire del horno fue de 640 °C, por lo que esta no presenta variación, la zona azul que representa las paredes del reactor, presenta una variación de 0.01 °C por lo que incluso un mallado más refinado, no implicó una variación significativa en los resultados.

4.1.2.3. Temperatura en el reactor

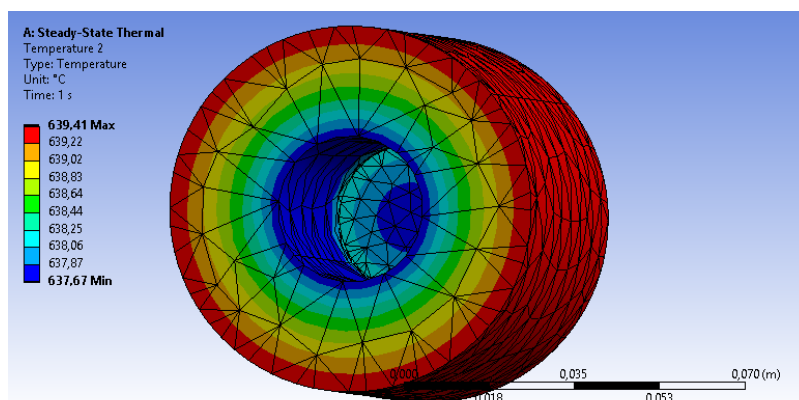


Figura 27. Distribución de temperatura a través del reactor

Fuente: Propia

En la Figura 26 se presenta la distribución de calor a través del reactor, la temperatura en la superficie del reactor fue de 639.41 °C (Tacuri, 2021); misma que pudo comprobarse en la simulación que se observa en la Figura 25. La temperatura introducida para el aire dentro del reactor fue de 386 °C con un coeficiente de transferencia de calor por convección de $30 \frac{W}{m^2 \cdot K}$, representando el cuerpo de aire, dicha temperatura fue físicamente presentada por (Tacuri, 2021) en su trabajo “Diseño y desarrollo de reactor lecho fijo catalítico para gasificación de biomasa de banano en la producción de hidrógeno”.

La zona azul representa la superficie de contacto del aire dentro del horno con las paredes del mismo, hubo una ligera pérdida de calor que se ve reflejada en el valor de 637.67 °C en dicha zona.

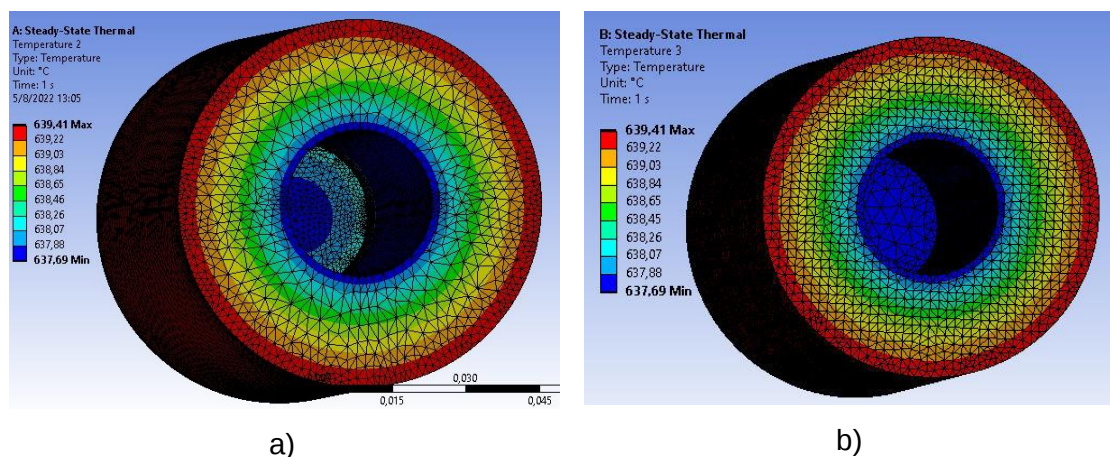


Figura 28. Distribución de temperatura en el reactor a) Refinamiento simple b) Refinamiento ICEM CFD

Fuente: Propia

Tabla 38. Número de nodos en las mallas del reactor del horno

Tipo de refinamiento	Nº de nodos
Por defecto	4417
Simple	52874
ICEM CFD	59645

Fuente: Propia

Al igual que en los resultados anteriores, se presentan las distribuciones de calor a través del reactor con sus respectivos refinamientos. En el mallado simple, se consiguió elevar el número de nodos hasta 52874, mientras que usando ICEM CFD, este valor aumentó hasta 59645; resultados que se presentan en la tabla 38 y las figuras 28 a) y b), respectivamente. Al igual que los resultados anteriores, es fácilmente visible una malla más uniforme y elementos más regulares. No se presenta variación en la zona de principal interés que es la de contacto entre las paredes internas del reactor y el aire dentro.

4.1.3. Cambio de temperatura del agente gasificante

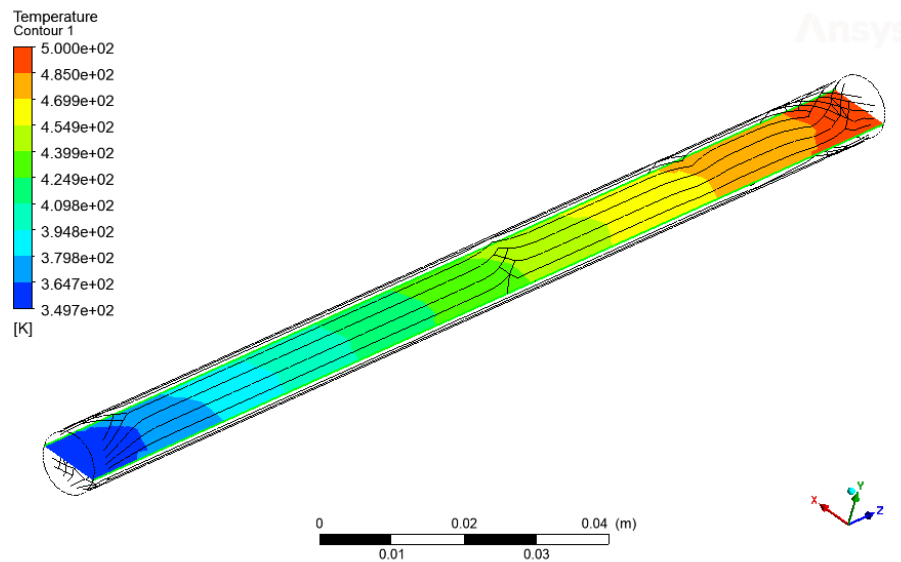


Figura 29. Temperatura del agente gasificante a través de la tubería

Fuente: Propia

El agua empleada como agente gasificante recorrió una longitud de 17 cm dentro del horno hasta llegar al reactor, recorrido en el cual aumentó su temperatura considerablemente, gracias al haber estado sometida a una temperatura externa de 350 °C, puesto que ingresó a una temperatura de 76.7 °C, presentando un coeficiente de transferencia de calor de 250.86 W/m².°C, según los cálculos realizados en el anexo 6. De acuerdo a la simulación, la temperatura de salida fue de 226.85 °C como se puede observar en la figura 30, pudiendo observar cómo se da el aumento de su temperatura a lo largo de la tubería. Por otra parte, en los resultados obtenidos en los cálculos del anexo 7, la temperatura de salida fue de 219.41 °C, presentan una ligera variación de 7.44 °C, entre los resultados de la simulación y los cálculos matemáticamente. De esta forma se logró obtener e identificar la temperatura de entrada del agente gasificante al reactor, pudiendo generar vapor sobrecalentado necesario para que se lleve a cabo la reacción.

4.2. Comportamiento del fluido dentro del reactor

4.2.1. Velocidad a través del reactor.

Como se muestra en las Figuras 31 y 32, la velocidad del fluido en la tubería es de 0.0065 m/s, una vez que entra al lecho de biomasa y catalítico, presentó una disminución considerable al tener que atravesar todo el lecho. En la parte central del reactor el flujo tuvo una velocidad de aproximadamente 0.00185 m/s cercana a la velocidad estimado en los cálculos presentados en el anexo 13. También se observa

que la velocidad a medida que está más cerca de las paredes del reactor tiende a cero, fenómeno que puede ser observado de mejor manera en la Figura 30.

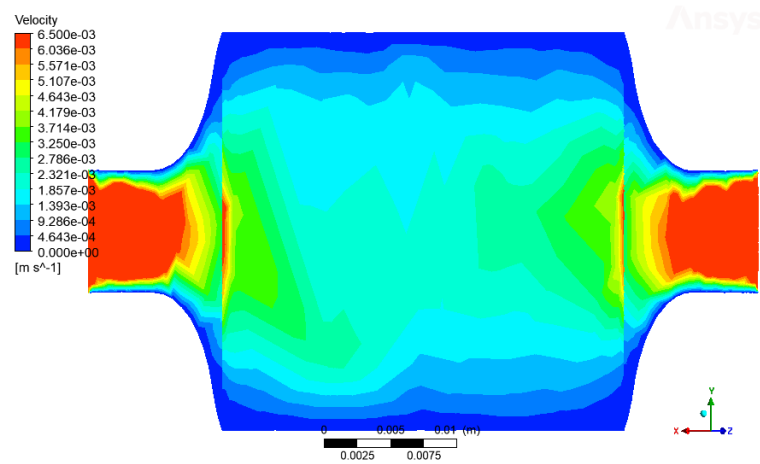


Figura 30. Comportamiento de la velocidad del fluido

Fuente: Propia

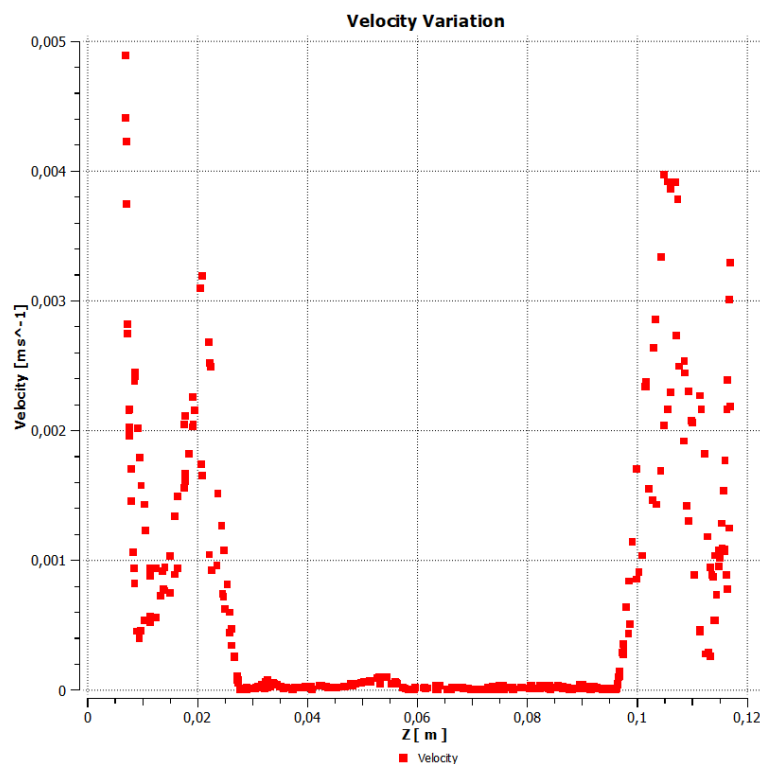


Figura 31. Velocidad del fluido a través de la coordenada Z

Fuente: Propia

4.2.2. Temperatura a través del reactor.

En las Figuras 33 y 34 nos indica la distribución de temperatura a lo largo del sistema, de acuerdo a la simulación la temperatura de salida del agente gasificante presentó un valor de 226.85 °C, y una temperatura en la pared interna de 637.2 °C, cuyo dato fue

obtenido previamente. Por lo tanto, el ingreso del fluido al reactor y al ser expuesta a dicha temperatura, ésta aumenta considerablemente, muy cercana a la temperatura del horno de 640 °C. La parte central del lecho adquirió aproximadamente 604.7 °C debido a la presencia del lecho de la masa y el catalizador, dicha temperatura es la necesaria y suficiente para llevar a cabo la gasificación de la biomasa, la misma que fue empleada en la simulación de la reacción de gasificación. Finalmente el fluido presentó una temperatura de salida 633.8 °C, que en comparación con la calculada en el anexo 12, tuvo una variación de 3.4 °C.

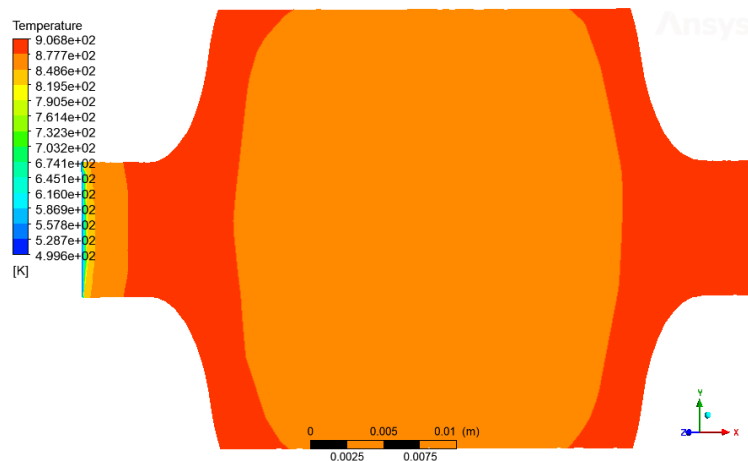


Figura 32. Distribución de temperatura del fluido

Fuente: Propia

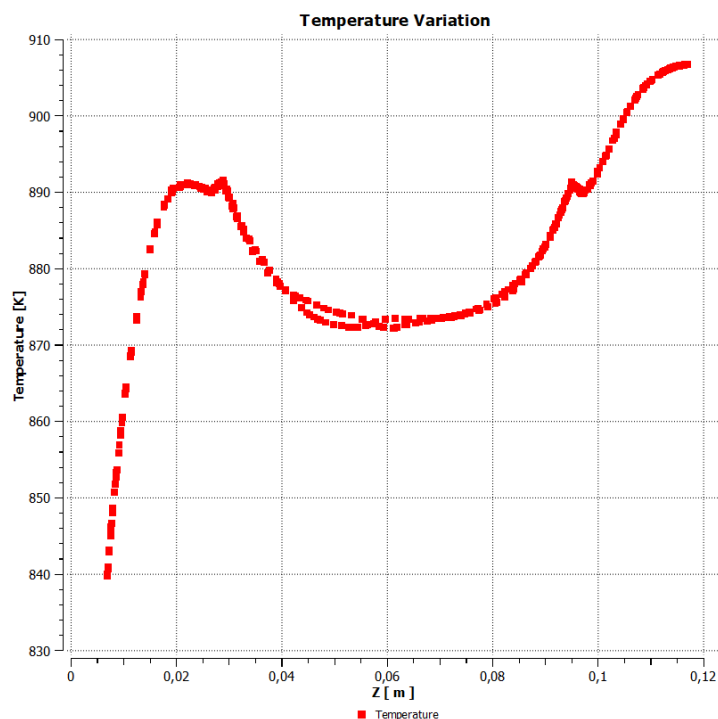


Figura 33. Variación de temperatura con respecto al eje Z

Fuente: Propia

4.2.3. Caída de presión a través del reactor.

En las Figuras 35 y 36 debido a resistencia que presenta el fluido a pasar a través del lecho de la biomasa y el catalítico, se generó una caída de presión a medida que el vapor y los gases generados atravesaron el reactor, provocando al final una presión negativa, es decir, inferior a la atmosférica o subatmosférica. Debido a este fenómeno los gases se expandan al disminuir su densidad y ascienden a través del reactor, permitiendo la salida de los mismos, aumentando también la velocidad a la salida del reactor como se evidencia en las figuras 31 y 32.

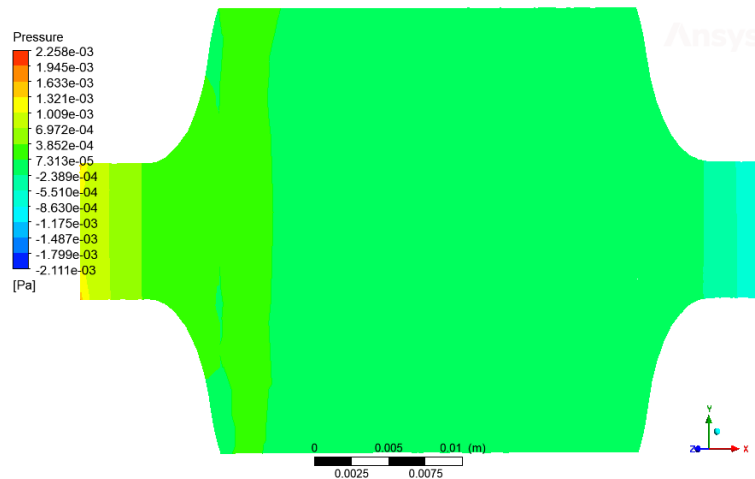


Figura 34. Variación de la presión a través del reactor

Fuente: Propia

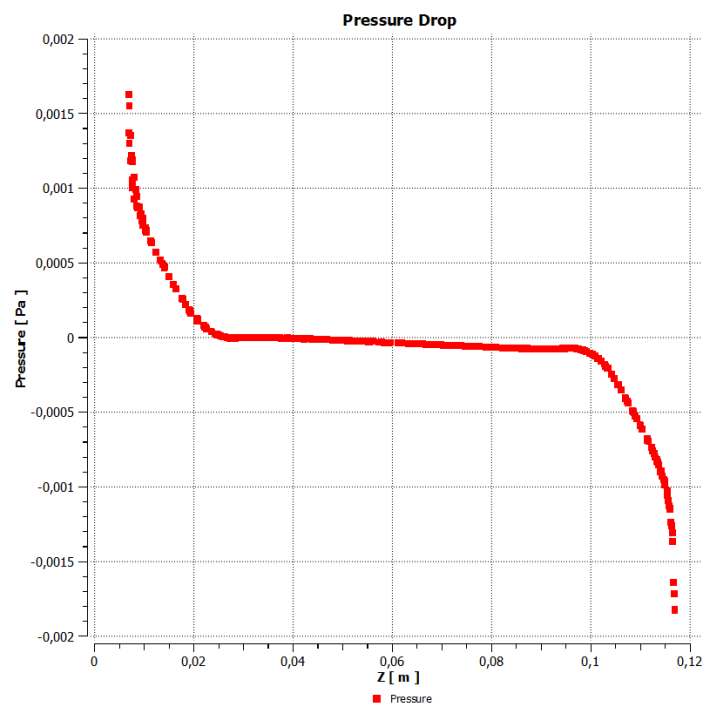


Figura 35. Caída de presión con respecto al eje Z

Fuente: Propia

4.3. Simulación de la reacción de gasificación

4.3.1. Evolución del número de moles con respecto al tiempo

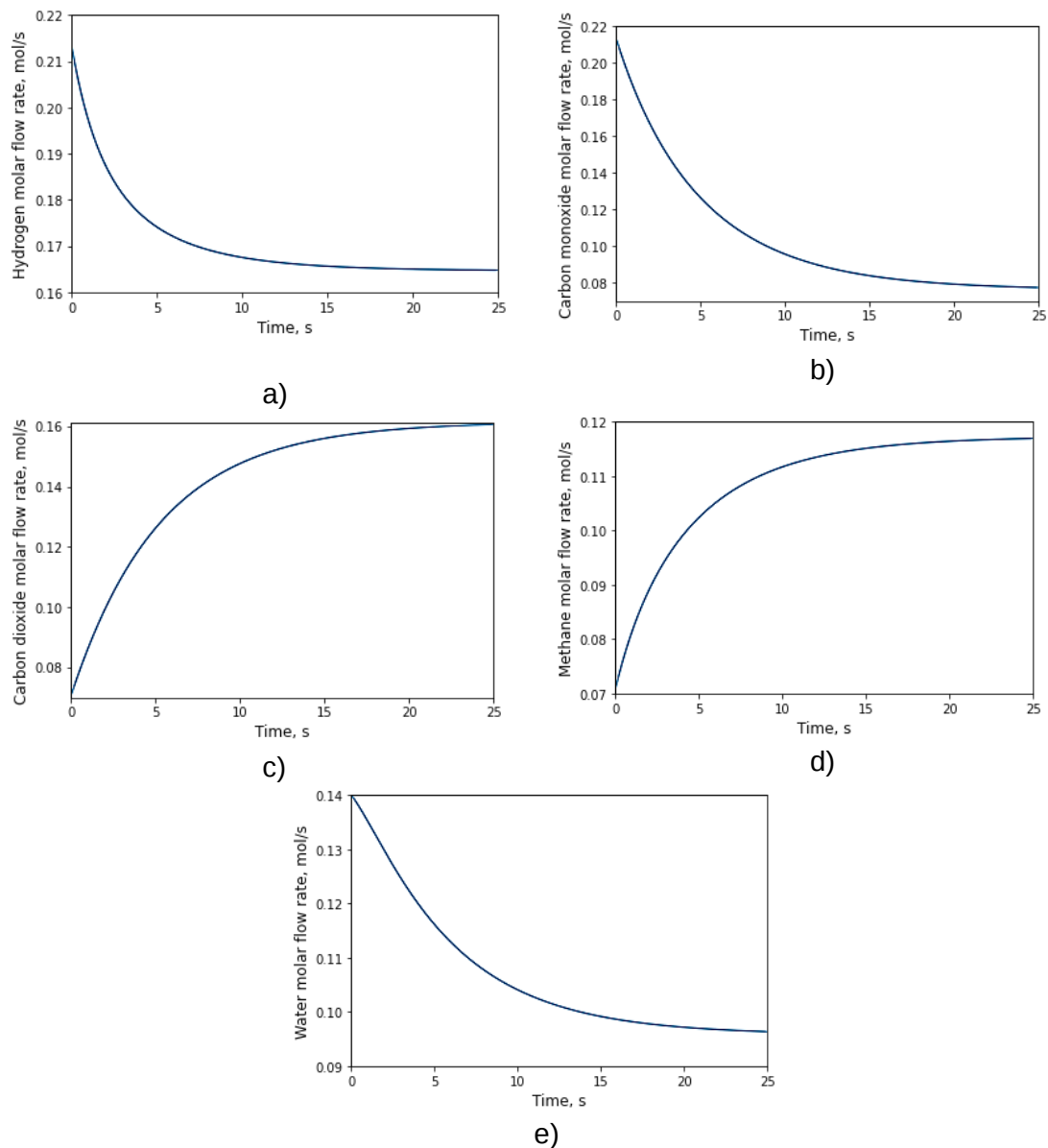


Figura 36. Evolución del comportamiento de flujos molares resultantes de la reacción de gasificación de glucosa a través del tiempo. a) Flujo de Hidrógeno b) Flujo de monóxido de carbono b) Flujo de dióxido de carbono d) Flujo de metano e) Flujo de agua.

Fuente: Propia

En la Figura 37 c) y d), es evidente que existe un aumento en la producción de dióxido de carbono y metano ya que estos son dos productos finales tanto en WGS y en RDRM. Tanto la generación de componentes como la gasificación de la glucosa alcanza un

punto estable y se vuelve constante a partir de cierto tiempo de residencia (Chowdhury et al., 2018).

En la figura 37.a) muestra la evolución en la obtención de hidrógeno; al ser un producto que se convierte en reactivo en la reacción de reformado en seco de metano RDRM, presenta una caída en la evolución de la curva hasta que se estabiliza aproximadamente en 0.16 mol/s. Salinas & García (2019) en su trabajo “Producción de hidrógeno a través de la gasificación de glucosa usando catalizadores de 5% Ni con 2% de La, Ce y Mg y deducción de una ecuación de velocidad de reacción intrínseca”; reporta valores resultantes aproximados a 0.3 mol/s para temperaturas cercanas a los superiores a 600 °C y catalizadores con contenidos de níquel superiores. Cruz (2018), en su estudio “Producción de hidrógeno a través de la gasificación de glucosa usando catalizadores de γ -Al₂O₃ con Ni, Ce y La e interpretación de resultados usando un modelo No-estequiométrico”, en el cual hace uso de la glucosa como modelo de biomasa, obtiene los valores más altos de producción de hidrógeno usando una temperatura de hasta 600 °C en un tiempo de reacción de 30 segundos.

La reducción significativa final de monóxido de carbono Figura 37.b), a comparación con la producción de Hidrógeno Figura 37.a), muestra que en la reacción RDRM, que presenta como reactivos a estos dos elementos, se consume principalmente CO. Esto tiene sentido observando los flujos molares obtenidos siendo 0.16 mol/s para el H₂ y 0.08 para CO.

La presencia de monóxido de carbono, como un agente reductor fuerte durante un ciclo redox, produce además de hidrógeno, dióxido de carbono (Chowdhury et al., 2018). Tal y como se observa en la figura 37.c), ocurre un incremento progresivo en la generación de CO₂ hasta alcanzar un flujo constante de 0.16 mol/s. Observado las reacciones que ocurren en la gasificación de glucosa, se atribuye este comportamiento a la formación de tales productos en WGS y RDRM.

La figura 37.d) muestra la evolución de la producción de metano que corresponde a RDRM en donde se forma como producto final, sin embargo, su formación no prima sobre la formación de CO₂ probablemente porque éste último también se obtiene como producto en WGS y desde ahí va en aumento hasta finalizar la reacción. El caudal final del metano es de 0.12 mol/s; Si el metano se forma únicamente por la reacción de metanización, las tendencias tanto del CO y H₂, disminuirá con el tiempo (Chowdhury et al., 2018); sin embargo, al ser uno de los caudales más bajos, demuestra que WGS predomina sobre las reacciones de metanización.

En la figura e) se puede observar el comportamiento de H_2O ; esta siempre se consume como reactivo tanto en WGS como en SRM, por lo tanto, su curva decrece hasta que naturalmente alcanza un flujo constante de 0.10 mol/s.

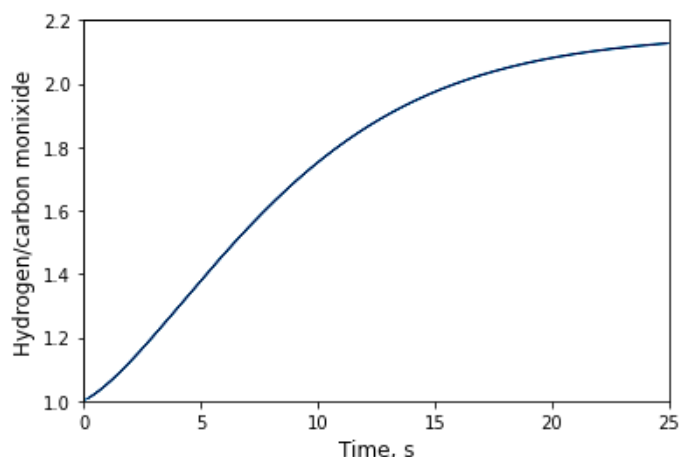
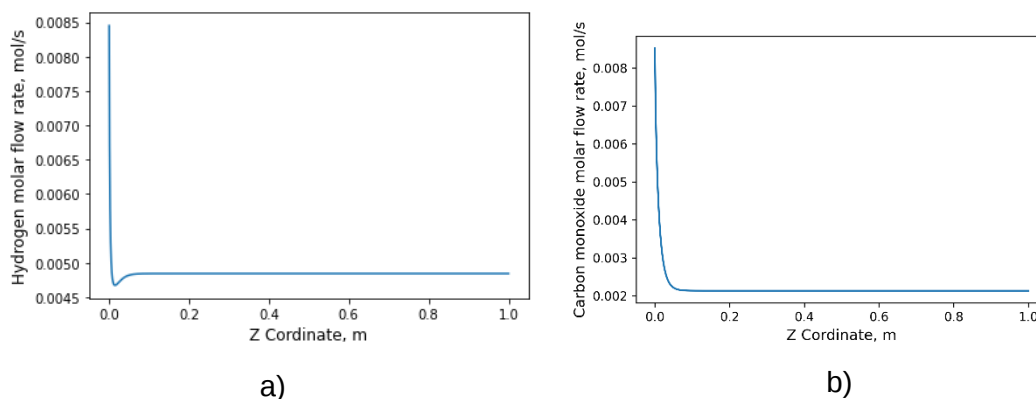


Figura 37. Relación Hidrógeno/Monóxido de Carbono con respecto al tiempo

Fuente: Propia

La Figura 38 muestra una relación constante $H_2:CO$ de 2.2 aproximadamente. (Gómez, 2019) en su trabajo “Catálisis Heterogénea para el Aprovechamiento Energético de la Biomasa”, reporta valores cercanos o iguales a 2 para lograr un óptimo aprovechamiento del hidrógeno como caudal de alimentación para la producción de etanol, nafta y tecnología que haga uso de este tipo de gas. Generalmente, una relación $H_2:CO$ elevada, se presenta cuando se trabaja a temperaturas altas, sobrepasando los 500 °C, llegando a ocupar rangos entre 1.7- 2 (Song & Guo, 2006), cumpliendo con lo presentado por el estudio mismo que se llevó a cabo a 604,05 °C.

4.3.2. Evolución del número de moles con respecto al eje longitudinal



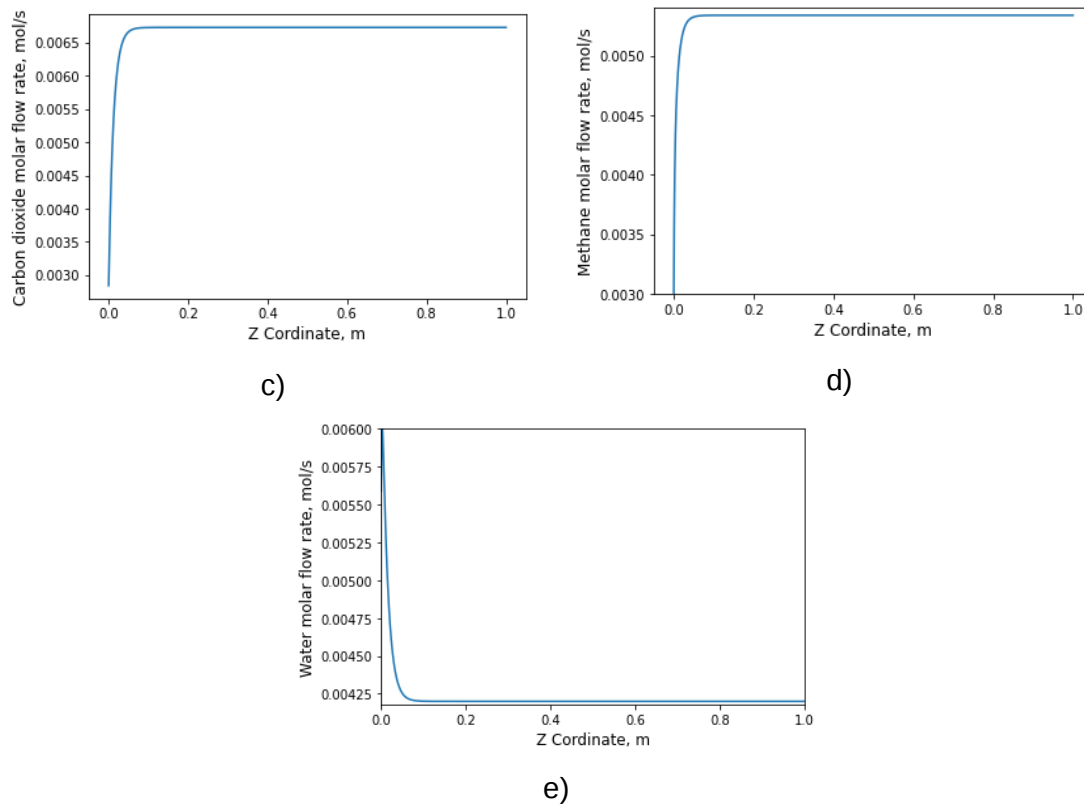


Figura 38. Evolución del comportamiento de flujos a través del eje axial z. a) Flujo de Hidrógeno b) Flujo de monóxido de carbono c) Flujo de dióxido de carbono d) Flujo de metano e) Flujo de agua.

Fuente: Propia

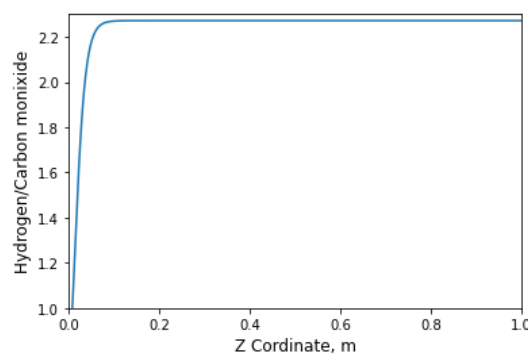


Figura 39. Relación Hidrógeno/Monóxido de Carbono con respecto al eje Z

Fuente: Propia

La Figura 39 muestra la evolución del flujo molar a través del eje longitudinal; este apartado se hizo aumentando la presión hasta 2 bares para estudiar cambios significativos en la gasificación. De igual manera que en la Figura 37, en cada curva se observan comportamientos exactamente similares en cuanto a tendencia.

La Figura 39.a) muestra una caída medianamente significativa hasta que alcanza el estado estable. Esto se explica porque el hidrógeno se consume en RDRM. Lo mismo

ocurre en la Figura 39.b) cuya tendencia disminuye debido a que se consume en WGS que es la reacción que prima. En el caso del dióxido de carbono cuyo comportamiento se exhibe en la figura 39.c) cuya tendencia es creciente porque, se genera únicamente en WGS siendo esta la reacción predominante. La reacción de reformado en seco de metano, muestra la formación de metano en conjunto con dióxido de carbono; a pesar de tener una tendencia creciente similar, se produce en menor cantidad que CO_2 , esto se puede observar en la figura 39.d). En WGS y SRM, uno de los reactivos es agua, este consumo lo muestra la figura 40 Finalmente, se obtuvo la misma relación $\text{H}_2:\text{CO}$ siendo la misma resultante que en el estudio con respecto al tiempo.

CONCLUSIONES

Dadas las limitaciones del trabajo base, se presentó un modelo que adapta condiciones reales de trabajo verificadas luego de haber realizado una primera simulación térmica en Ansys con la posterior simulación de la cinética de la reacción en Python con un modelo de biomasa, glucosa. Gracias a la primera, se logró determinar una temperatura de trabajo, la temperatura de entrada del agente gasificante a través de uso de la herramienta CFX, con la ayuda de simulaciones anteriores de la transferencia de calor a través del aislante, horno y reactor, las mismas que fueron verificados a través de cálculos de transferencia de calor, que al comparar los valores de la simulación y los calculados no presentan una variación significativa. De esta manera se identificó la temperatura en la pared interna del reactor.

Se realizaron dos tipos de refinamientos de malla, uno dentro del módulo Steady-State Thermal y otro dentro del módulo ICEM CFD. Gracias a esto, se logró comprobar que sin importar que se trabajase en una discretización más sensible, para este caso específico de estudio, las variaciones entre resultados para la transferencia de calor no son significativas entre simulaciones. Por lo tanto, centrar recursos en mejorar este aspecto, solo implica la generación de mayores costos computacionales; por lo que la mejor opción es presentar modelos sencillos de refinamiento que permiten obtener aproximaciones generales pero precisas.

La simulación posterior de la gasificación mediante los modelos cinéticos con respecto al tiempo y el eje longitudinal de los principales productos de la reacción arrojó flujos molares para H_2 , CO , CO_2 , CH_4 y H_2O , cuyos resultados no presentaron una variación significativa. En cuanto a la relación $H_2:CO$, se determinó que las condiciones iniciales fueron ideales para obtener un valor de 2.2 en dicha relación, llegando a igualar los valores reportados por otros autores.

El trabajo deja sentadas las bases de un modelo cinético y condiciones operativas que, gracias al uso de software especializado y bajo un estudio específico para cada caso, puede ser adaptable sin la necesidad de invertir recursos económicos y de carácter logístico como lo haría una implementación física.

RECOMENDACIONES

- Trabajar con una temperatura de entrada elevada del agente gasificante, es decir, en estado de vapor saturado, dentro de las condiciones de operación establecidas para el caso de estudio antes de la entrada al horno, para disminuir el tiempo de operación total.
- Resultaría un buen punto de enfoque, variar el tamaño de partícula del catalizador con el fin de realizar pruebas adoptando diferentes porosidades y determinar un diámetro final de optimización en la producción de hidrógeno.
- Realizar un análisis elemental previo de la materia prima que se vaya a someter a gasificación y así construir un modelo cinético específico.
- Realizar un estudio económico comparativo con la materia prima “en bruto” y de glucosa proveniente de ésta, con el propósito de determinar la rentabilidad de cada investigación.
- Determinar mediante un estudio los parámetros cinéticos, tales como constante de velocidad de equilibrio, constantes de velocidad de reacción, constantes de velocidad de adsorción del componente de las reacciones dominantes en la gasificación específicas para la biomasa, con la finalidad de mejorar el modelo cinético para su respectiva simulación.

REFERENCIAS

- Abu Ghalia, M., & Dahman, Y. (2017). Synthesis and utilization of natural fiber-reinforced poly (lactic acid) bionanocomposites. *Lignocellulosic Fibre and Biomass-Based Composite Materials: Processing, Properties and Applications*, 313–345. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100959-8.00015-9>
- Adamu, S., & Hossain, M. M. (2018a). Kinetics of Steam Gasification of Glucose as a Biomass Surrogate over Ni/Ce-Mesoporous Al₂O₃ in a Fluidized Bed Reactor. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 57(9), 3128–3137. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b04437>
- Adamu, S., & Hossain, M. M. (2018b). Kinetics of Steam Gasification of Glucose as a Biomass Surrogate over Ni/Ce-Mesoporous Al₂O₃ in a Fluidized Bed Reactor. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 57(9), 3128–3137. https://doi.org/10.1021/ACS.IECR.7B04437/ASSET/IMAGES/MEDIUM/IE-2017-04437X_0007.GIF
- Antonio, J., Torres, P., Enrique, J., Romero, R., Bolívar, P., & Jara, T. (2017). *Simulación computacional de esfuerzo-deformación y transferencia de calor de un secador cilíndrico rotativo de la industria papelera*.
- Aydin, M. (2019). The effect of biomass energy consumption on economic growth in BRICS countries: A country-specific panel data analysis. *Renewable Energy*, 138, 620–627. <https://doi.org/10.1016/J.RENENE.2019.02.001>
- Bajpai, P. (2018). Recycled Fiber Preparation. In *Biermann's Handbook of Pulp and Paper: Raw Material and Pulp Making*. Elsevier.
- Bakker, M., Beaven, R., Bogner, J. E., Canu, P., Carvalho, M. [Teresa, Clarke, W., Costa, G., Das, D., Hannan, M., Hjelm, O., Imhoff, P., Kalbe, U., Kjeldsen, P., Komilis, D., Leckner, B., Lü, F., Oonk, H., Pivato, A., Poletti, A., ... Miller, S. A. S. A. (2020). Encyclopedia of Renewable and Sustainable Materials. In A. Pandey, S. V. Mohan, J.-S. Chang, P. C. Hallenbeck, & C. Larroche (Eds.), *Journal of Cleaner Production* (Vol. 91, Issue 4). Woodhead Publishing. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652620304686>
- Barriga, W. (2013). *SIMULACIÓN DE UN GASIFICADOR DE BIOMASA COMO FUENTE ALTERNATIVA DE ENERGIA* [Universidad Central del Ecuador]. <https://doi.org/10.1190/segam2013-0137.1>
- Bermudez, J. M., Fidalgo, B., Kingdom, U., & Management, R. (2016). *Production of bio-syngas and bio-hydrogen via gasification* 15. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100455-5.00015-1>
- Bhushan, S., Rana, M. S., Mamta, Nandan, N., & Prajapati, S. K. (2019). Energy harnessing from banana plant wastes: A review. *Bioresource Technology Reports*, 7, 100212. <https://doi.org/10.1016/J.BITEB.2019.100212>
- Boujjat, H., Rodat, S., Chuayboon, S., & Abanades, S. (2019). Experimental and numerical study of a directly irradiated hybrid solar/combustion spouted bed reactor for continuous steam gasification of biomass. *Energy*, 189, 116118. <https://doi.org/10.1016/J.ENERGY.2019.116118>

- BUN-CA. (2002). *Manual sobre energía renovable: Biomasa* (1°).
- Cabrera, J., Jurado, F., Vera, D., Cabrera, J., Jurado, F., & Vera, D. (2021). Simulación de un deshidratador híbrido indirecto activo mediante el software ANSYS. *Enfoque UTE*, 12(4), 29–44. <https://doi.org/10.29019/ENFOQUEUTE.771>
- Carrera, J. (2019). *MODELACIÓN NUMÉRICA DE LA UNIÓN DE DOS CONDUCCIONES A PRESIÓN DE DIFERENTE GEOMETRÍA, APLICANDO EL PROGRAMA ANSYS CFX*.
- Cengel, Y. A. (2007). *Transferencia de calor y masa* (S. A. D. C. V. McGRAW-HILL/INTERAMERICANA EDITORES, Ed.; 3ra.).
- Cerda, S. (2014). *REFINAMIENTO DE MALLAS DE ELEMENTOS FINITOS MEDIANTE FUNCIONES DE FORMA SERENDIPITY*.
- Chávez, M. (2013). LIGNINA, ESTRUCTURA Y APLICACIONES: MÉTODOS DE DESPOLIMERIZACIÓN PARA LA OBTENCIÓN DE DERIVADOS AROMÁTICOS DE INTERÉS INDUSTRIAL. *Avances En Ciencias e Ingeniería*. <https://www.semanticscholar.org/paper/LIGNINA%2C-ESTRUCTURA-Y-APLICACIONES%3A-M%C3%89TODOS-DE-PARA-Ch%C3%A1vez-Sifontes-Domine/db2ceac3b930e6c8ea4d0da80912f57ad8c50b58>
- Chowdhury, M. B. I., Hossain, M. Z., Mazumder, J., Jhavar, A. K., & Charpentier, P. A. (2018). La-based catalysts to enhance hydrogen production during supercritical water gasification of glucose. *Fuel*, 217, 166–174. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2017.12.105>
- Cruz, I. (2018). *Producción de hidrógeno a través de la gasificación de glucosa usando catalizadores de γ -Al₂O₃ con Ni, Ce y La e interpretación de resultados usando un modelo No-estequiométrico*. <https://1library.co/document/y4jjvj9y-produccion-hidrogeno-traves-gasificacion-catalizadores-interpretacion-resultados-estequiometrico.html>
- Dayton, D. C., & Foust, T. D. (2020). Analytical methods for biomass characterization and conversion. *Analytical Methods for Biomass Characterization and Conversion*, 1–260. <https://doi.org/10.1016/C2017-0-03467-5>
- Durazno, M., & Alberto, C. (2018). *Producción de hidrógeno vía gasificación en agua supercrítica de la biomasa del banano, utilizando un nanocatalizador*. <http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/15004>
- Espinilla, J. (2019). *Elaboración de un modelo 3D de una turbina de vapor*. <https://riull.ull.es/xmlui/handle/915/13373>
- Esquivel, S., & Randal. (2017). *Análisis de un gasificador de flujo concurrente para el aprovechamiento energético de residuos biomásicos aplicando dinámica de fluidos computacional*. <http://repositorio.sibdi.ucr.ac.cr:8080/jspui/handle/123456789/5561>

- Flores Guamán, F. R. (2022). *Determinación de la capacidad calorífica de biomasas residuales de la producción agrícola del Ecuador*. Universidad Central de Ecuador.
- Gamboa, J. L. (2021). *Producción y aplicación de biocarbón a partir de biomasa residual para mejorar la calidad de suelos agrícolas. Revisión sistemática, 2020* [Universidad César Vallejo]. <https://repositorio.ucv.edu.pe/handle/20.500.12692/60501>
- Gómez, A. (2019). *Catálisis Heterogénea para el Aprovechamiento Energético de la Biomasa*. <https://repositorio.unal.edu.co/handle/unal/76973>
- Gurung, P., & Jialal, I. (2019). Plasma Glucose. *StatPearls*. <http://europepmc.org/books/NBK541081>
- Hu, X., & Gholizadeh, M. (2019). Biomass pyrolysis: A review of the process development and challenges from initial researches up to the commercialisation stage. *Journal of Energy Chemistry*, 39, 109–143. <https://doi.org/10.1016/J.JECHEM.2019.01.024>
- Kumar, N. (Materials scientist), & Dixit, Ambesh. (2021). *Nanotechnology for rural development*. Elsevier.
- Laín Beatove, S. (2014). *La simulación numérica en problemas de ingeniería*.
- Laín, S., & García, J. (2015). *Simulación numérica de turbinas Francis* (Universidad Eafit). Universidad Eafit. <https://books.google.com.ec/books?id=TC-jDwAAQBAJ&pg=PA80&dq=etapas+de+una+simulaci%C3%B3n+preproces+o&hl=es-419&sa=X&ved=2ahUKEwj53v-Mrvf3AhULVTABHZncBtQQ6AF6BAgKEAl#v=onepage&q=etapas%20de%20una%20simulaci%C3%B3n%20preproceso&f=false>
- Llangari, A. (2018). *Comparación del rendimiento y calidad de bioetanol obtenido a partir de la biomasa lignocelulósica de los pseudotallos de banano*. <http://dspace.ups.edu.ec/handle/123456789/15682>
- Lozada, A. F. V., Suquillo, N. R. G., Lozada, A. F. V., & Suquillo, N. R. G. (2018). Análisis por el método de elementos finitos del comportamiento de las pastillas de freno ABS con base de acero y zinc al discretizar el elemento continuo al utilizar “software” CAE. *Enfoque UTE*, 9(1), 188–203. <https://doi.org/10.29019/ENFOQUEUTE.V9N1.259>
- Machmudah, S., Wahyudiono, Kanda, H., & Goto, M. (2017). Hydrolysis of Biopolymers in Near-Critical and Subcritical Water. *Water Extraction of Bioactive Compounds: From Plants to Drug Development*, 69–107. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809380-1.00003-6>
- Martínez, S. (2019). *Estudio teórico experimental comparativo de los distintos modelos mecánicos de tejidos biológicos blandos empleados por software de elementos finitos* [Universitat Politècnica de València.]. <https://riunet.upv.es/handle/10251/125916>
- Millán, Z., Torre, L. D. E. L. A., Oliva, L., & Carmen, M. D. E. L. (2011). *Simulación numérica. Ecuación de difusión*. 15, 29–38.

- Mousa, E., Wang, C., Riesbeck, J., & Larsson, M. (2017). Biomass applications in iron and steel industry: An overview of challenges and opportunities. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 65, 1247–1266. <https://doi.org/10.1016/J.RSER.2016.07.061>
- Naheed, S., Mohammad, J., & Mohamed, T. (2021). *Biopolymers and Biocomposites from Agro-Waste for Packaging Applications* | ScienceDirect. Woodhead Publishing. <https://www.sciencedirect.com/book/9780128199534/biopolymers-and-biocomposites-from-agro-waste-for-packaging-applications>
- Núñez, de B. (2012). Biomasa y Desarrollo Oportunidades de la Biomasa para mejorar el acceso local a la Energía en comunidades rurales aisladas de América Latina. In *Fundación Energía sin Fronteras*.
- Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación (FAO). (2020). *FAOSFAT*. <https://www.fao.org/faostat/en/#data/QCL/visualize>
- Ortiz Moctezuma, M. B. (2015). *Sistemas dinámicos en tiempo continuo: Modelado y simulación*. Omnia Publisher SL. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.3926/oss.25>
- Palacios, M., & Zalamea, T. (2016). *Caracterización química de la biomasa procedente de las hojas, pseudotallo, raquis y pseudopeciolo de la planta de banano y su relación con el poder calorífico*. <http://dspace.ucuenca.edu.ec/handle/123456789/26232>
- Parrilla, A. B., & García, P. B. (2019). *Simulación 2D de la rotura de Presa de Malpasset con los modelos Iber y RiverFlow2D (Malpasset Dam break flow numerical simulation with Iber and RiverFlow2D)*.
- Patel, J. P., & Parsania, P. H. (2018). Characterization, testing, and reinforcing materials of biodegradable composites. *Biodegradable and Biocompatible Polymer Composites: Processing, Properties and Applications*, 55–79. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100970-3.00003-1>
- Ram, M., & Mondal, M. K. (2022). Biomass gasification: a step toward cleaner fuel and chemicals. *Biofuels and Bioenergy*, 253–276. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-85269-2.00008-3>
- Rodriguez Correa, C., & Kruse, A. (2018). Supercritical water gasification of biomass for hydrogen production – Review. *Journal of Supercritical Fluids*, 133(September), 573–590. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2017.09.019>
- Romero, C., Romero, C., & Vergara, G. (2019). Solución de las ecuaciones de Navier-Stokes. *Año*.
- Salinas, F., & García, G. (2019). *Producción de hidrógeno a través de la gasificación de glucosa usando catalizadores de 5%Ni con 2% de La, Ce y Mg y deducción de una ecuación de velocidad de reacción intrínseca*. <http://ricaxcan.uaz.edu.mx/jspui/handle/20.500.11845/2306>
- Sancho Ávila, J. (2018). Diseño y construcción de sistemas de predicción por conjuntos: error en las condiciones de contorno. *Física Del Caos En La*

Predicción Meteorológica, 275–285. <https://doi.org/10.31978/014-18-009-X.18>

- Serna, E. (2019). DESARROLLO E INNOVACIÓN EN INGENIERÍA. In *Desarrollo e Innovación en Ingeniería* (Cuarta edición, Vol. 4).
- Singh Siwal, S., Zhang, Q., Sun, C., Thakur, S., Kumar Gupta, V., & Kumar Thakur, V. (2020). Energy production from steam gasification processes and parameters that contemplate in biomass gasifier – A review. *Bioresource Technology*, 297, 122481. <https://doi.org/10.1016/J.BIORTECH.2019.122481>
- Situmorang, Y. A., Zhao, Z., Yoshida, A., Abudula, A., & Guan, G. (2020). Small-scale biomass gasification systems for power generation (<200 kW class): A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 117(January 2019), 109486. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109486>
- Song, X., & Guo, Z. (2006). Technologies for direct production of flexible H₂/CO synthesis gas. *Energy Conversion and Management*, 47(5), 560–569. <https://doi.org/10.1016/J.ENCONMAN.2005.05.012>
- Tacuri, D. (2021a). *DISEÑO Y DESARROLLO DE REACTOR LECHO FIJO CATALÍTICO PARA GASIFICACIÓN DE BIOMASA DE BANANO EN LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO*. Universidad de Cuenca.
- Tacuri, D. (2021b). *DISEÑO Y DESARROLLO DE REACTOR LECHO FIJO CATALÍTICO PARA GASIFICACIÓN DE BIOMASA DE BANANO EN LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO*. Universidad de Cuenca.
- Velázquez Martí, B. (2018). Aprovechamiento de la biomasa para uso energético. In *Colección Textos Académicos Universitarios*. Editorial Universitat Politècnica de València. <https://riunet.upv.es/handle/10251/113122>
- Wang, Z., Bui, Q., Zhang, B., & Pham, T. L. H. (2020). Biomass energy production and its impacts on the ecological footprint: An investigation of the G7 countries. *Science of The Total Environment*, 743, 140741. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2020.140741>
- Wulf, A., Akdag, V., & Akdag, V. (1995). Tuned grid generation with ICEM CFD. NASA. Lewis Research Center, Surface Modeling, Grid Generation, and Related Issues in Computational Fluid Dynamic (CFD) Solutions.
- Xu, C. C., Liao, B., Pang, S., Nazari, L., Mahmood, N., Tushar, M. S. H. K., Dutta, A., & Ray, M. B. (2018). Comprehensive Energy Systems. In *Comprehensive Energy Systems* (Vols. 1–5). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809597-3.00121-8>
- Yu, J., Guo, Q., Gong, Y., Ding, L., Wang, J., & Yu, G. (2021). A review of the effects of alkali and alkaline earth metal species on biomass gasification. *Fuel Processing Technology*, 214(December 2020), 106723. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2021.106723>
- Yupa, R. (2016). *Análisis Estructural y modal de la hélice de un aerogenerador de 3kW de potencia mediante Simulación Numérica Computacional*.

Zhang, Y., Li, L., Xu, P., Liu, B., Shuai, Y., & Li, B. (2019). Hydrogen production through biomass gasification in supercritical water: A review from exergy aspect. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(30), 15727–15736. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.151>

ANEXOS

ANEXO 1: Cálculo de la temperatura en la superficie del aislante

Cálculo del área

$$A = l^2$$

$$A = (0.17m)^2$$

$$A = 0.029m^2$$

Cálculo de U

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h_1} + \frac{L_1}{k_1}}$$

$$U = \frac{1}{\frac{1}{5 \frac{W}{m^2 * ^\circ C}} + \frac{0.04m}{0.04m}}$$

$$U = 0.833 \frac{W}{m^2 * ^\circ C}$$

Cálculo del calor

$$q = U * \Delta T$$

$$q = 0.833 \frac{W}{m^2 * ^\circ C} * (640 - 20)^\circ C$$

$$q = 516.667 \frac{W}{m^2}$$

Cálculo de Q

$$Q = q * A$$

$$Q = 516.667 \frac{W}{m^2} * 0.029m^2$$

$$Q = 14.98 W$$

Cálculo de T

$$Q = h * A * (T - 20)$$

$$\frac{14.983 \text{ W}}{5 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}} * 0.029 \text{ m}^2} + 20 \text{ } ^\circ\text{C} = T$$

$$T = 123.33 \text{ } ^\circ\text{C}$$

ANEXO 2: Cálculo de la porosidad del lecho

$$A_c = \frac{\pi(0.03 \text{ m})^2}{4} = 7.07 \times 10^{-4} \text{ m}^2$$

$$V_{lecho} = \pi(0.015 \text{ m})^2(0.01 \text{ m}) = 7.07 \times 10^{-6} \text{ m}^3$$

$$V_{Tresf} = \frac{4}{3}\pi(5 \times 10^{-4} \text{ m})^3 * 7340 = 3.84 \times 10^{-6} \text{ m}^3$$

$$\varepsilon = \frac{7.07 \times 10^{-6} \text{ m}^3 - 3.84 \times 10^{-6} \text{ m}^3}{7.07 \times 10^{-6} \text{ m}^3} = 0.46$$

ANEXO 3: Cálculo del número de moles de los reactivos y productos de la gasificación

Solución: 1.5 mL al 15% de glucosa en agua.

Glucosa:

$$V_{C_6H_{12}O_6} = 1.5 \text{ mL} * 0.15 = 0.225 \text{ mL}$$

$$m_{C_6H_{12}O_6} = 0.225 \text{ mL} * 1.56 \frac{\text{g}}{\text{mL}} = 0.398 \text{ g}$$

$$n_{C_6H_{12}O_6} = \frac{0.398 \text{ g}}{180 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 2.21 * 10^{-3} \text{ moles}$$

Agua:

$$V_{H_2O} = 1.5 \text{ mL} * 0.85 = 1.275 \text{ mL}$$

$$m_{H_2O} = 1.275 \text{ mL} * 1 \frac{\text{g}}{\text{mL}} = 1.275 \text{ g}$$

$$n_{H_2O} = \frac{1.275 \text{ g}}{18 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0.071 \text{ moles}$$

Reactivo limitante:

Para el agua:

$$\frac{0.398 \text{ g } C_6H_{12}O_6 * 18 \text{ g } H_2O}{180 \text{ g } C_6H_{12}O_6} = 0.0398 \text{ g } H_2O$$

Para la glucosa:

$$\frac{180 \text{ g } C_6H_{12}O_6 * 1.275 \text{ g } H_2O}{18 \text{ g } H_2O} = 12.75 \text{ g } C_6H_{12}O_6$$

El reactivo limitante es el agua.

Metano:

$$n_{CH_4} = 1.275 \text{ g } H_2O * \frac{1 \text{ mol } H_2O}{18 \text{ g } H_2O} * \frac{1 \text{ mol } CH_4}{1 \text{ mol } H_2O} = 0.071 \text{ moles}$$

$$m_{CH_4} = 0.071 \text{ moles} * \frac{16.04 \text{ g}}{1 \text{ mol } CH_4} = 1.14 \text{ g}$$

Hidrógeno:

$$n_{H_2} = 1.275 \text{ g } H_2O * \frac{1 \text{ mol } H_2O}{18 \text{ g } H_2O} * \frac{3 \text{ mol } H_2}{1 \text{ mol } H_2O} = 0.213 \text{ moles}$$

$$m_{H_2} = 0.213 \text{ moles} * \frac{2.016 \text{ g}}{1 \text{ mol } H_2} = 0.426 \text{ g}$$

Dióxido de carbono:

$$n_{CO_2} = 1.275 \text{ g } H_2O * \frac{1 \text{ mol } H_2O}{18 \text{ g } H_2O} * \frac{1 \text{ mol } CO_2}{1 \text{ mol } H_2O} = 0.071 \text{ moles}$$

$$m_{CO_2} = 0.071 \text{ moles} * \frac{44.01 \text{ g}}{1 \text{ mol } CO_2} = 3.124 \text{ g}$$

Agua:

$$n_{H_2O} = 1.275 \text{ g } H_2O * \frac{1 \text{ mol } H_2O}{18 \text{ g } H_2O} * \frac{2 \text{ mol } H_2O}{1 \text{ mol } H_2O} = 0.14 \text{ moles}$$

$$m_{H_2O} = 0.14 \text{ moles} * \frac{18.02 \text{ g}}{1 \text{ mol } H_2O} = 2.52 \text{ g}$$

Monóxido de carbono:

$$n_{CO} = 1.275 \text{ g } H_2O * \frac{1 \text{ mol } H_2O}{18 \text{ g } H_2O} * \frac{3 \text{ mol } CO}{1 \text{ mol } H_2O} = 0.213 \text{ moles}$$

$$m_{CO} = 0.213 \text{ moles} * \frac{28.01 \text{ g}}{1 \text{ mol } CO} = 0.852 \text{ g}$$

Carbono:

$$n_C = 1.275 \text{ g } H_2O * \frac{1 \text{ mol } H_2O}{18 \text{ g } H_2O} * \frac{1 \text{ mol } C}{1 \text{ mol } H_2O} = 0.071 \text{ moles}$$

$$m_C = 0.071 \text{ moles} * \frac{12 \text{ g}}{1 \text{ mol } CO} = 0.852 \text{ g}$$

ANEXO 4: Cálculo del flujo moles de los productos de la gasificación

Metano:

$$\dot{n}_{CH_4} = \frac{0.071 \text{ moles}}{25 \text{ s}} = 2.84 \times 10^{-3} \frac{\text{moles}}{\text{s}}$$

Hidrógeno:

$$\dot{n}_{H_2} = \frac{0.213 \text{ moles}}{25 \text{ s}} = 8.51 \times 10^{-3} \frac{\text{moles}}{\text{s}}$$

Dióxido de carbono:

$$\dot{n}_{CO_2} = \frac{0.071 \text{ moles}}{25 \text{ s}} = 2.84 \times 10^{-3} \frac{\text{moles}}{\text{s}}$$

Agua:

$$\dot{n}_{H_2O} = \frac{0.14 \text{ moles}}{25 \text{ s}} = 5.59 \times 10^{-3} \frac{\text{moles}}{\text{s}}$$

Monóxido de carbono:

$$\dot{n}_{CO} = \frac{0.213 \text{ moles}}{25 \text{ s}} = 8.52 \times 10^{-3} \frac{\text{moles}}{\text{s}}$$

Carbono:

$$\dot{n}_C = \frac{0.071 \text{ moles}}{25 \text{ s}} = 2.84 \times 10^{-3} \frac{\text{moles}}{\text{s}}$$

ANEXO 5: Cálculo del número de Reynolds del fluido gasificante

$$Re = \frac{6.45 \times 10^{-3} \frac{m}{s} * 9.25 \times 10^{-3} m}{1.45 \times 10^{-7} \frac{m^2}{s}} = 411.47$$

El cual es menor que el número de Reynolds crítico de 2300. Por lo tanto, se trata de un flujo laminar.

ANEXO 6: Cálculo del coeficiente de transferencia de calor del agente gasificante

$$As = \pi * (9 \times 10^{-3} m) * (0.17 m) = 4.94 \times 10^{-3} m^2$$

$$h = \frac{0.65 \frac{W}{m \cdot ^\circ C}}{9.25 \times 10^{-3} m} * 3.66 = 250.86 \frac{W}{m \cdot ^\circ C}$$

ANEXO 7: Cálculo de la temperatura de salida del agente gasificante

$$\dot{m} = 840.3 \frac{kg}{m^3} * \frac{\pi(9 \times 10^{-3} m)^2}{4} * 6.45 \times 10^{-3} \frac{m}{s} = 3.64 \times 10^{-4} \frac{kg}{s}$$

$$T_e = 350 ^\circ C - (350 ^\circ C - 76.7 ^\circ C) e^{-\frac{4.94 \times 10^{-3} m^2 * 250.86 \frac{W}{m \cdot ^\circ C}}{3.64 \times 10^{-4} \frac{kg}{s} * 4610 \frac{J}{kg \cdot ^\circ C}}} = 210.41 ^\circ C$$

ANEXO 8: Cálculo de la caída de presión

$$V_0 = \frac{4.33 \times 10^{-7} \frac{m^3}{s}}{7.07 \times 10^{-4} m^2} = 6.12 \times 10^{-4} \frac{m}{s}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{150 (6.12 \times 10^{-4} \frac{m}{s}) (2.5859 \times 10^{-5} Pa \cdot s)}{(1)^2 (1 \times 10^{-3})^2} * \frac{(1 - 0.46)^2}{0.46^3} + \frac{1.75 * 0.2992 * \left(6.12 \times 10^{-4} \frac{m}{s}\right)^2}{(1)(1 \times 10^{-3})} * \frac{(1 - 0.46)}{0.46^3} = 7.11 \frac{Pa}{m}$$

Considerando una caída de presión y velocidad bastante pequeña, el factor de coeficiente cuadrático tenderá a cero.

$$K_Q = 0$$

ANEXO 9: Cálculo de la densidad de área interfacial

$$\sigma = \frac{7.07 \times 10^{-4} m^2 * 0.46}{\pi(0.015 m)^2 * 0.066 m} = 7.67 m^{-1}$$

ANEXO 10: Cálculo del número de Reynolds para en el fluido a través del reactor

$$Re = \frac{1.33 \times 10^{-3} \frac{m}{s} * 0.03}{8.301 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}} = 0.480$$

El cual es menor que el número de Reynolds crítico de 2300. Por lo tanto, se trata de un flujo laminar.

ANEXO 11: Cálculo del coeficiente de transferencia de calor del fluido en el reactor

$$As = \pi * (0.03m) * (0.17m) = 6.22 \times 10^{-3} m^2$$

$$h = \frac{0.50 \frac{W}{m \cdot ^\circ C}}{0.03m} * 3.66 = 7.198 \frac{W}{m \cdot ^\circ C}$$

ANEXO 12: Cálculo de la temperatura de salida del fluido

$$\dot{m} = 0.3261 \frac{kg}{m^3} * \frac{\pi(0.03 m)^2}{4} * 1.33 \times 10^{-3} \frac{m}{s} = 3.07 \times 10^{-7} \frac{kg}{s}$$

$$Te = 637.2 ^\circ C - (637.2 ^\circ C - 210.41 ^\circ C)e^{-\frac{6.22 \times 10^{-3} m^2 * 7.198 \frac{W}{m \cdot ^\circ C}}{3.07 \times 10^{-7} \times 10^{-3} \frac{kg}{s} * 2088.61 \frac{J}{kg \cdot ^\circ C}}} = 637.2 ^\circ C$$

ANEXO 13: Cálculo de la velocidad esperada del fluido en el reactor

$$V_2 = \frac{4.33 \times 10^{-7} \frac{m^3}{s}}{7.07 \times 10^{-4} * 0.46} = 1.33 \times 10^{-3} \frac{m}{s}$$