

# Modelado orientado al control de una clase de reactores de gasificación.

Ulises Badillo-Hernández <sup>[1]</sup> y Luis Alvarez-Icaza <sup>[2]</sup>  
Instituto de Ingeniería  
Universidad Nacional Autónoma de México

**Resumen**—Se desarrolla una metodología de modelado orientada a control de una clase de reactores de gasificación mediante la aplicación del método de líneas por diferencias finitas a un sistema de parámetros distribuidos. La metodología es única en la literatura abierta de control por dos razones: a) se basa en objetivos de control críticos: mejorar el desempeño del reactor ante cambios de demanda energética, y b) utiliza un enfoque de complejidad baja en relación con la del sistema real. El modelado se divide en tres pasos: obtención de un modelo con parámetros distribuidos, discretización espacial y selección de una malla espacial de tamaño mínimo. El modelo obtenido es un sistema dinámico no lineal con tres entradas, cuatro salidas y estructura de tres bandas que reproduce el comportamiento dinámico alrededor de un estado de equilibrio. Los resultados de simulación presentan al reactor estabilizado en la cima y muestran que las variables de interés predichas por el modelo aproximan los valores reportados en la literatura de referencia.

**Palabras clave:** gasificación, control de reactores, modelos orientados a control, método de diferencias finitas.

## I. INTRODUCCIÓN

Un gasificador es un reactor de conversión termoquímica donde una fuente de carbono sólida/liquída reacciona con un agente oxidante ( $O_2$  puro o aire) y un agente gasificante ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ) produciendo un combustible gaseoso con una composición química simple, un valor calórico utilizable y de fácil manejo conocido como gas de síntesis. Entre las características que motivan el uso de este tipo de reactores se encuentran la flexibilidad en los combustibles sólidos/líquidos alimentados (en su mayoría productos de escaso valor comercial: biomasa, coque de petróleo, residuos sólidos, etc.), bajas emisiones de gases de efecto invernadero y una eficiencia energética alta.

En un sistema de generación de energía eléctrica basado en gasificador, el poder calórico del gas de síntesis es utilizado en una turbina de gas o en un motor de combustión interna acoplado mecánicamente a un generador eléctrico. Es común en este tipo de plantas que la carga energética demandada por los dispositivos a los que es acoplado el gasificador varíe y en consecuencia, también lo hagan las condiciones operacionales del reactor como la temperatura, la composición del gas de síntesis y la altura o masa del lecho de combustible que repercuten en la eficiencia y seguridad de la operación del gasificador. Por ello resulta

imprescindible diseñar esquemas de control que garanticen un desempeño autónomo y eficiente del proceso en un entorno de demanda energética tan cambiante.

En la literatura abierta de control de gasificadores prevalecen los modelos de caja negra debido a su rapidez de aplicación en plantas piloto. El desarrollo de modelos basados en principios fisico-químicos cuya estructura sea explotada para la síntesis y evaluación de leyes de control es limitado: (Paes, 2005) modela un gasificador de contraflujo de aire y biomasa y sintetiza un controlador sin tomar en cuenta los cambios de carga, (Dixon *et al.*, 1998) presenta un modelo de un gasificador de lecho fluidizado que es validado en distintas condiciones de carga, sin embargo, el acceso a él es restringido, y (Gobel *et al.*, 2007) deduce un modelo para un gasificador de lecho fijo validado experimentalmente en un reactor piloto, con base en el cual diseña una estrategia de control efectiva que reduce el transitorio (de 20h a 3min) ante cambios de carga en el sistema, sin embargo, el modelo sólo es aplicable a un gasificador experimental de dos etapas. Tales resultados evidencian los alcances de este tipo de modelos orientados a control en la optimización del desempeño de la operación y la eficiencia de gasificadores.

En consecuencia, este trabajo adopta una metodología de modelado basada en primeros principios que permitirá sistematizar el diseño de leyes de control para una clase de reactores de gasificación.

## II. MODELADO ORIENTADO AL CONTROL DE UN GASIFICADOR DE LECHO FIJO.

En esta sección se presenta la metodología de modelado basada en principios fundamentales en cuatro partes:

1. Descripción del tipo de gasificadores a modelar.
2. Obtención de un modelo dinámico de dimensión infinita basado en ecuaciones de conservación de masa y energía aplicadas a un sistema de dos fases termodinámicas.
3. Aproximación de dicho modelo con un sistema dinámico de dimensión finita mediante el método de líneas por diferencias finitas.
4. La elección de una malla espacial de tamaño mínimo que permita reproducir el comportamiento de las variables de salida del gasificador.
5. Presentación y comparación de resultados de simulación del modelo dinámico.

<sup>1</sup>Estudiante Doctorado - ubadilloh@iingen.unam.mx

<sup>2</sup>Investigador Corresponsal - alvar@pumas.iingen.unam.mx

## II-A. Descripción de la planta.

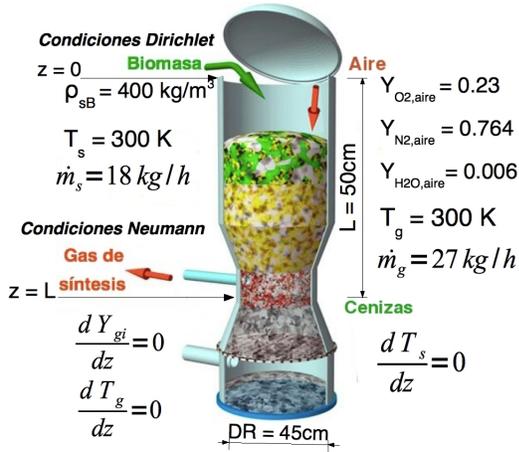


Figura 1. Diagrama de gasificador de lecho fijo de flujos concurrentes.

Los gasificadores de lecho fijo son reactores tubulares de flujo continuo de dos fases (sólido y gas) empleados en procesos de conversión energética de mediana y pequeña escala. El presente estudio se enfoca en un reactor de flujos paralelos (Fig. 1) a fin de obtener un gas de síntesis más limpio en relación a uno de flujos en contracorriente.

## II-B. Modelo en parámetros distribuidos de una clase de gasificadores.

Es un modelo euleriano unidimensional de dos fases separadas basado en los principios de conservación de masa y energía aplicado a un sistema termodinámico isobárico donde las reacciones químicas de mayor relevancia son la pirólisis, combustión y gasificación (Badillo, 2009). Cada fase es considerada una mezcla compuesta de especies químicas genéricas:

1. Gas:  $O_2$ ,  $H_2O(g)$ ,  $CO$ ,  $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $N_2$  y alquitranes en vapor ( $T$ ).
2. Sólido: Biomasa Cruda (B) y Carbonizado (C).

### ■ Ecuación de conservación de masa total del gas.

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g}{\partial z} = \dot{M}_{s \rightarrow g} \quad (1)$$

$\dot{M}_{s \rightarrow g}$  modela el intercambio de masa entre fases.

### ■ Ecuaciones de conservación por especie gaseosa.

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g Y_{gi}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g Y_{gi} \mathbf{v}_g}{\partial z} = M_{g,i}$$

$$i = 1, \dots, N_g - 1; \quad M_{g,i} = \sum_n \mathbf{R}_{i,n} \left[ \frac{kg}{m^3 s} \right] \quad (2-8)$$

Fuente de masa de la especie  $i$  por reacción  $n$ :

$$\mathbf{R}_{i,n} = W_i \nu_{i,n} R_n \quad \text{si} \quad R_n \left[ \frac{kmol}{m^3 s} \right] \quad (9)$$

$$\mathbf{R}_{i,n} = \nu_{i,n} R_n \quad \text{si} \quad R_n \left[ \frac{kg}{m^3 s} \right] \quad (10)$$

### ■ Ecuación de conservación de masa total de sólido.

$$\frac{\partial \alpha_s \rho_s}{\partial t} + \mathbf{v}_{s0} \frac{\partial \alpha_s \rho_s}{\partial z} + \alpha_s \rho_{s0} \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial z} = -\dot{M}_{s \rightarrow g} \quad (11)$$

donde  $\rho_{s0}$  es la densidad del sólido después de la pirólisis,  $\mathbf{v}_{s0}$  es la velocidad axial del sólido en  $z = 0$ .

### ■ Ecuaciones de conservación por especie sólida.

En el proceso de pirólisis:

$$\frac{\partial \alpha_s \rho_{si}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_s \rho_{si} \mathbf{v}_{s0}}{\partial z} = \mathbf{R}_{i,p1}; \quad i = B, C \quad (12-13)$$

En la gasificación y combustión del carbonizado:

$$\alpha_s \rho_{s0} \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial z} = \sum_n \mathbf{R}_{C,n}; \quad n = c5, g1, g2, g3 \quad (14)$$

$$\rho_{s0} = \rho_{sC0} = \nu_{Cp1} \rho_{sB0} \quad (15)$$

### ■ Ecuación de conservación de energía (gas).

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g \sum_i Y_{gi} \tilde{H}_{gi}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g \sum_i Y_{gi} \tilde{H}_{gi} \mathbf{v}_g}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( \alpha_g \lambda_g^{eff} \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) = \sum_n \mathbf{Q}_{n,g} + \mathbf{Q}_{s \rightarrow g} \quad (16)$$

$\mathbf{Q}_{n,g}$  la fuente de calor de la reacción  $n$  asociada al gas y  $\mathbf{Q}_{s \rightarrow g}$  el intercambio de calor entre fases.

### ■ Ecuación de conservación de energía (sólido).

$$\frac{\partial \sum_i \alpha_s \rho_{si} \tilde{H}_{si}}{\partial t} + \frac{\partial \sum_i \alpha_s \rho_{si} \tilde{H}_{si} \mathbf{v}_s}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( \alpha_s \lambda_s^{eff} \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) = \sum_n \mathbf{Q}_{n,s} - \mathbf{Q}_{s \rightarrow g} \quad (17)$$

Fuente de calor de la reacción  $n$  asociada a la fase  $k$ .

$$\mathbf{Q}_{n,k} = \Delta H_n R_{n,k}; \quad R_{n,k} \left[ \frac{kmol}{m^3 s} \right] \quad \Delta H_n \left[ \frac{kJ}{kmol} \right] \quad (18)$$

Entalpía y calor específico de las fases.

$$\tilde{H}_k = \sum_{i=1}^{N_k} Y_{ki} \tilde{H}_{ki} \quad (19)$$

$$\tilde{H}_{ki} = C_{p,ki} (T_k - T_0) \quad (20)$$

$$C_{p,k} = \sum_{i=1}^{N_k} Y_{ki} C_{p,ki}; \quad k = s, g \quad (21)$$

Para dotar de cerradura al sistema de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) es necesario definir las relaciones constitutivas de las propiedades de transporte y las condiciones de frontera del reactor (Figura 1) que fueron tomadas de (Badillo, 2009). Por simplicidad, en este artículo sólo se presenta la cinética química del gasificador tomada de (Di Blasi, 2000):

Un reactor de gasificación presenta una compleja red de reacciones químicas. Sin embargo, la velocidad del proceso global está limitada por algunas reacciones de pirólisis, combustión y gasificación (Rogel, 2007).

TABLA I  
 TABLA DE FUNCIONES DE  $R_n$ 

| $R_n$     | $\mathbf{k}(T_k)$   | $f(C_i)$                        | $T_k$ |
|-----------|---|---------------------------------|-------|
| $R_{p1}$  | $k_{p1}$  | $\rho_B = \alpha_s \rho_{sB}$   | $T_s$ |
| $R_{p2}$  | $k_{p2}$  | $W_T C_T$                       | $T_g$ |
| $R_{c1}$  | $\alpha_g T_g k_{c1}$                                       | $C_{O_2} C_T$                   | $T_g$ |
| $R_{c2}$  | $\alpha_g T_g k_{c2}$                                       | $C_{O_2} C_{CH_4}$              | $T_g$ |
| $R_{c3}$  | $\alpha_g k_{c3}$   | $C_{O_2} C_{CO} C_{H_2O}^{1/2}$ | $T_g$ |
| $R_{c4}$  | $k_{c4}$  | $C_{O_2} C_{H_2}$               | $T_g$ |
| $R_{wgf}$ | $\alpha_g k_{wgf}$  | $C_{CO} C_{H_2O}$               | $T_g$ |
| $R_{wgb}$ | $\alpha_g k_{wgb}$  | $C_{CO_2} C_{H_2}$              | $T_g$ |
| $R_{c5}$  | $A_p \eta_p \left( \frac{k_{c5} r_m}{k_{c5} + r_m} \right)$ | $C_{O_2}$                       | $T_s$ |
| $R_{g1}$  | $A_p \eta_p \left( \frac{k_{g1} r_m}{k_{g1} + r_m} \right)$ | $C_{CO_2}$                      | $T_s$ |
| $R_{g2}$  | $A_p \eta_p \left( \frac{k_{g2} r_m}{k_{g2} + r_m} \right)$ | $C_{H_2}$                       | $T_s$ |
| $R_{g3}$  | $A_p \eta_p \left( \frac{k_{g3} r_m}{k_{g3} + r_m} \right)$ | $C_{H_2O}$                      | $T_s$ |

Las velocidades de reacción son expresadas como el producto de dos funciones:

$$R_n = \mathbf{k}(T_k) \cdot f(C_i) \quad (22)$$

En la Tabla I se presentan las definiciones de las funciones  $\mathbf{k}$  y  $f$  para cada reacción considerada. Las constantes de reacción  $k_n$  son de tipo Arrhenius y dependen de la temperatura de la fase a la que estén asociadas de acuerdo a la misma tabla:

$$k_n = A_n e^{\frac{-E_n}{RT_k}} \quad (23)$$

Debido a que la reacción de separación de  $CO$  con  $H_2O$  ( $R_{wg}$ ) es reversible se descompone en dos direcciones: en favor de productos ( $R_{wgf}$ ) y en favor de reactivos ( $R_{wgb}$ ), por lo tanto  $R_{wg} = R_{wgf} - R_{wgb}$ . Mientras que las reacciones heterogéneas del carbonizado ( $c5, g1 - g3$ ) incorporan un modelo de núcleo contrayente no reactivo de las partículas de la fase sólida definido por las relaciones:

$$X_C = \frac{v_s}{v_{s0}}; \quad X = \left( \frac{d_p}{d_{p0}} \right)^3 \quad (24-25)$$

$$d_p = [(1 - \chi_{ash})X_C + \chi_{ash}]^{1/3} d_{p0} \quad (26)$$

$$A_p \eta_p = \frac{6\alpha_s}{d_p} \quad (27)$$

*Transferencia de masa entre fases.*

$$r_m = \frac{2.06 v_g}{\alpha_g} Re^{-0.575} Sc^{-(2/3)}; \quad r_m \leq r_m^* \quad (28)$$

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g \mathcal{D}_{gi}}; \quad Re = \frac{d_p \rho_g v_g}{\mu_g} \quad (29-30)$$

Al sumar las ecuaciones de las especies de la fase gaseosa (2-8) se obtiene la ecuación de continuidad (1) y por tanto, el término de intercambio de masa entre fases:

$$\dot{M}_{s \rightarrow g} = (1 - \nu_{C,p1})R_{p1} + W_C(R_{c5} + R_{g1} + R_{g2} + R_{g3}) \quad (31)$$

*Transporte de calor entre fases.*

$$Q_{s \rightarrow g} = A_p \eta_p h_{s \rightarrow g} (T_s - T_g) \quad (32)$$

$$h_{s \rightarrow g} = \zeta \frac{2.06 C_{p,g} \rho_g v_g}{\alpha_g} Re^{-0.575} Pr^{-(2/3)} \quad (33)$$

$$Pr = \frac{C_{p,g} \mu_g}{\lambda_g} \quad (34)$$

*II-C. Discretización espacial del modelo.*

El modelo de dimensión infinita de la parte II-B se aproxima ahora con un sistema dinámico de dimensión finita mediante una metodología de análisis numérico conocida como método de líneas por diferencias finitas. Este método discretiza el dominio de la variable independiente  $z$  en un conjunto de nodos llamado malla espacial y reemplaza las derivadas espaciales de las EDP por aproximaciones algebraicas para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) cuya solución aproxime la solución del problema de valor a la frontera original (Schiesser y Griffiths, 2009). Esto es equivalente a aproximar el comportamiento del reactor tubular con un conjunto de reactores de tanque continuamente agitados conectados en serie (ver Fig.2).

El modelo en parámetros distribuidos es un sistema de EDP cuasilineales de tipo hiperbólico-parabólico con cerradura provista por una elección de parámetros y condiciones que no introducen multiplicidad de soluciones según lo reportado en la literatura.

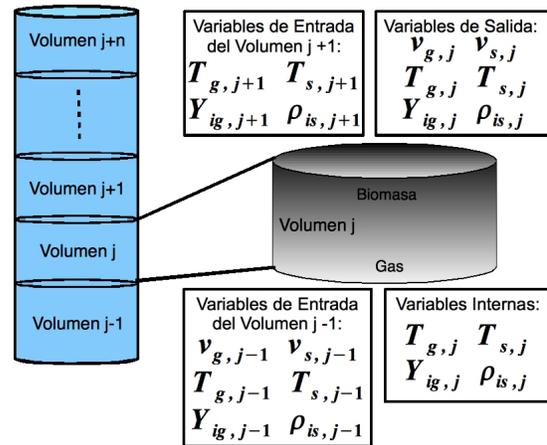


Figura 2. Reactor tubular discretizado en volúmenes de control.

Antes de proceder con el esquema de discretización espacial se realizan manipulaciones algebraicas de las Ecs. (1), (2-8), (16) y (17) para llevarlas a una forma estándar adecuada para el Método de Diferencias Finitas:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v}_k \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( D^{eff} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = F(\varphi, \mathbf{v});$$

$$g(\varphi, \mathbf{v}, \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z}, \frac{\partial \varphi}{\partial z}) = 0; \quad (35)$$

donde  $\varphi, F, \mathbf{v}_k, D^{eff} \in \mathbb{R}^{11}$  y  $\mathbf{v}, g \in \mathbb{R}^2$  son definidos:

$$\begin{aligned} \varphi &= \left[ Y_{O_2} \ Y_{H_2} \ Y_{CO} \ Y_{CO_2} \ Y_{CH_4} \ Y_{H_2O} \ Y_T \ T_g \ T_s \ \rho_B \ \rho_C \right]^T \\ \mathbf{v}_k &= \left[ \mathbf{v}_g \ \mathbf{v}_s \ \mathbf{v}_{s0} \ \mathbf{v}_{s0} \right]^T \\ D^{eff} &= \left[ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ \alpha_g \lambda_g^{eff} \ \alpha_s \lambda_s^{eff} \ 0 \ 0 \right]^T \\ F &= \left[ F_{gi} \ F_{Tsg} \ F_{si} \right]^T \\ F_{gi} &= \left[ \mathbf{M}_{g,O_2} - Y_{O_2} \dot{\mathbf{M}}_{s \rightarrow g} \ \cdots \ \mathbf{M}_{g,T} - Y_T \dot{\mathbf{M}}_{s \rightarrow g} \right] \\ F_{Tsg} &= \left[ \mathbf{Q}_g - \sum_i^{N_g-1} C_{p,gi} \mathbf{M}_{g,i} (T_g - T_0) \right]^T \\ F_{si} &= \left[ -R_{p1} \ \nu_{C,p1} R_{p1} \right] \end{aligned}$$

$$\mathbf{M}_{s,B} = -R_{p1} \quad (36)$$

$$\mathbf{M}_{s,C} = \nu_{C,p1} R_{p1} - W_C \sum_n R_n; \ n = c5, g1 - g3 \quad (37)$$

$\mathbf{Q}_g, \mathbf{Q}_s$  el lado derecho de (16) y (17) respectivamente.

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \left[ \mathbf{v}_g \ \mathbf{v}_s \right]^T \\ g &= \left[ g_1 \ g_2 \right]^T \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_1 &= \alpha_g \rho_g \frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial z} - \frac{1}{C_{p,g} T_g} \left( \frac{\partial}{\partial z} \left( \alpha_g \lambda_g^{eff} \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) \right) - \dot{\mathbf{M}}_{s \rightarrow g} \\ &\quad - \frac{1}{C_{p,g} T_g} \left( \mathbf{Q}_g - \sum_{i=1}^{N_g-1} C_{p,gi} \mathbf{M}_{g,i} (T_g - T_0) \right) \\ &\quad - W_g \sum_{i=1}^{N_g-1} \left( \frac{1}{W_{gi}} - \frac{1}{W_{N2}} \right) \left( \mathbf{M}_{g,i} - (\dot{\mathbf{M}}_{s \rightarrow g}) Y_{gi} \right) \end{aligned} \quad (38)$$

$$g_2 = \alpha_s \rho_{s0} \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial z} - \sum_n \mathbf{R}_{C,n}; \ n = c5, g1, g2, g3 \quad (39)$$

La deducción de la Ec. (38) es elaborada por lo que se omite aquí el procedimiento pero se encuentra en (Badillo, 2009). Finalmente, la Ec. (35) es discretizada espacialmente con el esquema de diferencias finitas híbrido:

**Término Convectivo.** El método upwind de primer orden es una combinación de los esquemas de diferencias finitas hacia atrás (backward) y hacia adelante (forward) de primer orden:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_j \left( \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_j &= \max(\mathbf{v}_j, 0) \cdot \left( \frac{\varphi_j - \varphi_{j-1}}{z_j - z_{j-1}} \right) \\ &\quad + \min(\mathbf{v}_j, 0) \cdot \left( \frac{\varphi_{j+1} - \varphi_j}{z_{j+1} - z_j} \right) \end{aligned} \quad (40)$$

**Término Difusivo.** El método de diferencias centradas que aproxima la segunda derivada espacial de la ecuación generalizada (35) es deducido al discretizar la derivada externa con un esquema de dirección (backward) y la derivada

interior con un operador de dirección contraria (forward).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left( D^{eff} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)_j &= a_1 \cdot \varphi_{j+1} + a_2 \cdot \varphi_j + a_3 \cdot \varphi_{j-1} \\ a_1 &= \frac{D_j^{eff}}{\Delta z_j \cdot \Delta z_{j+1}}; \\ a_2 &= - \left( \frac{D_j^{eff}}{\Delta z_j \cdot \Delta z_{j+1}} + \frac{D_{j-1}^{eff}}{\Delta z_j^2} \right); \\ a_3 &= \frac{D_{j-1}^{eff}}{\Delta z_j^2}; \end{aligned} \quad (41)$$

El modelo resultante de la discretización es un sistema de EDO con restricciones algebraicas (EDA) de la siguiente estructura:

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dt} &= f(\varphi, \mathbf{v}) \\ 0 &= g(\varphi, \mathbf{v}); \quad \varphi, f \in \mathbb{R}^n; \quad \mathbf{v}, g \in \mathbb{R}^m \end{aligned} \quad (42)$$

donde  $n = (11) \cdot (NX)$ ,  $m = (2) \cdot (NX)$  y  $NX$  es el tamaño de la malla espacial de discretización.

El sistema dinámico no lineal tiene una estructura de tres bandas, la cual es explotada por los métodos numéricos para la resolución eficiente de sistemas dinámicos de alto orden.

Las variables de entrada del modelo (42) son introducidas a través de las condiciones de frontera en  $z = 0$ :

1. *Flujo de masa del aire entrante:*  $\dot{\mathbf{m}}_{g,1}$

$$\dot{\mathbf{m}}_{g,1} = \rho_{g,1} \cdot \mathbf{v}_{g,1} \cdot AR \quad (43)$$

2. *Flujo de masa de biomasa:*  $\dot{\mathbf{m}}_{s,1}$

$$\dot{\mathbf{m}}_{s,1} = \frac{(\rho_{C,1} + \rho_{B,1}) \cdot \mathbf{v}_{s,1} \cdot AR}{2} \quad (44)$$

3. *Temperatura del aire entrante:*  $T_{g,1}$

Los trabajos de (Dixon y Pike, 2006) y (Gobel *et al.*, 2007) se tomaron como base para la elección de las variables de salida del modelo cuya definición en términos de las variables de estado está dada en las Ecs. (45)-(47).

1. *Valor calórico del gas de síntesis:*  $HHV_g$

$$HHV_g = \sum_i^{N_g} \Delta H_{c,i} Y_{gi,NX} \quad (45)$$

$\Delta H_{c,i}$  es la entalpía de combustión de la especie del gas  $i$  y  $Y_{gi,NX}$  es el valor de la fracción  $Y_{gi}$  en el último nodo del reactor.

2. *Masa del lecho de sólidos:*  $M_{lecho}$

$$M_{lecho} = \sum_{j=2}^{NX} \frac{(\rho_{C,j} + \rho_{B,j}) \cdot AR \cdot \Delta z_j}{\alpha_s} \quad (46)$$

3. *Flujo de masa del gas de síntesis:*  $\dot{\mathbf{m}}_{g,NX}$

$$\dot{\mathbf{m}}_{g,NX} = \rho_{g,NX} \cdot \mathbf{v}_{g,NX} \cdot AR \quad (47)$$

4. *Temperatura del gas de síntesis:*  $T_{g,NX}$

### II-D. Selección de malla espacial estática.

La elección de la distribución de la malla espacial se realizó con base en los perfiles espaciales encontrados en la literatura (Di Blasi, 2000): los gradientes espaciales de las variables de interés son mayores en una zona estrecha (de  $z = 0$  a  $z = 16\text{cm}$ ) por lo que la malla debe agrupar una mayor cantidad de elementos en dicha zona. Existen diversas distribuciones que pueden ser empleadas a fin de obtener un comportamiento similar como una distribución exponencial, polinomial (parábola) o sinusoidal. Sin embargo, los resultados presentados en este trabajo son simulados con una malla exponencial de 20 nodos logrando un buen compromiso entre exactitud y complejidad.

### II-E. Simulación numérica del modelo.

Se aplica una metodología directa en la solución numérica del sistema de EDA (42), la cual se basa en el teorema de la función implícita que garantiza la existencia en una vecindad de  $\mathbb{R}^m$  de una función vectorial única y suave  $\{G: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \mid \mathbf{v} = G(\varphi)\}$  si la matriz Jacobiana  $J_v = \frac{\partial g}{\partial \mathbf{v}}$  es no singular (Khalil, 2002). Una aproximación de la función  $G$ :  $\hat{G}(\varphi) = \hat{\mathbf{v}}$  se encuentra mediante el método de Newton vectorial y se sustituye en cada paso de integración en el sistema de EDO de la Ec. (42).

Empleando los valores de los parámetros de la referencia de (Badillo, 2009) se llevaron a cabo las simulaciones dinámicas a partir de condiciones iniciales obtenidas de los perfiles aproximados de las condiciones de operación estacionarias reportadas por (Di Blasi, 2000). Dicho estado de equilibrio es conocido como reactor estabilizado en la cima debido a que las reacciones exotérmicas de combustión que proveen de la energía química necesaria para que la gasificación se lleve a cabo dominan en la parte superior del mismo, por ello el proceso es esencialmente adiabático. El estado de equilibrio del sistema dinámico se alcanzó en 7000 segundos y está constituido por los perfiles espaciales de las variables dependientes (Figs. 3 y 4). En la Fig. 5 se muestra la complejidad del sistema distribuido introducida por los perfiles de las reacciones de combustión y pirólisis concentradas en una zona estrecha (9 cm) en la cima del gasificador y las reacciones de gasificación en el resto del dominio espacial.

En la tabla II se identifican las diferencias más importantes en los resultados de simulación que afectan la exactitud de la predicción de las variables de salida del modelo dinámico propuesto respecto a modelos validados experimentalmente con parámetros y condiciones de frontera semejantes a los utilizados en el caso de estudio. La concentración molar de  $CO$  es subestimada debido al carácter conservador de las cinéticas de combustión de los gases utilizadas, mientras que la concentración de  $CO_2$  es sobreestimada por el modelo propuesto debido a la ausencia de un término de disipación de energía (intercambio de calor con las paredes del reactor) que limite la combustión del carbonizado. Estas diferencias promueven una baja

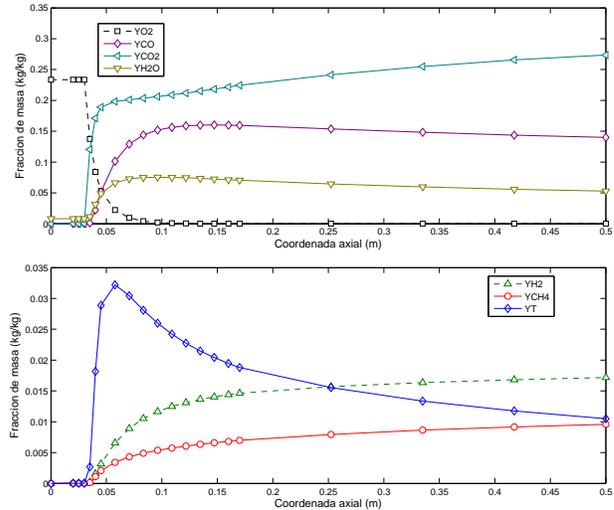


Figura 3. Perfiles de las fracciones máscas de las especies gaseosas.

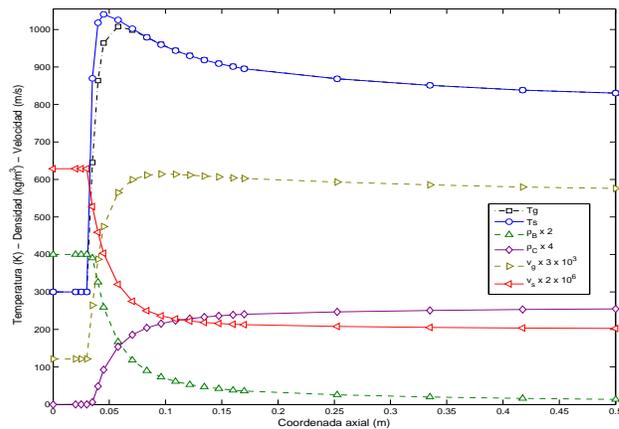


Figura 4. Perfiles de las temperaturas, densidades y velocidades.

predicción del valor calórico del gas de síntesis que debe ser tomada en cuenta en el cálculo de la eficiencia del proceso.

### III. CONCLUSIONES

Se desarrolló un modelado orientado a control de una clase de reactores de gasificación aplicando el método de líneas por diferencias finitas a un modelo dinámico de parámetros distribuidos obtenido a partir de principios fundamentales de conservación de masa y energía. El sistema dinámico deducido es no lineal con una estructura de tres bandas, tres entradas y cuatro salidas y un orden  $11 \cdot NX$  con  $NX$  el tamaño de la malla elegida. En las condiciones estacionarias, las variables de salida predichas por el modelo se aproximan satisfactoriamente a las reportadas en la literatura de referencia excepto en el contenido de  $CO$  y  $CO_2$  del gas de síntesis, obteniendo un valor calórico inferior al reportado. Con el objetivo de mejorar la predicción de estas fracciones molares se propone incluir un término de intercambio de calor con las paredes del reactor e incorporar el proceso de secado pues éste limita la temperatura máxima

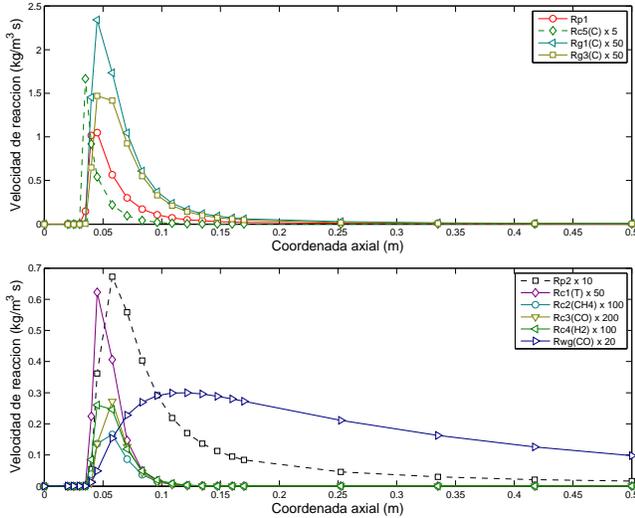


Figura 5. Perfiles axiales de las velocidades de reacción.

TABLA II

TABLA COMPARATIVA DE RESULTADOS.

| Variable                 | Ref1* <sup>2</sup> | Ref2* <sup>3</sup> | Ref3* <sup>4</sup> | Presente  |
|--------------------------|--------------------|--------------------|--------------------|-----------|
| $X_{CO,NX}$              | 0.198              | 0.17 – 0.18        | 0.17               | 0.13      |
| $X_{H2,NX}$              | 0.148              | 0.12 – 0.135       | 0.125              | 0.126     |
| $X_{CO2,NX}$             | 0.123              | 0.12 – 0.13        | 0.04 – 0.07        | 0.164     |
| $X_{CH4,NX}$             | 0.037              | --                 | 0.09 – 0.1         | 0.03      |
| $X_{H2O,NX}$             | 0.088              | --                 | --                 | 0.077     |
| $X_{N2,NX}$              | 0.404              | 0.45 – 0.55        | 0.535              | 0.47      |
| $T_{g,NX}(K)$            | 913                | 831                | 738                | 830       |
| $\dot{m}_g(kg/h)$        | 44                 | --                 | --                 | 42.7      |
| $LHV/HHV$ * <sup>1</sup> | 5.07/5.48          | --                 | 6.59/7.19          | 3.79/4.14 |

\*<sup>1</sup> ( $MJ/Nm^3$ ) Condición Normal:  $T_g = 293.15K$ ,  $P = 101.325kPa$

\*<sup>2</sup> (Di Blasi, 2000) (Simulación)

\*<sup>3</sup> (Manurung y Beenackers, 1993) (Experimental)

\*<sup>4</sup> (Rogel, 2007) (Simulación)

del carbonizado (Di Blasi, 2000). Cabe señalar que en este trabajo sólo se valida el comportamiento estacionario del modelo, sin embargo, en estudios posteriores se debe realizar una validación del comportamiento dinámico del modelo empleando los resultados experimentales de la literatura (Gobel *et al.*, 2007). Así mismo, el modelo obtenido es aún de alto orden para propósitos de control por lo que se deben incorporar métodos de reducción sistemática de orden de sistemas dinámicos no lineales. A su vez, es necesario simplificar varios submodelos a fin de reducir el número de parámetros que se deban identificar en el modelo total.

#### IV. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se realizó con fondos del proyecto 103640 del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología.

#### REFERENCIAS

Badillo, Ulises (2009). Modelado orientado a control de gasificadores. *Tesis de Maestría, Facultad de Ingeniería UNAM, México, D.F.*

Di Blasi, Colomba (2000). Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical Engineering Science* **55**, 2931–2944.

Dixon, R., M.S. Donne y A.W. Pike (1998). Dynamic modeling and simulation of the air blown gasification cycle prototype integrated plant. *International Conference on Simulation of IEE.*

Dixon, R. y A.W. Pike (2006). Alstom benchmark challenge ii on gasifier control. *IEE Proceedings Control Theory and Applications*. **153**, 254–261.

Gobel, Benny, Ulrik Henriksen, Torben Kvist Jensen, Bjorn Qvale y Niels Houbak (2007). The development of a computer model for a fixed bed gasifier and its use for optimization and control. *Bioresource Technology* **98**, 2043 – 2052.

Khalil, Hassan K.. (2002). *Nonlinear Systems, Third Edition*. Prentice Hall.

Manurung, R.K. y C.M. Beenackers (1993). Modeling and simulation of an open core downdraft moving bed rice husk gasifier. *Advances in Thermochemical Biomass Conversion. Proceedings of the International Conference on Advances in Thermochemical biomass Conversion*. **1**, 288–309.

Paes, Thijs (2005). Modeling for control of a biomass gasifier.

Rogel, Alejandro Ramírez (2007). Estudio numérico experimental de un gasificador estratificado que opera con biomasa, utilizando cfd. *Tesis de Doctorado, Facultad de Ingeniería UNAM, México, D.F.*

Schiesser, William E. y Graham W. Griffiths (2009). *A Compendium of Partial Differential Equation Models: Method of Lines Analysis with Matlab*. Cambridge University Press.

TABLA III  
NOMENCLATURA

|                       |  |
|-----------------------|--|
| $\rho_k$              | Densidad de la fase k                              |
| $\alpha_k$            | Fracción Volumétrica ocupada por fase k            |
| $v_k$                 | Velocidad axial de la fase k                       |
| $Y_{ki}$              | Fracción de masa de la especie i en la fase k      |
| $\tilde{H}_k$         | Entalpía por unidad de masa de la fase k           |
| $C_i$                 | Concentración molar de la especie i                |
| $T_k$                 | Temperatura de la fase k                           |
| $T_0$                 | Temperatura ambiente                               |
| $C_{p,k}$             | Calor específico de la fase k                      |
| $W_i$                 | Masa molecular de la especie i                     |
| $\nu_{i,n}$           | Coefficiente estequiométrico: especie i reacción n |
| $\lambda_k^{eff}$     | Conductividad térmica efectiva de la fase k        |
| $N_g$                 | Número de especies químicas en el gas              |
| $R_n$                 | Velocidad de la reacción n.                        |
| $M_{k,i}$             | Fuente de masa de la especie i en la fase k        |
| $\Delta H_n$          | Entalpía de la reacción n                          |
| $A_n$                 | Factor preexponencial de reacción n                |
| $E_n$                 | Energía de activación de reacción n                |
| $\mathcal{R}$         | Constante universal de los gases                   |
| $\eta_p$              | Densidad de número de partículas                   |
| $d_p$                 | Tamaño de la partícula                             |
| $A_p$                 | Área de la partícula                               |
| $X$                   | Conversión del carbonizado                         |
| $\chi^{ash}$          | Fracción de cenizas en el carbonizado              |
| $d_{p0}$              | Diámetro inicial de la partícula de carbonizado    |
| $r_m$                 | Coefficiente de transferencia de masa entre fases  |
| $h_{s \rightarrow g}$ | Coefficiente de transferencia de calor entre fases |
| $\zeta$               | Factor de corrección                               |
| $r_m^*$               | Coefficiente de transferencia de masa máximo       |
| $Re$                  | Número de Reynolds del gas                         |
| $Sc$                  | Número de Schmidt del gas                          |
| $Pr$                  | Número de Prandtl del gas                          |
| $\mu_g$               | Viscosidad del gas                                 |
| $\mathcal{D}_{gi}$    | Difusión de la especie gaseosa i                   |
| $AR$                  | Área transversal interna del reactor               |
| $L$                   | Longitud del reactor                               |