MODELOS MATEMÁTICOS DE LA TEMPERATURA DE LLAMA ADIABÁTICA PARA PRODUCTOS DE COMBUSTIÓN DE SÍNTESIS DE GAS

MATHEMATICAL MODELS OF THE ADIABATIC FLAME TEMPERATURE FOR SYNTHESIS GAS COMBUSTION PRODUCTS

Edwin Santiago Rios Escalante^{1a}
 João Andrade de Carvalho JR^{1b}
 Carlos Alexis Alvarado Silva^{2c}



Fecha de recepción: 15 dFecha de aprobación: 30 dDOI: https://doi.org/10.1001

: 15 de Octubre del 2020 : 30 de Noviembre del 2020 : https://doi.org/

Resumen

La situación energética y medioambiental global hace que los sistemas de generación de energía basados en energías renovables sean cada vez más importantes. Estos sistemas tienen una doble ventaja, ya que permiten la diversificación energética y reducen la dependencia del petróleo, al tiempo que se reducen las emisiones globales de CO₂. La biomasa es una de las fuentes de energía más prometedoras en los países desarrollados y emergentes, pero aún no experimenta el desarrollo esperado. El sistema de gasificación de biomasa es un sistema con gran potencial, ya que permite la generación de energía tanto térmica como eléctrica, a través de tecnologías de bajo costo, como gasificadores de lecho fijo (potencia media-baja), o reactores de lecho. fluidizado con tecnología más exigente y más capacidad de generación. Transformar la biomasa en un combustible gaseoso, utilizable en motores de combustión interna convencionales o turbinas de gas como combustible, la biomasa requiere varios pasos por procesos termoquímicos compuestos de reacciones endotérmicas (secado, volatilización y reducción) y exotérmicas (oxidación y carbón volátil). En este trabajo se calcula la temperatura de la llama adiabática con el objetivo de obtener la materia prima que produce una mayor energía térmica, utilizando para nuestro caso cinco tipos de biomasa como son: Eucalyptus Globulus o Blue Eucalyptus, Cane Bagasse (subproducto de la industria azucarera), Cascara de Arroz, Sequoia Gigante (residual) y Álamo Negro, con mayor énfasis en este último por considerarse una buena alternativa por su aparentemente rápido crecimiento (aprox. 2 años). De esta forma, una comparación de la energía térmica producida por los cinco tipos de biomasa utilizados.

Palabras Clave: Temperatura de llama adiabática, biomasa, gasificación.

Abstract

The global energy and environmental situation makes energy generation systems based on renewable energies increasingly important. These systems have a double advantage, as they allow energy diversification and reduce dependence on oil, while global emissions of CO₂ are reduced. Biomass is one of the most promising sources of energy in developed and emerging countries, but it still does not undergo the expected development. The biomass gasification system is a system with great potential, since it allows the generation of thermal as well as electrical energy, through low cost technologies, such as fixed bed gasifiers (medium - low power), or bed reactors fluidized with more demanding technology and more generation capacity. Transforming biomass into a gaseous fuel, usable in conventional internal combustion engines or gas turbines as fuel, biomass requires several passages through thermochemical processes composed of endothermic (drying, volatilization and reduction) and exothermic reactions (oxidation and volatile coal). In this work, the adiabatic flame temperature is calculated with the objective of obtaining the raw material that produces a higher thermal energy, using for our case five types of biomass such as: Eucalyptus Globulus or Blue Eucalyptus, Cane Bagasse (by-product of the industry sugar bowl), Rice Husk, Redwood Big (residual) and Black Poplar, with greater emphasis on the latter because it is considered a good alternative due to its apparently rapid growth (approx. 2 years). In this way, a comparison of the thermal energy produced by the five types of biomass used

Keywords: Adiabatic flame temperature, biomass, gasification

¹ Universidade Estadual Paulista "Julhio de Mesquita Filho" – Campus Guaratinguetá, Brasil.

² Universidad Señor de Sipan, Pimentel – Chiclayo – Perú.

^a Magister en Ingeniería Mecánica, esre 2808@hotmail.com

^b Doctor en Ingeniería Mecánica, joao@feg.unesp.br

^c Magister en Ingeniería Mecánica, <u>calvarados@crece.uss.edu.pe</u>

1. Introducción

La administración de residuos sólidos urbanos (RSU) es uno de los problemas más importantes, especialmente para el desarrollo de los países. La cantidad de sólidos generados por las actividades humanas ha ido aumentando drásticamente y estas características dependen del lugar y el estilo de vida de las personas. En general, se pueden encontrar cinco categorías aceptables para el control de desechos, a saber: 1) prevención, 2) reutilización y reciclaje, 3) desechos orgánicos, 4) incineración, 5) basura. Últimamente, la incineración se considera uno de los procedimientos más eficaces para los residuos (Tchobanoglous & Kreith, 2002). La incineración no solo reduce el volumen de residuos sólidos, también convierte este tipo de residuos en una forma de energía.

Este esquema se conoce popularmente como residuos para conversión de energía (WTE). Sin embargo, dados los problemas ambientales promedio relacionados con la incineración, es necesario instalar equipos sofisticados para limpiar los gases de escape. Dependiendo del país, estos pueden ser grandes y costosos (Morris & Waldheim, 1998).

La conversión termoquímica (combustión, gasificación y pirólisis) es la principal tecnología que se puede utilizar ampliamente para generar energía sin contaminantes ambientales (Gasification Word Database 2007 (Current Industry Status Report), 2007). La gasificación es uno de los procesos de conversión termoquímica en los que se pueden producir combustibles limpios. La gasificación es compatible con nuevas aplicaciones en el área de conversión de biomasa (cuando se usa con biomasa, es carbono natural); el carbono se convierte en combustible líquido útil, sobre todo se logra un mayor rendimiento para el medio ambiente con la captura de CO_2 y eliminación de azufre, y la posibilidad de mejorar sustancialmente la eficiencia cuando se incluye en centrales de ciclo combinado con Gasificador (IGCC).

La gasificación es un proceso termoquímico en el que el contenido de carbono de la materia prima se convierte en gas de síntesis que comprende hidrógeno (H₂) y monóxido de carbono (CO). La materia prima típica utilizada en los procesos de gasificación es el carbón y la biomasa, así como los residuos peligrosos. La producción de gas de síntesis mediante gasificación es un proceso complejo que depende de varios factores, incluida la composición de la materia prima, las condiciones de presión y temperatura del gasificador y el tipo y cantidad de oxidante y moderador (CO₂ el vapor) (Abuadala, I, & G, 2010).

El proceso de gasificación utiliza la combustión parcial de la materia prima, controlando cuidadosamente la cantidad de oxidante. La cantidad de oxidante también controla la temperatura del proceso de gasificación, que es el parámetro más importante del gasificador, según informó Walawender (Walawender, Hoveland, & Fan, 1985).

El proceso de gasificación es una serie de procesos exotérmicos y endotérmicos. Por lo tanto, se requiere una cantidad considerable de energía térmica para sostener el proceso, esta energía es suministrada por una fuente de calor externa o por la combustión parcial de la materia prima. Durante la combustión parcial, una cantidad considerable (~ 25%) de materia prima se quema mediante el proceso de gasificación, lo que proporciona energía para disminuir la humedad. Esta cantidad depende principalmente de la composición y el poder calorífico de la materia prima.

La eficiencia del proceso de gasificación es la principal preocupación que decide la viabilidad de diseñar un sistema. La eficiencia se mide en términos de la potencia calorífica del gas de síntesis producido con respecto a la potencia calorífica de la materia prima (Nakamura, y otros, 2008) (Sharma, 2010). El único elemento limpio presente en el gas producido por gasificación es H_2 , porque la combustión de H_2 produce agua. Por otro lado, el CO y el CH₄ se utilizan para producir CO₂ por combustión, lo que genera problemas ambientales (Pathak, y otros, 2008). El gas metano se puede convertir en H_2 y CO₂ a alta temperatura, pero el problema sigue siendo el CO porque su combustión da lugar a CO₂. Por lo tanto, la reacción de desplazamiento se usa ampliamente para convertir CO en H_2 (Chen & Jiang, 2008). El resto del CO₂ se separa típicamente del sistema anterior mediante el uso de productos de gasificación en la generación de energía, es decir, el ciclo Brayton de turbinas de gas o

celdas de combustible. De esta manera, se produce combustible limpio en términos de gas H_2 . Por tanto, el H_2 producido por el sistema de gasificación depende de la producción directa de gas H_2 a partir de la materia prima y de la producción indirecta que convierte el CO mediante una reacción de desplazamiento. En este sentido, el CO contribuye a la formación de combustible limpio y aumenta el valor de la planta generadora de energía (CGE).

El modelo de equilibrio termodinámico aproximado se usa ampliamente para evaluar la eficiencia del sistema de gasificación en términos de la composición y eficiencia del gas producto. Zanail (Zainal, Ali, Lean, & Seetharamu, 2001) desarrolló un modelo de equilibrio termodinámico para predecir la gasificación en el gasificador Downdraft. Se investigó el estudio de los parámetros en términos del contenido de humedad inicial en la materia prima y la temperatura en la zona de gasificación. Finalmente, se calculó la potencia calorífica del gas de síntesis producido y mostró una tendencia a disminuir con el aumento del contenido de humedad en la materia prima. Jarungthammachote (Jarungthammachote & Dutta, 2007) desarrolla un tipo de equilibrio similar al de Zainal (Zainal, Ali, Lean, & Seetharamu, 2001) para calcular la composición del gas de síntesis producido por los residuos sólidos urbanos utilizando un gasificador de Downdraft.

A continuación, se muestra si se han realizado supuestos para este análisis:

- La materia prima en seco y sin cenizas.
- El flujo en estado estacionario se considera dentro del gasificador.
- La energía potencial y cinética son insignificantes.
- Las mejores especies se consideran en los gases producto, a saber: CO, CO₂, H₂, CH₄ y N₂.
- No se considera la contribución de la ceniza a la ecuación energética.
- Se considera el comportamiento del gas ideal para toda la fase gaseosa.
- Se considera que el gasificador funciona de forma isotérmica y la caída de presión en el gasificador es depreciable.
- No hay pérdidas de calor, es decir, una condición de funcionamiento adiabática.
- Para cada etapa del gasificador, todos los gases producto se consideran a la misma temperatura

Temperatura de llama adiabática

Llamamos temperatura de llama adiabática a la temperatura más alta que se puede obtener para los productos de combustión, alcanzándose la misma, si no hay pérdida de energía fuera del sistema durante el proceso de combustión.

Para calcular la temperatura de la llama adiabática, necesitamos conocer el calor específico a presión constante, C_p , de la mezcla de gases que constituye los productos de combustión. Si este calor específico correspondiera a una sola sustancia y el rango de temperatura entre T_L y T_F fuera constante para todos, sería suficiente hacer:

$$\Delta H_c = C_p (T_L - T_F)$$

Como el calor específico varía mucho con la temperatura, ya que es una mezcla de gases, el lado derecho de la ecuación anterior debe reemplazarse por una integral:

$$\Delta H_c = \int_{T_L}^{T_F} C_p dT$$

2. Materiales y Métodos

Los cálculos se realizan para cinco tipos diferentes de biomasa como son: bagazo de caña de azúcar, cascarilla de arroz, eucalipto, secuoya gigante, álamo negro, con el fin de obtener la mayor energía térmica. La Tabla 1 muestra si el último análisis se realizó sin cenizas secas para los cinco tipos de biomasa. El porcentaje en parte del carbono presente en la biomasa en comparación con los demás elementos.

1 abia 1.								
Análisis elemental de materia prima sobre una base seca sin cenizas								
Materia Prima	$C \% W_t$	H % W_t	$O \% W_t$	N % W_t	S % W_t			
Bagazo de caña	44.80	5.35	39.55	5.35	0.01			
Cascara de arroz	38.5	5.7	39.8	0.5	0.00			
Eucalipto Globulus	48.18	5.92	44.18	0.39	0.01			
Secoya gigante	53.5	5.9	40.3	0.10	0.00			
Alamo Negro	49.2	6.3	44.13	0.33	0.02			
\mathbf{F} (D 1' 0010)								

Fuente: (Prabir, 2010)

Tabla 1

El porcentaje en orden de cada materia prima se utiliza para calcular la fórmula empírica considerando carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno. La Tabla 2 muestra si la fórmula empírica correspondiente a cada biomasa. Estas fórmulas se calculan sobre una base molar por normalización a un solo átomo de carbono. Los valores caloríficos superior (PCS) e inferior (PCI) se muestran en la Tabla 3, y se calculan utilizando la siguiente relación (Prabir, 2010).

Muchos países de Europa definen la eficiencia de los sistemas térmicos en términos de PCI. De esta forma, una eficiencia expresada de esta manera es mayor que la expresada en términos de PCS como suele ocurrir en varios países entre ellos Estados Unidos y Canadá.

$$PCS\left(\frac{KJ}{Kg}\right) = 349.1C + 1178.3H - 103.4O - 15.1N$$

$$PCI = PCS - h_g \left(\frac{9H}{100} - \frac{9M}{100}\right)$$

- 0 < C < 92%, 0.43 < H < 25%
- 0 < 0 < 50%, 0.43 < *N* < 5.6%
- 0 < Cinzas < 71%, 47.45 < PCS < 55.345 KJ/Kg

Dónde:

PCI: menor potencia térmica
PCS: Potencia térmica superior
H: porcentaje de hidrógeno
M: porcentaje de humedad
h_s: Calor latente del vapor (2260 KJ / Kg)

Tabla 2.	
----------	--

Matária nrima	

Matéria prima	Formula Empírica
Bagazo de cana	$CH_{1.4236}O_{0.6622}N_{0.0072}$
Cascara de arroz	$CH_{1.4236}O_{0.6622}N_{0.0072}$
Eucalipto Globulus	$CH_{1.4236}O_{0.6622}N_{0.0072}$
Secoya gigante	$CH_{1.4236}O_{0.6622}N_{0.0072}$
Álamo Negro	$CH_{1.4236}O_{0.6622}N_{0.0072}$

Fuente: (Prabir, 2010)

touer cutoryteo superior e ngerior de cutu Diomusu								
Materia	PCS	PCS	PCI	PCI				
prima	(KJ/Kmol)	(MJ/Kg)	(KJ/Kmol)	(MJ/Kg)				
Bagazo de cana	430877	17.85	404591	16.76				
Cascara de arroz	543796	16.03	503796	14.87				
Eucalipto Globulus	472838	19.22	443217	18.02				
Secoya gigante	480711	21.46	453829	20.26				
Álamo Negro	488756	20.03	457489	18.75				

Tabla 3.						
Poder calorifico	superior e	inferior	de d	cada	Bioma	sc

Fuente: (Prabir, 2010)

3. Modelo de gasificación

Para el desarrollo del modelo, la fórmula química de la materia prima se define como $CH_xO_yN_z$ y la reacción de gasificación se puede escribir de la siguiente manera:

$$CH_{x}O_{y}N_{z} + m(O_{2} + 3.76N_{2}) \rightarrow n_{CO}CO + n_{H_{2}}H_{2} + n_{CO_{2}}CO_{2} + n_{H_{2}O}H_{2}O + n_{CH_{4}}CH_{4} + \left(\frac{z}{2} + 3.76m\right)N_{2}$$
(1)

Donde, x, y, z son los números de átomos de hidrógeno, oxígeno y nitrógeno, por número de átomos de carbono en la materia prima, respectivamente. En la reacción química se considera biomasa sin humedad y m es la cantidad de oxígeno por Kmol de materia prima. Donde m_w pode ser calculado con:

$$m_w = \frac{M_{Biomassa}m}{18(1-m)}$$

Todos los reactivos de la ecuación (1) se consideran 25 °C. En el lado derecho de la ecuación (1) tenemos los n_i que son los números de moles de cada especie i que se desconocen.

3.1. Modelo de gasificación

Para encontrar los coeficientes de las cinco especies que componen el gas producto, se requieren cinco ecuaciones. Estas ecuaciones se generan utilizando el balance de masa y las relaciones constantes de equilibrio. Considerando la reacción de gasificación global en la ecuación (1), las tres primeras ecuaciones se formulan para un elemento químico como se muestra en las ecuaciones (2) - (4):

Balance de carbono:

$$n_{CO} + n_{CO_2} + n_{CH_4} = 1 \tag{2}$$

Balance de Hidrogênio:

$$2n_{H_2} + 2n_{H_2O} + 4n_{CH_4} = x \tag{3}$$

Balance de Oxigênio:

$$n_{CO} + 2n_{CO_2} + n_{H_2O} = y + 2m \tag{4}$$

3.2. Termodinámica de Equilíbrio

El equilibrio químico generalmente se explica minimizando la energía libre de Gibbs o usando la constante de equilibrio.

Para minimizar la energía libre de Gibbs, utilizamos métodos de optimización con restricciones que generalmente requieren una comprensión de teorías matemáticas complejas. Mediante este flujo, el presente modelo de equilibrio termodinámico se desarrolla basándose en la constante de equilibrio y no en la energía libre de Gibbs. Las otras ecuaciones se obtienen de las constantes de equilibrio de las reacciones que ocurren en la zona de gasificación. Las principales reacciones que ocurren en un gasificador Downdraft se muestran a continuación:

Reacción de Boudouard: C+CO₂→2CO

Reacción Agua-gas: $C+H_2O\rightarrow CO+H_2$

Las reacciones que se muestran arriba se pueden mezclar en una reacción simple conocida como reacción de cambio de vapor de agua.

$$CO + H_2O \to CO_2 + H_2$$

Otra reacción muy importante en el proceso de gasificación es la formación de metano como se muestra a continuación:

$$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$$

Entonces, la constante de equilibrio para las ecuaciones anteriores en función de su composición molar se puede escribir de la siguiente manera:

$$K_1 = \frac{(n_{CO_2})(n_{H_2})}{(n_{CO})(n_{H_2O})}$$
(5)

$$K_2 = \frac{n_{CH_4}}{(n_{H_2})^2} n_{total}$$
(6)

Donde N_{total} es el número total de moles gaseosos en el reactor gasificador. Entonces las ecuaciones (5) y (6) se pueden modificar así:

$$K_{1}(n_{CO})(n_{H_{2}O}) = (n_{CO_{2}})(n_{H_{2}})$$
(7)
$$K_{2}(n_{H_{2}})^{2} = (n_{CH_{4}})(n_{total})$$
(8)

Para determinar el valor de K_1 y K_2 se utilizan las ecuaciones (9) y (10) para el estado de equilibrio de una mezcla de gases ideales.

$$\ln k(T) = -\frac{\Delta G^{0}_{T}}{\bar{R}T}$$
(9)
$$\Delta G^{0}_{T} = \sum_{i} X_{i} \Delta \overline{g^{o}}_{f,T,l}$$
(10)

Donde $\Delta \overline{g_{f,T,l}^o}$ es calculado empíricamente, \overline{R} es la constante universal de los gases, 8.314 *KJ*/(*Kmol. K*), ΔG_T^0 es una función de Gibbs standard de reacción en $\Delta \overline{g_{f,T,l}^o}$ representa una función de Gibbs standard de formación a una temperatura *T* para cada espécie *i* que puede ser expresado por la siguiente ecuación empírica:

$$\Delta \overline{g^{o}}_{f,T} = \overline{h^{o}}_{f} - a'Tln(T) - b'^{T^{2}} - \left(\frac{c'}{2}\right)T^{3} - \left(\frac{d'}{3}\right)T^{4} + \left(\frac{e'}{2T}\right) + f' + g'T$$
(11)

Los valores de los coeficientes a'-g' y la entalpia de formación de gases son presentados en la tabla 4 . Se supone que el gas de síntesis es una mezcla de gases ideales, por lo que se puede realizar la siguiente formulación:

$$\left(\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} \right)_{gs} = n_{CO} \left[\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} + \left(\bar{h}^{0}{}_{T} - \bar{h}^{0}{}_{298} \right) \right]_{CO} + n_{H_{2}} \left[\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} + \left(\bar{h}^{0}{}_{T} - \bar{h}^{0}{}_{298} \right) \right]_{H_{2}} + n_{CO_{2}} \left[\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} + \left(\bar{h}^{0}{}_{T} - \bar{h}^{0}{}_{298} \right) \right]_{CO_{2}} + n_{CH_{4}} \left[\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} + \left(\bar{h}^{0}{}_{T} - \bar{h}^{0}{}_{298} \right) \right]_{CH_{4}} + n_{H_{2}O} \left[\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} + \left(\bar{h}^{0}{}_{T} - \bar{h}^{0}{}_{298} \right) \right]_{H_{2}O} + n_{N_{2}} \left[\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} + \left(\bar{h}^{0}{}_{T} - \bar{h}^{0}{}_{298} \right) \right]_{N_{2}}$$

$$(12)$$

Donde $T = 800^{\circ}\text{C} = 1073K \text{ y} (\bar{h}^{0}_{T} - \bar{h}^{0}_{298})$ representa la diferencia de entalpia entre qualquer estado o estado de referencia. Esto puede aproximarse mediante:

$$\left(\bar{h}^{0}_{T}-\bar{h}^{0}_{298}\right)=\int_{298}^{T}\bar{C}_{p}(T)dT,$$
 (13)

Donde $\overline{C_p}(T)$ es el calor específico a presión constante em KJ/KmolK y está en función de la temperatura. Esto puede definirse por la ecuación empírica:

$$\bar{C}_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^3$$
 (14)

Donde *T* es la temperatura em Kelvin (°K) y:

$$\int_{298}^{T} \bar{C}_p dT = aT + bT^2 + cT^3 + dT^4 + \kappa$$

Donde κ es una constante obtenida de la integración de *a*, *b*, *c*, *d* los coeficientes específicos de cada especie, que se muestran en la tabla 5.

Ahora que tenemos una entalpía de formación de combustible (gas de síntesis) la temperatura de la llama adiabática se puede calcular considerando la combustión completa, mediante la siguiente reacción:

$$\left[n_{CO}CO + n_{H_2}H_2 + n_{CO_2}CO_2 + n_{H_2O}H_2O + n_{CH_4}CH_4 + \left(\frac{z}{2} + 3.76m\right)N_2 \right]_{gs} + aO_2 + ax3.76N_2$$

 $\rightarrow bCO_2 + cH_2O + ax3.76N_2$

Mediante un simple balance de elementos C, H, O, N, podemos obtener los coeficientes estequiométricos a, b, c. Finalmente utilizando la ecuación de balance energético para un sistema abierto (cámara de combustión) en los casos en los que hay reacciones químicas.

$$Q - W_t = \sum n_P \bar{h}_P - \sum n_R \bar{h}_R + \sum n_P M_p \left(\frac{V_s^2}{2} + gZ_s\right) - \sum n_R M_R \left(\frac{V_e^2}{2} + gZ_e\right)$$

Dado que se considera que la cámara de combustión está inmóvil y adiabática, la ecuación se puede escribir de la siguiente manera:

$$\sum_{R_{P}\bar{h}_{P}} n_{P}\bar{h}_{P} = \sum_{R_{P}} n_{R}\bar{h}_{R}$$
$$\sum_{R_{P}} n_{P} [\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} + (\bar{h}^{0}{}_{T} - \bar{h}^{0}{}_{298})]_{P} = \sum_{R_{P}} n_{R} [\Delta \bar{h}^{0}{}_{f-298} + (\bar{h}^{0}{}_{T} - \bar{h}^{0}{}_{298})]_{R}$$

Sustituyendo valores podemos obtener la temperatura de llama adiabática. Con este resultado podemos saber cuál de las biomasas utilizadas transformará la energía térmica almacenada en mayor cantidad en energía utilizable. Además, se puede mostrar la relación que existe entre el PCI de biomasa y la temperatura de llama adiabática.

Tabla 4.

Valor de $\overline{h^o}_f(KJ/Kmol)$ y coeficientes de la ecuación empírica para $\Delta \overline{g^o}_{f,T}(KJ/Kmol)$

Compound	$ar{h}^{ m o}_{ m f}$	<i>a</i> ′	b'	c'	đ	e'	f	g'
CO CO ₂ H ₂ O CH ₄	-110.5 -393.5 -241.8 -74.8	$\begin{array}{c} 5.619 \times 10^{-3} \\ -1.949 \times 10^{-2} \\ -8.950 \times 10^{-3} \\ -4.620 \times 10^{-2} \end{array}$	$\begin{array}{c} -1.190 \times 10^{-5} \\ 3.122 \times 10^{-5} \\ -3.672 \times 10^{-6} \\ 1.130 \times 10^{-5} \end{array}$	$\begin{array}{c} 6.383 \times 10^{-9} \\ -2.448 \times 10^{-8} \\ 5.209 \times 10^{-9} \\ 1.319 \times 10^{-8} \end{array}$	$\begin{array}{c} -1.846 \times 10^{-12} \\ 6.946 \times 10^{-12} \\ -1.478 \times 10^{-12} \\ -6.647 \times 10^{-12} \end{array}$	$\begin{array}{c} -4.891 \times 10^2 \\ -4.891 \times 10^2 \\ 0.0 \\ -4.891 \times 10^2 \end{array}$	8.684×10^{-1} 5.270 2.868 1.411 × 10 ¹	$\begin{array}{c} -6.131 \times 10^{-2} \\ -1.207 \times 10^{-1} \\ -1.722 \times 10^{-2} \\ -2.234 \times 10^{-1} \end{array}$

Fuente: (Probstein & Hicks, 1982)

Tabla 5.

Coeficientes de calor específico para la ecuación empírica

Gas species	а	b	с	d	Temperature range (K)
Hydrogen	29.11	-0.1916×10^{-2}	0.4003×10^{-5}	-0.8704×10^{-9}	273-1800
Carbon monoxide	28.16	0.1675×10^{-2}	0.5372×10^{-5}	-2.222×10^{-9}	273-1800
Carbon dioxide	22.26	5.981×10^{-2}	-3.501×10^{-5}	-7.469×10^{-9}	273-1800
Water vapor	32.24	0.1923×10^{-2}	1.055×10^{-5}	-3.595×10^{-9}	273-1800
Methane	19.89	5.204×10^{-2}	1.269×10^{-5}	-11.01×10^{-9}	273-1500
Nitrogen	28.90	-0.1571×10^{-2}	0.8081×10^{-5}	-2.873×10^{-9}	273-1800

Fuente: (Cengel, 2002)

4. Resultados

Se realizó una comparación de las cantidades de moles de cada elemento que forma parte del gas de síntesis. (CO, H_2 , CO_2 , CH_4 , N_2), utilizando el gráfico obtenido en el artículo de Jarungthammachote (Jarungthammachote & Dutta, 2007).



En este caso las cantidades obtenidas al analizar las fórmulas empíricas son:

 $\begin{array}{l} 17.25\% \leq CO \leq 17.73\%,\\ 9.91\% \leq CO_2 \leq 11.87\%,\\ 1.41\% \leq CH_4 \leq 1.7\%,\\ 11.9\% \leq H_2 \leq 13.06\%,\\ 48.72\% \leq N_2 \leq 51.63\%. \end{array}$

El modelo termoquímico se aplica a los cinco tipos de biomasa como son: Bagazo de Caña de Azúcar, Cascarilla de Arroz, Eucalyptus Globulus (Eucalipto Azul), Secuoya Gigante, Álamo negro, al realizar el cálculo para cada biomasa considerada, tenemos los siguientes resultados:



Podemos observar que la mayor eficiencia de gasificación es para el bagazo de caña de azúcar y la menor eficiencia de gasificación es para la cascarilla de arroz con valores de 95.08% y 79.19% respectivamente. Indica la capacidad del gasificador para intercambiar la energía contenida en la materia prima (biomasa) en energía utilizable (gas de síntesis).

El valor más alto para el PCI del gas de síntesis para los cinco tipos diferentes de materia prima es para la gasificación de la cáscara de arroz y tiene un valor de 398969,12 KJ/Kmol.



El gas de síntesis, producido por cada biomasa, se utilizó en un proceso de combustión completo o estequiométrico y se puede obtener la temperatura de llama adiabática que indica cuál de las materias primas tiene mayor energía térmica ya que se calcula con medidas de temperatura.



Se realizó una comparación con los resultados obtenidos en la simulación de la combustión del gas de síntesis en la referencia de (Mendiburo, 2012)



Como puede ver los resultados obtenidos para una combustión completa ($\alpha = 1$) de gas de sínteses de los cinco tipos de biomassa som cercamos a lós obtendo com ele modelo de equilíbrio termoquímico realizado en este trabajo.

5. Conclusiones

- El modelo de equilibrio termodinámico fue desarrollado para el gasificador Downdraft con el propósito de calcular la composición del gas producido, también se puede calcular la eficiencia de gasificación para cada materia prima: bagazo de caña de azúcar, cascarilla de arroz, eucalipto globulus, secuoya gigante, álamo negro.
- El aire se utiliza para oxidar (proceso de combustión) el gas producido por la materia prima (gas de síntesis) a los cinco tipos de materia prima.
- La fórmula empírica y los valores caloríficos se calcularon utilizando el resultado del último análisis (análisis final) de cada materia prima.
- Para encontrar la composición del gas producto, se utilizaron cinco ecuaciones, tres de las cuales representan ecuaciones de equilibrio elementales y las otras dos son ecuaciones de constante de equilibrio.
- Para el tipo de gasificador elegido (Downdraft), se asumió una temperatura de 800 °C para el gas de síntesis.
- Por las suposiciones hechas al inicio se encontró que la mayor energía térmica es para la secuoya gigante con un valor de 2253.34 K por otro lado, la cáscara de arroz utilizada como materia prima es la que tiene el mayor valor de PCI para el gas de síntesis.

6. Referencias

Abuadala, A., I, D., & G, N. (2010). Exergy analysis of hydrogen production from biomass gasification. International Journal of Hydrogen Energy, 4981-4990.

Altafini, C., Wander, P & Barreto R. Prediction of the working parameters of a wood waste gasifier through an equilibrium model. Energy Convers Manage 2003; 44: p.2763-77.

- Bacon, D., Downie, J., Hsu, J & Peters, J. Modeling of fluidized bed wood. Gasifiers. In: Overend RP, Milne TA, Mudge KL, editors. Fundamentals of thermochemical biomass conversion. UK: Elsevier Applied Science Publishers; 1982.p.717-32.
- Cengel, Y. B. (2002). Thermodynamics an engineering approach. . New York: McGraw-Hill.
- Chen, W., & Jiang, T. (2008). An experimental study on carbon monoxide conversion and hydrogen generation from water gas shift reaction. *Energy Conversion and Management*, 2801-2808
- Gasification Word Database 2007 (Current Industry Status Report). (2007). Office of Fossil Energy Technology Laboratory.
- Green, D., Perry's chemical engineers handbook. 1984: McGraw Hill New York.
- Higman, C. & Van Der Burgt, M. Gasification. 2003: Gulf Professional Publishing.

Higman, C., van der Burgt, M., 2008. Gasification, 2nd ed. Gulf Professional Publishing/Elsevier.

- IFP–Innovation Energy Environment, 2007. Potential biomass mobilization for biofuel production worldwide, in Europe and in France, Panaroma, <u>www.ifp.fr</u>.
- J.A.Carvalho, M.Q. McQuay, Princípios de Combustão Aplicada (Principles of Applied Combustion), UFSCP Ed. São Paulo – Brasil, 2007 (In portuguese)
- Jarungthammachote, s., & Dutta, A. (2007). Thermodynamic Equilibrium model and second law analysis of a Downdraft waste gasifier. *Energy*, 1660-1669.
- Jarungthammachote, S., & Dutta, A. (2007). Thermodynamics equilibrium model and second law analysis of a downdraft waste gasifier. *Energy*, 1660-1669.
- Li, X., Grace JR., Watkinson., AP, Lim CJ., Ergudenter, A. Equilibrium modeling of gasification: a free energy minimization approach and its application to a circulating fluidized bed coal gasifier. Fuel 2001; 80: p.195-207.
- Mendiburo, A. (2012). Simulação da produção e combustão de gás de síntese oriundo de gaseificadores de leito fixo.
- Morris, M., & Waldheim, L. (1998). Energy recovery from solid waste fuels using advanced gasification technology. Waste Manage.
- Mountouris, A., Voutsas, E. & Tassios, D. Solid waste plasma gasification: Equilibrium model development and exergy analysis. Energy conversion and Management, 2006. 47 (13-14): p. 1723-1737.
- Nakamura, A., Kiyonaga, E., Yamamura, Y., Shimizu, Y., Minowa, T., Noda, Y., & Matsumura, Y. (2008). Gasification of catalyst-suspended chicken manure in supercritical water. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 433-440.
- Pathak, B., Patel, S., Bhave, A., Bhoi, P., Sharma, A., & Shah, N. (2008). Performance evaluation of and agricultural residue-based modular throat-type downdraft gasifier for thermal application. *Biomass and energy*, 72-77.

Prabir, B. (2010). *Biomass, Gasification and Pyrolysis: Practical, design and Theory*. Probstein R., Hicks R. Synthetic fuel. New York: McGraw-Hill; 1982.

Rezaiyan, J. & Cheremisinoff, N, Gasification technologies: A primer for engineers and scientist. 2005: CRC.

- Ruggiero, M. & Manfrida G. An equilibrium model for biomass gasification process. Renew Energy 1999; 16: p.1106-9.
- Sharma, A. (2010). Modeling and simulation of a downdraft biomass gasifier 1. Model development and validation. *Energy Conversion and Management*.
- Stephen, R., Turns. An introduction to combustion: concepts and applications. Mechanical Engineering Series. McGraw Hill, 2000.
- Tchobanoglous, G., & Kreith, F. (2002). *Handbook of solid waste management*. New York: McGraw-Hill.
- Tol, R. The marginal damage costs of carbon dioxide emissions: an assessment of the uncertainties. Energy policy, 2005. 33 (16): p. 2064-2074.
- Walawender, W., Hoveland, D., & Fan, L. (1985). Steam gasification of pure cellulose. 1. Uniform temperature profile. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 813-817.
- WENDER, I. Reactions of synthesis gas. Fuel Processing Technology, vol. 48, p. 189-297, 1996
- Xiang, W; Wang, S & Di, T, Investigation of gasification chemical looping combustion combined cycle performance. Energy and Fuels, 2008. 22(2): p. 961-966.
- Zainal, Z., Ali, R., Lean, C., & Seetharamu, K. (2001). Prediction of performance of a downdraft gasifier using equilibrium modeling for different biomass materials. *Energy conversion and Management*, 1499-1515.