



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

MODELOS NO LINEALES DE BAJO ORDEN PARA
DISEÑO CONTROL Y MONITOREO DE REACTORES DE GASIFICACIÓN

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
LUIS ALBERTO CANALES MEZA

TUTORES PRINCIPALES
DR. LUIS AGUSTÍN ÁLVAREZ-ICAZA LONGORIA, II-UNAM
DR. JESÚS ÁLVAREZ CALDERÓN, UAM-I
COMITÉ TUTOR
DR. JAIME ALBERTO MORENO PÉREZ, II-UNAM
DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ, II-UNAM

MÉXICO, D. F., DICIEMBRE DE 2018

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Jaime Alberto Moreno Pérez, II-UNAM
Secretario: Dr. William Vicente y Rodríguez, II-UNAM
Primer vocal: Dr. Luis Agustín Álvarez-Icaza Longoria, II-UNAM
Segundo vocal: Dr. Jesús Álvarez Calderón, UAM-I
Tercer vocal: Dr. Martín Salinas Vázquez, II-UNAM

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

TUTORES DE TESIS:

Dr. Luis Álvarez-Icaza Longoria

Dr. Jesús Álvarez Calderón

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México por las facilidades prestadas para realizar esta tesis. Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología y al proyecto UNAM-PAPIIT-IN104218 por las becas asignadas.

Resumen

En esta tesis se aborda el problema de *modelar eficientemente* la dinámica local y global de una clase de reactores de gasificación. El término *eficiente* es utilizado para definir aquellos modelos que (i) cumplen los objetivos descriptivos de forma confiable y (ii) son de dimensión tan baja como sea posible para no sobre-representar el comportamiento dinámico deseado. El objetivo de diseñar estos modelos de baja dimensión es aligerar la carga numérica computacional y de manipulación analítica que beneficien en un mejor entendimiento de fenómenos y propiedades fundamentales del proceso (diseño de equipo, multiplicidad de puntos de equilibrio, operaciones de encendido y apagado, etc.) y el diseño de algoritmos de control, monitoreo y estimación avanzados necesarios en la operación del reactor de gas de síntesis.

Debido a la naturaleza distribuida del proceso y su compleja dinámica no-lineal, tres enfoques de eficiencia son utilizados en este trabajo: (i) un tipo de *eficiencia-cuantitativa*, que garantiza una precisión descriptiva adecuada acorde a una métrica de error, que se inclina hacia el objetivo de describir la dinámica local del estado de ignición, (ii) otro de *eficiencia-cualitativa*, que garantiza la estabilidad estructural del modelo para no generar comportamientos dinámicos espurios, debido al truncamiento espacial de la dinámica distribuida del modelo y (iii) los modelos de *eficiencia-plena* que son estructuralmente-estables (eficiencia-cualitativa) y numéricamente precisos (eficiencia-cualitativa), dirigidos primordialmente para describir operaciones de encendido y apagado del reactor de gas de síntesis. Los tres enfoques de eficiencia descritos anteriormente, tienen como propósito dejar en claro que: cumplir simultáneamente con estos enfoques es una tarea no trivial de lograr con modelos de orden "bajo". En relación directa con estos tres enfoques de modelado, en esta tesis se abordan tres objetivos específicos de modelado: (i) descripción local eficiente-cuantitativa del estado estacionario de ignición, (ii) representación global eficiente-cualitativa de estados estacionarios del reactor y (iii) descripción eficiente-plena de la operación de encendido, desde un estado de apagado hasta el estado estacionario de ignición.

Dos medios son usados para abordar el problema de *modelado-eficiente*: (i) una elección efectiva del tipo de malla uniforme o adaptable de una clase de modelos por etapas en EDOs, generados a partir de la discretización espacial de un modelo distribuido en ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) que comúnmente representa este tipo de reactores y, (ii) la inyección de datos de una señal de temperatura, debidamente colocada y medida a lo largo del reactor, sobre el modelo de bajo orden, que asegura una restricción dinámica acorde a la trayectoria "real" medida.

Primero se aborda el objetivo de modelado-eficiente local del estado-estacionario de ignición por medio de un esquema de diseño de malla adaptable propuesto y presentado en esta tesis. Después, se realiza una valoración de los modelos de malla adaptable y uniforme para abordar el objetivo de modelado eficiente-cualitativo. Por último, el problema de eficiencia-plena es tratado

con modelos de malla uniforme y adaptable, con y sin inyección de medición de temperatura.

La metodología de modelado es ejemplificada sobre un caso de estudio representativo, abordado previamente en otros trabajos, encontrando que: (i) los modelos de malla adaptable resultan más eficientes (15 EDOs) para describir la dinámica local del estado estacionario de ignición, que los modelos de malla uniforme (24 EDOs), (ii) la malla uniforme es más eficiente y confiable (24 EDOs) para capturar la dinámica global del reactor de gas de síntesis que los modelos de malla adaptable (51 EDOs) y (iii) un modelo en línea de malla adaptable es más eficiente (8 EDOs) para describir la operación transitoria de arranque que un modelo de malla uniforme (23 EDOs).

Abstract

In this thesis, the problem of *efficiently modeling* the local and global dynamics of a class of gasification reactors is addressed. Here, *efficient* is used to define those models that (i) satisfy the descriptive objectives in a reliable way and (ii) have a dimension, as low as possible to not over-represent the desired dynamic behavior. The objective of designing these low dimensional models is to reduce the numerical computational load and the analytical manipulation tasks and to advance in the understanding of the fundamental phenomena and properties of the process (equipment design, multiplicity of points, on and off operations) and in the design of advanced control, monitoring and estimation algorithms needed in the syngas reactor operation.

Due to the distributed nature of the process and its complex non-linear dynamics, three efficiency concepts are defined: (i) the *quantitative-efficiency*, which guarantees an adequate descriptive accuracy according to an error metric, focused to the aim to describe the local dynamics of the ignition state, (ii) *qualitative-efficiency*, which guarantees the structural stability of the model so as not to generate spurious dynamic behaviors and (iii) the models of *full-efficiency* with structural-stability (qualitative-efficiency) and numerical accuracy (quantitative-efficiency) mainly directed to describe ignition and shutdown operations of the syngas reactor. These three efficiency approaches are intended to make it clear that: to comply simultaneously with these approaches is a nontrivial task to achieve with “low” order models. In direct relation with these three modeling approaches, this thesis addresses three specific modeling objectives: (i) efficient-quantitative local description of the steady state of ignition, (ii) efficient-qualitative global representation of reactor stationary states and (iii) efficient-full description of the ignition operation, from a shutdown state to the steady state of ignition.

Two specific tools are used to address the *efficient modeling* problem: (i) an effective choice of the uniform or adaptive mesh type of a class of stage models in ODEs, generated from the spatial discretization of a distributed model in partial differential equations (EDPs) that commonly represent this type of reactors and, (ii) the data injection of a temperature signal, properly located and measured in the the reactor, on the low order model, which ensures a dynamic restriction according to the “real” trajectory mesured.

First, the local modeling-efficient objective of the ignition steady-state is addressed by means of an adaptive mesh design scheme proposed and presented in this thesis. Then, an assessment of the adaptive and uniform mesh models is addressed to approach the objective of qualitative-efficiency modeling. Finally, the full-efficiency problem is treated with uniform and adaptable mesh models, with and without injection of temperature measurement.

The modeling approach is examined on a representative case study previously addressed in

other works finding that: (i) adaptive mesh models are more efficient (15 EDOs) to describe the local dynamics of the steady state of ignition, than uniform mesh models (24 EDOs), (ii) the uniform mesh models are more efficient and reliable (24 EDOs) to capture the global dynamics of the syngas reactor than the adaptive mesh models (51 EDOs) and (iii) for the case of online modeling, the adaptive mesh is more efficient (8 EDOs) to describe the ignition operation than the uniform mesh models (23 EDOs).

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Descripción del proceso de gasificación	3
1.2. Clasificación y tipos de reactores de gasificación	5
1.3. Modelado, control y estimación	10
1.4. Motivación	12
1.5. Objetivo	13
1.6. Hipótesis	13
1.7. Contribución	13
1.8. Estructura de esta tesis	14
2. Modelos Dinámicos	15
2.1. Modelo distribuido	17
2.2. Modelo distribuido adimensional	19
2.3. Modelo en parámetros concentrados (<i>modelo por etapas</i>)	21
2.4. Modelo por etapas en línea	24
3. Propiedades y orientación de modelos dinámicos	26
3.1. Conjuntos límite y error numérico de modelado	26
3.1.1. Modelo distribuido adimensional	26
3.1.2. Modelo por etapas	28
3.1.3. Modelo por etapas en línea	30
3.2. Enfoques de modelado	31
3.2.1. Modelo eficiente-cuantitativo	32
3.2.2. Modelo eficiente-cualitativo	33
3.2.3. Modelo eficiente-pleno	35
3.3. Caso de estudio	35
4. Problema del modelado por etapas y herramientas numéricas	37
4.1. Enunciado del problema de modelado	37
4.2. Algoritmo de diseño de malla adaptable	39
4.3. Cálculo de errores de modelado	41
4.4. Esquema numérico de continuación	43
5. Aplicación al caso de estudio	45
5.1. Modelo eficiente-cuantitativo de dinámica local	45
5.2. Modelo eficiente-cualitativo	53
5.3. Modelo eficiente-pleno	56

5.4. Síntesis de resultados	63
6. Conclusiones	65
A. Ecuaciones constitutivas de la cinética química	67
B. Transferencia de masa, calor y propiedades de transporte del sistema.	70
C. Parámetros de cinética química, entalpías de reacción, composición de hidrocarburos y propiedades de transporte	73
Bibliografía	76

Índice de figuras

1.1.	Diagrama esquemático de un gasificador a) contracorriente y b) concurrente mostrando las reacciones que ocurren en cada zona.	8
1.2.	a) Lecho fijo de partículas a través del cual el gas fluye. b) Lecho fluidizado burbujeante mostrando la circulación del gas alrededor de las burbujas. c) Lecho fluidizado turbulento. d) Lecho de transporte.	9
2.1.	Reactor de gasificación de lecho empacado y flujos paralelos.	16
2.2.	Representación del reactor de gasificación de lecho empacado y flujos paralelos como conexión de N -etapas con flujos hacia adelante q_k y hacia atrás q_k^b	22
3.1.	Perfiles de Temperatura en estado estacionario: (i) Estable de ignición de la operación continu, (ii) estable de extinción e (iii) inestable tipo punto-silla.	36
5.1.	Perfiles de la solución en estado-estacionario de ignición. Las gráficas muestran las soluciones de referencia $\bar{\pi}_u^{50}$ (línea negra) y el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\bar{\pi}_u^{50}(\check{p}_1)$ [líneas grises].	47
5.2.	Aplicación del segundo y tercer paso del método de diseño de malla adaptable para $N = 5$, $N_p = N - 1 = 4$. La gráfica muestra el mapa $\beta - \gamma$, el área total bajo la curva a_T , su partición en N_p secciones iguales a través de z^b (4.2b) y la localización de los N_p -centros para cada sección a través de z^c (4.2c).	48
5.3.	Comparación de errores de aproximación $\bar{\varepsilon}_N$ para modelos de malla adaptable σ_a (línea punteada) y uniforme σ_u (línea discontinua) utilizando los diferentes vectores de ponderación η de la Tabla 5.2 y el vector.	49
5.4.	Comparación de perfiles estacionarios de ignición de los estados de Temperatura, densidad aparente de biomasa, carbonizado, componentes de fase gas H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4 y flujos axiales de ambas fases. Las gráficas muestran las solución de referencia π_u^{50} , el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_1)$ y las soluciones reducidas de malla adaptable π_a^5 y uniforme π_a^8	50
5.5.	Comparación de perfiles estacionarios de ignición de los estados de Temperatura, densidad aparente de biomasa, carbonizado, componentes de fase gas H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4 y flujos axiales de ambas fases. Las gráficas muestran las solución de referencia π_u^{50} , el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_2)$ y las soluciones reducidas de malla adaptable π_a^9 y uniforme π_a^{16}	51
5.6.	Comparación de trayectorias en estado transitorio para el error de modelado ε_∂ y el error de aproximación ε_ε , el hot-spot y la temperatura y flujo de gas de síntesis a la salida del reactor. La comparación incluye la solución de referencia π_u^{50} , las soluciones reducidas de malla adaptable $\pi_a^{5,9}$ y uniforme $\pi_a^{8,16}$ σ_a^N y el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_1)$	52

5.7. Curvas de <i>estabilidad-estructural</i> de los modelos de malla adaptable σ_a^N y uniforme σ_u^N	54
5.8. Perfiles estacionarios reales (líneas negras) y espurios (líneas grises) de Temperatura para los modelos de malla adaptable σ_a^N y uniforme σ_u^N	55
5.9. Comparación de trayectorias en estado transitorio, de la operación de arranque, para el error de modelado ε_∂ y el error de aproximación ε_σ , el hot-spot y la temperatura y flujo de gas de síntesis a la salida del reactor. La comparación incluye la solución de referencia π_u^{50} , las solución reducida de malla adaptable π_a^{17} y uniforme $\pi_u^{8,21}$, y el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_2)$	57
5.10. Comparación de errores de modelado $\bar{\varepsilon}_\sigma$ (línea gris) y $\bar{\varepsilon}_\sigma^*$ (línea negra) para modelos de malla adaptable σ_a (línea punteada) y uniforme σ_u (línea discontinua) para los vectores de ponderación η (Tabla 5.2) y los subconjuntos \check{p} de errores de parámetros (Tabla 5.1).	59
5.11. Comparación del error de modelado ε_σ^* para las soluciones de los modelos en línea π_a^{4*} , π_a^{8*} y π_u^{8*} , π_u^{12*}	60
5.12. Trayectorias en estado transitorio de Temperatura, H_2 , flujo de gas de síntesis q_g y valor calorífico alto (Higher heating value - HHV), en las zonas alta, media y baja del reactor. Las gráficas incluyen la solución de referencia nominal π_u^{50} y las soluciones reducidas del modelo en línea de malla adaptable π_a^{4*} , π_a^{8*} y uniforme π_u^{8*} , π_u^{12*}	61
5.13. Comparación de perfiles estacionarios de ignición de los estados de Temperatura, densidad aparente de biomasa, carbonizado, componentes de fase gas H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4 y flujos axiales de ambas fases. Las gráficas muestran las solución de referencia π_u^{50} , el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_1)$ y las soluciones reducidas de malla adaptable π_a^5 y uniforme π_a^8	62

Índice de tablas

1.1. Procesos presentes en un reactor de gasificación.	3
1.2. Tabla de fuentes de las especies químicas contaminantes presentes en los gasificadores.	6
5.1. Subconjuntos de errores de parámetros $\tilde{\mathbf{p}} \in \tilde{\mathbf{p}}$ con $n_p = 4$	46
5.2. Cuatro casos de vector de ponderación $\boldsymbol{\eta}$	46
5.3. Condición inicial considerada para operación de encendido.	56
5.4. Comparación entre el presente y otros estudios de diferentes variables de interés a la salida del reactor de gasificación.	64
C.1. Características a la entrada de aire y biomasa, propiedades del lecho y dimensiones del reactor.	73
C.2. Tabla de parámetros de cinética química y entalpías de reacción.	74
C.3. Coeficientes estequiométricos $s_{i,j}$ para las componentes de las fases gaseosa y sólida en las reacciones \mathcal{R}_j involucradas en el proceso de gasificación.	75

Capítulo 1

Introducción

El proceso de gasificación ofrece una producción de energía limpia y eficiente. Esta tecnología permite generar un gas sintético a partir de materias primas que contienen carbono y que son caracterizadas por tener un bajo, nulo o negativo valor comercial, como puede ser el carbón, el coque de petróleo, combustibles de alto contenido de azufre o materiales que de otro modo serían catalogados como desperdicio (biomasa). El gas sintético producido, conocido como gas de síntesis o *syngas*, puede contener un poder calorífico de entre 5 y 10 [MJ/kg] y comúnmente es utilizado como combustible para generar fuentes de energía eléctrica, calórica y/o mecánica (Rezaiyan y Cheremisinoff, 2005). El propósito de la gasificación (o de la pirólisis) también puede ser la producción de materia prima química y combustibles líquidos (Basu, 2010).

Técnicamente, el proceso de gasificación se compone de una serie de fenómenos químicos y termodinámicos mediante los cuales se logra una conversión de materia prima en un gas compuesto de CO , H_2 , CH_4 y CO_2 . Esta conversión se lleva a cabo mediante la reacción entre la materia prima, vapor, aire y/o oxígeno puro y calor. En la actualidad, las técnicas de gasificación difieren en muchos aspectos, sin embargo, existen cuatro factores clave que dictan el desempeño del proceso (Rezaiyan y Cheremisinoff, 2005):

1. La cantidad de oxígeno, vapor o aire disponible para llevar a cabo el proceso.
2. La configuración mecánica del reactor.
3. El principio de calentamiento interno y externo del reactor y las etapas de intercambio de energía involucradas en el proceso.
4. La temperatura de funcionamiento (Hot-Spot)

En la literatura existe amplia información acerca de los orígenes del proceso de gasificación (ver por ejemplo Basu (2010); Higman y van der Burgt (2008); Rezaiyan y Cheremisinoff (2005); Reed y Das (1988)), sin embargo, en este trabajo basta con describir cuatro períodos que demuestran la evolución y actualidad del proceso (Basu, 2010):

- **1850-1940** Durante esta etapa inicial, el gas hecho de carbón se utilizó principalmente para iluminar casas, calles y como fuente de calor. La iluminación favoreció a lo largo de la Revolución Industrial al poder ampliar las horas de trabajo en las fábricas, especialmente en los días cortos de invierno. La invención de la bombilla eléctrica, alrededor de 1900, redujo la necesidad de gas para la iluminación, pero su uso para la calefacción y la cocción

continuó. Con el descubrimiento del gas natural, la necesidad de gasificación de carbón o biomasa disminuyó. Las principales tecnologías de gasificación comercial (el gasificador de lecho fluidizado de Winkler en 1926, el gasificador de lecho móvil presurizado de Lurgi en 1931, y el gasificador de flujo arrastrado de Koppers-Totzek) hicieron su debut durante este período.

- **1940-1975** La gasificación entró en dos campos de aplicación como combustibles sintéticos: la combustión interna y la síntesis química de petróleo y otros productos químicos de proceso. En la Segunda Guerra Mundial, el bombardeo de las refinerías nazis y las rutas de suministro de petróleo disminuyó en gran medida el suministro de petróleo crudo que alimentaba la maquinaria de guerra de Alemania. Esto obligó a Alemania a sintetizar petróleo a partir de gas de carbón utilizando los procesos de Fischer-Tropsch y Bergius. Los productos químicos y los combustibles de aviación también se producían a partir del carbón. Una gran cantidad de automóviles y camiones en Europa funcionaba con carbón o biomasa gasificada en reactores a bordo. Durante este período, más de un millón de pequeños gasificadores se construyeron principalmente para el transporte. El final de la Segunda Guerra Mundial, la disponibilidad de abundante petróleo del Medio Oriente eliminaron la necesidad de gasificación para el transporte y la producción de productos químicos. El advenimiento del abundante gas natural en la década de 1950 frenó el desarrollo de la gasificación del carbón o biomasa, pero la producción de gas sintético a partir del gas natural y la nafta aumentó, especialmente para satisfacer la creciente demanda de fertilizantes.
- **1975-2000** La tercera fase en la historia de la gasificación comenzó después de la Guerra de Yom Kippur (guerra Árabe-Israelí de 1973), que desencadenó el embargo de petróleo. El 15 de octubre de 1973, miembros de la Organización de Países Exportadores de Petróleo (OPEP) elevaron sustancialmente el precio de las exportaciones de petróleo a los Estados Unidos y otros países occidentales, que en ese momento dependían en gran medida del petróleo de Medio Oriente. Esto conmocionó a la economía occidental y dio un fuerte impulso al desarrollo de tecnologías alternativas como la gasificación con el fin de reducir la dependencia del petróleo importado. Además de proporcionar gas para calefacción, la gasificación encontró un gran uso comercial en la producción de materia prima química, que tradicionalmente provenía del petróleo. La caída posterior en el precio del petróleo, sin embargo, atenuó nuevamente el impulso del proceso, pero algunos gobiernos, reconociendo la necesidad de un medio ambiente más limpio, apoyaron el desarrollo a gran escala de centrales de gasificación integrada de ciclo combinado (IGCC).
- **Post-2000** El calentamiento global y la inestabilidad política en algunos países productores de petróleo dieron un nuevo impulso a la gasificación. La amenaza del cambio climático hizo hincapié en la necesidad de alejarse de los combustibles fósiles ricos en carbono. La gasificación surgió como una opción natural para la conversión de biomasa, carbono neutra renovable, en gas. La búsqueda de la independencia energética y el rápido aumento de los precios del crudo impulsaron a algunos países a reconocer la necesidad de desarrollar plantas IGCC. Se re-descubrió el atractivo de la gasificación para la extracción de materias primas valiosas a partir de residuos de refinerías, lo que condujo al desarrollo de algunas de las principales plantas de gasificación en las refinerías de petróleo. De hecho, la preparación de materia prima química tomó una mayor proporción del mercado de gasificación que la de la propia producción de energía.

Actualmente, se considera como la principal fuente de contaminación del aire a los productos

derivados de la quema de combustibles fósiles (boilers, motores, reactores u otros dispositivos) que producen gases contaminantes como: Óxidos de azufre (SO_2), Óxidos de Nitrogeno (Óxido Nítrico (NO) y Dióxido de Nitrógeno (N_2O)), Óxidos de Carbono (Monóxido de Carbono (CO) y Dióxido de Carbono (CO_2)), Mercurio (Hg) y compuestos volátiles orgánicos. Específicamente, para los gasificadores existen mecanismos para la reducción de emisiones de gases con efecto adverso al medio ambiente (Tabla 1.2) que permiten cumplir con los niveles de emisiones contaminantes (Basu, 2006). En la siguiente sección, se presenta una breve introducción acerca de la red de reacciones involucradas en el proceso de gasificación.

1.1. Descripción del proceso de gasificación

La red de reacciones involucradas en el procesos de gasificación se caracterizan por ser llevadas cabo en diferentes escalas de temperatura (ver Tabla 1.1), tiempo y espacio (Basu, 2010, 2006) y estas son de tipo endotérmicas ó exotérmicas.

Tabla 1.1: Procesos presentes en un reactor de gasificación.

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

Los procesos 1, 2 y 4 absorben el calor proveniente del proceso *exotérmico* de combustión. En el proceso de secado, la humedad en el combustible sólido se evapora. El proceso de pirólisis separa el vapor de agua, líquidos orgánicos y gases no condensables del carbonizado (carbón sólido del combustible). El proceso de combustión oxida el combustible mientras que el proceso de gasificación lo reduce a gases combustibles en una reacción endotérmica. A continuación se presenta una explicación más detallada de estos procesos, mientras que su representación matemática a través de la ecuaciones constitutivas de cinética química de reacción se encuentra en al apéndice A.

Pirólisis

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



El carbón y biomasa están integrados por compuestos orgánicos de carbón, coque o cenizas, monóxido de carbono (CO), metano (CH_4), humedad (H_2O) y dióxido de carbono (CO_2), mientras que los líquidos o vapores producidos son principalmente alquitranes. Debido a la viscosidad

de los alquitranes, estos representan un desafío para los componentes de los equipos de gasificación como filtros y motores de combustión interna (Shwe, 2004). El proceso de pirólisis es conocido por generar tres productos:

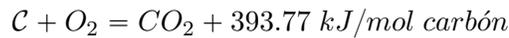
1. Gases ligeros como: H_2 , CO , CO_2 , H_2O , CH_4 .
2. Alquitranes (T), un líquido viscoso y corrosivo compuesto por moléculas pesadas.
3. Carbonizado (C), un residuo sólido principalmente conteniendo Carbón.

En la literatura existen diferentes formas de representar la reacción de pirólisis a través de reacciones tipo Arrhenius. En este trabajo se considera una simplificación a través de dos reacciones químicas secuenciales que producen los componentes antes descritos (Di Blasi, 2008):

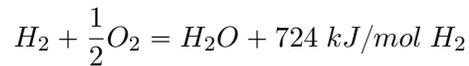
1. Pirólisis del combustible sólido (pirólisis primaria).
2. Descomposición térmica de los alquitranes (pirólisis secundaria).

Combustión

La oxidación o combustión del carbonizado es la reacción de mayor importancia del proceso de gasificación, ya que esta provee la energía térmica necesaria para las reacciones endotérmicas, con base en la reacción de los combustibles presentes y el oxígeno suministrado al gasificador. Esta reacción da como resultado la formación de CO_2 y H_2O los cuales generan la reducción del carbonizado producido de la pirólisis. Una de las reacciones de combustión es la oxidación del carbonizado que produce CO_2 .



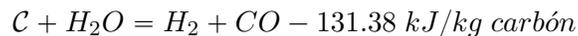
La otra reacción de combustión es la oxidación del hidrógeno en forma de combustible que produce vapor de agua.



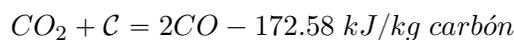
Gasificación

La gasificación involucra una serie de reacciones endotérmicas que son llevadas a cabo a partir del calor producido en las reacciones de combustión. La gasificación produce gases combustibles tales como H_2 , CO y CH_4 a través de cuatro reacciones principales:

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



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

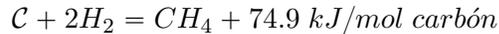


- *Shift conversion.* El valor calórico del hidrógeno es más alto que el del monóxido de carbono. Por lo tanto, la reducción del vapor de agua con monóxido de carbono produce hidrógeno:



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

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



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

El apéndice A muestra a detalle las ecuaciones constitutivas para las especies químicas que intervienen en las reacciones consideradas en este trabajo. En la siguiente sección se presenta un panorama general acerca de los diferentes tipos de gasificadores y sus variaciones mecánicas y de diseño.

1.2. Clasificación y tipos de reactores de gasificación

En la literatura existen al menos cuatro características para clasificar a los gasificadores, las cuales son establecidas a continuación:

- **Fuente de energía térmica del proceso de gasificación:** *Directa*, cuando la fuente de energía térmica principal es el calor producido en la oxidación parcial del combustible sólido. *Indirecta*, cuando la energía calórica es proporcionada por una fuente externa funcionando como intercambiador de calor.
- **Estado termodinámico de operación:** Con base en la definición de punto crítico como aquel, donde por las condiciones de temperatura y presión, un líquido tiene la misma densidad que su correspondiente fase gaseosa, existen dos tipos de gasificadores: (i) *Subcrítico*, la presión y temperatura del gasificador se encuentran abajo del punto crítico del agente gasificante dominante: vapor de agua (Presión de 220.9(bar) y temperatura de 374°C) y (ii) *Supercrítico*, la presión y temperatura del gasificador se encuentra por encima del punto crítico.
- **Movimiento relativo de los gases y el combustible sólido.** *Flujos paralelos (downdraft o concurrent)*, la fase sólida y la fase gaseosa se desplazan de forma descendente. *Flujos contracorriente (updraft o countercurrent)*, la fase sólida se desplaza de forma descendente mientras que los gases lo hacen en sentido ascendente.

Caram y Fuentes (1982) mencionan que el gasificador de flujos en contracorriente puede ofrecer alta eficiencia térmica y de conversión del carbonizado, baja contaminación de gases con sólidos, y es capaz de operar en elevadas presiones. Sin embargo, algunas desventajas

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

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

son la baja capacidad, una pobre adaptabilidad a diferentes tipos de combustible sólido y contaminación de gases por alquitranes. La principal limitación de esta configuración son las altas temperaturas impuestas por la fusión de cenizas además de las grandes cantidades de vapor de agua necesarias para controlar la zona de combustión produciendo un decremento de la eficiencia térmica.

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

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

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

- Tipo de agente oxidante utilizado.** Aire, el medio de gasificación y reactivo oxidante es el aire. Este tipo de gasificación produce un gas de síntesis de bajo valor calórico (de 3 a 6 (MJ/m^3)) debido al alto contenido de disolventes como el nitrógeno en el aire. Oxígeno, el reactivo oxidante y medio de gasificación es oxígeno puro por lo que el gas de síntesis producido posee un mayor valor calórico comparado con el gasificador de aire (de 10 a 12 (MJ/m^3)). Aire/Vapor de agua y Oxígeno/Vapor de agua, en ambos casos podría agregarse vapor de agua para regular la velocidad de reacción de oxidación.

En Basu (2006, 2010); Badillo-Hernandez (2009) se considera otra clasificación ligada al estado de fluidización definido como la operación a través de la cual los sólidos finos (fase sólida) se comportan como en un estado líquido a través del contacto con la fase gaseosa formando un "lecho". Una propiedad de este lecho es que la fuerza de gravedad sobre las partículas fluidizadas

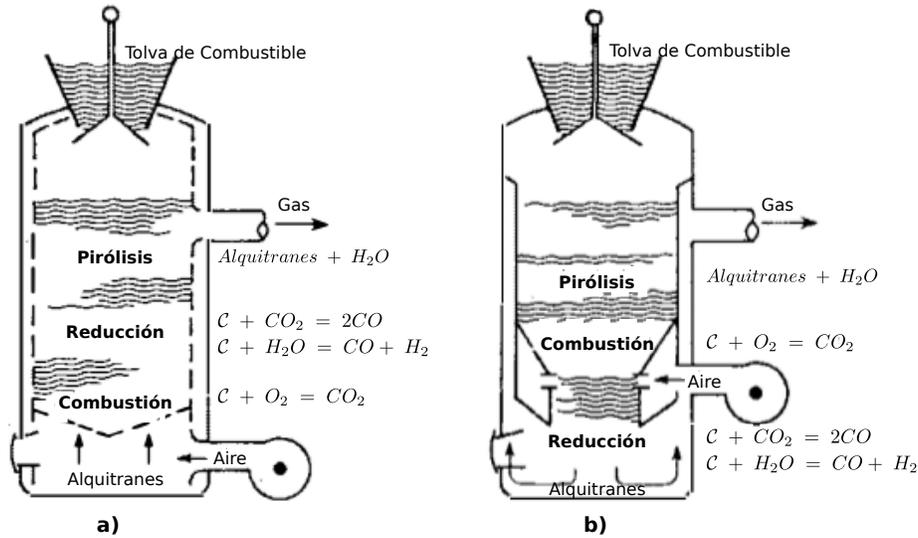


Figura 1.1: Diagrama esquemático de un gasificador a) contracorriente y b) concurrente mostrando las reacciones que ocurren en cada zona.

es compensada con el arrastre del flujo ascendente del gas, manteniendo las partículas en una condición semisuspendida y mostrando un comportamiento similar a un líquido con las siguientes características:

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

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

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

Lecho fluidizado burbujeante. Cuando se incrementa la velocidad superficial de la fase gaseosa en el lecho fijo, la caída de presión aumenta hasta que la velocidad superficial del gas

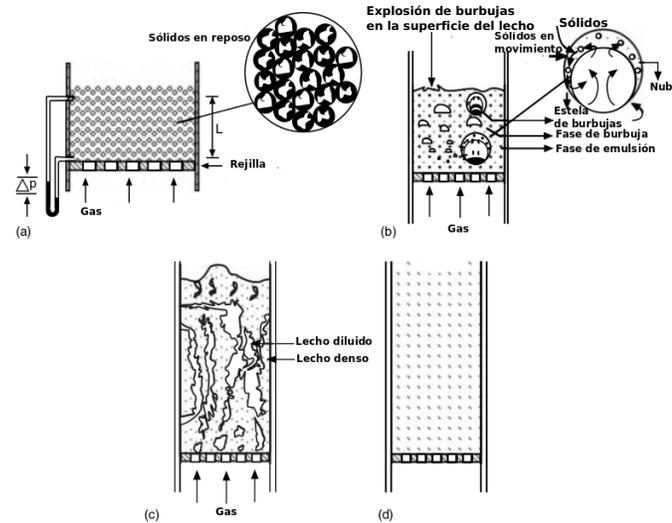


Figura 1.2: a) Lecho fijo de partículas a través del cual el gas fluye. b) Lecho fluidizado burbujeante mostrando la circulación del gas alrededor de las burbujas. c) Lecho fluidizado turbulento. d) Lecho de transporte.

alcanza un valor crítico conocido como *velocidad mínima de fluidización* (V_{mf}) y la fuerza de arrastre del gas es igual al peso de las partículas menos la fuerza que suspende las partículas en un estado incipiente de fluidización (Fig. 1.2b). Al elevar la velocidad superficial del gas por encima de a velocidad mínima de fluidización hasta un punto conocido como *velocidad mínima de burbujeo* (V_{mb}) el exceso del gas en la suspensión del sólido genera burbujas.

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

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

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

En (Reed y Das, 1988) se menciona que los gasificadores más importantes son los de lecho fijo en su configuración de flujos contracorriente y flujos paralelo. Aunque los gasificadores son equipos relativamente sencillos en sus mecanismos de alimentación y purificación del gas, los principios termodinámicos que dictan la temperatura, suministro de aire y otras variables no son triviales. En la siguiente sección se presenta una introducción acerca de los trabajos que han abordado el tema de modelado, control, estimación y monitoreo del proceso de gasificación.

1.3. Modelado, control y estimación

Durante los últimos años, el interés por el proceso de gasificación ha ido en aumento. Patra y Sheth (2015) presentan el estado del arte acerca de los diferentes tipos de modelos existentes en la literatura para gasificadores de flujos paralelos de los cuales destacan los basados en: (i) primeros principios de equilibrio termodinámico y cinético, (ii) resolvedores numéricos de Dinámica de fluidos computacional (*Computational fluid dynamics*, CFD) o simuladores de procesos químicos (*Aspen Plus*) y (iii) redes neuronales artificiales (*Artificial Neural Network*, ANN). Aunque los mecanismos de control de un gasificador a través de la manipulación de los flujos de aire-vapor-oxígeno y/o combustible sólido pudieran ser claros, los problemas de desempeño en operación persisten, lo que sugiere que la dinámica global del proceso no puede ser subestimada. Ruíz *et al.* (2013) menciona lo complicado de elegir el gasificador adecuado para un determinado tamaño de planta de generación eléctrica, ya que existe una muy amplia gama de diseños y montajes, muchos de los cuales se encuentran todavía en fase de investigación, aunado a que la biomasa no tiene el mismo comportamiento estable que los combustibles fósiles.

En lo que respecta a los estudios basados en modelos de primeros principios de equilibrio termodinámico (Di Blasi, 2000; Di Blasi *et al.*, 2013; Gøbel *et al.*, 2007; Rogel y Aguillon, 2006; Mas-moudi *et al.*, 2014, 2017), estos se han enfocado principalmente en la descripción de la operación local alrededor del estado estacionario de ignición utilizando modelos en ecuaciones diferenciales parciales (EDP) discretizados en espacio por medio de diferencia finitas (DF) y elemento finito (EF) con mallas de alto orden, que producen gran cantidad de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) (1800-7500). Aunque estos estudios proporcionan valiosos resultados e información, no han abordado la multiplicidad de estados estacionarios y las propiedades robustas que parecen ser temas importantes de acuerdo a lo que sugieren los fenómenos de extinción que ocurren en operación (Di Blasi, 2000; Ranzi *et al.*, 2014) y que han mencionados anteriormente en estudios de modelado de reactores tubulares de pirólisis y gasificación (Amundson y Arri, 1978; Yuan *et al.*, 2015).

Recientemente, el problema de describir el comportamiento no-lineal de reactores de lecho empacado ha sido dirigido sobre las bases del enfoque de modelado por etapas (o celdas) (Deans y Lapidus, 1960; Levenspiel, 1964). La aplicación a una planta piloto de gasificación (Manurung y Beenackers, 1993) ha demostrado que: (i) el estado estacionario de ignición puede ser modelado con 3 a 5 etapas no-uniformes (9 EDOs) (Badillo-Hernandez *et al.*, 2013), con tamaño de etapa ajustado mediante un procedimiento de prueba y error, (ii) el reactor de gas de síntesis tiene 3 estados estacionarios, en condiciones de operación nominal, y que puede ser modelado de forma confiable con 30 etapas uniformes (90 EDOs) (Badillo-Hernandez *et al.*, 2018). En este contexto, confiabilidad significa robustez con respecto a un número de etapas uniformes, de modo que se excluye la multiplicidad espuria y el comportamiento de bifurcación inducido por

sobre-agrupamiento (número de etapas muy bajo), y eficiencia significa que el modelo describe el comportamiento experimental y/o la solución del modelo en EDPs sin sobre-modelar de acuerdo a la incertidumbre en parámetros cinéticos y de transporte.

En lo que respecta a la implementación de algoritmos de control y estimación, Baldea y Daoutidis (2007) menciona que para proponer sistemas avanzados de control y monitoreo existen limitaciones debido a: (i) la poca disponibilidad de señales y mediciones provenientes del reactor, por ejemplo, aunque las mediciones de temperatura pueden ser tomadas a lo largo o a la salida del reactor, la composición de gas solo está disponible a la salida del reactor y regularmente puede ser medida en intervalos de tiempo relativamente largos, (ii) entradas no manipulables, como composición de materia sólida, y (iii) la rigidez y tamaño de modelos dinámicos.

A pesar de esto, se han implementado algunas propuestas a través de simulaciones (Baldea y Daoutidis, 2007; Gøbel *et al.*, 2007) o sobre equipos experimentales Paes (2005) e industriales (Yun, 2012; Dixon, 1999, 2006). Por ejemplo, Baldea y Daoutidis (2007) implementan un controlador proporcional, que usa la velocidad de entrada del combustible como la señal a manipular. Dos señales de temperatura, en el *hot-spot* y a la salida del reactor, son utilizadas como salida del sistema. Se diseñan dos leyes de control para cada una de las salidas. Se concluye que el control de *hot-spot* estabiliza el reactor alrededor de un estado de ignición al considerar una perturbación sobre el cambio de velocidad de uno de los reactantes. Por otro lado, cuando se trata de controlar la temperatura a la salida, no se logra estabilizar la operación del reactor en un estado de ignición. Se explica que el pobre desempeño del segundo controlador se debe al hecho de que la migración de la ola de calor hacia la salida del reactor se manifiesta inicialmente a través de una pequeña disminución de la temperatura, seguida de un aumento durante un período prolongado de tiempo de la temperatura en la salida del reactor seguida de un descenso de la temperatura agudo que corresponde con la extinción del reactor. Modelos lineales sobre operaciones locales del gasificador han sido utilizados para comparar el desempeño de diferentes algoritmos de control: (i) PI multivariable, (ii) predictivo (iii) $H-\infty$ y (iv) modos deslizantes (Dixon, 1999, 2006). Mientras todas las soluciones presentadas alcanzan un éxito razonable, ninguna de ellas logra cumplir con todos los criterios de desempeño para los diferentes puntos de operación. Paes (2005) propone y simula un controlador lineal PI en cascada, un control de flujo másico saliente de gas que dirige un controlador de temperatura, el algoritmo es probado sobre un gasificador de flujos a contracorriente de lecho fijo modelado en EDPs. Se concluye que sólo se puede lograr un control efectivo de 3 de las 4 variables de interés con una variable de control: la temperatura máxima del reactor, la temperatura del gas de síntesis, el flujo saliente de gas y la concentración del gas.

Dentro de las técnicas de estimación, el filtro extendido de Kalman (EFK) no lineal ha sido la más utilizada y probada en procesos químicos (Kazantzis *et al.*, 2000). Siendo su alta dimensionalidad su principal desventaja, el EKF para reactores tubulares de gasificación se ha implementado sobre la base de modelos reducidos simplificados (Wilson *et al.*, 2006), con un funcionamiento dudoso más allá de una localidad pequeña. En cambio, la tarea de estimación se ha llevado a cabo para un gasificador de lecho fluidizado utilizando un modelo simple para un *reactor continuo de tanque agitado* (CSTR) (Botero *et al.*, 2013) aplicando la técnica del llamado observador asintótico (Dochain *et al.*, 1992) que equivale a ejecutar el modelo en lazo abierto reemplazando el estado medido por la medición real. Debido a la necesidad de calcular derivadas de Lie de alto orden, la aplicación de observadores de Luenberger no lineales y de alta ganancia (Zeitz, 1987; Ciccarella *et al.*, 1993; Gauthier *et al.*, 1992) para sistemas de dimensión finita en etapas es una

tarea insoluble. Los problemas de alta dimensionalidad en el contexto de estimación de estados basados en inyección de mediciones de salida se han superado en la industria y laboratorio para columnas de destilación escalonadas de múltiples componentes (de 200 a 400 estados) por medio del enfoque de estimación geométrica no lineal para sistemas por etapas (Álvarez y Fernández, 2009; Fernandez *et al.*, 2012; Porru *et al.*, 2015).

Por otro lado, de acuerdo con nuestros estudios previos (Badillo-Hernandez *et al.*, 2017; Canales-Meza *et al.*, 2017) se ha establecido que el empleo de una o dos medidas de temperatura, adecuadamente ubicadas a lo largo del reactor, en conjunción con un modelo por etapas permite una reducción significativa del modelo donde, de acuerdo a resultados de simulación la estimación de los estados en la operación transitoria de arranque, y del estado de ignición, puede ser lograda con suficiente precisión mediante modelos en celdas de bajo orden de 6 etapas uniformes (o 5 no uniformes) y 18 (o 14) EDOs mediante un observador geométrico (Badillo-Hernandez *et al.*, 2017) (o modelado en línea) [Canales-Meza *et al.* (2017)].

1.4. Motivación

Al día de hoy, el proceso de gasificación representa una elección sobresaliente para la generación bio-energética, debido principalmente por su alta eficiencia de conversión, amplia variedad de materia prima disponible y su relativa y simple operación. Sin embargo, los hechos observados a nivel industrial (Ruíz *et al.*, 2013; Yun, 2012; Dasappa *et al.*, 2011; Shwe y Roberts, 2016) y en equipos experimentales de pequeña y mediana escala (Reed y Markson, 1985; Manurung y Beenackers, 1993; Barrio, 2002; Henriksen *et al.*, 2006; Olaleye *et al.*, 2014; Schweitzer *et al.*, 2017; Yucel y Hastaoglu, 2016) muestran que (i) los eventos de apagado indeseados del reactor, (ii) la alta sensibilidad del estado transitorio de encendido sobre la composición del gas de síntesis, (iii) el ajuste de parámetros, (iv) el escalamiento del reactor tubular y (v) los problemas de rendimiento, confiabilidad y desempeño representan todavía desafíos para la operación continua del reactor, sin olvidar la necesidad de cambios en la producción del gas de síntesis acorde a las demandas energéticas. De acuerdo a los estudios de Amundson y Arri (1978); Caram y Fuentes (1982); Ranzi *et al.* (2014); Badillo-Hernandez *et al.* (2018) se puede asegurar que los reactores de gasificación (i) pueden presentar multiplicidad de estados estacionarios, y fenómenos de bifurcación, y (ii) que estos operan la mayor parte del tiempo alrededor de un estado estacionario de ignición (Barrio, 2002; Pérez *et al.*, 2012; Dogru, 2013; Milligan, 1994; Shwe, 2004; Shwe y Roberts, 2016).

Estos desafíos de control, confiabilidad y optimización son objetos de interés y sugieren que la dinámica del proceso no debe ser subestimada, de tal forma, el diseño sistemático de equipos y procesos avanzados de análisis local y global, control y monitoreo son necesarios. Dicho lo anterior, con base en los enfoques de modelado y control de sistemas (Sepulchre *et al.*, 1997), es bien conocido que estos desafíos pueden ser encaminados desde un marco de análisis dinámico avanzado donde las representaciones (i) de orden reducido y (ii) de simplicidad máxima son aspectos deseados.

De acuerdo a nuestros estudios de modelado por etapas (Badillo-Hernandez *et al.*, 2013, 2017, 2018; Canales-Meza, 2013; Canales-Meza *et al.*, 2017) el alcance del presente estudio es motivado por modelar de una forma tan simple como sea posible la dinámica de una clase de reactores de gasificación.

1.5. Objetivo

El objetivo de este trabajo es presentar una metodología para diseñar modelos en parámetros concentrados de baja dimension que permitan aligerar las cargas (i) numérica computacional y (ii) de manipulación analítica. Esta metodología de modelado permitirá una adecuada elección de los grados de libertad de un tipo de modelos en parámetros concentrados: (i) mallas uniformes o adaptables, dependiendo del objetivo de modelado local o global, y (ii) el efecto en la estrategia de modelado de tener una medición de temperatura en línea. Estos modelos podrán facilitar el entendimiento de fenómenos y propiedades fundamentales del proceso (diseño de equipo, multiplicidad de puntos, operaciones de encendido y apagado) y el diseño de algoritmos de control, monitoreo y estimación avanzados necesarios en la operación del reactor de gas de síntesis. Los modelos diseñados son de estructura simple y ajustable acorde a las necesidades específicas de modelado, las capacidades de estos modelos podrán usarse para capturar comportamientos (i) locales, con una precisión acorde a la incertidumbre de los parámetros significativos de esta clase de sistemas, y/o (i) globales, con características fuertemente no lineales como la multiplicidad y bifurcación de los estados estacionarios.

1.6. Hipótesis

Basados en la factibilidad de representar dinámicas distribuidas a través de modelos por etapas (Deans y Lapidus, 1960) y las aportaciones recientes con esta clase de modelos de bajo orden para reactores de gasificación de descripción (i) local con malla no uniforme (Badillo-Hernandez *et al.*, 2013; Canales-Meza, 2013; Canales-Meza *et al.*, 2017) y (ii) global con malla uniforme (Badillo-Hernandez *et al.*, 2018). La hipótesis de este trabajo es sobre la posibilidad de deducir una metodología que proporcione modelos dinámicos en parámetros concentrados con (i) sentido físico basado en primeros principios, estructura simple y orden mínimo y, (ii) precisión y confiabilidad acorde al objetivo de modelado y la incertidumbre presente en esta clase de reactores.

Desde un punto de vista práctico, hemos tomado la idea fundamental de la teoría de control constructivo (Sepulchre *et al.*, 1997): la selección del modelo constituye en sí un grado de libertad que puede ser efectivamente explotado. Así, hemos racionalizado que la mejor manera de abordar el problema de modelado de bajo orden es tener descripciones acondicionadas a los propósitos de modelado específicos basados en el conocimiento de la operación del reactor de gas de síntesis.

1.7. Contribución

La principal aportación de este trabajo consiste en desarrollar una metodología para diseñar modelos de bajo orden de propósitos específicos. En este sentido, tres intereses descriptivos son evaluados: (i) descripción local eficiente-cuantitativa del estado estacionario de ignición, (ii) representación global eficiente-cualitativa de estados estacionarios del reactor y (iii) descripción global y local eficiente-cualitativa y cuantitativa de la operación de encendido; desde un estado de apagado, y el estado estacionario de ignición. El medio por el cual se aborda el problema de *modelar eficientemente* es a través de una elección efectiva de los grados de libertad (número y distribución de nodos de una malla espacial) de una clase de modelos por etapas, en EDOs, generados a partir de la discretización espacial de un modelo distribuido en ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) que comúnmente representa este tipo de reactores.

Para abordar el problema de modelado local, se propone un esquema de colocación de nodos para diseñar una malla adaptable que garantiza eficiencia-cuantitativa. Después, se realiza una valoración de los modelos de malla adaptable y uniforme para abordar el propósito de modelado global eficiente-cualitativo. Por último, los modelos de malla uniforme y adaptable, con y sin ayuda de una medición de temperatura, son evaluados para abordar el problema de descripción global y local.

1.8. Estructura de esta tesis

En el capítulo 2 se describe la clase de reactor de gasificación que será considerado en este estudio; así como las características y principios de funcionamiento de este. A continuación, se plantea el modelo en parámetros distribuidos que comúnmente es utilizado para describir el comportamiento dinámico de esta clase de reactores. Después, con base en los números y variables adimensionales, utilizados en teoría de ingeniería química de procesos, se presenta el modelo adimensional con estado cuasi-estacionario de los componentes de la fase gas. Seguido de esto, aplicando operadores de diferencias finitas de primer orden se presenta el modelo por etapas, análogo al modelo distribuido, que representa el comportamiento dinámico. A continuación, se describe el modelo por etapas en línea, caracterizado por ser una modelo de dinámica restringida que es manejado por los datos de una medición de temperatura.

En el capítulo 3 se exhibe una representación compacta de los tres tipos de modelos dinámicos presentados en el capítulo 2: (i) modelo distribuido, (ii) modelo por etapas y (iii) modelo por etapas en línea. Se presentan las propiedades de conjunto límite y error de modelado de cada tipo de modelo. Después se establecen las definiciones acerca de los propósitos de modelado que se abordan en esta tesis. Finalmente, se presenta la descripción detallada del caso ejemplo que se atiende y que se usará para ejemplificar la metodología de modelado que se propone.

El capítulo 4 se enuncia el problema de modelado por etapas con base en las definiciones establecidas en el capítulo 3, en el enunciado se establecen los tres objetivos de modelado que se abordan en esta tesis: (i) descripción numérica eficiente de la dinámica local alrededor del estado-estacionario de ignición, (ii) representación eficiente de los estados-estacionarios, es decir, modelo reducidos sin comportamientos de dinámica espuria y, (iii) descripción eficiente de operación de arranque del reactor de gas de síntesis. Una vez que se ha enunciado el problema de modelado, se describen los algoritmos numéricos y esquemas que serán utilizados para (i) diseñar la malla adaptable, (ii) determinar la multiplicidad de estados-estacionarios reales y espurios y, (iii) calcular los errores de modelado.

En el capítulo 5, la propuesta metodológica de modelado es aplicada al caso ejemplo de un reactor de gas de síntesis de pequeña escala a fin de determinar el tipo de malla uniforme o adaptable que favorece: (i) el modelo local eficiente-cuantitativo que describe la dinámica no-lineal local del estado de ignición, (ii) el modelo global eficiente-cualitativo que describe la dinámica global no-lineal y (iii) el modelo eficiente-pleno que representa la operación dinámica de arranque del reactor. Finalmente, el capítulo 6 se presenta una discusión acerca de los resultados obtenidos, así como conclusiones y propuestas de trabajo futuro.

Capítulo 2

Modelos Dinámicos

En este trabajo, se considera como caso de estudio para ser modelado un reactor tubular continuo de gasificación de lecho empacado (ver Figura 2.1), esta configuración resulta de interés para llevar a cabo el proceso de gasificación debido a la flexibilidad de biomasa que puede ser utilizada, su eficiencia y la calidad del gas de síntesis. En esta configuración, una corriente de aire (de flujo volumétrico q_{ge} y temperatura T_{ge}) y de sólido (de flujo másico m_{se} y temperatura T_{se}) compuesto por partículas de biomasa de diámetro d_{p0} y densidad a la entrada ρ_0 son alimentados por la parte superior del reactor para ser convertidos en bio-carbón, cenizas (con flujo másico m_{sf} , densidad ρ_{sf} and temperatura T_{sf}) y *syngas* [gas de síntesis] (con flujo volumétrico q_{gf} y temperatura T_{gf}) con una composición de gases de concentración \mathbf{C}_{gf} , L es la longitud, A_r es el área transversal y M_w es la masa de la pared del reactor de gas de síntesis.

El comportamiento del reactor de *syngas* comúnmente se describe mediante modelos en *Ecuaciones Diferenciales Parciales* (EDPs) basados en primeros principios de conservación de calor y masa (Di Blasi *et al.*, 2013; Shwe, 2004; Rogel, 2007). Estos modelos son caracterizados por su alta dimensión, de 1800-7000 *Ecuaciones Diferenciales Ordinarias* (EDOs), producidas como resultado de la discretización del dominio espacial con métodos numéricos de *Diferencias Finitas* (FD), *Elemento Finito* (FD) o *Dinámica de Fluidos Computacional* (CFD) que utilizan mallas espaciales de 250-700 nodos para obtener las soluciones. Para describir la conversión sólido-gas, la dinámica del proceso es matemáticamente modelada mediante (i) una red de reacciones heterogéneas sólido-gas de secado, pirólisis, combustión y reducción, así como también procesos homogéneos de oxidación de gas, (ii) fenómenos de convección de componentes de ambas fases, y (iii) transporte térmico por dispersión y radiación. De forma general, los principios de modelado de esta clase de reactores se basan en las siguientes consideraciones (Di Blasi, 2000; Baldea y Daoutidis, 2007; Rogel y Aguillon, 2006; Badillo-Hernandez *et al.*, 2013):

- Modelo Euleriano de dos fases (flujo de fases separados).
- Pirólisis de biomasa (pirólisis primaria), descomposición térmica de los alquitranes (pirólisis secundaria), y reacciones heterogéneas de combustión y gasificación del carbonizado, la combustión de los gases (volátiles) y la reacción de separación del CO_2 con agua (water-gas shift reacción) se realizan a una velocidad finita.
- Se incluye la transferencia de masa entre las partículas sólidas y el gas, la transferencia de calor entre fases y la transferencia de calor con las paredes del reactor para ambas fases mediante los coeficientes de transferencia incluidos en las ecuaciones de transporte.

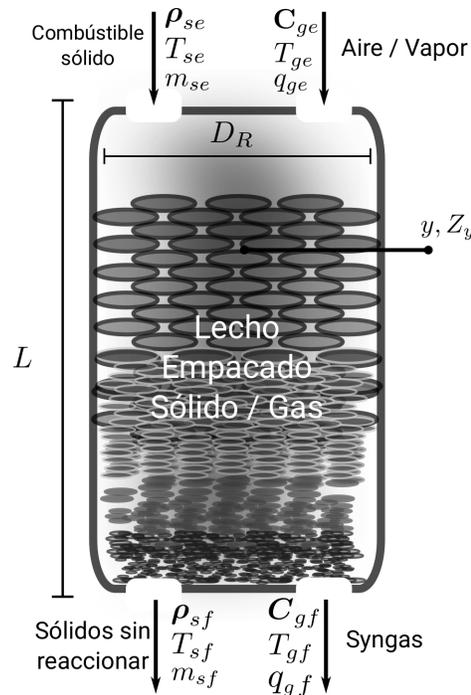


Figura 2.1: Reactor de gasificación de lecho empacado y flujos paralelos.

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

2.1. Modelo distribuido

De acuerdo a las consideraciones anteriores, Badillo-Hernandez *et al.* (2013) propone un modelo dinámico, donde a diferencia de lo mencionado anteriormente, las temperaturas de ambas fases son agrupadas. El modelo basado en primeros principios, está formado por balances de masa de las componentes químicas y balances de energía de cada una de las fases, la fase gaseosa (C_g) considera como especies químicas el oxígeno (O_2), hidrógeno (H_2), monóxido de carbono (CO), bióxido de carbono (CO_2), vapor de agua (H_2O), metano (CH_4), alquitranes (T) y nitrógeno (N_2), mientras que la fase sólida (C_s) está constituida por biomasa (\mathcal{B}) y carbonizado (\mathcal{C}) que representan el combustible sólido crudo y el combustible sólido carbonizado, respectivamente.

Así, la descripción de la dinámica distribuida temporal del reactor tubular de gasificación de la Figura 2.1, en términos de la red de reacciones descritas en la sección 1.1 y detalladas en el Apéndice A y C, está dada por el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) sobre un dominio espacial ($0 \leq Z \leq L$) y temporal ($t' > 0$):

$$\partial_{t'} T = -\partial_Z(T u_H) + \partial_Z(\mathcal{D}_H \partial_Z T) + \mathcal{Q}_T(\mathbf{C}, T) \quad (2.1a)$$

$$\partial_{t'} C_{s,i} = -\partial_Z(C_{s,i} u_s) + \mathcal{G}_{s,i}(\mathbf{C}, T) \quad (2.1b)$$

$$\partial_{t'} C_{g,i} = -\partial_Z(C_{g,i} u_g) + \partial_Z(\mathcal{D}_M \partial_Z C_{g,i}) + \mathcal{G}_{g,i}(\mathbf{C}, T) \quad (2.1c)$$

$$\mathcal{G}_{\pi,i}(\mathbf{C}, T) = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^{\pi} R_j, \quad \pi = g, s \quad (2.1d)$$

$$\mathcal{Q}_T(\mathbf{C}, T) = \left[\frac{\mathcal{Q}_R(\mathbf{C}, T) - \mathcal{Q}_w(T)}{C_s C_p^s} \right] \quad (2.1e)$$

$$\mathcal{Q}_R(\mathbf{C}, T) = -\sum_{j=1}^m \Delta H_j R_j \quad \mathcal{Q}_w(T) = \mathcal{A}_v h_w [T - T_w] \quad \mathcal{A}_v = \frac{4}{D_R} \quad (2.1f)$$

$$u_H = u_s + \left[\frac{C_p^g C_g}{C_p^s C_s} \right] u_g \quad \mathcal{D}_H = \frac{\lambda_s^{eff} + \lambda_g^{eff}}{C_s C_p^s} \quad C_{\pi} = \sum_{i=1}^{N_{\pi}} C_{\pi,i} \quad (2.1g)$$

$$\mathbf{C}_g = [C_{O_2} \ C_{H_2} \ C_{CO} \ C_{CO_2} \ C_{CH_4} \ C_{H_2O} \ C_T \ C_{N_2}], \quad n_g = \dim \mathbf{C}_g$$

$$\mathbf{C}_s = [C_{\mathcal{B}} \ C_{\mathcal{C}}], \quad n_s = \dim \mathbf{C}_s, \quad m = \dim(\mathbf{R})$$

donde $C_{\pi,i}$ es la concentración molar por unidad de volumen de la i -ésima componente en la fase π , T es la temperatura de ambas fases, $\mathcal{G}_{\pi,i}$ es la tasa de generación por unidad de volumen del componente i en la fase π , \mathcal{Q}_R y \mathcal{Q}_w es la tasa de generación de calor por unidad de volumen y la tasa de pérdida o aportación de calor entre el lecho y las paredes del reactor, respectivamente. R_j y ΔH_j son la tasa de reacción y el cambio de entalpía de la j -ésima reacción, respectivamente, $s_{i,j}^{\pi}$ es el coeficiente estequiométrico del i -ésimo componente en la j -ésima reacción de la fase π , u_{π} representa la velocidad convectiva de la fase π , u_H es el coeficiente de convección de calor para la temperatura promedio, \mathcal{D}_M y \mathcal{D}_H son el coeficiente de dispersión de la fase gas y el coeficiente de difusión de calor respectivamente, C_{π} y C_p^{π} es la concentración molar total y el calor específico de la fase π , respectivamente, h_w es el coeficiente de transferencia de calor de la pared del reactor y D_R es el diámetro interno del reactor. Los términos de reacción se presentan en el Apéndice A,

los términos de generación de calor se presentan en el Apéndice B y los parámetros del caso de estudio están en el Apéndice C.

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

$$\mathcal{D}_{\mathcal{M}} \partial_Z C_{g,i}(t', 0) = u_g(t, 0) [C_{g,i}(t', 0) - C_{g,i}^e] \quad (2.1h)$$

$$C_{s,i}(t', 0) u_s(t', 0) = C_{s,i}^e u_s^e \quad (2.1i)$$

$$\mathcal{D}_{\mathcal{H}} \partial_Z T(t', 0) = u_H(t', 0) [T(t', 0) - T^e] \quad (2.1j)$$

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

$$\partial_Z C_g(t', L) = 0 \quad (2.1k)$$

$$\partial_Z C_s(t', L) = 0 \quad (2.1l)$$

$$\partial_Z T(t', L) = 0 \quad (2.1m)$$

La mayoría de los modelos para gasificación en reactores de lecho fijo existentes en la literatura (Amundson y Arri, 1978; Di Blasi, 2000; Gøbel *et al.*, 2007; Badillo-Hernandez *et al.*, 2013) no incorporan el balance de momento debido a la alta diferencia entre los tiempos característicos de la hidrodinámica, mucho más rápida, en relación con la energía y la masa. Por consiguiente, la velocidad convectiva de la fase gaseosa y del lecho de carbonizado satisfacen las siguientes ecuaciones de continuidad.

$$0 = -\partial_Z C_g u_g + \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g R_j \quad (2.1n)$$

$$0 = -C_{\mathcal{C},pyr} \partial_Z u_s - (R_{g1} + R_{g2} + R_{g3} + R_{c5}) \quad (2.1ñ)$$

donde $C_{\mathcal{C},pyr}$ es la concentración de carbonizado, ó de sólido, después de la reacción y zona de pirólisis. Estas expresiones establecen que la reacción de pirólisis afecta solamente la densidad del sólido, y que la combustión y gasificación (reacciones R_{g1} , R_{g2} , R_{g3} , R_{c5}) del carbonizado \mathcal{C} produce cambios estructurales modelados como variaciones de velocidad a través de la ecuación de continuidad de carbonizado. Las condiciones de frontera correspondientes a las ecuaciones de continuidad son las siguientes:

$$Z = 0 \quad : \quad C_g(0, t') u_g(0, t') = C_g^e u_g^e, \quad C_s(0, t') u_s(0, t') = C_s^e u_s^e \quad (2.1o)$$

$$Z = L \quad : \quad \partial_Z C_g(t', L) = 0, \quad \partial_Z C_s(t', L) = 0 \quad (2.1p)$$

En la siguiente sección se presenta el modelo distribuido adimensional, cuya principal característica es la simplificación dinámica temporal de los componentes de la fase gas.

2.2. Modelo distribuido adimensional

Con el interés de simplificar el modelo, a continuación se muestra el modelo con simplificación dinámica de los estados de la fase gas. Este simplificación tiene como fundamento la teoría de perturbaciones singulares, en donde las derivadas de algunos de los estados están multiplicadas por un pequeño parámetro ε que produce una descomposición en las escalas de tiempo (Khalil, 2002). En el contexto de reactores de gasificación, la descomposición de las escalas de tiempo tiene como interpretación física las diferencias de densidad, velocidad de flujo y capacidad térmica entre la fase sólida y la fase gaseosa (Baldea y Daoutidis, 2007). En este sentido, considere las siguientes variables y números adimensionales, utilizados en teoría de ingeniería química de procesos:

$$\begin{aligned}
 c_{\pi,i} &= \frac{C_{\pi,i}}{C_{\pi 0}} & z &= \frac{Z}{L} & v_{\pi} &= \frac{u_{\pi}}{u_{\pi 0}} & \tau &= \frac{T}{T_0} \\
 \tau_w &= \frac{T_w}{T_0} & t &= \frac{u_{s0} t'}{L} & K_M &= \frac{C_{g0} u_{g0}}{C_{s0} u_{s0}} \\
 D_M &= \frac{\mathcal{D}_M}{\mathcal{D}_{M0}} & D_H &= \frac{\mathcal{D}_H}{\mathcal{D}_{H0}} & \mathcal{D}_{H0} &= \frac{\lambda_0}{C_s C_p^s} & St_w &= \frac{L h_w \mathcal{A}_v}{C_s C_p^s u_{s0}} \\
 Pe_M &= \frac{L u_{g0}}{\mathcal{D}_{M0}} & Pe_H &= \frac{L u_{s0}}{\mathcal{D}_{H0}} & Da_j &= \frac{L R_{j0}}{u_{g0} C_{g0}} & B_j &= \frac{\Delta H_j}{C_p^s T_0}
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

donde Pe_M y Pe_H son los números de Peclet de la masa de gas y de calor, respectivamente, St_w es el número de Stanton de pared, Da_j y B_j son el número de Damkholer o el aumento de temperatura adiabática para la j -ésima reacción. Aplicando un cambio de variables naturales sobre el sistema de ecuaciones (2.1) por las variables y números adimensionales (2.2), se obtiene la nueva representación sobre un dominio espacial $z = [0 \quad 1]$:

$$\partial_t \tau = -\partial_z(\tau v_H) + \frac{1}{Pe_H} \partial_z(D_H \partial_z \tau) + Q_{\tau}(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.3a}$$

$$\partial_t c_{s,i} = -\partial_z(c_{s,i} v_s) + G_{s,i}(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.3b}$$

$$\varepsilon \partial_t c_{g,i} = -\partial_z(c_{g,i} v_g) + \frac{1}{Pe_M} \partial_z(D_M \partial_z c_{g,i}) + G_{g,i}(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.3c}$$

$$0 = -\partial_z c_g v_g + \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g Da_j r_j \tag{2.3d}$$

$$0 = -c_{\mathcal{C},pyr} \partial_z v_s - (Da_{g1} r_{g1} + Da_{g2} r_{g2} + Da_{g3} r_{g3} + Da_{c5} r_{c5}) \tag{2.3e}$$

$$G_{g,i}(\mathbf{c}, \tau) = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g Da_j r_j(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.3f}$$

$$G_{s,i}(\mathbf{c}, \tau) = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^s Da_j K_M r_j(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.3g}$$

$$Q_{\tau}(\mathbf{c}, \tau) = -St_w [\tau - \tau_w] - K_M \sum_{j=1}^m B_j Da_j r_j(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.3h}$$

$$\begin{aligned}
r_j(\mathbf{c}, \tau) &= \frac{R_j(C, T)}{R(C_{g0}, T_0)} & v_H &= v_s + K_M \left[\frac{c_p^g c_g}{c_p^s c_s} \right] v_g \\
\varepsilon &= \frac{u_s}{u_g} & u_g &\gg u_s & \varepsilon &\rightarrow 0
\end{aligned} \tag{2.3i}$$

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

$$\frac{D_M}{Pe_M} \partial_z c_{g,i}(t, 0) = v_g [c_{g,i}(t, 0) - c_g^e] \tag{2.3j}$$

$$c_{s,i}(t, 0) v_s(t, 0) = c_s^e v_s^e \tag{2.3k}$$

$$\frac{D_H}{Pe_H} \partial_z \tau(t, 0) = v_H [\tau(t, 0) - \tau^e] \tag{2.3l}$$

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

$$\partial_z c_{g,i}(t, 1) = 0 \tag{2.3m}$$

$$\partial_z c_{s,i}(t, 1) = 0 \tag{2.3n}$$

$$\partial_z \tau(t, 1) = 0 \tag{2.3ñ}$$

El modelo anterior (2.3) es una representación con solución numérica de los estados sobre un dominio de $[0 \ 1]$ con los siguientes números y variables: t y z son el tiempo y la posición axial, \mathbf{c}_s (o \mathbf{c}_g) es el vector de n_s (o n_g) componentes dinámicos de la fase sólida (o cuasi-estáticos de la fase gas), \mathbf{c}_s incluye las concentraciones de biomasa y carbonizado, τ es la temperatura (fase gas τ_g -igual a- fase sólida- τ_s), v_g (o v_s) es la velocidad de la fase gas (o sólida) cuasi-estática, v_H es la velocidad de calor por convección. El vector \mathbf{r} contiene las m funciones de las tasas de reacción, \mathbf{s} es la matriz estequiométrica con los componentes de fase sólida \mathbf{s}^s y gas \mathbf{s}^g , m es el número de reacciones.

Debido a la presencia del parámetro ε , la ecuación (2.3c) está en la forma estándar de perturbaciones singulares (Khalil, 2002) y, de esta forma el modelo del reactor adimensional (2.3) exhibe un comportamiento con dos escalas de tiempo diferentes. En este sentido, Badillo-Hernandez *et al.* (2013) considera el caso límite donde el parámetro $\varepsilon \rightarrow 0$ (2.3i). Esta consideración supone que la capacidad térmica de la fase sólida es muy alta, o, de forma equivalente la fase gas tiene capacidad térmica cero en comparación con la fase sólida. En este límite, el cambio de variable desarrollado anteriormente genera un modelo con una descomposición con (i) una dinámica lenta para los componentes de la fase sólida (\mathcal{B}, \mathcal{C}) y la temperatura τ y (ii) una dinámica rápida (cuasi-estacionaria) para los componentes la fase gas $c_{g,i}$:

$$\partial_t \tau = -\partial_z(\tau v_H) + \frac{1}{Pe_H} \partial_z(D_H \partial_z \tau) + Q_\tau(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.4a}$$

$$\partial_t c_{s,i} = -\partial_z(c_{s,i} v_s) + G_{s,i}(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.4b}$$

$$0 \approx -\partial_z(c_{g,i} v_g) + \frac{1}{Pe_M} \partial_z(D_M \partial_z c_{g,i}) + G_{g,i}(\mathbf{c}, \tau) \tag{2.4c}$$

$$0 = -\partial_z c_g v_g + \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g Da_j r_j \tag{2.4d}$$

$$0 = -c_{\mathcal{C}, pyr} \partial_z v_s - (Da_{g1} r_{g1} + Da_{g2} r_{g2} + Da_{g3} r_{g3} + Da_{c5} r_{c5}) \tag{2.4e}$$

El modelo resultante, es un sistema gobernado por las tres EDPs con dinámica temporal y sujeto a las ocho EDOs de dinámica temporal cuasi-estacionaria y dos EDOs estacionarias para las velocidades de la fase gas v_g y sólida v_s . De tal forma la dinámica espacio-temporal de los componentes de la fase gas pueden ser calculados conociendo la dinámica de la Temperatura y los componentes de la fase sólida.

En la siguiente sección, se presenta una alternativa para representar el comportamiento dinámico del reactor de gas de síntesis, esta nueva descripción es desarrollada a través de la discretización del dominio espacial a través de operadores de diferencias finitas sobre el modelo simplificado (2.4).

2.3. Modelo en parámetros concentrados (*modelo por etapas*)

En esta sección se presenta el modelo en parámetros concentrados, generado a partir del modelo adimensional en parámetros distribuidos de gasificadores de lecho móvil empacado dado por el conjunto de ecuaciones (2.4). Siguiendo el agrupamiento de reactores tubulares de (Coste *et al.*, 1961; Deans y Lapidus, 1960) y recientes estudios de Nájera (2012) se realiza el ordenamiento del conjunto de ecuaciones diferenciales y algebraicas obtenidas de la discretización del modelo distribuido 2.4 que produce un modelo de parámetros concentrados, llamado modelo por etapas (o celdas). El desarrollo detallado para este modelo es presentado en Badillo-Hernandez (2014). El método de modelado adoptado consiste en la representación del modelo de un reactor tubular de dos fases como un serie de N -etapas con interacción de flujos (i) hacia adelante para representar los mecanismos de convección y dispersión de calor y masa y (ii) hacia atrás para describir los fenómenos de transporte de calor por dispersión. El método de discretización utilizado es el de diferencias finitas de primer orden, en este sentido, a continuación se muestran los operadores diferenciales utilizados para discretizar el modelo adimensional del reactor de gasificación (2.4):

- *Operador diferencial para término de transporte convectivo.* La derivada espacial del transporte convectivo regularmente es discretizada mediante los esquemas de diferencias finitas hacia atrás y hacia adelante de primer orden. Por lo tanto, para el caso de un reactor de gasificación de flujos paralelos descendentes, el término de diferencias finitas hacia atrás es el que prevalece:

$$(\partial_z \phi \nu)_k = \frac{\phi_k \nu_k - \phi_{k-1} \nu_{k-1}}{z_k - z_{k-1}} \quad (2.5a)$$

- *Operador diferencial para el término de transporte dispersivo.* Un método de diferencias finitas centradas es empleado para el término diferencial espacial dispersivo: diferencias finitas hacia atrás en la derivada espacial exterior y diferencias finitas hacia adelante en la derivada interior.

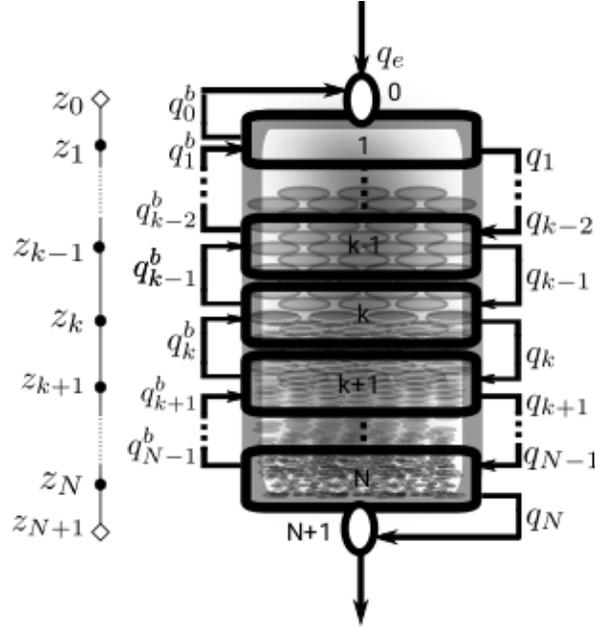


Figura 2.2: Representación del reactor de gasificación de lecho empacado y flujos paralelos como conexión de N -etapas con flujos hacia adelante q_k y hacia atrás q_k^b .

$$\partial_z (D \partial_z \phi)_k = \frac{D_k (\partial \phi)_k - D_{k-1} (\partial \phi)_{k-1}}{z_k - z_{k-1}} \quad (2.5b)$$

$$(\partial \phi)_k = \frac{\phi_{k+1} - \phi_k}{z_{k+1} - z_k} \quad (2.5c)$$

$$(\partial \phi)_{k-1} = \frac{\phi_k - \phi_{k-1}}{z_k - z_{k-1}} \quad (2.5d)$$

- *Operador diferencial de frontera en $z = 0$.* Se emplea el método de diferencias finitas hacia adelante en la derivada espacial.
- *Operador diferencial de frontera en $z = 1$.* Se emplea el método de diferencias finitas hacia atrás en la derivada espacial.

Aplicando los operadores diferenciales descritos anteriormente (2.5) sobre el modelo distribuido adimensional (2.4), se puede establecer una analogía directa entre el modelo discretizado espacialmente de un gasificador de lecho empacado y una serie de N -etapas con dos tipos de flujos volumétricos: (i) flujos hacia adelante q_k y (ii) los flujos de retromezclado por dispersión q_k^b , ver Figura 2.2. El enfoque de modelado descrito anteriormente indica que el comportamiento dinámico del reactor tubular de gasificación puede ser descrito por el siguiente conjunto de $n_x = N(n_s + 1)$ ecuaciones diferenciales ordinarias (2.6):

$$\dot{\tau}_k = \frac{1}{\Delta z_k} \left(q_{k-1}^\tau \tau_{k-1} - q_k^\tau \tau_k + q_k^{b,\tau} \tau_{k+1} - q_{k-1}^{b,\tau} \tau_k \right) + Q_{\tau,k}(\mathbf{c}, \tau) \quad (2.6a)$$

$$\dot{c}_{s,i,k} = \frac{1}{\Delta z_k} \left(q_{k-1}^s c_{s,i,k-1} - q_k^s c_{s,i,k} \right) + G_{s,i,k}(\mathbf{c}, \tau) \quad (2.6b)$$

$$0 = \frac{1}{\Delta z_k} \left(q_{k-1}^g c_{g,i,k-1} - q_k^g c_{g,i,k} + q_k^{b,g} c_{g,i,k+1} - q_{k-1}^{b,g} c_{g,i,k} \right) + G_{g,i,k}(\mathbf{c}, \tau) \quad (2.6c)$$

$$v_{g,k} c_{g,k} = v_{g,k-1} c_{g,k-1} + \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g Da_j r_{j,k} \quad (2.6d)$$

$$v_{s,k} = v_{s,k-1} c_{s,k-1} - \frac{Da_{g1} r_{g1,k} + Da_{g2} r_{g2,k} + Da_{g3} r_{g3,k} + Da_{c5} r_{c5,k}}{c_{c,pyr}} \quad (2.6e)$$

para

$$k = 1, \dots, N, \quad N = \dim(\mathbf{z} - 2), \quad \boldsymbol{\sigma} := \{N, \mathbf{z}\} \quad (2.6f)$$

$$\mathbf{z} : z_0 = 0 < z_1 < z_2 < \dots < z_N < z_{N+1} = 1 \quad (2.6g)$$

donde

$$q_k^\tau = v_{H,k} + \frac{D_{H,k}}{Pe_H \Delta z_{k+1}}, \quad q_k^s = v_{s,i,k}, \quad q_k^g = v_{g,k} + \frac{D_{M,k}}{Pe_M \Delta z_{k+1}} \quad (2.6h)$$

$$q_k^{b,\tau} = \frac{D_{H,k}}{Pe_H \Delta z_{k+1}}, \quad q_k^{b,s} = 0, \quad q_k^{b,g} = \frac{D_{M,k}}{Pe_M \Delta z_{k+1}} \quad (2.6i)$$

condiciones de frontera discretizadas

$$z = 0 : \mathbf{q}_0 \boldsymbol{\phi}_0 = \mathbf{q}_e \boldsymbol{\phi}_e + \mathbf{q}_0^b \boldsymbol{\phi}_1, \quad z = 1 : \boldsymbol{\phi}_{N+1} = \boldsymbol{\phi}_N \quad (2.6j)$$

$$(2.6k)$$

condiciones iniciales

$$t = 0 : \boldsymbol{\phi}_k(0) = \boldsymbol{\phi}_{k,ic} \quad (2.6l)$$

con

$$\mathbf{q}_e = \begin{bmatrix} q_e^\tau \\ q_e^s \\ q_e^g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{H,e} \\ v_{s,e} \\ v_{g,e} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\phi}_k = \begin{bmatrix} \tau_k \\ c_{s,i,k} \\ c_{g,i,k} \end{bmatrix}, \quad v_H = v_{s,k} + K_M \begin{bmatrix} \frac{c_{p,k}^g c_{g,k}}{c_{p,k}^s c_{s,k}} \end{bmatrix} v_{g,k} \quad (2.6m)$$

y con términos fuente

$$G_{g,i,k}(\mathbf{c}, \tau) = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g Da_j r_{j,k}(\mathbf{c}, \tau) \quad (2.6n)$$

$$G_{s,i,k}(\mathbf{c}, \tau) = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^s Da_j K_M r_{j,k}(\mathbf{c}, \tau) \quad (2.6ñ)$$

$$Q_{\tau,k}(\mathbf{c}, \tau) = -St_w [\tau_k - \tau_w] - K_M \sum_{j=1}^m B_j Da_j r_{j,k}(\mathbf{c}, \tau) \quad (2.6o)$$

q_k^τ y q_k^g son los términos hacia adelante de transporte de flujo de calor y masa de la fase gas con parte convectiva y difusiva, q_k^s es el término de transporte convectivo de masa sólida, $q_k^{b,\tau}$ y $q_k^{b,g}$ son los términos de flujo por retromezclado de calor y masa en fase gas. Δz_k es se le conoce como la dimensión de la etapa, \mathbf{q}_e es el vector de flujo de alimentación con los componentes q_e^τ , q_e^s y q_e^g . Esta representación, análoga al modelo que describe un tren de reactores continuos de tanque agitado multi-componente, está sujeta a un conjunto de ecuaciones diferenciales algebraicas (EDAs) [2.6c] representando el estado cuasi-estacionario de los componentes de la fase gas.

En la siguiente sección se presenta una variante del modelo de N - etapas, esta variación incluye la reducción y restricción dinámica del modelo (2.6) originadas por sustituir un estado de temperatura del modelo por una señal de temperatura tomada desde un sensor debidamente colocado en el reactor.

2.4. Modelo por etapas en línea

Motivados por los trabajos de observadores a lazo abierto (Álvarez y Fernández, 2009), observadores asintóticos (Dochain *et al.*, 1992) y modelado basado en datos, considere la señal de temperatura $y(t)$, obtenida desde un sensor colocado en el reactor de gas de síntesis, cuya posición axial es determinada de acuerdo al siguiente criterio (Bashir *et al.*, 1992):

$$y(t) = T(Z_y, t_\infty), \quad 0 < Z_y < L, \quad \partial_{ZZ}^2 T(Z_y) \approx 0 \quad (2.7a)$$

donde $y(t)$ es la medición de temperatura, localizada en la posición z_y donde ocurre el mayor cambio de pendiente del perfil de temperatura $T(Z_y, t_\infty)$, este criterio es empleado comúnmente en controladores industriales de temperatura (Bashir *et al.*, 1992; Álvarez y Fernández, 2009; Porru *et al.*, 2015). En variables y números adimensionales:

$$\tau_y(t) = \frac{y(t)}{T_0}, \quad z_y = \frac{Z_y}{L} \quad (2.8a)$$

Ahora, retomando el modelo de N -etapas (2.6) descrito en la sección anterior, identifique la s -ésima etapa más cercana (o ubicación espacial z_s) a la ubicación del sensor z_y , es decir:

$$z_s = \text{mín} (| z_y - z_s |), \quad s \in [1 \quad N] \quad (2.9)$$

Finalmente, en el modelo de N -etapas (2.6), se sustituye la s -ésima ecuación de balance de temperatura $\tau_s(t)$ por el valor de temperatura adimensional interpolado que contiene la medición de temperatura $\tau_y(t)$:

$$\dot{\tau}_k = \frac{1}{\Delta z_k} \left(q_{k-1}^\tau \tau_{k-1} - q_k^\tau \tau_k + q_k^{b,\tau} \tau_{k+1} - q_{k-1}^{b,\tau} \tau_k \right) + Q_{\tau,k}(\mathbf{c}, \tau),$$

$$k \in [1 \ N], \quad k \neq s \quad (2.10a)$$

$$\dot{c}_{s,i,k} = \frac{1}{\Delta z_k} \left(q_{k-1}^s c_{s,i,k-1} - q_k^s c_{s,i,k} \right) + G_{s,i,k}(\mathbf{c}, \tau) \quad (2.10b)$$

$$0 = \frac{1}{\Delta z_k} \left(q_{k-1}^g c_{g,i,k-1} - q_k^g c_{g,i,k} + q_k^{b,g} c_{g,i,k+1} - q_{k-1}^{b,g} c_{g,i,k} \right) + G_{g,i,k}(\mathbf{c}, \tau) \quad (2.10c)$$

sujeto a

$$\tau_s(t) = h(\tau_y(t), z_y, \tau_{s\pm 1}, z_{s\pm 1}), \quad s \in [1 \ N] \quad (2.10d)$$

este conjunto de ecuaciones es un sistema dinámico no-autónomo manejado por $\tau_s(t)$, donde $\tau_s(t)$ es el valor de temperatura interpolado que contiene la información de la señal de temperatura medida $y(t)$ (2.7a) y los valores de temperatura vecinos del modelo $\tau_{k\pm 1}(t)$. Este *modelo en línea de N-etapas* resultante es un sistema dinámico de dimensión $n_x^* = n_x - 1$.

En esta capítulo se presentaron de forma detallada los modelos dinámicos que serán utilizados en este trabajo. En el el siguiente capítulo se presentará, una representación condensada de estos modelos con el propósito de favorecer y plantear en una forma más clara el planteamiento de problema.

Capítulo 3

Propiedades y orientación de modelos dinámicos

En este capítulo se exhibe una representación compacta de los tres tipos de modelos dinámicos presentados en el capítulo anterior: (i) modelo distribuido (2.4), (ii) modelo por etapas (2.6) y (iii) modelo por etapas en línea (2.10). El propósito de aligerar la representación es facilitar la descripción de las propiedades del conjunto límite y del error de modelado de cada tipo de modelo.

En la primera sección de este capítulo se describen de forma compacta los modelos dinámicos y se establecen las propiedades de conjunto límite y error de modelado. Después se establecen las definiciones acerca de los propósitos de modelado que se abordan en esta tesis. Finalmente, se presenta la descripción detallada del caso ejemplo que se atiende y que se usará para ejemplificar la metodología de modelado que se propone.

3.1. Conjuntos límite y error numérico de modelado

En esta tesis entendemos por *conjunto límite* al número de estados estacionarios y ciclos límite que numéricamente puede describir un modelo dinámico y por otro lado, el *error numérico de modelado* es una propiedad de precisión que se mide a través de una métrica de error tomando como referencia una solución o comportamiento “ideal” del reactor de gas de síntesis.

3.1.1. Modelo distribuido adimensional

Para el caso del modelo distribuido adimensional (2.4), considere la siguiente representación en forma compacta (3.1):

$$\partial_t \mathcal{X} = \mathcal{F}(\mathcal{X}, \mathbf{u}, \mathbf{p}), \quad \mathcal{X}(0) = \mathcal{X}_0, \quad (3.1a)$$

$$\psi = \mathcal{G}(\mathcal{X}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \quad (3.1b)$$

$$\mathcal{X}(t) = [\mathbf{c}_s(z, t), \tau(z, t)]^T, \quad \psi(t) = [\mathbf{c}_g(z, t), \mathbf{v}(z, t)]^T \quad (3.1c)$$

$$\boldsymbol{\pi}_\partial := (\mathcal{X}^T, \psi^T) \quad (3.1d)$$

$$\mathbf{v}(z, t) = [v_g(z, t), v_s(z, t)] \quad \mathbf{u} = [\mathbf{v}_e^T, \mathbf{c}_{ge}^T, \mathbf{c}_{se}^T, \tau_e, \tau_a] \quad (3.1e)$$

donde $\boldsymbol{\pi}_\partial$ es la solución espacio-temporal, $\boldsymbol{\mathcal{X}}$ es el vector de los n_s perfiles de concentraciones de componentes de la fase sólida y temperatura, $\boldsymbol{\Omega}$ es el vector con los n_g perfiles de concentraciones de componentes de la fase gas en estado cuasi-estacionario y las dos velocidades axiales, $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ y $\boldsymbol{\mathcal{G}}$ son los operadores integral-espacial y \boldsymbol{p} es el vector de parámetros nominales de los fenómenos de transporte convectivo y dispersivo y de las cinéticas de reacción. El vector de entradas exógenas \boldsymbol{u} contiene los flujos de alimentación (\boldsymbol{v}_e/A_R), de los componentes en fase gas y sólida ($\boldsymbol{c}_{g,e}, \boldsymbol{c}_{s,e}$), la temperatura promedio de alimentación (τ_e) y la temperatura de la pared del reactor (τ_w).

El conjunto límite de estados-estacionarios (EEs) y ciclos límite (CLs) del modelo en EDPs de dimensión infinita para el reactor de gasificación de lecho empacado (3.1) es denotado por:

$$S_\partial = S_\partial^{EE} \cup S_\partial^{CL} = \Sigma_\partial(\boldsymbol{p}), \quad (3.2a)$$

$$S_\partial^{EE} = \{\bar{\boldsymbol{\mathcal{X}}}_1, \dots, \bar{\boldsymbol{\mathcal{X}}}_{n_\partial^{EE}}\} = \Sigma_\partial^{EE}(\boldsymbol{p}), \quad S_\partial^{CL} = \{\bar{\boldsymbol{\mathcal{X}}}_1(t), \dots, \bar{\boldsymbol{\mathcal{X}}}_{n_\partial^{CL}}(t)\} = \Sigma_\partial^{CL}(\boldsymbol{p}), \quad (3.2b)$$

donde S_∂^{EE} es el conjunto de EEs, $\bar{\boldsymbol{\mathcal{X}}}_i$ es el i -ésima solución en estado estacionario del sistema en EDOs con condiciones a la frontera

$$\boldsymbol{\mathcal{F}}(\bar{\boldsymbol{\mathcal{X}}}_i, \bar{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{p}) = 0, \quad i = 1, \dots, n_\partial^{EE} \geq 1, \quad n_\partial^{EE} = v_\partial^{EE}(\boldsymbol{p}) \quad (3.2c)$$

S_∂^{CL} es el conjunto de CLs y $\bar{\boldsymbol{\mathcal{X}}}_i(t)$ es la i -ésima solución periódica del modelo en EDPs (3.1)

$$\bar{\boldsymbol{\mathcal{X}}}_i(t), \quad i = 1, \dots, n_\partial^{CL}, \quad n_\partial^{CL} = v_\partial^{CL}(\boldsymbol{p}) \quad (3.2d)$$

Σ_∂^{EE} y v_∂^{EE} (o Σ_∂^{CL} y v_∂^{CL}) son los mapas que definen la dependencia de la solución de EEs (o CLs) sobre el conjunto de parámetros del modelo \boldsymbol{p} . Los cambios que puedan ocurrir en el número de EEs o CLs nominales debido a pequeños cambios en \boldsymbol{p} o \boldsymbol{u} producen diferentes tipos de bifurcación (Kielhöfer, 2012).

El modelo distribuido (2.1-3.1) descrito anteriormente es una versión “ideal” simplificada-conceptual de la dinámica *real* del reactor de gas de síntesis la cual puede ser representada a través del siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\partial_t \boldsymbol{\phi} = F(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{u}, \bar{\boldsymbol{p}}) \quad (3.3a)$$

$$\partial_t \boldsymbol{\psi} = G(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{u}, \bar{\boldsymbol{p}}) \quad (3.3b)$$

$$\boldsymbol{\pi}_a := (\boldsymbol{\phi}^T, \boldsymbol{\psi}^T) \quad (3.3c)$$

donde $\boldsymbol{\pi}_a$ es el comportamiento dinámico espacio-temporal *real* del reactor, $\boldsymbol{\phi}$ contiene las dinámicas de las variables lentas o dominantes de concentración de sólidos \boldsymbol{C}_s , su temperatura T_s y velocidad u_s , $\boldsymbol{\psi}$ es el vector de dinámicas rápidas que incluye las concentraciones de los componentes de la fase gas \boldsymbol{C}_g , su velocidad axial u_s y su temperatura T_g , modeladas en estado cuasi-estacionario para el caso del modelo simplificado (3.1), $\bar{\boldsymbol{p}}$ es el vector de parámetros de Cinética-y-Transporte *reales*, F y G representan los mecanismos reales de Cinética-y-Transporte. En consecuencia, surge un error numérico de modelado ε_∂ debido a: (i) errores de parámetros de Cinética-y-Transporte, (ii) la aproximación de estado cuasi-estacionario y (iii) el transporte de calor y modelado cinético y de transporte, entre el modelo en EDP (3.1) y la dinámica *real* del reactor (3.3).

En este trabajo, para el caso del error numérico de modelado ε_∂ solo se considera el error debido a incertidumbre en los parámetros de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\varepsilon_\partial(\tilde{\mathbf{p}}) = \|\pi_a(\bar{\mathbf{p}}, t) - \pi_\partial(\mathbf{p}, t)\|_t, \quad \tilde{\mathbf{p}} = \bar{\mathbf{p}} - \mathbf{p}, \quad \tilde{\mathbf{p}} \in [\tilde{\mathbf{p}}^-, \tilde{\mathbf{p}}^+] \quad (3.4a)$$

donde $\tilde{\mathbf{p}}$ denota los errores típicos de parámetros de Cinética-y-Transporte. Este error numérico de modelado, aplicado el caso del régimen en estado-estacionario se denotado por:

$$\bar{\varepsilon}_\partial(\tilde{\mathbf{p}}) = \|\bar{\pi}_a(\bar{\mathbf{p}}, t) - \bar{\pi}_\partial(\mathbf{p}, t)\|_s \quad (3.4b)$$

3.1.2. Modelo por etapas

En el caso del modelo por etapas (2.6), considere la siguiente representación en forma compacta:

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \quad (3.5a)$$

$$\mathbf{w} = g(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) \quad (3.5b)$$

$$\boldsymbol{\pi}_\sigma := (\mathbf{x}^T, \mathbf{w}^T) \quad (3.5c)$$

$$\mathbf{x} = [\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_k \dots \mathbf{x}_N \mathbf{x}_{N+1}] \quad (3.5d)$$

$$\mathbf{w} = [\mathbf{w}_1 \dots \mathbf{w}_k \dots \mathbf{w}_N \mathbf{w}_{N+1}], \quad (3.5e)$$

$$\mathbf{x}_k = [\mathbf{c}_{s,k}(t), \tau_k(t)], \quad \mathbf{w}_k = [\mathbf{c}_{g,k}(t), \mathbf{v}_k(t)], \quad \mathbf{v}_k(t) = [v_{g,k}(t), v_{s,k}(t)] \quad (3.5f)$$

$$\boldsymbol{\sigma} := \{N, \mathbf{z}\}, \quad N = \dim \mathbf{z} - 2, \quad k = 1, \dots, N \quad (3.5g)$$

$$\mathbf{z} = 1 : \mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{x}_N, \quad \mathbf{w}_{N+1} = \mathbf{w}_N, \quad (3.5h)$$

$$\mathbf{z} : z_0 = 0 < z_1 < z_2 < \dots < z_N < z_{N+1} = 1 \quad (3.5i)$$

donde

$$\dim \mathbf{x} = N(n_s + 1) := n_x \quad (3.5j)$$

$$\dim \mathbf{w} = N(n_g + 2) := n_w, \quad (3.5k)$$

$$\dim \boldsymbol{\pi}_N = n_x + n_w := n_{xw} \quad (3.5l)$$

$\boldsymbol{\pi}_\sigma$ es la solución etapa-temporal (o nodo de malla-temporal), \mathbf{x} y \mathbf{w} son los estados dinámicos y cuasi-estáticos, respectivamente, y $\boldsymbol{\sigma}$ es la *malla* que contiene los dos grados de libertad de nuestro enfoque de modelado de bajo orden: (i) el número de nodos internos de la malla espacial N , llamado *número de etapas* y, (ii) el vector de partición espacial o de distribución de nodos \mathbf{z} , llamado *tamaño de las etapas*. $\boldsymbol{\sigma} = \{N, \mathbf{z}\}$ genera (i) el modelo de N - etapas uniforme (o adaptable), por medio del paso equidistante (o no-equidistante) de los elementos de \mathbf{z} y, (ii) la complejidad del modelo debido a la dependencia lineal de la dimensión sobre el número de etapas N .

El conjunto límite de estados-estacionarios (EEs) y ciclos límite (CLs) del modelo de N - etapas (3.5) se denota por:

$$S_\sigma = S_\sigma^{EE} \cup S_\sigma^{CL} = \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}), \quad (3.6a)$$

$$S_\sigma^{EE} = \{\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_{n_\sigma^{EE}}\} = \Sigma_\sigma^{EE}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}), \quad S_\sigma^{CL} = \{\bar{\mathbf{x}}_1(t), \dots, \bar{\mathbf{x}}_{n_\sigma^{CL}}(t)\} = \Sigma_\sigma^{LC}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}), \quad (3.6b)$$

donde S_σ^{SS} es el EEs y $\bar{\mathbf{x}}_i$ es la i -ésima solución del sistema algebraico con condiciones a la frontera

$$\mathbf{f}(\bar{\mathbf{x}}_i, \bar{\mathbf{u}}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) = 0, \quad i = 1, \dots, n_\sigma^{EE} \geq 1, \quad n_\sigma^{EE} = v_\sigma^{EE}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) \quad (3.6c)$$

S_σ^{CL} es el conjunto de CLs y $\bar{\mathbf{x}}_i(t)$ es la i -ésima solución periódica del modelo de N -etapas (3.5)

$$\bar{\mathbf{x}}_i(t), \quad i = 1, \dots, n_\sigma^{LC}, \quad n_\sigma^{LC} = v_\sigma^{LC}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) \quad (3.6d)$$

Σ_σ^{EE} y v_σ^{EE} (o Σ_σ^{CL} y v_σ^{CL}) proveen la dependencia de las soluciones de EEs (o CLs) sobre el vector de parámetros de Cinética-y-Transporte \mathbf{p} , \mathbf{u} y la malla $\boldsymbol{\sigma}$. La dependencia de la dinámica no-lineal del conjunto de estados estacionarios, sobre el parámetro de discretización $\boldsymbol{\sigma}$ es la noción fundamental para ser evaluada en el presente estudio.

En esta representación, el error numérico de modelado ε_σ , es equivalente al error de discretización del método de diferencias finitas aplicado sobre el modelo en EDPs (3.1), y calculado entre las soluciones $\boldsymbol{\pi}_\partial$ y $\boldsymbol{\pi}_\sigma$ de la solución del modelo de N -etapas (3.5), este error numérico de modelado ε_σ se desvanece con respecto a la solución del modelo en EDPs (3.1) en el sentido de una norma espacial-temporal adecuada ($\|\cdot\|$) (Leveque, 2007), de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\varepsilon_\sigma(\boldsymbol{\sigma}) = \|\boldsymbol{\pi}_\partial(\mathbf{p}, t) - \boldsymbol{\pi}_\sigma(\mathbf{p}, t, \boldsymbol{\sigma})\|_t \quad (3.7a)$$

$$\varepsilon_{\sigma\{N\}} > \varepsilon_{\sigma\{N+1\}}, \quad \lim_{N \rightarrow N_{pde}} \varepsilon_\sigma \rightarrow 0 \quad (3.7b)$$

implicando que cuando el número de etapas es suficientemente grande $N \approx N_{pde}$ el error numérico de modelado ε_σ desaparece. Esta medida de error de modelado, o error discretización, aplicada al caso de régimen de estado estacionario se denota por:

$$\bar{\varepsilon}_N(\boldsymbol{\sigma}) = \|\bar{\boldsymbol{\pi}}_\partial(\mathbf{p}, t) - \bar{\boldsymbol{\pi}}_N(\mathbf{p}, t, \boldsymbol{\sigma})\|_s \quad (3.7c)$$

De igual forma, para el caso del conjunto límite cuando Σ_σ , cuando $N \approx N_{pde}$ el conjunto límite Σ_σ (3.6) del modelo de N -etapas (3.5) es igual al conjunto límite Σ_∂ (3.2) del modelo en EDPs (3.1).

$$\lim_{N \rightarrow N_{pde}} \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) = \Sigma_\partial(\mathbf{p}) \quad (3.7d)$$

Comúnmente, para el caso del reactor de gasificación exotérmico de lecho empacado se ha utilizado $N_{pde} \in [200, 700]$ en resolvedores de EDPs basados en métodos por diferencias finitas (Di Blasi, 2000, 2008; Di Blasi *et al.*, 2013; Shwe, 2004; Rogel y Aguilon, 2006). Para el caso del modelado por etapas:

$$N = N^+ \approx L/d_p, \quad N^+ < N_{pde}, \quad N^+ \in [30, 100] \quad (3.8)$$

donde L/d_p es la relación que existe entre la longitud del reactor-y- el tamaño inicial de la partícula sólida. De acuerdo al enfoque de modelado por etapas (Badillo-Hernandez *et al.*, 2017; Hlavacek

et al., 2000), la relación (3.8) establece que el número de etapas debería ser elegido: (i) por encima del límite inferior (N^-) para eliminar los estados estacionarios (SSs) espurios (Amundson *et al.*, 1980; Schreiber y Keller, 1983; Lafon y Yee, 1996a,b), y (ii) por debajo del límite superior (N^+) para prevenir el sobre-modelado con respecto al error de modelado (3.4).

3.1.3. Modelo por etapas en línea

Considere el modelo de N -etapas en forma condensada (3.5). El modelado en línea se caracteriza por el reemplazo de la k -ésima ecuación de temperatura $\tau_k(t)$ por el valor interpolado correspondiente dado por la ecuación algebraica (3.9e) que contiene una medición de temperatura $\tau_y(t)$ debidamente colocada a lo largo del reactor (2.8a). Una vez que se lleva a cabo esta sustitución se produce una representación cuyo comportamiento dinámico es gobernado por los datos de la medición de temperatura. El conjunto de ecuaciones resultantes se define como modelo de N -etapas en línea:

$$\dot{\mathbf{x}}^* = f(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}, \tau_k), \quad \mathbf{x}^*(0) = \mathbf{x}_0^* \quad (3.9a)$$

$$\mathbf{w} = g(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \quad (3.9b)$$

$$\boldsymbol{\pi}_\sigma^* := (\mathbf{x}^{*T}, \mathbf{w}^T) \quad (3.9c)$$

$$\dim(\mathbf{x}^*) = N(n_s + 1) - 1 := n_x^* \quad (3.9d)$$

sujeito a

$$\tau_s(t) = h(\tau_y(t), z_y, \tau_{s\pm 1}, z_{s\pm 1}), \quad s \in [1 \quad N] \quad (3.9e)$$

donde \mathbf{x}^* es el sistema dinámico no-autónomo, $\tau_s(t)$ es el valor de temperatura que le corresponde a la etapa s obtenido a través de la interpolación entre la señal de medición de temperatura adimensional $\tau_y(t)$ [2.8a] y el valor de temperatura de la(s) etapa(s) vecina(s), a la etapa s , $\tau_{s\pm 1}(t)$ del modelo de N -etapas. El modelo de N -etapas resultante es un sistema dinámico de dimensión $n_x^* = n_x - 1$ manejado por $\tau_y(t)$. El modelo de N -etapas es similar al estimador de lazo abierto de Baratti *et al.* (1993) y al observador asintótico de Dochain *et al.* (1992).

En términos generales, el objetivo del modelo de N -etapas en línea (3.9) es inferir el estado del proceso $\boldsymbol{\pi}$ (3.1, 3.5) con base en la medición de temperatura del proceso τ_y (2.7a). La propiedad de *detectabilidad* del modelo no-autónomo de N -etapas en línea (3.9) es establecida dentro de un marco de estabilidad entrada-estado en Fernandez *et al.* (2012); Badillo-Hernandez *et al.* (2016). Para esto, considere la solución $\boldsymbol{\pi}_\sigma^*(t)$ del sistema dinámico que resulta de la aplicación de la señal de salida medida $y(t)$ (2.7a) sobre el modelo de N -etapas (3.5). Cuando (i) las condiciones iniciales del sistema restringido \mathbf{x}_0^* (3.9) y el sistema no-restringido \mathbf{x}_0 (3.1,3.5) y, (ii) la malla $\boldsymbol{\sigma}$ es la misma en ambos modelos, las trayectorias del sistema restringido $\boldsymbol{\pi}_\sigma^*(t)$ [3.9] y del no-restringido $\boldsymbol{\pi}(t)$ [3.1,3.5] son las mismas, es decir:

$$\mathbf{x}_0^* = \mathbf{x}_0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\pi}^*(t) = \boldsymbol{\pi}(t) \quad (3.10a)$$

Por otro lado, las trayectorias $\boldsymbol{\pi}$ (3.1,3.5) se dicen ser *robustamente detectable* con índice de observabilidad uno, si (i) la malla $\boldsymbol{\sigma}$ es diferente para el modelo restringido (3.9) y el modelo no-restringido (3.1,3.5) y (ii) la trayectorias $\boldsymbol{\pi}^*(t)$ del sistema restringido (3.9) convergen robustamente

a las trayectorias $\boldsymbol{\pi}(t)$ del sistema no-restringido (3.1, 3.5), es decir:

$$\boldsymbol{x}_0^* \neq \boldsymbol{x}_0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\pi}^*(t) = \boldsymbol{\pi}(t) \quad (3.10b)$$

Considerando lo anterior, el conjunto límite de EEs y CLs del modelo de N -etapas en línea queda definido de la siguiente forma:

$$S_\sigma^* = S_\sigma^{EE*} \cup S_\sigma^{CL*} = \Sigma_\sigma^*(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}) = \Sigma_\partial(\boldsymbol{p}), \quad (3.11a)$$

$$S_\sigma^{EE*} = \left\{ \bar{\boldsymbol{x}}_1^*, \dots, \bar{\boldsymbol{x}}_{n_{SS^*}}^* \right\} = \Sigma_\sigma^{EE*}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}) = \Sigma_\partial^{EE}(\boldsymbol{p}), \quad (3.11b)$$

$$S_\sigma^{CL*} = \left\{ \bar{\boldsymbol{x}}_1^*(t), \dots, \bar{\boldsymbol{x}}_{n_{CL^*}}^*(t) \right\} = \Sigma_\sigma^{CL*}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}) = \Sigma_\partial^{CL}(\boldsymbol{p}), \quad (3.11c)$$

donde el conjunto de EEs (o CLs) del modelo en línea S_σ^{EE} (o $S_\sigma^{*,CL}$) es igual al conjunto de EEs (o CLs) S_∂^{EE} (or S_∂^{CL}) (3.2) del modelo adimensional distribuido (3.1).

El error de discretización ε_σ^* del modelo de N -etapas en línea (3.5) se desvanece con respecto a la solución del modelo distribuido (3.1) de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\varepsilon_\sigma^*(\boldsymbol{\sigma}) = \left\| \boldsymbol{\pi}_\partial(\boldsymbol{p}, t) - \boldsymbol{\pi}_\sigma^*(\boldsymbol{p}, t, \boldsymbol{\sigma}) \right\|_t \quad \varepsilon_{\sigma\{N\}}^* > \varepsilon_{\sigma\{N+1\}}^* \quad \lim_{N \rightarrow N_{pde}} \varepsilon_\sigma^* = 0 \quad (3.12a)$$

En el caso del régimen en estado estacionario, la medición del error de discretización del modelo de N -etapas en línea se indica por:

$$\bar{\varepsilon}_\sigma^*(\boldsymbol{\sigma}) = \left\| \bar{\boldsymbol{\pi}}_\partial(\boldsymbol{p}, t) - \bar{\boldsymbol{\pi}}_\sigma^*(\boldsymbol{p}, t, \boldsymbol{\sigma}) \right\|_s \quad (3.12b)$$

En esta sección se han determinado las propiedades de conjunto límite y errores numéricos de modelado de los modelos distribuidos en EDPs (3.1), y los modelos por etapas (3.5) y modelo de N -etapas en línea (3.9). En la siguiente sección se establecen las definiciones acerca de los enfoques o propósitos de modelado que se abordan en esta tesis. Estos conceptos se establecen de acuerdo a la propiedad de *eficiencia de modelado* que se basa en la elección eficaz el grado de libertad $\boldsymbol{\sigma} := \{N, \boldsymbol{z}\}$ respecto al objetivo de modelado.

3.2. Enfoques de modelado

En esta sección, las definiciones de modelo eficiente cuantitativo, cualitativo y pleno son establecidas en términos del grado de libertad $\boldsymbol{\sigma} = \{N, \boldsymbol{z}\}$, N como número y \boldsymbol{z} como dimensión de las etapas del modelo de N -etapas (2.6). Primero, se definen las propiedades de eficiencia-cuantitativa en estado transitorio y en estado estacionario, estas propiedades son una característica de aquellos modelos cuyas soluciones en estado transitorio y/o estacionario son numéricamente “comparables” a las soluciones de alto orden (3.1) con incertidumbre paramétrica $\tilde{\boldsymbol{p}}$. Después, se define la propiedad de eficiencia-cualitativa designada a aquellos modelos que ofrecen una descripción “confiable” del conjunto límite S_σ (3.6); esto es, una descripción sin dinámicas espurias provocadas por sobre-discretización (Lafon y Yee, 1996a,b). Por último, se define la propiedad de eficiencia-plena, este atributo denota aquellos modelos que cumplen con: (i) una solución de precisión numérica “comparable” a las soluciones de alto orden con incertidumbre paramétrica $\tilde{\boldsymbol{p}}$ y (ii) una descripción de conjuntos límite S_σ (3.6) “confiable”. Cabe recordar, que el objetivo en

este trabajo es evaluar los tipos de malla (i) adaptable σ_a^N y (ii) uniforme σ_u^N y las definiciones mostradas en los siguientes renglones se establecen a través de $\sigma = \{N, \mathbf{z}\}$ como grado de libertad de modelado para lograr el mínimo número de etapas N de acuerdo al tipo de distribución.

3.2.1. Modelo eficiente-cuantitativo

A diferencia de trabajos previos (Badillo-Hernandez *et al.*, 2013, 2018), en donde el número de etapas N es elegido mediante una comparación visual entre los perfiles de alto (referencia) y bajo orden en estado transitorio y/o estacionario, en este trabajo la elección del número de etapas N del modelo (3.5) se elige de acuerdo a una métrica que permite comparar los errores numéricos de modelado y discretización.

Para comenzar, considere la solución en estado transitorio π_N (o estacionario $\bar{\pi}_N$) del modelo de N_ε -etapas (3.5), con número de etapas igual a N_ε , y la solución en estado transitorio π_∂ (o estacionario $\bar{\pi}_\partial$) del modelo de alto orden (3.1) con número de nodos de la malla espacial $N = N_{pde}$.

El modelo de N_ε -etapas se dice ser *eficiente-cuantitativo*, con respecto al modelo distribuido, si numéricamente el comportamiento del reactor se puede describir con un número de etapas N_ε tal que la reducción $N_{pde} \rightarrow N_\varepsilon$ permite que los errores numéricos de modelado en estado transitorio ε_∂ (3.4) y ε_N (3.7) (o estacionario $\bar{\varepsilon}_\partial$ [3.4b] y $\bar{\varepsilon}_N$ [3.7c]) sean comparables, dado un vector de errores de parámetros de Cinética-y-Transporte $\tilde{\mathbf{p}}$. Estas propiedades son establecidas en la siguientes definiciones:

Definición 1. El modelo de N_ε -etapas (3.5), con número de etapas N_ε , es *eficiente-cuantitativo* en estado transitorio, con respecto al modelo distribuido (3.1), si el error numérico de modelado en estado transitorio $\varepsilon_N(\sigma)$ [3.7] es menor o comparable al error numérico de modelado en estado transitorio $\varepsilon_\partial(\tilde{\mathbf{p}})$ [3.4]:

$$N_\varepsilon = \left\{ \min_{N \in \mathcal{N}} \mid \varepsilon_N(\sigma) \lesssim \varepsilon_\partial(\tilde{\mathbf{p}}) \right\} \quad (3.13)$$

con

$$\mathcal{N} = [N^-, N_{pde}), \quad \sigma = \{N, \mathbf{z}\}, \quad \mathbf{z} = \{z_u, z_a\}$$

Definición 2. El modelo de N_ε -etapas (3.5), con número de etapas N_ε , es *eficiente-cuantitativo* en estado estacionario, con respecto al modelo distribuido (3.1), si el error numérico de modelado en estado estacionario $\bar{\varepsilon}_N(\sigma)$ [3.7c] es menor o comparable al error de numérico de modelado en estado estacionario $\bar{\varepsilon}_\partial(\tilde{\mathbf{p}})$ [3.4b]:

$$\bar{N}_\varepsilon = \left\{ \min_{N \in \mathcal{N}} \mid \bar{\varepsilon}_N(\sigma) \lesssim \bar{\varepsilon}_\partial(\tilde{\mathbf{p}}) \right\} \quad (3.14)$$

con

$$\mathcal{N} = [N^-, N_{pde}), \quad \sigma = \{N, \mathbf{z}\}, \quad \mathbf{z} = \{z_u, z_a\} \quad (3.15)$$

Las definiciones anteriores, denotan una característica sobre aquellos modelos cuyas solucio-

nes en estado transitorio y/o estacionario son numéricamente “comparables” a las soluciones de alto orden (3.1) con incertidumbre $\tilde{\mathbf{p}}$ de los parámetros de Cinética-y-Transporte. En este sentido, la definición (3.13) será utilizada frecuentemente como guía para elegir aquellos modelos que numéricamente describen estados transitorios locales o de operaciones de arranque de encendido o apagado del reactor, mientras que la definición (3.14) será utilizada únicamente como referencia de elección de aquellos modelos que numéricamente son adecuados para describir el estado estacionario de interés.

Las definiciones anteriores son válidas para el caso de los modelos de N_ε^* -etapas en línea. Los números N_ε^* y ε_N^* (o \bar{N}_ε^* and $\bar{\varepsilon}_N^*$) definirán el mínimo número de etapas requeridos y el error numérico de modelado en estado transitorio (o estacionario), respectivamente.

3.2.2. Modelo eficiente-cualitativo

En esta sección, se define la propiedad de *eficiencia-cualitativa*. Esta propiedad está relacionada con la confiabilidad del modelo de N_Σ -etapas (3.5), con número de etapas N_Σ y distribución espacial \mathbf{z} como grados de libertad, para no generar dinámicas espurias provocadas por la sobre-discretización del modelo distribuido (Lafon y Yee, 1996a,b). En este sentido, la propiedad de *eficiencia-cualitativa* se define en términos de la estabilidad estructural del modelo respecto a la continuación sobre un parámetro del modelo. En el caso del modelo de N -etapas se consideran como parámetros los grados de libertad de la malla $\boldsymbol{\sigma} = \{N, \mathbf{z}\}$: (i) el número de etapas N y (ii) el tipo de distribución espacial adaptable \mathbf{z}_a o uniforme \mathbf{z}_u .

Para comenzar, en este trabajo se retoman los conceptos establecidos por Badillo-Hernandez *et al.* (2018) para modelos de N -etapas (3.5) de malla uniforme $\boldsymbol{\sigma}_u^N$, con número variable de etapas N , parámetros nominales de Cinética-y-Transporte \mathbf{p} y conjunto límite de estados-estacionarios (EEs) y ciclos límite (CLs) $S_\sigma = \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma})$ (3.2):

$$S_\sigma = \Sigma_\sigma(N), \quad n_\sigma(N) = n_{SS} + n_{LC} = \nu_\sigma^{SS}(\mathbf{p}, N) + \nu_\sigma^{LC}(\mathbf{p}, N) = \nu_\sigma(\mathbf{p}, N) \quad (3.16)$$

donde, para el caso de malla uniforme $\boldsymbol{\sigma}_u^N$, Σ_σ (o ν_σ) depende del número de etapas N y el conjunto de parámetros nominales \mathbf{p} . Badillo-Hernandez *et al.* (2018) definen la propiedad de *N-estructura-estable*, con respecto a parámetros nominales \mathbf{p} y el parámetro variable N , como una extensión de la noción clásica de estabilidad estructural (Andronov & Pontryagin, 1937) donde se estable que el modelo de N -etapas (3.5) con malla uniforme $\boldsymbol{\sigma}_u^N$ es *N-estructura-estable* si:

$$\forall N \in \mathcal{N}_r = [N^-, N_{pde}) : S_\sigma = \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, N) \approx \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, N_{pde}), \quad \nu_\sigma(\mathbf{p}, N) = \nu_\sigma(\mathbf{p}, N_{pde}) \quad (3.17)$$

implicando que la dinámica del modelo de N -etapas es topológicamente equivalente a la dinámica del modelo distribuido en EDPs (3.1) bajo los cambios en N sobre \mathcal{N}_r , esto es, el modelo de N -etapas (3.5) tiene: (i) el mismo número ν_σ de EEs o CLs y (ii) la misma (robusta o frágil) propiedad de estabilidad que el modelo distribuido en EDPs (3.1). En este caso, N^- es el límite inferior de etapas que evita comportamientos espurios (Lafon y Yee, 1996a,b), y este es determinado de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$N^- = N^* + \Delta N, \quad N^* = \max\{N_1^*, \dots, N_{n_d}^*\}, \quad N_i^* < N_{i+1}^*, \quad \Delta N \in [2, 5] \quad (3.18)$$

donde N^* es el límite superior de bifurcación, y N_i^* es el i -ésimo número de etapas de la bifurcación de Hopf que satisface las condiciones:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_i^*, \mathbf{p}, N_i^*) = \mathbf{0}, \quad \nu_\sigma(N_i^* - 1) \neq \nu_\sigma(N_i^*) \quad (3.19)$$

lo que significa que en el paso del número de etapas de $N_i^* \rightarrow N_i^* - 1$ el modelo padece de la creación o destrucción de conjuntos límite, es decir, el número ν_σ de EEs y CLs depende del número de etapas N del modelo (3.5). En consecuencia, la dependencia de EEs y CLs sobre el número de etapas N , es denotado por $\Sigma_\sigma(N)$ y llamado N -bifurcación.

En vista de la evaluación actual del tipo de malla uniforme σ_u^N o adaptable σ_a^N como grado de libertad, para los diferentes propósitos (o enfoques) de eficiencia de modelado, la noción de N -estructura estable es extendida al caso de estudio con malla adaptable σ_a^N . Retomado el modelo de N -etapas (3.5) con parámetros nominales de Cinética-y-Transporte (\mathbf{p}), número de etapas N de dimensión ajustable a través de la distribución espacial de nodos \mathbf{z} , la propiedades de *eficiencia-cualitativa* es establecida en la siguiente definición:

Definición 3. El modelo de N_Σ -etapas (3.5), con número de etapas N_Σ , es *eficiente-cualitativo*, con respecto al modelo distribuido (3.1), si el conjunto límite S_σ (3.6) es topológicamente equivalente al conjunto límite S_δ (3.2):

$$N_\Sigma = \left\{ \min_{N \in \mathcal{N}} S_\sigma = \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) \simeq \Sigma_\delta(\mathbf{p}, N_{pde}) = S_\delta \right\} \quad (3.20)$$

con

$$\mathcal{N} = [N^-, N_{pde}), \quad \boldsymbol{\sigma} = \{\mathcal{N}, \mathbf{z}\}, \quad \mathbf{z} = \{\mathbf{z}_u, \mathbf{z}_a\}$$

estableciendo que, sobre el parámetro de discretización $\boldsymbol{\sigma} = \{\mathcal{N}, \mathbf{z}\}$, el modelo de N_Σ -etapas tiene el (la) mismo (a): (i) número n_{SS} y n_{LC} de EE y CL, respectivamente, y (ii) estabilidad (robusta o frágil), que el modelo distribuido (3.1). El número de etapas N^- mínimo de etapas para evitar comportamientos espurios es determinado de acuerdo a las ecuación (3.18).

Cabe destacar que, la definición de *eficiencia-cualitativa* es comúnmente utilizada cuando se busca una representación confiable de la dinámica del conjunto límite S_σ , esta propiedad garantiza únicamente una descripción adecuada del número n_σ de EEs y CLs sin considerar la eficiencia-cuantitativa del modelo de la parte de N_Σ -etapas resultante. El propósito es establecer una descripción global confiable a partir del modelo que ofrece la mayor eficiencia-cualitativa, respecto al tipo de malla uniforme o adaptable, como aspecto deseable ya que los modelos con discretización espacial inducen estados estacionarios espurios (Lafon y Yee, 1996a,b) que pueden desvanecerse con el incremento del número de etapas N .

3.2.3. Modelo eficiente-pleno

En esta sección se define la propiedad de *eficiencia-plena*, este atributo denota aquellos modelos que cumplen con: (i) una solución de precisión numérica “comparable” a las soluciones de alto orden con incertidumbre paramétrica $\tilde{\mathbf{p}}$ y (ii) una descripción de conjuntos límite S_σ (3.6) “confiable”. Esta propiedad, es un enfoque de modelado más riguroso, ya que, los modelos que cumplen con este atributo, deberán ser numéricamente precisos y con estructura-estable para no contener dinámicas espurias. En este sentido, la propiedad de *eficiencia-plena* es establecida a continuación:

Definición 4. El modelo de $N_{\Sigma,\varepsilon}$ -etapas (3.5), con número de etapas $N_{\Sigma,\varepsilon}$, es *eficiente-pleno*, con respecto al modelo distribuido (3.1), si es *eficiente-cuantitativo* y *eficiente-cualitativo*:

$$N_{\Sigma,\varepsilon} = \left\{ \min_{N \in \mathcal{N}} | \varepsilon_N(\boldsymbol{\sigma}) \lesssim \varepsilon_\partial(\tilde{\mathbf{p}}) , S_\sigma = \Sigma_\sigma(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) \simeq \Sigma_\partial(\mathbf{p}, N_{pde}) = S_\partial \right\} \quad (3.21)$$

con

$$\mathcal{N} = [N^-, N_{pde}], \quad \boldsymbol{\sigma} = \{\mathcal{N}, \mathbf{z}\}, \quad \mathbf{z} = \{\mathbf{z}_u, \mathbf{z}_a\}$$

Los modelos de *eficiencia-plena* son modelos cuyas características de precisión numérica y estabilidad estructural pueden ser utilizados para describir comportamientos dinámicos de encendido y apagado del reactor de gas de síntesis, así como también, describir la operación continua del estado-estacionario de ignición en la operación continua del proceso (2.1).

En esta sección se han definido los conceptos de eficiencia- cuantitativa, cualitativa y plena, estos conceptos tienen como objetivo hacer notar la diferencia que existe entre los propósitos descriptivos de modelado. En la siguiente sección se describe el caso ejemplo en el cual será aplicado la metodología de modelado que se aborda en esta tesis.

3.3. Caso de estudio

Para ilustrar el desarrollo y resultados de la metodología de modelado que aquí se propone, se toma un caso de estudio que ha sido previamente investigado mediante experimentos (Shwe, 2004; Manurung y Beenackers, 1993; Barrio, 2002; Milligan, 1994) y simulaciones (Di Blasi, 2000; Badillo-Hernandez *et al.*, 2013, 2017, 2018; Canales-Meza *et al.*, 2017).

El gasificador de pequeña escala (Fig. 2.1) tiene un diámetro interno $D_R = 0,45 m$ y longitud de $L = 0,5 m$. El diámetro inicial del combustible sólido que se ingresa al reactor tiene $dp_{in} = 0,01 m$ con densidad $\rho_{se} = 200 kg/m^3$ y se supone que estas tiene forma esférica. La fracción de vacío se considera contante a lo largo del reactor y tiene un valor de 0,5. La pared del reactor es constante en espacio y tiempo y es igual a $T_w = 600^\circ K$.

La fase gas contiene $n_g = 8$ componentes ($n_g^R = 7$ reactivos: $O_2, H_2, CO, CO_2, H_2O, CH_4, Tars$ y $n_g^I = 1$ inertes: N_2). La fase sólida contiene $n_s = n_s^R = 2$ componentes (biomasa \mathcal{B} y carbonizado \mathcal{C}). El modelo de N -etapas utilizado considera (i) una temperatura promedio para ambas fases $T_g = T_s = T$ y (ii) estado cuasi-estacionario de los componentes de la fase gas. La

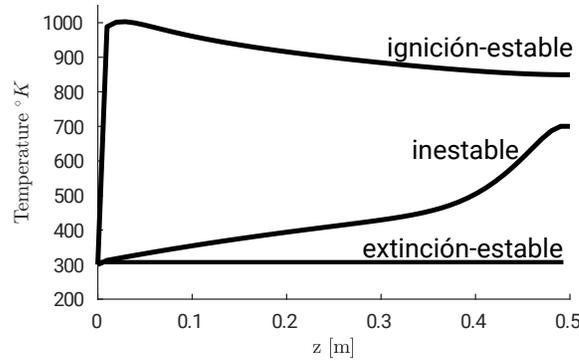


Figura 3.1: Perfiles de Temperatura en estado estacionario: (i) Estable de ignición de la operación continu, (ii) estable de extinción e (iii) inestable tipo punto-silla.

naturaleza de los fenómenos de transporte del reactor de gasificación es conservada a través de del acoplamiento de sistema de EDOs (2.6) a través de la interconexión de la etapas y los flujos convectivos q_k y dispersivos q_k^b bidireccionales.

De acuerdo a los estudios recientes de simulación (Ranzi *et al.*, 2014; Badillo-Hernandez *et al.*, 2018), este trabajo considera como punto de partida que el reactor de estudio exhibe un comportamiento bi-estable: (i) un estado estacionario estable de ignición de interés para la operación continua, (ii) un estado estacionario de extinción y (iii) un estado inestable tipo punto-silla en medio de los dos estables, tal y como se muestra en los perfiles de Temperatura de la Figura 3.1. Se sabe que los estados estacionarios estables han sido corroborados en estudios experimentales (Di Blasi, 2000; Shwe, 2004).

En este capítulo se han descrito las propiedades de ciclo límite y error numérico de modelado. De acuerdo a estas propiedades, se han definido los conceptos de eficiencia-cuantitativa, cualitativa y plena que forman el fundamento del objetivo de elección de malla de este trabajo. Finalmente se ha descrito el caso de estudio que será considerado en este trabajo para ejemplificar la metodología de modelado que se propone.

En el siguiente capítulo se enuncia el problema de modelado por etapas con base en las definiciones establecidas. Después, las herramientas numéricas de desarrollo para (i) diseñar las mallas uniforme y adaptable, (ii) medir los errores numéricos de modelado y (iii) determinar la multiplicidad de estados estacionarios reales y espurios de los modelos resultantes son presentadas.

Capítulo 4

Problema del modelado por etapas y herramientas numéricas

En este capítulo se enuncia el problema de modelado por etapas con base en las definiciones establecidas en el capítulo anterior, en el enunciado se establecen los tres objetivos de modelado que se abordan en esta tesis: (i) descripción numérica eficiente de la dinámica local alrededor del estado-estacionario de ignición, (ii) representación eficiente de los estados-estacionarios, es decir, modelos reducidos sin comportamientos de dinámica espuria y, (iii) descripción eficiente de operación de arranque del reactor de gas de síntesis.

Una vez que se ha enunciado el problema de modelado, se describen los algoritmos numéricos y esquemas que serán utilizados para (i) diseñar la malla adaptable $\sigma_a^N = \{N, \mathbf{z}_a\}$ para los modelos de N -etapas, (ii) determinar la multiplicidad de estados-estacionarios reales y espurios y, (iii) calcular los errores de modelado del modelo distribuido debido a la incertidumbre de parámetros ε_∂ (3.4) y del modelo por etapas debido a la discretización-espacial ε_σ (3.7).

Primero se presenta el algoritmo de diseño de malla adaptable que garantiza una colocación balanceada de N nodos de la malla \mathbf{z} para mejorar la cobertura de (i) las zonas de alta variación espacial de los perfiles estacionarios de la solución de referencia y (ii) el largo del reactor. Hacemos esto utilizando una ecuación de peso que ajusta la posición de los nodos con base a dos distribuciones uniformes de nodos: (i) una de espacio y (ii) una de gradiente.

Después, se presentan las ecuaciones para medir los errores de modelado ε_∂ (3.4) y ε_σ (3.7). Finalmente, se presenta el método de identificación de estados estacionarios reales y espurios de los modelos por etapas de malla adaptable $\sigma_a^N = \{N, \mathbf{z}_a\}$ y uniforme $\sigma_u^N = \{N, \mathbf{z}_u\}$.

4.1. Enunciado del problema de modelado

En esta tesis, nuestro problema consiste en desarrollar una metodología para obtener *modelos eficientes* que (i) cumplan con los objetivos descriptivos, de precisión y/o estabilidad estructural, de forma confiable y (ii) que sean de dimensión tan baja como sea posible para no sobre-representar el comportamiento dinámico deseado. Hacemos esto tomando como base el modelado por etapas y eligiendo, como mejor convenga, el tipo de malla uniforme o adaptable.

Reconociendo la complejidad dinámica del reactor de gasificación, en este estudio se derivan tres enfoques de eficiencia: (i) *eficiencia-cuantitativa* (3.14), que garantiza una precisión numérica adecuada acorde a una métrica de error y que va dirigida principalmente a los propósitos de modelado de dinámicas locales o de operación continua, (ii) *eficiencia-cualitativa* (3.20), que garantiza la estabilidad estructural del modelo para no generar dinámicas espurias y que es utilizada principalmente para los problemas de determinación de la multiplicidad de estados estacionarios y, (iii) *eficiencia-plena* (3.21) que aborda de manera conjunta la estabilidad estructural y la precisión numérica del modelo. Estos tres enfoques de modelado-eficiente surgen del conocimiento obtenido a través de experimentos y simulaciones propias, de las cuales pudimos concluir que el tipo de malla uniforme o adaptable tiene un rol importante sobre la cantidad de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) [o número de etapas] necesarias para satisfacer tres objetivos específicos de modelado: (i) la descripción local eficiente-cuantitativa del estado estacionario de ignición, (ii) la representación global eficiente-cualitativa de estados estacionarios del reactor y (iii) el modelado eficiente-pleno de acuerdo a la operación de encendido, desde un estado de apagado hasta el estado estacionario de ignición, del reactor de gas de síntesis. Estos propósitos de modelado son abordados tomando como base los modelos N -etapas a través de una elección efectiva de los grados de libertad de $\sigma = \{N, \mathbf{z}\}$: (i) el número de nodos etapas N y, (ii) el tamaño de la etapas por medio de la distribución espacial \mathbf{z} .

Como parte de la metodología de modelado que se propone en este trabajo, primero se presenta el algoritmo de diseño de malla adaptable $\sigma_a^N = \{N, \mathbf{z}_a\}$. Este algoritmo está principalmente diseñado para balancear la colocación de los N nodos de la malla \mathbf{z} . Este balance mejora la cobertura del dominio espacial considerando (i) las zonas donde existe alta variación de los perfiles estacionarios de la solución de referencia y (ii) la longitud del reactor. El resultado es un modelo mínimo de \bar{N}_ε -etapas que describe el estado estacionario de ignición, y bajo el cual se aborda el primer objetivo de *modelado local eficiente-cuantitativo*. El número de etapas \bar{N}_ε se elige de acuerdo al criterio (3.14) de la definición 2 establecida en el capítulo 3. Para el caso del cálculo del error de modelado del modelo distribuido (3.4b), se considera un vector de errores paramétricos típicos de Cinética-y-Transporte $\tilde{\mathbf{p}}$, bajo el cual se genera un conjunto de soluciones perturbadas cuyo propósito es simular el comportamiento de la solución *real* π_a del reactor.

Después, el objetivo de *modelado eficiente-cualitativo* para describir de forma confiable la multiplicidad de estados estacionarios es abordado. En este caso se utiliza el método de continuación numérica desarrollado previamente por Badillo-Hernandez *et al.* (2018) que permite determinar la multiplicidad de estados estacionarios reales y espurias. Se realiza una evaluación de los modelos de malla adaptable $\sigma_a^N = \{N, \mathbf{z}_a\}$ y uniforme $\sigma_u^N = \{N, \mathbf{z}_u\}$ para obtener el tipo de modelo que ofrece un menor número de etapas para cumplir con el criterio (3.20) de la definición 2.

Finalmente, el objetivo de *modelado de eficiencia-plena* es abordado mediante el enfoque de modelado por etapas. La meta es describir de forma eficiente (i) la operación de encendido o arranque y (ii) la operación continua del estado-estacionario de ignición del reactor de gas de síntesis. Se realiza una evaluación de los modelos de malla adaptable $\sigma_a = \{N, \mathbf{z}_a\}$ y uniforme $\sigma_u = \{N, \mathbf{z}_u\}$ para determinar el modelo de mínimo número de etapas que cumple con el criterio (3.21) de la definición 4. Particularmente para este objetivo de modelado se consideran las soluciones de modelos por etapas fuera de línea π_σ (3.5) y el modelo por etapas en línea π_σ^* (3.9).

4.2. Algoritmo de diseño de malla adaptable

El algoritmo de diseño de malla adaptable que a continuación se presenta tiene como objetivo ajustar el tamaño de las etapas (o nodos internos) a través del vector espacial \mathbf{z} , para cada N dado. Este ajuste se realiza de forma automática a través de una ecuación de balance cuya propósito es colocar los nodos internos considerando dos vectores: (i) un vector que mide la inclinación o variación espacial de los perfiles en el estado estacionario de interés y (ii) un vector que mide la cobertura adecuada del dominio espacial. El esquema propuesto consta de cinco pasos que van desde el cálculo de una solución de referencia en estado-estacionario y la comparación de los errores numéricos de modelado (3.4b, 3.7c) hasta la elección de número de etapas \bar{N}_ε necesarias para satisfacer la condición de *eficiencia-cuantitativa en estado estacionario* (3.14), los pasos de los que consta este algoritmo se detallan a continuación:

1. *Solución de referencia en estado-estacionario $\bar{\pi}_\partial$ y error de modelado $\bar{\varepsilon}_\partial$.* Calcule una solución de referencia $\bar{\pi}_\partial$ utilizando (i) parámetros de Cinética-y-Transporte nominales \mathbf{p} y (ii) una malla $\sigma_u^{\mathcal{N}} = \{\mathcal{N}, z_u^+\}$ de distribución de nodos uniforme z_u^+ y número de nodos internos lo suficientemente grande $\mathcal{N} = [N^+, N_{pde}]$. Seleccione o calcule un error numérico de modelado en estado-estacionario $\bar{\varepsilon}_\partial$ (3.4b), una forma de calcular este error numérico de modelado se presenta en la siguiente sección.

2. *Mapa de gradiente $\beta - \gamma$.* Con base en los perfiles de la solución de referencia en estado-estacionario $\bar{\pi}_\partial$ y la malla espacial de alto orden $\sigma_u^{\mathcal{N}} = \{\mathcal{N}, z_u^+\}$, genere el mapa de gradiente $\beta - \gamma$ (4.1) para capturar la zonas de alta y baja variación. β captura la intensidad de las variaciones y γ sus localizaciones. Calcule el área total bajo la curva a_T de este mapa.

$$\beta(k) = \sum_{j=1}^{n_{xw}} \delta(j, k), \quad \gamma(k) = |z_u(k+1) - z_u(k)| \quad (4.1a)$$

$$\delta(j, k) = \frac{|\bar{\pi}_\partial(j, k+1) - \bar{\pi}_\partial(j, k)|}{\|\bar{\pi}_\partial + (j)\|} \quad (4.1b)$$

$$j = 1, \dots, n_{xw}, \quad k = 0, \dots, \mathcal{N} \quad (4.1c)$$

$$a_T = \int \beta(\gamma) d\gamma \quad (4.1d)$$

donde δ es la matriz de gradientes normalizados de j renglones representando los estados, dinámicos y cuasi-estáticos y $\mathcal{N} + 1$ columnas representando el número de nodos (o etapas) de la solución de referencia en estado estacionario $\bar{\pi}_\partial$. β es el vector de cambios que agrupa los gradientes de los n_{xw} estados en la j -ésima posición, γ es el vector de posición de gradientes agrupados y a_T es el área bajo el mapa de gradiente $\beta - \gamma$.

3. *Malla adaptable σ_a^N .* Comience con $N = 2$ y defina $N_p = N - 1$. Calcule una malla espacial uniforme z_u (4.2a) de N_p nodos internos:

$$z_u(k) = \frac{k}{N}, \quad k = 1, \dots, N_p \quad (4.2a)$$

A continuación, construya el vector espacial z_b (4.2b) que divide el área total a_T en N_p secciones

de tamaño de área uniforme:

$$z_b(k) = \left\{ \gamma_b(k+1) \in \gamma \mid \int_{\gamma_b(k)}^{\gamma_b(k+1)} \beta(\gamma) d\gamma = \frac{a_T}{N_p} \right\} \quad (4.2b)$$

$$\gamma_b(1) = \gamma(1)$$

Después, construya el vector de N_p -centros z_c (4.2c) que divide cada sección uniforme de área en dos partes de sub-áreas iguales:

$$z_c(k) = \left\{ \gamma_c(k) \in \gamma \mid \int_{\gamma_b(k)}^{\gamma_c(k)} \beta(\gamma) d\gamma = \frac{a_T}{2N_p} \right\} \quad (4.2c)$$

Finalmente, por medio de z_u y z_c calcule la distribución espacial previa z_p aplicando la ecuación de balance (4.2d):

$$z_p = f(k) z_c(k), \quad f(k) = \frac{1}{1 + z_c(k) - z_u(k)} \quad (4.2d)$$

donde $f(k)$ es el factor de balance entre las mallas de distribución espacial uniforme z_u y de distribución de área uniforme z_c . La malla adaptable $\sigma_a^N = \{N, z_a^N\}$ es completada agregando un nodo a z_p (4.2) para compensar la dinámica restringida de la condición de frontera tipo Neumann (3.5h), i.e.:

$$\sigma_a^N = \{N, z_a\}, \quad z_a = \{z_p, z_u^+(\mathcal{N})\} \quad (4.3a)$$

4. *Solución de bajo orden $\bar{\pi}_\sigma$ y error de modelado $\bar{\varepsilon}_N$.* Aplique la malla adaptable σ_a^N y calcule el error de discretización $\bar{\varepsilon}_N$ (3.7) entre la solución reducida $\bar{\pi}_\sigma$ (3.5) y la solución de referencia $\bar{\pi}_\partial$ (3.1) en estado estacionario. Una forma de calcular el error de modelado debido a la discretización-espacial $\bar{\varepsilon}_\sigma$ (3.7) se muestra en la siguiente sección.

5. *Validación de la solución de bajo orden $\bar{\pi}_\sigma$.* Verifique el criterio (3.14) de la definición 2. Si esta condición se satisface, detenga el algoritmo y asigne $N = \bar{N}_\varepsilon$, si no, incremente $N = N + 1$ y repita el procedimiento desde el paso (3).

El algoritmo de diseño de malla adaptable $\sigma_a^{N_\varepsilon} = \{N_\varepsilon, z_a\}$ presentado es un esquema que establece un compromiso entre la cobertura de: (i) las zonas con alta variación de los perfiles en el estado estacionario de interés a través del vector z_c (4.2c) y, (ii) el dominio espacial del reactor por medio de z_u (4.2a). El compromiso de estas coberturas es alcanzado por medio de (i) ajustar los N_p tamaños de las etapas a través de la ecuación de ponderación (4.2d) para fortalecer la distribución uniforme de los gradientes z_c y, (ii) agregar el nodo N (4.2) para compensar la condición de frontera tipo Neumann (3.5h).

En la siguiente sección se presentan los métodos bajo los cuales en este trabajo se calculan los errores de modelado debido a la incertidumbre de parámetros ε_∂ (3.4) y debido a la discretización espacial del modelo de N -etapas ε_σ (3.7).

4.3. Cálculo de errores de modelado

En este trabajo, la *eficiencia-cuantitativa* es evaluada a partir de una comparación entre (i) el error de modelado debido a la discretización-espacial ε_σ (3.7) y (ii) el error de modelado debido a la incertidumbre-paramétrica ε_∂ (3.4) tomando como base los criterios establecidos en las definiciones 1 y 2 (3.13, 3.14) del capítulo anterior.

Error de modelado debido a incertidumbre de parámetros ε_∂

Con el propósito de formular una métrica del error de modelado ε_∂ (3.4) originado por la incertidumbre-paramétrica, definida en el capítulo anterior como la diferencia entre (i) la solución π_∂ del modelo distribuido (3.1) y (ii) el comportamiento *real* del reactor π_a (3.3), en este trabajo se considera que: (i) las trayectorias *reales* del reactor de gas de síntesis π_a (3.3) y (ii) la solución nominal π_∂ (3.1) se encuentran dentro de un conjunto de soluciones de alto orden con perturbación paramétrica $\Delta\pi_\partial$, es decir:

$$\begin{aligned} \{\pi_a(\bar{\mathbf{p}}, t), \pi(\mathbf{p}, t)\} &\in \Delta\pi_\partial = \cup_{i=1}^{n_\Delta} \pi_\partial^i(\mathbf{p} + \check{\mathbf{p}}, t) \\ n_\Delta = \dim \Delta\pi_\partial &= 2^{n_p}, \quad n_p = \dim \check{\mathbf{p}}, \quad \check{\mathbf{p}} \in \tilde{\mathbf{p}} \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde $\check{\mathbf{p}}$ es un subconjunto de n_p elementos del vector de errores de parámetros $\tilde{\mathbf{p}}$, el número n_Δ de soluciones de alto orden perturbadas que contiene el conjunto $\Delta\pi_\partial$ se obtienen agregando los errores de parámetros $\check{\mathbf{p}}$ en el modelo distribuido en EDPs (3.1), o el modelo de \mathcal{N} -etapas, por medio de un diseño de experimentos factorial de dos niveles (Gunst *et al.*, 1996). Para obtener este conjunto de soluciones de alto orden perturbadas, se recomienda utilizar la malla $\sigma_u^{\mathcal{N}} = \{\mathcal{N}, z_u^+\}$ de distribución de nodos uniforme z_u^+ y número de nodos internos lo suficientemente grande $\mathcal{N} = [N^+, N_{pde}]$ (ver paso 1 del *algoritmo de diseño de malla adaptable* en la sección 4.2).

Una vez calculado el conjunto de soluciones de alto orden con perturbación paramétrica $\Delta\pi_\partial$, se genera el i -ésimo vector de error promedio ponderado en estado-transitorio ε_Δ^i entre la solución en estado-transitorio de referencia π_∂ y la i -ésima solución en estado-transitorio perturbada $\Delta\pi_\partial^i$, esto es:

$$\begin{aligned} \varepsilon_\Delta^i &= 100 \times \eta \times \left(\frac{|\pi_\partial - \Delta\pi_\partial^i|}{\pi_\partial} \right)_t, \quad t = [t_0, t_f] \\ \eta &= \{1, 0\}, \quad \dim(\eta) = n_{xw} \quad i = 1, \dots, n_\Delta \end{aligned} \quad (4.5a)$$

η es el vector de ponderación que sirve para pesar los estados de interés, --- define el valor promedio para del error relativo entre la solución en estado-transitorio de referencia π_∂ y la i -ésima solución en estado-transitorio perturbada $\Delta\pi_\partial^i$ para cada instante de tiempo del vector t . Finalmente, el error de modelado en estado-transitorio ε_∂ (3.4) debido a la incertidumbre de parámetros se define como:

$$\varepsilon_\partial = \text{máx} \{\Delta\varepsilon_\partial\} = \text{máx} \{\varepsilon_\Delta^1, \varepsilon_\Delta^2, \dots, \varepsilon_\Delta^{n_\Delta}\}_t, \quad t = [t_0, t_f] \quad (4.5b)$$

Para el caso del error de modelado en estado-estacionario $\bar{\varepsilon}_\partial$ (3.4b), este es calculado de

forma similar, considerando esta vez las soluciones en estado-estacionario $\bar{\pi}_\partial$ y $\Delta\bar{\pi}_\partial^i$, es decir:

$$\bar{\varepsilon}_\Delta^i = 100 \times \eta \times \left(\frac{|\bar{\pi}_\partial - \Delta\bar{\pi}_\partial^i|}{\bar{\pi}_\partial} \right) \quad (4.6a)$$

$$\bar{\varepsilon}_\partial = \text{máx} \{ \Delta\bar{\varepsilon}_\partial \} = \text{máx} \{ \bar{\varepsilon}_\Delta^1, \bar{\varepsilon}_\Delta^2, \dots, \bar{\varepsilon}_\Delta^{n_\Delta} \} \quad (4.6b)$$

donde, de igual forma, η es el vector de ponderación, $\overline{\quad}$ define el valor promedio para del error relativo entre la solución en estado-estacionario de referencia $\bar{\pi}_\partial$ y la i -ésima solución en estado-estacionario perturbada $\Delta\bar{\pi}_\partial^i$.

Error de modelado debido a la discretización-espacial ε_σ

En esta sección se presenta la formulación de la métrica de error de modelado ε_σ (3.7) debido a la discretización-espacial del modelo de N -etapas, definida en el capítulo anterior como la diferencia numérica entre (i) la solución del modelo distribuido π_∂ (3.1) y (ii) la solución del modelo de N -etapas π_σ (3.5).

Como primer punto, debido a la diferencia espacial entre (i) el número de etapas (o nodos) de la malla $\sigma_u^N = \{N, z_u^+\}$ utilizada para obtener la solución de referencia π_∂ (ver paso 1 del *algoritmo de diseño de malla adaptable* en la sección 4.2) y (ii) el menor número de etapas (o nodos) de la malla $\sigma = \{N, z\}$ de la solución reducida π_σ , se considera lo siguiente: elegir únicamente la solución en aquellas etapas (o nodos) que coinciden, ó se aproximan, espacialmente con los etapas (o nodos) de la malla reducida $\sigma = \{N, z\}$, con el propósito de generar la sub-solución de referencia π_∂^s , esto es:

$$\pi_\partial^s = \{ \pi_\partial \mid z_k^+ \approx z_k \} \quad \forall \quad k = 0, \dots, N + 1, \quad \dim(\pi_\partial^s) = \dim(\pi_\sigma) \quad (4.7a)$$

Una vez generada la sub-solución π_∂^s , se genera el vector de error promedio ponderado en estado-transitorio ε_σ entre la sub-solución en estado-transitorio de referencia π_∂^s y la solución en estado-transitorio reducida π_σ :

$$\varepsilon_\partial = 100 \times \eta \times \left(\frac{|\pi_\partial^s - \pi_\sigma|}{\pi_\partial^s} \right)_t, \quad t = [t_0, t_f] \quad (4.7b)$$

$$\eta = \{1, 0\}, \quad \dim(\eta) = n_{xw}$$

donde η es el vector de peso que pondera los estados de interés, $\overline{\quad}$ define el valor promedio para del error relativo entra la solución en estado-transitorio de referencia π_∂^s y la solución en estado-transitorio reducida π_σ para cada instante de tiempo del vector t .

Para el caso del error de modelado en estado-estacionario $\bar{\varepsilon}_\sigma$ (3.7c), este se calcula de forma similar, considerando esta vez las soluciones en estado estacionario $\bar{\pi}_\partial^s$ y $\bar{\pi}_\sigma$, tal y como se muestra a continuación:

$$\bar{\varepsilon}_\partial = 100 \times \eta \times \left(\frac{|\bar{\pi}_\partial^s - \bar{\pi}_\sigma|}{\bar{\pi}_\partial^s} \right) \quad (4.8a)$$

$$\bar{\pi}_\partial^s = \{ \bar{\pi}_\partial \mid z_k^+ \approx z_k \} \quad \forall \quad k = 0, \dots, N + 1, \quad \dim(\bar{\pi}_\partial^s) = \dim(\bar{\pi}_\sigma) \quad (4.8b)$$

$$\eta = \{1, 0\}, \quad \dim(\eta) = n_{xw}$$

donde, de igual forma, $\boldsymbol{\eta}$ es el vector de ponderación, $\bar{\cdot}$ define el valor promedio para el error relativo entra la solución en estado-estacionario de referencia $\bar{\boldsymbol{\pi}}_\rho$ y la en estado-estacionario reducida $\bar{\boldsymbol{\pi}}_\sigma$.

Las métricas formuladas anteriormente, son también válidas para el caso de los errores de modelado ε_N^* y $\bar{\varepsilon}_N^*$ (3.12) debido a la discretización-espacial de los modelos de N -etapas *en línea* (3.9).

4.4. Esquema numérico de continuación

El método de continuación, es un procedimiento numérico que calcula el conjunto de estados-estacionarios (SSs) o soluciones periódicas mediante el seguimiento de cambios, de un conjunto de soluciones conocidas, originados por la variación de uno o varios parámetros de Cinética-y-Transporte del proceso (Seydel y Hlavacek, 1987; Allgower y Georg, 1990). En esta sección, se explicará brevemente el esquema de *continuación* presentado en el estudio de Badillo-Hernandez *et al.* (2018). Este esquema es utilizado en este estudio como la herramienta necesaria para evaluar la *estabilidad estructural* de los modelos de N -etapas (3.5), y por consiguiente, determinar el tipo de malla adaptable $\boldsymbol{\sigma}_a^N = \{N, \boldsymbol{z}_a\}$ o uniforme $\boldsymbol{\sigma}_u^N = \{N, \boldsymbol{z}_u\}$ que brinda la descripción *eficiente-cualitativa*.

Retomando el concepto de conjunto límite $\Sigma(p)$ (3.2, 3.6) del conjunto de soluciones S de estado-estacionarios S^{EE} y ciclos límite S^{CL} , y la dependencia de este conjunto sobre el parámetro continuo p , la determinación del conjunto $\Sigma(p)$ se construye a través del esquema de *p-continuación*, denotado por:

$$\Sigma(p) \approx \mathcal{C}[\Sigma(p_0)], \quad p \in P = [p^-, p^+] \quad (4.9)$$

donde $\Sigma(p_0)$ es el conjunto de solución inicial, \mathcal{C} es el algoritmo de *continuación* implementado a través del software de MATCONT (Dhooge *et al.*, 2003; Govaerts *et al.*, 2011), que es un proyecto de software en **Matlab** para el estudio de continuación numérica y bifurcación de sistemas dinámicos parametrizados continuos y discretos, que usa el método de longitud de pseudo-arco (Keller, 1977; Doedel *et al.*, 1991) combinado con *simulaciones de falso transitorio*. Este software es desarrollado con el integrador implícito **ode15s** para sistemas rígidos en ecuaciones diferenciales ordinaria de **MatLab** (Gear, 1971; Shampine *et al.*, 2003). El uso de este software tiene el propósito de buscar estados-estacionarios estables de ramas desconectadas desde $\Sigma(p)$, incluyendo los estados-estacionarios espurios (Lafon y Yee, 1996a,b).

En este sentido, en este trabajo buscamos la dependencia del conjunto límite $\Sigma_c(N)$ (3.6) de estados-estacionarios sobre el parámetro de discretización N , el cual es llevado a cabo mediante el esquema llamado *N-continuación*, denotado por:

$$\Sigma_d(N) \approx \mathcal{C}_d[N, \Sigma_d(N_0)], \quad \mathcal{C}_d := \mathcal{C} \circ \mathcal{P}, \quad N \in \mathcal{N} = [1, N_{pde}], \quad N^- = N^* + 2 \quad (4.10)$$

donde $\Sigma_d(N_0)$ es el conjunto solución inicial de SSs de un modelo inicial de N_0 -etapas, \mathcal{P} es el predictor del conjunto de soluciones, \mathcal{C} es el operador corrector de algoritmo \mathcal{C}_d , N^- y N^* son el número mínimo de etapas para evitar soluciones espurias y el máximo número de etapas donde aparece la N -bifurcación, respectivamente [ver (3.18)]. El operador \mathcal{P} predice el conjunto de SSs

por medio de resolutor algebraico no lineal basado en la región de confianza (Powell, 1968; Conn *et al.*, 1987) con una “sugerencia” inicial la interpolación espacial $\bar{\pi}_N$ de los perfiles calculada con un número de etapa anterior. El corrector \mathcal{C} obtiene el conjunto solución $\Sigma_d(N)$ por medio del *p-continuación auxiliar* (3.16).

El esquema *N-continuación* (4.10) puede ser aplicado al modelo de *N-etapas* (3.5) con malla adaptable σ_a^N o uniforme σ_u^N . De esta manera, nosotros llamamos *σ -continuación* a esta especialización del *N-continuación* (4.10) para malla uniforme desarrollado anteriormente por (Badillo-Hernandez *et al.*, 2018).

Para evaluar la confiabilidad del modelo de *N-etapas* (3.5) para describir el comportamiento no-lineal del reactor de gas de síntesis a través del modelo en EDPs (3.1), un procedimiento de dos pasos es desarrollado: (i) primero, el esquema de *σ -continuación* es aplicado a los casos de malla uniforme σ_u^N y adaptable σ_a^N , proporcionada por el esquema de colocación de nodos de la sección 4.2, produciendo las soluciones de estados-estacionarios y ciclos-límite $S = \Sigma_d(N)$ (3.16) del modelo por etapas confiable y (ii) agregando un número de etapas igual dos a partir de N^- ((3.18)) para asegurar la confiabilidad y *estabilidad estructural* del modelo. De acuerdo a la definición 3 (3.20), el modelo por etapas *eficiente-cualitativo* es aquel con el menor número de etapas límite para asegurar la *estabilidad estructural* del modelo de bajo orden, esto es:

$$N_\Sigma = \min(N_u^-, N_a^-), \quad \forall N \in \mathcal{N}_r = [N^-, N_{pde}) : S = \Sigma_d(N) \approx \Sigma_d(N_{pde}), \quad N^- \geq 1 \quad (4.11)$$

En este capítulo, se ha planteado el enunciado del problema que se aborda en esta tesis a partir de los enfoques y objetivos de modelado definidos en el capítulo anterior, también se han presentado las herramientas numéricas que serán utilizadas para evaluar los objetivos de modelado y que forman la base de desarrollo de la metodología de modelado que se propone y que es ejemplificado en el siguiente capítulo. Así, en el siguiente capítulo, la propuesta metodológica de modelado es aplicada al caso de estudio de acuerdo a los tres enfoques de modelado: (i) modelado local del estado estacionario de ignición con eficiencia cuantitativa, (ii) modelado global del conjunto de estados estacionarios con eficiencia-cualitativa y (iii) modelado de la operación de arranque con eficiencia-plena.

Capítulo 5

Aplicación al caso de estudio

En este capítulo se aplica la propuesta metodológica de modelado al caso ejemplo del reactor de gas de síntesis de pequeña escala de la Figura 2.1. El método de modelado tiene como fin determinar el tipo de malla uniforme o adaptable adecuado para atender los siguientes objetivos descriptivos: (i) modelado local eficiente-cuantitativo para describir la dinámica no-lineal local del estado-estacionario de ignición, el interés sobre esta descripción se debe a que la mayor parte del tiempo el reactor de gasificación opera en este estado, (ii) modelado global eficiente-cualitativo de estados estacionarios del reactor, es decir, modelos dinámicos eficientes de estructura estable (sin dinámicas espurias) y (iii) modelado eficiente-pleno para representar operaciones de encendido del reactor.

En la primera sección de este capítulo, se atiende el objetivo de modelado-eficiente local, se elige el modelo de referencia que es utilizado para determinar los errores de modelado debido a incertidumbre de parámetros y discretización-espacial. También se aplica el *algoritmo de diseño de malla adaptable* (sección 4.2) y se presenta una comparación numérica acerca de las capacidades descriptivas de los modelos de N -etapas de malla adaptable y uniforme.

Después, se hace una evaluación de los modelos de malla adaptable y uniforme para atender el objetivo de describir la dinámica global de manera confiable del reactor en estudio, para esto se utiliza el *esquema numérico de continuación* descrito en la sección 4.4.

Finalmente, se atiende el propósito de modelado para describir la operación de arranque del reactor, para esto el concepto de eficiencia-plena es utilizado para determinar el tipo de modelo de N -etapas de malla adaptable o uniforme que es capaz de lograr este objetivo con un menor número de etapas. Este propósito es abordado con base en el modelo de N -etapas *fuera de línea*, es decir, sin ayuda auxiliar de la medición de temperatura y, con el modelo de N -etapas *en línea* que garantiza una solución restringida del modelo acorde a la trayectoria de los datos de temperatura medidos en el reactor. De aquí en adelante usaremos la nomenclatura σ_d^N (ó π_d^N) para referirnos a una malla (ó solución) de N -etapas, ó nodos, adaptables [$d = a$] o uniformes [$d = u$]. Para el caso de modelos en *en línea* (3.9) se usara σ_d^{N*} ó π_d^{N*} .

5.1. Modelo eficiente-cuantitativo de dinámica local

En esta sección se aplican los cinco pasos del *algoritmo de diseño de malla adaptable* de la sección 4.2. De acuerdo a este algoritmo, el primer paso es calcular la solución de referencia del

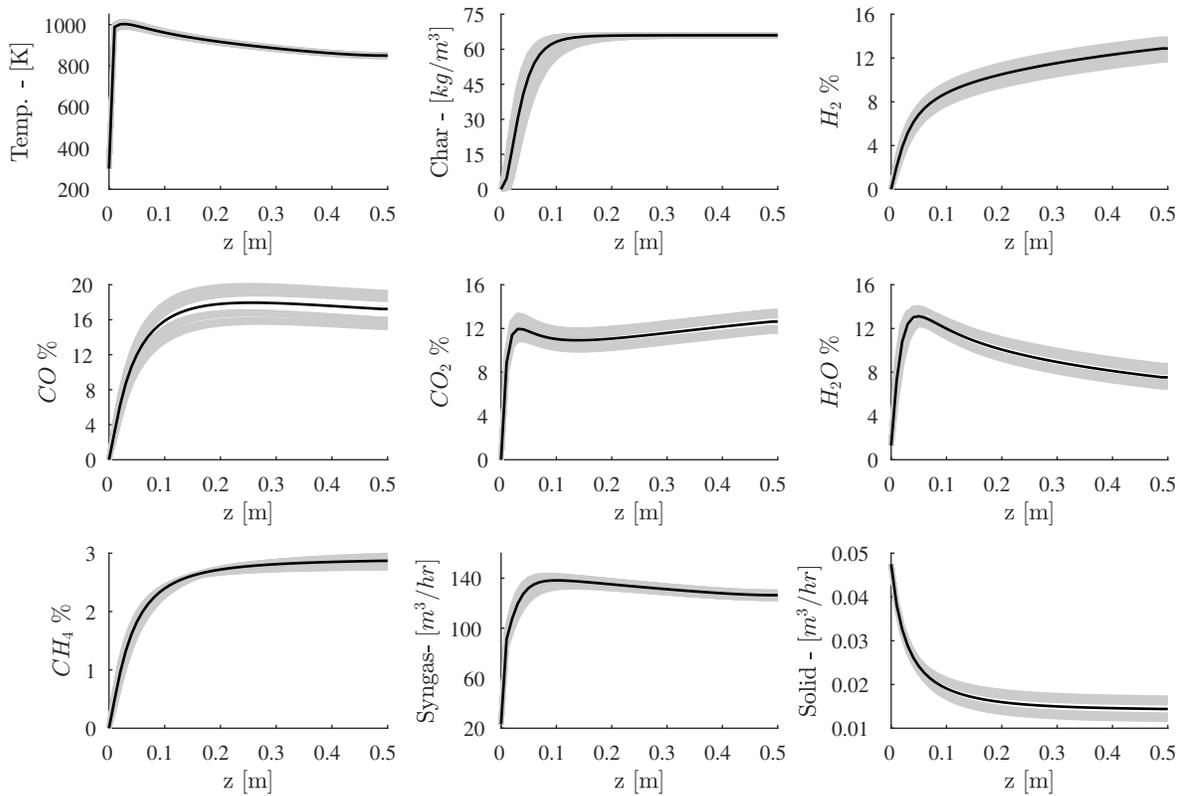


Figura 5.1: Perfiles de la solución en estado-estacionario de ignición. Las gráficas muestran las soluciones de referencia $\bar{\pi}_u^{50}$ (línea negra) y el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\bar{\pi}_u^{50}(\tilde{\mathbf{p}}_1)$ [líneas grises].

Específicamente, para el cálculo del error de modelado $\bar{\varepsilon}_\partial$ (4.6a), se han elegido tres casos para el vector de ponderación $\boldsymbol{\eta}$ (ver Tabla 5.2). Donde, $\boldsymbol{\eta}_1$ y $\boldsymbol{\eta}_2$ son vectores que contiene más estados de interés incluyendo Temperatura promedio, componentes de fase gas y sólida y velocidades axiales, mientras que, $\boldsymbol{\eta}_3$ es más simple y solo contiene Temperatura y flujo axial de gas de síntesis producido.

Los pasos segundo y tercero del *algoritmo de diseño de malla adaptable* indican la construcción del mapa de gradiente $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\gamma}$ (4.1), con base en la solución de referencia $\bar{\pi}_u^{50}$, y el diseño de la malla adaptable (4.2), respectivamente. En la Figura 5.2 se ejemplifica el segundo y tercer paso de este algoritmo con $N = 5$ ($N_p = N - 1 = 4$). El área total a_T está dividida en N_p secciones de igual área mediante el vector \mathbf{z}_b (4.2b), la búsqueda de los N_p -centros, que divide cada sección en dos áreas iguales, se hace por medio de vector \mathbf{z}_c (4.2c). La Figura muestra que: (i) el mapa $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\gamma}$ captura la zonas de alta variación sobre $\gamma = [0 - 0.1]$, de acuerdo a los perfiles en estado estacionario de la solución de referencia $\bar{\pi}_u^{50}$ de la Figura 5.1 y, (ii) la mayoría de los nodos de \mathbf{z}_c (o \mathbf{z}_b) aparecen localizados en la zona de alta variación de los perfiles $\gamma = [0 - 0.1]$ (o $\gamma = [0 - 0.2]$). Mediante esta gráfica es posible deducir la necesidad de generar un método para optimizar la distribución interna de los nodos de la malla, ya que, para este caso de $N_p = 4$, si se considera solo el vector de centros $\mathbf{z}_c = [0.0283 \quad 0.0535 \quad 0.1041 \quad 0.2911]$, que distribuye uniformemente el área bajo la curva, ó $\mathbf{z}_u = [0.2000 \quad 0.4000 \quad 0.6000 \quad 0.8000]$, que distribuye uniformemente el dominio espacial, se pueden subestimar las distribuciones. Por tal motivo, lo que se busca con el *algoritmo*

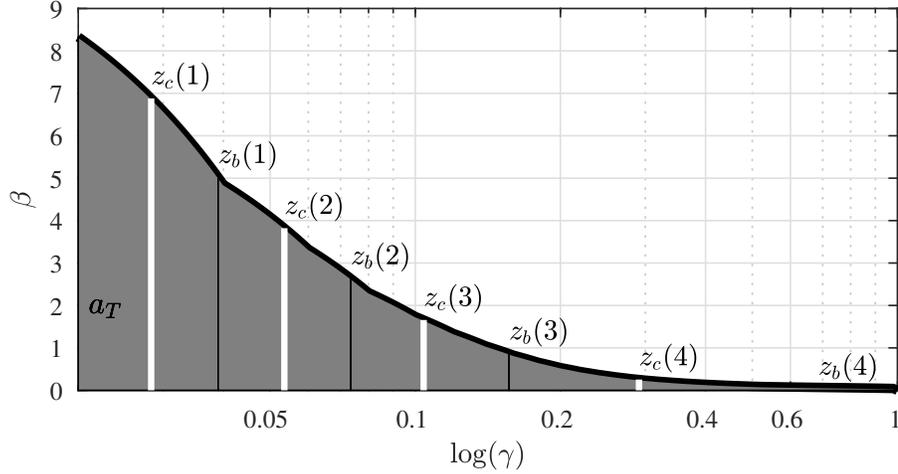


Figura 5.2: Aplicación del segundo y tercer paso del método de diseño de malla adaptable para $N = 5$, $N_p = N - 1 = 4$. La gráfica muestra el mapa $\beta - \gamma$, el área total bajo la curva a_T , su partición en N_p secciones iguales a través de z^b (4.2b) y la localización de los N_p -centros para cada sección a través de z^c (4.2c).

de diseño de malla adaptable es complementar la información a través de la ecuación de balance (4.2) y la ecuación de compensación de la condición de frontera tipo Neumann (4.3), dando como resultado la malla optimizada $\sigma_a^5 = \{5, [0 \ 0.0342 \ 0.0819 \ 0.2065 \ 0.5927 \ 0.9800 \ 1]\}$.

Ahora, una vez diseñada la malla adaptable σ_a^5 el cuarto paso indica calcular (i) la solución reducida en estado-estacionario $\bar{\pi}_a^5$ por medio del modelo de N -etapas (3.5) y (ii) el error de modelado debido a la discretización-espacial $\bar{\varepsilon}_\sigma$ (4.7) entre la solución reducida $\bar{\pi}_a^5$ y la solución de referencia $\bar{\pi}_u^{50}$. Finalmente el quinto paso señala la comparación de los errores $\bar{\varepsilon}_\sigma$ y $\bar{\varepsilon}_\delta$ a través del criterio (3.14) de la definición 2.

Para ejemplificar y comparar el desempeño de las soluciones reducidas de los modelos de etapas adaptables $\bar{\pi}_a^N$ y uniformes $\bar{\pi}_u^N$ hemos aplicado los pasos 1 al 4 con $N = [2-12]$, utilizando los cuatro diferentes vectores de ponderación $\boldsymbol{\eta}$ de la Tabla 5.2 y los dos subconjuntos $\check{\boldsymbol{p}}$ de errores de parámetros de la Tabla 5.1. La síntesis de estos resultados de simulación se muestra en la Figura 5.3 a través de la comparación de los errores de modelado estado-estacionario $\bar{\varepsilon}_\sigma$ (4.8a), de los modelos de malla adaptable $\bar{\pi}_a^N$ y uniforme $\bar{\pi}_u^N$, y $\bar{\varepsilon}_\delta$ (4.6a), donde, de acuerdo a la definición 2 (3.14), se puede concluir lo siguiente : para el caso de $\check{\boldsymbol{p}}_1$ (ó $\check{\boldsymbol{p}}_2$) y los vectores de ponderación $\boldsymbol{\eta}$, el modelo de malla adaptable $\sigma_a^{N_\varepsilon}$ es *eficiente-cuantitativo* en estado-estacionario con $N_\varepsilon = 5$ (ó $N_\varepsilon = 8$). En el caso de la malla uniforme σ_u^N , para $\check{\boldsymbol{p}}_1$ (o $\check{\boldsymbol{p}}_2$) se requiere un número de etapas $N = 8$ (ó $N_\varepsilon = 21$). Los resultados cuantitativos demuestran que al usar la malla adaptable σ_a^N , el error de discretización $\bar{\varepsilon}_N$ se desvanece más rápido conforme incrementa N y existe una reducción en el número de ecuaciones del modelo ≥ 9 EDOs (3 etapas).

Por otro lado, una verificación cualitativa acerca de la descripción de los perfiles estacionarios del estado de ignición es presentada en la Figura 5.4 (ó 5.5) por medio de una comparación visual de la solución de referencia $\bar{\pi}_u^{50}$, el conjunto de soluciones con perturbación de parámetros $\Delta \bar{\pi}_u^{50}(\check{\boldsymbol{p}}_1)$ [ó $\Delta \bar{\pi}_u^{50}(\check{\boldsymbol{p}}_2)$] y las soluciones reducidas de malla adaptable $\bar{\pi}_a^5$ (ó $\bar{\pi}_a^9$) y uniforme $\bar{\pi}_u^8$ (ó

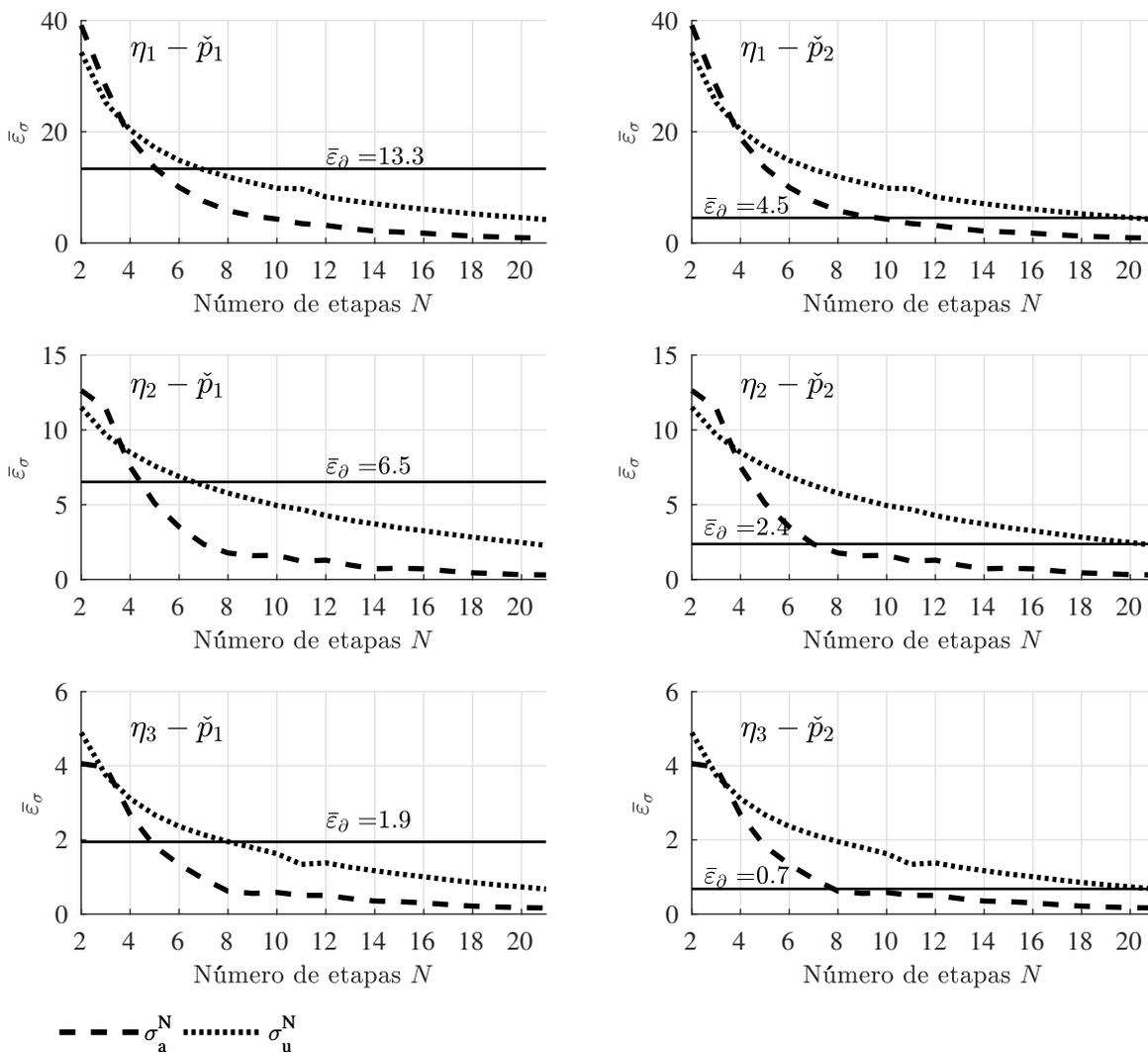


Figura 5.3: Comparación de errores de aproximación $\bar{\epsilon}_N$ para modelos de malla adaptable σ_a (línea punteada) y uniforme σ_u (línea discontinua) utilizando los diferentes vectores de ponderación η de la Tabla 5.2 y el vector.

$\bar{\pi}_a^{16}$). Las gráficas muestran los perfiles de Temperatura, densidad de Carbonizado, componentes de la fase gas H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4 , así como, el flujo axial de la fase gas y sólida. Desde una perspectiva cualitativa, y también cuantitativa (Figura 5.3), es posible notar que la solución reducida $\bar{\pi}_a^5$ tiene un buen desempeño y es comparable a la solución $\bar{\pi}_u^8$, de mayor número de etapas, mientras que, $\bar{\pi}_a^9$ tiene un seguimiento muy cercano a la solución de referencia $\bar{\pi}_u^{50}$, principalmente, en la zona de alta variación de los perfiles $z = [0 \ 0.1]$.

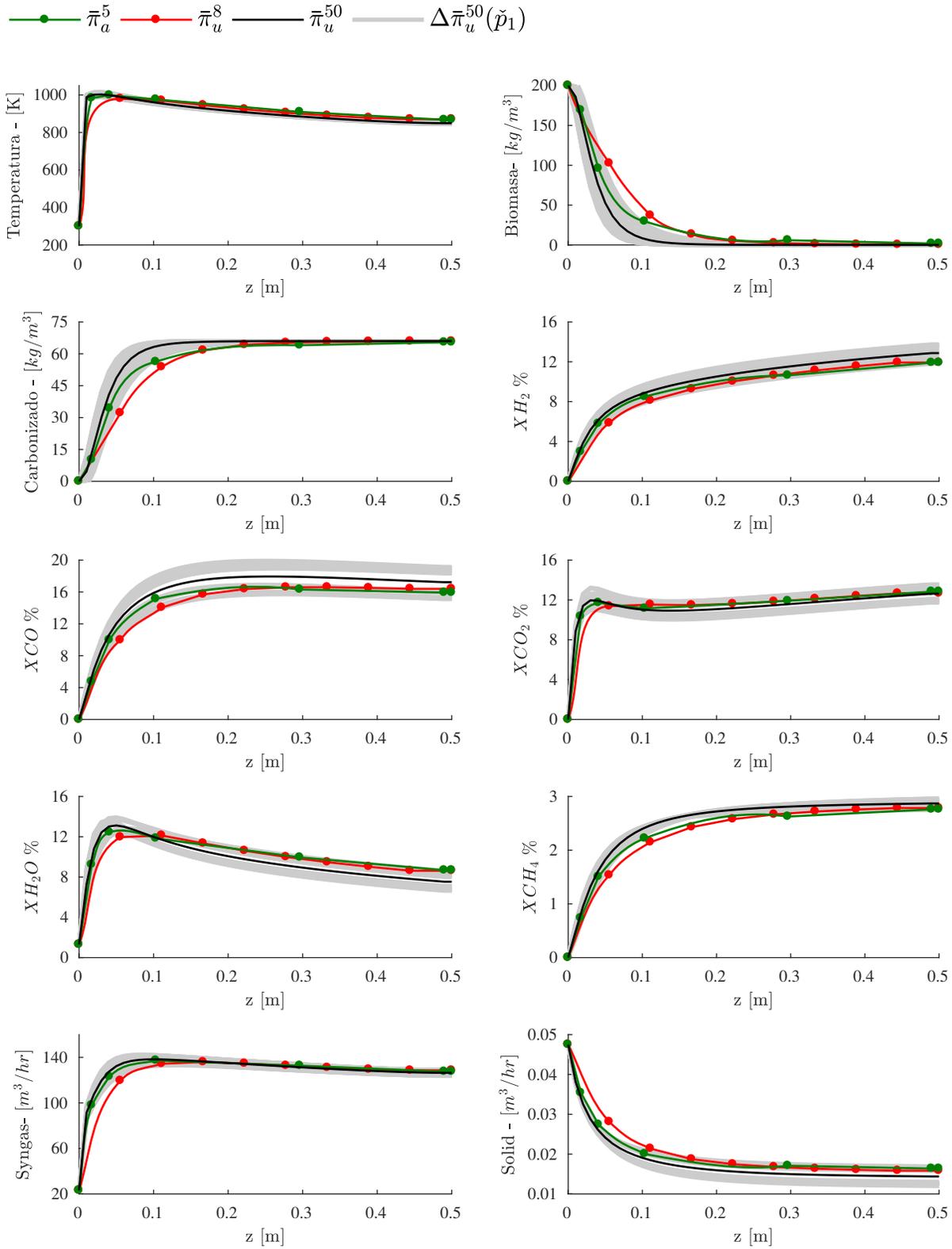


Figura 5.4: Comparación de perfiles estacionarios de ignición de los estados de Temperatura, densidad aparente de biomasa, carbonizado, componentes de fase gas H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4 y flujos axiales de ambas fases. Las gráficas muestran las solución de referencia π_u^{50} , el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\tilde{p}_1)$ y las soluciones reducidas de malla adaptable π_a^5 y uniforme π_a^8 .

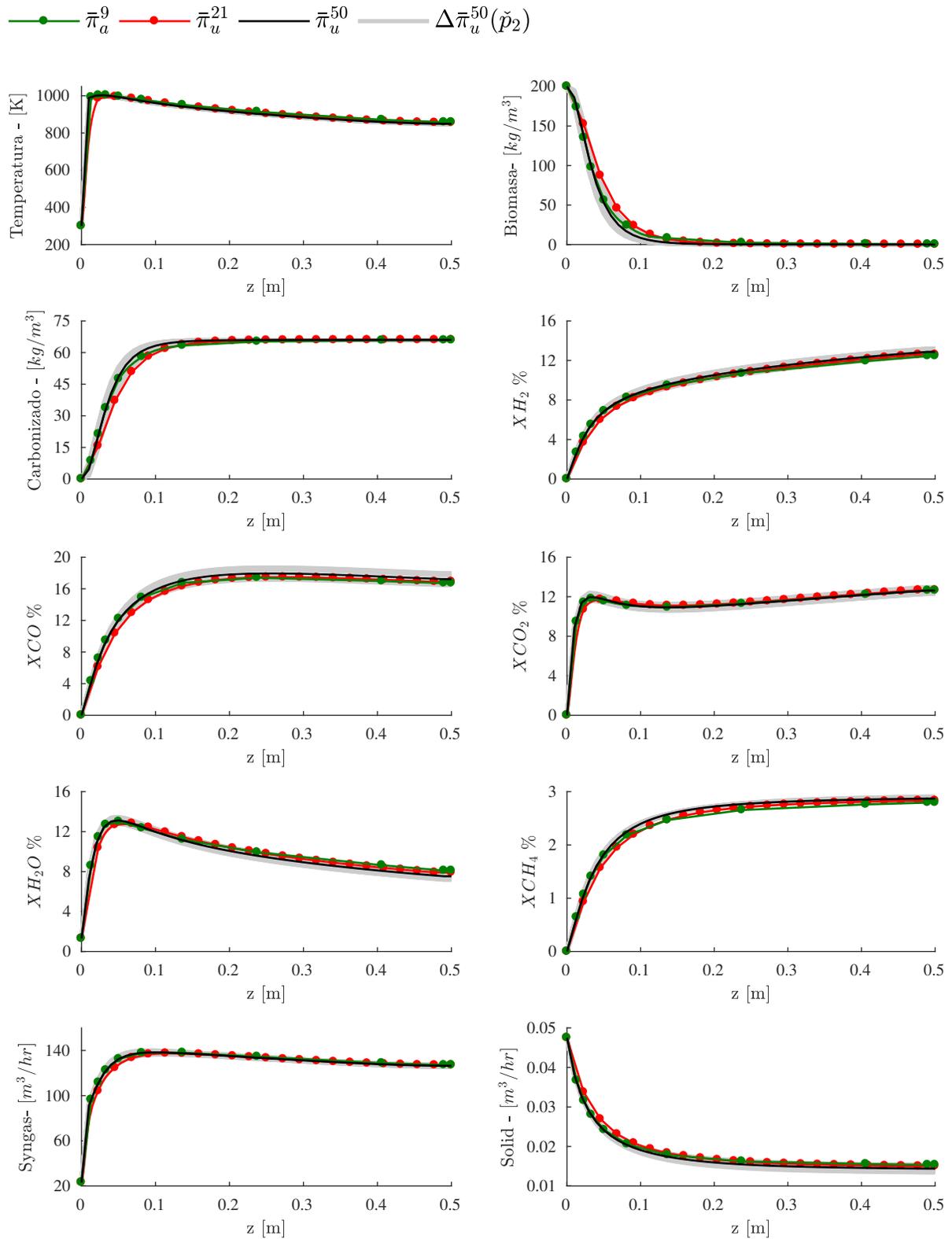


Figura 5.5: Comparación de perfiles estacionarios de ignición de los estados de Temperatura, densidad aparente de biomasa, carbonizado, componentes de fase gas H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4 y flujos axiales de ambas fases. Las gráficas muestran las solución de referencia π_u^{50} , el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_2)$ y las soluciones reducidas de malla adaptable π_a^9 y uniforme π_a^{16} .

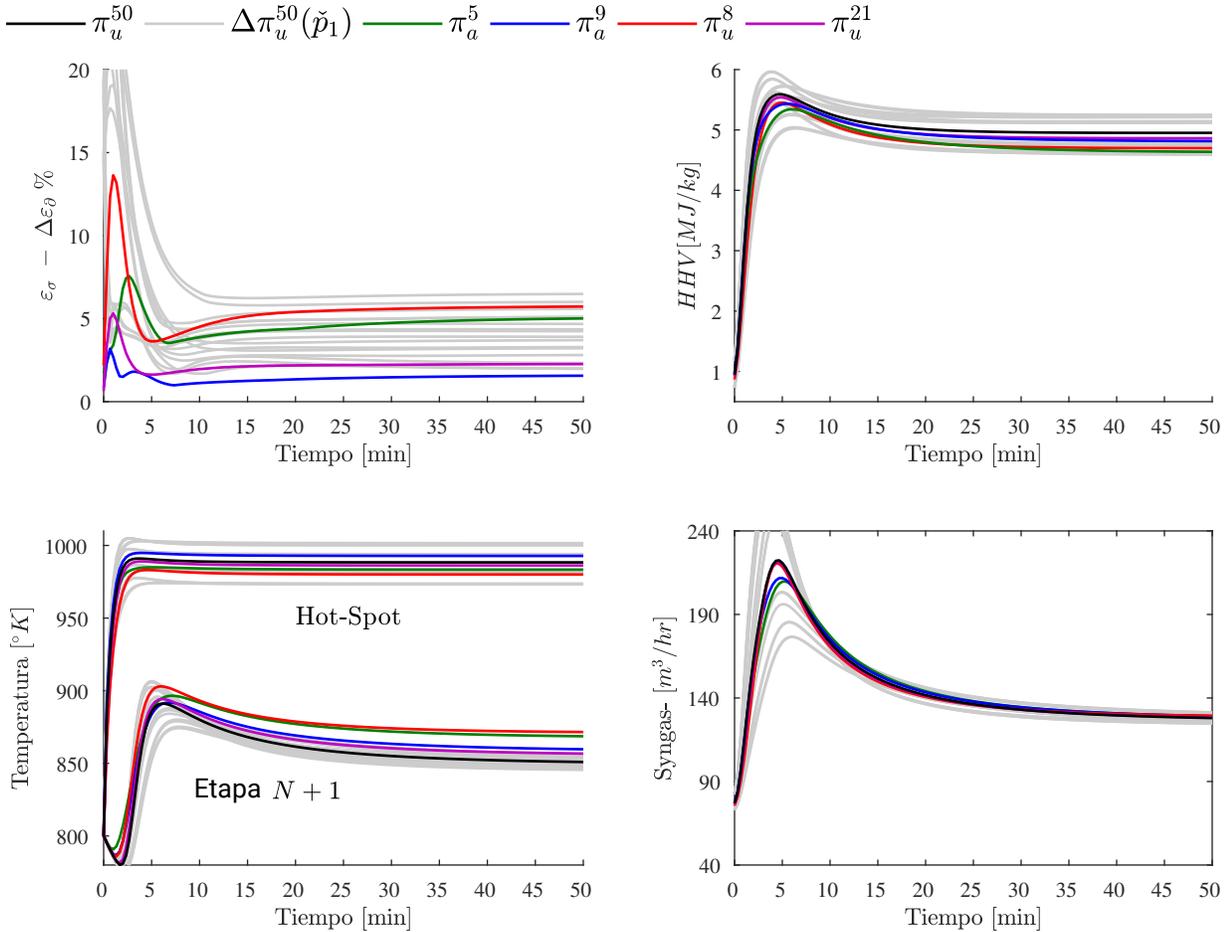


Figura 5.6: Comparación de trayectorias en estado transitorio para el error de modelado ε_σ y el error de aproximación ε_ε , el hot-spot y la temperatura y flujo de gas de síntesis a la salida del reactor. La comparación incluye la solución de referencia π_u^{50} , las soluciones reducidas de malla adaptable $\pi_a^{5,9}$ y uniforme $\pi_u^{8,16}$ σ_a^N y el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_1)$.

Finalmente, los resultados locales de estado transitorio son desplegados en la Figura 5.6. Se considera una condición inicial con $T = 800$ (K), $\rho, B = 100$ (kg/m^3), $\rho C = 40$ (kg/m^3). Primero se comparan los errores ε_σ y ε_N para la solución completa (todas las etapas) y luego para la etapa $N + 1$. Luego, la temperatura del punto caliente (Hot-spot) y el poder calórico y el flujo másico del gas de síntesis producido. Particularmente, es posible observar un comportamiento similar entre las trayectorias de los modelos de malla adaptable σ_a^5 y uniforme σ_u^8 con la ventaja de que la malla adaptable presenta un menor sobre-paso dentro del conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_1)$. Estos resultados en estado estacionario y transitorio demuestran la ventaja, conveniencia y factibilidad para reducir el orden del modelo de acuerdo al propósito de modelado eficiente-cuantitativo local basados en el diseño de una malla $\sigma = \{N, z\}$, adaptada a las necesidades descriptivas de estado-estacionario. Específicamente, la dinámica no-lineal del estado estacionario de ignición de interés es apropiadamente descrito con 15 EDOs (σ_a^5), alrededor de 40% menos número de ecuaciones que con malla uniforme (σ_u^8), y 90% menos si es comparada con la solución de referencia π_u^{50} (150 EDOs), sin mencionar el número de nodos de 250-700 (3000-7000 EDOs) utilizados en resolvedores de EDPs.

En esta sección se ha abordado el objetivo de modelado de descripción numérica eficiente de la dinámica local alrededor del estado-estacionario de ignición del reactor de gas de síntesis, útil para la descripción de operación continua así como tareas fundamentales de control local. Con base en la definición de *eficiencia-cuantitativa* (3.13, 3.14), se determinó que los modelos de malla adaptable ofrecen una reducción de al menos 9 EDOs con respecto a su contraparte de modelos de malla uniforme. Se ha implementado y ejemplificado el *algoritmo de diseño de malla adaptable* considerando un modelo de referencia de 150 EDOs. En la siguiente sección se abordará el objetivo de modelado para la representación eficiente de estados-estacionarios, es decir, modelos reducidos sin comportamientos de dinámica espuria, con base en la definición de *eficiencia-cualitativa* (3.20).

5.2. Modelo eficiente-cualitativo

En esta sección se aborda el objetivo de modelado para representar la dinámica global de manera confiable y eficiente para garantizar la estabilidad estructural del modelo para no generar dinámicas espurias, este enfoque de modelado *eficiente-cualitativo* (3.20), es utilizado principalmente para los problemas de determinación de la multiplicidad de estados-estacionarios.

Recordemos que en Badillo-Hernandez *et al.* (2018), la propiedad de bi-estabilidad global ha sido evaluada en un caso de estudio de reactores de gas de síntesis. En este trabajo previo, únicamente se han evaluado modelos de malla uniforme concluyendo que a partir de un modelo ≥ 10 etapas, 30 EDOs, la *estabilidad-estructural* prevalece, es decir, no existen dinámicas espurias en el modelo. Particularmente en este trabajo, la novedad es evaluar los modelos con tipo de malla adaptable σ_a^N y uniforme σ_u^N para determinar en cual de los casos es posible obtener modelos de menor número de etapas con estructura-estable.

Cabe recordar que de acuerdo a los estudios recientes de simulación (Ranzi *et al.*, 2014; Badillo-Hernandez *et al.*, 2018), este trabajo considera como punto de partida que el reactor de estudio exhibe un comportamiento bi-estable: (i) un estado estacionario estable de ignición de interés para la operación continua, (ii) un estado estacionario de extinción y (iii) un estado inestable tipo punto-silla en medio de los dos estables (Figura 3.1), esto es:

$$S_\delta^{EE} = \{\bar{\mathcal{X}}_1, \bar{\mathcal{X}}_2, \bar{\mathcal{X}}_3\} = \Sigma_\delta^{EE}(\mathbf{p}, \mathcal{N}), \quad \mathcal{N} = [N^+, N_{pde}], \quad N^+ = L/d_p$$

Para ejemplificar este objetivo de modelado, hemos retomado los modelos de malla adaptable σ_a^N y uniforme σ_u^N para aplicar el *esquema numérico de σ -continuación* de la sección 4.4, con el fin de determinar la dependencia del conjunto límite $S_\delta^{EE} = \Sigma_\delta^{EE}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma})$ de estados-estacionarios sobre el parámetro y grado de libertad $\boldsymbol{\sigma} = \{N, z_d\}$, con distribución espacial \mathbf{z} adaptable $d = a$ ó uniforme $d = u$.

La Figura 5.7 muestra las curvas de *estabilidad-estructural* donde es posible notar que la descripción cualitativa de la multiplicidad de estados estacionarios es mejor lograda con modelos basados en mallas uniformes. De acuerdo a la definición 3 (3.20), el modelo de malla uniforme $\sigma_u^{N_\Sigma}$ con $N_\Sigma \geq 8$ es *eficiente-cualitativo*. En la figura, para el caso de la malla uniforme para $N^* \leq 6$, conocido como el número de etapas de la bifurcación de Hopf, prevalece una estructura frágil del modelo y, $N^- = 8$ es el límite inferior de etapas que garantiza que se eviten comportamientos

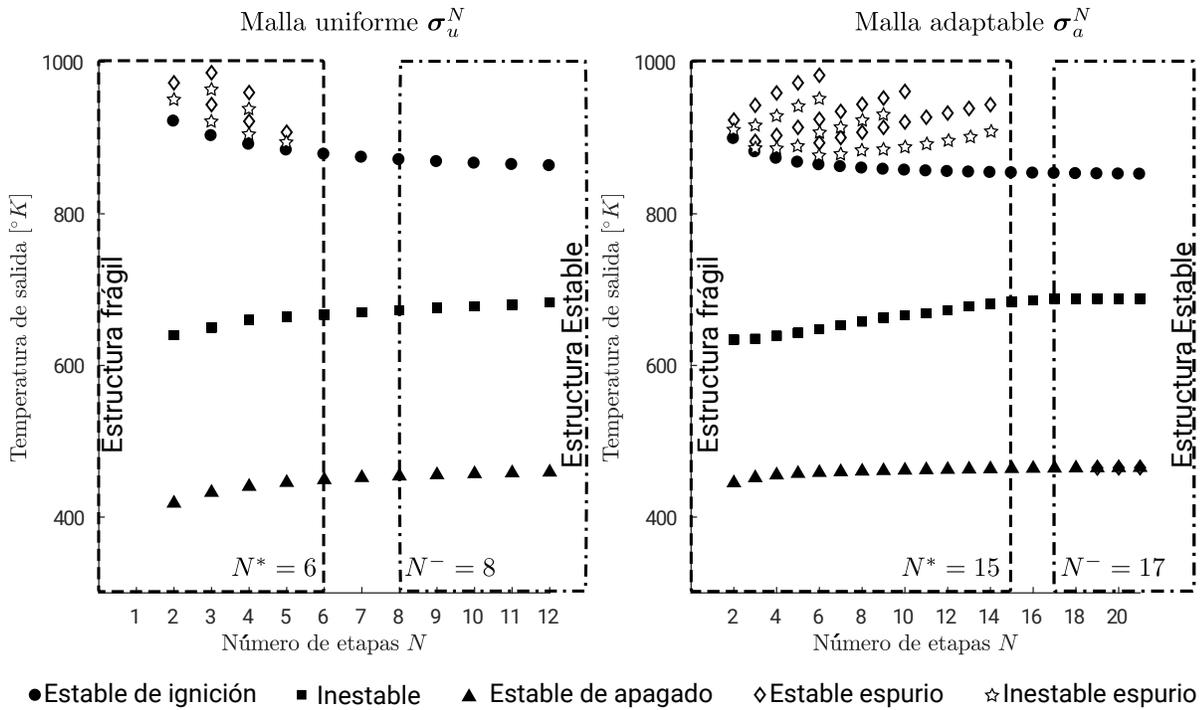


Figura 5.7: Curvas de *estabilidad-estructural* de los modelos de malla adaptable σ_a^N y uniforme σ_u^N .

espurios (Lafon y Yee, 1996a,b) [3.18] donde se garantiza la estructura estable del modelo. Para el caso de malla adaptable, la zona de estructura frágil del modelo es para $N^* \leq 15$ y la estabilidad estructural del modelo se garantiza para $N^- \geq 17$ (3.18). Una demostración visual de la aparición de estos estados-estacionarios espurios se muestra en la Figura 5.8. En esta imagen se muestran los perfiles de Temperatura del conjunto límite (p, σ) para σ_a^N , con $N = 3, 4, 5, 8$, y σ_u^N con $N = 4, 8, 12, 17$. Estos resultados sugieren que el hecho de diseñar un modelo por etapas de malla adaptable σ_a^N , para uso local exclusivo del estado-estacionario de ignición de interés, no garantiza un apropiado desempeño en regímenes transitorios.

En la siguiente sección se abordará el objetivo de modelar la operación de arranque-encendido del reactor de gas de síntesis con base el enfoque de modelado de *eficiencia-plena*. Sabiendo que la multiplicidad y dimensión del modelo está en juego, naturalmente surge la pregunta sobre cómo la búsqueda de baja dimensionalidad puede beneficiarse del empleo en línea del modelo por etapas junto con un sensor de temperatura. En la siguiente sección, los datos del sensor de temperatura se emplean junto con los modelos de N -etapas. El objetivo es reducir aún más el orden del modelo y aumentar la confiabilidad del modelo para obtener modelos de bajo orden apropiados para el diseño avanzado de estimadores y controladores.

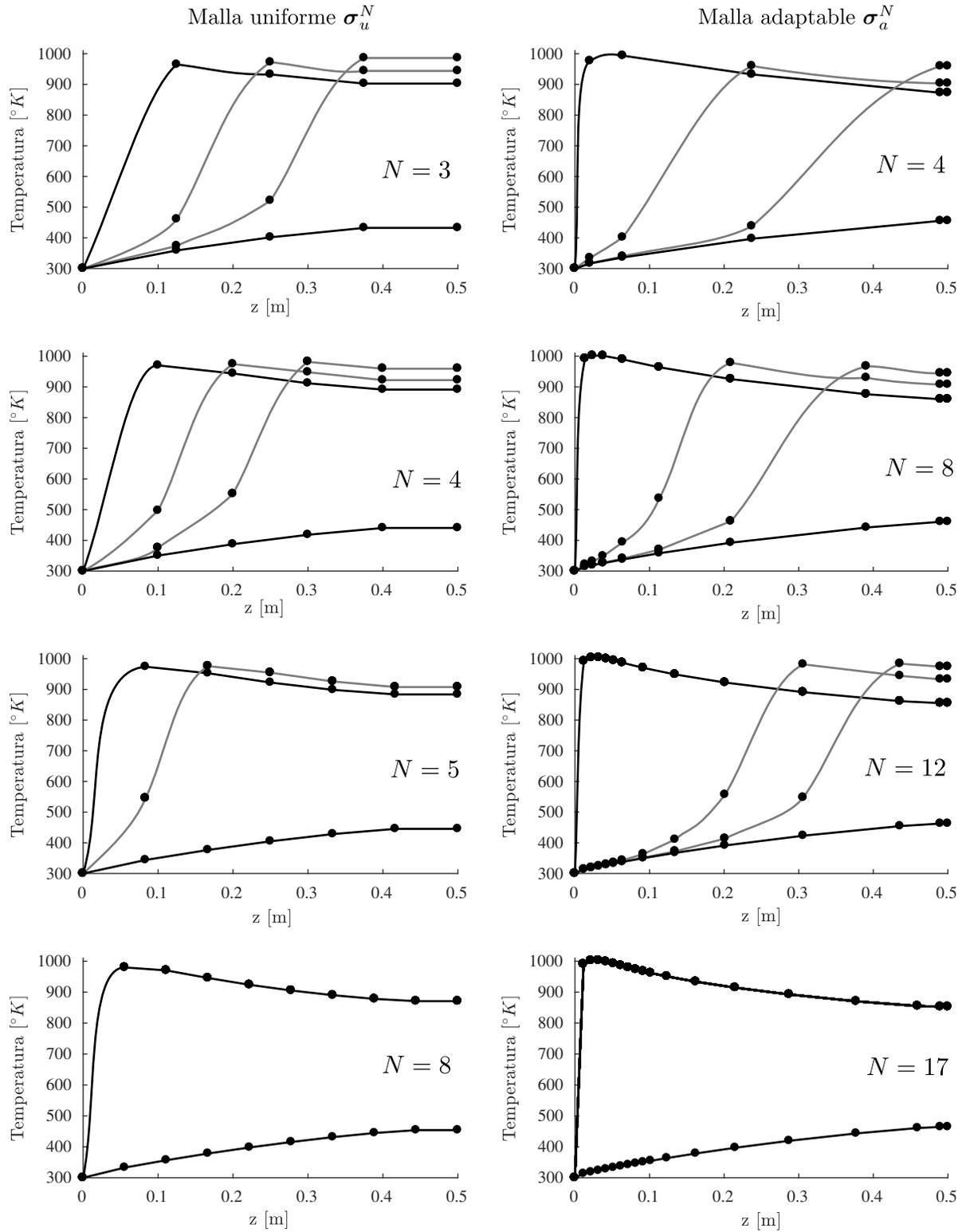


Figura 5.8: Perfiles estacionarios reales (líneas negras) y espurios (líneas grises) de Temperatura para los modelos de malla adaptable σ_a^N y uniforme σ_u^N .

5.3. Modelo eficiente-pleno

En esta sección se aborda el enfoque de modelado de *eficiencia-plena*. De acuerdo con la definición 3.21, un modelo es *eficiente-pleno* si es (i) *eficiente-cuantitativo* y *eficiente-cualitativo*, es decir, este atributo denota aquellos modelos de mínimo número de etapas $N_{\Sigma,\varepsilon}$ que cumplen con (i) una solución global “confiable” de conjuntos límite S_σ y (ii) precisión numérica “comparable” a las soluciones de alto orden con incertidumbre paramétrica $\tilde{\mathbf{p}}$. Con el propósito de evaluar la estabilidad-estructural del modelo, así como, la precisión numérica del mismo, hemos puesto como objetivo de modelado la descripción de la operación de arranque del reactor de gas de síntesis. Para esto, se considera una condición inicial donde el reactor se encuentra encendido solo en una zona, existe únicamente biomasa en la parte superior y carbón en la parte inferior tal y como se describe en la Tabla 5.3. La determinación del modelo de $N_{\Sigma,\varepsilon}$ -etapas (3.21) se hace valorando las propiedades de *eficiencia cuantitativa y cualitativa* sobre los modelos de malla adaptable σ_a^N y uniforme σ_u^N y para los casos de modelos por etapas sin medición de temperatura (3.5), y los modelos por etapas en línea (3.9). De manera similar, se considera la malla de alto orden σ_u^{50} , para obtener la solución de referencia π_u^{50} , con parámetros nominales \mathbf{p} , y para el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}$, con los subconjuntos de errores de parámetros $\tilde{\mathbf{p}}_1$ y $\tilde{\mathbf{p}}_2$ de la Tabla 5.1. También se retoman los vectores de ponderación $\boldsymbol{\eta}$ (Tabla 5.2) para el cálculo de los errores de modelado ε_σ (4.7) y ε_∂ (4.6a).

Tabla 5.3: Condición inicial considerada para operación de encendido.

Estado / z [m]	0 – 0.05	0.06– 0.10	0.11– 0.15	0.16– 0.20	0.21– 0.25	0.26– 0.30	0.31– 0.35	0.36– 0.40	0.46– 0.50
Temperatura [$^\circ K$]	300	1000	1000	1000	1000	300	300	300	300
Biomasa [kg/m^3]	200	200	200	200	200	0	0	0	0
Carbonizado [kg/m^3]	0	0	0	0	0	60	60	60	60

Modelos de N -etapas sin medición de temperatura

Tomando como base los resultados de las secciones 5.1 y 5.2 previas, y la definición de *eficiencia-plena* descrita en la sección 3.2.3, se puede concluir lo siguiente:

1. Para el caso del subconjunto de errores de parámetros $\tilde{\mathbf{p}}_1$ (Tabla 5.1) y conforme a los resultados mostrados en las Figuras 5.3 y 5.7, el modelo de $N_{\Sigma,\varepsilon}$ -etapas de malla uniforme σ_u^8 , $N_{\Sigma,\varepsilon} = 8$, es *eficiente-pleno*.
2. Por otro lado, si se considera el caso del subconjunto de errores de parámetros $\tilde{\mathbf{p}}_2$ (Tabla 5.1) y las curvas desplegadas en las Figuras 5.3 y 5.7, el modelo de $N_{\Sigma,\varepsilon}$ -etapas de malla adaptable σ_a^{17} , $N_{\Sigma,\varepsilon} = 17$, es *eficiente-pleno*.

Las conclusiones anteriores demuestran la importancia de la precisión requerida (ε_σ [4.7]) de la solución reducida, sobre la magnitud del error de modelado debido a la incertidumbre de parámetros ε_∂ (4.6a), ya que por un lado, cuando el error de modelado es relativamente grande, un modelo de malla uniforme simple σ_u^N puede cumplir con el enfoque de modelado de eficiencia-plena; sin embargo, cuando la exigencia de precisión numérica es mayor, un modelo de malla

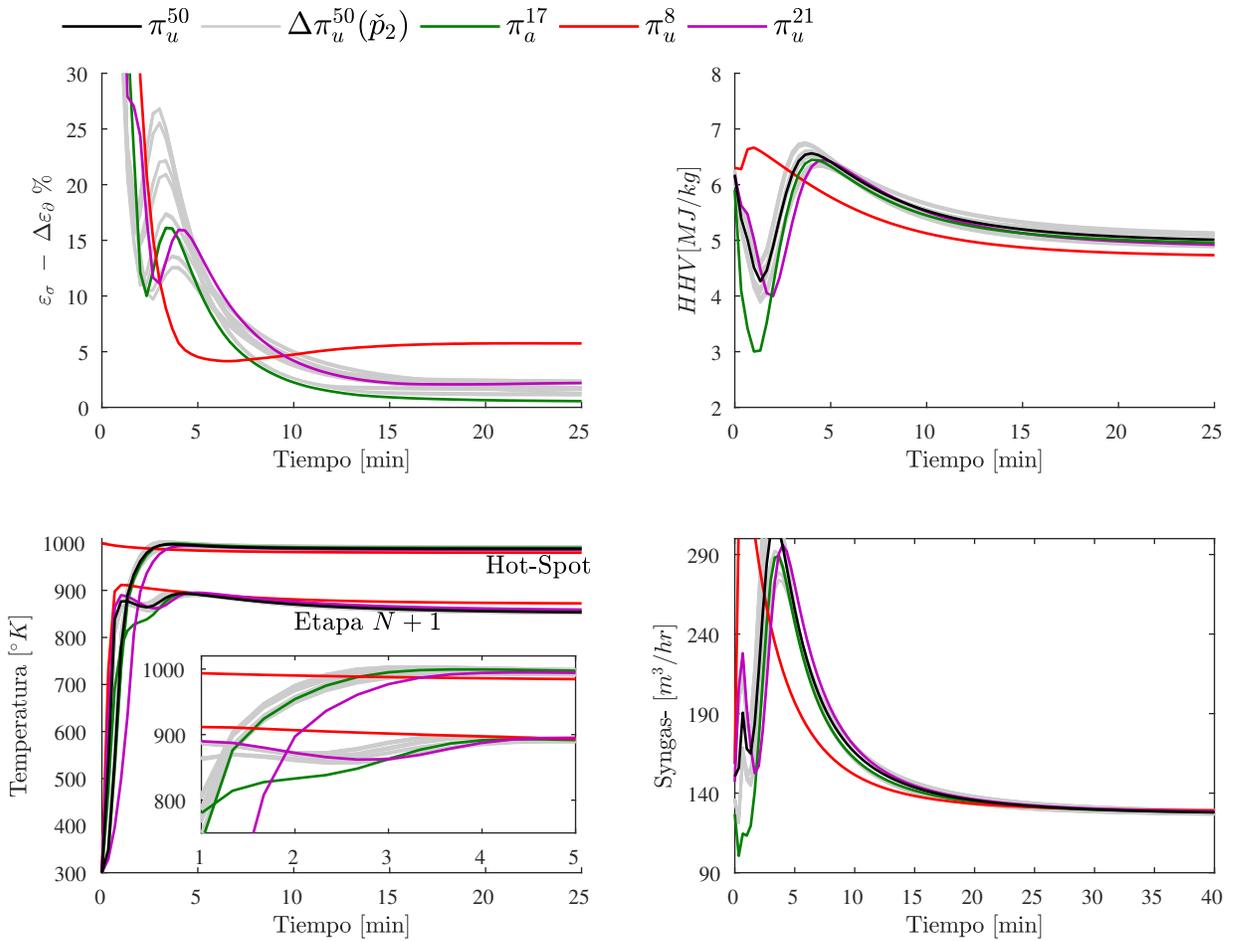


Figura 5.9: Comparación de trayectorias en estado transitorio, de la operación de arranque, para el error de modelado ε_δ y el error de aproximación ε_σ , el hot-spot y la temperatura y flujo de gas de síntesis a la salida del reactor. La comparación incluye la solución de referencia π_u^{50} , las solución reducida de malla adaptable π_a^{17} y uniforme $\pi_u^{8,21}$, y el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\tilde{p}_2)$.

adaptable especializada σ_a^N es necesario. En la Figura 5.9 se muestran las trayectorias en estado transitorio de la operación de arranque para los errores de modelado ε_σ y ε_δ , así como, de los estados y salidas de interés para el caso subconjunto de errores de parámetros \tilde{p}_2 (Tabla 5.1). En este caso, es posible notar que, las trayectorias del modelo reducido de malla uniforme π_u^8 permanecen fuera del conjunto de soluciones perturbada de alto orden $\Delta\pi_u^{50}(\tilde{p}_2)$.

Modelos de N -etapas en línea

Cabe recordar que el modelado en línea se caracteriza por el reemplazo de la k -ésima ecuación de temperatura $\tau_k(t)$ por el valor interpolado correspondiente $\tau_s(t)$ (3.9e) dado por la ecuación algebraica que contiene una medición de temperatura $y(t)$ (2.7a) debidamente colocada a lo largo del reactor (2.8a). Una vez que se lleva a cabo esta sustitución se produce una representación cuyo comportamiento dinámico es gobernado por los datos de la medición de temperatura y los cuales son utilizados como herramienta de modelado (Badillo-Hernandez *et al.*, 2017; Canales-Meza *et al.*, 2017). Reconociendo que nuestro principal propósito es la eficiencia de modelado del reactor

de gas de síntesis, en el sentido del menor número de ecuaciones posibles para describir el proceso, el principal beneficio de esta variación de modelado es que se *asegura la estabilidad-estructural del modelo* por medio de la restricción numérica de las trayectorias del modelo reducido que están sujetas al comportamiento “real” de temperatura del reactor, es decir, elimina la dinámica espuria originada por sub-representación (“bajo” número de etapas) del proceso (Lafon y Yee, 1996a,b).

Para llevar a cabo la aplicación y evaluación de los modelos en línea hemos seguido el siguiente procedimiento de cuatro pasos: (i) retomar el conjunto de modelos de malla adaptable σ_a^N y uniforme σ_u^N obtenidos en la sección 5.1, (ii) reemplazar la k -ésima ecuación de balance de calor por la nueva ecuación de calor $\tau_s(t)$ (3.9e), que relaciona la medición de temperatura $y(t)$ (2.7a), y calcular la solución restringida π_σ^* (3.9) del modelo de N -etapas en línea, (iii) calcular los errores de modelado debido a la discretización-espacial ε_σ^* (4.7) para cada modelo y (iv) finalmente, a través de la aplicación de la definición 2 (3.14), establecida en la sección 3.2.1, elegir el modelo *eficiente-pleno*.

Las simulaciones son hechas considerando la condición inicial descrita en la Tabla 5.3 para el caso modelo de referencia, mientras que, para el caso del modelo en línea se considera que el reactor se encuentra a temperatura constante $T = 300 [^\circ K]$ y lleno de biomasa $B = 200 [kg/m^3]$ (sin carbonizado $\mathcal{C} = 0 [kg/m^3]$). Considerando el estado-estacionario de ignición, el perfil de temperatura obtenido de la solución de referencia $\bar{\pi}_\rho$ y aplicando el criterio de colocación de sensor (2.7a), el sensor de temperatura está localizado en $Z_y = 0.01[m]$, por lo que $y(t) = \tau(0.1, t)$ es la señal de interés que se incluye en la ecuación $\tau_s(t)$ (3.9e).

Parte de los resultados de simulación de estos modelos en línea son mostrados en la Figura 5.10 a través de la comparación de los errores de modelado en estado-estacionario $\bar{\varepsilon}_\sigma^*$ (4.8a), de los modelos de malla adaptable $\bar{\pi}_a^{N*}$ y uniforme $\bar{\pi}_u^{N*}$, y $\bar{\varepsilon}_\rho$ (4.6a), utilizando los vectores de ponderación η de la Tabla 5.2 y los dos subconjuntos \check{p} de errores de parámetros de la Tabla 5.1. De acuerdo a la definición 2 (3.14), se puede concluir lo siguiente: para el caso de \check{p}_1 (ó \check{p}_2) y los vectores de ponderación η , el modelo de malla adaptable $\sigma_a^{N_\varepsilon}$ es *eficiente-cuantitativo* en estado-estacionario con $N_\varepsilon = 3 - 5$ (ó $N_\varepsilon = 6 - 8$). En el caso de la malla uniforme σ_u^N , para \check{p}_1 (o \check{p}_2) se requiere un número de etapas $N = 8$ (ó $N > 12$). Los resultados cuantitativos demuestran que al usar la malla adaptable σ_a^N , el error de discretización $\bar{\varepsilon}_N$ se desvanece mar rápido conforme incrementa N y existe una reducción en el número de ecuaciones del modelo ≥ 9 EDOs (3 etapas).

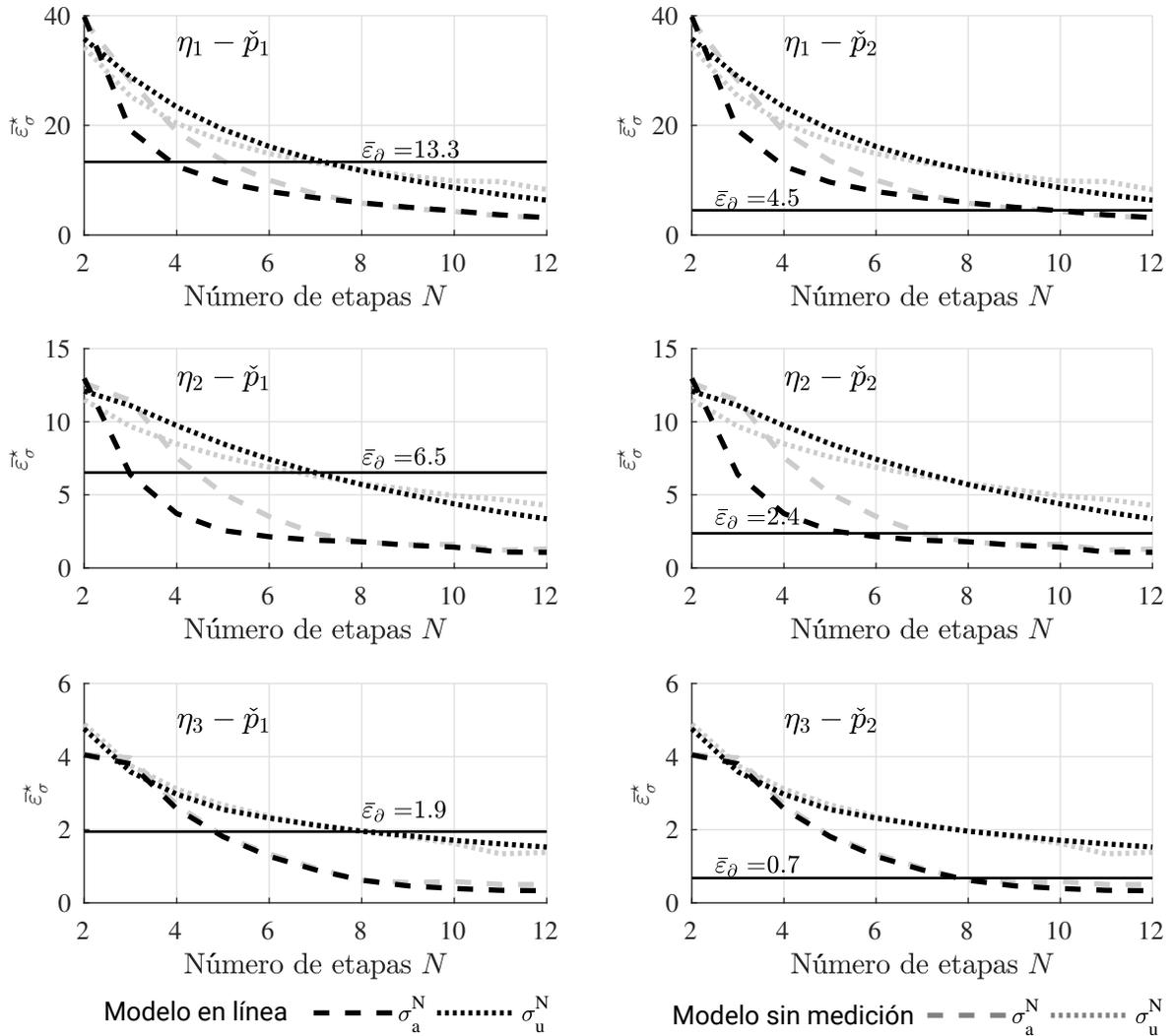


Figura 5.10: Comparación de errores de modelado $\bar{\epsilon}_\sigma$ (línea gris) y $\bar{\epsilon}_\sigma^*$ (línea negra) para modelos de malla adaptable σ_a (línea punteada) y uniforme σ_u (línea discontinua) para los vectores de ponderación η (Tabla 5.2) y los subconjuntos \check{p} de errores de parámetros (Tabla 5.1).

Por otro lado, en la Figura 5.10 también se comparan los errores de modelado en estado-estacionario $\bar{\epsilon}_N$ de los modelos sin medición (líneas grises) y los modelos en línea (líneas negras). Las gráficas muestran que para el caso de las soluciones de los modelos en línea de malla adaptable π_a^{N*} se logran mejoras cuantitativas respecto a las soluciones de los modelos sin medición, mientras que, dichas mejoras no son frecuentes para el caso de los soluciones de los modelos de malla uniforme π_u^{N*} . De tal manera, se puede concluir que las mejoras cuantitativas son logradas a través del conocimiento de la señal de temperatura $y(t)$ y esto refleja una reducción en la orden del modelo de al menos > 3 EDOs en comparación con la versión del modelo sin medición.

Las Figuras 5.11 y 5.12 afirman la eliminación de los estados-estacionarios espurios. Ya que, dada la naturaleza de la condición inicial (Tabla 5.3), cercana al estado-estacionario de apagado (Figura 3.1), las trayectorias de la solución del modelo en línea π^* se manifiestan de manera unívoca por la medición de temperatura, de modo que la propiedad de multiplicidad espuria del

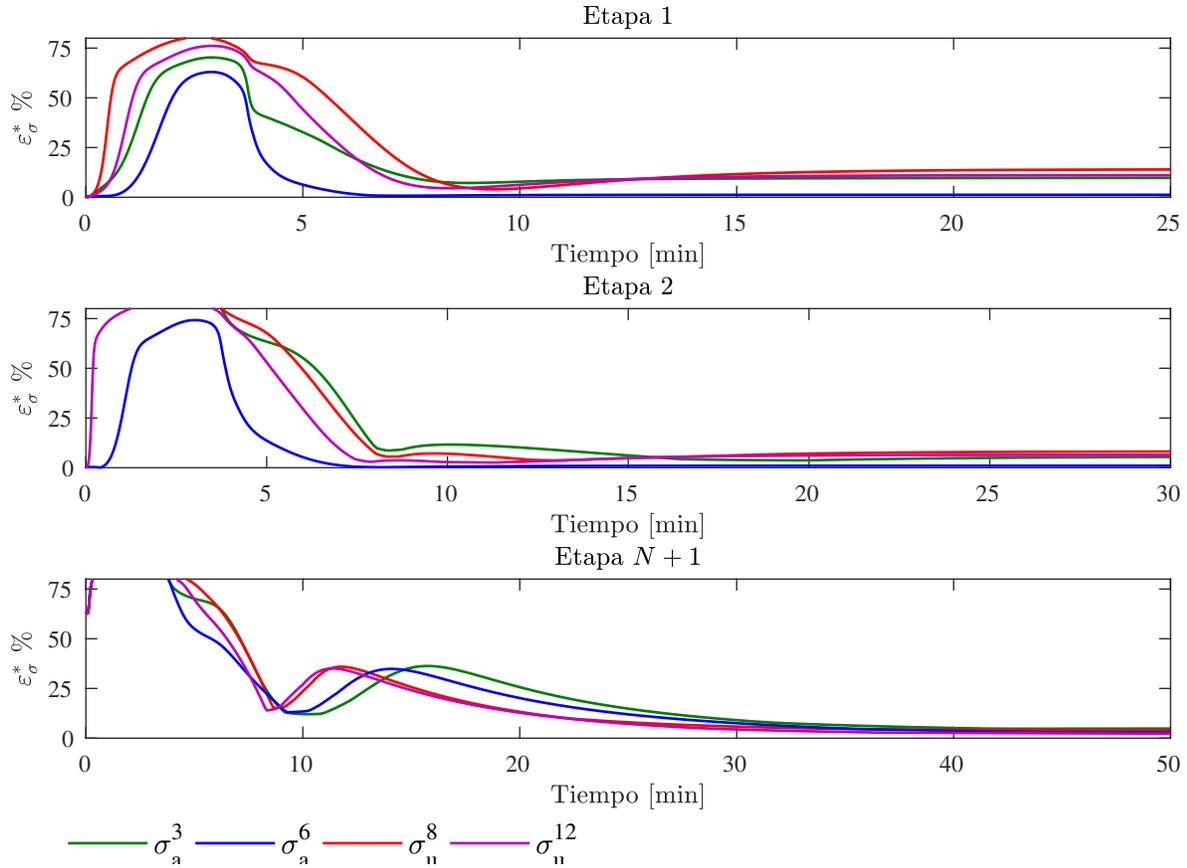


Figura 5.11: Comparación del error de modelado ε_σ^* para las soluciones de los modelos en línea π_a^{4*} , π_a^{8*} y π_u^{8*} , π_u^{12*} .

modelo sin medición (ver Figura 5.8) desaparece. Específicamente, la Figura 5.11 ilustra el comportamiento transitorio del error de modelado ε_σ^* en las etapas $k = 1, 2, 3$ y $N + 1$ de las soluciones de los modelos en línea π_a^{4*} , π_a^{8*} and π_u^{8*} , π_u^{12*} , por otro lado, la Figura 5.12 muestra las trayectorias del modelo de referencia y los modelos reducidos para los estados de Temperatura, H_2 , flujo de gas de síntesis producido q_g y valor calorífico alto (Higher heating value -HHV) en tres zonas diferentes a lo largo del reactor (alta, media y baja). Las gráficas en ambas figuras muestran que las mejoras descriptivas de las soluciones de malla adaptable son reflejadas en las zonas alta y media, mientras que, en la zona baja, las trayectorias de ambas mallas son comparables, sin embargo, una reducción al menos del 30 % puede ser lograda con la malla adaptable.

Por último, en la Figura 5.13 se presenta una verificación cuantitativa por medio de los perfiles de ignición del estado-estacionario de interés, donde se muestra la solución de referencia $\bar{\pi}_u^{50}$, el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\bar{\pi}_u^{50}$ y las soluciones reducidas de los modelos en línea de malla adaptable π_a^{4*} y uniforme π_u^{8*} para los estados de Temperatura, densidad aparente de biomasa, carbonizado, componentes de fase gas H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4 y flujos axiales de ambas fases.

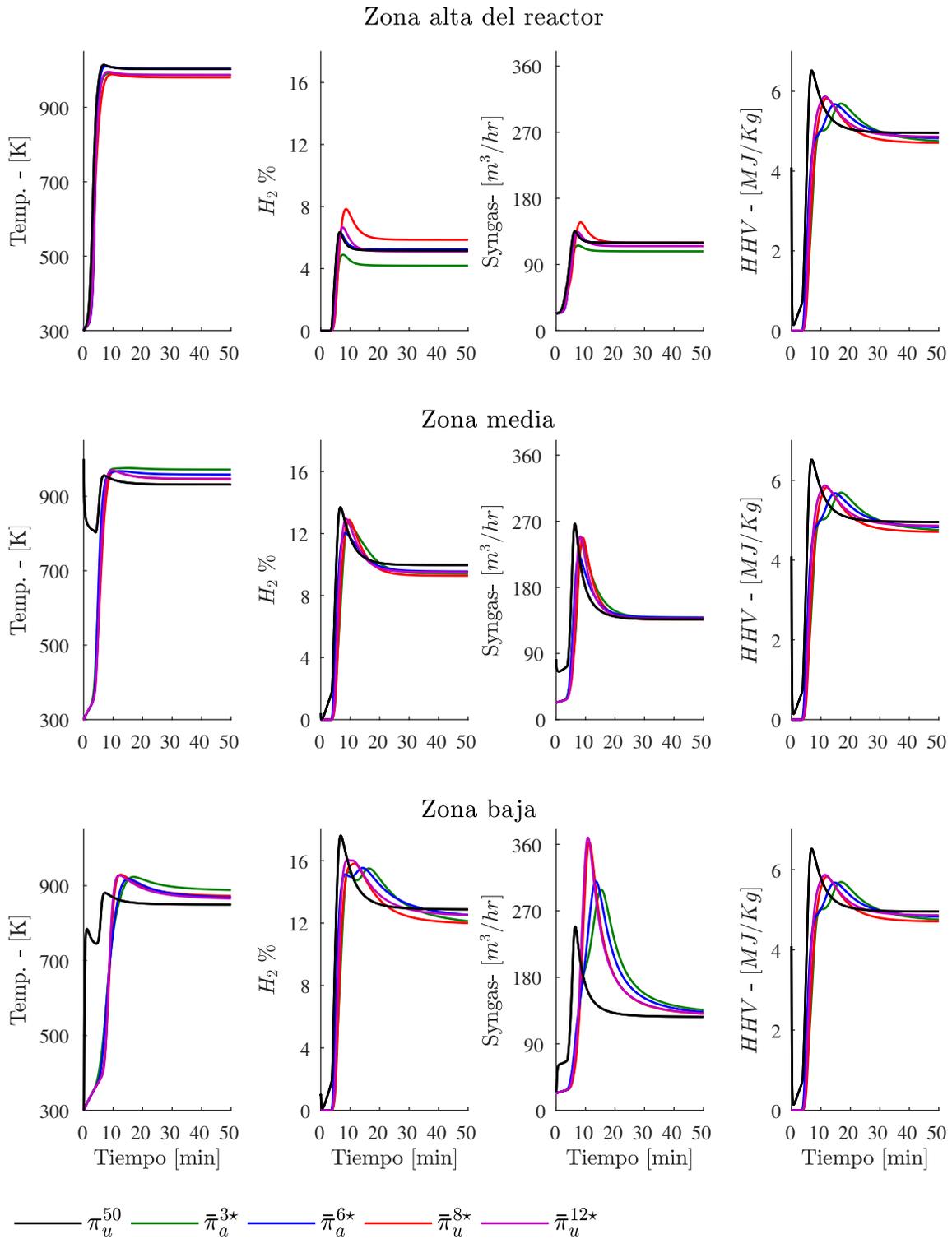


Figura 5.12: Trayectorias en estado transitorio de Temperatura, H_2 , flujo de gas de síntesis q_g y valor calorífico alto (Higher heating value - HHV), en las zonas alta, media y baja del reactor. Las gráficas incluyen la solución de referencia nominal π_u^{50} y las soluciones reducidas del modelo en línea de malla adaptable π_a^{4*} , π_a^{8*} y uniforme π_u^{8*} , π_u^{12*} .

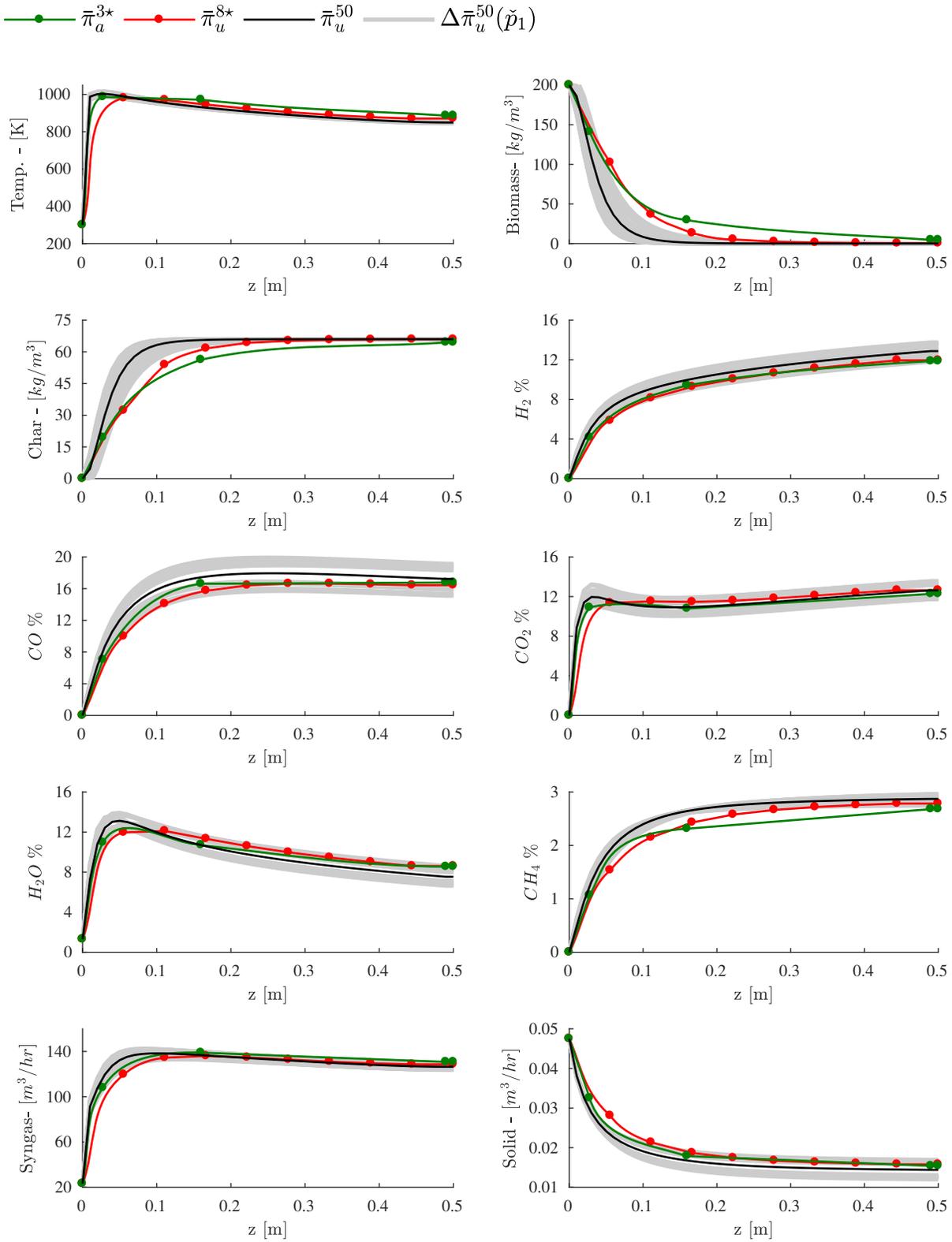


Figura 5.13: Comparación de perfiles estacionarios de ignición de los estados de Temperatura, densidad aparente de biomasa, carbonizado, componentes de fase gas H_2 , CO , CO_2 , H_2O y CH_4 y flujos axiales de ambas fases. Las gráficas muestran las solución de referencia π_u^{50} , el conjunto de soluciones perturbadas $\Delta\pi_u^{50}(\check{p}_1)$ y las soluciones reducidas de malla adaptable π_a^5 y uniforme π_a^8 .

En esta sección, se evaluaron los alcances del modelado de eficiente-plena del reactor de gas de síntesis a través de las mallas adaptables y uniformes y la ayuda de la medición de temperatura. Los resultados sobre el uso del modelo en línea demuestran la (i) eliminación de la multiplicidad espuria y, (ii) la reducción del orden del modelo para satisfacer las demandas cuantitativas respecto al problema de describir la operación de arranque del reactor.

5.4. Síntesis de resultados

Con base en lo presentado en las últimas secciones, a continuación se presenta la síntesis de los resultados obtenidos para los enfoques y objetivos de modelado planteados en este trabajo:

- **Modelo eficiente-cualitativo:** Para el caso de la descripción local eficiente del estado estacionario de ignición, considerando el subconjunto de errores de parámetros $\check{\mathbf{p}}_1$ (ó $\check{\mathbf{p}}_2$) y los vectores de ponderación $\boldsymbol{\eta}$, el modelo de malla adaptable $\boldsymbol{\sigma}_a^{N_\varepsilon}$ es *eficiente-cuantitativo* en estado-estacionario con $N_\varepsilon = 5$ (ó $N_\varepsilon = 8$). En el caso de la malla uniforme $\boldsymbol{\sigma}_u^N$, para $\check{\mathbf{p}}_1$ (o $\check{\mathbf{p}}_2$) se requiere un número de etapas $N = 8$ (ó $N_\varepsilon = 21$). Los resultados cuantitativos demuestran que al usar la malla adaptable $\boldsymbol{\sigma}_a^N$, el error de discretización $\bar{\varepsilon}_N$ se desvanece mar rápido conforme incrementa N y existe una reducción en el número de ecuaciones del modelo ≥ 9 EDOs (3 etapas).
- **Modelo eficiente-cualitativo:** El modelo de malla uniforme $\boldsymbol{\sigma}_u^{N_\Sigma}$ con $N_\Sigma \geq 8$ es *eficiente-cualitativo*, mientras que para el caso de modelos de malla adaptable se requieren $N = 17$ etapas.
- **Modelo eficiente-pleno:**
 - *Modelo por etapas sin medición:* Para el caso del subconjunto de errores de parámetros $\check{\mathbf{p}}_1$, el modelo de $N_{\Sigma,\varepsilon}$ -etapas de malla uniforme $\boldsymbol{\sigma}_u^8$, $N_{\Sigma,\varepsilon} = 8$, es *eficiente-pleno*. Por otro lado, si se considera el caso del subconjunto de errores de parámetros $\check{\mathbf{p}}_2$, el modelo de $N_{\Sigma,\varepsilon}$ -etapas de malla adaptable $\boldsymbol{\sigma}_a^{17}$, $N_{\Sigma,\varepsilon} = 17$, es *eficiente-pleno*.
 - *Modelo por etapas en línea:* Para el caso de $\check{\mathbf{p}}_1$ (ó $\check{\mathbf{p}}_2$) y los vectores de ponderación $\boldsymbol{\eta}$, el modelo de malla adaptable $\boldsymbol{\sigma}_a^{N_\varepsilon}$ es *eficiente-cuantitativo* en estado-estacionario con $N_\varepsilon = 3-5$ (ó $N_\varepsilon = 6-8$). En el caso de la malla uniforme $\boldsymbol{\sigma}_u^N$, para $\check{\mathbf{p}}_1$ (o $\check{\mathbf{p}}_2$) se requiere un número de etapas $N = 8$ (ó $N_\varepsilon > 12$). Los resultados cuantitativos demuestran que al usar la malla adaptable $\boldsymbol{\sigma}_a^N$, el error de discretización $\bar{\varepsilon}_N$ se desvanece más rápido conforme incrementa N y existe una reducción en el número de ecuaciones del modelo ≥ 9 EDOs (3 etapas).

Finalmente, la Tabla 5.4 muestra una comparación de los resultados obtenidos en este trabajo y otros estudios disponibles en la literatura. La Tabla muestra los valores de salida de algunas variables de interés y permite resaltar la significativa reducción en el número de ecuaciones requeridas para describir de el comportamiento local y/o global del reactor de gas de síntesis.

Tabla 5.4: Comparación entre el presente y otros estudios de diferentes variables de interés a la salida del reactor de gasificación.

Variable	A	B	C	D	E	F	G	H	I
$\%X_{CO}$	18.5-20	20-28	18	17-18	15-17	17.2	16	17.1	17.2
$\%X_{H_2}$	10-17	5.4-10	13	11-13	21-20	12.9	12	12.8	12.2
$\%X_{CO_2}$	9-15	10-11	14	11-13	12-13	12.6	12.8	12.6	12.2
$\%X_{CH_4}$	2.4-4.5	4-7	3.5	-	2.0	2.8	2.7	2.8	2.7
$\%X_{H_2O}$	9	10.5-11	8	-	-	7.5	8.6	7.5	8.2
$\%X_{N_2}$	43-60	47	43.5	45-55	45	46.7	46.1	46.6	46.4
T (K)	810-942	741	900	837	750	849.5	867.6	852.8	876.3
\dot{m} (kg/s)	44	-	43	-	-	46.5	45.5	46.0	45.9
HHV (MJ/kg)	5.5	7.2	5	-	5	5.1	4.7	4.9	5.0
Local y/o Global	Local	Local	Local	-	Local	Global	Local	Global	Global

A:Di Blasi (2000), simulación, 14 EDPs, Diferencias Finitas, $N_{pde} \approx 250 - 500$,
 $\dot{m}_{s,in} = 18$ (kg/hr), $\dot{m}_{g,in} = 27$ (kg/hr)

B:Rogel (2007), simulación, 18 EDPs, CFD Volumen Finito, 2 dimensiones, $N_{pde} \approx 100$,
 $\dot{m}_{s,in} = 15$ (kg/hr), $\dot{m}_{g,in} = 22.5$ (kg/hr)

C:Badillo-Hernandez *et al.* (2013), simulación, 3 EDOs + 8 EDAs, $N = 3$

D:Manurung y Beenackers (1993), experimental

E:Gøbel *et al.* (2007), simulación y experimental, 3 EDPs + 1 EDO, Volumen Finito
 $\dot{m}_{s,in} = 24.8$ (kg/hr), $\dot{m}_{g,in} = 25.9$ (kg/hr) + $\dot{m}_{steam,in} = 7$ (kg/hr)

F:Este estudio, 3 EDOs + 8 DAEs, Modelo de referencia $N_{pde} = 50$, 150 ODEs + 400 DAEs,
 $\dot{m}_{s,in} = 18$ (kg/hr), $\dot{m}_{g,in} = 27$ (kg/hr)

G:Este estudio, 3 EDOs + EDAs, Modelo Reducido $N = 5$, 15 EDOs,
 $\dot{m}_{s,in} = 18$ (kg/hr), $\dot{m}_{g,in} = 27$ (kg/hr)

H:Este estudio, 3 EDOs + EDAs, Modelo Reducido $N = 17$, 51 EDOs
 $\dot{m}_{s,in} = 18$ (kg/hr), $\dot{m}_{g,in} = 27$ (kg/hr)

I:Este estudio, 3 EDOs + EDAs, Modelo Reducido en línea $N = 4$, 11 EDOs
 $\dot{m}_{s,in} = 18$ (kg/hr), $\dot{m}_{g,in} = 27$ (kg/hr)

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis se ha abordado el problema de *modelar eficientemente* la dinámica local y/o global de una clase de reactores de gasificación, donde el término *eficiente* se ha utilizado como sinónimo para definir aquellos modelos que (i) satisfacen los objetivos descriptivos de forma confiable y (ii) contienen el mínimo número de ecuaciones para no sobre-representar el comportamiento deseado. Estos modelos reducidos, en ecuaciones diferenciales ordinarias, tienen como objetivo aligerar la carga numérica computacional y de manipulación analítica que beneficien en un mejor entendimiento de fenómenos y propiedades fundamentales del proceso (diseño de equipo, multiplicidad de puntos de equilibrio, operaciones de encendido y apagado, etc.) y el diseño de algoritmos de control, monitoreo y estimación avanzados necesarios en la operación del reactor de gas de síntesis.

El problema de modelar con el menor número de ecuaciones posibles el comportamiento dinámico del reactor de gasificación, ha sido motivado por los aún existentes desafíos de control, confiabilidad y optimización del proceso. De tal forma que en este trabajo se plantea la idea de un acercamiento a la solución de estos desafíos desde un marco de análisis dinámico avanzado donde las representaciones de orden reducido y de simplicidad máxima son aspectos deseados. Aunque la naturaleza distribuida, la compleja dinámica no-lineal y los fenómenos de transporte y procesos de conversión de sólido-a-gas involucrados en el proceso, provocan por sí mismos un problema en la representación del proceso, en este trabajo se fundamenta en la idea de la teoría de control constructivo (Sepulchre *et al.*, 1997) que dice que la selección del modelo constituye en sí un grado de libertad que puede ser efectivamente explotado.

Con base en lo mencionado anteriormente, hemos planteado los enfoques de modelado de (i) *eficiencia-cuantitativa*, que garantiza una precisión descriptiva adecuada acorde a una métrica de error, (ii) *eficiencia-cualitativa* para garantizar la estabilidad estructural del modelo y (iii) *eficiencia-plena* que garantiza las dos anteriores. Estos enfoques fueron dirigidos a tres propósitos de modelado en particular: (i) descripción numérica eficiente de la dinámica local alrededor del estado-estacionario de ignición, (ii) representación eficiente de los estados-estacionarios, es decir, modelos reducidos sin comportamientos de dinámica espuria y, (iii) descripción eficiente de la operación de arranque del reactor de gas de síntesis. Así, la propuesta de modelado de bajo orden del reactor de gas de síntesis espacialmente distribuido, se ha propuesto a la luz de objetivos de modelado específicos e incertidumbres de parámetros de Cinética-y-Transporte.

Los medios bajo los cuales se ha abordado el problema de *modelado-eficiente* son (i) la elec-

ción efectiva del tipo de malla uniforme o adaptable de los modelos de N -etapas, generados a partir de la discretización espacial del modelo distribuido en ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) que comúnmente representa este tipo de reactores y, (ii) la inyección de datos de una señal de temperatura que asegura una restricción dinámica del modelo acorde a la trayectoria “real” medida.

Las aportaciones en este trabajo consisten en (i) la metodología para diseñar modelos por etapas de bajo orden de propósitos específicos, (ii) el esquema de colocación de nodos para diseñar la malla adaptable que garantiza eficiencia-cuantitativa y (iii) los operadores que definen las métricas de error de modelado debido a la incertidumbre de parámetros y a la discretización-espacial.

La efectividad y alcances de la metodología de modelado propuesta en este trabajo, fueron ilustradas y probadas sobre un caso ejemplo de un reactor de gasificación piloto de pequeña escala previamente modelado. De acuerdo a los resultados para un caso de incertidumbre típica de parámetros ($\boldsymbol{\eta}_2$) y una balanceada ponderación de estados de interés (\boldsymbol{p}_1), se concluye lo siguiente: (i) cuantitativamente, la operación continua alrededor del estado-estacionario ignición se puede describir de forma eficiente, no más allá de la incertidumbre típica del modelo respecto al comportamiento real del reactor, con modelos de malla adaptable con número de etapas $N = 5$ (15 EDOs), mientras que, un modelo de malla uniforme requiere un número de etapas $N = 8$ (24 EDOs) para el mismo propósito, (ii) cualitativamente, la dinámica biestable se puede describir de manera eficiente con un modelo de malla uniforme con número de etapas $N = 8$ (24 EDOs), mientras que, un modelo de malla adaptable requiere un número de etapas $N = 17$ (51 EDOs) y, (iii) la operación transitoria de arranque se describe de manera eficiente con un modelo en línea, manejado por una señal de temperatura inyectada al modelo por etapas, de malla adaptable de $N = 3$ etapas (8 EDOs), mientras que, la contraparte de modelos por etapas en línea de malla uniforme requiere $N = 8$ etapas (23 EDOs). Esta última mejora se debe a que la inyección de una medición de temperatura en línea al modelo garantiza la estabilidad-estructural del modelo y reduce el error de modelado debido al truncamiento del dominio espacial.

Trabajo Futuro

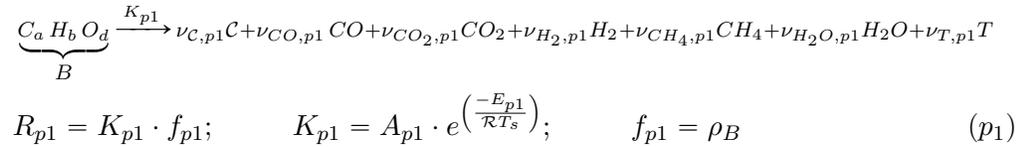
Hasta este momento, los resultados del enfoque de modelado que se ha propuesto en el grupo de investigación abren la vía para continuar los estudios sobre:

- Abordar las nociones de estabilidad, controlabilidad y detectabilidad, y el diseño de esquemas avanzados o convencionales de control de realimentación de salida, así como, de observadores avanzados para fines de control y monitoreo.
- Extender la aplicación de los resultados y la metodología aplicada al modelo de N -etapas a reactores con diferentes geometrías para caracterización de la estabilidad estructural de sus estados-estacionarios.
- Mejorar la precisión de los modelos de N -etapas en línea con la inyección de datos de 2 ó más sensores.
- Validación experimental de modelos con y sin inyección de temperatura.

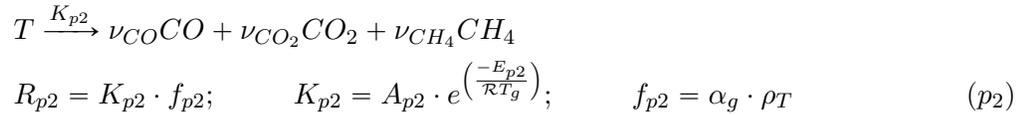
Apéndice A

Ecuaciones constitutivas de la cinética química

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

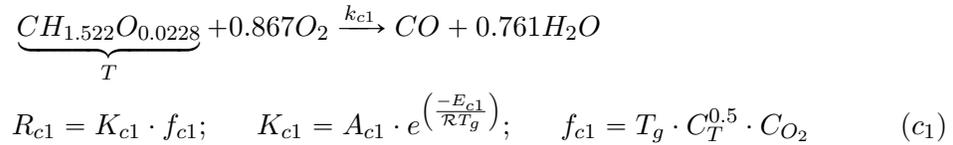


- Pirólisis secundaria. La descomposición térmica de los alquitranes (T) es modelada con una reacción global con cinética tipo Arrhenius.

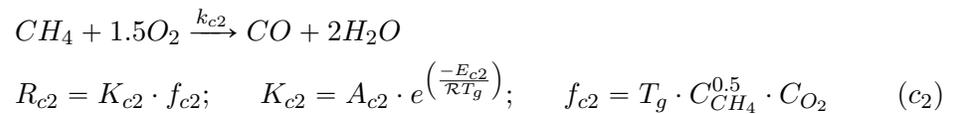


- Combustión de volátiles (reacciones homogéneas). El modelo incorpora reacciones homogéneas de oxidación de cuatro especies de la fase gaseosa.

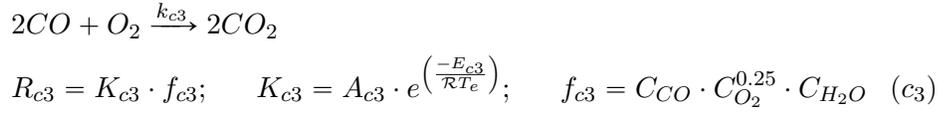
- *Oxidación de los alquitranes en fase vapor.* Los alquitranes son modelados por el hidrocarburo $T = CH_{1.522}O_{0.0228}$.



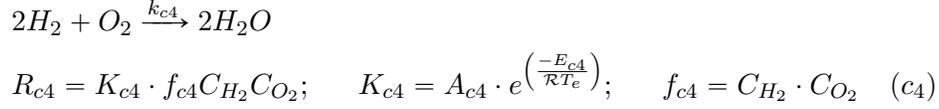
- *Oxidación del metano (CH_4)*



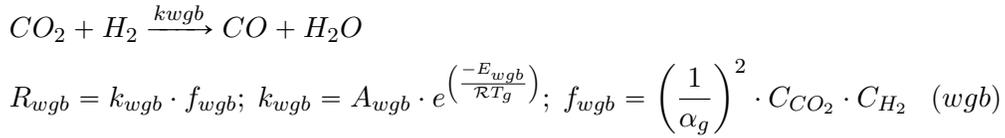
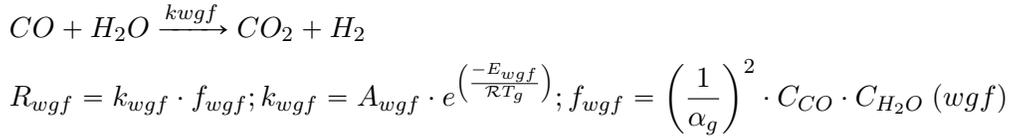
- Oxidación del Monóxido de Carbono (CO)



- Oxidación del Hidrógeno (H_2)



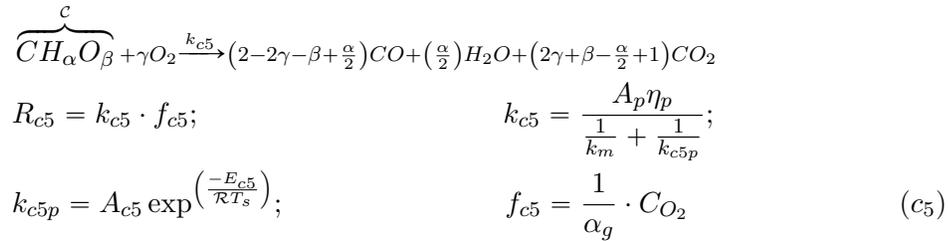
- Reacción de separación del CO_2 con vapor de agua (reversible).



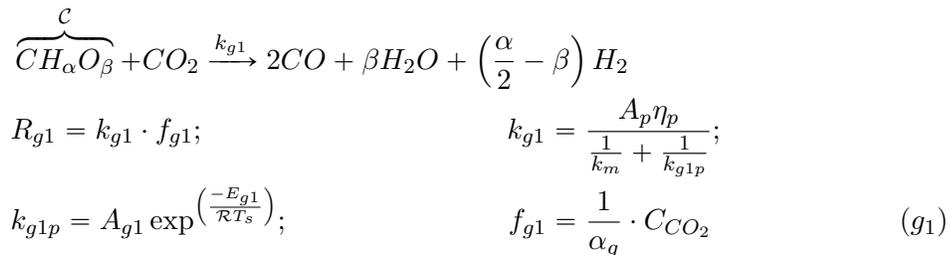
$$R_{wg} = R_{wgf} - R_{wgb} \quad (wgf)$$

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

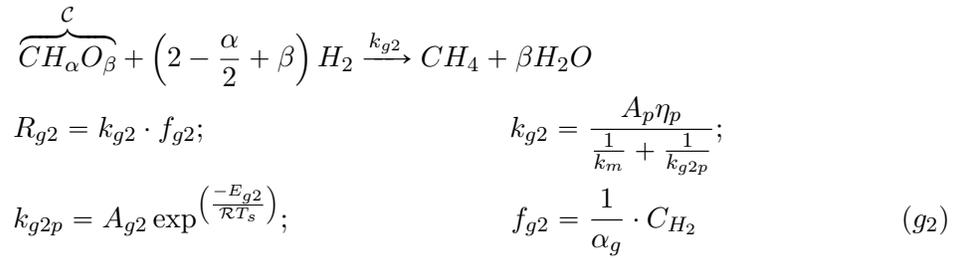
- Oxidación parcial del carbonizado



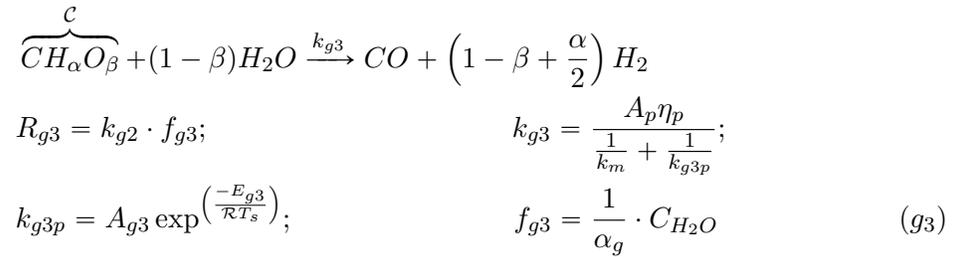
- Gasificación del carbonizado por medio de Dióxido de Carbono (CO_2)



- Gasificación del carbonizado por medio de Hidrógeno (H_2)



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



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

Apéndice B

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

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

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

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

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

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

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

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

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

donde ζ es un factor correctivo para tomar en cuenta los efectos de transferencia de calor no estacionarios en sistema reactivos. A_p es el área de la partícula de carbonizado y η_p es la densidad de número de partículas definida como el número de partículas de la fase sólida por unidad de volumen total, k_m es el coeficiente de transferencia de masa difusivo correspondiente al transporte de la especie reactante a través de la capa de la fase gaseosa que se forma alrededor de la partícula. La densidad de número de partículas η_p , el tamaño de la partícula d_p , el área de la superficie del núcleo no reactivo de la partícula A_p y su relación con el volumen de la misma V_p están dados

por las siguientes expresiones:

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

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

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

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

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

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

Coefficientes de pérdida de calor en las paredes del reactor.

- Fase gaseosa.

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

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

- Fase sólida.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Las ecuaciones que determinan el parámetro de empaquetamiento ψ están dadas por Hobbs

et al. (1992).

Propiedades de transporte del sistema.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Apéndice C

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

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

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

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

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

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

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

Bibliografía

- Allgower, Eugene L. y Georg, Kurt (1990). *Numerical Continuation Methods: An Introduction*. Springer Series in Computational Mathematics 13. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1^a edición.
- Álvarez, Jesús y Fernández, Carlos (2009). Geometric estimation of nonlinear process systems. *Journal of Process Control*, **19(2)**, pp. 247 – 260. ISSN 0959-1524.
- Amundson, Neal R; Aris, Rutherford y Varma, Arvind (1980). *The Mathematical Understanding of Chemical Engineering Systems: selected papers of Neal R. Amundson*. Pergamon Press, , Elsevier Ltd, 1^a edición.
- Amundson, Neal R. y Arri, Luis Ernesto (1978). Char Gasification in a Countercurrent Reactor. *AIChE Journal*, **24**, pp. 87–101.
- Badillo-Hernandez, Ulises. (2009). *Modelado orientado al control de gasificadores*. Tesis de maestría, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.
- Badillo-Hernandez, Ulises (2014). *Modelado, Observación y Control de Reactores de Gasificación*. Tesis doctoral, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.
- Badillo-Hernandez, Ulises; Alvarez-Icaza, Luis A. y Alvarez, Jesus (2013). Model design of a class of packed bed tubular gasification reactors. *Chemical Engineering Science*, **101**, pp. 674–685.
- Badillo-Hernandez, Ulises; Alvarez-Icaza, Luis A. y Alvarez, Jesus (2018). Nonlinear dynamics of tubular gasification reactors. *Submitted to Chemical Engineering Science*.
- Badillo-Hernandez, Ulises; Najera, Israel; Alvarez, Jesus y Alvarez-Icaza, Luis A. (2016). Estimator design for a moving bed gasification reactor. En: *Memorias del Congreso Nacional de la Asociación de México de Control Automático*, pp. 13–18. Querétaro, México..
- Badillo-Hernandez, Ulises; Najera, Israel; Alvarez, Jesus y Alvarez-Icaza, Luis A. (2017). State profile estimation in a biomass gasification tubular reactor. *IFAC-PapersOnLine*, **50**.
- Baldea, M. y Daoutidis, P. (2007). Dynamics and control of autothermal reactors for the production of hydrogen. *Chemical Engineering Science*, **62**, pp. 3218–3230.
- Baratti, Roberto; Alvarez, Jesus y Morbidelli, Massimo (1993). Design and experimental verification of a nonlinear catalytic reactor estimator. *Chemical Engineering Science*, **48(14)**, pp. 2573 – 2585.
- Barrio, Maria (2002). *Experimental investigation of small-scale gasification of woody biomass*. Tesis doctoral, The Norwegian University of Science and Technology.
- Bashir, Shahid; Chovan, Tibor; Masri, Bassam J.; Mukherjee, Ananya; Pant, Alok; Sen, Sumit; Vijayaraghavan, P. y Berty, Jozsef M. (1992). Thermal runaway limit of tubular reactors, defined at the inflection point of the temperature profile. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **31(9)**, pp. 2164–2171.
- Basu, Prabir. (2006). *Combustion and gasification in fluidized beds*. Taylor and Francis Group.

- Basu, Prabir (2010). *Biomass Gasification and Pyrolysis: Practical Design and Theory*. Academic Press, 1^a edición.
- Biba, V.; Macak, J.; Klose, E. y Malecha, J. (1978). Mathematical model for the gasification of coal under pressure. *Industrial and Engineering Chemical Process Design and Development*, **17**, p. 92.
- Botero, H.; Alvarez, H. y Gómez, L. (2013). Estimación de Estado y Control de un Gasificador de Carbón en Lecho Fluidizado Presurizado. *Revista Iberoamericana de Automática e Informática industrial*, **10**, pp. 279–290.
- Bryden, Kenneth M. y Ragland, Kenneth W. (1996). Numerical Modeling of a Deep, Fixed Bed Combustor. *Energy and Fuels*, **10**, pp. 269–275.
- Canales-Meza, Luis (2013). *Reducción de orden en modelos para reactores de gasificación*. Tesis de maestría, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.
- Canales-Meza, Luis; Badillo-Hernandez, Ulises; Alvarez-Icaza, Luis A. y Alvarez, Jesus (2017). Low order online modeling of a distributed syngas reactor. En: *Memorias del Congreso Nacional de la Asociación de México de Control Automático*, UANL, Monterrey, Nuevo León, Mexico.
- Caram, H. S. y Fuentes, C. (1982). Simplified Model for a Countercurrent Char Gasifier. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **21**, pp. 464–472.
- Ciccarella, G.; Dalla Mora, M. y Germani, A. (1993). A Luenberger-like observer for nonlinear systems. *International Journal of Control*, **57**, pp. 537–556.
- Conn, A.; Gould, N. y Toint, P. (1987). *Trust-region methods*. MPS-SIAM series on optimization. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Cooper, J. y Hallett, W.L.H. (2000). A numerical model for packed-bed combustion of char particles. *Chemical Engineering Science*, **55**, pp. 4451–4460.
- Coste, J.; Rudd, D. y Amundson, N. R. (1961). Taylor diffusion in tabular reactors. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **39**, pp. 149–151.
- Dasappa, S.; Subbukrishna, D.N.; Suresh, K.C.; Paul, P.J. y Prabhu, G.S. (2011). Operational experience on a grid connected 100 kWe biomass gasification power plant in Karnataka, India. *Energy for Sustainable Development*, **15**, pp. 231 – 239.
- de Souza-Santos, Marcio L. (2005). *Solid Fuels Combustion and Gasification*. Marcel Dekker Inc.
- Deans, H. A. y Lapidus, L. (1960). A computational model predicting and correlating the behavior of fixed bed reactors. *AIChE Journal*, **6**, pp. 663–668.
- Dhooge, A.; Govaerts, W. y Kuznetsov, Yu. A. (2003). MATCONT: A MATLAB Package for Numerical Bifurcation Analysis of ODEs. *ACM Trans. Math. Softw.*, **29(2)**, pp. 141–164.
- Di Blasi, C.; Branca, C.; Masotta, F. y Biase, E. De (2013). Experimental Analysis of Reaction Heat Effects during Beech Wood Pyrolysis. *Energy and Fuels*, **27**, pp. 2665–2674.
- Di Blasi, Colomba (1996). Heat, momentum and mass transport through a shrinking biomass particle exposed to thermal radiation. *Chemical Engineering Science*, **51**, pp. 1121 – 1132.
- Di Blasi, Colomba. (2000). Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical Engineering Science*, **55**, pp. 2931–2944.
- Di Blasi, Colomba. (2008). Modeling chemical and physical process of wood and biomass pyrolysis. *Progress in Energy and Combustion Science*, **34**, pp. 47–90.

- Dixon, A.W., R.; Pike (2006). Alstom Benchmark Challenge II on Gasifier Control. *IEE Proceedings - Control Theory and Applications*, **153**, pp. 254–261.
- Dixon, R. (1999). Advanced gasifier control. *Computing and Control Engineering Journal*, **10**, pp. 93–96.
- Dochain, D.; Perrier, M. y Ydstie, B. E. (1992). Asymptotic Observer for Stirred Tank Reactors. *Chemical Engineering Science*, **47**, pp. 4167–4177.
- Doedel, E.; Keller, H. B. y Kernevez, J. P. (1991). Numerical analysis and control of bifurcation problems (ii): Bifurcation in infinite dimensions. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, **1**, pp. 745–772.
- Dogru, Murat (2013). Experimental results of olive pits gasification in a fixed bed downdraft gasifier system. *International Journal of Green Energy*, **10**, pp. 348–361.
- Fernandez, Carlos; Alvarez, Jesus; Baratti, Roberto y Frau, Andrea (2012). Estimation structure design for staged systems. *Journal of Process Control*, **22(10)**, pp. 2038 – 2056. ISSN 0959-1524.
- Gauthier, J. P.; Hammouri, H. y Othman, S. (1992). A simple observer for nonlinear systems applications to bioreactors. *IEEE Transactions on Automatic Control*, **37**, pp. 875–880.
- Gear, C. William (1971). *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*. Prentice Hall PTR.
- Goldman, J.; Xieu, A.; Oko, A.; Milne, R. y Essenhigh, R. (1984). A comparison of predictions and experiment in the gasification of anthracite in air and oxygen-enriched/steam mixtures. En: *Proceedings of the 20th International Symposium on Combustion*, pp. 1365–1372.
- Govaerts, W.; Kuznetsov, Y. A.; De Witte, V.; Dhooge, A.; Meijer, H. G. E.; Mestrom, W.; Riet, A. M. y Sautis, B. (2011). MATCONT and CL MATCONT: Continuation toolboxes in MATLAB, Technical report.
<https://sourceforge.net/p/matcont>
- Groenveld, M. J. y van Swaaij, W. P. M. (1980). Gasification of Char Particles with CO_2 and H_2O . *Chemical Engineering Science*, **35**, pp. 307–313.
- Gunst, Richard F.; Myers, Raymond H. y Montgomery, Douglas C. (1996). Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments. *Technometrics*, **38**, p. 285.
- Gøbel, B.; Henriksen, U.; Jensen, T. K.; Qvale, B. y Houbkæk, N. (2007). The development of a computer model for a fixed bed gasifier and its use for optimization and control. *Bioresource Technology*, **98**, pp. 2043–2052.
- Henriksen, Ulrik Birk; Ahrenfeldt, Jesper; Jensen, Torben Kvist; Gøbel, Benny; Bentzen, Jens Dall; Hinds-gaul, Claus y Sørensen, Lasse Holst (2006). The design, construction and operation of a 75kW two-stage gasifier. *Energy*, **31**, pp. 1542–1553.
- Higman, Christopher. y van der Burgt, Marten. (2008). *Gasification*. Gulf Professional Publishing, second^a edición.
- Hlavacek, Vladimir; Puszynski, Jan A.; Viljoen, Hendrik J. y Gatica, Jorge E. (2000). *Model Reactors and Their Design Equations*. Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA. ISBN 9783527306732.
- Hobbs, M. L.; Radulovic, P. y Douglas Smoot, L. (1992). Modeling Fixed-Bed Coal Gasifiers. *Advanced Combustion Engineering Research Center*, **38**, pp. 681–701.
- Kashiwagi, T. y Nambu, H. (1992). Global Kinetic Constants for Thermal Oxidative Degradation of a Cellulosic Paper. *Combustion and Flame*, **88**, pp. 345–368.

- Kazantzis, Nikolaos; Kravaris, Costas y Wright, Raymond A. (2000). Nonlinear Observer Design for Process Monitoring. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **39**, pp. 408–419.
- Keller, H. B. (1977). *Numerical solution of bifurcation and nonlinear eigenvalue problems. Applications of bifurcation theory: proceedings of an advanced seminar*. volumen 1. Academic Press.
- Khalil, Hassan K. (2002). *Nonlinear Systems*. Prentice Hall.
- Kielhöfer, Hansjörg (2012). *[Applied Mathematical Sciences] Bifurcation Theory Volume 156* // volumen 10.1007/978-1-4614-0502-3.
- Koufopoulos, C.; Papayannakos, N.; Maschio, G. y Lucchesi, A. (1991). Modelling of the pyrolysis of biomass particles. Studies on kinetics, thermal and heat transfer effects. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, **69**, pp. 907–915.
- Lafon, A. y Yee, H. C. (1996a). Dynamical Approach Study of Spurious Steady-State Numerical Solutions of Nonlinear Differential Equations, Part III. The Effects of Nonlinear Source Terms in Reaction-Convection Equations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **6**, pp. 1–36.
- Lafon, A. y Yee, H. C. (1996b). Dynamical Approach Study of Spurious Steady-State Numerical Solutions of Nonlinear Differential Equations Part IV. Stability vs. Methods of Discretizing Nonlinear Source Terms in Reaction-Convection Equations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **6**, pp. 89–123.
- Levenspiel, Octave (1964). *[Advances in Chemical Engineering] Volume 4 // Patterns of Flow in Chemical Process Vessels*. pp. 95–198.
- Leveque, Randall (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems (Classics in Applied Mathematics)*. Classics in Applied Mathematics. SIAM, Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Liden, A.; Berruti, F. y D., Scott (1988). A kinetic model for the production of liquids from the flash pyrolysis of biomass. *Chemical Engineering Communications*, **65**, p. 207.
- Manurung, RK y Beenackers, AACM (1993). Modeling and simulation of an open core down-draft moving bed rice husk gasifier. En: *Advances in thermochemical biomass conversion*, pp. 288–309. Springer.
- Masmoudi, Mohamed Ali; Halouani, Kamel y Sahraoui, Melik (2017). Comprehensive experimental investigation and numerical modeling of the combined partial oxidation-gasification zone in a pilot downdraft air-blown gasifier. *Energy Conversion and Management*, **144**, pp. 34 – 52.
- Masmoudi, "Mohamed Ali; Sahraoui, Melik; Grioui, Najla y Halouani, Kamel (2014). 2-D Modeling of thermo-kinetics coupled with heat and mass transfer in the reduction zone of a fixed bed downdraft biomass gasifier. *Renewable Energy*, **66**, pp. 288–298.
- Milligan, Jimmy Baxter (1994). *Downdraft Gasification of Biomass*. Tesis doctoral, The University of Aston in Birmingham.
- Nájera, Israel (2012). *Modelado y Control de una Clase de Reactores Tubulares Exotérmicos*. Tesis de maestría, Universidad Autónoma Metropolitana.
- Olaleye, Akeem K.; Adedayo, Kunle J.; Wu, Chunfei; Nahil, Mohamad A.; Wang, Meihong y Williams, Paul T. (2014). Experimental study, dynamic modelling, validation and analysis of hydrogen production from biomass pyrolysis/gasification of biomass in a two-stage fixed bed reaction system. *Fuel*, **137**, pp. 364 – 374.
- Paes, T. (2005). *Modeling for control of a biomass gasifier*. Tesis doctoral, Technische Universiteit Eindhoven.

- Patra, Tapas H. y Sheth, Patrik N. (2015). Biomass gasification models for downdraft gasifier: A state-of-the-art review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **50**, pp. 583–593.
- Pérez, Juan F.; Melgar, Andrés y Benjumea, Pedro Nel (2012). Effect of operating and design parameters on the gasification/combustion process of waste biomass in fixed bed downdraft reactors: An experimental study. *Fuel*, **96**, pp. 487–496.
- Porru, Marcella; Baratti, Roberto y Alvarez, Jesus (2015). Energy Saving through Control in an Industrial Multicomponent Distillation Column. *IFAC-PapersOnLine*, **48(8)**, pp. 1138 – 1143.
- Powell, M. J.D. (1968). A Fortran subroutine for solving systems of nonlinear algebraic equations.
- Purnomo, D.; Aerts, J. y Ragland, K. (1990). Pressurized downdraft combustion of woodchips. En: *Proceeding of 23rd International Symposium on Combustion*, pp. 1025–1032.
- Ranzi, Eliseo; Corbetta, Michele; Manenti, Flavio y Pierucci, Sauro (2014). Kinetic modeling of the thermal degradation and combustion of biomass. *Chemical Engineering Science*, **110**, pp. 2–12.
- Reed, T. B. y Das, A. (1988). *Handbook of Biomass Downdraft Gasifier Engine Systems*. Solar Technical Information Program.
- Reed, T. B. y Markson, M. (1985). Biomass Gasification Reaction Velocities. *Fundamentals of Thermochemical Biomass Conversion*, pp. 951–965.
- Reid, R.; Prausnitz, J. M. y Poling, B. E. (1987). *The properties of gases and liquids*. McGraw-Hill, fourth^a edición.
- Rezaiyan, John y Cheremisinoff, Nicholas P. (2005). *Gasification Technologies A Primer for Engineers and Scientists*. Chemical Industries. CRC Press, 1^a edición.
- Roberts, A.F. (1970). A review of kinetics data for the pyrolysis of wood and related substances. *Combustion and Flame*, **14**, pp. 261–272.
- Rogel, A. y Aguillon, J. (2006). The 2D Eulerian Approach of Entrained Flow and Temperature in a Biomass Stratified Downdraft Gasifier. *American Journal of Applied Sciences*, **3(10)**, pp. 2068–2075.
- Rogel, A. R. (2007). *Estudio numérico experimental de un gasificador estratificado que opera con biomasa, utilizando CFD*. Tesis doctoral, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM.
- Ruíz, J. A.; Juárez, M. C.; Morales, M. P.; Muñoz, P. y Mendivil, M. A. (2013). Biomass gasification for electricity generation: Review of current technology barriers. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **18**, pp. 174 – 183.
- Schreiber, R. y Keller, H. B. (1983). Spurious solutions in driven cavity calculations. *Journal of Computational Physics*, **49**, pp. 165–172.
- Schweitzer, Daniel; Gredinger, Andreas; Schmid, Max; Waizmann, Gebhard; Gebhard, Beirow; Beirow, Marcel; Spörl, Reinhold y Scheffknecht, Günter (2017). Steam gasification of wood pellets, sewage sludge and manure: Gasification performance and concentration of impurities. *Biomass and Bioenergy*.
- Sepulchre, R.; Janković, M. y Kokotović, P. V. (1997). *Constructive Nonlinear Control*. Communications and Control Engineering. Springer-Verlag London, 1^a edición. ISBN 978-1-4471-1245-7, 978-1-4471-0967-9.
- Seydel, Rüdiger y Hlavacek, Vladimir (1987). Role of continuation in engineering analysis. *Chemical Engineering Science*, **42(6)**, pp. 1281 – 1295.
- Shampine, Larry; Gladwell, Ian y Thompson, S. (2003). *Solving ODEs with MATLAB*. Cambridge University Press.

- Shwe, San (2004). *A Theoretical and Experimental Study on a Stratified Downdraft Biomass Gasifier*. Tesis doctoral, University of Melbourne.
- Shwe, San y Roberts, Daniel (2016). Addressing the barriers to greater penetration of gasification-based BioEnergy. En: *BioEnergy Australia Conference 2016*, .
- Wilson, J. A.; Chew, M. y Jones, W.E. (2006). State estimation-based control of a coal gasifier. *IEE Proceedings - Control Theory and Applications*, **153**, pp. 268–0. doi: 10.1049/ip-cta:20050071.
- Yoon, Heeyoung; Wei, James y Denn, Morton M. (1978). A model for moving bed coal gasification reactors. *AIChE*, **24**, p. 885–903.
- Yuan, Zhihong; Wang, Ping y Yang, Chaohe (2015). Steady-state multiplicity analysis of two-stage-riser catalytic pyrolysis processes. *Computers and Chemical Engineering*, **73**, pp. 49 – 63. ISSN 0098-1354.
- Yucel, Ozgun y Hastaoglu, Mehmet A. (2016). Kinetic modeling and simulation of throated downdraft gasifier. *Fuel Processing Technology*, **144**, pp. 145–154.
- Yun, Y. (2012). *Gasification for practical Applications*. INTECH.
- Zeitz, M. (1987). The extended Luenberger observer for nonlinear systems. *Systems and Control Letters*, **9**, pp. 149–156.