

**MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE UN GASIFICADOR DE CARBÓN PARA  
LA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO**

**WILLIAM ENRIQUE CARO GONZÁLEZ  
JULIO CÉSAR RUEDA NÚÑEZ**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERIAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERIA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2007**

**MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE UN GASIFICADOR DE CARBÓN PARA  
LA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO**

**WILLIAM ENRIQUE CARO GONZÁLEZ  
JULIO CÉSAR RUEDA NÚÑEZ**

**Trabajo de grado presentado como requisito  
parcial para optar el título de Ingeniero Químico**

**Dr. M.Sc. VIATCHESLAV KAFAROV**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERIAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERIA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2007**

## DEDICATORIA

*Este logro tan importante para mi vida lo dedico con profundo amor y cariño a la memoria de mi padre Enrique.*

*A mi querida y respetada madre Blanca. Tu fuerza y tu amor me han dirigido por la vida. Tus brazos siempre se abren cuando necesito un abrazo. Tus ojos sensibles se endurecen cuando necesito una lección. Todo lo que soy te lo debo a ti madre adorada.*

*A mi hermano Iván por compartir el espacio y los momentos significativos en mi vida.*

*Mi gratitud a todos los que me acompañaron en este proceso.*

*William Enrique*

## DEDICATORIA

*A Dios por regalarme unos padres y hermanos que en cada momento de mi vida me acompañan para mostrarme lo bueno que hay en mi y lo mucho que tengo que mejorar.*

*A mis padres por brindarme su apoyo y fortaleza en cada momento de mi vida, razón fundamental para que este logro se pudiera realizar.*

*A mis hermanos que con su ejemplo y apoyo me mostraron nuevos horizontes en todas las áreas de mi vida.*

*A Jenny que con su amor y comprensión me acompaña para mostrarme que en la vida es mejor ser dos para ser feliz.*

*Julio Cesar*

## CONTENIDO

	<b>Pág.</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b> .....	13
<b>1. MARCO TEÓRICO</b> .....	15
1.1 GENERALIDADES .....	15
1.2 EL CARBÓN EN COLOMBIA.....	16
1.3 GASIFICACIÓN DE CARBÓN. ....	17
1.3.1 Elección Del Medio De Gasificación, Oxígeno O Aire.....	20
1.3.2 Manejo Del Carbón.....	21
1.3.3 Gasificadores De Carbón.....	21
1.3.4 Gasificadores De Flujo Entrante.....	22
1.4 ECONOMÍA DE LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO.....	26
<b>2. MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN</b> .....	28
2.1 PLANTEAMIENTO DEL MODELO.....	28
2.2 SIMULACIÓN DE LA CORRIENTE DE CARBÓN .....	30
2.3 SIMULACIÓN DEL GASIFICADOR DE CARBÓN .....	32
2.4 VALIDACIÓN DEL MODELO .....	33
<b>3. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE LA SIMULACIÓN</b> .....	35
3.1 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DEL PROCESO.....	35
3.2 ANÁLISIS DE LA SIMULACIÓN.....	39
3.2.1 Efecto De La Relación Carbón/Vapor En El Gas De Síntesis.....	39
3.2.2 Efecto De La Relación Carbón/Oxígeno En El Gas De Síntesis.....	40
<b>4. CONCLUSIONES</b> .....	42
<b>5. BIBLIOGRAFIA</b> .....	44
<b>6. ANEXOS</b> .....	46

## LISTA DE TABLAS

	Pág.
<b>Tabla 1.</b> Productos producidos por gasificación de combustibles fósiles . . . . .	16
<b>Tabla 2.</b> Alimentos usados en plantas de gasificación . . . . .	17
<b>Tabla 3.</b> Resumen de los métodos de producción de hidrógeno . . . . .	26
<b>Tabla 4.</b> Características de los diferentes tipos de gasificadores . . . . .	29
<b>Tabla 5.</b> Propiedades de los carbónes de Boyacá, Cundinamarca y Guajira empleados en la simulación . . . . .	31
<b>Tabla 6.</b> Propiedades de las corrientes de entrada al gasificador. . . . .	33
<b>Tabla 7.</b> Datos para la validación del modelo. . . . .	34

## LISTA DE GRÁFICAS

	<b>Pág.</b>
<b>Gráfica 1.</b> Esquema de un gasificador de flujo entrante.....	23
<b>Gráfica 2.</b> Principio de operación del gasificador de flujo entrante.....	24
<b>Gráfica 3.</b> Diagrama de flujo del modelo planteado. ....	30
<b>Gráfica 4.</b> Composición de H <sub>2</sub> en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Oxígeno .....	35
<b>Gráfica 5.</b> Composición de CO en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Oxígeno.....	36
<b>Gráfica 6.</b> Temperatura del Gas de Síntesis vs. Relación Carbón / Oxígeno .....	36
<b>Gráfica 7.</b> Composición de H <sub>2</sub> en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón / Vapor .....	37
<b>Gráfica 8.</b> Composición de CO en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón / Vapor .....	37
<b>Gráfica 9.</b> Temperatura del Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Vapor .....	38
<b>Gráfica 10.</b> Composición de H <sub>2</sub> en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Oxígeno.....	38
<b>Gráfica 11.</b> Composición de H <sub>2</sub> en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Vapor .....	39

## LISTA DE ANEXOS

	<b>Pág.</b>
<b>ANEXO A.</b> SISTEMAS DE SEPARACIÓN DE AIRE (Air Separation Unit). ....	46
<b>ANEXO B.</b> ECONOMÍA DE LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO.....	55
<b>ANEXO C.</b> METODOLOGÍA DE MODELAMIENTO Y SIMULACION .....	63
<b>ANEXO D.</b> RESULTADOS DE SIMULACIÓN PARA CARBONES DE BOYACÁ, CUNDINAMARCA Y GUAJIRA.....	70

## **TITULO: MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE UN GASIFICADOR DE CARBÓN PARA LA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO\***

**AUTORES:** CARO GONZÁLEZ, William Enrique. RUEDA NUÑEZ, Julio Cesar\*\*

**Palabras Claves:** Gasificación, Hidrogeno, Carbón, Simulación, Modelamiento, ASPEN HYSYS.

### **RESUMEN**

El objetivo de esta tesis es investigar una tecnología limpia y promisorio como lo es la gasificación de carbón. Este trabajo presenta el modelamiento y simulación de un sistema de gasificación de carbón para la producción de hidrogeno en un gasificador de flujo entrante. La propuesta de este estudio es desarrollar una evaluación previa para diseñar un gasificador de carbón empleando el simulador de procesos ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup>.

La influencia de la relación de alimento de carga (carbón / oxígeno y carbón/vapor) en la temperatura y composición de hidrogeno en el gas de síntesis es motivo de estudio en el presente trabajo. Tres tipos de carbones Colombianos se evaluaron para examinar cual ofrece los mejores resultados de producción de hidrogeno.

Los resultados de la simulación muestran que el oxigeno como agente oxidante tiene un efecto significativo en la composición del gas de síntesis, en la temperatura del reactor y por consiguiente, existe un rango óptimo de relación de carbón / oxígeno donde las concentraciones de H<sub>2</sub> y CO muestran los valores máximos.

---

\* Tesis de pregrado

\*\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Dr. M.Sc. VIATCHESLAV KAFAROV

**TITLE: MODELING AND SIMULATION OF A COAL GASIFIER FOR HYDROGEN PRODUCTION\*.**

**AUTHORS:** CARO GONZÁLEZ, William Enrique. RUEDA NUÑEZ, Julio Cesar\*\*

**Keywords:** Gasification, Hydrogen, Coal, Modeling, Simulation, ASPEN HYSYS.

**ABSTRACT**

The aim of this thesis is to investigate a promising clean coal technology gasification. This work presents modeling and simulation of coal gasification system for hydrogen production for an entrained flow coal gasifier. The purpose of this study is to develop a previous evaluation to design a coal gasifier using the ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup> process simulator.

The influence of feedstock ratio (coal / oxygen and coal / steam) in the temperature and syngas composition was studied in this work. Three types of Colombian coals were used to be evaluated in order to examine which one offers major results of hydrogen production.

The results of simulation shows that oxygen has an strong effect in syngas composition, in reactor temperature and therefore, there is a optimum range of feedstock ratio (coal / oxygen), where concentrations of Hydrogen and carbon monoxide reach maximum values; these results are agree with the literature data for the coal gasification systems. In the same way, other parameter that is important is the steam flowrate because it's a control mechanism of temperature reactor.

---

\* Undergraduate thesis

\*\* Faculty of Physicochemical Engineering. School of Chemical Engineering. Director: Dr. M.Sc. VIATCHESLAV KAFAROV

## INTRODUCCIÓN

El hidrógeno puede llegar a convertirse en un vector energético en las próximas décadas, con la posibilidad de emplearse en mecanismos de combustión o celdas combustibles sin producir contaminación, especialmente sin emisiones de CO<sub>2</sub>. El hidrógeno se genera a partir de cualquier hidrocarburo, agua y diversos subproductos de la industria. La elección del método de producción depende de la disponibilidad local de recursos y del costo total de producción.

El carbón es el combustible fósil más abundante del mundo, tanto, que sus reservas probadas han sido definidas en más de 100 países y, con la rata actual de producción, su vida útil sería superior a 200 años, en contraste con las reservas de petróleo y gas cuyas duraciones previstas son de 40 y 60 años respectivamente.

Se predice que el carbón continuará jugando un papel importante en la producción energética mundial y enfrentará en un futuro inmediato un incremento en la demanda. No obstante, el uso del carbón enfrenta grandes retos, el mayor es la considerable emisión de CO<sub>2</sub>, SO<sub>x</sub> y NO<sub>x</sub>, cuyos compuestos conducen a la desestabilización del efecto invernadero evidenciado por el cambio climático actual y la polución del aire.

El proceso de gasificación consiste en la oxidación parcial del carbón para formar gas de combustible o gas de síntesis: monóxido de carbono, hidrógeno, y metano. Además, de otros productos que no son combustibles como los son el dióxido de carbono y el agua que se forma durante el proceso. La gasificación de carbón se considera como una tecnología limpia y promisoría para reducir emisiones

contaminantes para el medio ambiente por generar corrientes con alta concentración de CO<sub>2</sub> que mejoran el potencial de captura.

La utilización industrial de hidrógeno abarca la producción de diferentes productos tales como electricidad, amoníaco, oxy-químicos, gas de síntesis, metanol e hidrógeno; pero su impacto más relevante esta en la producción de energía eléctrica en donde el hidrógeno contenido en el gas de síntesis producido a partir de gasificación de carbón reacciona electroquímicamente con oxígeno en distintos tipos de pilas combustibles, siendo la mejor alternativa de producción de energía limpia debido a su alta eficiencia y bajas emisiones.

## 1. MARCO TEÓRICO

### 1.1 GENERALIDADES

Los sistemas de gasificación son una propuesta promisorio para la generación eficiente de energía limpia así como también para la poligeneración de una gran variedad de productos, tales como: vapor, azufre, hidrógeno, metanol, amoníaco y otros. Los gasificadores emplean gas natural, residuos de petróleo, coque del petróleo, desechos de refinería, carbón, biomasa y otros combustibles, para producir un gas de síntesis que contiene monóxido de carbono (CO), hidrógeno (H<sub>2</sub>), y otros compuestos. El gas de síntesis puede ser procesado para producir combustibles líquidos o gaseosos, químicos, y energía eléctrica. En años recientes, la gasificación se ha tenido en cuenta como una opción para la generación de energía en refinerías de petróleo, donde actualmente existe una escasez de mercados para los residuos líquidos de bajo precio y coque [1].

En el mundo se encuentran alrededor de 160 plantas modernas de gasificación en operación y 35 plantas en etapa de planeación. Los productos primarios que son producidos en cada planta incluyen electricidad, amoníaco, oxy-químicos, gas de síntesis, metanol e hidrógeno, como se resume en la **Tabla 1**; la gran mayoría de estas plantas se encuentran localizadas en Europa o en los Estados Unidos.

Los materiales de alimento al gasificador incluyen carbón, gas natural (para aplicaciones de reformado), residuos de refinería y biomasa/desechos en combinación con carbón, como se muestra en la **Tabla 2**. La mayoría de proyectos de gasificación están basados en la utilización de carbón.

## 1.2 EL CARBÓN EN COLOMBIA

Colombia es el cuarto exportador de carbón a nivel mundial y posee las mayores reservas de carbón en Latinoamérica, la industria carbonífera nacional ha mostrando un crecimiento sostenido en su producción, pasando de 8.9 millones de toneladas en 1985 a 49.5 millones de toneladas en el 2003. Igualmente paso de exportar 3.5 millones de toneladas a 45.6 millones de toneladas en el mismo periodo de tiempo.

En las décadas de los 70, 80 y 90 se presento un aumento substancial de la exploración y los estudios de factibilidad de los principales yacimientos carboníferos del país. Luego de la etapa de exploración, se reconoció la importancia de realizar programas de investigación y desarrollo tecnológico del carbón con la participación de Colciencias, universidades y centros de investigación del país, contando con el apoyo de instituciones científicas europeas y norteamericanas [1].

**Tabla 1.** Productos producidos por gasificación de combustibles fósiles [4].

Producto	Producto primario		Producto secundario
	Planta en operación	Planta planeada	
Electricidad	35	25	6
Hidrógeno	11	1	11
Amoniaco	34	3	1
Gas de síntesis	14	1	2
Metanol	12	1	11
Oxy-químicos	22	0	1
Dióxido de carbono	7	0	5
Otros	25	4	0
Total	160	35	37

**Tabla 2.** Alimentos usados en plantas de gasificación [4].

<b>Alimento</b>	<b>Plantas en operación</b>	<b>Plantas planeadas</b>
Carbón	27	14
Carbón/Coque	3	1
Coque	5	7
Gas natural	22	0
Biomasa	12	3
Fuel oil / Residuos de crudo pesado	29	2
Desechos municipales	5	0
Naphta	5	0
Residuos de vacío	12	2
Desconocido	40	6
Totales	160	35

### **1.3 GASIFICACIÓN DE CARBÓN.**

La gasificación de carbón es un proceso en que el carbón es parcialmente oxidado para formar gases combustibles tales como el monóxido de carbono, hidrógeno y metano. Igualmente son producidos gases no combustibles como el dióxido de carbono y agua.

El proceso general de gasificación puede ser dividido en cuatro etapas, obteniéndose una mezcla de gases, líquidos y sólidos.

El primer paso es el secado, donde la humedad de carbón alimentado al gasificador se evapora, en esta etapa la temperatura se incrementa alrededor de 427 °C, a continuación se inicia el segundo paso el cual se denomina pirolisis, durante este paso los componentes volátiles del carbón se evaporan formando una mezcla gaseosa de hidrógeno, óxidos de carbono, hidrocarburos livianos, alquitrán, aceites y fenoles. En la pirolisis el peso de carbón inicialmente

alimentado se reduce cerca del 70%, pero el poder calorífico de los gases y de los líquidos de la cámara producidos es solo alrededor del 50% del valor inicial del poder calorífico del carbón alimentado al gasificador. El restante 50% del poder calorífico está contenido en una corriente residual denominada cenizas.

Las cenizas están compuestas principalmente por minerales contenidos en el carbón, y carbón sin reaccionar durante la pirolisis. Adicionalmente la ceniza contiene hidrocarburos pesados que son formados por combinación y re-polimerización de los compuestos volátiles formados durante la pirolisis. Para lograr un proceso total de gasificación con una máxima eficiencia, y disminuir la cantidad de cenizas el proceso se debe llevar a temperaturas que excedan los 677 °C para que alcancen a reaccionar el carbón fijo y los compuestos de alto peso molecular.

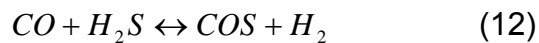
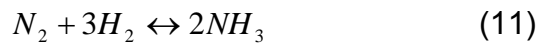
Al igual que la conversión de la ceniza, la gasificación, es un proceso considerablemente más rápido que la pirolisis, siendo la tasa de gasificación de cenizas lo que influye principalmente en el dimensionamiento y diseño total del reactor de gasificación.

Aún cuando las reacciones globales que toman lugar durante el proceso de gasificación no son complejas, el establecimiento de las relaciones cinéticas entre las diferentes especies sí lo es. El mecanismo completo de reacción es un poco más complejo e incluye radicales libres y una gran cantidad de reacciones elementales incluyendo la formación de fenoles e hidrocarburos pesados que forman alquitrán.

Las reacciones básicas que toman lugar en la gasificación de carbón son:



Aparte de las especies consideradas en las anteriores reacciones, se producen diversos compuestos altamente contaminantes como son:



❖ **Compuestos de Azufre:** Más del 90 % del azufre en el alimento del gasificador es convertido a ácido sulfhídrico ( $H_2S$ ) y el resto es convertido a ( $COS$ ). Compuestos como el  $SO_2$  y  $SO_3$  son despreciables en el gas de síntesis.

- ❖ **Compuestos de Nitrógeno:** El nitrógeno entra al gasificador como impureza de la unidad separadora de aire y el contenido en el carbón. El gasificador produce principalmente amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) con cantidades despreciables de NO o  $\text{NO}_2$ .

### 1.3.1 Elección Del Medio De Gasificación, Oxígeno O Aire.

Debido a que algunas de las reacciones del proceso de gasificación son endotérmicas, el calor requerido para que se lleven a cabo las reacciones es suministrado por la combustión de una fracción del carbón alimentado al gasificador, como se muestra en la reacción (2).

Para que se lleve a cabo la combustión se requiere un flujo de oxígeno en el alimento al gasificador; en este punto se encuentra la posibilidad de escoger oxígeno o aire. Los criterios de selección entre aire y oxígeno son generalmente la temperatura y presión de operación del gasificador. Debido a que el aire contiene alrededor de 79 % de nitrógeno, el uso de aire requeriría que la cantidad de carbón que se quema deba ser mayor que cuando se usa oxígeno para mantener la temperatura del gasificador.

El uso de oxígeno en vez de aire puede ser favorable cuando se opera el gasificador a presiones elevadas. Los gases alimentados al gasificador deben ser comprimidos a la presión de operación del reactor, lo que generaría que el nitrógeno presente en el aire incremente el trabajo requerido para compresión. En el **ANEXO A** se presenta una exposición de los sistemas de separación de aire.

### **1.3.2 Manejo Del Carbón.**

El manejo de carbón involucra descargues de carbón desde barcos (tren, camión, o barcaza) y almacenamiento, moviéndolo a través de molinos de atrición o discos, y posteriormente para su alimentación al gasificador se utilizan bombas de desplazamiento positivo. La sección de manejo típico de carbones contiene un tren de operación y uno de repuesto. Un tren consiste de un ferrocarril con un carro que vierte o descarga el material en una tolva, posee alimentadores por vibración, bandas transportadoras, bascula en cinta transportadora, separadores magnéticos, sistema de muestreo, almacenamiento a granel, apilador, recuperador, así como también un sistema de supresión de polvo.

La preparación del slurry (lodo) tiene de uno a cinco trenes de operación con un tren de reserva. El tren esta constituido de alimentadores por vibración, transportadores de sólidos, bascula en cinta transportadora, molinos de barras, tanques de almacenamiento, y bombas de desplazamiento positivo para acarrear el alimento al gasificador. Todos los equipos tanto los que se utilizan para el manejo del carbón así como los que transportan el slurry se encuentran disponibles comercialmente. El alimento de carbón se tritura en molinos de barras húmedos. El slurry de carbón contiene aproximadamente 66.5 % de peso porcentual de sólidos y es alimentado al sistema de gasificación, los cuales junto con el agente oxidante entran a una cámara refractaria para que reaccionen. El slurry se acarrea hacia el gasificador a alta presión por medio de bombas de carga. El agua en el slurry actúa como moderador de temperatura y además que el agua es una fuente de hidrógeno durante la gasificación.

### **1.3.3 Gasificadores De Carbón**

El proceso de oxidación exotérmico suministra el calor para las reacciones endotérmicas de gasificación. Agua o vapor se usa como fuente de hidrólisis en

las reacciones de gasificación. El tipo de reactor usado es la base primordial para clasificar los diferentes tipos de de gasificadores.

Existen tres tipos de tecnologías, clasificadas por la configuración geometría de flujo del gasificador:

- ❖ **Gasificadores de flujo entrante:** el carbón pulverizado y los gases fluyen en paralelo a grandes velocidades. Este es el tipo de gasificador más usado para gasificación de carbón.
- ❖ **Gasificadores de lecho fluidizado:** las partículas de carbón son suspendidas en el flujo de gas, el carbón alimentado es mezclado con los gases produciéndose la gasificación.
- ❖ **Gasificadores de lecho movable (lecho mezclado):** los gases fluyen relativamente lento a través del lecho de carbón de alimento.

Cada una de las tecnologías tiene ventajas y desventajas, junto con diferentes aspectos comerciales. En términos generales, los gasificadores de flujo entrante Shell y Texaco son usados en alrededor del 75 % de los proyectos existentes y en gran parte de las plantas de gasificación en proyecto de construcción en el mundo.

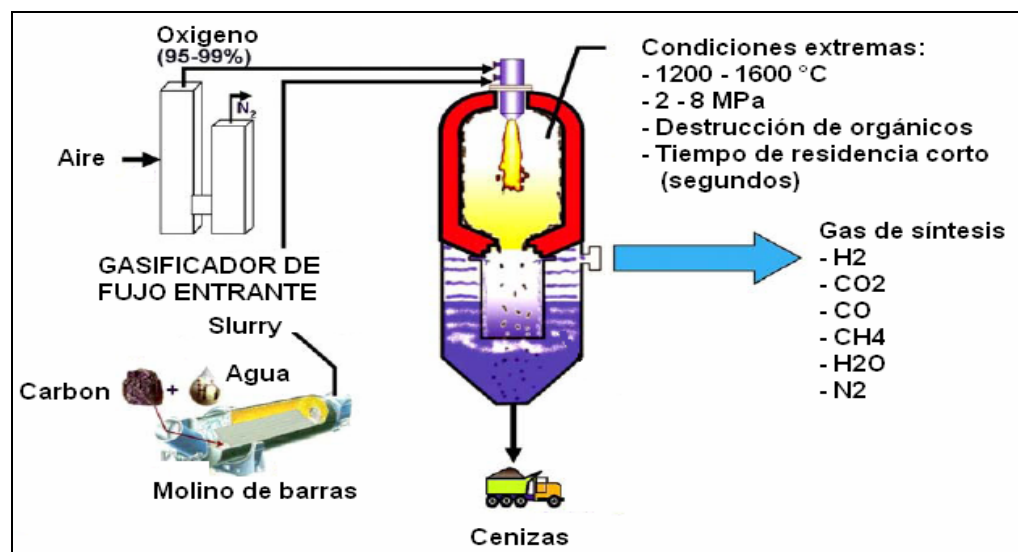
Debido a la gran cantidad de proyectos y plantas existentes en el mundo que utilizan gasificadores de flujo entrante, a continuación se estudia su configuración.

#### **1.3.4 Gasificadores De Flujo Entrante.**

Los gasificadores de flujo entrante son los gasificadores más usados con siete diferentes tecnologías disponibles (BBP, Hitachi, MHI, PRENFLO, SCGP, E-Gas y

Texaco). En estos gasificadores, el carbón y otras partículas sólidas combustibles reaccionan en suspensión con vapor y oxígeno (o aire). El carbón puede ser alimentado seco (se usa comúnmente nitrógeno como gas de transporte para crear una atmósfera inerte y de esta forma evitar posibles explosiones en las líneas de transporte, puesto que se están manejando particulados finos) o húmedo (transportado como slurry), el agua actúa como moderador de calor, y por tanto el gasificador puede ser operado a presiones altas, ver la **Gráfica 1**.

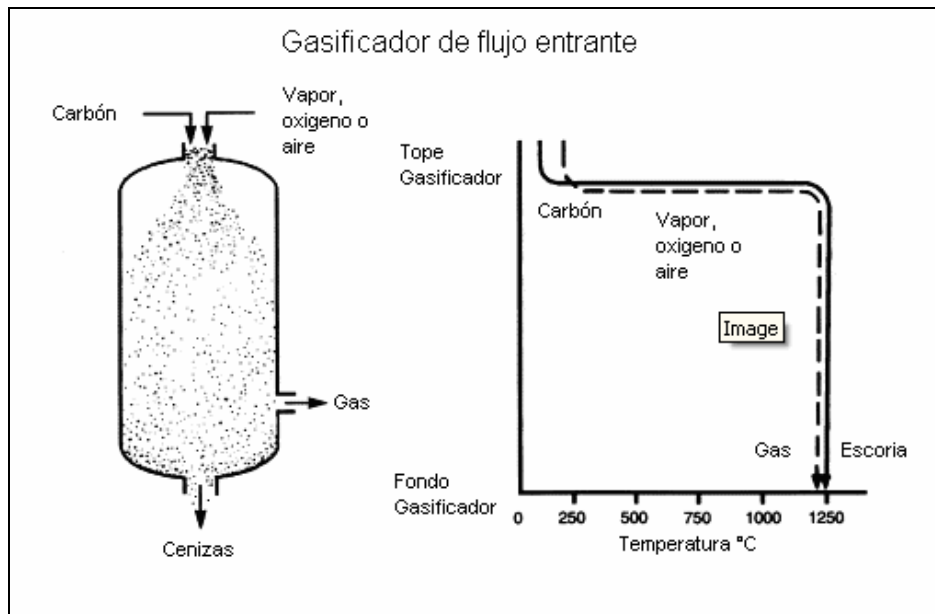
**Gráfica 1.** Esquema de un gasificador de flujo entrante<sup>1</sup>.



Presiones de operación más altas conducen a una capacidad incrementada de producción de gas dependiendo del tamaño del gasificador determinado para tal fin. Los gasificadores de flujo entrante usualmente operan a temperaturas entre 1200 °C – 1600 °C y presiones en el rango de 2 – 8 MPa como se muestra en la **Gráfica 2**, donde la mayoría de plantas operan alrededor de 2.5 MPa.

<sup>1</sup> Tomado de la compañía de servicios de gasificación Eastman, 2005.

**Gráfica 2.** Principio de operación del gasificador de flujo entrante [2].



Algunas unidades, con un tiempo de residencia de los gases de unos pocos segundos, tienen una elevada capacidad de carga pero esto requiere que el sólido sea pulverizado a un tamaño igual o menor a 0.1 mm. Cambios rápidos en el combustible de carga son difíciles de manejar, debido a que el valor de oxidación se debe mantener en un rango reducido para mantener una llama estable en el inyector y de esta forma mantener la estabilidad de la operación.

Los gasificadores de carbón de flujo entrante son el tipo de gasificador más versátil, pueden aceptar combustibles sólidos y líquidos, y operar a altas temperaturas (por debajo del punto de fusión de las cenizas) logrando altas conversiones de carbón y un gas de síntesis libre de alquitrán y fenoles.

Debido a razones económicas y técnicas, son preferidos carbones con bajo contenido de ceniza. Si las condiciones de operación del gasificador se mantienen constantes, un aumento en el contenido de ceniza puede generar una disminución en la eficiencia de la gasificación y un aumento en la producción de escoria y su

posterior disposición. Estos tres factores contribuyen a un aumento del costo total del proceso.

Igualmente se requiere un contenido mínimo de cenizas en el carbón dependiendo de la tecnología, los gasificadores SCGP (>8%), BBP e Hitachi (>1%), debido a que un bajo contenido de cenizas produciría un aumento en las pérdidas de calor ya que la capa de cenizas formada en la pared del reactor funciona como aislante.

La resistencia de los gasificadores de flujo entrante a Sulfuros y Halógenos difiere en cada proceso. Depende de la composición y resistencia de los materiales usados en los sistemas de enfriamiento y limpieza pero también en las condiciones de operación del proceso (especialmente temperatura de operación).

La alimentación, oxígeno y vapor se introduce en la cima del reactor. La gasificación toma lugar rápidamente a temperaturas superiores de 1250 °C. el alimento se convierte fundamentalmente a H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, sin hidrocarburos líquidos. El gas sale por el fondo del reactor a temperaturas de 1250 °C y superiores. El gas saliente contiene bajas cantidades de metano y sin ningún otro tipo de hidrocarburos debido a la alta temperatura de salida del gas de síntesis.

Los gasificadores de flujo entrante utilizan típicamente oxígeno como oxidante y operan a temperaturas altas por encima de las condiciones de punto de fusión de la escoria para asegurar una conversión razonable de carbono, de tal forma que suministre un mecanismo para la remoción de cenizas.

La gasificación de flujo entrante tiene la ventaja sobre otros diseños en cuanto a que se puede emplear casi todo tipo de carbones, posee ventajas relacionadas con las características de aglutinamiento, debido a la cantidad de finos de carbón que se manejan.

La ventaja de adoptar la gasificación de flujo entrante sobre los otros gasificadores es la alta conversión de gas de síntesis que contiene cantidades insignificantes de metano y otros hidrocarburos como resultado de las altas temperaturas en los reactores de flujo entrante.

#### 1.4 ECONOMÍA DE LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO.

La economía de la generación de hidrógeno depende de una gran variedad de factores, tanto internos como externos. Los factores externos raramente pueden ser controlados por el grupo de diseño del proyecto, mientras los internos son usualmente ajustados hasta cierto punto. Los factores externos incluyen el costo de los combustibles, legislación y variaciones en el mercado, a su vez los internos pueden ser el diseño de la planta y condiciones de operación. En la **Tabla 3** se resumen las estimaciones actuales del costo de producción de hidrógeno usando diversos procesos e indica las eficiencias que se pueden alcanzar actualmente.

**Tabla 3.** Resumen de los métodos de producción de hidrógeno<sup>2</sup>.

Método	Combustible	Eficiencia Total (%)	Costo H <sub>2</sub> (US\$/GJ)	CTI* (US\$/GJ capacidad H <sub>2</sub> )
Reformado con vapor	GN, crudo	65 - 75	5 - 8	9 - 15
Oxidación parcial	GN, crudo	50	7 - 10	9 - 22
Gasificación	Biomasa, crudo, carbón	42,5 - 46,5	10 - 12, 9 - 13	33 - 34, 20 - 42
Pirolisis	Biomasa, carbón	47,9	9 - 13	15 - 19
Electrolisis	Agua, H <sub>2</sub> S	35 - 42	20 - 25 (Grandes) 11 - 42 (Pequeñas)	3 - 30 (Grandes) 32 - 486 (Pequeñas)

\*CTI: Costo Total de Inversión

Se puede observar que el método predominante de producción es el reformado con vapor, es significativamente menos costoso en capital y costo de operación

<sup>2</sup> Tomado de Padro y Putsche, 1999.

por Giga Joule de hidrógeno producido. Las predicciones actuales de la abundancia de carbón comparada con otros combustibles fósiles y el incremento en la demanda de petróleo y gas natural indican que el crudo y el gas incrementarían su precio significativamente, mientras el carbón permanecerá relativamente barato. Si estas predicciones se cumplen, la producción de hidrógeno a partir de carbón se volverá competitiva, o aun sobrepase el reformado con vapor de gas natural en términos de costo.

Cada día la legislación ambiental se vuelve más estricta con las industrias en cuanto a emisiones de agentes contaminantes como el CO<sub>2</sub>, SO<sub>x</sub> y NO<sub>x</sub>. La gasificación de carbón implica menores emisiones, debido a que genera corrientes concentradas en CO<sub>2</sub> que aumentan la posibilidad de captura, contando también con bajas emisiones de SO<sub>x</sub> y NO<sub>x</sub>. La posibilidad de disminuir emisiones y de esta forma evitar sanciones asociadas a la nueva legislación ambiental, puede llegar a ser una ventaja económica importante, a la vez que reduce el impacto ambiental. En el **ANEXO B** se encuentra una revisión de la economía de la generación de hidrógeno.

## 2. MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN.

El proceso de gasificación de carbón fue modelado y simulado empleando una herramienta comercial para la simulación de procesos tal como lo es ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup>. Para realizar el modelo y su consiguiente simulación se siguió una metodología definida, ver **ANEXO C**.

### 2.1 PLANTEAMIENTO DEL MODELO

Para elegir el tipo de gasificador a modelar y simular se considero la cantidad de plantas existentes, los proyectos diseñados en base a cada tipo de gasificador, las condiciones de operación y la composición del gas de síntesis para los tres tipos de gasificadores.

El gasificador de flujo entrante es el más usado en las plantas de proceso existentes y en las plantas que se encuentran en etapa de diseño.

Los datos de operación y la composición del gas de síntesis obtenido en los tres tipos de gasificadores se encuentran en la **Tabla 4**, se puede observar que el gasificador de flujo entrante muestra un porcentaje más alto de producción de hidrógeno y condiciones de operación más amplias con respecto a los otros gasificadores.

En base a estos criterios se selecciono el gasificador de flujo entrante, una característica importante de este gasificador es su versatilidad puesto que puede aceptar combustibles sólidos y líquidos, y operar a altas temperaturas logrando altas conversiones de carbón y un gas de síntesis libre de alquitrán y fenoles.

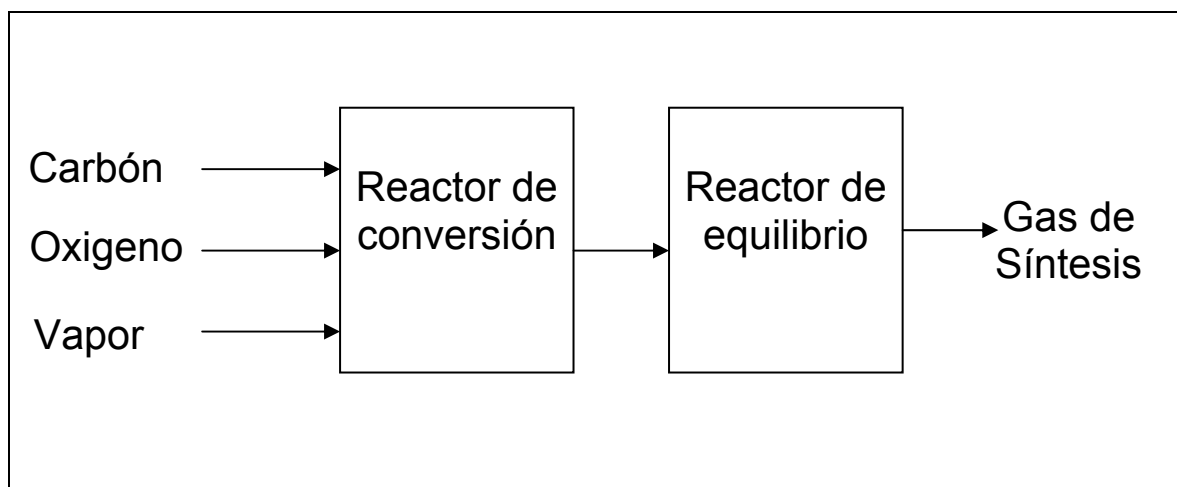
El modelo del gasificador de carbón se realizó considerando que los productos gaseosos alcanzan el equilibrio químico. El fundamento de esta consideración es la alta temperatura de operación del gasificador, lo que resulta en una alta velocidad de reacción. El diagrama de flujo del modelo es presentado en la **Gráfica 3**.

**Tabla 4.** Características de los diferentes tipos de gasificadores [2]

	<b>Lecho Movable</b>	<b>Lecho Fluidizado</b>	<b>Flujo Entrante</b>
Alimento	Seco	Seco	Seco o húmedo
Temperatura de salida (K)	600 - 810	1200	1300 - 1700
Presión (atm)	~ 28	~ 25	~ 25 - 42
Oxidante	Oxígeno	Oxígeno	Oxígeno
Conversión de carbón (%)	~ 99	~ 96	~ 97 - 99
<b>Composición del Gas (% vol.)</b>			
H <sub>2</sub>	~ 26	~ 28	~ 26 - 35
CO	~ 46	~ 33	~ 29 - 63
CO <sub>2</sub>	~ 3	~ 15	~ 1.5 - 14.5
CH <sub>4</sub>	~ 4	~ 4.6	~ 0 - 0.6
C <sub>2</sub>	~ 0.1	-	-
H <sub>2</sub> S	~ 1.0	~ 0.2	~ 0.1 - 1.3
COS	~ 0.1	-	~ 0 - 0.1
N <sub>2</sub>	~ 2.7	~ 0.6	~ 0.5 - 4.3
Ar	~ 0.6	~ 0.7	~ 0.7 - 1.1
H <sub>2</sub> O	~ 16.3	~ 16.8	~ 2.0 - 25.8
NH <sub>3</sub> + HCN	~ 0.2	~ 0.1	~ 0 - 0.2
Contenido de Alquitrán	Alto	Medio	Bajo

En el modelo se considera un acercamiento global al equilibrio sin considerar la complejidad hidrodinámica del gasificador. El gasificador se trató como un juego de reactores de conversión y equilibrio. El carbón es alimentado a un reactor de conversión en el cual se llevan a cabo las reacciones que involucran al carbón, reacciones (1, 2, 3, 4, 5 y 6). Los productos gaseosos del reactor de conversión son llevados al reactor de equilibrio en el cual se llevan a cabo las reacciones (7, 8 y 9).

**Gráfica 3.** Diagrama de flujo del modelo planteado<sup>3</sup>.



Por limitaciones en la herramienta empleada no se consideraron las reacciones (10, 11 y 12). Sin embargo, no inciden para el estudio presente puesto que la producción de estos compuestos es en cantidades muy pequeñas (trazas) comparadas con las concentraciones de los compuestos de importancia en el presente estudio.

## 2.2 SIMULACIÓN DE LA CORRIENTE DE CARBÓN

Aunque ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup> no contiene el compuesto carbón en la base de datos del programa, este brinda la posibilidad de crear compuestos hipotéticos sólidos y líquidos. El compuesto hipotético se crea suministrando los siguientes datos: propiedades del sólido, análisis de carbón y el calor de combustión. Los datos requeridos para crear los compuestos hipotéticos, esto es, los diversos carbones que fueron simulados se encuentra en la **Tabla 5**.

<sup>3</sup> Gráfica tomada de ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup>.

Como es una gasificador de flujo entrante el tamaño de partícula debe ser igual o menor a 0.1 mm [4], para el calculo de la distribución de tamaño de partícula se considero un diámetro promedio de 0.01 mm con una desviación estándar de 0.5. Estos datos son suministrados al módulo de caracterización de sólidos el cual calcula la distribución del tamaño de partícula, obteniéndose valores satisfactorios para este tipo de gasificador. Adicional a esto el software calcula las propiedades dependientes de la temperatura.

**Tabla 5.** Propiedades de los carbones de Boyacá, Cundinamarca y Guajira empleados en la simulación [1].

<b>Carbón</b>	<b>Boyacá</b>	<b>Cundinamarca</b>	<b>Guajira</b>
<b>Análisis próximo (% en peso)</b>			
Humedad	2.4	3.06	3.06
Ceniza	10	12.67	6.94
Materia volátil	25.19	20.8	35.92
Carbono fijo	61.25	63.1	45.2
<b>Análisis ultimo (% en peso)</b>			
Carbono	77.76	76.97	66.25
Hidrógeno	4.65	4.28	3.59
Nitrógeno	1.65	1.53	1.37
Oxígeno	3.53	1.85	9.48
Cloro	-	-	0.03
<b>Análisis de azufre (% en peso)</b>			
Piritico	0.17	0.5	0.11
Sulfato	0.01	0.1	0.04
Orgánico	0.62	0.97	0.28
<b>Poder calorífico(Kcal/Kg)</b>	<b>7466</b>	<b>7245</b>	<b>11586</b>

### 2.3 SIMULACIÓN DEL GASIFICADOR DE CARBÓN

Para el planteamiento del modelo se considero la ecuación de Peng – Robinson como paquete termodinámico<sup>4</sup>, esta selección se baso en recomendaciones dadas en el manual de usuario del simulador de procesos.

El modulo de caracterización de compuestos hipotéticos de ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup> no considera el contenido de cenizas del carbón, solo se cuenta con el análisis elemental, en el cual se considera el porcentaje de Carbón, Oxígeno, Nitrógeno, Hidrógeno, Azufre y Cloro. Para la presente simulación no se consideraron la producción de cenizas, para ajustar el contenido de cenizas se hizo una corrección en el set de relación de combustibles.

Para simular las corrientes de alimento y los productos, hay que especificar ciertas condiciones como presión, temperatura y composición. El proceso de gasificación de carbón, se alimenta con carbón como slurry a una temperatura de 20 °C y una presión de 2026 kPa, operando en el rango de 1200 – 1500 °C [2]. Las condiciones de las corrientes de entrada al gasificador de encuentran en la **Tabla 6**.

Como se muestra en la **Gráfica 3**, el gasificador se simula en un juego de reactores de conversión y equilibrio. Al primer reactor entran las corrientes de carga como lo son: slurry, vapor y oxígeno. Una corriente de agua y carbón se mezclan previamente en una unidad para generar la corriente de slurry (lodo), la composición del Slurry considerada fue de 66.5 % en peso de Carbón y 33.5 % en peso de Agua. Se utiliza este reactor debido a que el reactor de equilibrio no puede manejar el carbón porque es un compuesto hipotético.

---

<sup>4</sup> Manual de Usuario ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup>

Se emplearon dos reactores de equilibrio basados en la suposición que las corrientes gaseosas de salida de estos reactores alcanzan el equilibrio químico. Los modelos de los reactores están basados en la minimización de la energía libre de Gibbs del sistema, alcanzando el equilibrio químico y de fases.

**Tabla 6.** Propiedades de las corrientes de entrada al gasificador [2].

Corriente	Agua	Carbón	Oxígeno	Vapor
Temperatura (°C)	20	20	20	400
Presión (kPa)	2026	2026	2026	2026
Fracción de vapor	-	-	1.00	1.00
Composición (Fracción Molar)				
H <sub>2</sub> O	1	-	-	1
N <sub>2</sub>	-	-	0.05	-
Carbón	-	1	-	-
O <sub>2</sub>	-	-	0.95	-

Los compuestos presentes en el gas de síntesis son H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, producidos por reacción de las corrientes de entrada y compuestos sin reaccionar como N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, considerando que el carbón reacciona completamente.

## 2.4 VALIDACIÓN DEL MODELO

Los resultados obtenidos de la simulación del proceso de gasificación calculados por ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup> fueron comparados con los datos que se reportan en la **Tabla 4** para el gasificador de flujo entrante.

La validación del modelo se realizó comparando los datos de composición y temperatura del gas de síntesis obtenidas con el modelo planteado y los datos reportados en la literatura. Los datos obtenidos con el modelo y los datos reportados en la literatura se encuentran en la **Tabla 7**.

**Tabla 7.** Datos para la validación del modelo<sup>5</sup>.

<b>Composición del gas (% vol.)</b>	<b>Literatura</b>	<b>Modelo</b>
H <sub>2</sub>	~ 26 - 35	~ 27 - 33
CO	~ 29 - 63	~ 35 - 51
CO <sub>2</sub>	~ 1.5 - 14.5	~ 1 - 15
CH <sub>4</sub>	~ 0 - 0.6	~ 0 - 0.45
H <sub>2</sub> O	~ 2.0 - 25.8	~ 7 - 26

La validación del modelo se realizó con estos datos por no contar con resultados experimentales comparables con este modelo; a pesar de esto se observa que los datos son similares. Las diferencias entre los datos obtenidos y reportados en la literatura se puede deber a no considerar el porcentaje de cenizas en la caracterización del carbón, los factores cinéticos y la transferencia de masa que ocurre dentro del gasificador.

---

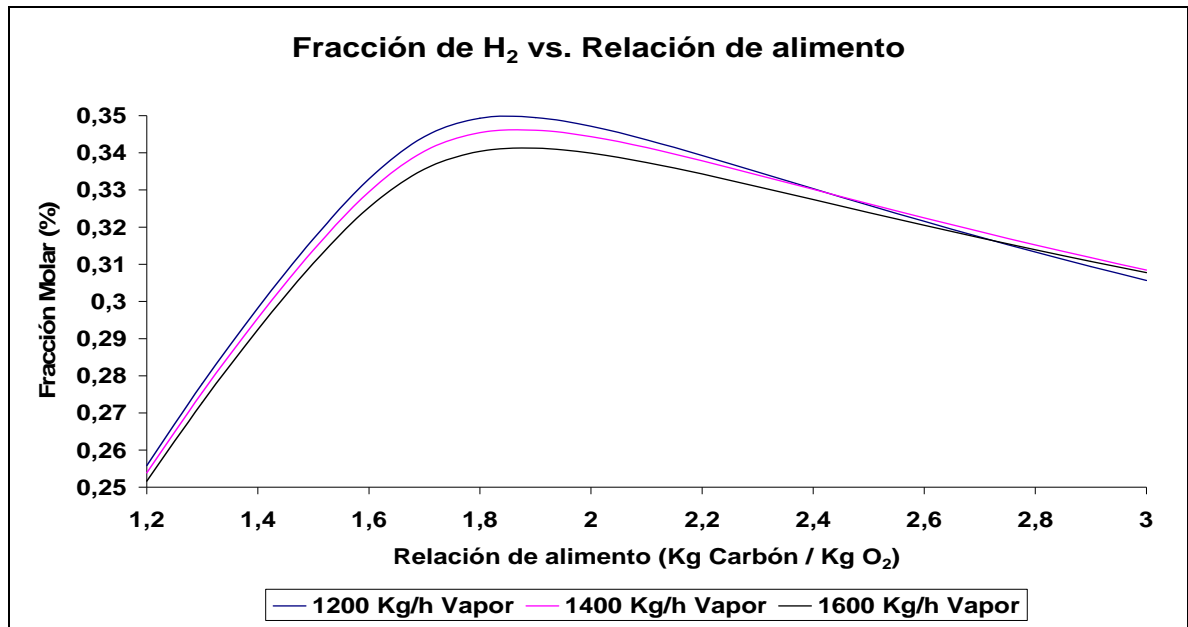
<sup>5</sup> Datos reportados en [2] y obtenidos de ASPEN HYSYS 2004.2®

### 3. RESULTADOS Y ANÁLISIS DE LA SIMULACIÓN

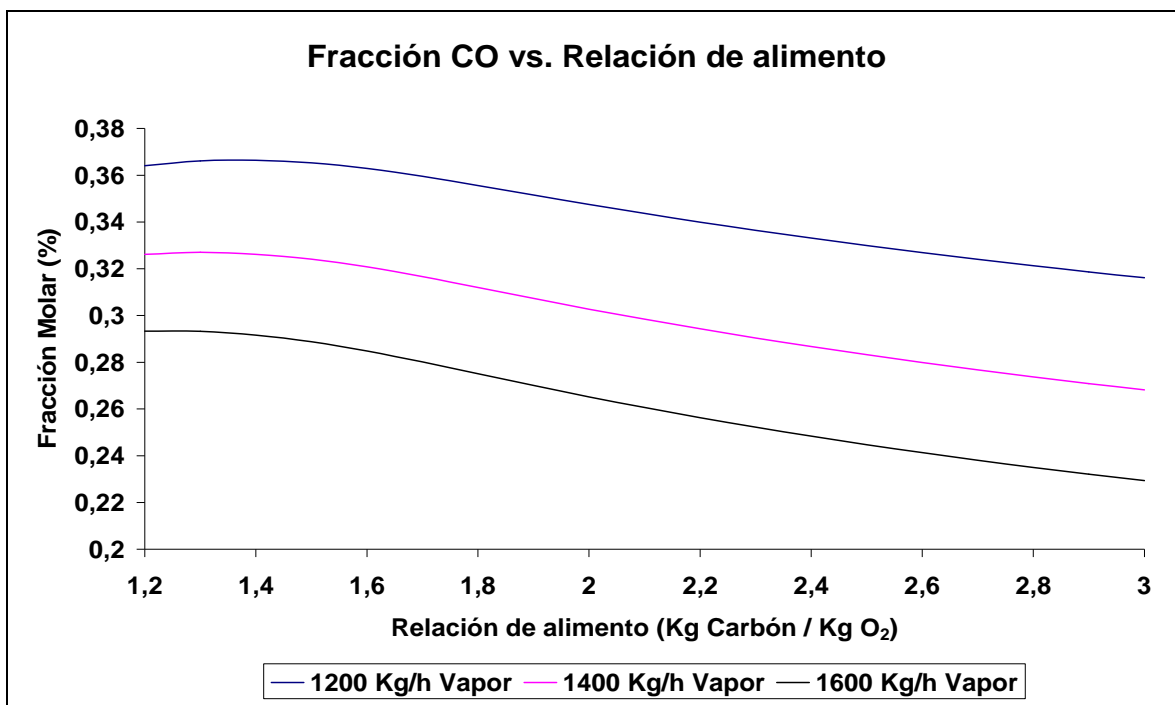
#### 3.1 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DEL PROCESO

Se consideró la relación de alimento Carbón/Vapor y Carbón/Oxígeno para observar los efectos en la composición y temperatura del gas de síntesis. En cada caso se evaluaron estos parámetros para entender como las relaciones de alimento afectan el rendimiento del proceso de gasificación y a su vez, como éste afecta la composición y temperatura del gas de síntesis. Se asume que el proceso de gasificación se opera a 2026 kPa (20 bares) empleando tres carbones colombianos cuyas composiciones se listaron en la **Tabla 5**. Los resultados en forma gráfica para el carbón de Boyacá se encuentran a continuación, junto con la comparación de los tres carbones estudiados. Los resultados totales para los carbones de Boyacá, Cundinamarca y Guajira se encuentran en el **ANEXO D**.

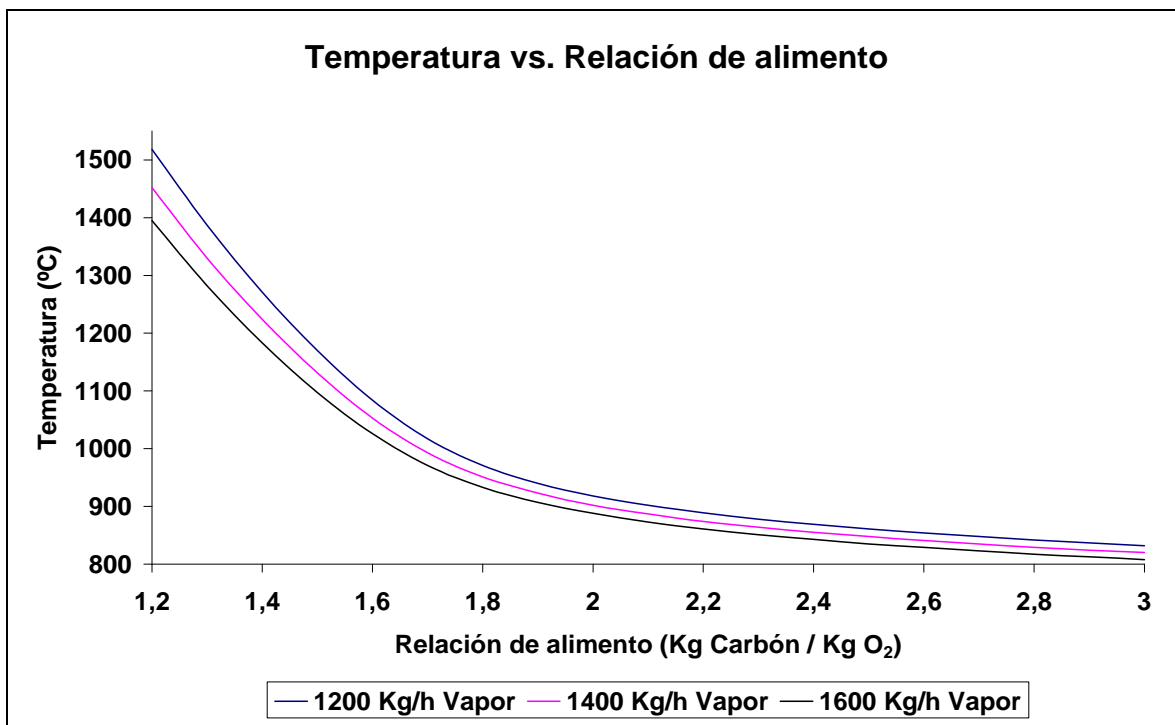
**Gráfica 4.** Composición de H<sub>2</sub> en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Oxígeno



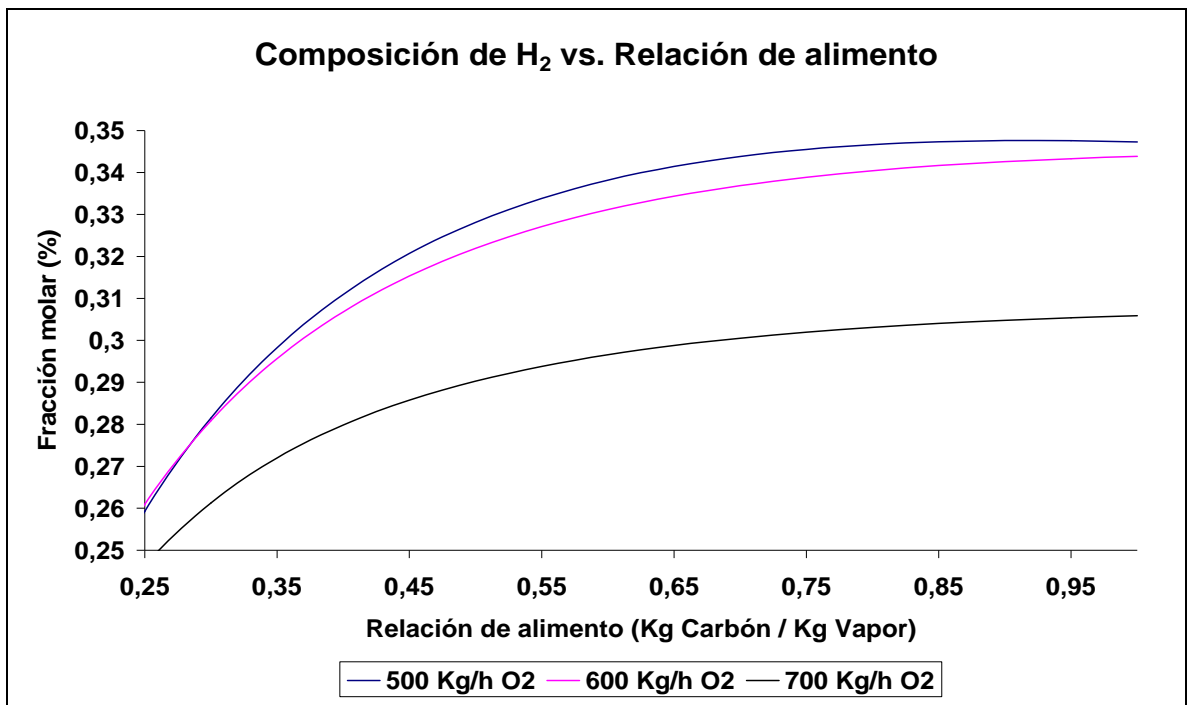
Gráfica 5. Composición de CO en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Oxígeno



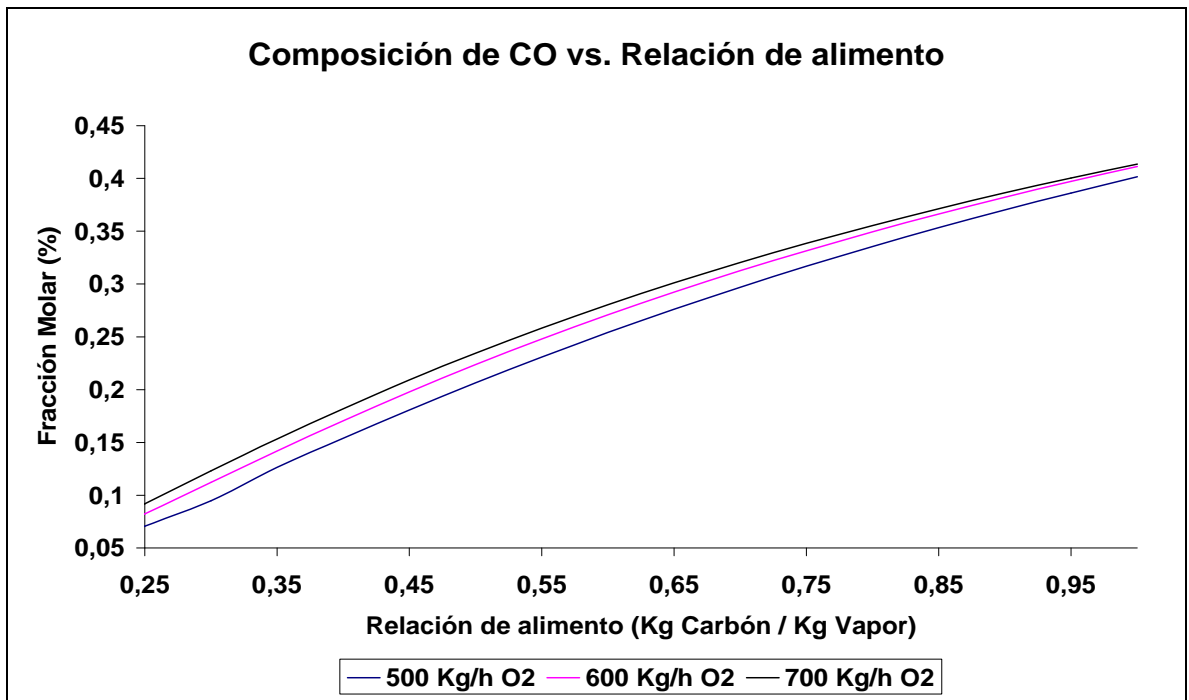
Gráfica 6. Temperatura del Gas de Síntesis vs. Relación Carbón / Oxígeno



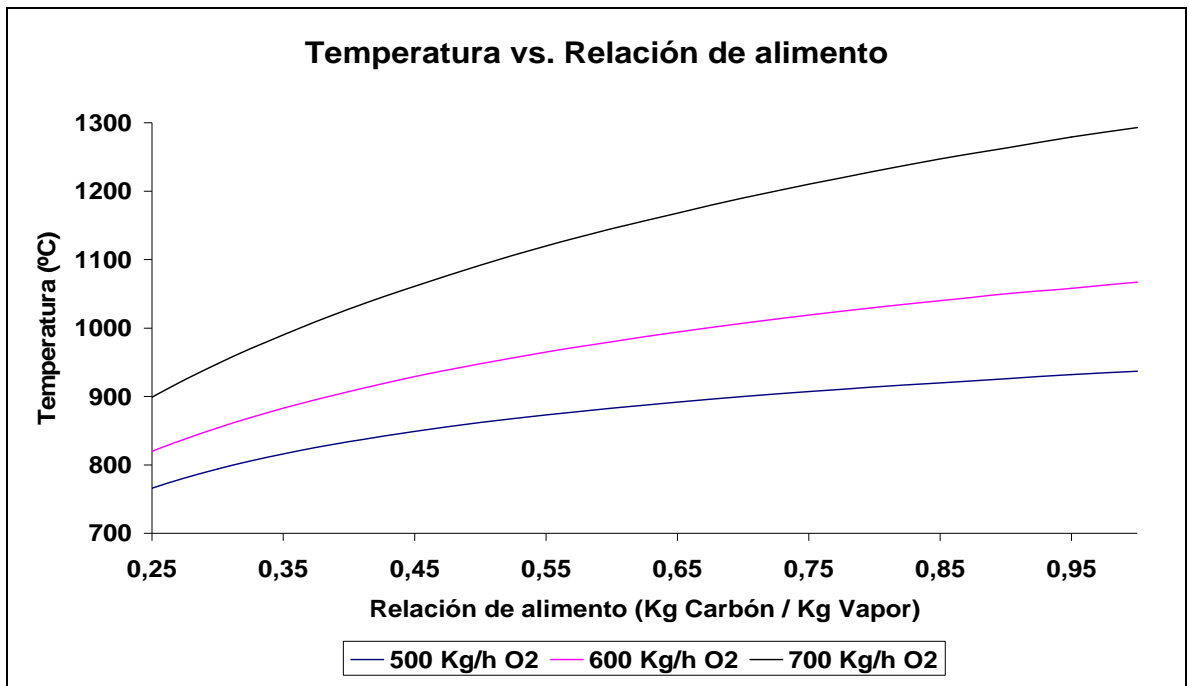
**Gráfica 7.** Composición de H<sub>2</sub> en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón / Vapor



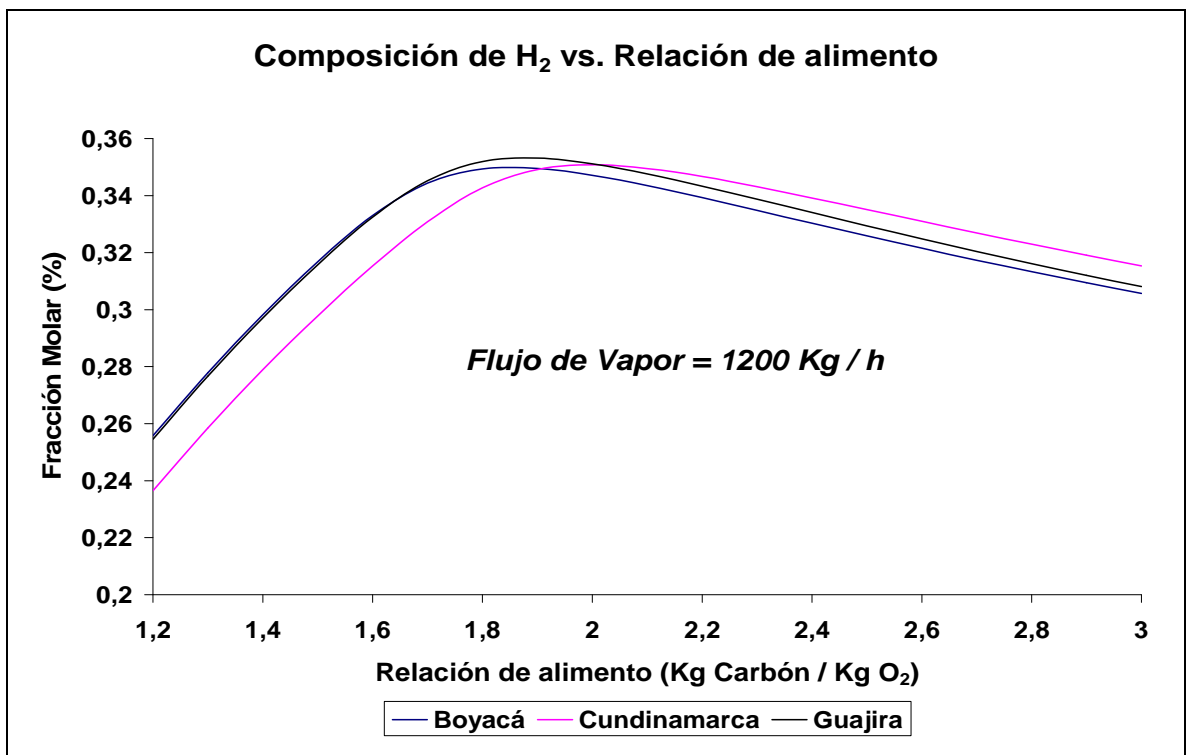
**Gráfica 8.** Composición de CO en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón / Vapor



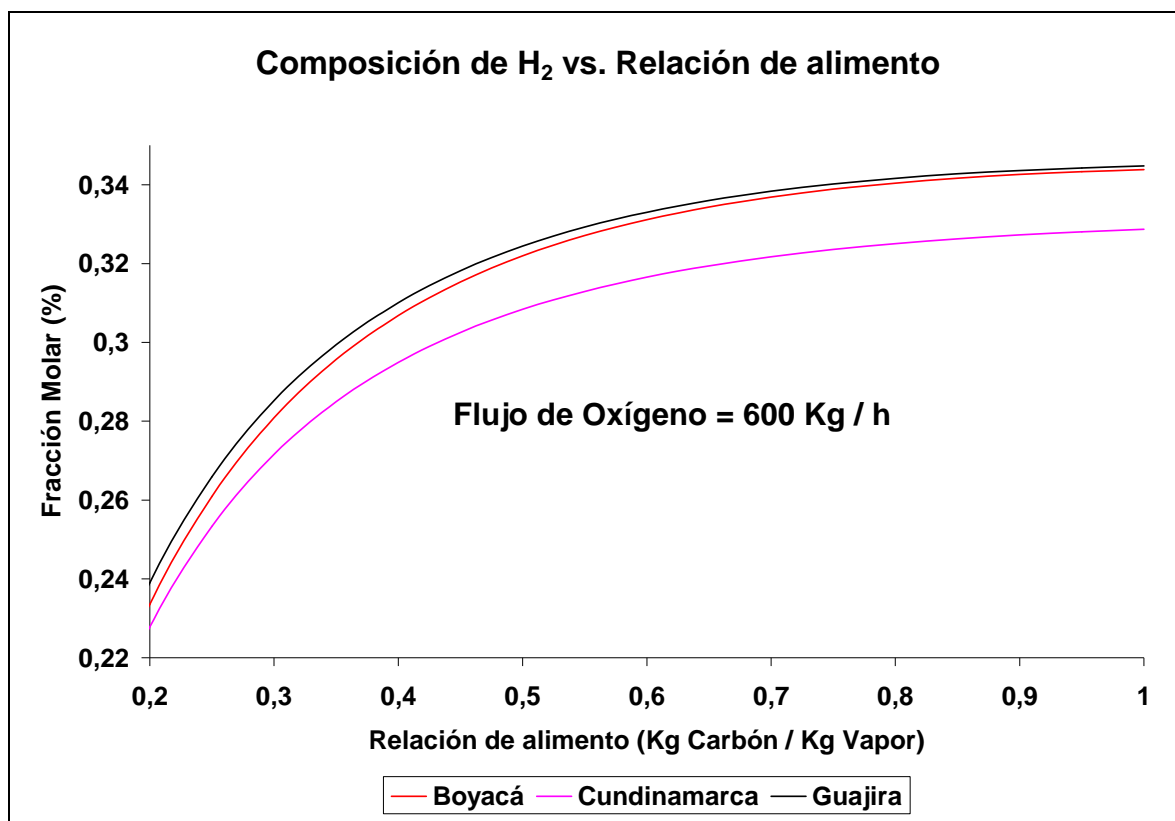
**Gráfica 9.** Temperatura del Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Vapor



**Gráfica 10.** Composición de H<sub>2</sub> en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Oxígeno



**Gráfica 11.** Composición de H<sub>2</sub> en el Gas de Síntesis vs. Relación Carbón/Vapor



### 3.2 ANÁLISIS DE LA SIMULACIÓN

En el presente trabajo se analizó el efecto de la variación de la relación de alimento carbón/oxígeno y carbón/vapor en la composición y temperatura del gas de síntesis obtenido a partir de gasificación de carbón de tres carbones colombianos.

#### 3.2.1 Efecto De La Relación Carbón/Vapor En El Gas De Síntesis.

Se observó que al incrementar el flujo de vapor conduce a una reducción moderada en las concentraciones de H<sub>2</sub> y CO. Esto se debe a que el incremento

de vapor atrapa calor y por lo tanto disminuye la temperatura del reactor, y de esta forma obstaculiza las reacciones endotérmicas del carbón.

Además, la dilución del gas de síntesis obtenido con el vapor introducido al sistema conduce a una reducción en las concentraciones del  $H_2$  y del  $CO$ . Por consiguiente el vapor podría ser un método apropiado para ajustar la temperatura del reactor por su efecto moderado en la composición de gas de síntesis.

Al analizar el comportamiento de los tres carbones se encontró que es similar, mostrando valores similares para los carbones Boyacá y Guajira y una pequeña diferencia respecto al carbón Cundinamarca en todos los casos estudiados.

### **3.2.2 Efecto De La Relación Carbón/Oxígeno En El Gas De Síntesis.**

Las gráficas muestran que la concentración del  $H_2$  y el  $CO$  se incrementan con el aumento en el flujo de oxígeno, mientras la concentración de metano permanece casi invariante. La concentración de  $CO_2$  no varía significativamente.

Se puede observar para los tres carbones existe una región óptima para la relación carbón/oxígeno (1.7 – 2.2) donde las concentraciones de hidrógeno ( $H_2$ ) y monóxido de carbono ( $CO$ ) muestran valores de 0.33 y 0.51 % en fracción molar respectivamente, y la concentración de metano se aproxima a cero. Esto podría ser debido a que el incremento del flujo de oxígeno favorece las reacciones de combustión parcial o completa, causando la disminución en la concentración de  $CH_4$  en el gas de síntesis.

Como se esperaba, el incremento en el flujo de oxígeno favorece las reacciones de combustión exotérmicas, y por ende, conduce a un incremento en la temperatura del reactor. Se encuentra un punto de cambio en la tendencia de la

temperatura del reactor con el incremento en el flujo de oxígeno, como se observa en las gráficas, esto se debe al favorecimiento de la reacción de combustión de carbón.

El punto de cambio de la temperatura del reactor aparece en el rango donde las concentraciones de  $H_2$  y  $CO$  alcanzan el máximo valor. Temperaturas mayores en el reactor representan una disminución de las concentraciones de  $H_2$  y  $CO$  en el gas de síntesis producido y por ende se consume más oxígeno. Por consiguiente, es mejor seleccionar flujos de oxígeno donde la relación carbón/oxígeno este alrededor de la región óptima par así obtener un gas de síntesis más rico en hidrogenó.

#### 4. CONCLUSIONES

- ❖ La tecnología de gasificación para la producción de hidrógeno se diseñó y se modeló conceptualmente. La propuesta de este trabajo posee ventajas en la flexibilidad del combustible, reducción de emisiones de gases de efecto invernadero con descargas muy bajas de CO<sub>2</sub>.
- ❖ El modelamiento del proceso de gasificación se ejecutó empleando el simulador de procesos ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup>, para analizar el modelo desarrollado en términos de la capacidad predictiva concerniente a la composición de gas de síntesis producido.
- ❖ El estudio de simulación muestra que el oxígeno tiene un efecto significativo en la composición de gas de síntesis, en la temperatura del reactor y por consiguiente existe un rango óptimo de relación de carbón/oxígeno donde las concentraciones de H<sub>2</sub> y CO muestran los valores máximos.
- ❖ El incremento en el flujo de vapor da como resultado una reducción moderada de las concentraciones de H<sub>2</sub> y CO, así como también incide en la temperatura del reactor, mostrando que es un mecanismo eficiente para el control de la temperatura.
- ❖ Para los tres carbones estudiados se encontró un punto óptimo diferente en la relación carbón/oxígeno, sin mostrar diferencias importantes en cuanto a la composición de hidrógeno y monóxido de carbono en el gas de síntesis.

- ❖ Los carbones de Boyacá y Guajira presentan un comportamiento similar en la composición de hidrógeno en el gas de síntesis ante la variación de la relación carbón/vapor, mostrando una pequeña diferencia con respecto al carbón Cundinamarca.
  
- ❖ No se presentan diferencias importantes en cuanto a la composición de hidrógeno en el gas de síntesis para los tres carbones debido a no considerar la fracción de cenizas presente en cada carbón por limitaciones en el simulador.
  
- ❖ Los datos arrojados por el simulador concuerdan con los datos reportados en la literatura para sistemas de gasificación de carbón, mostrando que la herramienta de simulación ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup> es adecuada para la simulación de este tipo de procesos a pesar de tener limitaciones.

## 5. BIBLIOGRAFIA

[1]. INGEOMINAS. El carbón Colombiano. Recursos, reservas y calidad. Bogotá. 2004.

[2]. KIVISAARI, Timo; BJORNBOM, Pehr; SYLWAN, Chirstopher; JACQUINOT, Bernard; JANSEN, Daniel; DE GROOT, Arend. The feasibility of coal gasifier combined with a high – temperature fuel cell. Chemical engineering journal 100 (2004) 167 – 180.

[3]. KRISTIANSEN, A. Understanding coal gasification, IEA Coal Research, London. Vols. IEACR/86. Nos. 1-3. 1996. p. 13.

[4]. MINCHENER, Andrew. Coal gasification for advanced power generation. Fuel 84 (2005) 2222 – 2235.

[5]. OTHMER, Kirk. Coal conversion processes (Gasification). Encyclopedia of Chemical Technology, Fourth Edition. Vol. 6. John Wiley and Sons. New York. 1993.

[6]. RUBIN, E. Development and application of optimal design capability for coal gasification systems. Volume 1: Technical documentation: Integrated Gasification Combined Cycle Systems (IGCC) with Carbon Capture and Storage (CCS). Department of Energy National Energy Technology Center. Pittsburgh, PA. November 2006.

- [7]. SHOKO, E; MCLELLAN, B; DICKS, A.L; DINIZ DA COSTA, J.C. Hydrogen from coal: Production and utilization technologies. International journal of coal geology 65 (2006) 213 – 222.
- [8]. TAKEMATSU, T. Coal Gasification for IGCC Power Generation, vol. IEACR/37, IEA Coal Research, London. 1991.
- [9]. USDOE and Gasification Technology Council, World Gasification Database 2001.
- [10]. WANG, Zhihua; ZHOU, Junjhu; QINHUI Wang; FAN, Jianren; CEN, Kefa. Thermodynamic equilibrium analysis of hydrogen production by coal based on coal/CaO/H<sub>2</sub>O gasification system. International journal of hydrogen energy 31 (2006) 945 – 952.
- [11]. YUEHONG, Zhao; HAO, Wen; ZHIHONG, Xu. Conceptual design and simulation study of co-gasification technology. Energy conversion and management 47 (2006) 1416 – 1428.

## 6. ANEXOS

### ANEXO A. SISTEMAS DE SEPARACIÓN DE AIRE (Air Separation Unit).

#### A.1 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE OBTENCIÓN DE AGENTE OXIDANTE

Las unidades de separación de aire criogénicas (ASU), por su sigla en inglés “Air Separation Units” son usadas en un amplio rango de flujos y purezas. Plantas criogénicas son capaces de producir oxígeno con purezas que exceden el 99.5 %. Se usan exclusivamente para producciones de oxígeno a gran escala, entre 600 toneladas/día hasta aproximadamente 8000 toneladas/día.

Históricamente, la mayoría de sistemas de gasificadores han empleado altas purezas en vez de aire atmosférico. El desarrollo tecnológico japonés, sin embargo, han concentrado aire mediante sistemas de aire soplado.

Las principales ventajas de gasificación por soplado de oxígeno son:

- ❖ Reduce el tamaño del gasificador y por consiguiente reduce el costo.
- ❖ Valores caloríficos más altos HHV “Higher Heating Value”<sup>6</sup>
- ❖ Maneja cantidades más pequeños de gas facilitando la limpieza del equipo debido a volúmenes de gas de síntesis más bajos y por consiguiente un costo menor.
- ❖ Intercambiadores de calor más pequeños para recuperar calor sensible del gas de síntesis previo a la limpieza.

---

<sup>6</sup> El Higher Heating Value (HHV) o valor calorífico superior de un combustible se define como la cantidad de calor liberado por una cantidad especificada (inicialmente 25 °C) una vez que hace combustión y los productos regresan a la temperatura de 25 °C.

Las desventajas de utilizar oxígeno de alta pureza como agente oxidante es la complejidad más grande en cuanto a la integración requerida de la planta. Por lo tanto, el control y la operabilidad de la planta de energía se asimilan a la puesta en marcha de una planta química. El principal reto es relacionar los requerimientos de disponibilidad, confiabilidad y flexibilidad de operación a costos competitivos sobre un largo periodo. El consumo auxiliar de energía en los sistemas de inyección o soplado de oxígeno se estima que es el 10 -15%, el doble de un sistema de soplado de aire.

Una planta típica de separación de aire consiste en dos trenes de operación paralela. No existen trenes de reserva porque la disponibilidad del producto es mayor al 99 % de las plantas grandes (Alstom, 2003). Cada tren incluye un sistema de compresión de aire, una unidad de separación de aire y un sistema opcional de compresión de oxígeno. Las plantas de oxígeno producen un alimento oxidante para el gasificador que contiene entre el 95 y el 98 % de oxígeno en volumen. Es posible recuperar Argon como subproducto comercializable de las plantas de oxígeno de alta pureza operando a una rata de pureza de un 99.5 % de oxígeno o mayor.

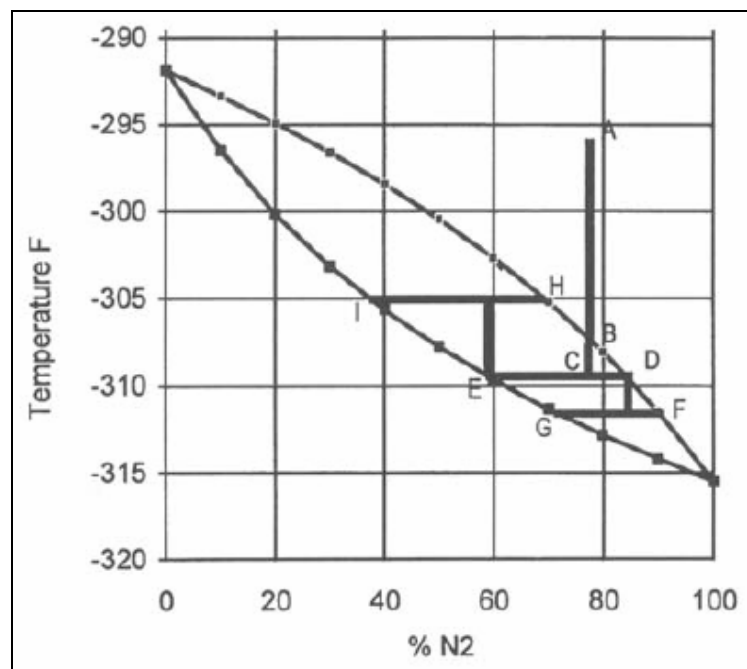
Esta sección del proceso tiene un sistema de compresión de aire, una unidad de separación de aire, y un sistema de compresión de oxígeno por cada tren. El sistema de compresión de oxígeno no es tratado para plantas de energía que operan cerca de presión atmosférica. El número mínimo de trenes de operación es de dos y no existen trenes de repuesto. El número de trenes depende del flujo total de masa de oxígeno.

## **A.2 DESTILACION CRIOGENICA**

El corazón del proceso de destilación criogénica es la columna de destilación. En esta columna el aire es separado en sus componentes. La diferencia en los puntos

de ebullición de los componentes del aire es la principal fuerza impulsora y el principio en el que se basa la columna. Esto se ilustra en la **Gráfica 1**, se muestra la temperatura versus la composición del aire, tratado como una mezcla binaria de nitrógeno y oxígeno. La línea de arriba es la línea de rocío, cuando las gotas de líquido empiezan a formarse en el gas mientras el aire se enfría, la línea de abajo es la línea de burbuja, cuando las primeras burbujas de gas se empiezan a formar en el líquido mientras el aire se calienta. El punto de ebullición para el oxígeno puro (0% de nitrógeno) se muestra en el punto superior izquierdo de la gráfica, a - 292 °F. El punto de ebullición del nitrógeno se muestra en la parte inferior derecho en la gráfica, a - 316 °F. El aire atmosférico contiene 0.93% de argón en volumen, el cual tiene un punto de ebullición de - 303 °F. Como esto está mucho más cercano al punto de ebullición del oxígeno que del nitrógeno, la mayoría del argón en el aire irá con el oxígeno a través de la columna principal de destilación. Por lo tanto, el aire puede ser tratado como 78% de nitrógeno y 22% de oxígeno para esta propuesta.

**Gráfica1.** Diagrama de equilibrio con etapa de separación (Baukal, 1998)



Siguiendo la línea oscura muestra como el proceso de separación ocurre. Aire del medio ambiente (A) es enfriado abajo del punto de rocío (B) a una temperatura entre el punto de burbuja y el punto de rocío (C). El aire es ahora una mezcla de líquido y gas, entonces es bombeado hacia la columna. La mezcla permite establecerse en un plato en la columna de destilación hasta que alcance el equilibrio térmico y las fases de líquido y vapor se separen.

La fase líquida ahora es más rica en oxígeno (E) y la fase gaseosa (D) es más rica en nitrógeno. El líquido enriquecido en oxígeno se remueve ahora y se calienta lentamente hasta una temperatura entre las líneas de líquido y burbuja. Como resultado del calentamiento del líquido se forma una espuma de vapor y líquido. La mezcla se puede enfriar hasta que alcance el equilibrio térmico y se separen las fases vapor (H) y el líquido (I). El líquido, el cual es ahora más rico en oxígeno en ambos puntos (A) y (E), se remueve y se calienta otra vez. El ciclo continua hasta que se alcance la pureza deseada.

El vapor (H) se mezcla con otra cochada del líquido en (E), suministrando el calor para cambiar el líquido a espuma. El vapor rico en nitrógeno (D) se enfría suavemente hasta que se vuelva espuma otra vez. Luego se alcanza el equilibrio, donde se separan las fase de vapor (F) y líquida (G). El vapor, ahora es más rico en nitrógeno, luego en (A) y (D), se remueve y se enfría una vez más. El líquido frío (G) se vuelve a reciclar en el vapor (D), suministrándole a esa corriente enfriamiento.

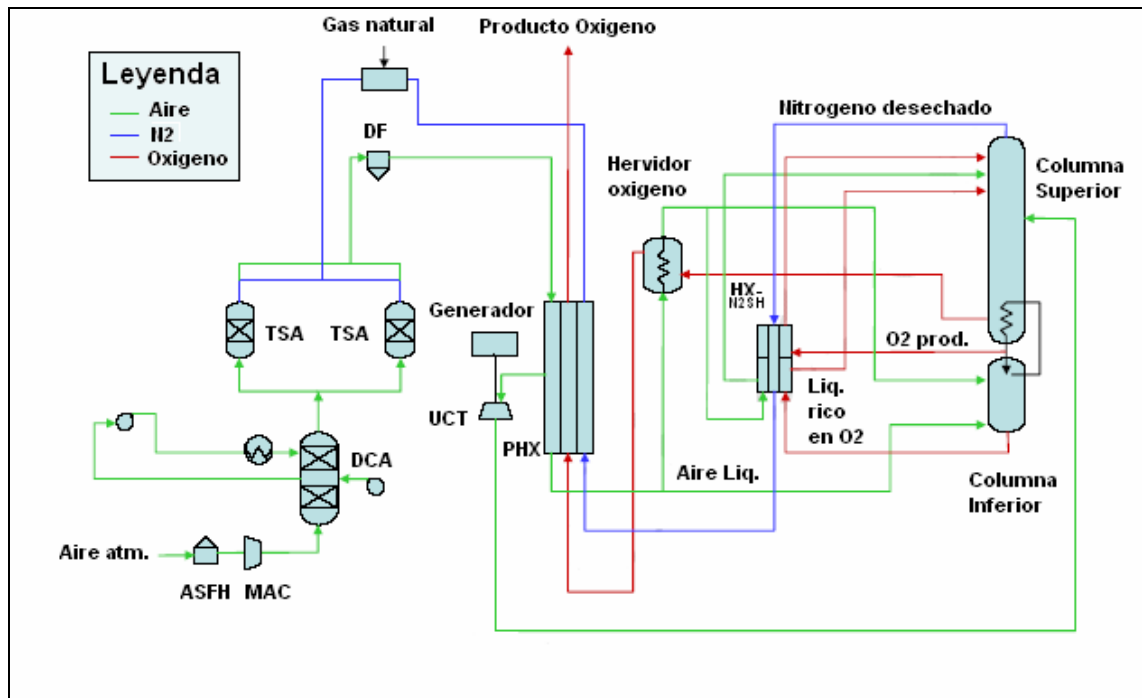
En la columna de destilación, ocurre cada separación y equilibrio en un plato perforado. Estos platos metálicos tienen muchos agujeros permitiendo que el vapor burbujee el líquido. Cuando la espuma en el plato se separa en líquido y vapor, el vapor continua ascendiendo, y a su vez haciendo contacto con el líquido procedente del siguiente plato. El líquido del plato se vierte hacia el siguiente plato a través del derramadero y cae hacia la siguiente etapa de separación. En una

columna, existe un flujo constante de vapor ascendente y un líquido en contra flujo. Mientras el vapor se mueve hacia arriba a través del plato este se vuelve más caliente y rico en oxígeno. El número de platos en la columna determina la pureza del producto.

### A.3 ÁREAS DE PROCESO DE LA UNIDAD DE SEPARACIÓN (ASU)

La unidad de separación de aire puede ser separada en varios pasos, cada uno es importante en la separación de oxígeno de manera eficiente del aire. La **Gráfica 2** muestra un diagrama del proceso criogénico entero. Las secciones que siguen describirán varias subsecciones.

**Gráfica 2.** Diagrama de flujo del proceso de la unidad de separación de aire (Alstom, 2003)



### **A.3.1 COMPRESIÓN DE AIRE.**

El aire ambiental es llevado a través de filtro de separación de aire (**ASFH**) para la remoción previa del polvo y partículas grandes de llevadas por el aire antes de ingresarlo a un compresor de aire principal de tres etapas (**MAC**). El compresor puede ser tratado isotérmicamente. El aire filtrado se comprime hasta aproximadamente unos 550 kPa (65 psig) y luego fluye a través del enfriador de contacto directo de 2 etapas (**DCA**). El aire se enfría por intercambio de calor con agua enfriada en la primera etapa y con agua enfriada suministrada por un enfriador mecánico en la segunda etapa.

### **A.3.2 PRE-PURIFICACIÓN**

El aire pos-enfriado se pasa luego por un sistema de pre-purificación. El sistema de pre-purificación usa un proceso de dos lechos (**Temperature – Swing Adsorption, TSA**) que permite una operación continua. Un lecho purifica el aire alimentado mientras el otro lecho esta siendo regenerado primero con nitrógeno caliente y luego con nitrógeno frío de desecho. Los lechos pre-purificadores utilizan un diseño adsorbente de separación (tamiz molecular y alumina) para remover agua, dióxido de carbono, y la mayoría de hidrocarburos de la corriente de aire. Mientras el agua y el dióxido de carbono tienen puntos de ebullición superiores a los del nitrógeno y oxígeno, podrían enfriarse en el intercambiador principal y eventualmente bloquear el flujo de aire. Los hidrocarburos impuros serian extremadamente peligrosos en una corriente de aire. Después de la pre-purificación, la corriente de aire se pasa por un filtro de polvo para remover cualquier particulado sólido.

### A.3.3 CORRIENTES DE AIRE DE ALIMENTO

El aire tratado entra a una construcción grande y pesada que contiene las columnas de destilación y todos los equipos de criogenia. Para plantas grandes esta construcción puede ser de 10 pisos de alto. Esta edificación se llama refrigerador (**Cold Box**), la temperatura del interior siempre esta por debajo de - 250 °F. También existen sistemas de refrigeración convencional para compensar las fugas de calor y otras no idealidades en el refrigerador. El refrigerador requiere un corriente de aire de alimento, esta corriente es enviada por un intercambiador de calor principal (**Primary Heater Exchanger, PHX**) y luego se separa en tres corrientes. Una corriente se alimenta a un rehervidor de oxígeno, la segunda corriente de aire (turbina de aire) se enfría parcialmente en el PHX y se alimenta a una turbina en la columna superior (**Upper Column Turbina, UCT**). Ajustando el flujo de aire de la turbina se puede modular la cantidad total de refrigeración generado por la caja fría. La tercera corriente de aire se alimenta por el fondo de la columna inferior.

### A.3.4 REFRIGERADOR

Los primeros diseños criogénicos tenían solamente una columna de destilación y por tanto eran ineficientes e incapaces de producir oxígenos a altas purezas. Los dos diseños de columnas, como se muestra en al **Gráfica 2**, solucionan los dos problemas mencionados. Las dos columnas están térmicamente unidas al rehervidor. El diseño de la doble columna no ha sido cambiado desde que se introdujo en la década de los treinta. La columna superior opera a presión baja y la columna inferior opera a alta presión.

La corriente de aire al rehervidor de oxígeno se enfría y se condensa en contra corriente con las corrientes de oxígeno y de desecho de nitrógeno. La corriente saliente de oxígeno y la corriente de desecho de nitrógeno son calentadas desde

temperaturas criogénicas hasta una temperatura ambiente aproximadamente. La corriente de aire enfriada se envía hacia la columna inferior y superior.

La corriente de aire de la turbina también se enfría en contra corriente con las corrientes de nitrógeno y oxígeno. Es retirada desde una lugar intermedio entre el lado caliente y el lado frío del PHX o intercambiador de calor primario. Luego se expande y se enfría en la turbina de la columna superior (**UCT**). La UCT maneja un generador que suministra energía para la planta. La corriente de aire de la UCT entra a 2/3 del camino debajo de la columna inferior de destilación (baja presión). Inyectando esta corriente directamente en la columna a baja presión incrementa el mezclado y por ende la efectividad de la columna.

La corriente de aire enfriada entra a la columna inferior y se separa el nitrógeno por la cima de la columna y aire enriquecido (líquido de caldera) por el fondo. El oxígeno crudo líquido en el fondo es aproximadamente el 45 % en pureza. El argon se retira en este punto para permitir una mejor pureza en el producto mayor al 97 %. El nitrógeno por la cima de la columna se condensa, el condensador principal se encuentra en contra corriente con el oxígeno de ebullición de la columna superior. Una porción del nitrógeno condensado procedente del condensador principal se emplea como reflujo para la columna inferior. El remanente se sub-enfría en la sección del supercalentador de nitrógeno del PHX contra las corrientes de nitrógeno gaseoso calentado procedente de la columna superior. Esta corriente de nitrógeno líquido sub-enfriado luego entra por la cima de la columna superior como reflujo. El líquido de caldera se subenfria con la corriente de flujo de nitrógeno de la sección de supercalentamiento del PHX y luego entra a la superior aproximadamente 2/3 del camino hacia abajo de la columna.

La columna superior también produce desechos de nitrógeno de la cima, este nitrógeno se podría purificar más en la columna superior y ser vendido como un

subproducto. La corriente de nitrógeno gaseoso es la corriente más fría en la planta y con frecuencia se emplea para subenfriar otras corrientes dentro del refrigerador, como se ilustra en la **Gráfica 2**. El nitrógeno se calienta en todas las secciones del PHX hasta alcanzar temperatura ambiente. El producto oxígeno se hierve en el rehervidor de oxígeno en contra corriente a la corriente de aire y luego sale como producto de alta pureza.

El oxígeno líquido cae al fondo de la columna, diferente a la columna de alta presión; este líquido es un producto de alta pureza. Cuando el producto LOX es deseado puede ser tomado de la piscina. Sin embargo, estos resultados producen pérdidas en la eficiencia y por consiguiente una salida de oxígeno gaseoso más bajo. Desde que el oxígeno requerido para la combustión sea gaseoso, se asume que grandes cantidades de LOX no son requeridas. El líquido en el fondo de la columna se envía a través del rehervidor, donde se hierve por el calor del nitrógeno condensado en la columna de alta presión.

Este gas de alta pureza es canalizado por la tubería fuera de la columna de baja presión y enviado al intercambiador de calor principal (PHX), donde enfría el aire entrante. El producto oxígeno sale cerca de la temperatura ambiente y a 115 kPa (2 psig). Si se desea el producto a alta presión, el oxígeno se comprime por medio de compresores de oxígeno.

## ANEXO B. ECONOMÍA DE LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO.

### B.1 HACIA LA ECONOMÍA DEL HIDRÓGENO

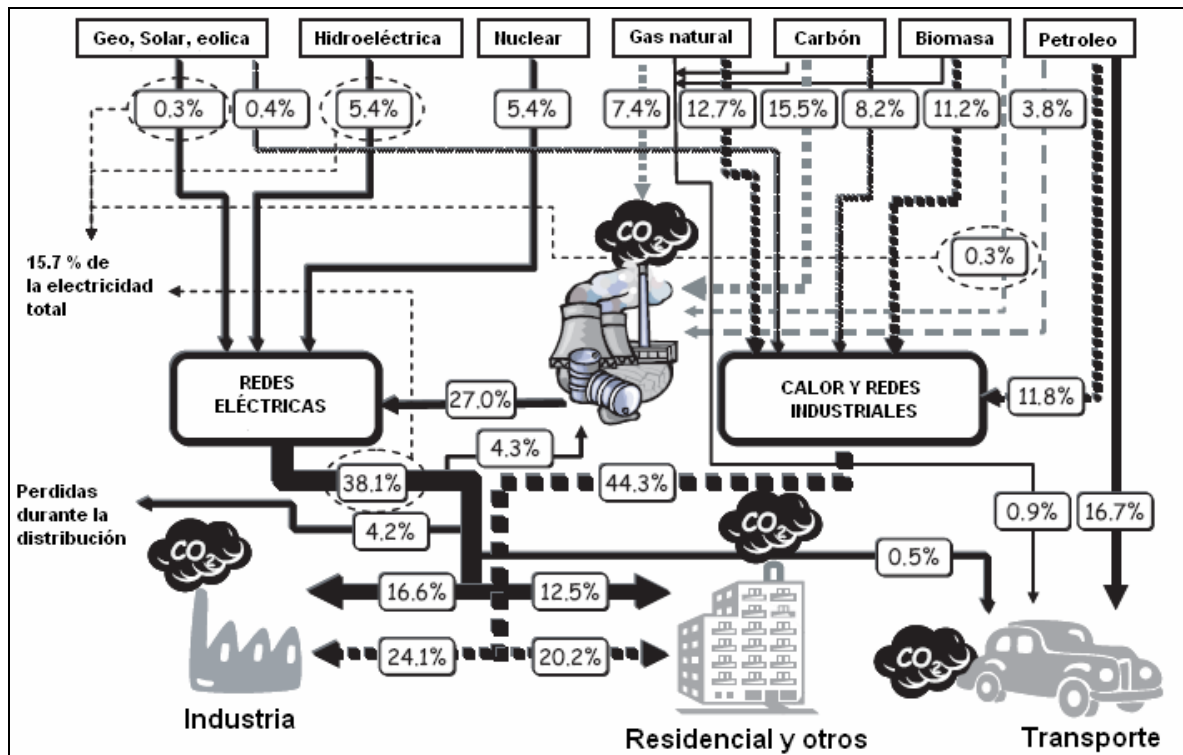
El consumo de energía primaria a nivel mundial se observa esquemáticamente en la **Gráfica 1**, 82 % de esta energía es sido transformada en calor, electricidad o movimiento por medio de procesos de combustión de combustibles fósiles, los cuales han producido emisiones de CO<sub>2</sub> a la atmósfera equivalente a 7 GTon de carbono [1], si no se da algún cambio en este escenario, las emisiones de CO<sub>2</sub> en el 2050 pueden incrementar a 14 GTon [1]. La concentración actual de CO<sub>2</sub> en la atmósfera es de 30 % sobre el nivel de la era preindustrial. Los posibles efectos ambientales que se derivan de este incremento continuo en la concentración atmosférica de CO<sub>2</sub> han obligado a la comunidad internacional a actuar. Como consecuencia de esto y medida preventiva, el protocolo de Kyoto y otros acuerdos internacionales han sido firmados para asegurar un comité internacional que reduzca las emisiones de CO<sub>2</sub>. Existe una obligación política como resultado de la necesidad de reducir las emisiones de CO<sub>2</sub>, la cuales van a cambiar todo nuestro sistema energético.

Actualmente existe un problema de dependencia energética mundial. El petróleo, el cual por estos días constituye alrededor del 33% de la energía mundial primaria ver **Gráfica 1**, se produce en un pequeño número de países organizados alrededor de la OPEP (Organización de Países Exportadores de Petróleo), caracterizada por una inestabilidad política en sus relaciones internacionales, al menos desde el punto de vista occidental. Por esta razón, el precio del petróleo esta sujeto a importantes fluctuaciones debido a razones políticas y económicas.

La guerra en Irak ha traído como consecuencia una inestabilidad en las relaciones entre Irak y EU, produciendo un incremento del precio del barril de crudo a

US \$75/Brent bbl (1 de mayo del 2006), un precio sin precedentes y exorbitante para aquellos países en vía de desarrollo, que dependen del petróleo como suministro energético.

**Gráfica 1.** Escenario actual de energía. Fuentes de consumo de energía actual, incluyendo los procesos de transformación y los usos de energía primaria a nivel mundial. [2,3 y 4]



El petróleo sin lugar a duda se está haciendo cada vez más escaso. Considerando las extrapolaciones en la tasa de crecimiento en el consumo del petróleo y la tasa de incremento de las reservas conocidas de petróleo, se puede deducir que el fin del suministro de petróleo podrá tomar lugar en el 2050 [2]. El gas natural aparece como una alternativa a mediano plazo, aunque un método similar de cálculo predice que su consumo total tomara entre 70 y 100 años. Adicionalmente hay que considerar que las naciones, sobre todo la que están en vía de desarrollo se incrementan cada día más rápido en población, lo cual lleva a

pensar que el consumo energético también se incrementara. China es el ejemplo más representativo de los países emergentes en gasto de energía, China ha incrementado su consumo del 22 % del consumo mundial en el 2000 al 35 % en el año 2004 [2]. En este país se pronostica que el número total de carros sea superior 90 veces en el 2010 en comparación con 1990. Sin embargo, cabe destacar que las emisiones de CO<sub>2</sub> per capita en China esta 3 toneladas por debajo de las 20 toneladas aproximadas por ciudadano norteamericano [5].

Por esto el hidrógeno se presenta como una alternativa a largo plazo que surge por el esfuerzo de cambiar el sistema energético actual. Lo que se pretende es imponer al hidrógeno como vector energético ya que es un combustible limpio para su utilización en celdas combustibles eficientes, las cuales transforman la energía en electricidad y calor. El hidrógeno como vector energético se debe obtener de otros recursos, en procesos, que al menos al largo plazo, eviten las emisiones y minimicen el CO<sub>2</sub>. Para el futuro de la energía mundial se deben cumplir los siguientes tres objetivos:

- ❖ Seguridad en el suministro de energía.
- ❖ Protección ambiental.
- ❖ Utilización de recursos energéticos que promuevan el crecimiento de la economía de las sociedades.

## **B.2 ¿POR QUÉ EL HIDRÓGENO?**

La cantidad de energía producida durante la combustión de hidrógeno es mayor que la liberada por cualquier otro combustible en base masica, con un valor calorífico bajo (LHV) 2.4, 2.8 y 4 veces mayor al del metano, gasolina y carbón respectivamente. Actualmente, la producción anual de H<sub>2</sub> es aproximadamente 0.1 Gton, el 98% procedente del reformado de combustibles fósiles. El hidrógeno principalmente se emplea en refinado de petróleo y producción de amoniac y

metanol. Este combustible solamente se emplea en sistemas de propulsión espacial y prototipos de vehículos, por mencionar solo algunos usos.

El hidrógeno como vector energético exhibe aspectos positivos y negativos. La ciencia y la tecnología deben intentar derivar el máximo beneficio de todos los aspectos positivos mientras minimiza los aspectos negativos en la transición en el largo y turbulento plazo que se espera. La principal ventaja del hidrógeno como combustible es la ausencia de emisiones de CO<sub>2</sub>, así como también la emisión de otros contaminantes (NO<sub>x</sub> térmicos) si se emplea a bajas temperaturas en las celdas combustibles. Esto es importante especialmente en el sector del transporte, el cual es responsable del 18 % del consumo primario de energía mundial, ver **Gráfica 1**, aparte de los intereses económicos y políticos involucrados en la sustitución de derivados del petróleo, los cuales se hacen más escasos y están sujetos a continuas fluctuaciones en los precios. Los vehículos son fuentes altamente contaminantes de CO<sub>2</sub>, lo cual dificulta la implementación de sistemas que capturen el CO<sub>2</sub> y lo almacenen. Las dos alternativas actualmente bajo consideración son hidrógeno (y su derivado bio-metanol) y bio-combustibles (bio-etanol y bio-diesel), cuya participación en las futuras economías energéticas mundiales serán competitivas.

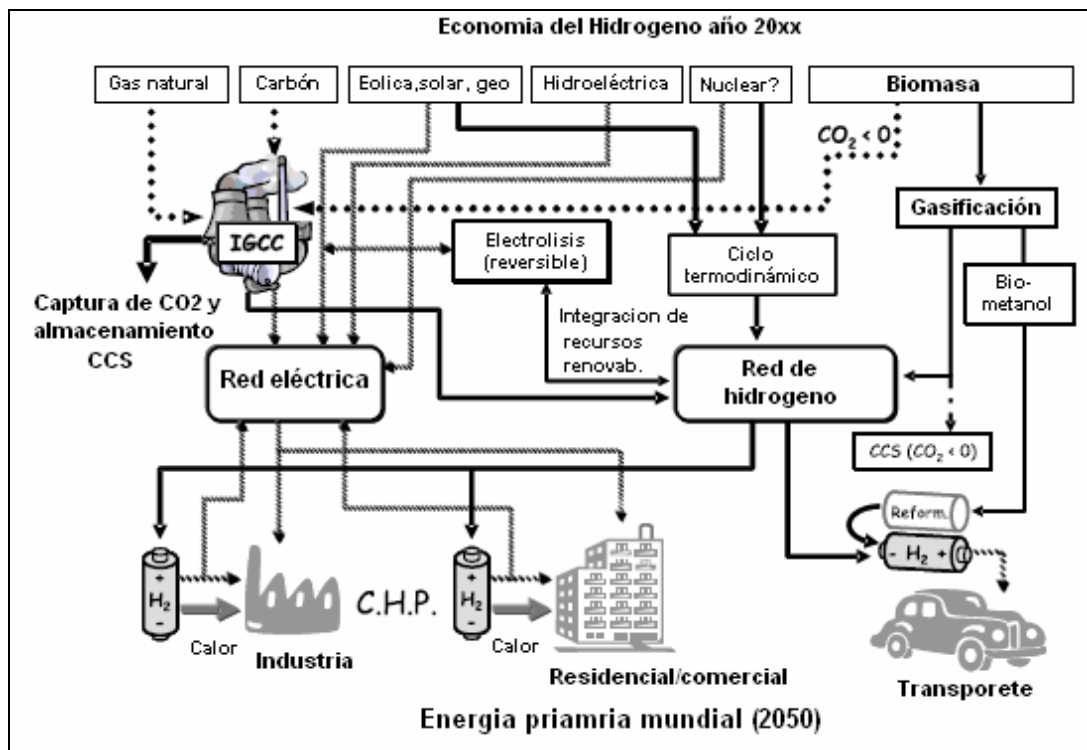
Adicionalmente se espera que el hidrógeno permita la integración de algunas fuentes de energía renovables, de carácter intermitente, en los actuales sistemas energéticos. De este modo, se puede concebir la idea de un panel solar fotovoltaico unido a una celda combustible, la cual emplea una parte de la electricidad generada para producir hidrógeno durante el día (o en condiciones ventosas), y se pueda consumir el hidrógeno durante la noche (o en ausencia de viento) para producir electricidad. A pesar de la innegable falta de eficiencia de este sistema, es claro que suministraría una entrega ininterrumpida de electricidad.

Sin embargo, como se menciona antes, el hidrógeno no es una fuente de energía, pero si un portador y consecuentemente será tan limpia como el método empleado para su producción. Además su transporte y almacenamiento es costoso y complicado debido a su baja densidad en base volumétrica (la densidad de la gasolina es de 0.07 Kg/L mientras que la densidad del H<sub>2</sub> es 0.03, 0.06 y 0.07 KG/L a 350 atmósferas, 700 atm y licuado a 20 K, respectivamente). Aunque es más fácil de transportar sin que se disipe energía como pasa cuando se transporta electricidad a través de líneas de transmisión.

Como el hidrógeno es altamente inflamable, le confiere una alta peligrosidad sobre todo al almacenar en espacios reducidos, aunque es seguro en lugares abiertos y se difunde rápidamente a la atmósfera. Se espera que se adelanten investigaciones para nuevos almacenamientos y se establezcan códigos y estándares para que su uso en el futuro permita vencer esos aspectos negativos.

Algunos países han emprendido comités encargados para el hidrógeno. Canadá, Japón, EU y Alemania han liderado el camino de las nuevas tecnologías y gradualmente están incrementando sus esfuerzos por implementar nichos de aplicación del hidrógeno y sus sistemas energéticos. Japón, una nación con pocos recursos en combustibles fósiles, tiene un gran programa para desarrollar un sistema global de hidrógeno con nuevas tecnologías para plantas de energía, carros, buses, aviones, naves y cohetes, todos a base de hidrógeno. Por ello la imperiosa necesidad de aunar esfuerzos e iluminar los senderos conducentes a una sociedad del hidrógeno, ver **Gráfica 2**.

**Gráfica 2.** Expectativa para la sociedad del hidrógeno en un futuro distante.



Para lograr este objetivo se deben dar dos condiciones importantes para la sociedad del hidrógeno. Como primera medida, las organizaciones deben garantizar el cumplimiento de los acuerdos internacionales en la reducción de emisiones de CO<sub>2</sub>, este problema se puede expresar en números, el mercado mundial de emisiones de CO<sub>2</sub> se estima en un costo de US \$ 50/ton, esto parecería ser suficiente para obligar a las compañías a lo largo del desarrollo de este proceso a la implementación de fuentes de energía libres de carbono. Si esta condición no se da, los combustibles fósiles continuarán formando la base del escenario energético durante décadas. Si esta situación no, cuando el crudo se deje de usar y sea reemplazado por combustibles sintéticos producidos a partir del carbón y gas natural por medio de la síntesis de Fischer-Tropsch (procesos SASOL) y sean empleados en transporte, acarrearía consecuencias dramáticas en el cambio climático y lo único que le quedaría a la sociedad de ese entonces, es

cuestionarse porque sus predecesores fueron tan egoístas e inconcientes de su actitud frente a la crisis energética que preveían. Sin embargo, esta no es la única condición que se necesita para que se efectúe con éxito y constituya lo que se ha denominado sociedad del hidrógeno. El desarrollo tecnológico debe efectuar una disminución en el costo de producción de H<sub>2</sub>, en su distribución, almacenamiento y utilización de celdas combustibles. Incluso en el caso que falle, si se garantiza al menos que la primera condición se cumpla para que el sistema energético sea limpio y se logre que la sociedad emplee energía renovable como fuentes de electricidad y sistemas híbridos basados en baterías convencionales de litio y bio combustibles para los vehículos sería muy bueno.

La IEA ha analizado varios escenarios de evolución política y tecnológica, empleando varias dimensiones para cuantificar las diferentes hipótesis planteadas (ambiental, seguridad, progreso tecnológico, condiciones económicas y opciones competitivas). En la mayoría de situaciones favorables para el desarrollo de la economía del hidrógeno en el 2050, el 30% de los autos funcionarían con hidrógeno alimentado mediante una celda combustible instalada, permitiendo de esta forma que tuviese una capacidad de generar de 200-300 GW para cogenerar calor y electricidad en el sector residencial. Por consiguiente el impacto colectivo del hidrógeno y otras tecnologías (captura y almacenamiento CCS, electricidad de energías renovables, etc.) ayudarán a estabilizar las emisiones de CO<sub>2</sub> a la atmósfera y crearán una red diversificada de fuentes de energía, que por lo tanto reduciría la dependencia del petróleo.

### B.3 BIBLIOGRAFÍA

[1] Pacala S, Socolow R. Stabilization wedges: Solving the climate problem for the next 50 years with current technologies. Science 2004;305: 968–72.

[2] BP. Statistical Review of World Energy, 2005.

[http://www.bp.com/genericsection.do?categoryId = 92&contentId = 7005893](http://www.bp.com/genericsection.do?categoryId=92&contentId=7005893)

[3] IEA (International Energy Agency). Key World Energy Statistics, 2005.

[4] DOE (US Department of Energy) - EIA (Energy Information Administration). InternationalEnergyOutlook2005.

[http://www.eia.doe.gov/oiaf/ieo/pdf/0484\(2005\).pdf](http://www.eia.doe.gov/oiaf/ieo/pdf/0484(2005).pdf)

[5] Nation Master Database

([http://www.nationmaster.com/graph/env\\_co2\\_emi\\_percap-environment-co2-emissions-per-capita](http://www.nationmaster.com/graph/env_co2_emi_percap-environment-co2-emissions-per-capita)).

## **ANEXO C. METODOLOGÍA DE MODELAMIENTO Y SIMULACION**

### **C.1 SIMULACIÓN DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN DE CARBÓN**

Se empleo el modelo para estudiar y prever el comportamiento del proceso de gasificación, así como las relaciones entre el conjunto de elementos que se configuran, a fin de evaluar diversas estrategias u opciones para el funcionamiento del mismo.

#### **C.1.1 METODOLOGIA DE LA SIMULACION**

1. Definir el contenido de la simulación.
2. Establecer las variables a través de las cuales se realizara la simulación.
3. Escoger el modelo que representa el contenido de la simulación.
4. Evaluar la información necesaria para la simulación y la que se obtiene de esta.
5. Ejecutar el modelamiento/simulación.
6. Analizar los resultados
7. Elaborar conclusiones y recomendaciones

#### **C.1.2 BASE DE CÁLCULO**

Elección de los componentes involucrados en el proceso:

- ❖ Reactor de conversión
- ❖ Reactores de equilibrio
- ❖ Corrientes
- ❖ Mezclador

Elección del paquete termodinámico:

❖ **MODELO TERMODINÁMICO:** Se escogió el Fluid Package o paquete de fluido basado en el modelo de Peng Robinson (PR), para compuestos puros o mezclas en estado gaseoso o vapor.

- Cálculo de equilibrio de fases Líquido-Vapor (L-V)
- Aplicable a sistemas no ideales
- Procesos petroquímicos, reformado y gasificación
- Permite ser exacto para una gran variedad de sistemas sobre un amplio rango de condiciones
- Resuelve rigurosamente la mayoría de sistemas en una sola fase, dos fases y hasta tres fases con un alto grado de eficiencia y confiabilidad

$$P = \frac{R \cdot T}{(V - b)} - \frac{a}{V \cdot (V + b) + b \cdot (V - b)}$$

Conjunto de propiedades físicas del carbón

❖ La utilización de propiedades físicas y una correcta elección del modelo son las claves para obtener un modelo realista.

- Densidad
- Peso molecular promedio
- Esfericidad
- Área por unidad de volumen
- Diámetro medio
- Análisis de carbón
- Calor de combustión
- Distribución de tamaño de partícula

## Análisis de gráficos

- Tendencias
- Comportamientos
- Perfiles

## **C.2 CONCEPTOS FUNDAMENTALES DE OPERACIÓN DE ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup>**

- ❖ Diagrama de flujo y sub-diagramas de flujo (Flowsheet and Sub-flowsheet)
  - Facilitan la construcción y el trabajo con el diagrama de flujo
  
- ❖ Ambientes (Environments)
  - Elegir los componentes
  - Elegir las bases de las propiedades
  - Crear nuevos hipotéticos
  - Definir reacciones:
    - Estequiometría
    - Compuesto limitante
    - Extensión (conversión o  $K_{eq}$ )
    - Ecuación cinética

### **C.2.1 OPERACIONES LÓGICAS (Set)**

Son modelos matemáticos que facilitan los mecanismos de convergencia, el trabajo con datos y el control de la información en diagramas de flujo complejos.

Además relaciona parámetros de diferentes corrientes según diferentes criterios o esquemas cuantitativos. Para el trabajo de simulación presente permitió buscar

relaciones entre las corrientes de alimento a fin de encontrar regiones optimas para una alta fracción molar hidrogeno en el gas de síntesis.

### C.2.2 REACTORES INVOLUCRADOS EN EL PROCESO DE GASIFICACION

Definición de reacciones:

- ❖ Se definen las reacciones químicas entorno al proceso de gasificación.
  - Conversión
  - Equilibrio
  
- ❖ Estequiometría de las reacciones
  - Se especifican los coeficientes estequiometricos de las reacciones
  - Las ecuaciones bien balanceadas quieren decir que el error del balance es cero.

$$Error\ de\ Balance = masa_{Reactantes} - m_{Productos}$$

$$Error\ de\ Balance = \sum_{Reactantes} v_i \cdot M_i - \sum_{Productos} v_i \cdot M_i$$

$v_i$  : coeficiente estequiométrico en la ecuación ajustada;  
 $M_i$  : masa molar ;  
 $i$  : i-ésimo componente en la mezcla.

$$Error\ de\ Balance = 0$$

- Las reacciones se agrupan en sets o en juegos de reacciones
- Los sets deben tener asignado el paquete de fluidos

## C.2.3 REACCIONES DEL PROCESO

### C.2.3.1 Definición De Las Reacciones De Conversión En ASPEN HYSYS 2004.2®

#### Conversión

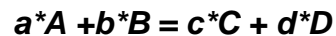
- ❖ Basados en modelos “cuantitativos” de la reacción
- ❖ Describen la reacción por su extensión
- ❖ Grado de conversión

$$\text{Conv}(\%) = C_o + C_1 * T + C_2 * T^2$$

Si la conversión es independiente de la temperatura o no se tiene la información de cómo varía ella, entonces:

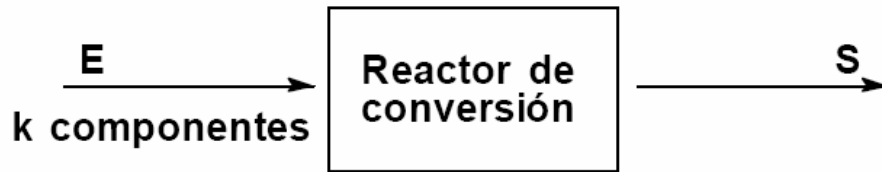
$$\text{Conv}(\%) = C_o$$

### C.2.3.2 Definición Completa De Las Reacciones De Conversión:



La conversión se define con respecto a **A** para todos los componentes de la reacción:

$$\begin{aligned} N_A &= N_{A_o} * (1 - X_A) \\ N_B &= N_{B_o} - b/a * (N_{A_o} * X_A) \\ N_C &= N_{C_o} + c/a * (N_{A_o} * X_A) \\ N_D &= N_{D_o} + d/a * (N_{A_o} * X_A) \end{aligned}$$



N reacciones paralelas

r: reacción (1,..., N)

l: componente limitante

l(r): componente limitante por la reacción r

n(r): conversión por paso para la reacción r

Los coeficientes estequiométricos se normalizan respecto al componente limitante:

$$\gamma_{r,k} = \left( \frac{C_{r,k}}{C_{r,l(r)}} \right)_r \quad \mu_S^k = \mu_E^k + \sum_{r=1}^N \gamma_{r,k} \cdot \eta_r \cdot \mu_E^{l(r)}$$

$$\gamma_{r,k} \begin{cases} > 0 ; k : \text{producto} \\ < 0 ; k : \text{reaccionante} \\ = 0 ; k : \text{inerte} \end{cases}$$

Para las reacciones complejas (en serie o en paralelo) para aplicar el formalismo se definen reactores adicionales en serie donde ocurren estas reacciones

### C.2.3.3 Equilibrio

- Librería de reacciones ( $K_{eq}^T$ )
- Introducción manual de las constantes de equilibrio ( $K_{eq} = f(T)$ )

Estos reactores transforman reactantes en productos según la estequiometría especificada mediante la minimización de la energía de Gibbs calculando las composiciones de todos los compuestos involucrados en el equilibrio.

$$\Delta G_{\text{Reacción}} = \sum_{\text{Productos}} G_{\text{Formación}} - \sum_{\text{Reactantes}} G_{\text{Formación}}$$

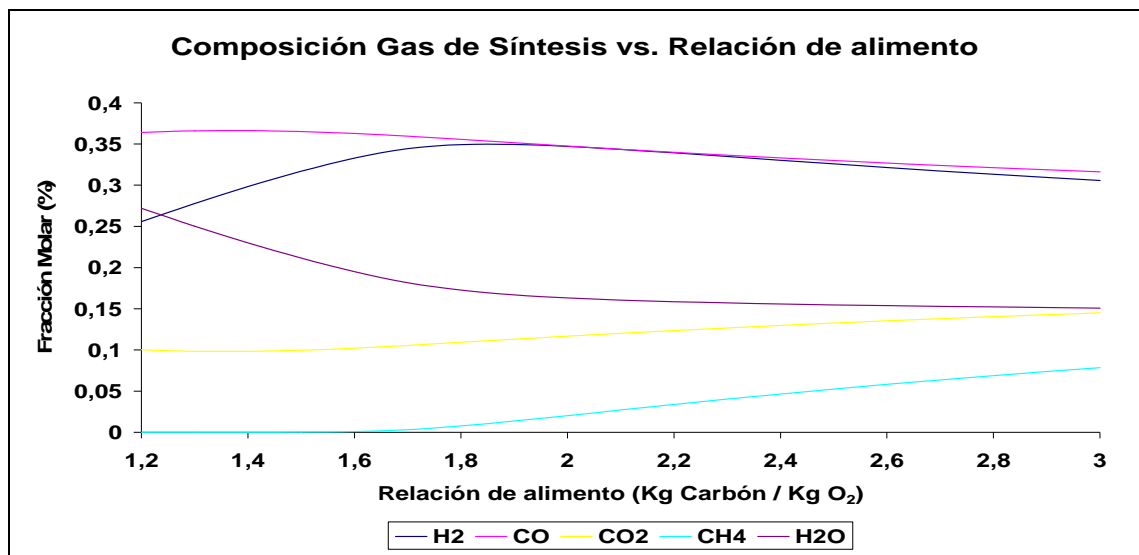
ASPEN HYSYS 2004.2<sup>®</sup> calcula el  $\Delta G$  de reacción para cualquier reacción sin error de balance.

## ANEXO D. RESULTADOS DE SIMULACIÓN PARA CARBONES DE BOYACÁ, CUNDINAMARCA Y GUAJIRA.

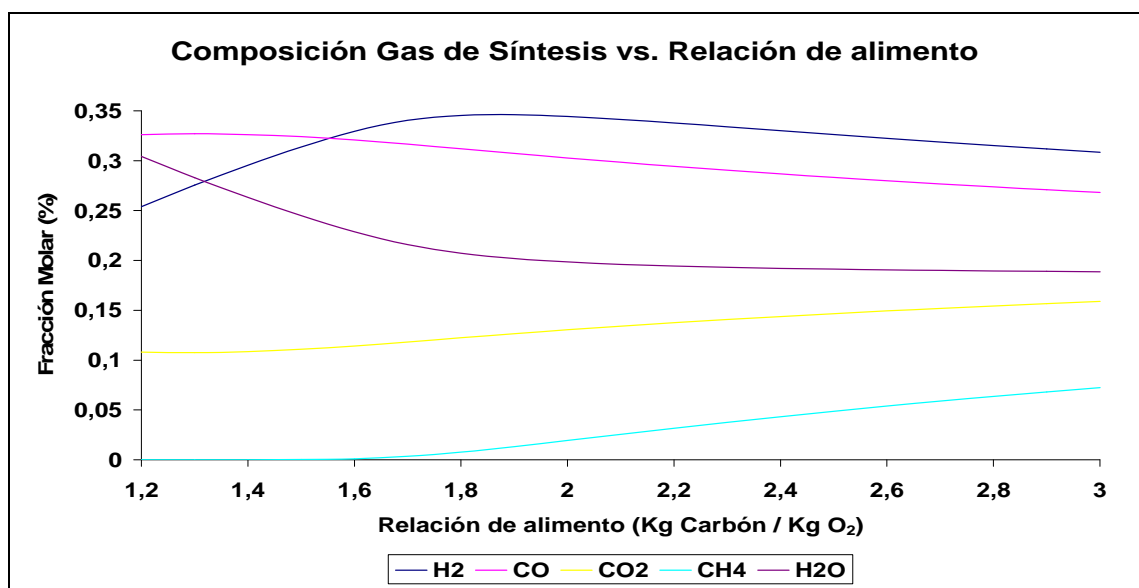
### D.1 CARBÓN DE BOYACA

#### D.1.1 RELACIÓN CARBÓN/OXÍGENO

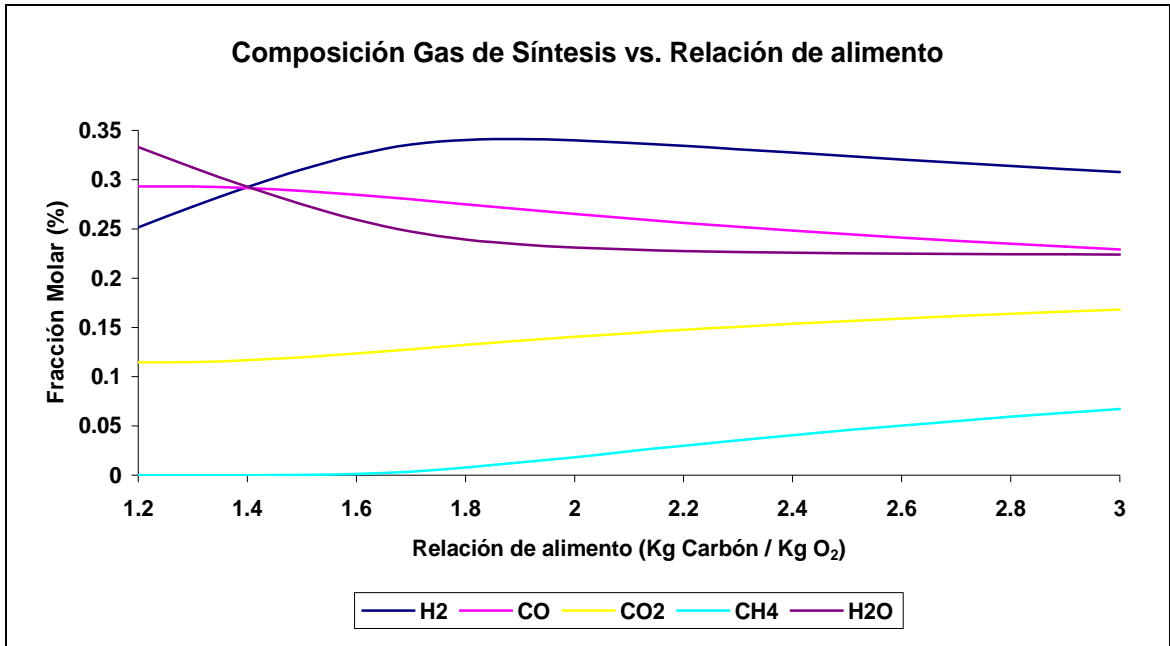
Gráfica 1. Flujo de 1200 Kg/h de Vapor.



Gráfica 2. Flujo de 1400 Kg/h de Vapor.

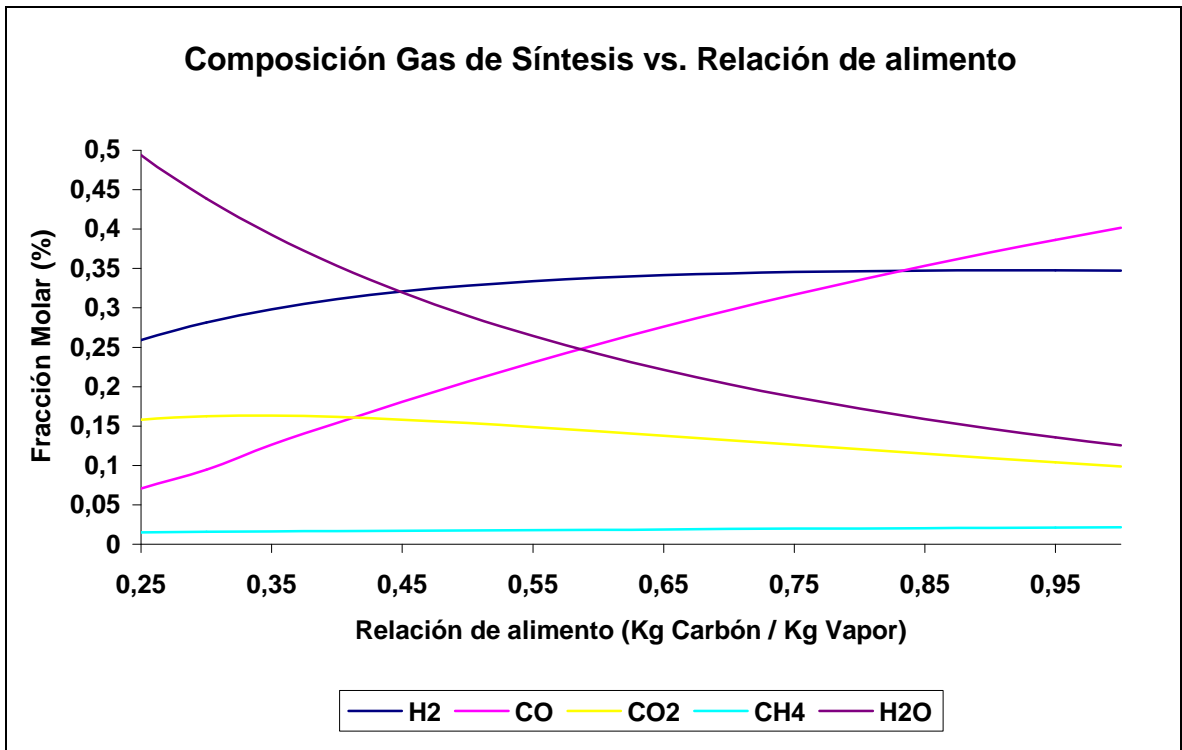


Gráfica 3. Flujo de 1600 Kg/h de Vapor.

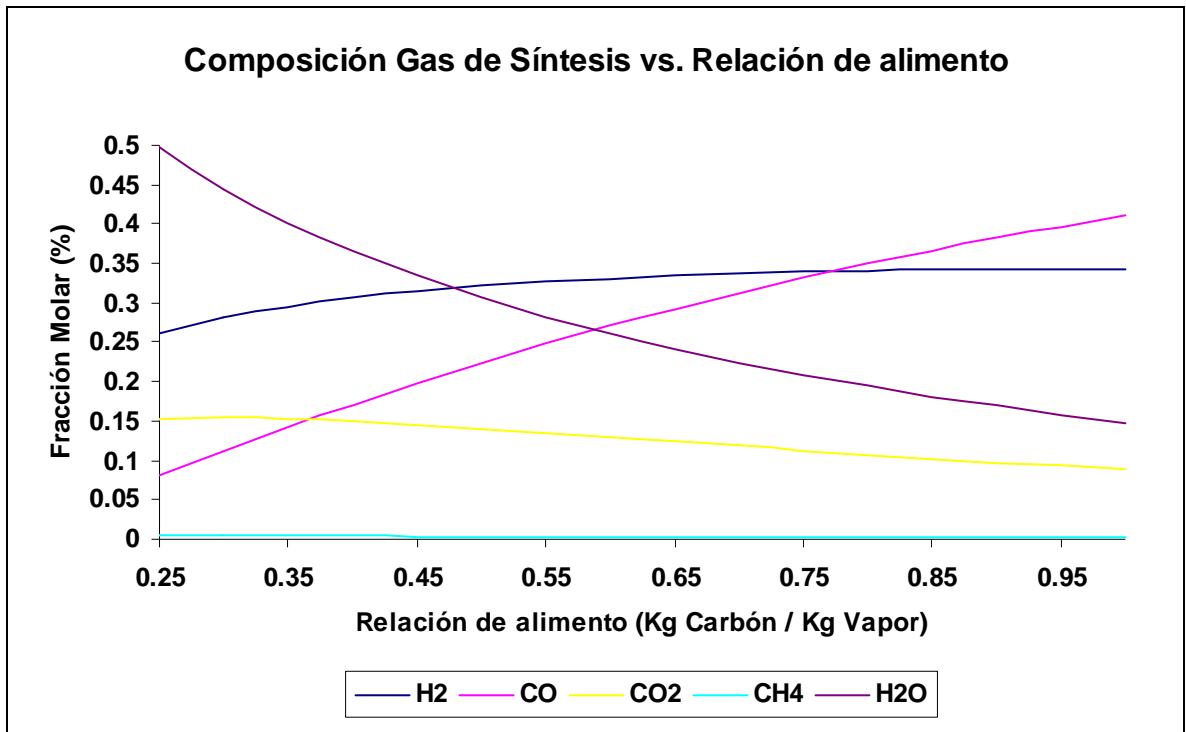


#### D.1.2 RELACIÓN CARBÓN/VAPOR

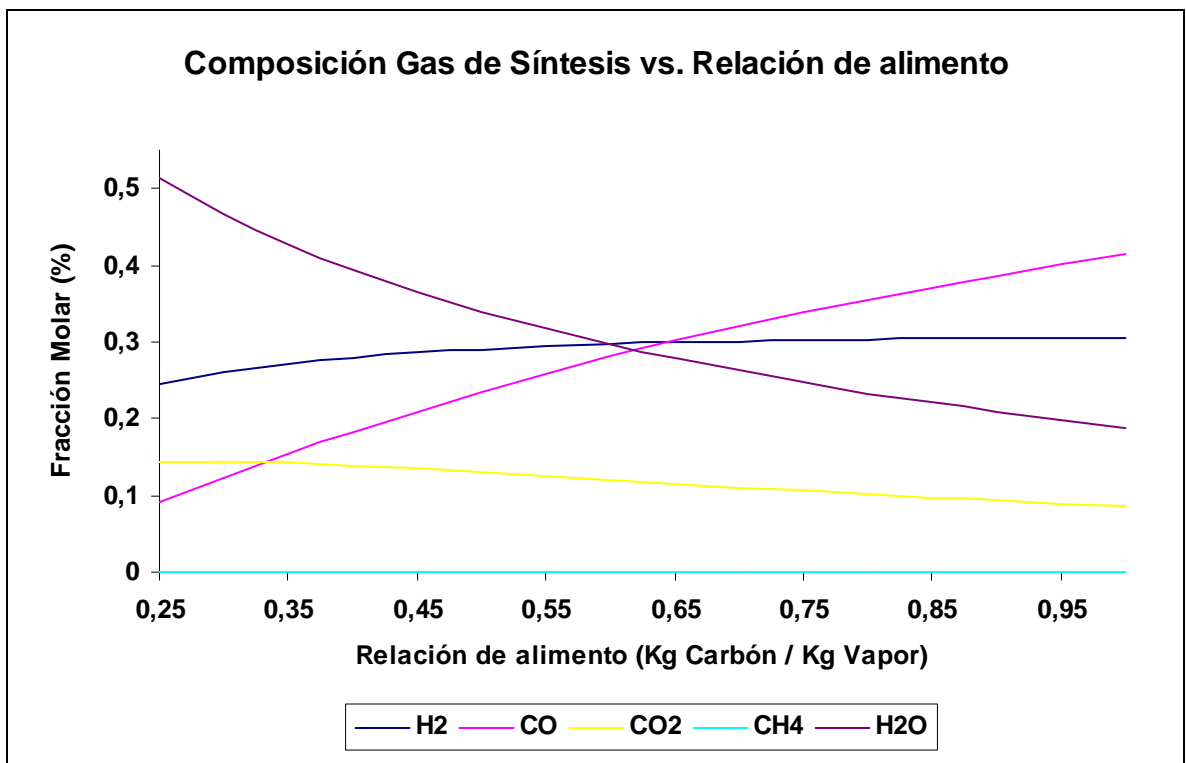
Grafica 4. Flujo de 500 Kg/h de Oxígeno



Gráfica 5. Flujo de 600 Kg/h de Oxígeno



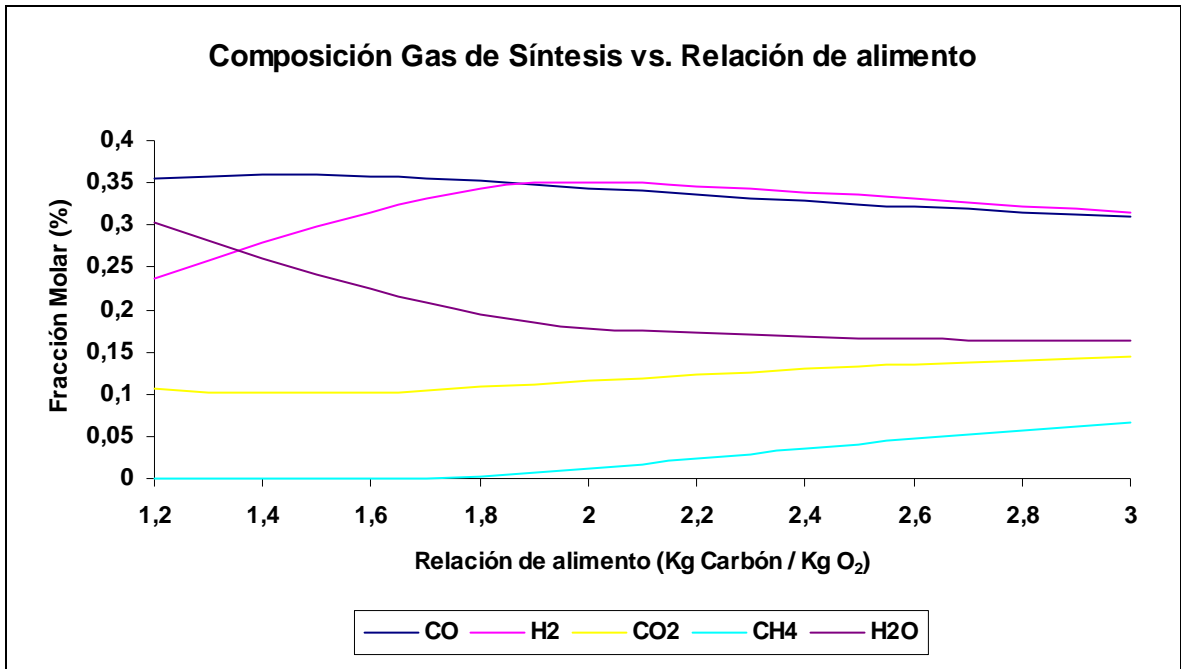
Gráfica 6. Flujo de 700 Kg/h de Oxígeno



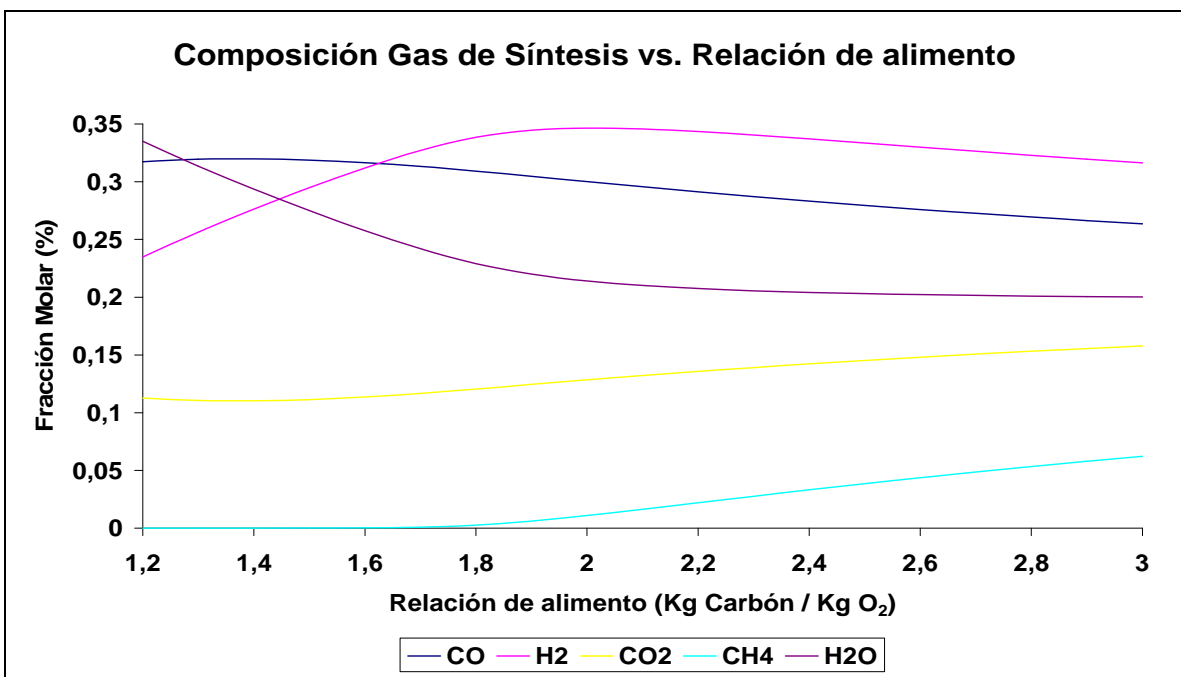
## D.2 CARBÓN DE CUNDINAMARCA

### D.2.1 RELACIÓN CARBÓN/OXÍGENO

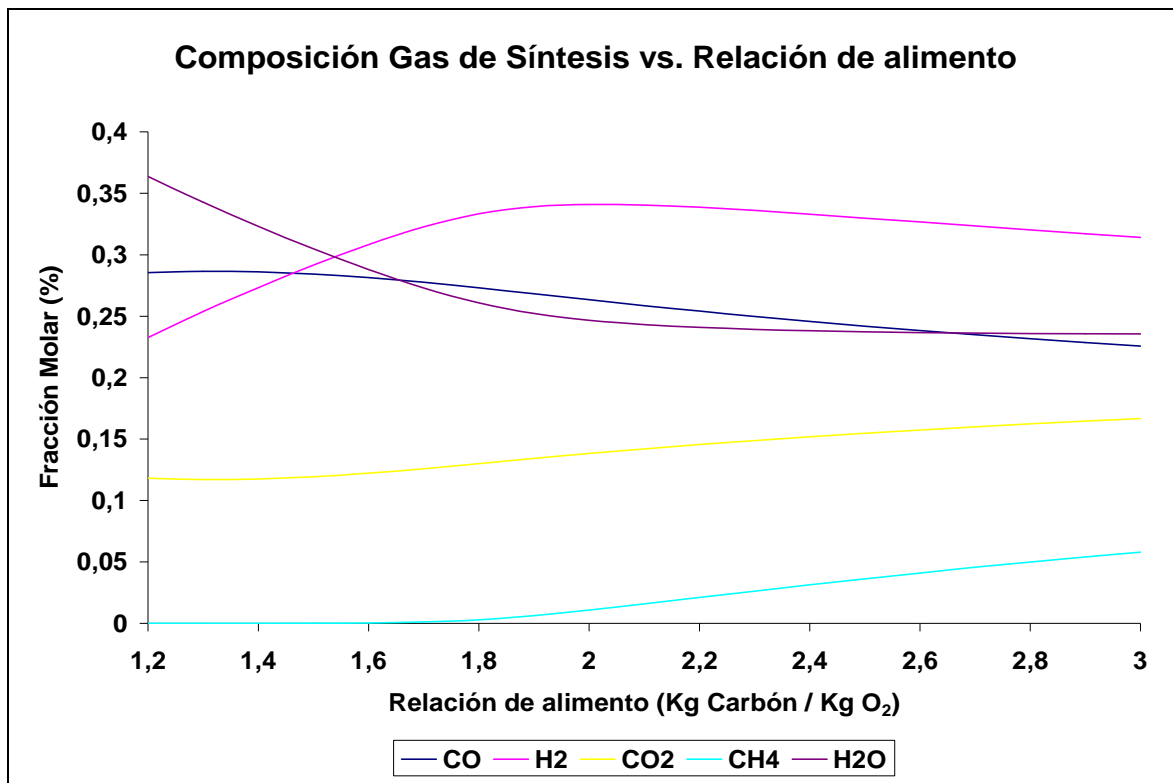
Grafica 7. Flujo de 1200 Kg/h de Vapor



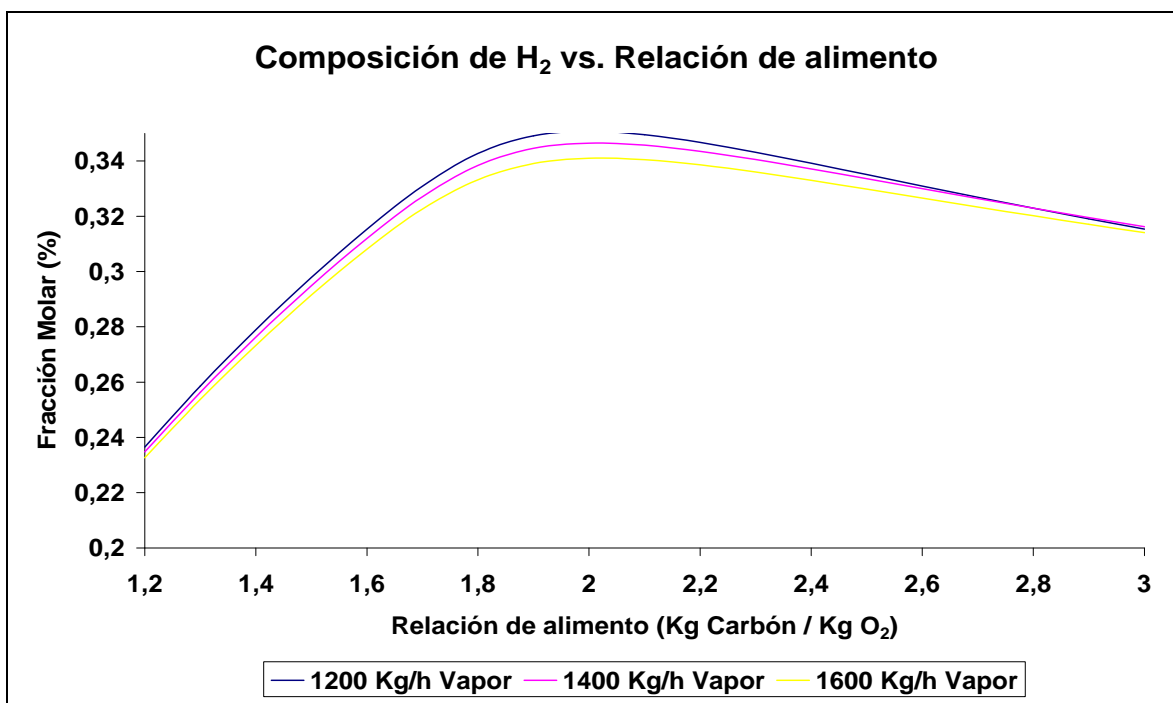
Grafica 8. Flujo de 1400 Kg/h de Vapor



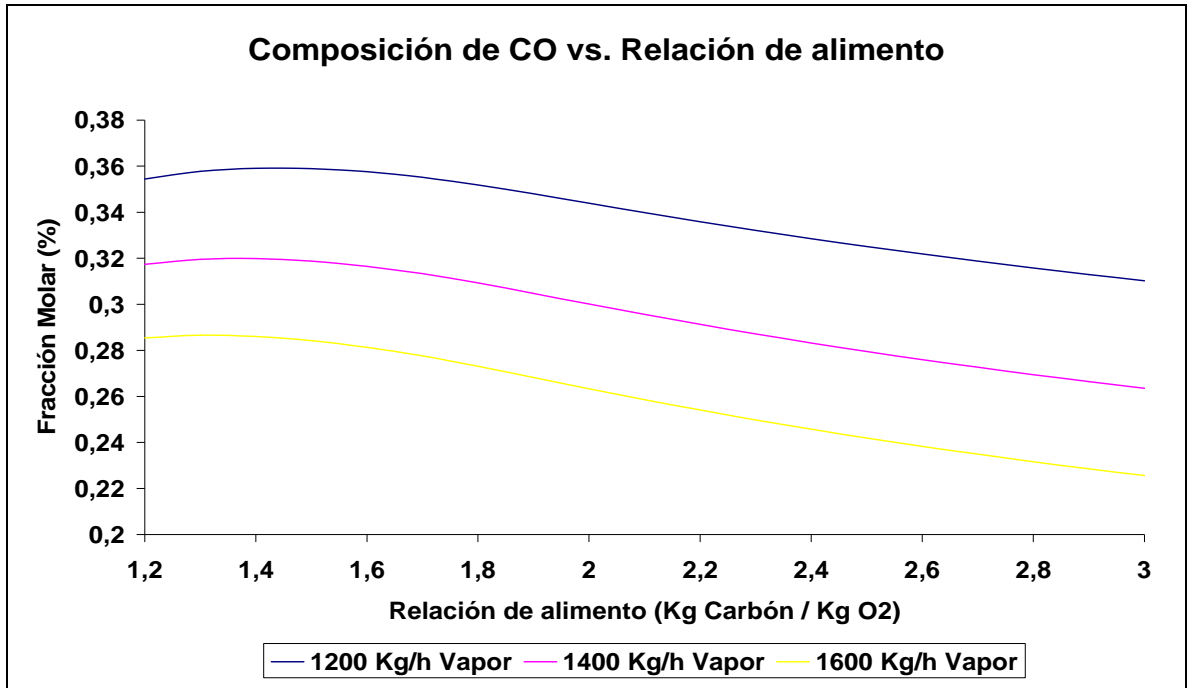
Gráfica 9. Flujo de 1600 Kg/h de Vapor



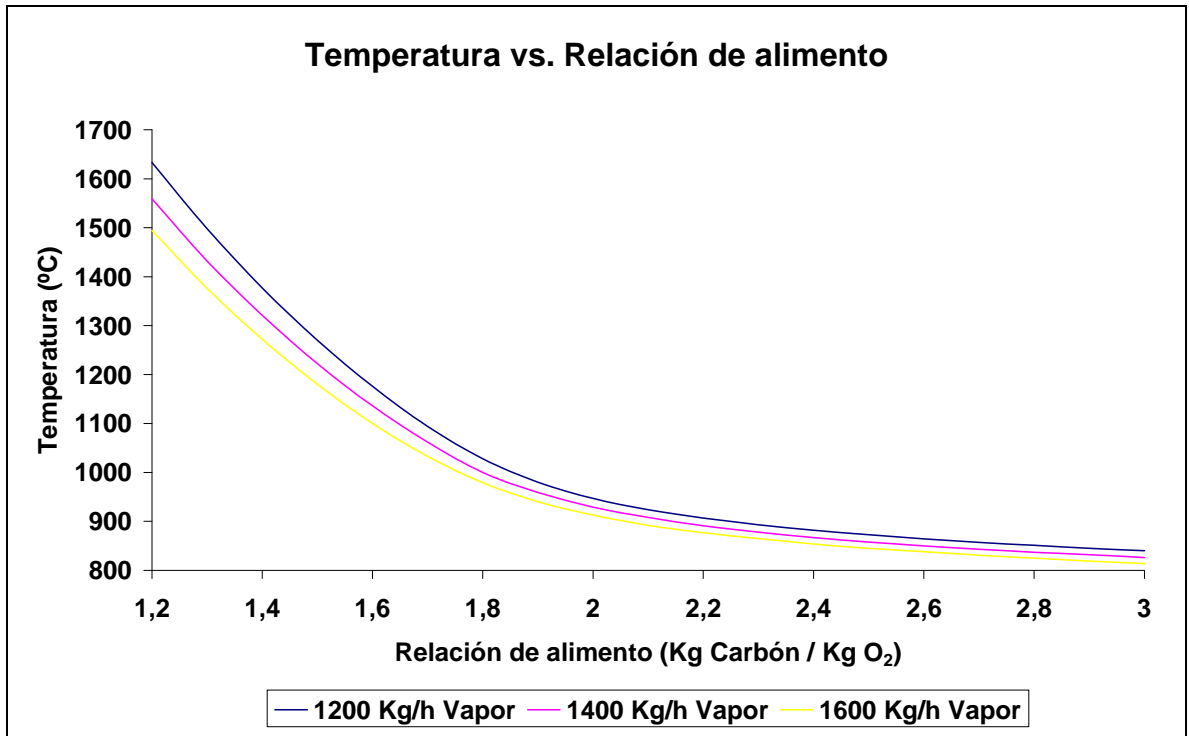
Gráfica 10. Composición de H<sub>2</sub> para diferentes flujos de Vapor



Gráfica 11. Composición de CO para diferentes flujos de Vapor

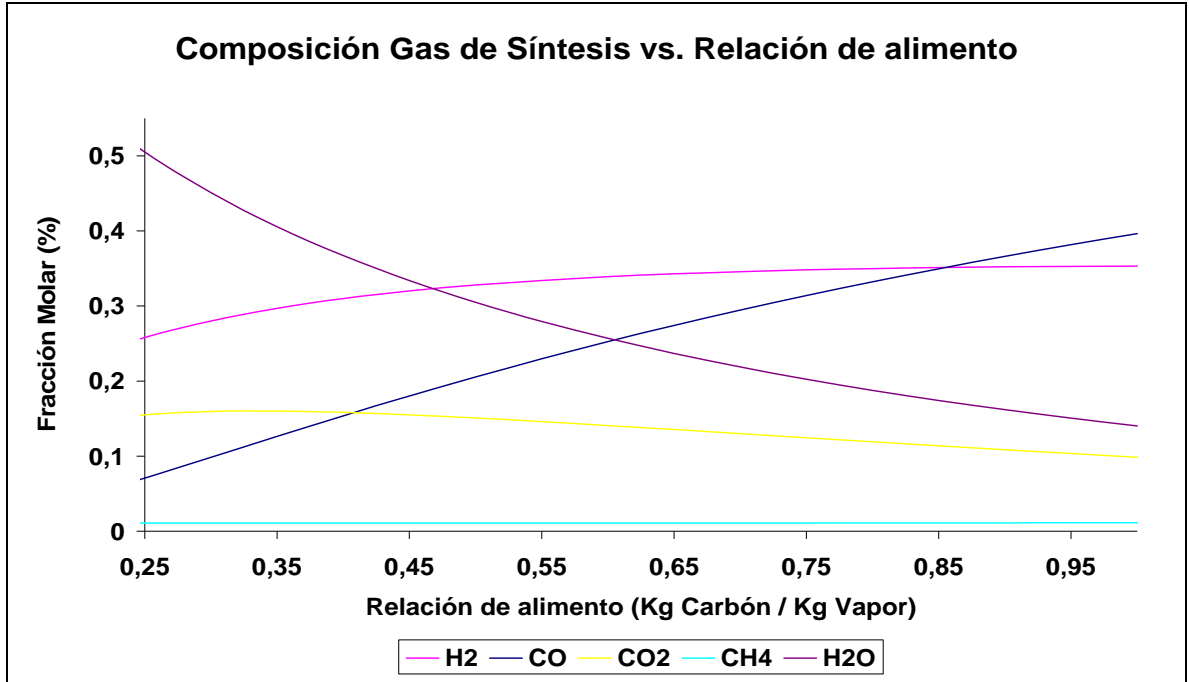


Gráfica 12. Temperatura para diferentes flujos de Vapor

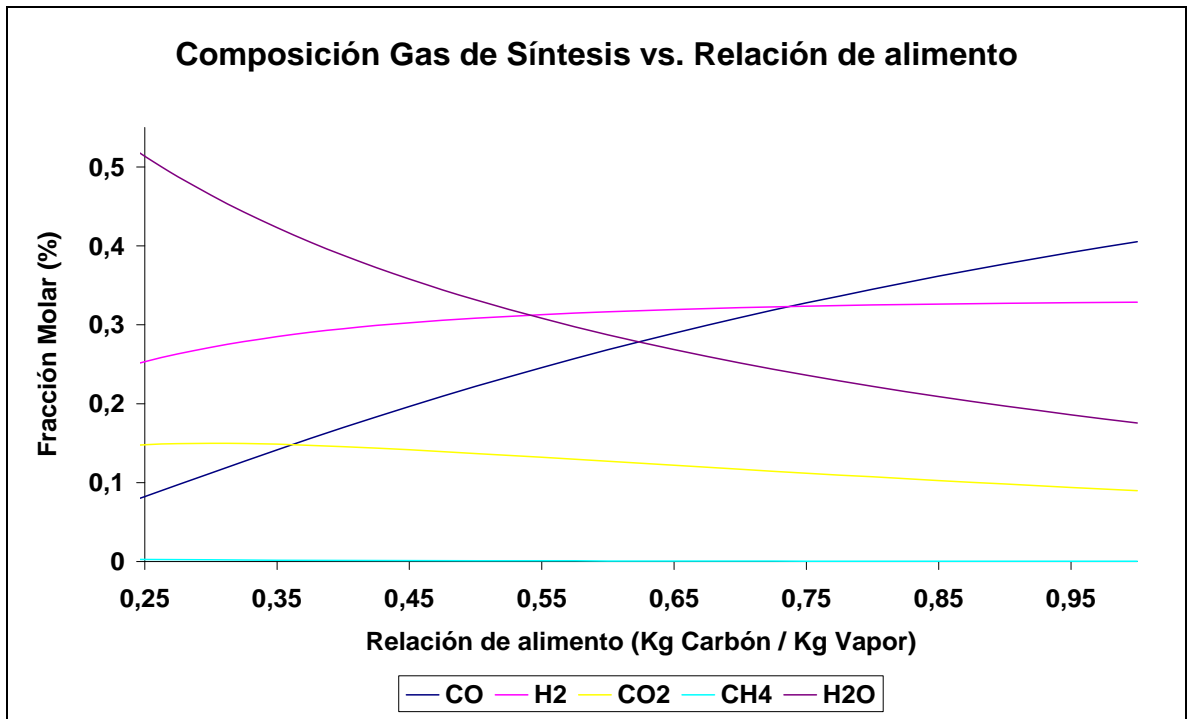


## D.2.2 RELACIÓN CARBÓN/VAPOR

Grafica 13. Flujo de 500 Kg/h de oxígeno



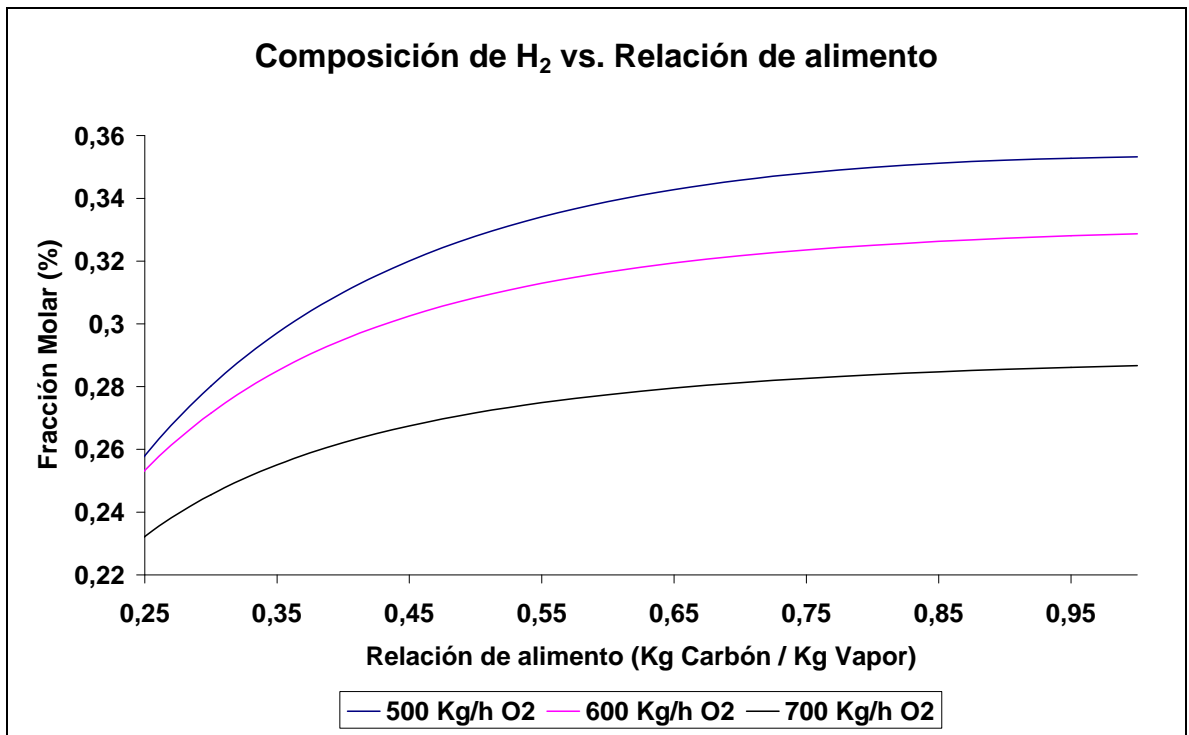
Gráfica 14. Flujo de 600 Kg/h de Oxígeno



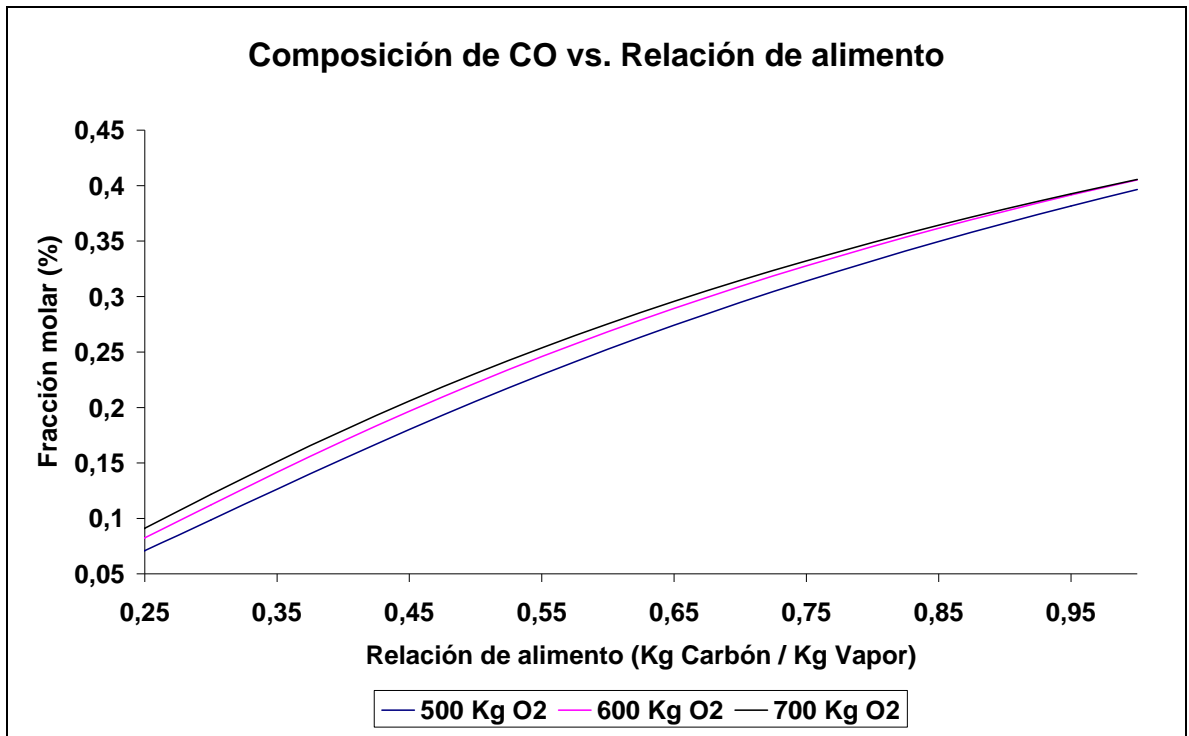
Gráfica 15. Flujo de 700 Kg/h de oxígeno



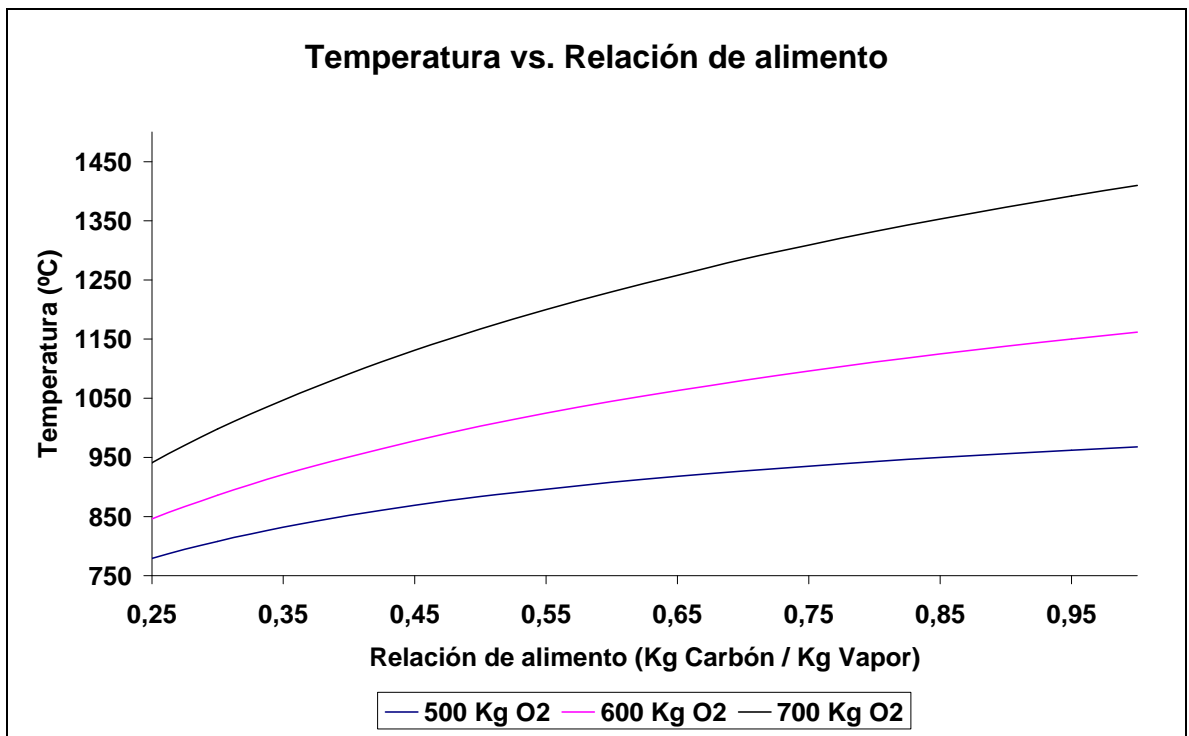
Gráfica 16. Composición de H<sub>2</sub> para diferentes flujos de Oxígeno



Gráfica 17. Composición de CO para diferentes flujos de Oxígeno



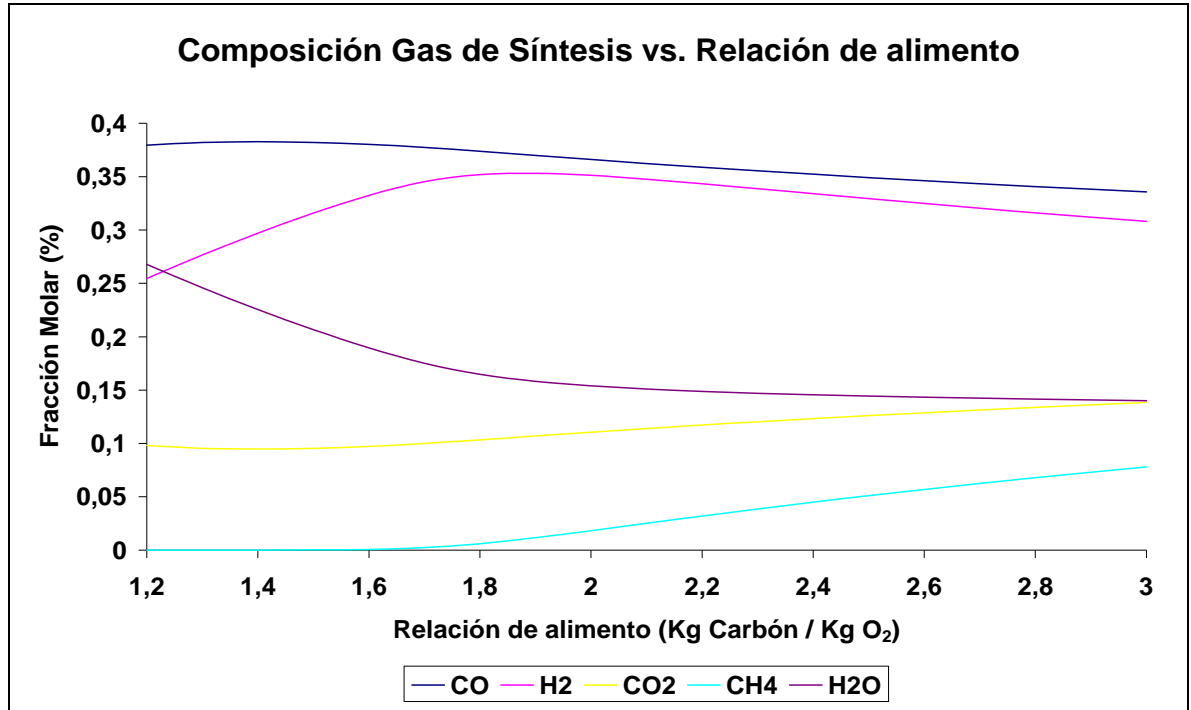
Gráfica 18. Temperatura para diferentes flujos de Oxígeno



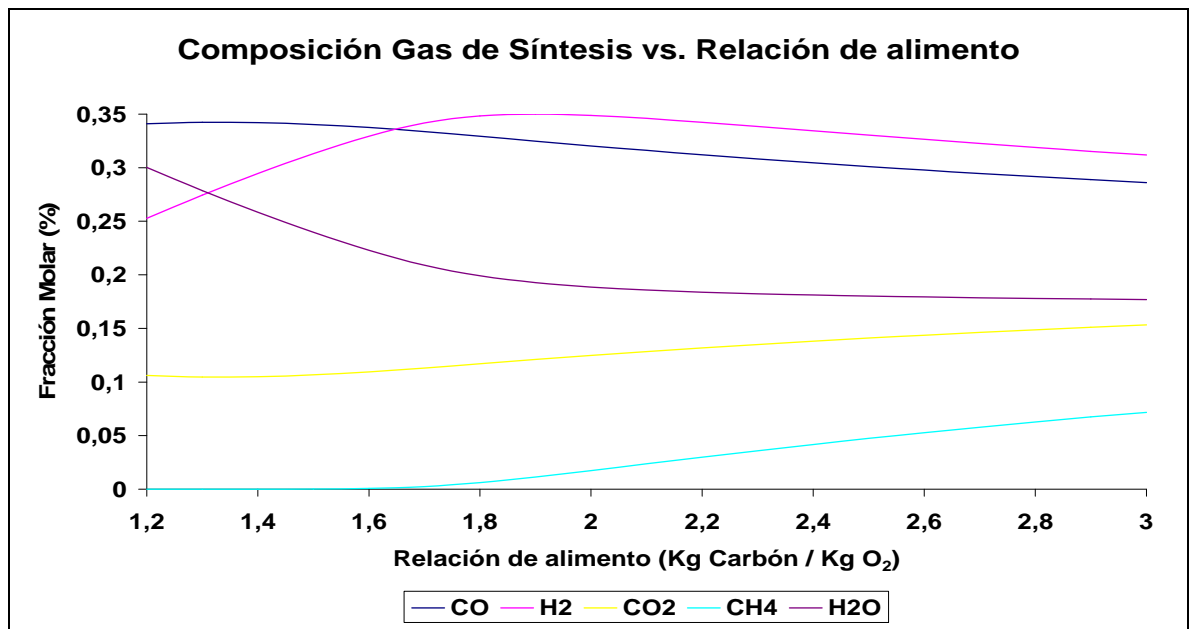
### D.3 CARBÓN DE LA GUAJIRA

#### D.3.1 RELACIÓN CARBÓN/OXÍGENO

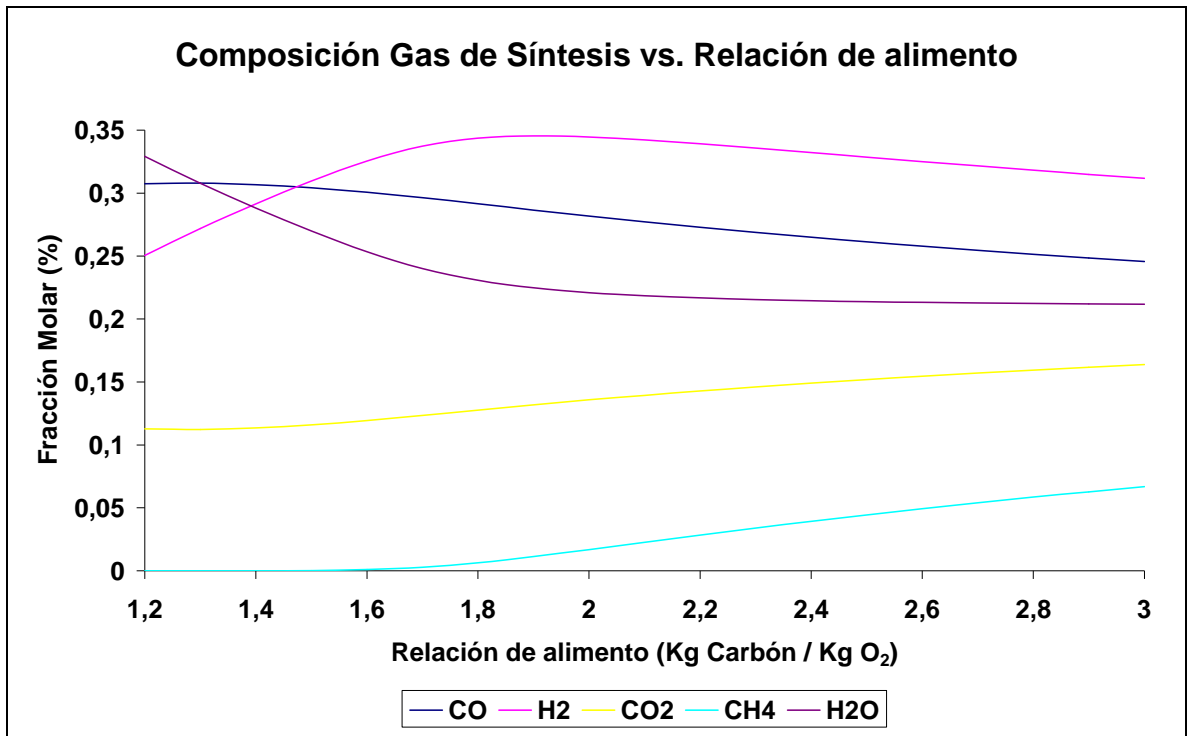
Grafica 19. Flujo de 1200 Kg/h de Vapor



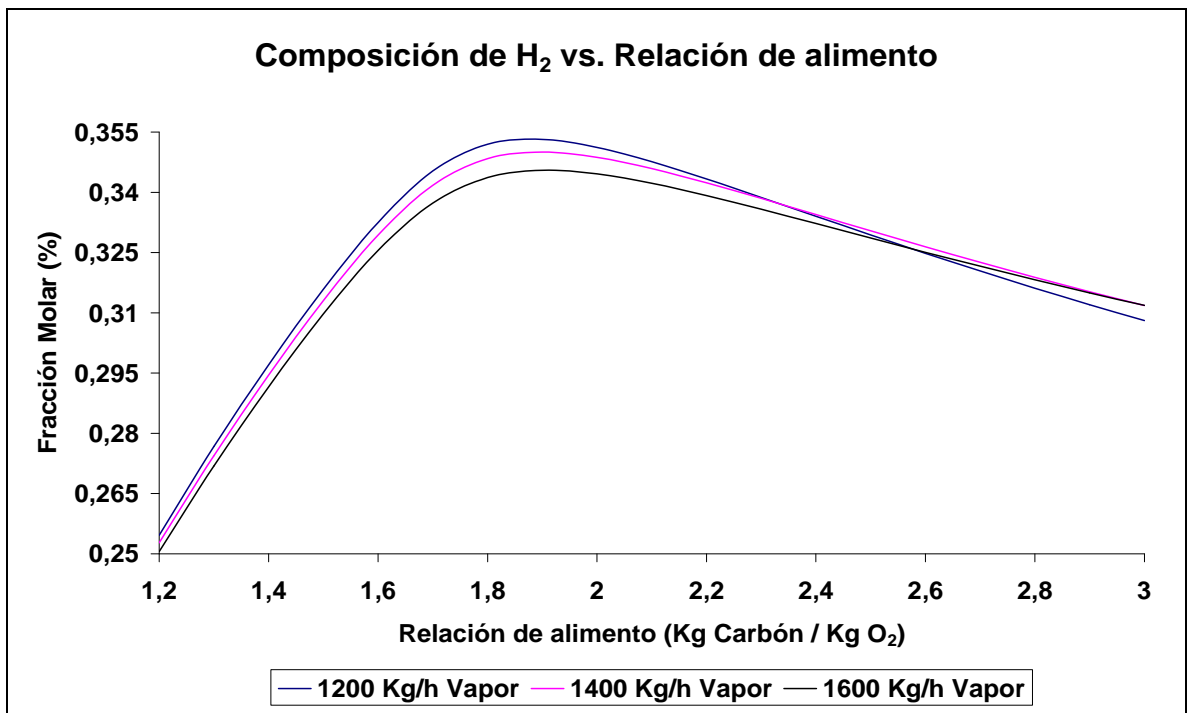
Grafica 20. Flujo de 1400 Kg/h de Vapor



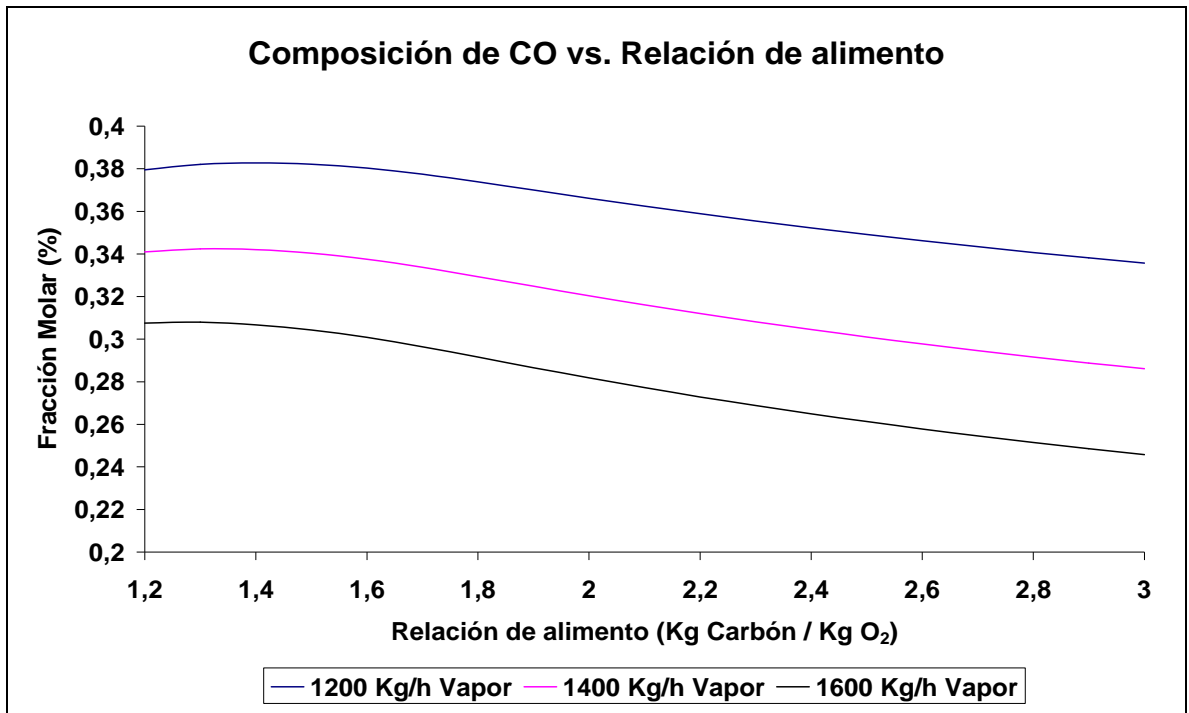
Gráfica 21. Flujo de 1600 Kg/h de vapor



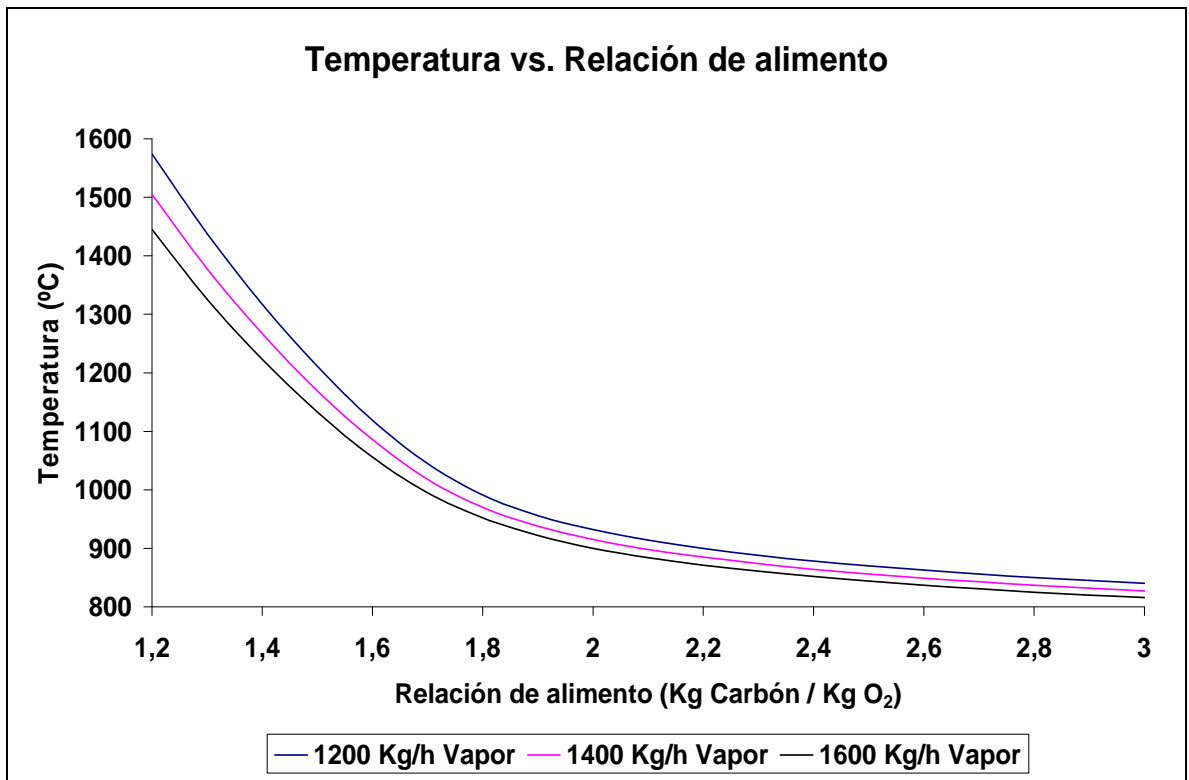
Gráfica 22. Composición de H<sub>2</sub> para diferentes flujos de Vapor



Gráfica 23. Composición de CO para diferentes flujos de Vapor

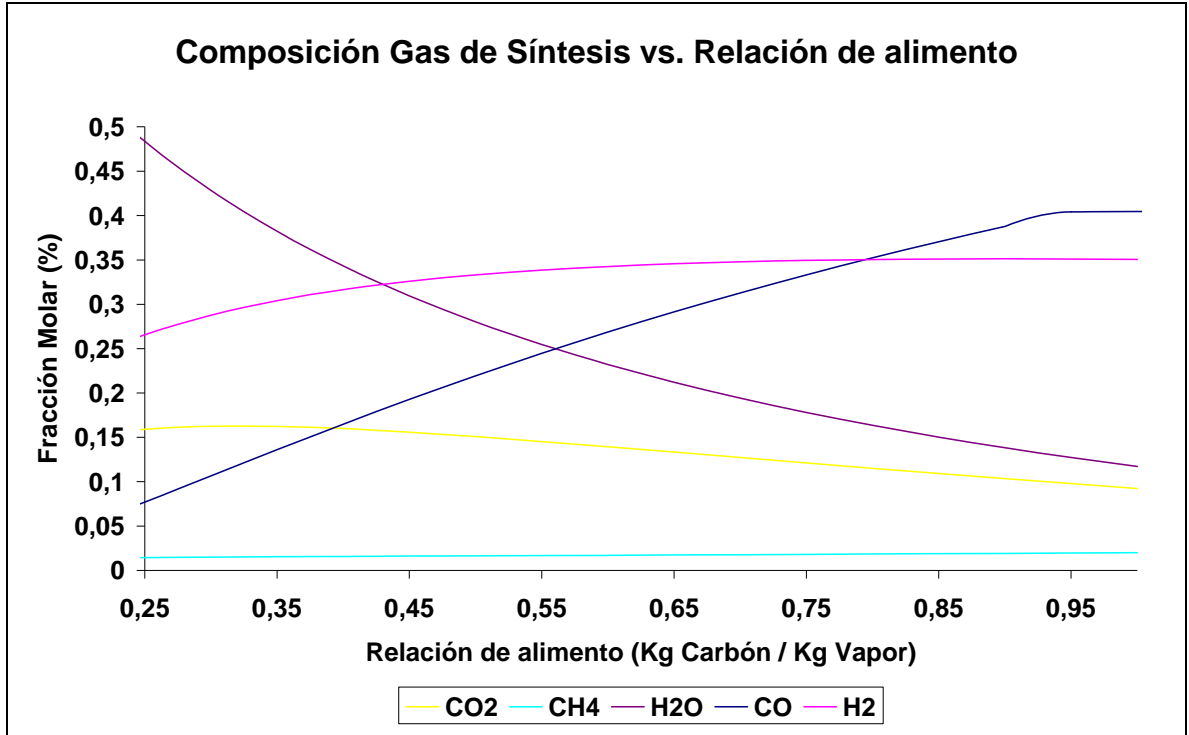


Gráfica 24. Temperatura para diferentes flujos de Vapor

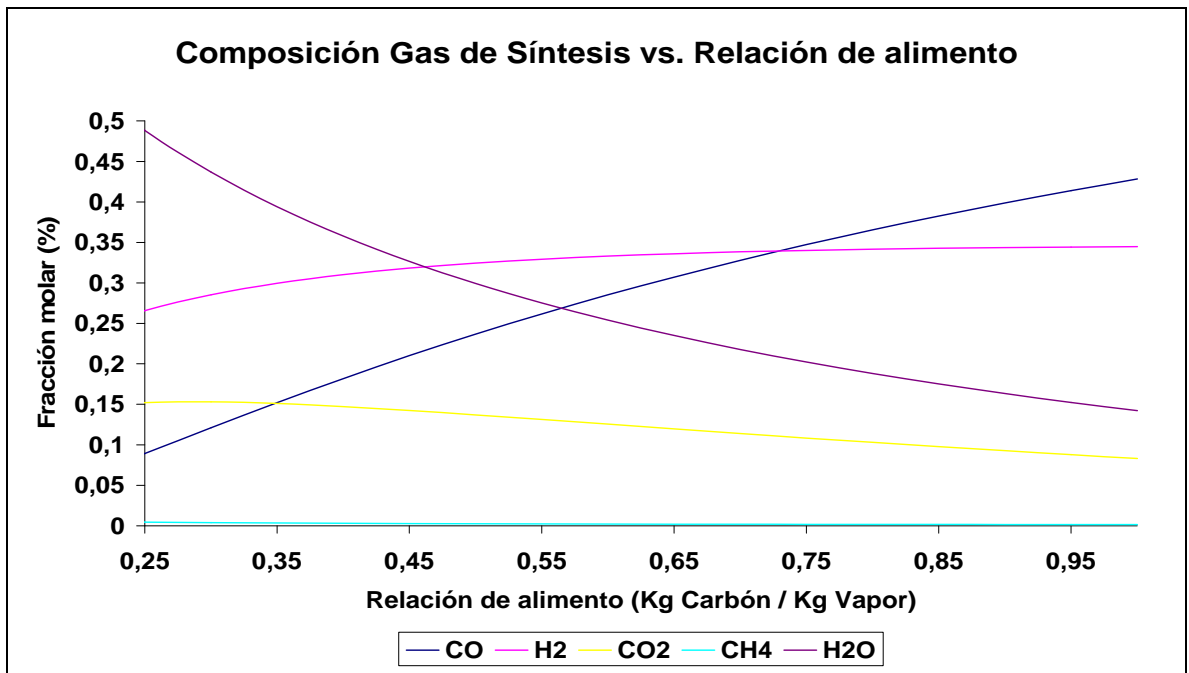


### D.3.2 RELACIÓN CARBÓN/VAPOR

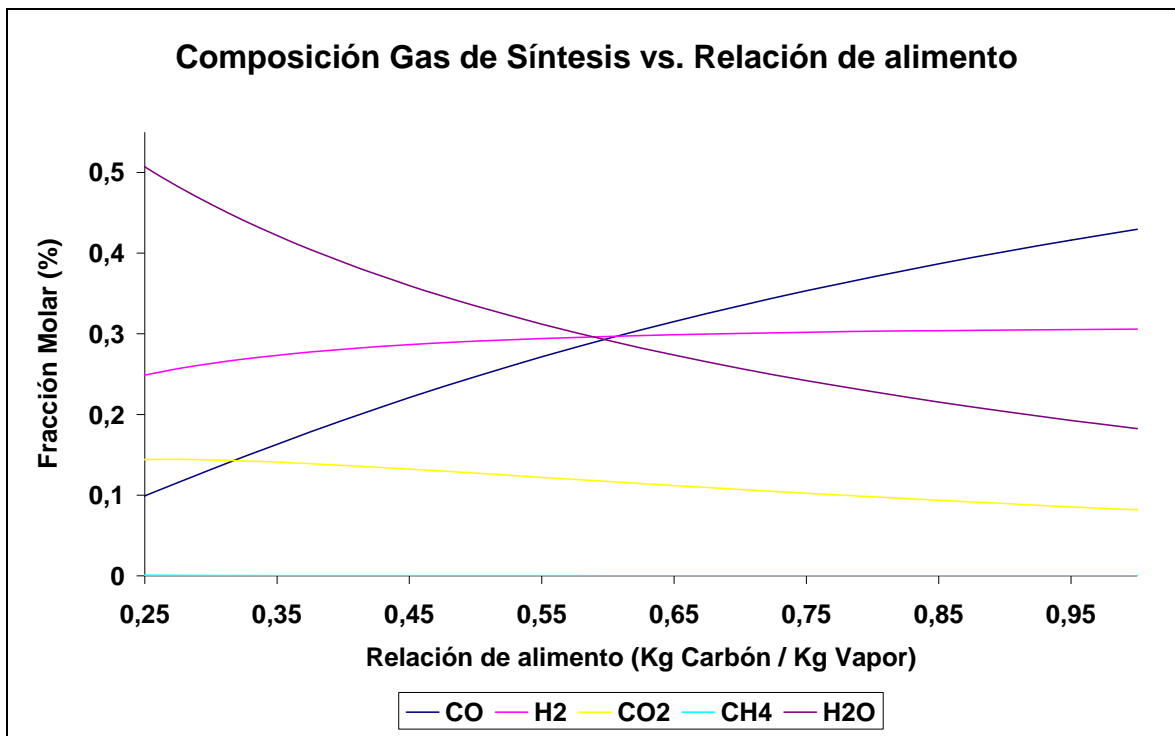
Grafica 25. Flujo de 500 Kg/h de Oxígeno



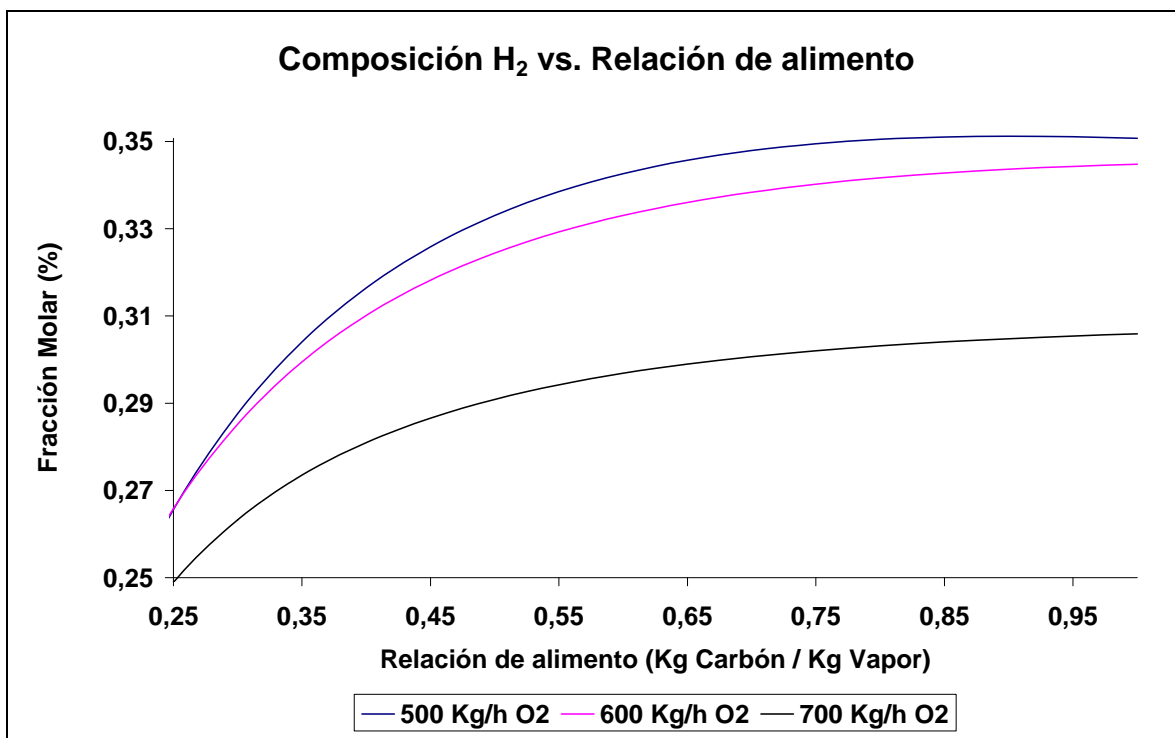
Gráfica 26. Flujo de 600 Kg/h de Oxígeno



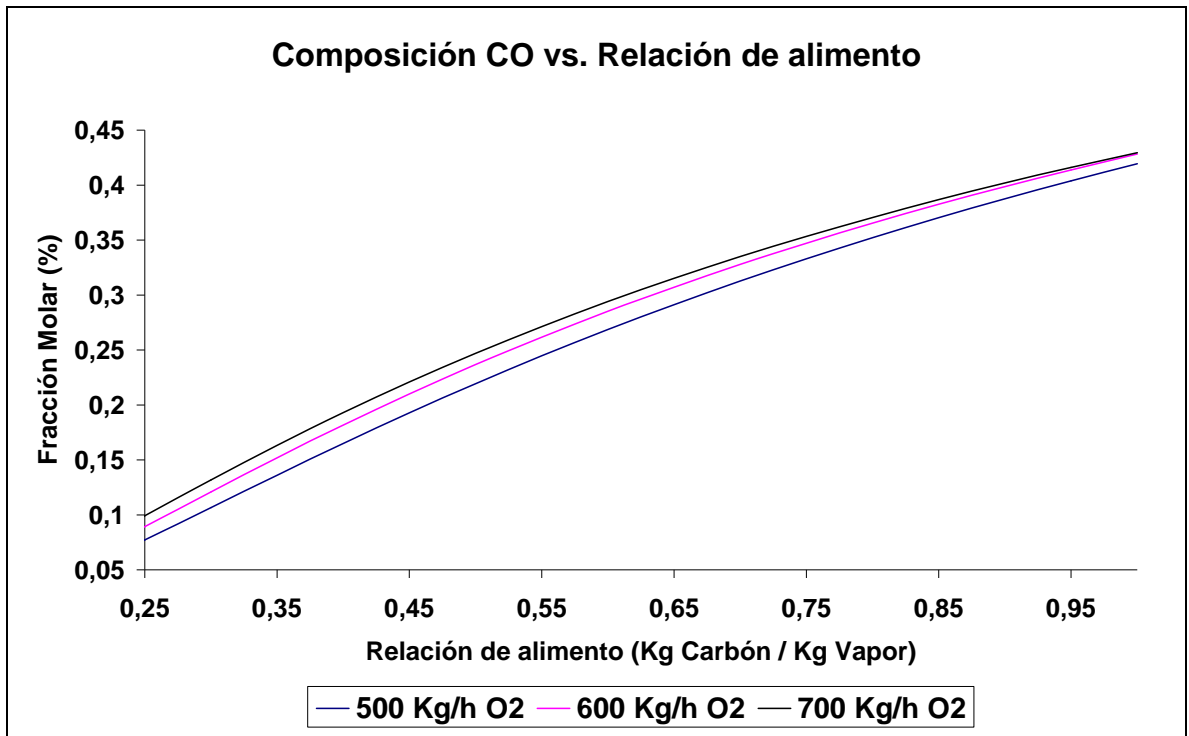
Gráfica 27. Flujo de 700 Kg/h de Vapor



Gráfica 28. Composición de H<sub>2</sub> para diferentes flujos de Oxígeno



Gráfica 29. Composición de CO para diferentes flujos de Oxígeno



Gráfica 30. Temperatura para diferentes flujos de Oxígeno

