

**SIMULACIÓN DE UN SISTEMA GASIFICADOR
DE BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR CONECTADO
A UN REACTOR WGS PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO**

NOLBERTO GONZÁLEZ LAGUADO

VLADIMIR ANTONIO QUINTANILLA PRADA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2008

**SIMULACIÓN DE UN SISTEMA GASIFICADOR
DE BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR CONECTADO
A UN REACTOR WGS PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO**

**PROYECTO DE GRADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE:
INGENIERO QUÍMICO**

**AUTORES: NOLBERTO GONZÁLEZ LAGUADO
 VLADIMIR ANTONIO QUINTANILLA PRADA**

DIRECTOR: Dr. M.Sc. VIATCHESLAV KAFAROV

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2008

AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan sus agradecimientos a:

Al Director del Proyecto, **Viatcheslav Kafarov**, por su confianza, apoyo y aportes realizados para culminar esta fase.

A nuestras familias por el apoyo absoluto.

A nuestros amigos, quienes estuvieron incondicionalmente motivándonos.

A la Universidad Industrial de Santander, por habernos permitido crecer de manera integral a nivel personal y profesional.

A todas las personas que de una u otra forma, colaboraron o participaron en el desarrollo de este trabajo de grado.

DEDICATORIA

*A Dios y a San Francisco de Asís,
por sus bendiciones*

Y por nunca desampararme.

A mis padres por su amor y su paciencia,

Por estar en todo momento motivándome

a sacarle el lado bueno a todo.

A Juan, Claudia y Angelo,

por colaborarme, apoyarme,

hacerme reír y por sus consejos.

NOLBERTO

DEDICATORIA

Gracias ...

A Dios, por la fortaleza

A mis padres, por su afecto y apoyo incondicional

*Y a todas las personas que me motivaron
en este camino recorrido.*

VLADIMIR

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	16
1. MARCO TEÓRICO	17
1.1 GENERALIDADES	17
1.2. BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR	18
1.2.1. Composición Física	18
1.2.2. Composición Química	18
1.3. BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR EN COLOMBIA	19
1.4. GASIFICACIÓN DEL BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR	20
1.4.1. Gasificadores en Contra Corriente (Ufdraft)	21
1.4.2. Gasificadores en Corriente Directa (Downdraft)	22
1.4.3. Gasificadores de Lecho Fluidizado	22
1.4.4. Agentes Gasificantes	23
1.4.5. Termoquímica del proceso de Gasificación	23
1.4.6. Reacciones en el proceso de Gasificación	24
1.4.7. Factores de Operación	25
1.5. REACTOR WGS (Water Gas Shift)	26
1.6. Hidrógeno para la producción de energía.	27
2. MODELAMIENTO Y SIMULACION	29
2.1. PLANTEAMIENTO DEL MODELO	29
2.2. SIMULACION DE LA CORRIENTE DE BAGAZO DE CAÑA DE AZUCAR	32
2.3. SIMULACION DEL GASIFICADOR	32
2.4. SIMULACION DEL REACTOR DE EQUILIBRIO WGS	33
3. RESULTADOS Y ANALISIS DE LA SIMULACION	35
3.1. RESULTADOS DE LA SIMULACION DEL PROCESO	35
3.1.1. Agente Gasificante: Aire	36
3.1.2. Agente Gasificante: Vapor de Agua	38
4. CONCLUSIONES	40
5. BIBLIOGRAFIA	41
6. ANEXOS	43

LISTA DE TABLAS

Tabla 1	Composición física del bagazo de caña	18
Tabla 2	Composición química del bagazo de caña	18
Tabla 3	Alimentos usados en plantas de gasificación	19
Tabla 4	Composición del gas obtenido de acuerdo al agente gasificante	21
Tabla 5	Resumen de los métodos de producción de hidrógeno	28
Tabla 6	Composiciones Típicas del Gas de Síntesis según el Gasificador	30
Tabla 7	Concentración de sólidos y alquitrán en el gas según el tipo de gasificador	30
Tabla 8	Propiedades físicas y químicas del bagazo de caña de azúcar	32
Tabla 9	Propiedades de las corrientes de entrada al Gasificador	33
Tabla 10	Datos para la validación del modelo	33
Tabla 11	Composiciones Molares	35

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Proceso de gasificación	20
Figura 2	Características para seleccionar el método de gasificación	20
Figura 3	Tipos de Gasificadores	22
Figura 4	Diagrama de flujo de proceso modelado	31
Figura 5	Temperatura Vs Relación de Alimento	36
Figura 6	Fracción Molar CO Vs Relación de Alimento	36
Figura 7	Fracción Molar H ₂ Vs Relación de Alimento	37
Figura 8	Temperatura Vs Relación de Alimento	38
Figura 9	Fracción Molar CO Vs Relación de Alimento	38
Figura 10	Fracción Molar H ₂ Vs Relación de Alimento	39

LISTA DE ANEXOS

ANEXO A	Representación de la pared celular de los materiales lignocelulósicos	43
ANEXO B	Cultivo de caña de azúcar en Colombia	45
ANEXO C	Tipos de Gasificadores	47
ANEXO D	Metodología del Modelamiento y Simulación	49

RESUMEN

TITULO*:

Simulación de un sistema gasificador de bagazo de caña de azúcar conectado a un reactor WGS para la producción de hidrógeno.

AUTORES**:

NOLBERTO GONZÁLEZ LAGUADO, VLADIMIR ANTONIO QUINTANILLA PRADA.

PALABRAS CLAVES:

Biomasa, bagazo, caña de azúcar, gasificador, reactor wgs, hidrógeno.

DESCRIPCIÓN:

El objetivo de esta tesis de grado es investigar y presentar una alternativa de energía limpia y ecológica, como lo es el Hidrógeno. En este trabajo se realizó la simulación de un Gasificador de bagazo de caña de azúcar; Downdraft; conectado a un reactor WGS convencional, para la producción de Hidrógeno. El desarrollo de este estudio se llevó a cabo empleando el simulador de procesos ASPEN HYSYS versión 3.2.

En la simulación se manejan dos alternativas como Agentes Gasificantes (Aire y Vapor de Agua) los cuales junto con la corriente de Bagazo de caña de azúcar, ingresan al gasificador, obteniendo el gas de Síntesis (de bajo poder calorífico), el cual junto con otra corriente de vapor de agua, ingresan al reactor WGS, donde se obtiene como resultado el gas de salida rico en Hidrógeno.

Los resultados de la simulación muestran la influencia de la relación de alimento (Bagazo/Agente Gasificante) en la composición del gas de Síntesis proveniente del gasificador, y la relación del alimento (vapor de agua/gas síntesis) en la temperatura y composición del gas de salida del reactor WGS. Al final, el objetivo es encontrar un rango óptimo de relación, donde la concentración de hidrogeno muestre los valores máximos.

* Proyecto de grado

** Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Dr. M.Sc. VIATCHESLAV KAFAROV

SUMMARY

TITLE*:

Simulation of a gasifier of waste pulp of sugar cane connected to a WGS reactor for production of hydrogen.

AUTHORS**:

NOLBERTO GONZÁLEZ LAGUADO, VLADIMIR ANTONIO QUINTANILLA PRADA.

KEY WORDS:

Biomass, waste pulp, sugar cane, gasifier, WGS reactor, hydrogen

ABSTRACT:

The objective of this thesis project is to investigate and present a clean and ecologic alternative of energy as it is the hydrogen. In this work it a simulation of a gasifier of waste pulp of sugar cane was applied, Downdraft, connected to a conventional WGS reactor for production of hydrogen. The development of this study was carried out using the simulator of processes ASPEN HYSYS version 3.2

In the simulation two alternatives are utilized as gasifying agents (air and water vapor) which together with the stream of waste pulp of sugar cane, enter to the gasifier obtaining gas of synthesis (gas of low calorific power), which together with another stream of water vapor, enter to the WGS reactor, where gas of exit rich in hydrogen is obtained as the result.

The outcomes of this simulation shows the influence of the relationship of foodstuff (waste pulp/ gasifying agent) in the composition of gas of synthesis originated from the gasifier, and the relationship of foodstuff (water vapor / gas of synthesis) in the temperature and composition of gas of exit of WGS reactor. At the end, the objective is to find a minimum optimum range of relation where the concentration of hydrogen shows the maximum values.

* Degree Project

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

INTRODUCCION

El uso y la explotación de los recursos energéticos sumado a la globalización han traído consigo un incremento en el consumo de energía, la consecuencia directa es un acrecentamiento en las emisiones de CO₂ (Dióxido de Carbono), que amenaza el clima del planeta. Resulta indispensable investigar y adoptar tecnologías de combustión más avanzadas con emisiones contaminantes cercanas a cero y con las máximas contribuciones posibles de energías renovables con el objetivo de garantizar el menor daño medioambiental posible.

La obtención de hidrógeno a partir de biomasa constituye una alternativa interesante, dado que se postula como futuro vector energético en sustitución de los combustibles fósiles actuales.

La producción de panela es una de las principales actividades agropecuarias de Colombia, de la molienda de la caña y de la extracción de su jugo resulta el bagazo, compuesto por un conjunto de fibras y partículas de diferentes tamaños. El uso habitual y de superior cobertura del bagazo, es la producción de energía mediante la combustión en el sector panelero y azucarero. Gracias a sus propiedades el bagazo es un material alternativo para la obtención de hidrógeno.

En este documento se presenta el proceso de simulación de un sistema gasificador de bagazo de caña de azúcar conectado a un reactor WGS para la producción de hidrógeno.

El hidrógeno es un elemento químico que contiene energía y que puede ser almacenado en forma líquida o gaseosa. El hidrógeno es 14 veces más ligero que el aire, incoloro, inodoro y no tóxico, ya que su único producto luego de la combustión es agua. El hidrógeno es el elemento más ligero y abundante en la naturaleza, presenta propiedades que hacen delicada su utilización en condiciones seguras: es altamente inflamable, tiene una alta detonabilidad en el medio ambiente, presenta un bajo calor de vaporización, una baja energía de ignición y posee la más grande energía de combustión por unidad de masa.

1. MARCO TEÓRICO

1.1. GENERALIDADES

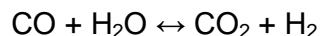
Los procesos de gasificación constituyen una tecnología prometedora en el aprovechamiento de la biomasa de desechos agrícolas con fines energéticos contribuyendo con el medio ambiente en la reducción de las emisiones de CO₂ a la atmósfera. La tecnología consiste en generar un gas de síntesis que podría no sólo usarse como combustible para generación de energía eléctrica, sino también para la producción de hidrógeno. El proceso de gasificación consta de tres etapas básicas: el secado, la pirólisis y la gasificación. Los tres tipos principales de gasificadores son:

- Gasificadores en contracorriente (Updraft).
- Gasificadores en corriente directa (Downdraft).
- Gasificadores de lecho fluidizado.

La selección del tipo de gasificador que se va a emplear depende de la potencia que se desee. En los gasificadores de lecho de flujo de arrastre se pueden tener dos variantes, puede procesar combustibles sólidos o líquidos, si se trata de un combustible sólido éste tiene que ser pulverizado finamente antes de entrar al gasificador, o si el combustible es líquido tiene que ser atomizado, en ambos casos se alimentan junto con él o los agentes gasificantes. Los procesos de lecho fluidizado y lecho móvil únicamente pueden procesar combustibles sólidos, incluyendo la biomasa.

En esencia, la gasificación es el proceso de conversión de la biomasa en un gas combustible que contiene monóxido de carbono e hidrógeno principalmente por medio de un proceso termoquímico.

Para disminuir la concentración de monóxido de carbono (CO), se acude a la reacción de desplazamiento de gas de agua ("water gas shift", WGS); la cual también tiene el efecto de aumentar la producción de hidrógeno:



1.2. BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR

La caña de azúcar es una gramínea tropical, en cuyos tallos se forma y se acumula un jugo rico en sacarosa, forma espiguillas pequeñas agrupadas en rosetas y rodeadas por largas fibras sedosas. El bagazo se compone de un conjunto de fibras y partículas de diferentes tamaños que se obtienen de la molienda de la caña cuando se extrae su jugo. El uso tradicional y de mayor cobertura del bagazo, es la producción de energía mediante su combustión en el sector azucarero y panelero, ocasionando por la emisión de Dióxido de Carbono, grave deterioro al medio ambiente.

1.2.1. Composición Física. La composición física del bagazo varía entre límites bastante estrechos; desde el punto de vista de la producción de vapor; su propiedad más importante es la humedad.

Tabla 1. Composición Física del bagazo de caña [13].

COMPOSICION	PORCENTAJE (%)
Lignocelulósicos	45
Sólidos insolubles	2 – 3
Sólidos Solubles	2 – 3
Agua	49 – 51

1.2.2. Composición Química. El bagazo al igual que todos los materiales lignocelulósicos, se compone de Celulosa, Hemicelulosa y Lignina como principales polímeros naturales. En el anexo A, se representa la estructura de la pared celular de las plantas.

Tabla 2. Composición Química del bagazo de caña¹

COMPOSICION	PORCENTAJE (%)
Celulosa	46.6
Hemicelulosa	25.2
Lignina	20.7

¹ En Línea:

<http://www.uncu.edu.ar/contenido/skins/unc/download/1630%20vaz%20roselapres%20jornVR%20REDUCIDA.ppt>

Debido a sus propiedades el bagazo se ha convertido en un material interesante para la obtención de hidrógeno.

Tabla 3. Alimentos usados en plantas de gasificación [8].

Alimento	Plantas en Operación	Plantas Planeadas
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 vacio	12	2
Desconocido	40	6
TOTALES	160	35

1.3. BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR EN COLOMBIA

En el mundo cerca de 30 países producen panela, una de las principales actividades agropecuarias de Colombia, ocupando de esta manera el segundo lugar a nivel mundial después de la India. Otros países latinoamericanos que producen panela son: Brasil, Guatemala, México, Perú y Honduras, entre otros, pero con montos de producción bastante inferiores. Del total de esa producción de panela, un poco más del 90% se destina directamente a la alimentación; el resto se utiliza en la elaboración de otros alimentos y en otros usos no especificados. En el anexo B se presentan datos estadísticos acerca del cultivo de caña de azúcar en Colombia.

1.4. GASIFICACIÓN DEL BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR

La gasificación es un proceso termoquímico en el que un sustrato carbonoso (residuo orgánico) es transformado en un gas combustible de bajo poder calorífico, mediante una serie de reacciones que ocurren a una temperatura determinada en presencia de un agente gasificante (aire, oxígeno y/o vapor de agua).

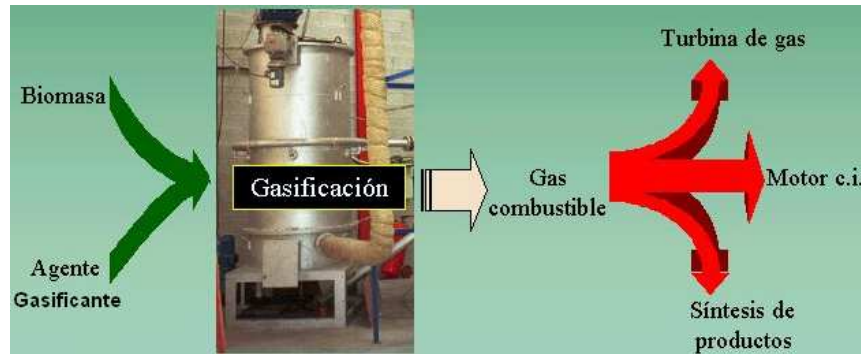


Figura 1. Proceso de gasificación²

La elección del método para llevar a cabo el proceso de gasificación depende de varios factores como el tamaño y forma del residuo, el aprovechamiento de la energía del gas producido que vaya a hacerse y, por supuesto, de los condicionantes económicos.

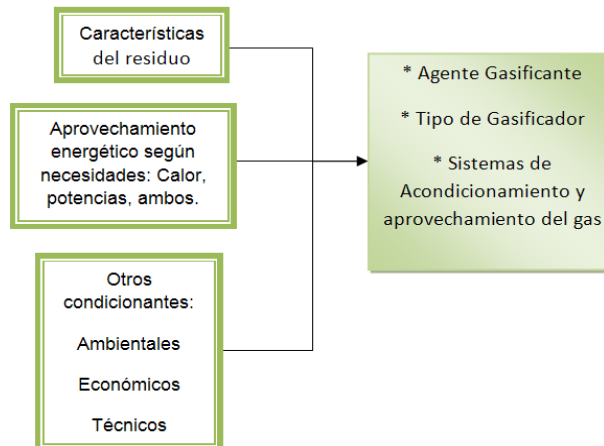


Figura 2. Características para seleccionar el método de gasificación

² En línea: [<http://www.cps.unizar.es/~proter/Gasificaci%F3n.htm>]

La utilización energética de este gas pobre puede hacerse quemándolo inmediatamente en una cámara de combustión, o introduciéndolo en una turbina de gas o un motor de combustión interna. El agente gasificante puede ser tanto aire, oxígeno, aire enriquecido con oxígeno, vapor de agua o hidrógeno, de modo que se obtienen diferentes mezclas de gases que a su vez pueden tener diferentes utilidades, de tal modo que el llamado “gas producto” puede ser muy diverso.

Tabla 4. Composición del gas obtenido de acuerdo al agente gasificante³

AGENTE GASIFICANTE	PCS (MJ/m ³)	COMPOSICION DEL GAS OBTENIDO (% en volumen)						USO
		H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	N ₂	C ₂	
Aire	< 6	16	20	12	2	50	-	Combustible
Oxígeno	10 - 20	32	48	15	2	3	-	Combustible gas de síntesis
Vapor de Agua	10 - 20	50	20	22	6	-	2	Combustible gas de síntesis
Hidrógeno	> 30							Sustituto del gas natural

Los dispositivos de contacto entre el combustible y el comburente pueden ser también muy diferentes pero respecto al sentido de flujo del gas y del sólido a gasificar se clasifican en tres grandes grupos cuyas propiedades se analizan en el anexo C.

- Gasificadores en Contracorriente (normalmente llamados Updraft)
- Gasificadores en Corriente directa (normalmente llamados Downdraft).
- Gasificadores de Lecho Fluidizado

1.4.1. Gasificadores en contracorriente (Updraft). Los gasificadores de lecho móvil se utilizan con combustibles troceados en tamaños de 1 a 10 cm. El de lecho móvil en contracorriente es el reactor más simple. El gas, que se produce en la zona de gasificación, sale del reactor junto con los productos de la pirólisis y del vapor procedente de la zona de secado. El gas de proceso tiene un alto porcentaje de alquitranes y una temperatura de unos 400 °C, pudiendo utilizarse para calefacción. En la figura 3 se esquematiza el funcionamiento y el perfil de temperatura de un generador típico operando con biomasa húmeda.

³ En línea: [<http://www.cps.unizar.es/~proter/Gasificaci%F3n.htm>]

1.4.2. Gasificador en corriente directa (downdraft). La principal característica de este tipo de reactor es que todos los productos procedentes de la zona de pirólisis son forzados a pasar por la zona de oxidación. De esta forma los alquitranes pasan a hidrocarburos ligeros y a gases de peso molecular bajo, como son el CO y el metano. El gas obtenido sale del gasificador a unos 700°C y contiene alrededor de 1 g/Nm³ de alquitranes. Así, aunque siempre sea necesario un sistema de limpieza del gas, es muy interesante su uso en motores de combustión interna. La figura 3 determina el esquema conceptual del reactor.

1.4.3. Gasificadores de lecho fluidizado. Se trata de un tipo de gasificador en el que el sólido es mantenido en suspensión mediante el gas. En general, no podemos distinguir zonas más o menos diferenciadas en las que se lleven a cabo los distintos procesos de secado, pirólisis, etc. Cada partícula es sometida de forma instantánea-consecutiva-simultánea a estos procesos en cualquier punto del gasificador tras su entrada en él, siendo finalmente las cenizas elutriadas por el gas emergente, como se muestra en la figura 3.

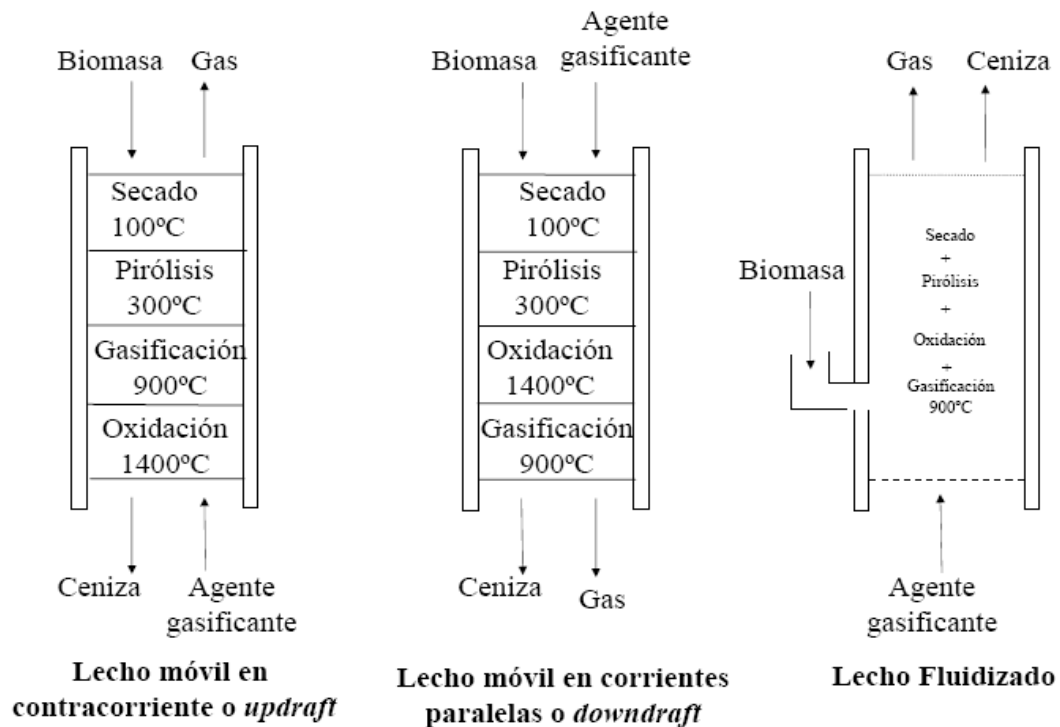


Figura 3. Tipos de Gasificadores⁴

⁴ En línea: [http://www.soriactiva.com/Biodiversidad/JornadasBioenergia1/PDF/17_GASBI.pdf]

1.4.4. Agentes Gasificantes. El término genérico gasificación engloba una gran variedad de procesos en los que pueden obtenerse muy diversos productos. Basándose en el agente gasificante empleado puede establecerse una primera clasificación de los procesos de gasificación:

- **Con aire:** La reacción de combustión parcial con el aire da lugar a una reacción exotérmica que produce un gas de bajo poder calorífico, que será aprovechado con fines de carácter energético.

- **Con oxígeno:** Se produce un gas de poder calorífico medio, pero de mayor calidad al no estar diluido con N_2 . Además en aplicaciones de carácter energético puede utilizarse como gas de síntesis para la obtención de metanol.

- **Con vapor de agua y/o oxígeno (o aire):** Se produce un gas enriquecido en H_2 y CO que se puede utilizar como gas de síntesis para diversos compuestos (amoníaco, metanol, gasolinas, etc.)². El empleo de vapor de agua en la alimentación permite incrementar la producción de hidrógeno reduciendo la producción de alquitrans.

1.4.5. Termoquímica del proceso de gasificación. En el proceso de gasificación tienen lugar una gran variedad de reacciones cuyo orden e importancia relativa depende de las condiciones de operación y del agente gasificante utilizado, pero que pueden agruparse en tres bloques o etapas en los que conceptualmente puede dividirse un proceso de gasificación:⁵

- **Pirólisis o descomposición térmica:** En la que mediante calor, el sólido original se descompone en una mezcla sólido, líquido, gas. Al sólido originado en esta etapa se le suele denominar char y, a los líquidos, debido a la presencia mayoritaria de alquitrans y vapores condensables, tar. Puede incluirse aquí el proceso de secado que tiene lugar al entrar la biomasa al gasificador, aunque este proceso no implica ninguna reacción química.

- **Oxidación o combustión:** Tiene lugar cuando el agente gasificante es un oxidante como oxígeno o aire e implica el conjunto de reacciones de oxidación, tanto homogéneas como heterogéneas, fundamentalmente exotérmicas, mediante las que se genera el calor necesario para que el proceso se mantenga.

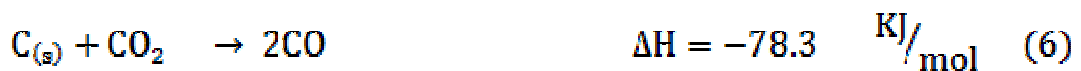
⁵ En línea: [http://www.volund.dk/technologies_products/gasification/the_gasification_process]

- **Reducción o gasificación:** La constituyen las reacciones sólido-gas o en fase gas, mediante las que el sólido remanente se convierte en gas. Se trata de reacciones fundamentalmente endotérmicas, algunas de las cuales tienen lugar en muy poca extensión, o solo tienen lugar en determinadas condiciones, como ocurre con algunas reacciones de hidrogenación y/o reformado.

Las etapas de oxidación y reducción pueden considerarse conjuntamente en una sola etapa de gasificación en la que tienen lugar todo tipo de reacciones posibles entre el char y la mezcla gaseosa presente.

Existen una serie de factores que influyen en el proceso de gasificación, pudiendo distinguirse entre los que se refieren al modo de operación y al sólido gasificado, y los que son inherentes al diseño del gasificador y de los equipos auxiliares.

1.4.6. Reacciones en el proceso de Gasificación





1.4.7. Factores de operación

- **Temperatura:** La temperatura es un parámetro importante en todas las etapas, y por tanto en el rendimiento final del proceso. En concreto, las proporciones entre char, tar y gas en los productos de pirólisis dependen estrechamente de la velocidad de calentamiento y de la temperatura final alcanzada. Como idea general puede decirse que a altas velocidades de calentamiento y alta temperatura final se produce mayoritariamente gas, mientras que a temperaturas finales y velocidades de calentamiento menores se producen mayoritariamente líquidos o sólidos.

En los gasificadores de lecho fluidizado se tiene normalmente velocidades de calentamiento altas (hasta miles de °C/seg), mientras que en los reactores de lecho móvil las velocidades de calentamiento suelen ser moderadas (del orden de 0,2 - 0,5 °C/ seg).

En la etapa de gasificación propiamente dicha, dada la reversibilidad de la mayoría de las reacciones, la temperatura influye en los equilibrios de reacción. En general para distintos combustibles puede decirse que el aumento de temperatura favorece el aumento del contenido en el gas producto de H₂ y CO en detrimento del CH₄ y del H₂O.

- **Presión:** En general el aumento de la presión desfavorece las reacciones de gasificación, aumentando las proporciones de hidrocarburos y alquitranes. Los gasificadores de lecho móvil suelen trabajar a presión atmosférica y los de lecho fluidizado suelen trabajar a presión, alcanzándose hasta los 30 bars en algunos casos.

- **Relación agente gasificante/residuo:** Es uno de los parámetros más importantes en la gasificación, especialmente cuando esta se autoabastece energéticamente mediante la oxidación parcial, con aire u oxígeno del residuo tratado.

Valores excesivamente bajos de este parámetro pueden no generar la cantidad suficiente de energía para mantener el proceso en las condiciones adecuadas, produciéndose una disminución del rendimiento. Por otro lado, cuando el agente gasificante es aire, existe además un efecto de dilución por parte del N₂.

Por ello hay un valor óptimo de la relación gasificante/residuo para cada proceso, que depende básicamente de la composición del residuo gasificado. Así, por ejemplo, cuando se trata de biomasa forestal la relación óptima en peso de aire/biomasa se ha comprobado que está entre 0,5 y 1,6 para los gasificadores de lecho fluido, y alrededor de 1,5 para los gasificadores de lecho móvil.

Así se relaciona, por un lado el aumento de temperatura que produce una disminución de la proporción de residuo sólido y condensables generados en la etapa de pirólisis, y por otro la disminución de la calidad del gas.

1.5. REACTOR WGS (Water Gas Shift)

Habitualmente, el hidrógeno se obtiene a partir del reformado o la oxidación parcial de hidrocarburos o alcoholes. Estos procesos producen una corriente compuesta por hidrógeno, monóxido de carbono, dióxido de carbono y pequeñas cantidades de metano. La concentración de CO que sale del reformador debe ser reducida dependiendo del uso del producto final.

Una reacción extensamente utilizada para reducir el contenido de CO es la de desplazamiento de gas de agua ("water gas shift", WGS); la cual tiene el doble efecto de disminuir la concentración de CO y aumentar la producción de hidrógeno: $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ $\Delta H^{\circ}_{298\text{ K}} = - 41.09 \text{ KJ/mol}$

La reacción de WGS presenta una exotermia moderada y está fuertemente controlada por el equilibrio químico. La conversión de equilibrio es favorecida por las bajas temperaturas y es prácticamente independiente de la presión. En aplicaciones de celdas de combustible las limitaciones de equilibrio rigen el diseño del reactor de WGS, convirtiéndolo en el equipo más voluminoso del sistema general de generación-purificación.⁶

Una opción interesante para aumentar la conversión de monóxido de carbono, es emplear reactores de membrana. Estos reactores presentan un interés creciente debido a que permiten concentrar en una sola unidad dos procesos químicos clásicos, la reacción química y la separación.

En el caso de las reacciones limitadas por el equilibrio, como la reacción de WGS, el desplazamiento se logra porque la membrana consigue permear en forma preferencial o selectiva alguno de los productos de la reacción. En el

⁶ En línea:

[http://www.netl.doe.gov/technologies/hydrogen_clean_fuels/refshelf/papers/hydrogen/Kinetics%20of%20the%20Homogeneous%20Reverse%20Water-Gas%20Shift%20Reaction.pdf]

caso de la reacción de WGS, es posible promover el desplazamiento del equilibrio mediante la extracción selectiva de alguno de los productos (hidrógeno o CO₂) del medio de reacción.

El desplazamiento del equilibrio no sólo podría aumentar la conversión por paso, reduciendo la cantidad de reciclo necesario y los costos de operación del proceso, sino que para una conversión dada permitiría reducir la masa de catalizador y/o la temperatura de operación.

La remoción de H₂ puede realizarse mediante membranas densas selectivas a hidrógeno, de paladio o de sus aleaciones. Si bien, las membranas densas ofrecen altas selectividades a gases específicos, su baja permeabilidad y el alto costo del paladio han limitado su uso a procesos de pequeña escala. Una alternativa para aumentar el flujo, consiste en utilizar membranas compuestas. En ellas, un sustrato de alta porosidad con baja resistencia al flujo se recubre de una capa metálica, que es la que proporciona la selectividad.

1.6. HIDRÓGENO PARA LA PRODUCCIÓN DE ENERGÍA

El Hidrógeno fue descubierto en 1776 por Cavendish, y bautizado cinco años después por Lavoasier. En 1920 comienza la producción industrial, siendo ampliamente utilizado en forma de gas. Se espera que durante la primera mitad del siglo XXI comience su uso generalizado como portador energético.

La producción de hidrógeno ha sido un tema de gran importancia en las últimas décadas, pero en la actualidad se ha convertido en un proceso clave impulsado, entre otros factores, por los avances en la tecnología de celdas de combustible. Esta situación ha intensificado los estudios tendientes a mejorar las tecnologías existentes y a desarrollar nuevos procesos, tanto en las etapas de generación de H₂ como en las de purificación del mismo.

El petróleo y otros combustibles fósiles, como el carbón, tienen los días contados. Las previsiones pesimistas hablan de 30 años, y las más optimistas de 60, pero es indudable que se acabarán algún día. Es sorprendente como los intereses económicos de las grandes compañías petroleras son capaces de bloquear (o al menos dificultar) la búsqueda de fuentes de energía que nos permitan mantener nuestro actual modo de vida. Desde hace décadas se habla del hidrógeno como uno de los candidatos a sustituir a estas fuentes 'tradicionales'.

El hidrógeno tiene la ventaja de que al quemarlo produce energía y sólo se desprende vapor de agua, nada de CO₂. Los científicos llevan años intentando sintetizarlo de forma rentable⁷.

En la tabla 5 se resumen las estimaciones actuales del costo de producción de Hidrógeno utilizando diversos procesos e indica las eficiencias que se pueden alcanzar actualmente.

Tabla 5. Resumen de los métodos de producción de hidrógeno⁸

Proceso de obtención	Rendimiento Neto	Costo de Producción c € / Kwh (sin ingresos por energía)
Reformado	< 74	2,4
Gasificación	hasta 60 ó 70	3,6 Carbón 5,1 Biomasa
Oxidación Parcial	73 - 77	2,2
Electrólisis	73 (30 bar) 77(100 bar)	5,6

⁷ En línea: [<http://www.cienciateca.com/azucarygrasa.html>]

⁸ En línea: [<http://www.rac.es/ficheros/doc/00447.pdf>]

2. MODELAMIENTO Y SIMULACION

El proceso de gasificación de bagazo de caña de azúcar conectado a un reactor WGS; fue modelado y simulado empleando la herramienta comercial para la simulación de procesos; ASPEN HYSYS V 3.2® siguiendo una metodología definida, ver anexo D.

2.1. PLANTEAMIENTO DEL MODELO

En la elección del tipo de gasificador a modelar y simular se consideraron los siguientes criterios:

- La cantidad de plantas existentes.
- La producción de un gas relativamente limpio de alquitranes, polvo y cenizas (ver tabla 7).
- La calidad deseada para el producto gaseoso a obtener (Gas de Síntesis).
- El tamaño y la densidad del residuo biomásico (bagazo de caña de azúcar) a procesar.
- La capacidad de procesamiento del gasificador y las condiciones de operación.
- Elevada conversión de la biomasa

Todos estos parámetros con el objetivo de obtener la mayor cantidad de hidrógeno.

Después de un amplio estudio bibliográfico y de analizar las ventajas y desventajas de los distintos tipos de gasificadores existentes en el mercado, se escoge un **gasificador Downdraft** para la realización de este trabajo, el cual produce mayor cantidad hidrógeno (H_2) (ver tabla 6), respondiendo así a las necesidades planteadas.

Otras ventajas que presenta el gasificador Downdraft son su fácil construcción, operación, la citada del bajo contenido en tar (alquitranes) de los gases y alta conversión de la biomasa, gracias a las altas temperaturas que se manejan en la zona de oxidación. El modo de operación es simple y adaptable a diferentes tipos de alimentación (biomasa), las pérdidas de energía son relativamente bajas, su construcción es sencilla y la eliminación de las cenizas es rápida y fácil.

Tabla 6. Composiciones Típicas del Gas de Síntesis según el Gasificador.

Tipo de Gasificador	Agente Gasificante	Composición del gas seco (vol. %)					
		H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	N ₂	PCS (MJ/Nm ³)
Lecho Fluidizado	Aire	9	14	20	7	50	5.4
Lecho Móvil Downdraft	Aire	17	21	13	1	48	5.7

Para la realización del modelo de gasificador de Bagazo de caña de azúcar se consideró que los productos gaseosos alcanzan el equilibrio químico debido a las altas temperaturas alcanzadas en la zona de oxidación en el tipo de gasificador Downdraft.

La biomasa es un material fibroso y de baja densidad, por lo tanto, para ingresarla al gasificador es necesario hacerle un pre-tratamiento el cual consiste en transformarla a gránulos o briquetas, de lo contrario ocasionarían problemas de circulación y una caída excesiva de presión en el gasificador.

Tabla 7. Concentración de sólidos y alquitrán en el gas según el tipo de gasificador⁹

Tipo gasificador	Alquitrán (mg/m ³)	Partículas sólidas (mg/m ³)	Escalado	Capacidad máx. (T/h)
Lecho móvil en contracorriente (Updraft)	10000 - 100000	100 - 1000	Bueno	10
Lecho móvil en corrientes paralelas (Downdraft)	40 - 300	100 - 6000	Limitado	0,5
Lecho fluidizado y de transporte	2000 - 10000	10000 -100000	Bueno	20

⁹ En línea:

[http://www.aragoninvestiga.org/investigacion/temas_todo.asp?id_tema=28&intPagActual=1&categoria=Ciencias+Experimentales&id_categoria=290]

Para la realización de este modelo, se consideró el alcance al equilibrio químico del gasificador. El gasificador Downdraft se simuló en HYSYS como un reactor de conversión y el reactor Water Gas Shift (WGS) como un reactor de equilibrio (Ver figura 4). El bagazo de caña de azúcar es alimentado al reactor de conversión en el cual ocurren las reacciones (1, 2, 3, 4, 5, 6); citadas en el marco teórico. Los productos gaseosos pasan al reactor de equilibrio donde se lleva a cabo la reacción (7), realizando el proceso final de obtención de hidrogeno y limpieza del gas de síntesis mediante el consumo de monóxido de Carbono (CO).

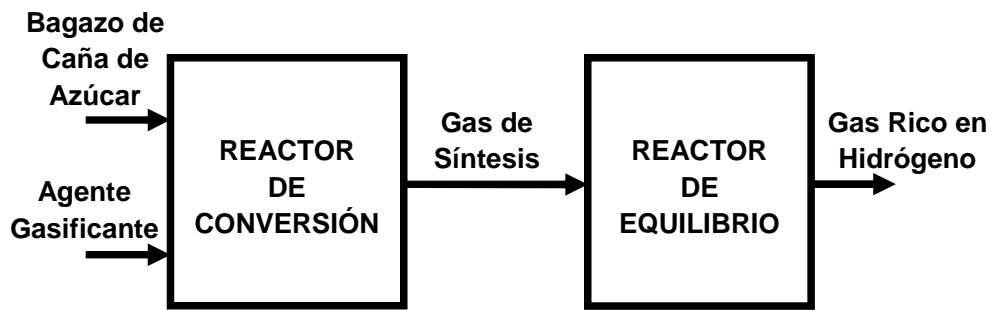
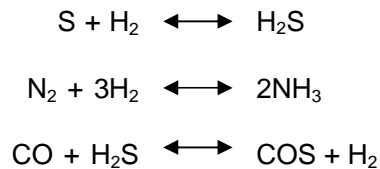


Figura 4. Diagrama de flujo de proceso modelado.

La composición del bagazo de caña de azúcar presenta muy bajo contenido de azufre (S) entre 0.018 a 0.020 % peso; comparado con las demás concentraciones de compuestos importantes como el Carbono, Hidrógeno y Oxígeno (ver tabla 8); lo cual hace que en el producto de gas de síntesis la presencia de sulfuros sea muy pequeña, por lo tanto las reacciones:



No se tuvieron en cuenta para el desarrollo del modelo y simulación en HYSYS.

2.2. SIMULACION DE LA CORRIENTE DE BAGAZO DE CAÑA DE AZUCAR

La herramienta para la simulación de procesos HYSYS no contiene el bagazo de caña de azúcar como un compuesto en su base de datos, por lo cual, la entrada de dicha biomasa se trató como una corriente hipotética, teniendo en cuenta la composición química del bagazo, el análisis próximo y último; y las propiedades del sólido (ver tabla 8). El tamaño de partícula considerado para este estudio oscila entre 2 – 10 (cm).

Tabla 8. Propiedades físicas y químicas del bagazo de caña de azúcar.

	Análisis Próximo	Análisis Ultimo (%Peso)	
Humedad (%Peso)	6.4	Carbono	45.16 ± 0.14
Carbono Fijo(%Peso)	13.00 ± 2.85	Hidrógeno	5.66 ± 0.01
Materia Volátil (%Peso)	39.89 ± 4.30	Oxígeno	48.68 ± 0.06
Cenizas (%Peso)	1.51 ± 0.32	Nitrógeno	0.42 ± 0.06
HHV (dry fuel) (MJ/Kg)	18.14 ± 1.16	Sulfuros	0.02 ± 0.002
LHV (dry fuel) (MJ/Kg)	17.70 ± 1.06	Cloruros	0.06 ± 0.02

2.3. SIMULACIÓN DEL GASIFICADOR

Para la simulación del gasificador se hicieron dos pruebas en HYSYS, con dos corrientes diferentes de agente Gasificante; con Vapor de Agua y con Aire; para hacer comparaciones entre los resultados de la composición del gas de síntesis en la corriente de salida.

Para simular las corrientes de alimento y los productos, se consideraron las reacciones de gasificación, ya antes mencionadas, así como también las condiciones de composición, presión y temperatura. Durante el proceso de gasificación las temperaturas varían entre 1000 y 1400 °C a una presión de 2000 KPa. En la entrada de alimentación de bagazo la temperatura es de 20 °C y se considera que está compuesto por un 20 % peso de agua y un 80% peso de bagazo seco. Las condiciones de operación de entrada al gasificador se pueden ver en la tabla 9.

Tabla 9. Propiedades de las corrientes de entrada al Gasificador

Corriente	Bagazo	Vapor de Agua	Aire
Temperatura (°C)	20	400	20
Presión (KP)	2000	2000	2000
Fracción de Vapor	--	1.00	1.00
Composición (Fracción Molar)			
H ₂ O	0.20	1.00	--
N ₂	---	--	0.77
O ₂	0.34	--	0.23
C	0.41	--	--
H ₂	0.05	--	--

Para la realización del modelo se utilizó la ecuación Peng – Robinson como paquete termodinámico, para esto se siguieron las recomendaciones dadas en el manual de usuario del simulador de procesos y por limitaciones de la herramienta HYSYS, no fue tenido en cuenta el contenido de cenizas en la corriente de Bagazo alimentado.

El gas de síntesis está compuesto por: H₂, CO, CO₂, CH₄, considerando que el bagazo reacciona completamente durante todo el proceso de gasificación. Los resultados obtenidos para dicho gas en la simulación, fueron comparados y analizados con los datos reportados en la literatura (ver tabla 10).

Tabla 10. Datos para la validación del modelo

	Agente Gasificante	Composición del Gas Obtenido (%V)					
		H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	N ₂	C
Literatura	Aire	16	20	12	2	50	-
	Vapor de Agua	50	20	22	6	-	2
Modelo Simulado	Aire	17.82	20.16	11.13	1.20	49.69	-
	Vapor de Agua	47.24	29.71	18.93	4.12	-	-

Los datos obtenidos por la simulación y los reportados en la literatura son valores muy cercanos entre sí; esto nos indica que la simulación fue comparativamente óptima.

2.4. SIMULACION DEL REACTOR DE EQUILIBRIO WGS

El reactor WGS se trabajó en HYSYS como un reactor de Gibbs, el cual disminuye la energía libre de Gibbs en la corriente de entrada para calcular la composición de equilibrio en la corriente de salida. A este reactor ingresan dos

corrientes; una que proviene del gasificador y que se ha modificado y ajustado para alcanzar las condiciones de temperatura (600 °C) y presión (800 KPa); y otra adicional de vapor de agua a una temperatura de 150 °C y una presión de 800 KPa que son necesarias en el reactor WGS para llevar a cabo la reacción de equilibrio (7). También se creó un SET para ajustar los flujos molares de las dos corrientes de entrada (vapor y gas de síntesis proveniente del gasificador), cuya relación de alimento varía de acuerdo a los flujos.

La corriente de salida de este reactor contiene el gas producto que gracias a la reacción (7) que ocurre en el reactor WGS, consume el CO dando como resultado un gas-producto rico en Hidrógeno y bajo contenido de CO.

3. RESULTADOS Y ANALISIS DE LA SIMULACION

3.1. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DEL PROCESO

Los datos obtenidos de la simulación para el gas de síntesis provenientes del proceso de gasificación; en el cual se consideraron las relaciones de alimento: (Bagazo/Vapor de Agua) y (Bagazo/Aire); han sido comparados con los datos reportados en la literatura y de acuerdo a esto se realizó la validación. Los resultados que vamos a analizar a continuación son los obtenidos en el reactor de equilibrio (WGS) teniendo en cuenta el gas síntesis que se validó anteriormente.

Para la obtención de los resultados se empleó la relación de alimento: (Vapor de Agua/Gas Síntesis). En cada caso se estudió como de la relación de alimento, depende el rendimiento del reactor WGS y el rendimiento en la producción de hidrógeno, y a su vez observar los efectos en la composición y la temperatura del gas rico en H₂.

Los resultados del reactor WGS se presentan en forma gráfica y mediante una tabla de comparación entre las composiciones molares del Gas Rico en H₂ y el Gas de Síntesis.

Tabla 11. Composiciones Molares

Agente Gasificante	Corrientes	Composición Fracción Molar		
		H ₂	CO	CO ₂
Aire	Gas de Síntesis	0.22	0.20	0.08
	Gas Rico en H ₂	0.29	0.02	0.20
Vapor de Agua	Gas de Síntesis	0.45	0.30	0.05
	Gas Rico en H ₂	0.52	0.08	0.20

3.1.1. Agente Gasificante: Aire

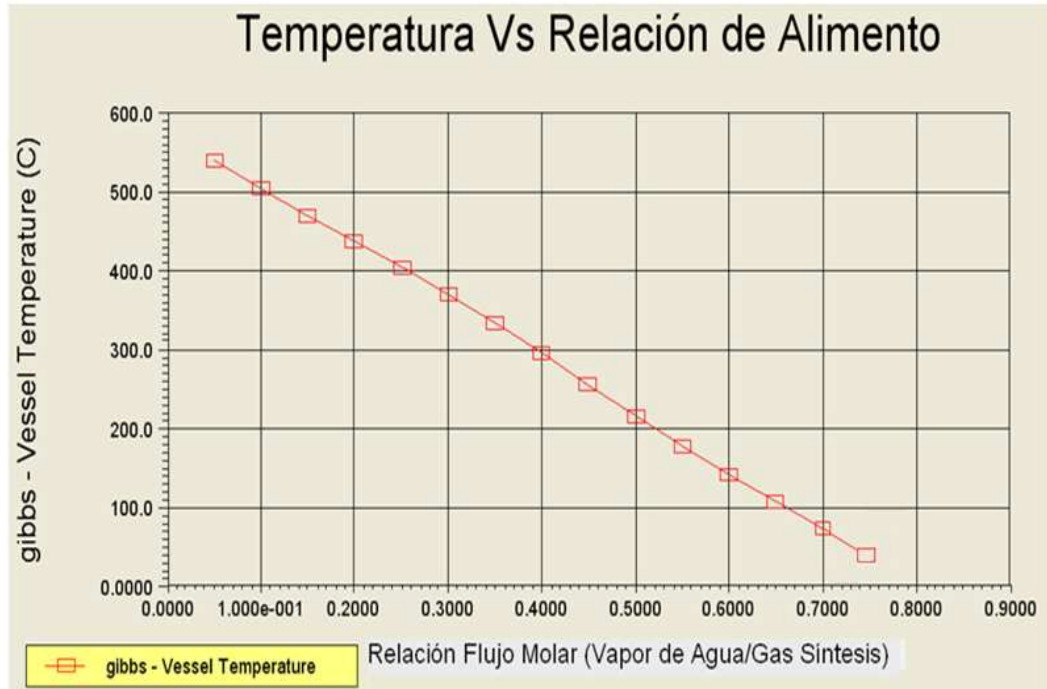


Figura 5. Temperatura Vs Relación de Alimento

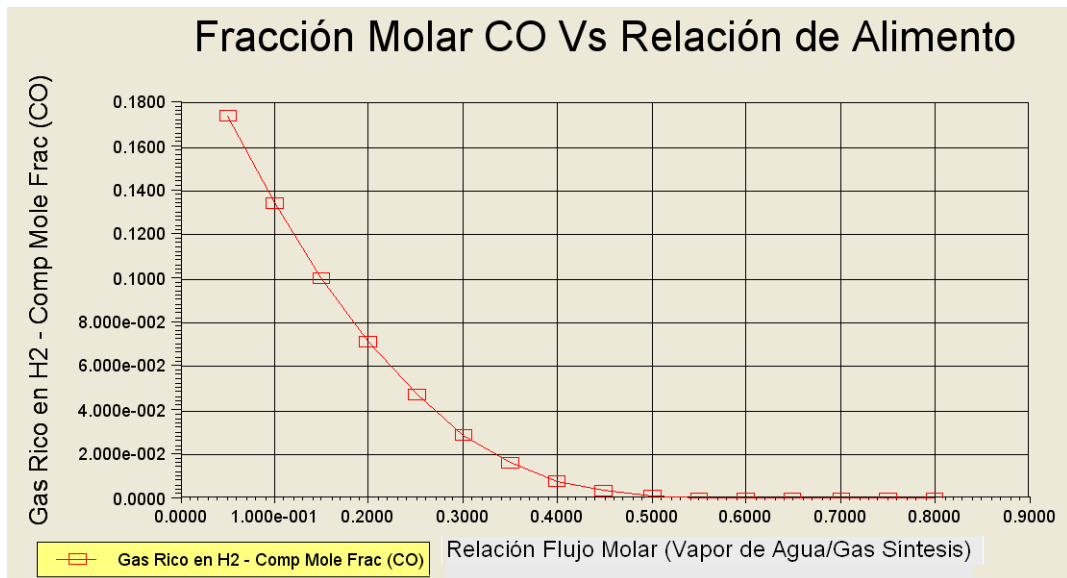


Figura 6. Fracción Molar CO Vs Relación de Alimento

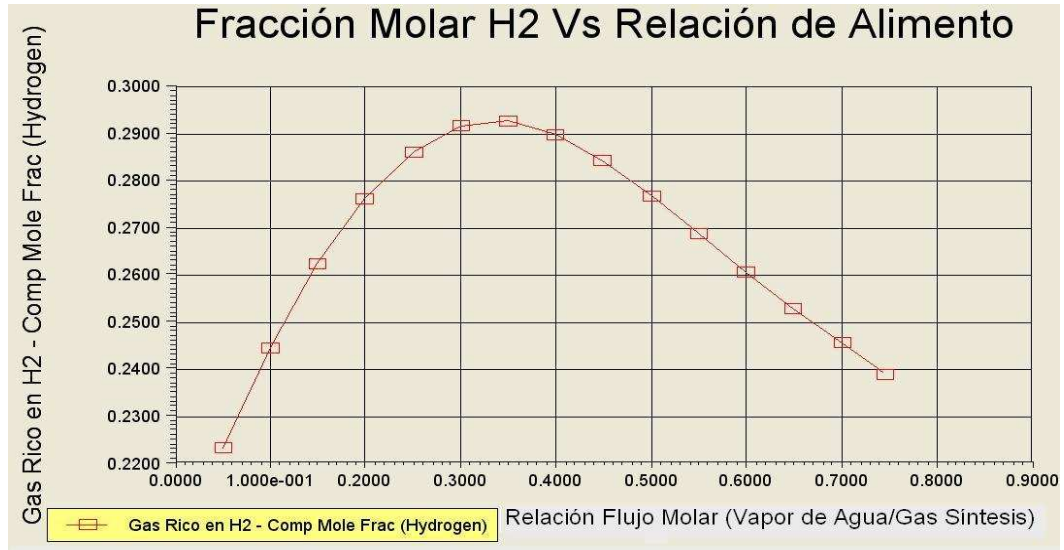


Figura 7. Fracción Molar H₂ Vs Relación de Alimento

A medida que aumenta la relación de flujo molar alimentado al reactor WGS; disminuye la temperatura; esta relación depende del flujo de vapor que ingresa; el cual es inversamente proporcional a la temperatura. Por consiguiente lo ideal es seleccionar flujos de vapor, donde la relación (Vapor de Agua/Gas de Síntesis) esté alrededor de la región óptima, para así obtener un Gas con alto contenido de H₂.

La región óptima encontrada para la relación (Vapor de Agua/Gas de Síntesis) de flujo molar está comprendida en un rango entre 0.300 y 0.400, puesto que es donde se encuentra la mayor concentración de H₂ (0.293% fracc mole), unida a un bajo contenido de CO (0.2% fracc mole) y una temperatura entre (300 – 370 °C).

Dentro de la composición del gas de síntesis, existe una pequeña cantidad de CH₄, la cual no está involucrada en la reacción WGS, pero si se incrementa considerablemente el contenido de CO₂, producto de dicha reacción.

3.1.2. Agente Gasificante: Vapor de Agua

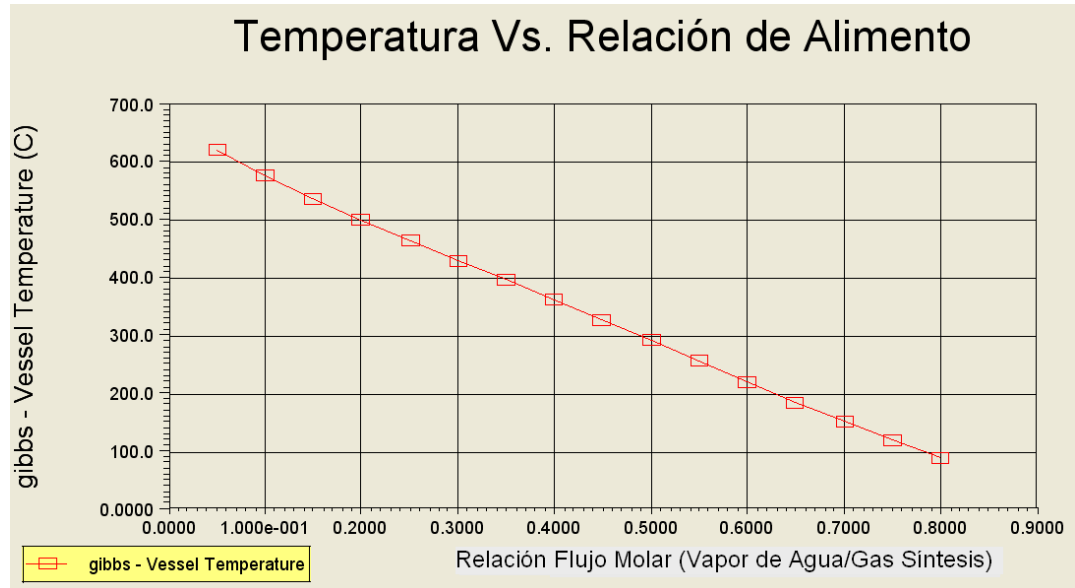


Figura 8. Temperatura Vs Relación de Alimento

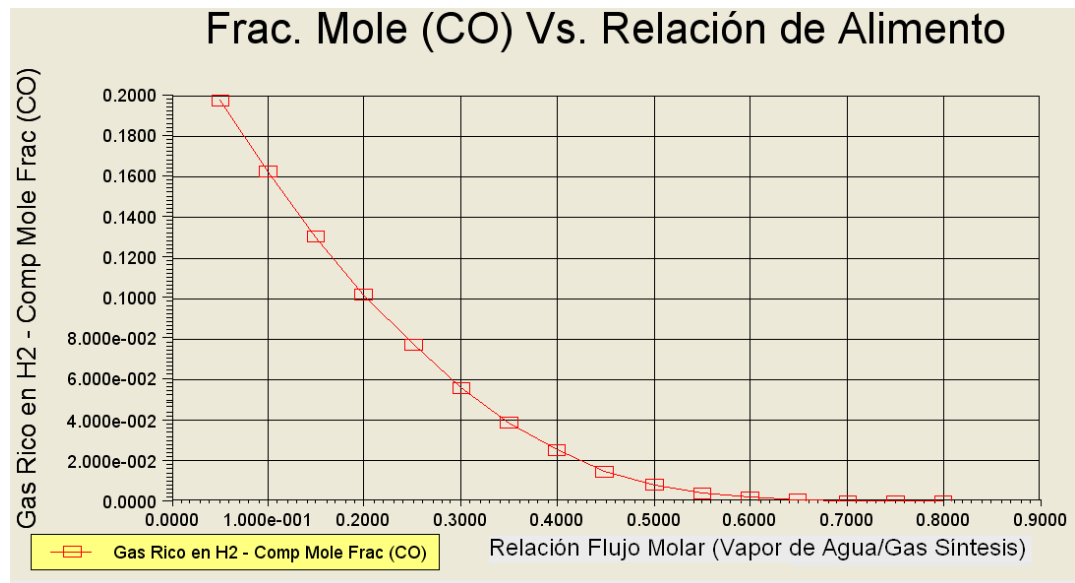


Figura 9. Fracción Molar CO Vs Relación de Alimento

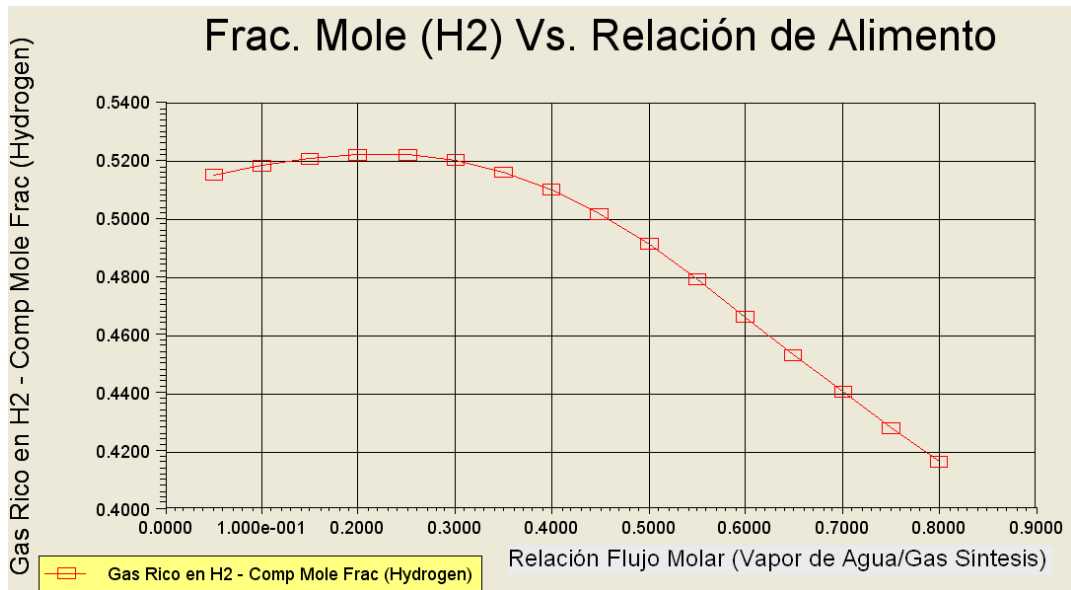


Figura 10. Fracción Molar H₂ Vs Relación de Alimento

Al analizar el Gas Síntesis procedente del gasificador; donde se ha utilizado como agente Gasificante Vapor de Agua; se observa que la concentración de H₂ y CO, es mayor que el que proviene del gasificador donde se empleó Aire como Gasificante. La relación óptima de flujo molar (vapor de agua/gas síntesis) que se puede observar en la grafica se encuentra en un rango entre 0.200 y 0.400 alcanzándose una concentración máxima de hidrógeno de (0.52% fracc mole) acompañada de una baja concentración de monóxido de carbono (0.06% fracc. .mole) y una temperatura entre (380 - 500 °C), el dióxido de carbono se incrementa considerablemente alcanzando valores de concentración de hasta (0.20% fracc mole).

Al estudiar el comportamiento de nuestras graficas se observa que el flujo de vapor de agua incide en la temperatura del reactor por consiguiente el vapor debe ser tomado en cuenta como método apropiado para el ajuste de la temperatura del reactor teniendo en cuenta su efecto en la composición del gas de salida.

4. CONCLUSIONES

- Mediante las gráficas obtenidas como resultado de la simulación se observa que el flujo de vapor de agua incide en la temperatura del reactor WGS, por consiguiente el vapor debe ser tomado en cuenta como método apropiado para el ajuste de la temperatura del reactor teniendo en cuenta su efecto en la composición del gas de salida y por lo tanto existe un rango óptimo de relación de vapor de agua/gas síntesis [0.3 - 0.4], donde las concentraciones de Hidrógeno, muestra los valores máximos.
- La utilización del reactor WGS para la limpieza de gas de síntesis es muy importante cuando se quiere obtener la mayor concentración de Hidrógeno con bajo contenido de CO.
- El mejor agente gasificante utilizado fue el vapor de agua, con el cual se produjo la mayor cantidad de H₂ en el gas de síntesis y por tanto en el gas que sale del reactor de equilibrio, mientras que con el aire como agente gasificante la obtención de Hidrógeno fue menor, debido al contenido de Nitrógeno.

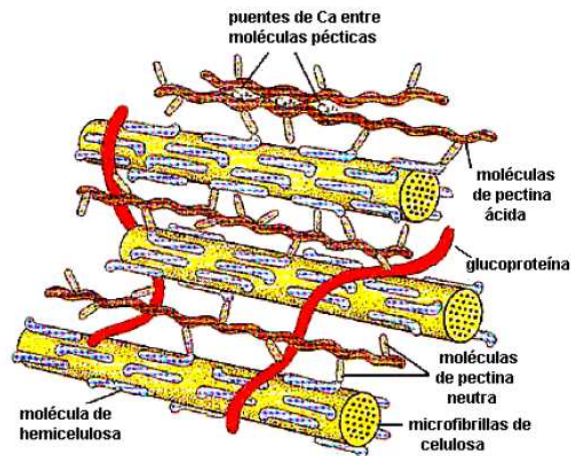
5. BIBLIOGRAFIA

- [1]. ADROVER, Esperanza; LÓPEZ, Eduardo; PEDERNERA, Marisa; BORIO, Daniel. Efectos térmicos en un reactor de membrana para la reacción de desplazamiento de gas de agua; Planta Piloto de Ingeniería Química; (Universidad Nacional del Sur - CONICET); Camino La Carrindanga km. 7 - 3000 Bahía Blanca; Argentina.
- [2]. AZNAR, M.P; CABALLERO, M.A; Gil, J; OLIVARES, A; and CORELLA, J. (1997). Hydrogen by Biomass Gasification with Steam-O₂ Mixtures and Steam Reforming and Co-Shift Catalytic Beds Downstream of the Gasifier, Making a Business from Biomass in Energy, Environment Chemicals, Fibers and Materials, Proceedings of the 3rd Biomass Conference of the Americas, Vol. I, Montreal, Quebec, Canada, August 24-29, R.P. Overend and E. Chornet (eds). (1997), pp. 859–860.
- [3]. CAGLAR, A. and DEMIRBAS, A. Hydrogen Rich Gaseous Products from Tea Waste by Pyrolysis, *Energy Sources* 23. 2001, pp. 739–746.
- [4]. CONTRERAS, A; y otros, *Int. J. Hydrogen Energy*. (1999) ,1041-52.
- [5]. GARCIA, L; SANCHEZ, J.L; Salvador, M.L; Bilbao, R; and Arauzo J. Hydrogen-rich Gas from Steam Gasification of Biomass Using Coprecipitated Nickel-alumina Catalysts, *Bioenergy* 96. The eventh National Bioenergy Conference, (1996), pp.859–865.
- [6]. Lindblad, P. IEA Agreement on the Production and Utilization of Hydrogen, Annual Report, Uppsala University, Sweden; available on-line at <http://www.ieahia.org>, 2003.
- [7]. MANIATIS, K. Progress in biomass gasification: an overview, in *Progress in Thermochemical Biomass Conversion*, Bridgwater, A.V., Ed., Blackwell, Oxford, 2001.
- [8]. MINCHENER, A. Coal gasification for advanced power generation *Fuel*, Volume 84, Issue 17, December 2005, Pages 2222-2235; available on-line at http://www.sciencedirect.com/science?_ob=ArticleURL&_udi=B6V3B-4H5F4MM-1&_user=10&_coverDate=12%2F31%2F2005&_alid=815883825&_rdoc=1&_fmt=high&_orig=search&_cdi=5726&_sort=d&_docanchor=&_view=c&_ct=4&_acct=C000050221&_version=1&_urlVersion=0&_userid=10&md5=9474de5d1198fbdc9f85c2683b793010

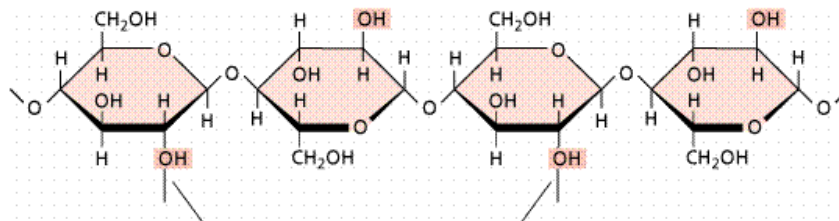
- [9]. OTHMER, Kirk. Coal conversion processes (Gasification). Encyclopedia of Chemical Technology, Fourth Edition. Vol. 6. John Wiley and Sons. New York. 1993.
- [10]. REITH, J.H; WIJFFELS, R.H; and BARTEN, H., Bio-Methane and Bio-Hydrogen: Status and Perspectives of Biological Methane and Hydrogen Production; available on-line at www.ecn.nl/biomassa/biohydrogen.en.html, (2005), p. 150.
- [11]. 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.
- [12]. TURARE. C. Biomass gasification technology and utilisation. Institute university of Flensburg – Germany - available on-line. <http://mitglied.lycos.de/cturare/bio.htm>
- [13]. VILLAR J; CANETE, R & GARCIA, A. La industria de los derivados de la caña de azúcar: Instituto cubano de investigaciones de los derivados de la caña de azúcar, Cuba. (1986).
- [14]. WANG, Zhihua; ZHOU, Junjhu; QINHUI Wang; FAN, Jianren; CEN, Kefa. Thermodynamic equilibrium analysis of hydrogen production by coal based on coal/CaO/H₂O gasification system. International journal of hydrogen energy 31. (2006), 945 – 952.
- [15]. ZITTEL, W. and WURSTER, R; The Prospects for a Hydrogen Economy Based on Renewable Energy: Ireland's Transition to Renewable Energy, HyWeb, Thurles, Tipperary; available on-line at <http://www.hydrogen.org/index-e.html>, 1 Nov. 2002.

6. ANEXOS

ANEXO A. Representación de la pared celular de los materiales lignocelulósicos¹⁰

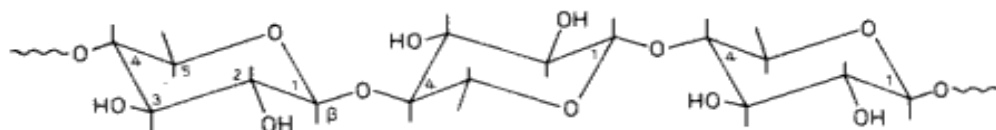


La celulosa ($C_6H_{10}O_5$)_n, es un polímero natural, constituido por una larga cadena de carbohidratos polisacáridos, es el componente mayoritario de los materiales lignocelulósicos, base estructural de las células vegetales, es la sustancia natural más importante, tanto por su abundancia como por su aprovechamiento tecnológico. Es una fibra vegetal que al ser observada en el microscopio es similar a un cabello humano, cuya longitud y espesor varía según el tipo de árbol o planta. Actualmente es la base de muchos productos de interés industrial (papel, fibras, aditivos, etc.). La siguiente figura presenta la estructura Molecular de la Celulosa¹¹

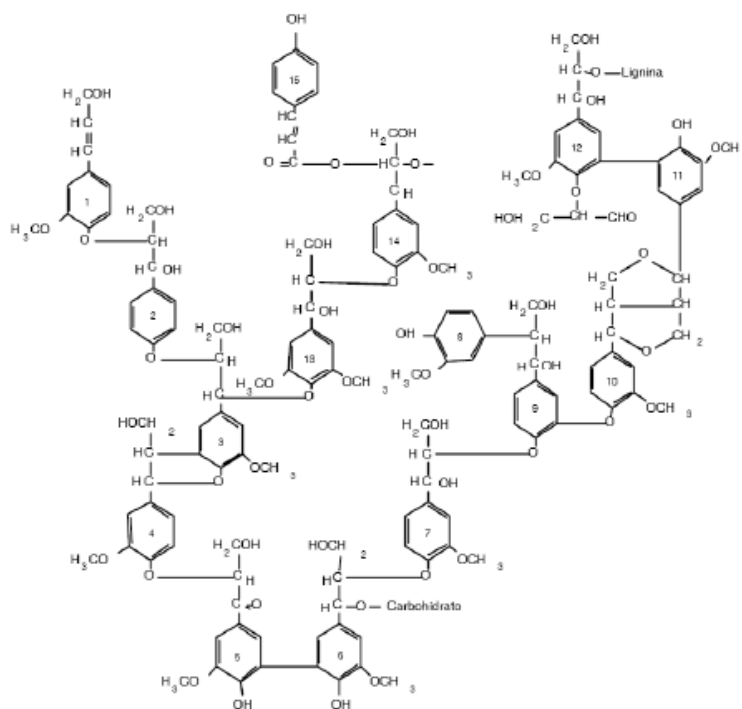


¹¹ En Línea:[http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/meiq/perez_l_oa/capitulo1.pdf]

Las hemicelulosas se encuentran sobre todo en las paredes celulares, están compuestas de diferentes azúcares formando cadenas más cortas y con ramificaciones. Contiene azúcares de cinco carbonos (generalmente D-d-xilosa y L-l-arabinosa) y azúcares de seis carbonos (D-galactosa, d-glucosa y D-d-manosa). Su naturaleza ramificada hace que la hemicelulosa sea amorfa, y relativamente fácil de hidrolizar a sus azúcares constitutivos. La siguiente figura representa una parte de una cadena de Xilano¹²



La lignina es un polímero tridimensional amorfo formado por la polimerización deshidrogenante de unidades de fenilpropano, ligadas por diferentes tipos de enlaces, que se alternan de manera desordenada. Los monómeros que forman la lignina son los denominados alcoholes cinamílicos (diferenciados entre sí por las diferentes sustituciones que presenta el anillo aromático). La siguiente estructura representa la estructura de la lignina¹³



¹² Hans Beyer, José Barluenga Mur, Wolfgang Walter. Manual de Química Orgánica. Publicado por Reverté, 1987. ISBN 8429170669, 9788429170665, pág. 489.

¹³ En Línea: [http://www.inta.gov.ar/actual/info/perspectiva_%20biocombus.pdf]

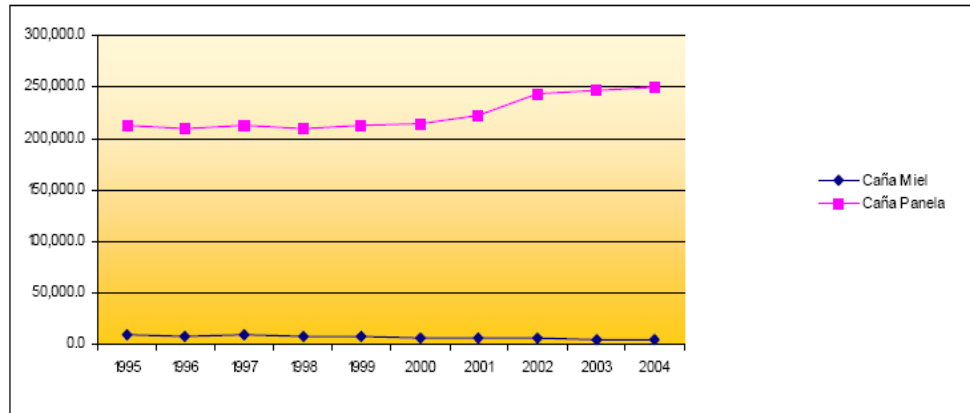
ANEXO B. Cultivo de caña de azúcar en Colombia.

Colombia cuenta con más de 200 mil hectáreas sembradas en caña destinada a la producción de panela, distribuidas en 22 departamentos, representando el 6.5% del área total sembrada en el país. La siguiente gráfica constituye la superficie de caña panelera cultivada en Colombia [1995-2004]¹⁴

Cadena: Panela

Superficie cultivada

Ha



Cultivo	1995	1996	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004
Caña Panela	212,445.8	209,010.6	213,452.5	210,472.5	213,561.6	214,582.1	222,203.9	243,117.8	246,056.9	249,384.1
Caña Miel	8,932.0	8,366.0	9,243.3	8,211.4	7,835.8	6,443.0	5,743.5	5,672.5	5,606.5	5,039.0

La panela se produce en casi todos los departamentos del país, sin embargo, las cuatro mayores regiones productoras son: La Hoya del Río Suárez, Cundinamarca, Antioquia y Nariño, que aportan más del 70% de la producción nacional.

La mayoría de las actividades de producción tienen lugar en el contexto de la economía campesina, en unidades de pequeña escala con alto uso de mano de obra y bajos niveles de inversión en mejoras tecnológicas. Al mismo tiempo, se encuentran explotaciones medianas con mayor grado de tecnificación y algunas de mayor escala en las que la producción se desarrolla con índices de productividad y beneficios más altos.

Después de la extracción del jugo de la caña de azúcar se obtiene el bagazo. La cantidad de bagazo obtenido varía de 240 kg a 280 kg de bagazo por tonelada de caña, y el azúcar en el contenido representa una de las pérdidas del proceso.

¹⁴ En línea: [http://www.agrocadenas.gov.co/panela/reportes/prd_nal_14.pdf]

La siguiente tabla muestra datos acerca de la Producción Nacional de caña panelera¹⁵

PRODUCCION NACIONAL			
DEPARTAMENTO	SUPERFICIE DE CAÑA (Ha)	PRODUCCION ANUAL (Ton)	RENDIMIENTO (Kg/Ha)
Cundinamarca	51.000	207.179	4.143
Antioquia	37.148	144.655	3.894
Santander	18.399	219.523	11.931
Boyacá	17.302	240.052	13.869
Nariño	14.000	109.928	7.852
Tolima	15.036	73.548	4.891
Caldas	13.574	45.657	3.364
Cauca	12.996	69.786	5.370
Caquetá	2.725	14.137	5.188

¹⁵ En línea: [<http://www.fao.org.co/manualpanela.pdf>]

ANEXO C. Tipos de Gasificadores

- Gasificador Updraft: En este gasificador sólido y gas se mueven en sentidos contrarios, normalmente el sólido descendente y el gas ascendente. Vamos, pues, a seguir el proceso que sigue una partícula de biomasa desde que entra al gasificador hasta su conversión a gas, en este tipo de reactor.

La partícula se encuentra primero con gases calientes procedentes de las zonas inferiores lo que aumenta su temperatura a medida que desciende en el lecho, a costa del calor sensible de los gases ascendentes. Inicialmente la partícula se seca y a determinada temperatura comienzan los procesos de pirólisis, generándose los gases que ascienden a la salida del reactor. Como productos de pirólisis también aparecen mezclados con el gas alquitranes y vapores condensables que salen del gasificador sin craquear o quemar.

Continuando en sentido descendente, la partícula, que ya es char, se encuentra con los gases de combustión y el oxígeno en defecto necesario para mantener térmicamente el proceso. Tienen lugar entonces reacciones de oxidación y reducción entre el sólido y la mezcla gaseosa presente, con lo que el gas producido en esta zona se mezclará con el producido en la superior de pirólisis componiendo el gas producto que sale del gasificador.

El perfil de temperatura es tal, que va aumentando a medida que se baja en el reactor, alcanzándose un pequeño máximo antes de llegar al extremo caliente. La conversión también aumenta a medida que se desciende en el reactor, alcanzando prácticamente el 100 % del sólido en el extremo caliente.

Este gasificador es de fácil construcción y operación y su eficacia térmica es alta. La baja temperatura de salida del gas, un gas adecuado para combustión directa, es otra ventaja. El principal inconveniente es que el gas producido contiene los alquitranes y condensables producidos en el proceso de pirólisis inicial de las partículas, por lo que el proceso de limpieza del gas puede volverse tecnológicamente complejo y económicamente costoso. Esta clase de gasificador ha sido probado principalmente en plantas de poca potencia.

Además, los gasificadores de lecho móvil tienen una serie de características como son la alta conversión, bajo arrastre de sólidos, fácil construcción y operación, antes comentadas. Los inconvenientes que presenta son la baja capacidad específica y peligro de fusión de cenizas.

En la figura 8 se esquematiza el funcionamiento y el perfil de temperaturas de un generador típico operando con biomasa húmeda. En la zona superior se produce el secado (eliminación de la humedad libre) que es un proceso endotérmico con consumo de unas 600 Kcal/Kg de agua evaporada. La segunda zona en sentido descendente, define la eliminación de agua de constitución, etapa de naturaleza que elevaría por si sola la temperatura del sólido a 450 °C, efecto claramente exaltado por la presencia de gases de mayor temperatura. En la zona superior a 600 °C se considera que entra en la

zona de gasificación propiamente dicha y consiste en dos franjas en las que, en la parte superior se produce la reducción de gases como CO_2 , H_2O para formar CO y H_2 , consumiendo energía térmica y enfriando los gases ascendentes. En la zona inferior se produce el contacto de los gases de alimentación (aire, oxígeno puro, vapor de agua o mezcla de gases) con la fase final de la descomposición del bagazo de caña de azúcar más las cenizas; en dicha zona se produce el calentamiento de los gases con el enfriamiento de las cenizas más las reacciones de oxidación de los residuos de madera por el oxígeno de la alimentación en reacciones exotérmicas de formación de CO y CO_2 .¹⁶

- Gasificador en corriente directa (**downdraft**) La principal desventaja de este reactor frente al gasificador en contracorriente es la alta temperatura del gas de salida y la presencia de inquemados en las cenizas, lo que origina una eficiencia más baja del proceso.¹⁷

En el gasificador en lecho móvil en corrientes paralelas sólido y gas se mueven en el mismo sentido, normalmente descendente, de ahí el nombre de downdraft.

Una partícula que entra al gasificador por la parte superior sufre sucesivamente los procesos de secado y pirólisis, al someterse a un progresivo aumento de temperatura en su camino descendente. Este perfil de temperatura es debido fundamentalmente a la conducción de calor o radiación a temperaturas lo bastante altas, desde la parte inferior, en la que se está generando mediante la combustión parcial de los productos que allí llegan.

Gases, tar y char, descienden hasta la zona de oxidación donde, con el oxígeno introducido, se proporciona la energía necesaria para mantener térmicamente el proceso. Esto quiere decir que es así como se provoca el perfil de temperaturas de la parte superior del reactor, y aumenta el calor sensible y temperatura de los productos que continúan su camino descendente. Al haber sufrido estos cambios en calor sensible y temperatura, aún cuando cesa el aporte de oxígeno y se entra por tanto en una zona de reducción, los productos continúan reaccionando entre sí en, lo que da como resultado una disminución de la temperatura, y un incremento de la cantidad y calidad del gas producido. Dado el perfil de temperatura y la historia térmica de los productos, al haber atravesado previamente una zona de alta temperatura, los tar o alquitranes, están en muy pequeña proporción en el gas producto. Para evitar que existan zonas frías o perfiles radiales de temperatura, y que de esta forma se puedan escapar los tar, es necesario un buen sistema de distribución del oxidante, además de reducir la sección del gasificador en la zona de oxidación.

¹⁶ En línea: [<http://ambiental.uvigo.es/agroforestal/catedra/assignaturas/Pirogas.pdf>]

¹⁷ En línea:

[http://www.virtual.unal.edu.co/cursos/sedes/arauca/87061/docs_curso/C11_L3.htm]

Este gasificador es de fácil construcción y operación y su principal ventaja es la citada del bajo contenido en tar de los gases. La tendencia actual es a juntar las zonas de pirólisis y oxidación en una sola, de forma que los productos de pirólisis se producen y se queman simultáneamente, en tanto que en una zona inferior se produce la reducción de forma análoga al downdraft tradicional. La principal ventaja de este tipo de gasificador es la de producir un gas relativamente limpio de alquitranes, aunque a una temperatura más alta que el updraft.

La gran diferencia conceptual entre un gasificador en corriente directa y el de contracorriente; está en que en corriente directa los gases liberados en las etapas de pirólisis y zona reductora de la etapa de gasificación han de pasar necesariamente por la zona de la alta temperatura de la zona de oxidación en la etapa final de la gasificación, lo que impone una serie de condiciones como que los alquitranes tienden a desaparecer en el producto final y el agua liberada que en ascendente sale del sistema sin oportunidad de reaccionar (zona de secado) alcanza los más altos niveles de conversión. La consecuencia global es que los gases tienden a salir del sistema a menor temperatura, (menor calor sensible) pero con una composición tal que su poder calorífico es superior.

La suma del poder calorífico más el calor sensible es la misma para el mismo sistema, con iguales pérdidas y con la misma relación de equivalencia.

- Gasificadores de lecho fluidizado. Presenta características de elevada velocidad de reacción y excelente mezcla las cuales hacen que los perfiles de temperatura y conversión sean uniformes a lo largo del reactor, permitiendo un control muy preciso de las condiciones de operación. Presenta alta capacidad específica (Kg de sólido/ m³ de reactor) frente a otros tipos de reactores, por lo que, para unidades de gran tamaño (más de 100 Mw) resultan más interesantes. La operación con estas unidades a presión, también ayuda a disminuir el tamaño del reactor.

Tienen alta capacidad de procesado y una mayor flexibilidad para usar sólidos poco densos. Su principal desventaja es la alta concentración de partículas sólidas emitidas en el gas de salida, lo que complica las subsecuentes etapas de depuración y acondicionamiento de los gases.

Los gasificadores de lecho fluidizado se pueden clasificar atendiendo a la variable de operación velocidad de fluidización, en: lecho fluidizado burbujeante (velocidad de fluidización en el rango de 1-2 m/s) y lecho fluidizado circulante (velocidad de fluidización mayor de 5 m/s)¹⁸. En cualquier caso, característica común a los diversos tipos de lechos fluidos, junto con el buen contacto sólido-

¹⁸ En línea: [<http://alternativefuels.about.com/od/researchdevelopment/a/gasification.htm>]

gas, la alta capacidad específica y el buen control de las condiciones antes mencionadas, es un contenido medio en alquitranes para el gas de salida, y como principal desventaja, un importante arrastre de sólidos.

Otros tipos de gasificadores utilizados en menor medida son los hornos rotatorios, reactores ciclónicos, lechos fluidizados circulantes, de arrastre, etc.

ANEXO D. METODOLOGÍA DEL MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN DE BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR CONECTADO A UN REACTOR WGS

Se aplicó un modelo para estudiar, analizar y comparar el comportamiento del proceso de gasificación y la limpieza del gas de síntesis en el reactor WGS, teniendo en cuenta las relaciones entre el conjunto de elementos que se configuran, a fin de evaluar diversas alternativas para el funcionamiento del mismo y optimizar la mayor producción de hidrógeno.

DESARROLLO METODOLOGICO DEL TRABAJO

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. Validación de los datos obtenidos.
7. Analizar los resultados
8. Elaborar conclusiones y recomendaciones

BASE DE CÁLCULO

Elección de los componentes involucrados en el proceso:

- Reactor de conversión
- Reactor de equilibrio
- Corrientes
- Cooler

Elección del paquete termodinámico:

MODELO TERMODINÁMICO: Se escogió el Fluid Package (paquete de fluido) basado en el modelo de Peng Robinson, puesto que es el recomendado por el manual de HYSYS para compuestos puros o mezclas en estado gaseoso o vapor. Las características del paquete de fluido Peng Robinson, son las siguientes:

- 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.

Ecuación de Peng Robinson:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a\alpha}{V_m^2 + 2bV_m - b^2}$$

R = constante de los gases (8,31451 J/mol·K)

$$a = \frac{0,45724R^2T_c^2}{P_c}$$

$$b = \frac{0,07780RT_c}{P_c}$$

$$\alpha = \left(1 + \left(0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2\right) \left(1 - T_r^{0,5}\right)\right)^2$$

$$T_r = \frac{T}{T_c}$$

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

CONCEPTOS FUNDAMENTALES DE OPERACIÓN DE ASPEN HYSYS V3.2®

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
- Creación de una corriente hipotética de bagazo
- Definir reacciones:
- Estequiometría
- Compuesto limitante
- Extensión (conversión o K_{eq})
- Ecuación cinética

OPERACIONES LÓGICAS (Set): La operación SET se usa para fijar el valor de una variable de proceso en relación a otra. La relación es entre variables de proceso de dos objetos del mismo tipo.

Para el presente trabajo de simulación se permitió buscar relaciones entre la corriente de Gas de Síntesis y la corriente de vapor a fin de encontrar regiones óptimas favorables; para que se lleve a cabo la reacción WGS; y de esta forma, obtener una alta fracción molar de hidrógeno en el producto final.

REACTORES INVOLUCRADOS EN EL PROCESO DE GASIFICACIÓN

Reactor de Conversión: Intervienen exclusivamente reacciones de conversión, se debe especificar la estequiometría de todas las reacciones que se lleven a cabo y la conversión del componente base, el reactor de conversión calcula las composiciones de la corriente de salida.

Reactor de Gibbs: El reactor de Gibbs calcula la composición de equilibrio de la corriente de salida minimizando la energía libre de Gibbs de la corriente de entrada. Solo se requiere especificar la estequiometría. Al minimizar la energía de Gibbs se produce la reacción más probable. Este es un proceso espontáneo en la naturaleza. Con este reactor no se requiere una expresión de K_{eq} en función de la temperatura. En este caso solos los reactivos reaccionan y no los productos, además es ideal simular el reactor WGS.

Definición de reacciones:

Se definen las reacciones químicas en torno al proceso de gasificación y WGS.

- Reacción de Conversión
- Reacción de Equilibrio

Estequiometria de las reacciones

- Se especifican los coeficientes estequiométricos de las reacciones
- Para las ecuaciones bien balanceadas el error del balance es cero.

$$\text{Error de Balance} = \text{masa}_{\text{Reactantes}} - \text{masa}_{\text{Productos}}$$

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

$$\text{Error de Balance} = 0$$

V_i = Coeficiente estequiométrico en la ecuación ajusta

M_i = Masa Molar

i = i - ésimo componente de la mezcla

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

REACCIONES DEL PROCESO

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

$$\text{Conv (\%)} = C_0 + C_1 \cdot T + C_2 \cdot T^2$$

Si la conversión es independiente de la temperatura o no se tiene la información de cómo varía ella, entonces: **Conv (%) = C₀**

Reacciones de 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.

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

ASPEN HYSYS V3.2® calcula el ΔG de reacción para cualquier reacción sin error de balance.