



UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA TÉRMICA Y DE FLUIDOS

ÁREA DE INGENIERÍA TÉRMICA

INGENIERÍA INDUSTRIAL

PROYECTO FIN DE CARRERA

MODELO NO ISOTÉRMICO DE GASIFICADORES DE LECHO FLUIDIZADO

AUTOR:

JESÚS GÓMEZ HERNÁNDEZ

TUTOR:

DOMINGO SANTANA SANTANA

JULIO 2010

RESUMEN	4
NOMENCLATURA.....	5
1. INTRODUCCIÓN.....	9
1.1. Antecedentes.....	9
1.2. Introducción.....	9
1.3. Objetivo del estudio.....	10
1.4. Alcance del estudio.....	10
1.5. Estructura de la memoria.....	11
2. CONCEPTOS DE FLUIDIZACIÓN.....	14
2.1. Introducción.....	14
2.2. Tipos de lechos fluidizados.....	14
2.3. Comportamiento de un lecho fluidizado.....	17
2.4. Ventajas y desventajas de un lecho fluidizado.....	18
2.5. Propiedades de los lechos.....	19
2.5.1 Fluidización sin transporte de partículas.....	19
2.5.2 Velocidad mínima de fluidización.....	19
2.5.3 Clasificación de Geldart.....	20
2.5.4 Formación de burbujas durante la fluidización.....	22
3. REACCIONES QUÍMICAS.....	25
3.1. Tipos de carbón.....	25
3.2. Esquema de la cinética química.....	25
3.3. Devolatilización.....	26
3.4. Combustión.....	29
3.5. Gasificación.....	32
3.5.1 Modelo de Johnson.....	33
3.6. Reacciones homogéneas.....	35
3.7. Resumen de las reacciones.....	38
4. FRACCIÓN DE CONVERSIÓN DEL CARBÓN.....	41
4.1. Introducción.....	41
4.1.1 Propiedades del carbón.....	41
4.2. Valores iniciales de carbono.....	42
4.3. Devolatilización.....	42
4.4. Combustión.....	43
4.5. Gasificación.....	44

4.6. Fracción de conversión total.....	44
5. TRANSFERENCIA DE MASA Y DE CALOR.....	46
5.1. Introducción.....	46
5.2. Transferencia de masa.	46
5.2.2 Coeficiente de transferencia de masa de una partícula.....	46
5.2.3 Coeficiente de transferencia de masa del lecho.....	46
5.3. Transferencia de calor.	47
5.3.2 Coeficiente de transferencia de calor del lecho.....	48
6. MODELO DEL LECHO FLUIDIZADO.....	50
6.1. Hipótesis.....	50
6.2. Modelo hidrodinámico.	52
6.3. Flujo neto.....	53
6.4. Comparativa con otros modelos.	54
6.5. Ecuaciones de conservación.....	55
6.5.1 Conservación de la masa.	55
6.5.2 Balance másico del carbono.	56
6.5.3 Conservación de la energía.....	56
7. MODELO MATEMÁTICO.....	59
7.1. Introducción.....	59
7.2. Esquema numérico.	59
7.3. Método predictor-corrector.....	60
7.4. Método SOR.....	61
8. PROGRAMACIÓN.....	64
8.1. Introducción.....	64
8.2. Variables principales.	64
8.3. Estructura del programa.....	64
9. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS.....	67
9.1. Introducción.....	67
9.2. Datos iniciales.	67
9.3. Caso 1.	69
9.3.1 Análisis hidrodinámico.....	69
9.3.2 Flujo neto.....	70
9.3.3 Análisis del modelo cinético.	71
9.3.4 Análisis de la composición de gases.....	75

9.3.5 Temperatura de los gases.....	77
9.3.6 Efecto la temperatura de los sólidos.....	78
9.3.7 Análisis del gasificador.....	81
9.4. Caso 2.....	83
9.4.1 Análisis hidrodinámico.....	83
9.4.2 Flujo neto.....	84
9.4.3 Análisis del modelo cinético.....	84
9.4.4 Análisis de la composición de gases.....	86
9.4.5 Temperatura de los gases.....	87
9.4.6 Análisis del gasificador.....	88
9.5. Comparación entre los carbones simulados.....	90
10. CONCLUSIONES.....	94
10.1. Sobre el modelo fluidodinámico.....	94
10.2. Sobre el modelo cinético.....	94
10.3. Sobre el gasificador.....	94
10.4. Estudios posteriores.....	95
A. PROPIEDADES.....	97
A.1. Calor específico.....	97
A.2. Viscosidad cinemática.....	98
A.2.1. Gases.....	98
A.2.2. Sistema multicomponente.....	98
A.2.3. Fase de emulsión.....	99
A.3. Difusividad.....	99
A.3.1. Gases.....	99
A.3.2. Sistema multicomponente.....	100
A.4. Conductividad térmica.....	100
A.4.1. Gases.....	100
A.4.2. Sistema multicomponente.....	100
A.5. Entalpías estándar de formación.....	101
A.6. Entalpías estándar de reacción.....	102
B. CÓDIGO.....	104
BIBLIOGRAFÍA.....	125

RESUMEN

El presente proyecto fin de carrera es un estudio teórico que trata de predecir el comportamiento de un gasificador de carbón de lecho fluidizado a diferentes temperaturas. Para ello se utiliza un modelo matemático unidimensional, en donde sólo se consideran los cambios en la dirección axial, y un modelo hidrodinámico bifásico que supone que en la fase de emulsión están todos los sólidos y parte de los gases, bajo la hipótesis de mezcla perfecta, y que en la fase de burbuja hay gases totalmente libres de sólidos suponiendo sus reacciones continuas.

Este modelo se basa en los balances másicos y energéticos de las distintas fases, así como de las correlaciones experimentales que definen los parámetros fundamentales del lecho tales como la fracción del lecho en burbujas o la velocidad de los gases.

Mención aparte se merece el modelo cinético de las reacciones presentes en el lecho. Principalmente está basado en el propuesto por Yan et al. [1], pero también se utilizan las expresiones de las velocidades de reacción de Gómez-Barea et al [5]

El modelo puede predecir la fracción de conversión del carbón para una temperatura de los sólidos determinada. Para las fases de emulsión y de burbuja, predice la composición del gas y otros parámetros fluidodinámicos. Por otro lado, el sistema de ecuaciones diferenciales y ecuaciones no lineales de forma explícita en cada punto mediante el método de Adams-Bashforth-Moulton.

Palabras clave: gasificador carbón, modelo bifásico, lecho fluidizado, modelo matemático.

NOMENCLATURA

a_b	Área interfacial por unidad de volumen entre la fase de burbuja y de emulsión (m^2 / m^3)
a_s	Área específica de la partícula (m^2 / m^3)
A	Sección transversal del lecho (m^2)
C_i	Concentración de la especie i (mol / m^3)
D_{B0}	Diámetro inicial de la burbuja formado sobre el distribuidor (m)
D_{BM}	Diámetro máximo teórico de la burbuja formado por la coalescencia de burbujas (m)
D_g	Difusividad del gas (m^2 / s)
d_b	Diámetro medio de la burbuja (m)
d_p	Diámetro medio de las partículas de carbón (m)
f_i	Flujo molar de la especie i (mol / s)
H_b	Altura del lecho sobre el distribuidor (m)
h_{BE}	Coefficiente de transferencia de energía entre emulsión y burbuja ($Jm^{-3}K^{-1}s^{-1}$)
$H_{g_i,I}$	Entalpía de los gases que entran al lecho (J / mol)
$H_{g_i,O}$	Entalpía de los gases que salen del lecho (J / mol)
$H_{s_i,I}$	Entalpía de los sólidos que entran al lecho (J / mol)
$H_{s_i,O}$	Entalpía de los sólidos que salen del lecho (J / mol)
h_p	Coefficiente de transferencia de energía convectivo de una partícula ($Jm^{-3}K^{-1}s^{-1}$)
g	Constante de gravitación = $9.81m / s^2$
Q_{loss}	Entalpía cedida debido a pérdidas (J / mol)
k_{BE}	Coefficiente de transferencia de masa entre emulsión y burbuja (m / s)
k_g	Coefficiente de transferencia de masa de la superficie de la partícula (m / s)
N	Número de especies gaseosas del sistema
Nu_p	Número de Nusselt de la partícula
Pr	Número de Prandtl de la partícula
Re_p	Número de Reynolds de la partícula
r_{Bj}	Velocidad de reacción homogénea j en la fase de burbuja ($molm^{-3}s^{-1}$)
r_{Bcj}	Velocidad de combustión del carbón j en la fase de emulsión ($molm^{-3}s^{-1}$)
r_{Bvj}	Velocidad de volatilización del carbón j en la fase de emulsión ($molm^{-3}s^{-1}$)

r_{Bgi}	Velocidad de gasificación j en la fase de emulsión ($molm^{-3}s^{-1}$)
r_{Bj}	Velocidad de reacción homogénea j en la fase de emulsión ($molm^{-3}s^{-1}$)
Sc	Número de Schmidt
T	Temperatura (K)
Sc	Número de Schmidt
u_0	Velocidad superficial del gas (m/s)
u_b	Velocidad de ascenso de la burbuja (m/s)
u_{ex}	Velocidad del flujo en exceso (m/s)
u_{mf}	Velocidad mínima de fluidización (m/s)
z	Incremento de altura del lecho (m)

Letras griegas

α_{ij}	Coefficiente estequiométrico de la especie i en la reacción j
σ	Constante de Stefan-Boltzman = $5.669 \cdot 10^{-8} J/(m^2 sK)$
e_E	Emisividad
ΔF_E	Flujo neto total entre las dos fases ($mol/m^3 s$)
ΔF_{E_i}	Flujo neto de la especie i entre las dos fases ($mol/m^3 s$)
ΔH_{Ej}^0	Entalpía de la reacción j en la fase de burbuja (J/mol)
ΔH_{Bj}^0	Entalpía de la reacción j en la fase de emulsión (J/mol)
ε	Fracción vacía del lecho
ε_b	Fracción volumétrica del lecho en burbujas
ε_{mf}	Fracción del lecho con partículas al comienzo de la fluidización
μ_g	Viscosidad del gas fluidizante (kg/ms)
μ_0	Viscosidad de la fase de emulsión (kg/ms)
ρ_g	Densidad del gas fluidizante (kg/m^3)

Subíndices

B	Fase de burbuja
E	Fase de emulsión
c	Combustión
g	Gasificación
v	Volatilización
i	Número de especie gaseosa
j	Número de reacción
p	Partículas
s	Sólidos

m_f Condición mínima de fluidización

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1. INTRODUCCIÓN.

1.1. Antecedentes.

Se redacta el siguiente Proyecto Fin de Carrera, titulado “MODELO NO ISOTERMICO DE GASIFICADORES DE LECHO FLUIDIZADO”, por parte del alumno que suscribe, D. Jesús Gómez Hernández, atendiendo a la necesidad del mismo para la finalización de sus estudios de Ingeniería Industrial, especialidad en Tecnologías Energéticas.

El tutor de este proyecto es D. Domingo Santana Santana, profesor de la Escuela Politécnica Superior de la Universidad Carlos III de Madrid y director del departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos.

1.2. Introducción.

La fluidización es un fenómeno ampliamente conocido en el área de ingeniería energética. Tuvo su inicio a nivel industrial a comienzos de los años 1940s, con los procesos de craqueo catalítico y, desde entonces, se ha empleado en muchas otras áreas. A lo largo de su historia, la fluidización ha aunado los esfuerzos de múltiples investigadores, de manera que son muchos los estudios que se han publicado sobre el tema. Una de las aplicaciones en investigación actualmente es la gasificación de combustibles, como carbón o biomasa, en lechos fluidizados con el fin de obtener energías menos contaminantes.

La gasificación se define como un conjunto de reacciones termoquímicas, que se produce en un ambiente pobre en oxígeno, y que da como resultado la transformación de un sólido en una serie de gases susceptibles de ser utilizados en una caldera, en una turbina o en un motor, tras ser debidamente acondicionados.

La gasificación utilizando lechos fluidizados es una tecnología atractiva para la generación de potencia mediante carbón. Sin embargo, el enfoque tradicional de las plantas de lecho fluidizado de carbón se ha basado en el ensayo y error de técnicas que suponían un alto costo de instalaciones y laboratorios a escala. Por ello, recientemente se ha investigado en la modelización de dichos procesos mediante programas informáticos, con el fin de obtener resultados fiables con un coste considerablemente menor.

Respecto a los modelos posibles, cualquiera está basado en la descripción de los procesos entre gases y sólidos que se producen dentro del reactor mediante la aplicación de balances de masa, de energía, e incluyendo la formulación de las condiciones de contorno y de las relaciones entre las distintas fases. En el modelo que se presenta a continuación se considera un lecho fluidizado dividido en dos fases, de burbuja (gases) y de emulsión (gases y sólidos) suponiendo un comportamiento no isotérmico. Por tanto, se estudiará el efecto de los cambios de temperaturas en el lecho sobre los parámetros fluidodinámicos y sobre la composición del mismo.

1.3. Objetivo del estudio.

El propósito de este estudio es la modelización de un lecho fluidizado no isotérmico con el fin de analizar el comportamiento del mismo. Para ello, se codificará un programa en Matlab que consiga, a partir de unas condiciones iniciales del lecho, obtener la composición y el comportamiento del mismo.

Como extensión de esta modelización, el estudio se centra en la gasificación del carbón en un lecho sin partículas de arena y del que se analizará:

- Composición de los gases a la salida del lecho.
- Temperatura del lecho y de los gases.
- Factor de conversión del carbón.
- Cinética de las reacciones presentes en el lecho.

Es decir, se trata de implementar un modelo de lecho fluidizado bajo las hipótesis principales del modelo bifásico, con temperatura variable y tamaño de partícula constante; basándose, principalmente, en los siguientes artículos:

- “Mathematical modelling of a bubbling fluidised-bed coal gasifier and the significance of the net flow”, de Yan HM, Heidenreich C, Zahng DK. Fuel 1998; 77:1067-79. [1]
- “Modelling of bubbling fluidised bed coal gasifiers”, de Yan HM, Heidenreich C, Zahng DK. Fuel 1999; 78:1027-47. [3]

1.4. Alcance del estudio.

La importancia de la cinética química en el comportamiento del lecho implica la dificultad de incorporarla al modelo, quedando éste restringido a la gasificación del

carbón. Por ello, inicialmente se propuso seguir los artículos citados anteriormente con el fin de tener una referencia fiable con la que contrastar resultados, y de la que obtener la cinética química. Sin embargo, como se comentará posteriormente, no se pudieron seguir estos artículos.

En definitiva, el desarrollo del estudio supone aunar los distintos procesos que se dan lugar en un lecho fluidizado implementándolos en un programa de cálculo con el fin de comparar los resultados con los obtenidos por otros autores.

1.5. Estructura de la memoria.

La memoria se constituye en 9 capítulos que, a parte del presente capítulo de introducción, se estructuran del siguiente modo:

- Capítulo 2. **CONCEPTOS DE FLUIDIZACIÓN**
En este capítulo se explican los parámetros fundamentales que describen el comportamiento fluidodinámico de un lecho.
- Capítulo 3. **REACCIONES QUÍMICAS.**
Se establece el modelo de la cinética química explicándose las reacciones que se van a utilizar y sus correspondientes expresiones de la velocidad de reacción.
- Capítulo 4. **FRACCIÓN DE CONVERSIÓN DEL CARBÓN.**
Se define como la relación entre la cantidad de carbono que abandona el lecho y la que entra. Será un parámetro importante para las reacciones químicas de gasificación así como un parámetro de control de la calidad del gasificador.
- Capítulo 5. **TRANSFERENCIA DE MASA Y DE CALOR.**
En este capítulo se definen los coeficientes de transferencia de masa y calor entre las fases consideradas.
- Capítulo 6. **MODELO DEL LECHO FLUIDIZADO.**
Uniendo el modelo cinético y el fluidodinámico, se obtiene este modelo que describirá con exactitud las hipótesis seguidas.
- Capítulo 7. **MODELO MATEMÁTICO.**
Se trata de la aplicación del modelo del capítulo anterior; aquí se describen los métodos numéricos utilizados.
- Capítulo 8. **PROGRAMACIÓN.**
Se define la estructura del programa
- Capítulo 9. **ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS.**
Se comprueban todas las hipótesis y se compara con resultados experimentales de la bibliografía.
- Capítulo 10. **CONCLUSIONES.**
Se comentan brevemente los resultados obtenidos.

Además, se incluyen los anexos de los datos experimentales utilizados así como el código del programa utilizado en las simulaciones.

CAPÍTULO 2

CONCEPTOS DE FLUIDIZACIÓN

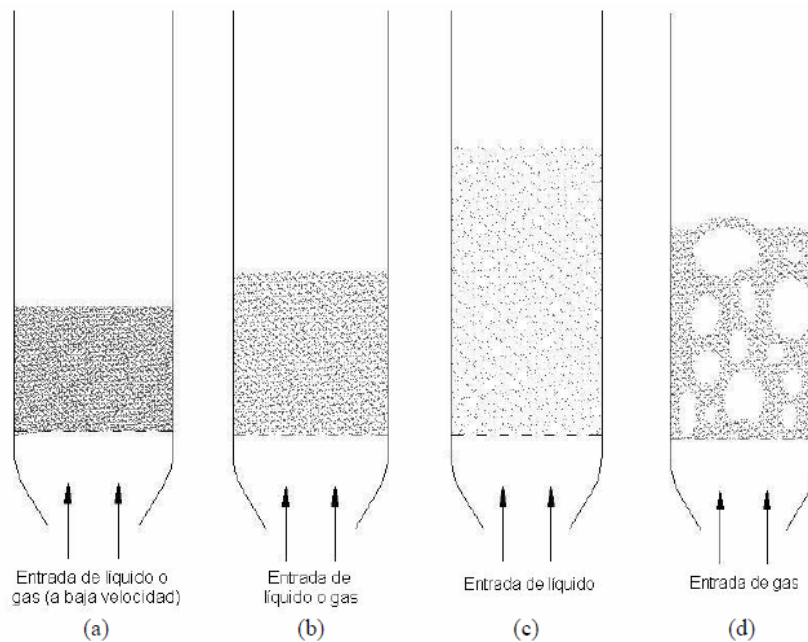
2. CONCEPTOS DE FLUIDIZACIÓN.

2.1. Introducción.

La razón para el desarrollo de modelos conceptuales para lechos fluidizados es ser capaces de estimar sus principales características tales como la fracción volumétrica de las fases, la velocidad de los gases, etc., a partir de las condiciones iniciales de funcionamiento. Por ello, en este capítulo se describirán los parámetros fundamentales del modelo de dos fases utilizado en la programación del lecho fluidizado.

2.2. Tipos de lechos fluidizados.

La fluidización es el proceso mediante el cual las partículas sólidas se comportan como un fluido mediante su suspensión a través de una corriente de gas o líquido. Dependiendo de la velocidad del flujo de gas, se pueden dar distintos regímenes:



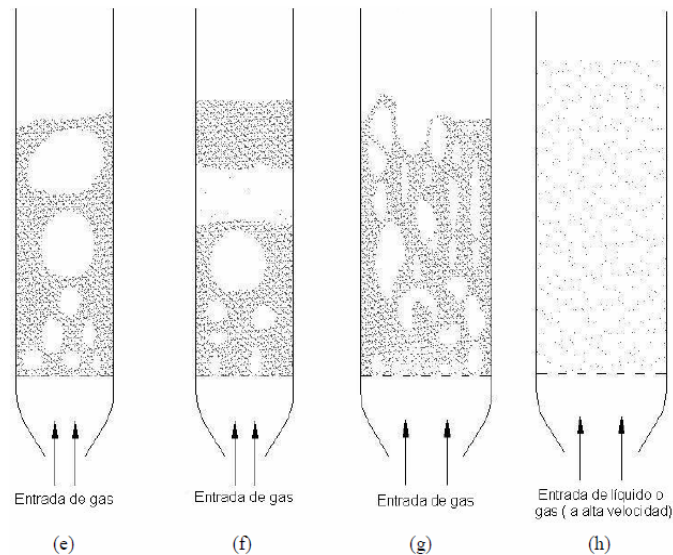


Figura 1. Tipos de lechos [4]

Considerando un flujo ascendente que atraviesa un lecho de partículas, su comportamiento a bajas velocidades será el de un lecho fijo, en donde el flujo simplemente se filtra a través de las partículas (a).

Si se continúa aumentando la velocidad, las partículas se encuentran suspendidas por el flujo ascendente. Es decir, la fuerza de fricción entre las partículas y el fluido se equilibra con el peso de las partículas, por lo que la componente vertical de la fuerza de compresión desaparece, y la pérdida de carga por unidad de área es igual al peso de las partículas por unidad de área. Estas características definen un lecho en condiciones de mínima fluidización, (b). La velocidad superficial del fluido en este punto se denomina velocidad de mínima fluidización, u_{mf} .

En sistemas fluidizados por gas, como el que se considera en este estudio, a velocidades superiores a la de mínima fluidización, se observa la aparición y crecimiento de burbujas conforme ascienden en el lecho, (d). Si estas burbujas se extienden en lo ancho del depósito, por ser el gasificador estrecho y alto, se da el fenómeno de slugging que puede ser de dos tipos. Si las partículas son finas, éstas caen por la pared lentamente, (e), conocido como slugs axial. Por contra, si las partículas son gruesas, la fracción de lecho por encima de la burbuja es empujada hacia arriba, como un pistón, desde donde caen partículas desintegrando el slug. Este fenómeno se repite de forma oscilatoria. A esta distribución se la conoce como flat slug, (f).

Por otro lado, cuando la velocidad del flujo es suficientemente alta a través de un lecho de partículas finas, la superficie superior del lecho desaparece y se produce el arrastre de partículas. Dentro del lecho se puede observar una distribución caótica de grupos de sólidos y espacios de gas de distintos tamaños y formas. Éste es el lecho

turbulento, (g). Por último, si aumentamos más la velocidad del fluido, los sólidos son transportados neumáticamente fuera del lecho, (h).

En la práctica es necesario colocar sistemas de captación de partículas a la salida de lechos turbulentos y dispersos. Se suelen colocar ciclones, que son elementos de sedimentación por fuerza centrífuga, y que pueden ser internos o externos, en función del tipo de lecho.

A modo de resumen esquemático, se presenta la siguiente figura en donde el comportamiento del lecho viene definido por la velocidad del gas y por el tamaño de las partículas:

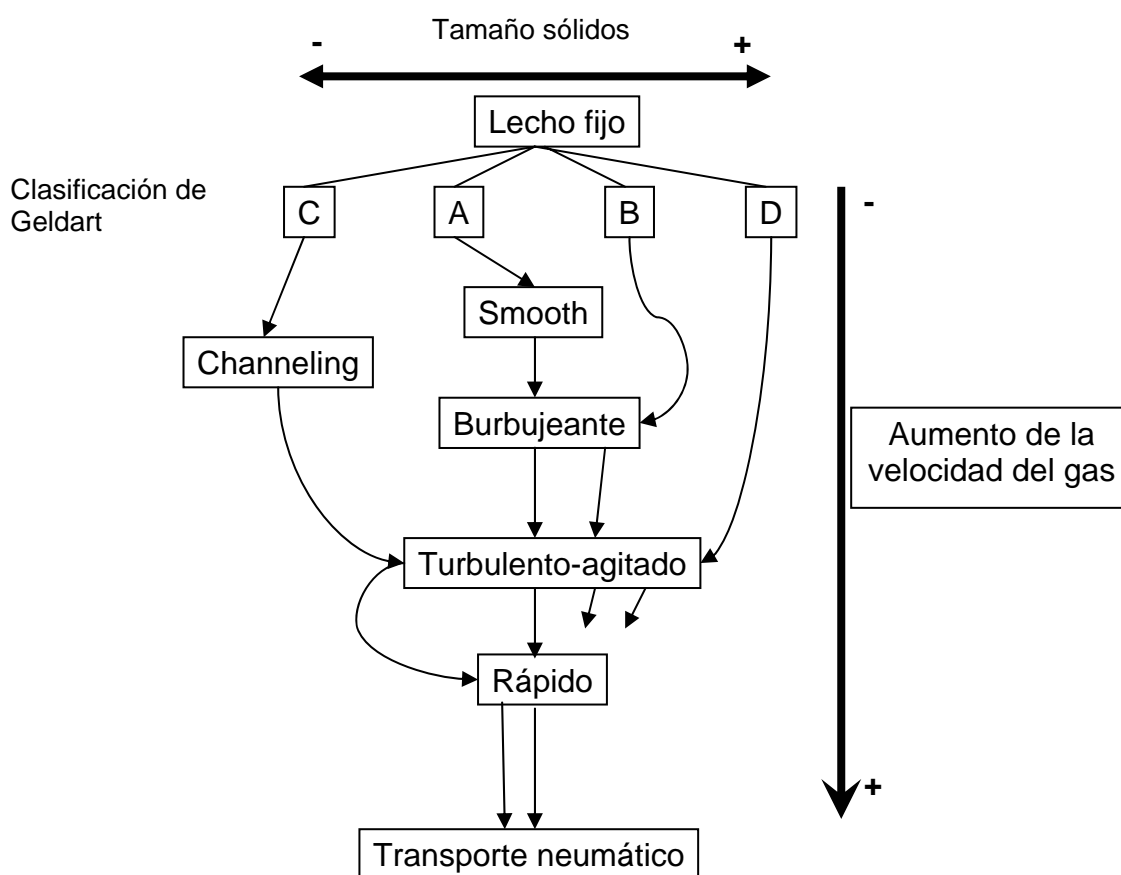


Figura 2. Tipos de lechos según las partículas.

En el caso de estudio, se considerará que su comportamiento es el del lecho burbujeante, (d), en donde se satisfacen las condiciones mínimas de fluidización. Para que esto se cumpla, se mantendrá la velocidad superficial por debajo de $10u_{mf}$, mientras que la máxima velocidad superficial del gas estará limitada por el diámetro medio de la burbuja en el lecho. Además, se considerará que si el diámetro de la burbuja es mayor que 0.6 veces el diámetro del lecho, el régimen será de slugging.

2.3. Comportamiento de un lecho fluidizado.

Un lecho de partículas fluidizado con gas tiene un comportamiento similar a un líquido en ebullición y, en otros aspectos, también es similar al de un fluido. Tal y como podemos ver en la siguiente figura, cumple con los comportamientos de flotación, permanencia de su superficie libre horizontal e igualación de niveles cuando se conectan dos lechos. Además, la diferencia de presión entre dos puntos del lecho es proporcional a la diferencia de altura entre ellos y, ante por ejemplo un orificio, las partículas se comportan como un chorro. Este característico comportamiento permite idear distintos sistemas de contacto entre partículas y flujo de interés en aplicaciones industriales.

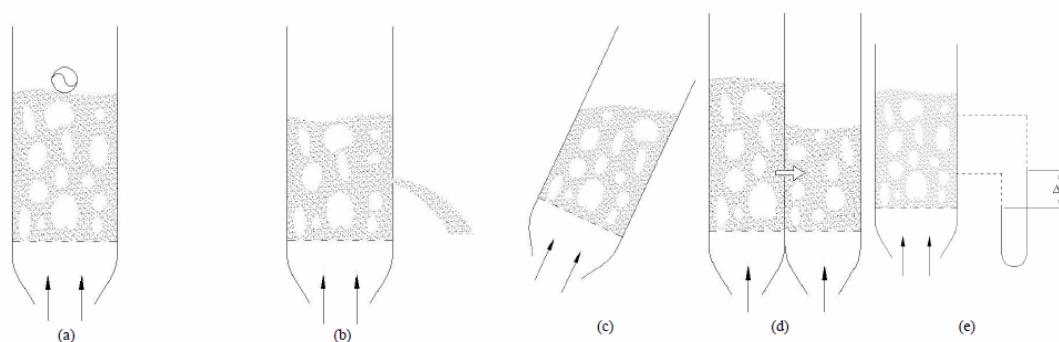


Figura 3. Propiedades de los lechos [4]

Cabe señalar las principales características del lecho fluidizado trabajando como reactor químico. Éstas son comunes para un lecho fluidizado burbujeante y para uno turbulento:

- Reacciones de gases catalizadas por sólidos:
Indicado para partículas granulares pequeñas o polvos no friables. Se consigue una rápida desactivación de los sólidos. El excelente control de la temperatura permite operaciones a grandes escalas.
- Reacciones entre gases y sólidos:
Es posible utilizar un amplio rango de tamaños de partículas. Se puede utilizar para operaciones a grandes escalas a temperatura uniforme. Es excelente para operaciones continuas.
- Distribución de temperaturas en el lecho:
La temperatura de las partículas es constante a través del lecho, y está controlada por el intercambio de calor o por el flujo y la agitación continua de sólidos.
- Partículas:
Acepta un amplio rango de partículas de tamaño medio y pequeño. Por contra, la erosión del depósito y las tuberías, y el desgaste de las partículas puede ser importante.

- Pérdida de carga:
Es alta en lechos profundos, lo que implica un alto consumo de energía.
- Intercambio y transporte de calor:
Eficiente intercambio de calor transportado por la circulación de partículas, por lo que no se suelen dar problemas de intercambio de calor para grandes escalas.
- Factor de conversión:
Para procesos continuos, la mezcla de gases y sólidos da un peor resultado que otros tipos de reactores, por ejemplo, para el lecho fijo teóricamente se pueden conseguir conversiones del 100%, aunque en la realidad se aproximan a valores del 60%.

2.4. Ventajas y desventajas de un lecho fluidizado.

Las principales ventajas e inconvenientes son:

Ventajas:

1. El comportamiento de las partículas como un fluido permite controlar los procesos fácilmente.
2. El buen mezclado de los sólidos satisface el comportamiento isoterma a través del reactor, de ahí que se controle de forma simple.
3. Además, el mezclado homogéneo de los sólidos genera una inercia térmica que impide cambios bruscos de temperatura y da un amplio margen de seguridad para evacuar el calor en procesos muy exotérmicos.
4. La circulación de partículas entre dos lechos hace posible extraer, o añadir, grandes cantidades de calor necesario en grandes reactores
5. Se puede utilizar en operaciones a grandes escalas.
6. Los coeficientes de transferencia de calor y de masa son altos comparados con otros procesos.
7. La transferencia de calor entre un lecho fluidizado y un objeto sumergido en éste es alta, por lo que se necesitan pequeñas áreas en los intercambiadores.

Desventajas:

1. La descripción del flujo de gas en un lecho burbujeante es complicada ya que se desvía bastante del modelo “plug flow”, que considera que la velocidad del flujo es constante a través de la sección de área. Cuando hay una alta conversión en productos gaseosos el modelo es más complicado todavía.
2. El rápido mezclado de las partículas en el lecho impide que su tiempo de residencia no sea uniforme. En procesos continuos, esto genera unos productos

no uniformes y un bajo rendimiento, especialmente con altos niveles de conversión.

3. Las partículas friables son pulverizadas y arrastradas por el gas, por lo que deben reemplazarse.
4. Hay una importante abrasión del depósito y de las tuberías.
5. En las reacciones no catalíticas a alta temperatura, se puede dar la aglomeración y el sinterizado de las partículas pequeñas.

2.5. Propiedades de los lechos.

2.5.1 Fluidización sin transporte de partículas.

Tal y como se ha comentado anteriormente, el modelo matemático supone que el lecho fluidizado estará en condiciones de burbujeo que se caracteriza por no producir el arrastre de partículas, y matemáticamente por $u_0 < 10u_{mf}$. Luego no se estudiará el transporte neumático de partículas. Además, se considera que el flujo es homogéneo y producido por un plato distribuidor con n_d orificios, sobre el que las partículas sólidas se encuentran homogéneamente mezcladas según el modelo de mezclado perfecto.

2.5.2 Velocidad mínima de fluidización.

Si se considera un flujo vertical de gas a través de un lecho, la velocidad mínima de éste para que la pérdida de carga sea igual al peso de las partículas es la velocidad mínima de fluidización. Experimentalmente, se ha comprobado que esta velocidad es dependiente del tamaño y la densidad de las partículas del lecho, de las propiedades del gas fluidizante, y de las condiciones de presión y temperatura en las que se lleva a cabo el proceso. Su expresión es:

$$u_{mf} = \left(\frac{\mu_0}{d_p \rho_g} \right) \left(\left[25.25^2 + \frac{0.0651 d_p^3 \rho_g (\rho_s - \rho_g) g}{\mu_f^2} \right]^{1/2} - 25.25 \right)$$

Expresión definida en [2]. Observándola se tiene que el cálculo de la velocidad de mínima fluidización pasa por conocer las características de las partículas (densidad ρ_s y diámetro d_p), del fluido (densidad ρ_g y viscosidad μ_f) y de la fase de emulsión (μ_0) durante la operación. Además, es preciso saber el valor de la fracción de vacío al comienzo de la fluidización, ε_{mf} , parámetro que resulta complejo de

determinar con exactitud y que se puede obtener de tablas, como la siguiente, obtenida de [4].

Partículas	Tamaño de la partícula, d_p (mm)						
	0.02	0.05	0.07	0.10	0.20	0.30	0.40
Arena fina	-	0.60	0.59	0.58	0.54	0.50	0.49
Arena gruesa	-	0.56	0.52	0.48	0.44	0.42	-
Mezcla de arenas	-	-	0.42	0.42	0.41	-	-
Carbón y polvo de vidrio	0.72	0.67	0.64	0.62	0.57	0.56	-
Antracita	-	0.62	0.61	0.60	0.56	0.53	0.51
Carbón de absorción	0.74	0.72	0.71	0.69	-	-	-
Catalizador Fischer-Tropsch	-	.	-	0.58	0.56	0.55	-
Carborundum	-	0.61	0.59	0.56	0.48	-	-

Tabla1. Valor de ε_{mf} .[4]

2.5.3 Clasificación de Geldart.

La capacidad y el modo en que las partículas fluidizan varía según su naturaleza. Atendiendo a este hecho y en lechos sin transporte de partículas, Geldart propuso cuatro grupos principales, que a condiciones ambientales se clasifican según la siguiente gráfica:

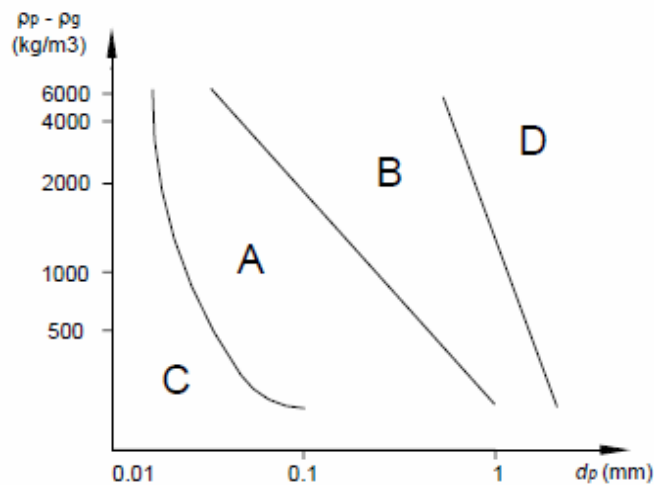


Figura 5. Clasificación de Geldart [4]

I. Grupo A:

Se trata de materiales con una baja densidad ($\rho_s < \sim 1.4 \text{ g/cm}^3$). Estas partículas llegan a la fluidización fácilmente, presentando un lecho muy suave a bajas velocidades del flujo de gas y un crecimiento de burbujas a mayores velocidades. Cuando se llega a la fluidización, el lecho se expande considerablemente antes de que aparezcan las burbujas. A velocidades del gas superiores a la velocidad de crecimiento de las burbujas, el comportamiento del lecho es burbujeante; y se caracteriza por:

- Las burbujas de gas suben más rápido que el resto del gas, por lo que se introduce en la fase de emulsión.
- Estas burbujas se parten y se juntan frecuentemente, con un tamaño máximo de unos 10 cm.
- Cuando las burbujas llegan al tamaño del depósito, se forman slugs axiales.

II. Grupo B:

Partículas semejantes a la arena, con diámetros comprendidos entre $40 \mu\text{m} < \overline{d_p} < 500 \mu\text{m}$ y sus densidades entre $1.4 \text{ g/cm}^3 < \rho_s < 4 \text{ g/cm}^3$. Estos sólidos fluidizan bien con una alta velocidad de burbujeo y con burbujas grandes. Por otro lado, en cuanto se alcanza la velocidad mínima de fluidización se forman burbujas, y a mayores velocidades:

- En el distribuidor se forman pequeñas burbujas que crecen y se unen conforme se elevan en el lecho.
- El tamaño de la burbuja es independiente del tamaño de la partícula.
- El burbujeo fuerte incrementa la circulación bruta de partículas.

III. Grupo C:

Polvo muy fino. La fluidización es muy complicada de conseguir porque las fuerzas entre las distintas partículas son más grandes que la resultante debida a la acción del gas.

IV. Grupo D:

Partículas grandes y/o densas. El comportamiento de sus lechos es errático, con estallidos de burbujas o chorros si la distribución del gas no es homogénea. Algunos ejemplos pueden ser metales incandescentes, grano seco o granos de café incandescentes. Los lechos tienen las siguientes propiedades:

- Las burbujas se unen rápidamente y crecen hasta un gran tamaño.
- Las burbujas suben más despacio que el resto del gas.
- Las partículas son proyectadas como un chorro fácilmente.

Las propiedades de fluidización de una partícula en aire se pueden predecir si se clasifica en uno de los cuatro grupos. No obstante, se debe tener en cuenta que la operación a temperaturas y presiones por encima de la ambiente puede suponer que una partícula, en concreto, muestre un comportamiento típico de un grupo diferente al que realmente pertenece.

2.5.4 Formación de burbujas durante la fluidización.

La experiencia demuestra que, en muchas características, un lecho burbujeante se comporta como un líquido burbujeante de baja viscosidad. De este modo, la forma de las burbujas es parecida en ambos casos: casi esféricas las de pequeño tamaño, alargadas y deformadas cuando crecen, y esféricas con forma de tapón las de mayor tamaño. En los dos casos se observa el ascenso lento de las burbujas pequeñas, que pasa a ser más rápido en las grandes, pudiendo una serie de burbujas formar por coalescencia burbujas de mayor tamaño. Además, la velocidad de ascenso de las burbujas depende de los mismos factores en ambos casos, pudiendo determinarse mediante expresiones similares. La correlación empírica que define la velocidad de ascenso de una burbuja es:

$$u_{br} = 0.711(gd_b)^{1/2}$$

Donde d_b es el diámetro de la burbuja. Éste es un parámetro crítico en la modelización de un lecho fluidizado ya que afecta a la velocidad de elevación de las burbujas, a la fracción de las fases de burbuja y de emulsión, al mezclado de partículas, y a los coeficientes de transferencia de masa y calor entre ambas fases.

La coalescencia de las burbujas aumenta con la altura del lecho, y ésta se modeliza de acuerdo a muchas correlaciones, utilizándose en este trabajo la desarrollada por [1] Mori and Wen, válida para partículas Geldart B y para un plato distribuidor con n_d orificios:

$$D_{B0} = 0.347 \left(\frac{A(u_0 - u_{mf})}{n_d} \right)^{0.4}$$

$$D_{B0} = 0.652 (A(u_0 - u_{mf}))^{0.4}$$

$$d_b(z) = D_{BM} - (D_{BM} - D_{B0}) \exp(-0.3z/D_t)$$

donde D_{B0} es el diámetro inicial de la burbuja, tras el distribuidor; D_{BM} es el máximo tamaño de burbuja en la superficie superior del lecho; mientras que D_t es el diámetro total del gasificador.

Volviendo a la velocidad de ascenso de las burbujas, ésta se define en lechos burbujeantes como:

$$u_b(z) = u_0 - u_{mf} + u_{br} = u_0 - u_{mf} + 0.711(gd_b)^{1/2}$$

Que es función de la altura ya que la velocidad superficial y el diámetro de la burbuja lo son. La velocidad superficial se define en función del flujo molar total:

$$\frac{du_0}{dz} = \frac{1}{AC_T} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{i=1}^{N_B} f_{Bi} + \sum_{i=1}^{N_E} f_{Ei} \right)$$

CAPÍTULO 3

REACCIONES QUÍMICAS

3. REACCIONES QUÍMICAS.

3.1. Tipos de carbón.

Las clasificaciones más típicas del carbón se realizan según sus propiedades más importantes, que en esencia buscan determinar el poder calorífico del carbón. De esta forma es posible construir un rango de clasificación que permiten identificar las condiciones bioquímicas y fisicoquímicas que caracterizan el desarrollo del carbón. Respecto a la composición en peso en base daf (base húmeda libre de cenizas), se tiene:

	Volátiles (%)	Carbono (%)	Hidrógeno (%)	Poder calorífico inferior [MJ / kg]
Antracita	1.8-10	91-94.4	2.05-3.89	34.4-35.7
Bituminoso	19-44.6	77.7-89.9	5.47-6.15	31-36.3
Subbituminoso	44.2-44.7	73.9-76	5.16-5.5	29-30.7
Lignito	47	71	4.89	28.3

Tabla 2. Tipos de carbón [11]

3.2. Esquema de la cinética química.

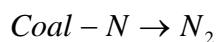
El proceso de gasificación comienza con la introducción del carbón pulverizado en el seno de una corriente de gas, aire pretratado u oxígeno según el caso de estudio, momento en el que, de forma instantánea, se produce la volatilización del carbón en compuestos gaseosos.

A partir del momento en que se introduce el flujo de carbón y el de gas en el lecho, se producen distintas reacciones según la fase:

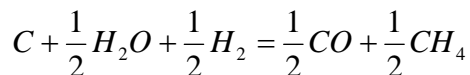
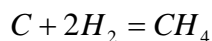
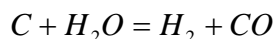
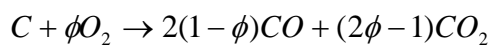
- Fase de emulsión:
 - Devolatilización:

$$\text{Coal} - C - O - H \rightarrow CO, CO_2, CH_4, H_2, H_2O$$

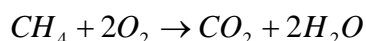
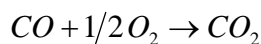
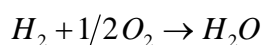
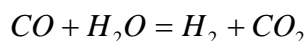
$$\text{Coal} - S \rightarrow H_2S$$



– Reacciones heterogéneas:

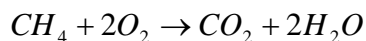
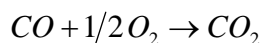
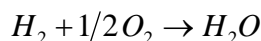
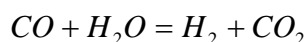


– Reacciones homogéneas:



- Fase de burbuja:

– Reacciones homogéneas:



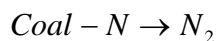
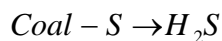
Es decir, los productos de la gasificación reaccionan entre sí en la fase de emulsión y al mismo tiempo son transportados mediante el flujo neto y por difusión a la fase de burbuja, en donde se producen reacciones homogéneas.

Las reacciones que se producen en la fase de burbuja solamente conducen a un cambio de volumen en esta fase y no contribuyen al flujo neto.

Cabe señalar, que, si bien se ha intentado seguir el modelo de gasificación con lecho fluidizado propuesto en [1] y [3] lo más fielmente posible, ha sido imposible por tener graves erratas en las expresiones de las velocidades de reacción, como se comentará más adelante.

3.3. Devolatilización.

La devolatilización es una etapa intermedia en los procesos de reacción de gasificación y combustión, en la cual se liberan los compuestos gaseosos que se generan en el carbón por un calentamiento a temperaturas elevadas. Los productos considerados en la devolatilización son:



Los productos de la devolatilización dependen de la composición del carbón original, así como de las condiciones en las cuales se dé la reacción. Para un mismo carbón la velocidad de reacción se ve afectada por la temperatura de devolatilización, presión en el reactor, tipo de carbón, tamaño de partícula, tiempo de residencia del gas y del sólido, y la velocidad de calentamiento.

Los productos de la descomposición térmica del carbón se pueden dividir en char (carbono), tar (alquitrán) y gas. El char es el material no destilable que permanece como sólido. El tar es el líquido destilable con peso molecular superior a C_6 , llamado también alquitrán. El gas corresponde a los componentes más livianos que C_6 , son los volátiles.

El char es un material con una gran área superficial, constituida por micro, meso y macroporos, la estructura y distribución de éstos depende del rango del carbón y de las condiciones de devolatilización. El área superficial de los microporos aumenta durante la devolatilización por la liberación de volátiles a través de los poros, que inicialmente eran inaccesibles.

La estructura porosa del char y su área superficial interna, determinan la posibilidad de acceso a los gases reactivos como el oxígeno, lo cual es una característica importante en los procesos de gasificación y combustión.

El proceso de evolución del tar, se puede describir como sigue:

1. Iniciación de las moléculas de tar por evaporación y fragmentación de la estructura del carbón.
2. Crecimiento de las moléculas de tar por su transporte hacia el exterior de la partícula de carbón y la transferencia interior.
3. Evaporación y transporte de las especies hacia el exterior de la partícula de carbón.

4. Reacciones secundarias de las moléculas de tar generado con las de gas o char durante su transporte.

La producción de tar se incrementa con la temperatura. La temperatura a la cual se inicia la liberación del tar, así como también la temperatura a la cual se alcanza el máximo de tar producido depende del rango del carbón original, así como de la estabilidad del tar. Si se utilizan velocidades de calentamiento elevadas, la producción de tar disminuye debido a que se disminuye su estabilidad y éste se descompone a su vez en hidrocarburos livianos tales como CH_4 y otros.

Los volátiles se originan en las reacciones de devolatilización o pirólisis, causadas por una ruptura de uniones durante el calentamiento. Esta liberación está influenciada por la temperatura, el tiempo de residencia, la presión, el tamaño de la partícula y el tipo de carbón, los cuales hacen que la velocidad de evolución de volátiles pueda estar controlada por la descomposición química del carbón o por la difusión de gases en el interior de las partículas sólidas. De hecho, este mecanismo de difusión en el interior del sólido no se tendrá en cuenta ya que se suele dar en procesos de combustión y gasificación de partículas de gran tamaño.

Otras variables que también afecta a la devolatilización es el tamaño de partícula del carbón afecta a la cantidad de char y tar producido. Si se incrementa el tamaño de partícula se disminuye la cantidad de tar, se aumenta la cantidad de char y se mantiene la cantidad de volátiles.

El tamaño de la partícula de carbón afecta al transporte de volátiles desde el punto donde son generados hasta la superficie de la partícula. Por tanto, si se incrementa el tamaño de la partícula se incrementa el tiempo de residencia promedio de los volátiles en ella y se favorece la evolución de reacciones secundarias entre las especies generadas.

La presión tiene un efecto similar al del tamaño del partícula. Un incremento de la presión extrema durante la reacción de un carbón bituminoso genera una disminución en la cantidad de tar producido. El efecto de la presión sobre la producción de tar se genera por la disminución de la velocidades de difusión con un incremento de la presión, lo que genera tiempos de residencia en la partícula prolongados y favorece las reacciones secundarias. Al mismo tiempo, la producción de gases livianos se incrementa con un incremento en la presión.

Existe un gran número de modelos matemáticos de cinética y mecanismos de reacción según los cuales se produce la devolatilización del carbón como el modelo de

reacción simple, el de reacción de orden n y los de reacciones paralelas. Estos modelos suponen que la etapa controladora de la reacción de devolatilización son las reacciones de descomposición. En todos los casos, la falta de datos de velocidad de formación de cada una de las especies volátiles dificultan el tratamiento de la devolatilización y por lo tanto la aplicación de los diferentes modelos.

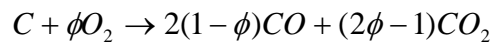
En este estudio se seguirán las siguientes relaciones empíricas propuestas en [1] por Loison and Chauvin:

$$\begin{aligned} X_{H_2} &= 0.157 - 0.868X_{mv} + 1.388(X_{mv})^2 \\ X_{CH_4} &= 0.201 - 0.469X_{mv} + 0.241(X_{mv})^2 \\ X_{CO} &= 0.428 - 0.2.653X_{mv} + 4.845(X_{mv})^2 \\ X_{CO_2} &= 0.135 - 0.90X_{mv} + 1.906(X_{mv})^2 \\ X_{H_2O} &= 0.409 - 2.389X_{mv} + 4.554(X_{mv})^2 \end{aligned}$$

Donde X_{mv} se refiere a la fracción másica de partículas volátiles que hay en el carbón en condiciones de dry and ash-free basis.

3.4. Combustión.

La combustión del carbón se define de acuerdo a un parámetro ajustable ϕ que suele tener un valor aproximado a 0.8. La reacción es:



Sin embargo, este parámetro que determina la relación entre CO/CO_2 también se puede modelizar según la siguiente expresión:

$$CO/CO_2 = 2400 \exp\left(-\frac{6234}{T_s}\right)$$

Siendo T_s la temperatura superficial de las partículas de carbón. Sin embargo, no se utilizará esta expresión indicada en [2] por las hipótesis del modelo seguido.

La velocidad de combustión del carbón no solamente depende de la reacción química en la superficie de la partícula, sino que también está influenciada por la velocidad de difusión del oxígeno hasta la zona de reacción, lo que se produce mediante

transporte difusivo. Se considera que la partícula de carbón está rodeada por una capa de gas a través de la cual hay un gradiente en la concentración de oxígeno, y en la que el CO es oxidado a CO_2 durante la difusión hasta la superficie reactante. Fuera de esta capa límite no hay gradiente en la concentración de oxígeno.

Por otro lado, con el progreso de la combustión la superficie de reacción va disminuyendo paulatinamente dejando una zona formada por cenizas, y aunque se considera que esta capa límite de cenizas es retirada por la turbulencia de la corriente, dificulta la difusión del oxígeno.

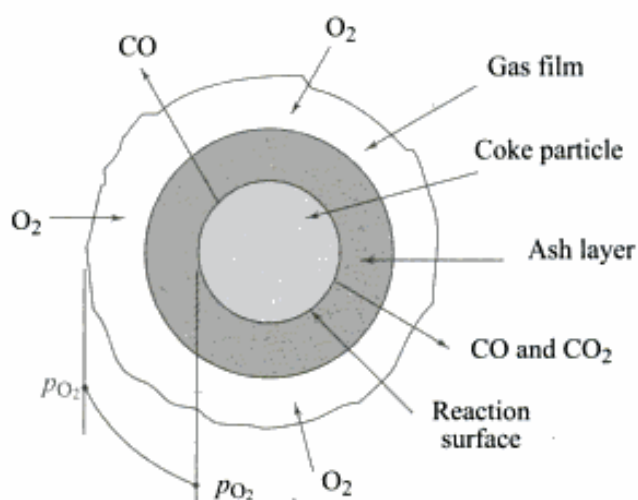


Figura 6. Combustión de una partícula de carbón [1]

La velocidad de difusión del oxígeno por unidad de área de la superficie viene dada por las leyes de Fick:

$$r_s^d = k_g (C_b - C_s)$$

Por otro lado, cuando estén en contacto el oxígeno y la partícula de carbón, la velocidad de la reacción vendrá descrita por la cinética:

$$r_s^r = k C_b$$

Combinando ambas expresiones:

$$r_s = k_g \left(C_b - \frac{r_s^r}{k} \right) \rightarrow r_s = \frac{1}{\frac{1}{k} + \frac{1}{k_g}} C_b$$

Esta expresión determina el comportamiento de la velocidad de reacción de la combustión del carbón, si bien, estudiando su comportamiento con la temperatura se pueden distinguir tres zonas principales:

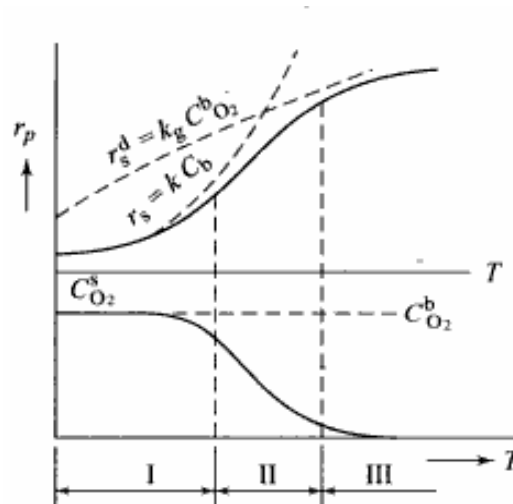


Figura 7. Zonas de la combustión del carbón [11]

- **Región I: Zona de combustión cinética:**
A baja temperatura se consume una pequeña parte del oxígeno suministrado a la superficie ya que $k \ll k_g$ y por tanto la velocidad de reacción está controlada por la cinética química:

$$r_s = k C_b$$

- **Región II: Zona de transición:**
La velocidad de reacción depende de ambos mecanismos.
- **Región III: Zona de combustión por difusión:**
A altas temperaturas, el oxígeno que llega a la superficie del carbón reacciona instantáneamente y su concentración en la superficie se hace nula. Sobre la superficie de la partícula se produce la reducción de CO_2 a CO debido a la deficiencia de oxígeno en la superficie, mientras que parte del oxígeno que se transporta por difusión oxida el CO a CO_2 en la capa adyacente a la partícula.

$$r_s = k_g C_b$$

En las partículas de carbón del lecho fluidizado, al estar incandescentes y tener alta temperatura, se considerará que su velocidad de reacción está controlada por difusión. Por lo tanto, y de acuerdo con [1], la expresión de la velocidad de reacción de la combustión vendrá dada por:

$$k_g = \frac{D_g}{d_p} \left(2\varepsilon_{mf} + 0.69(Sc)^{1/3} (Re/\varepsilon_b)^{1/2} \right)$$

Donde:

- D_g es el coeficiente de difusión.

- d_p el diámetro de la partícula.
- El número de Shmidt, que se define en relación a la corriente del gas incidente:

$$Sc = \frac{\nu}{D_g}$$

- El número de Reynolds de la partícula:

$$Re_p = \frac{d_p u_0 \rho_{aire}}{\mu_{aire}}$$

La velocidad de la reacción queda:

$$r_{O_2} = -\frac{dC_{E_{O_2}}}{dt} = k_g C_{E_{O_2}} = \frac{D_g}{d_p} (2\varepsilon_{mf} + 0.69(Sc)^{1/3}) (Re/\varepsilon_b)^{1/2} \cdot C_{E_{O_2}} = \left[\frac{mol}{m^2 s} \right]$$

Para que coincidan las unidades con el resto de velocidades de reacción, se multiplica por el área específica de la partícula, que se define como:

$$a_s = \frac{A_{particula}}{V_{particula}} = \frac{6}{d_p} = [m^2 m^{-3}]$$

Luego la velocidad de reacción es:

$$r_{O_2} = k_g C_{E_{O_2}} a_s$$

3.5. Gasificación.

La gasificación de un sólido es un proceso termoquímico que engloba la descomposición térmica de la materia orgánica y la acción de un gas que reacciona principalmente con el residuo carbonoso procedente de esa descomposición térmica. La constituyen las reacciones sólido-gas (heterogéneas), o en fase gas (homogéneas), 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.

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.

- **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.

▪ **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 bares en algunos casos.

▪ **Relación agente gasificante/residuo:**

Es uno de los parámetros más importantes en la gasificación, especialmente cuando está 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 nitrógeno. Por ello hay un valor óptimo de la relación gasificante/residuo para cada proceso, que depende básicamente de la composición del residuo gasificado.

Así se conjuga, 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.

Las reacciones de gasificación que se producen se dan en la fase de emulsión y se engloban dentro de las reacciones heterogéneas, como se explica en el siguiente apartado.

3.5.1 Modelo de Johnson.

Este modelo de gasificación del carbón, [7], la describe suponiendo las siguientes etapas:

- Volatilización del carbón.
- Formación rápida de metano.
- Baja velocidad de gasificación.

Cuando se somete un carbón con contenido en volátiles a alta temperatura, se produce una serie de reacciones químicas complejas en su estructura que van acompañadas por reacciones pirolíticas mediante las que se producen ciertos compuestos durante la volatilización.

Por otro lado, si la volatilización se produce en presencia de hidrógeno a elevada temperatura, además de la pirólisis, el carbón muestra una alta tendencia a la formación de metano; y sin embargo, esta formación no se considera inherente al proceso de la volatilización, sino que lo es al de gasificación. Es decir, dentro del carbón se tiene una parte volátil, que se libera durante la volatilización, y otra parte de carbón fijo, que bajo las condiciones adecuadas de temperatura y presencia de hidrógeno y vapor de agua produce gases.

Este proceso se modeliza de acuerdo a las siguientes expresiones:

- I. $C + H_2O = H_2 + CO$
- II. $C + 2H_2 = CH_4$
- III. $C + \frac{1}{2}H_2O + \frac{1}{2}H_2 = \frac{1}{2}CO + \frac{1}{2}CH_4$

La reacción I es la convencional entre vapor de agua y carbón, que sólo sucede con vapor puro a elevadas presiones o con una mezcla de gases a baja presión y con contenido de vapor. Se inhibe por los efectos del hidrógeno o del monóxido de carbono.

La reacción II es la única que se produce en sistemas en los que estén presentes tanto el hidrógeno como el vapor de agua. Depende en gran medida de la presión parcial del hidrógeno.

Por último, la estequiometría de la reacción III limita su aparición en sistemas en los que haya hidrógeno y vapor. Aunque es la suma de las reacciones I y II, este modelo considera que debe de haber una tercera reacción, con el fin de reflejar que las dos primeras reacciones no son equilibrios.

Las expresiones de las velocidades de reacción son:

$$r_{E_{gi}} = \frac{\varepsilon_s \rho_0 f_0}{mw_C} r(X) g_j(T_p, P_i) = \left[\frac{kmol}{m^3 s} \right]$$

donde:

- f_0 , la reactividad relativa del carbón.
- ρ_0 , la densidad inicial del carbón [kg/m³].
- ε_s , la fracción volumétrica ocupada por las partículas.
- M_c , la fracción másica de carbón fijo [kg C/kg carbón].
- mw_c , el peso molecular del carbón [12 kg/kmol].
- Y_c , la fracción másica de carbono en carbón en base daf.
- T_p , temperatura de las partículas de carbón.
- $r(X)$, velocidad de conversión del carbón.

$$r(X) = \frac{dX}{dt} = M_c (1-X)^{2/3} \exp(-\alpha X^2)$$

- $g_j(T_p, P_i)$ es la contante de reacción global [s⁻¹], se define como:

$$g_j(T_p, P_i) = \frac{\exp(4704/T_p)}{60} k_j$$

- k_j , se definen para cada reacción según:

$$k_1 = \frac{\exp(9.0201 - 17613/T) \left(1 - \frac{P_{CO} P_{H_2}}{P_{H_2}^2 K_{eq1}} \right)}{\left[1 + \exp(-22.216 + 24881/T) \left(\frac{1}{P_{H_2O}} + 16.35 \frac{P_{H_2}}{P_{H_2O}} + 43.5 \frac{P_{CO}}{P_{H_2O}} \right) \right]^2}$$

$$k_2 = \frac{\exp(2.6741 - 18375/T) \left(1 - \frac{P_{CH_4}}{P_{H_2}^2 K_{eq2}} \right)}{\left[1 + P_{H_2} \exp(1 - 10.452 + 11097/T) \right]}$$

$$k_3 = \frac{P_{H_2}^2 P_{H_2O} \exp(12.4663 - 24746/T) \left(1 - \frac{P_{CH_4} P_{CO}}{P_{H_2} P_{H_2O} K_{eq3}} \right)}{\left[1 + \exp(-6.6696 + 8443/T) \left(P_{H_2}^{0.5} + 0.85 P_{CO} + 18.62 \frac{P_{CH_4}}{P_{H_2}} \right) \right]^2}$$

$$\log_{10}(K_{eq1}) = -7.49 - 7070/T$$

$$\log_{10}(K_{eq2}) = -5.373 + 4723/T$$

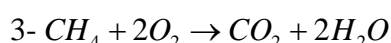
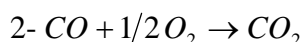
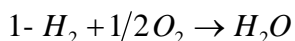
$$K_{eq3} = K_{eq1} \cdot K_{eq2}$$

donde p_i es la presión parcial de cada componente [atm].

3.6. Reacciones homogéneas.

En las reacciones homogéneas todas las sustancias reaccionantes se encuentran en una sola fase, en estado gaseoso en este estudio. La velocidad de este tipo de reacciones depende de la composición de las sustancias en la fase considerada, así como de la temperatura y presión del sistema. No deben influir sobre la velocidad: la forma del recipiente, las propiedades de las superficies de los sólidos en contacto con la fase, y las características difusionales del fluido, es decir, será función de la concentración, presión y temperatura.

Las reacciones homogéneas que aparecen en el lecho son:



Tal y como se señala en [1], las velocidades de reacción son:

- $r_I = k_{CO} C_{CO}^2 C_{CO_2} = [mol / m^3 s]$

$$\frac{k_{CO}}{k_{H_2}} = 0.35$$

$$k_{CO} = 2.4602 \cdot 10^{-12} \exp\left(-\frac{21137}{T} + 24.74414\right) T^3$$

- $r_{II} = k_{H_2} C_{H_2}^2 C_{CO_2}$

- $r_{III} = r_{II}$

Se puede comprobar a simple vista que ni la combustión del hidrógeno ni la del monóxido de carbono dependen de la concentración de oxígeno, es decir, son erróneas.

Según [5], las posibles velocidades de reacción para las reacciones anteriores son:

$H_2 + 1/2 O_2 \rightarrow H_2O \quad r_{H_2} = A T^\delta e^{(-E_a/RT)} C_{H_2}^\alpha C_{O_2}^\beta = [kmol/m^3 s]$				
α	β	δ	$E_a = [kJ / mol]$	A
1	1	0	109	$2.2 \cdot 10^9$
1.5	1	-1.5	28.5	$5.16 \cdot 10^{13}$
1	1	0	125	$1.08 \cdot 10^{13}$
1	1	0	42	$1 \cdot 10^{14}$
$k_{H_2} / k_{CO} = 2.86$				

Tabla 3. Velocidad de combustión del hidrógeno [5]

$CO + 1/2 O_2 \rightarrow CO_2 \quad r_{CO} = Ae^{(-E_a/RT)} C_{CO}^\alpha C_{O_2}^\beta C_{H_2O}^\delta = [kmol/m^3 s]$				
α	β	δ	$E_a = [kJ / mol]$	A
1	0.25	0.5	167	$2.32 \cdot 10^{12}$
1	0.5	0.5	126	$1.3 \cdot 10^{11}$
1	0.3	0.5	66.9	$4.78 \cdot 10^8$
1	0.25	0.5	289	$1.28 \cdot 10^{17}$
1	0.5	0.5	126	$1 \cdot 10^{10}$
1	0.5	0.5	126	$3.25 \cdot 10^{10}$

Tabla 4. Velocidad de combustión del monóxido de carbono [5]

$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O \quad r_{CH_4} = AT^\delta e^{(-E_a/RT)} C_{CH_4}^\alpha C_{O_2}^\beta = [kmol/m^3 s]$				
α	β	δ	$E_a = [kJ / mol]$	A
-0.3	1.3	0	28.5	$1.10 \cdot 10^9$
0.7	0.8	0	203	$5.01 \cdot 10^{11}$

Tabla 5. Velocidad de combustión del metano [5]

En todas las expresiones anteriores la concentración está expresada en $[kmol / m^3 s]$.

Para la reacción de combustión del hidrógeno se ha optado por seguir la expresión:

$$r_{H_2} = 2.20 \cdot 10^9 \cdot T^0 e^{(-109000/RT)} C_{H_2}^1 C_{O_2}^1 = [kmol/m^3 s]$$

En la reacción de oxidación del monóxido de carbono se tienen distintas opciones, si bien se ha optado por la de menor velocidad de reacción.

$$r_{CO} = 1 \cdot 10^{10} e^{(-126/RT)} C_{CO} C_{O_2}^{0.5} C_{H_2O}^{0.5} = [kmol/m^3 s]$$

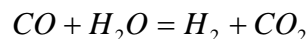
Mientras que para la combustión del metano, se opta por la expresión más generalista:

$$r_{CH_4} = 5.01 \cdot 10^{11} e^{(-203/RT)} C_{CH_4}^{0.7} C_{O_2}^{0.8} = [kmol/m^3 s]$$

Aunque muchos autores la consideran tan pequeña que se suele despreciar.

3.6.1 Water-Gas Shift Reaction.

Se trata también de una reacción homogénea cuya velocidad de reacción se define de acuerdo al modelo propuesto por Karim y Mohindra [5].



$$r_{WGSR} = 2.78 \cdot 10^3 e^{(-12.6/RT)} (C_{CO} C_{H_2O} - C_{CO_2} C_{H_2} / K) = [kmol/m^3 s]$$

$$K = 0.0265 e^{\left(\frac{65800}{RT}\right)}$$

La reacción WGSR (Water-Gas Shift Reaction) se da sólo en la fase de burbuja.

Por otro lado, en la fase gaseosa de emulsión, debido a la presencia de cenizas la reacción anterior aumenta su velocidad, es catalizada por éstas, con lo que su velocidad de reacción quedaría:

$$r_{CWGSR} = 1.26 \cdot 10^5 e^{(-116/RT)} f_{wg} P_T \left(p_{CO} - \frac{p_{CO_2} p_{H_2}}{p_{H_2O} K_{eqwg}} \right)$$

Sin embargo, de nuevo el artículo de referencia principal, [1], está incompleto, ya que no se especifican ni unidades ni el valor de K_{eqwg} o de f_{wg} . Además, la referencia de esta expresión está descatalogada quizás por ser una ponencia de un congreso en 1979.

En cualquier caso, ante la imposibilidad de reflejar los efectos catalíticos de las cenizas, se opta por utilizar la expresión anterior del equilibrio de la reacción WGSR en la fase de emulsión.

3.7. Resumen de las reacciones.

En la siguiente tabla se presenta el resumen de todas las reacciones, la fase en la que se dan y la referencia bibliográfica consultada:

Índice	Reacción	Fase	Referencia
1	$Coal \rightarrow CO, CO_2, CH_4, H_2, H_2O$	Emulsión	[1]
2	$Coal - S \rightarrow H_2S$		

3	$Coal - N \rightarrow N_2$		
4	$C + \phi O_2 \rightarrow 2(1 - \phi)CO + (2\phi - 1)CO_2$	Emulsión	[1]
5	$C + H_2O = H_2 + CO$	Emulsión	[7]
6	$C + 2H_2 = CH_4$	Emulsión	
7	$C + \frac{1}{2}H_2O + \frac{1}{2}H_2 = \frac{1}{2}CO + \frac{1}{2}CH_4$	Emulsión	
10/13	$H_2 + 1/2 O_2 \rightarrow H_2O$	Burbuja/ Emulsión	[5]
11/14	$CO + 1/2 O_2 \rightarrow CO_2$	Burbuja/ Emulsión	[5]
12/15	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	Burbuja/ Emulsión	[5]
8	$CO + H_2O = H_2 + CO_2$	Emulsión	[5]
9	$CO + H_2O = H_2 + CO_2$	Burbuja	[5]

Tabla 6. Resumen reacciones

CAPÍTULO 4

FRACCIÓN DE CONVERSIÓN DEL CARBÓN

4. FRACCIÓN DE CONVERSIÓN DEL CARBÓN.

4.1. Introducción.

Se define la fracción de conversión del carbón, X_c , como la relación entre la cantidad de carbón que abandona el lecho, en partículas sólidas o en los gases, y la cantidad de carbón inicial inyectada en el lecho. Es decir:

$$X_c = \frac{f_{\text{Carbón}}^{\text{SALIDA}} (\text{gases} + \text{sólidos})}{f_{\text{Carbón}}^{\text{ENTRADA}}}$$

Luego a través de la composición inicial del carbón y de las especies producidas tras su devolatilización, gasificación y combustión; se podrá conocer el porcentaje de partículas de carbón que quedan como residuo. La fracción de conversión del carbón se considera constante a través del lecho, y depende solamente de las velocidades de reacción de la combustión del carbón y de la gasificación. Por lo tanto, no será necesario calcular estas ecuaciones para los compuestos que no estén formados por carbón, tales como el hidrógeno, el agua o el oxígeno, que también son productos de las reacciones anteriores.

4.1.1 Propiedades del carbón.

Según las propiedades del carbón, éste se puede dividir en cuatro tipos: lignito, carbón bituminoso, antracita y grafito. Generalmente, cada uno de ellos se define según los siguientes parámetros físicos:

– Humedad:

Es una propiedad importante que se puede dar cuatro formas:

- En la superficie del carbón.
- De forma hidroscópica, el agua entra por capilaridad dentro de las grietas.
- En especies descompuestas.
- Humedad mineral, el agua es parte de compuestos cristalinos como silicatos.

– Partículas volátiles:

Se refiere a los componentes del carbón, excepto la humedad, que son liberados a altas temperaturas en ausencia de aire. El contenido en volátiles es determinado mediante estándares.

– Cenizas:

Es el residuo no combustible dejado tras la combustión del carbón.

– Carbono fijo:

Es el carbono que queda tras la salida de las partículas volátiles. Se diferencia del contenido total de carbono en que éste sí refleja parte de las especies volátiles como hidrocarburos.

Respecto a los análisis posibles, las composiciones de carbón que se suelen suministrar son:

- Proximate Analysis:

El objetivo de este análisis es determinar el porcentaje de carbono fijo, partículas volátiles, humedad y cenizas que tiene el carbón.

- Ultimate Analysis:

Se calcula la composición del carbón en sus distintos elementos, como el carbono (C), hidrógeno (H), oxígeno (O), azufre (S) entre otros.

4.2. Valores iniciales de carbono.

Es necesario conocer la referencia con la que comparar el contenido de carbón que abandona el lecho, que viene determinada por el carbono fijo.

$$(f_C)_{in} = f_{COAL} \cdot FC = [kg / s]$$

La concentración inicial del carbono que entra al lecho se calcula de acuerdo con:

$$(C_C)_{in} = \frac{(f_C)_{in}}{u_{mf} \varepsilon_{mf} A} = [kg / m^3]$$

4.3. Devolatilización.

Al tratarse de un proceso tan rápido, se considera instantáneo y sólo se conocen las fracciones molares de los productos de la devolatilización, X_i , tal y como se ha comentado anteriormente.

Representado la especie por el subíndice “i”, de cada fracción molar se puede calcular el contenido en carbón del gas tras la devolatilización:

$$(\%C)_i^v = X_i \frac{Mr_C}{Mr_i} = \left[\frac{kgC}{kgCOAL} \right]$$

Del mismo modo, como se conoce la composición aproximada del carbón (proximate analysis) en base ar (as received), se puede determinar la parte proporcional de carbón contenida en los volátiles y compararla con el porcentaje del carbón fijo y de cenizas, que no se volatilizarán. Es decir:

$$X_C^v = \frac{(\%C)_i^v}{FC + Ash} = \frac{\sum_{i=1}^{CO,CO_2,CH_4} X_i \frac{Mr_C}{Mr_i}}{FC + Ash}$$

La fracción de conversión del carbón que actúa en la combustión y en la gasificación es la que queda tras la devolatilización, ya que es el primer proceso que se realiza mientras que los otros dos son simultáneos en el lecho. Por tanto se utiliza la fracción de conversión que queda tras ésta:

$$X'_C = X_C(1) - X_C^v$$

4.4. Combustión.

Los productos de la combustión contienen carbono, por lo que en función de la velocidad de reacción se obtendrá la cantidad de carbono extraída. Para ello, basta con calcular la concentración de monóxido de carbono y de dióxido de carbono en cada iteración de cálculo, y sumarlas a la salida del lecho. Es decir:

$$\begin{aligned} (C_C^{CO})^z &= (1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{mf}) \frac{2(\phi - 1)}{\phi} a_s r_{O_2} \frac{\Delta z}{u} Mr_{CO} \frac{Mr_C}{Mr_{CO}} = (1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{mf}) \frac{2(\phi - 1)}{\phi} a_s r_{O_2} \frac{\Delta z}{u} Mr_C \\ (C_C^{CO_2})^z &= (1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{mf}) \frac{(2\phi - 1)}{\phi} a_s r_{O_2} \frac{\Delta z}{u} Mr_{CO_2} \frac{Mr_C}{Mr_{CO_2}} = (1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{mf}) \frac{(2\phi - 1)}{\phi} a_s r_{O_2} \frac{\Delta z}{u} Mr_C \end{aligned}$$

donde z representa la altura del lecho, e Δz la longitud del paso.

Por tanto, el contenido total de carbono en los productos de la combustión es:

$$\begin{aligned} C_C^{CO} &= \sum_{z=0}^{z=H} (C_C^{CO})^z = \left[\frac{g}{m^3} \right] \\ C_C^{CO_2} &= \sum_{z=0}^{z=H} (C_C^{CO_2})^z = \left[\frac{g}{m^3} \right] \end{aligned}$$

El factor de conversión del carbón para la combustión será:

$$X_C^{comb} = \frac{C_C^{CO} + C_C^{CO_2}}{(C_C)_{in}}$$

4.5. Gasificación.

La fracción de conversión del carbón debida a la gasificación está definida por el modelo de Johnson, [7].

$$X_C^G = \frac{\Delta W/W_0 - V}{1 - V - A}$$

siendo:

- V , partículas volátiles, incluyendo la humedad, en el flujo de carbón, gramos/gramos de carbón.
- A , material no gasificable incluyendo las cenizas y el azufre, gramos/gramos de carbón.
- ΔW , peso perdido durante la gasificación.
- W_0 , peso inicial del carbón.

La relación $\Delta W/W_0$ se puede determinar igual que en la combustión, es decir, determinando las concentraciones de los productos de las reacciones de gasificación y dividiéndolas por la concentración inicial de carbono. Para una especie i :

$$(C_C^i)^Z = (1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{mf})\alpha_{ij}r_j \frac{\Delta z}{u} Mr_C$$

Realizando el sumatorio en todo el lecho:

$$C_C^i = \sum_i^{CO, CO_2, CH_4} \left(\sum_{Z=0}^{Z=H} (C_C^{CO})^Z \right)$$

$$\frac{\Delta W}{W_0} = \frac{C_C^{CO} + C_C^{CO_2} + C_C^{CH_4}}{(C_C)_{in}}$$

Por tanto, la fracción de conversión del carbón es:

$$X_C^G = \frac{\Delta W/W_0 - (X_{mv} + Moisture)}{1 - (X_{mv} + Moisture) - (FC + Ash)}$$

4.6. Fracción de conversión total.

Este valor será el que se compare con el supuesto inicialmente para comprobar la convergencia:

$$X_C = X_C^v + X_C^G + X_C^{Comb}$$

CAPÍTULO 5

TRANSFERENCIA DE MASA Y DE CALOR

5. TRANSFERENCIA DE MASA Y DE CALOR.

5.1. Introducción.

Los reactores de lecho fluidizado involucran una gran cantidad de fenómenos, incluyendo la transferencia de masa y de energía. Los procesos de transferencia de masa toman lugar entre las burbujas y el gas en la emulsión, y entre partículas sólidas y gas en la emulsión. Debe recordarse que no se toma en cuenta la transferencia directa entre las partículas y el gas en las burbujas, debido a la suposición que las burbujas están libres de sólidos. Sin embargo, no se descartan los efectos de este intercambio pues estas transferencias se toman en cuenta indirectamente a través del gas en la emulsión.

En la siguientes figuras se pueden observar los distintos procesos de transferencia de calor y de masa, así como el flujo neto:

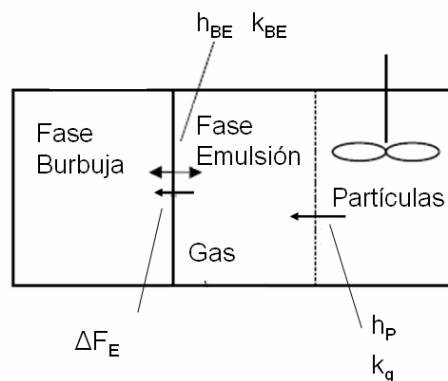


Figura 7. Mecanismos de transferencia de masa y energía [3]

5.2. Transferencia de masa.

5.2.2 Coeficiente de transferencia de masa de una partícula.

Se define mediante las leyes de difusión tal y como se ha explicado anteriormente, ya que se utiliza en la combustión del carbón.

5.2.3 Coeficiente de transferencia de masa del lecho.

El coeficiente de transferencia de masa entre las partículas y el gas del lecho tiene una modelización complicada. Esto es debido a que la gran área específica de los

sólidos conduce a un rápido equilibrio, y además, el comportamiento burbujeante de estos lechos complica la determinación de las propiedades de transferencia de masa.

Considerando el comportamiento global del lecho fluidizado, se dan dos situaciones en función del tamaño de las partículas:

➤ Partículas finas.

La mayor parte del gas que atraviesa el lecho pasa a través de éste como burbujas, por lo que las partículas pasan desde la fase gaseosa de emulsión a la de nube gaseosa, y de ésta a la de burbuja; es decir, se trata de un modelo trifásico. Asumiendo que el flujo tiene velocidad constante (plug flow), se llega a la conclusión de que el coeficiente de transferencia de una partícula ($k_{g,partícula}$) es mayor que el del lecho ($k_{g,lecho}$):

$$k_{g,lecho} < k_{g,partícula}$$

Por lo tanto, sólo es posible estudiarlo bajo la hipótesis de flujo de reacción continua (plug flow reactor model, PFR), que es asumida en este modelo dentro de la fase de emulsión. Luego el coeficiente de transferencia de masa entre la burbuja y la fase de emulsión queda:

$$k_{BE} = \frac{u_{mf}}{3} + \sqrt{\frac{4D_g \varepsilon_{mf} u_b}{\pi d_b}}$$

➤ Partículas gruesas:

En este caso el gas pasa a través del lecho sin formar nube gaseosa alrededor de las partículas. Por lo tanto, midiendo las concentraciones a la entrada y a la salida y asumiendo que el flujo tiene velocidad constante, se considera que:

$$k_{g,lecho} \cong k_{g,partícula}$$

Lo que no se corresponde con este modelo.

5.3. Transferencia de calor.

Muchos investigadores han estudiado la transferencia de calor entre el gas y las partículas del lecho, distinguiendo entre el coeficiente de transferencia de una partícula, h_p , y el de todo el lecho, h_{BE} .

5.3.1 Coeficiente de transferencia de calor de una partícula.

Suponiendo que introducimos una partícula caliente a temperatura T_s en un lecho fluidizado frío, la velocidad de enfriamiento de dicha partícula representa su coeficiente de transferencia de calor, h_p .

Como hemos visto anteriormente, las partículas son de tipo Geldart B, por lo que tenemos partículas gruesas, cuya expresión se obtiene a partir de:

$$Nu_p \cong 2 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3}$$

Tal y como señala [4], en donde se definen los números de Reynolds, Prandtl y Nusselt de la partícula:

$$Re = \frac{d_p u_0 \rho_s}{\mu}$$

$$Pr = \frac{c_p \mu}{k_g}$$

$$Nu_p = \frac{h_p \cdot d_p}{k_g}$$

5.3.2 Coeficiente de transferencia de calor del lecho.

Representa el coeficiente de intercambio de calor entre las superficies de las fases de emulsión y de burbuja. Este coeficiente depende del tipo de flujo de gas y de las partículas presentes en el lecho. Además, debe reflejar las hipótesis de mezclado perfecto de los sólidos en el lecho, llamado CSTR (continuously stirred tank reactor); y la consideración de que las reacciones se consideran continuas en todo el lecho, denominado PFR (plug flow reactor).

El siguiente coeficiente se utiliza con lechos fluidizados con partículas finas que se hayan rodeadas por pequeñas nubes, que constituyen la fase gaseosa de emulsión, y en las que el los gases atraviesan el lecho en forma de burbujas.

Basándonos en la unidad de volumen de la fase de burbuja se tiene:

$$h_{BE} = \left(\begin{array}{l} \text{Transferencia} \\ \text{por flujo de gas} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \text{Transferencia} \\ \text{por convección} \end{array} \right) = 4.5 \left(\frac{u_{mf} \rho_g C_p}{d_b} \right) + 4.5 \frac{(k_g \rho_g C_p)^{1/2} g^{1/4}}{d_b^{5/4}}$$

En donde el primer término se refiere al calor sensible transportado por los gases que pasan de la fase de emulsión a la de burbuja, es decir, el flujo neto; mientras que el segundo término es el de la transferencia de calor por convección.

CAPÍTULO 6

MODELO DEL LECHO FLUIDIZADO

6. MODELO DEL LECHO FLUIDIZADO.

6.1. Hipótesis.

El lecho fluidizado con burbujas considerado está representado esquemáticamente en la siguiente figura:

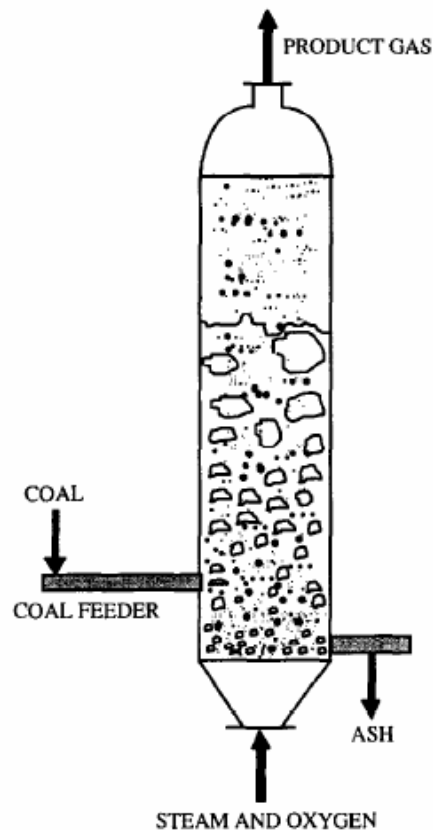


Figura 8. Esquema del gasificador [1]

El lecho se alimenta continuamente con carbón, que reacciona con el oxígeno y el vapor del gas para producir gases sintéticos combustibles, compuestos principalmente por hidrógeno y monóxido de carbono y por pequeñas cantidades de metano. Por otro lado, el gas sin tratar, o en exceso, contiene grandes cantidades de vapor y de dióxido de carbono. En cuanto a las condiciones de operación, el gasificador funciona a presión atmosférica con temperaturas de 1000-1200 K.

Las hipótesis principales del modelo del lecho son:

- I. El sistema se considera en estado estacionario y no isotérmico.
- II. El lecho fluidizado es unidimensional. Cualquier variación de las condiciones interiores y de contorno se producirá solamente en la dirección de la altura, eje Z.

- III. El comportamiento hidrodinámico del lecho fluidizado está descrito por la teoría de las dos fases de la fluidización, que se desarrollará en el siguiente apartado.
- IV. Se considera que tanto los gases de la fase de emulsión como los de la fase burbuja se encuentran en “plug flow mode”, es decir, en flujo de pistón, que es un modelo simple en el que el perfil de velocidades se considera constante a través de cualquier sección perpendicular al eje del conducto; además, asume que no hay capa límite adyacente a la pared interna del tubo.

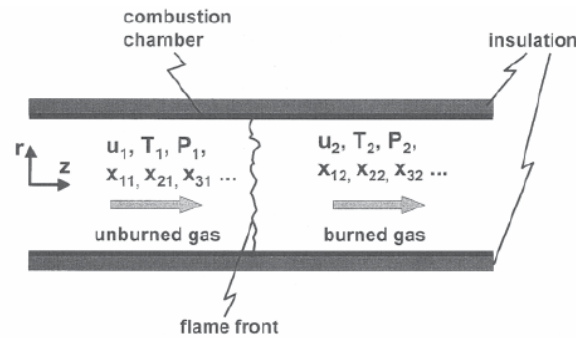


Figura 9. Esquema de plug flow [16]

- Además, también se considera que las reacciones son continuas en todo el gasificador.
- V. Por otro lado, los sólidos presentes en la fase de emulsión se suponen bajo el modelo de mezcla perfecta.
- VI. El estado de fluidización del lecho se mantiene en fluidización con burbujas. Para ello, es necesario que la velocidad superficial del gas sea menor que $10u_{mf}$. Por otro lado, la velocidad máxima del gas está limitada por el diámetro medio de las burbujas del lecho, por ello, si el diámetro de la burbuja es mayor que 0.6 veces el diámetro del lecho, se dice que el lecho trabaja en “slugging”, explicado anteriormente.
- VII. El tamaño de la burbuja varía en función de la altura del lecho. Es decir, las burbujas tienen un tamaño uniforme en cualquier sección transversal del lecho, pero crecen por coalescencia con otras burbujas y por la acción del flujo neto conforme suben en el lecho.
- VIII. Se considera que la devolatilización del carbón se produce instantáneamente en la entrada del lecho y produce especies volátiles, gases como CH_4, H_2O, H_2, CO y CO_2 , y cenizas (char). Además, se considera que los productos volátiles se distribuyen uniformemente en la fase de emulsión, siguiendo la hipótesis de la mezcla perfecta de los sólidos.
- IX. La transferencia de masa entre las partículas y la fase gaseosa de emulsión, y entre las fases de burbuja y de emulsión, se producen por difusión molecular y por convección.
- X. Las partículas de carbón se suponen esféricas y de tamaño uniforme.

XI. No se utiliza ningún medio inerte en el lecho, como pudiera ser arena.

Un esquema del modelo unidimensional es:

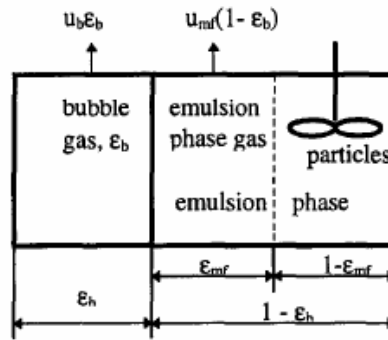


Figura 11. Esquema del modelo bifásico [1]

Como se puede apreciar, la fracción del lecho en fase burbuja se define por ϵ_b :

$$\epsilon_b = 1 - 1/B$$

Siendo “B” una correlación experimental definida como:

$$B = \frac{H}{H_{mf}} = 1 + \frac{10.978(u_0 - u_{mf})^{0.738} \rho_s^{0.376} d_p^{1.006}}{u_{mf}^{0.937} \rho_g^{0.126}}$$

Por otro lado, la fracción del lecho en fase de emulsión es:

$$\epsilon_{mf} = 1 - \epsilon_b$$

Mientras que la fracción del lecho vacío queda:

$$\epsilon_f = \epsilon_b + (1 - \epsilon_b)\epsilon_{mf}$$

6.2. Modelo hidrodinámico.

Debido a la compleja hidrodinámica de un lecho y a la cinética de las reacciones, modelizar un gasificador de lecho fluidizado es una ardua tarea. Aunque recientemente se han propuesto varios modelos matemáticos, que básicamente se dividen en los que utilizan el modelo bifásico o el trifásico, es importante destacar que muchos de ellos no incorporan el concepto de flujo neto.

De acuerdo al modelo bifásico, los lechos con fluidización burbujeante tienen dos fases:

- Fase de emulsión:

Se considera que contiene todas las partículas y una fracción del gas que pasa a través de los sólidos permitiendo la fluidización del lecho. Se supone continua y en ésta se producen las reacciones de devolatilización,

combustión y las reacciones heterogéneas y homogéneas. Todo el gas que no se utiliza en la fluidización del lecho pasa a través de éste como burbujas libres de sólidos.

- Fase de burbuja:
Está compuesta únicamente por gases libres de partículas que son transportados a ésta por las leyes de la difusión y de la convección mediante el flujo neto. En ella se dan reacciones homogéneas.

En la siguiente figura podemos observar los distintos mecanismos de transferencia de masa considerados, que son:

- Flujo neto.
- Transferencia de masa por difusión entre las fases de burbuja y de emulsión.
- Transferencia de masa entre las partículas sólidas y los gases de emulsión.

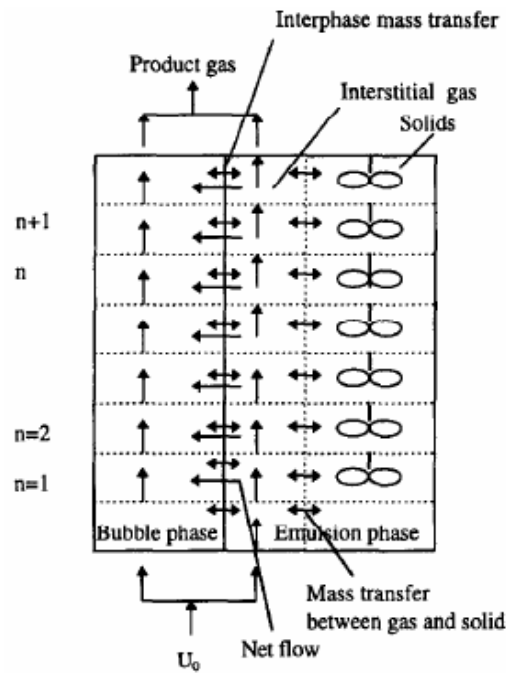


Figura 12. Esquema de los mecanismos de transferencia de masa [1]

Además, cabe señalar que el gas producto del lecho se le denomina gas en exceso y lo hace de acuerdo a la velocidad:

$$u_{ex} = u_0 - u_{mf}$$

6.3. Flujo neto.

Es el flujo producido por las reacciones químicas que se dan en la fase de emulsión y que transporta por convección los productos hasta la fase de burbuja. El

concepto de flujo neto es diferente al de gas en exceso, ya que el gas en exceso es puramente un concepto hidrodinámico relacionado con el flujo total de gas necesario para mantener las condiciones de fluidización en la fase de emulsión, mientras que el flujo neto se refiere a la generación neta de gases en la fase de emulsión por las reacciones químicas.

De acuerdo con lo anterior, se define:

$$\Delta F_E = \frac{C_{E_i}}{\sum_{i=1}^N C_{E_i}} \sum_{i=1}^N \left[(1 - \varepsilon_b) \left(\varepsilon_{mf} \sum_{j=1}^{N_E} \alpha_{ij} r_{Ej} + (1 - \varepsilon_{mf}) \cdot \left[\sum_{j=1}^{N_c} a_s \alpha_{ij} r_{Ecj} + \sum_{j=1}^{N_g} \alpha_{ij} r_{Egj} + \sum_{j=1}^{N_v} \alpha_{ij} r_{Evj} \right] \right) \right]$$

6.4. Comparativa con otros modelos.

A parte del modelo bifásico, existen varios modelos entre los que destacan el modelo trifásico y el modelo que incluye la superficie superior libre del lecho.

El modelo trifásico considera que la fase gaseosa de emulsión se subdivide en dos partes:

- Estela, que está compuesta por partículas y gases y que rodea a la fase de burbuja.
- Nube, con la misma composición que la estela, pero rodeando a ésta.

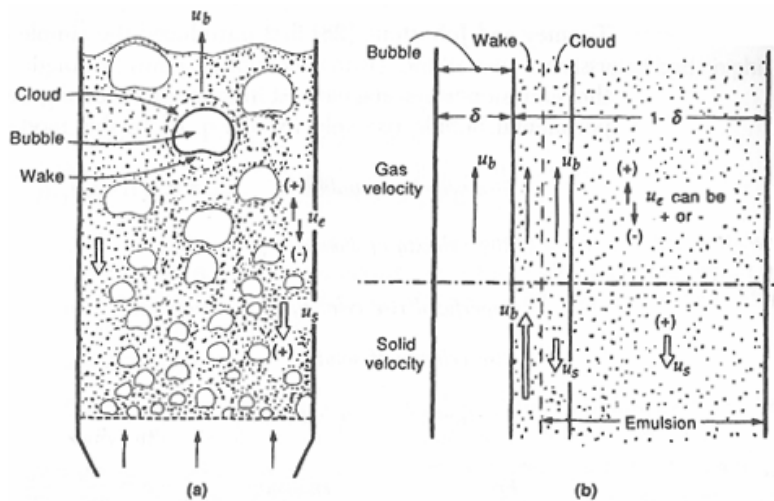


Figura 13. Modelo trifásico [4]

Tal y como se muestra en la figura anterior, aparecen nuevas velocidades asociadas al movimiento de los sólidos en el lecho y a la velocidad del gas de emulsión.

Sin embargo, la aplicación de este modelo más complejo no aporta mejoras significativas sobre el modelo bifásico ya que es más influyente la cinética química sobre el resultado final que la exactitud del modelo hidrodinámico.

Por otro lado, aquellos modelos que incluyen la superficie libre del lecho (freeboard), consiguen reproducir con mayor fidelidad las emisiones de N_2O y NO_x , y el efecto de la postcombustión de los volátiles de carbón. Sin embargo, no será considerada esta zona en este modelo al no influir sobre la temperatura del lecho.

6.5. Ecuaciones de conservación.

Las ecuaciones de conservación reflejan los procesos que tienen lugar en cada fase, y se establecen aplicando los respectivos balances a la figura 14.

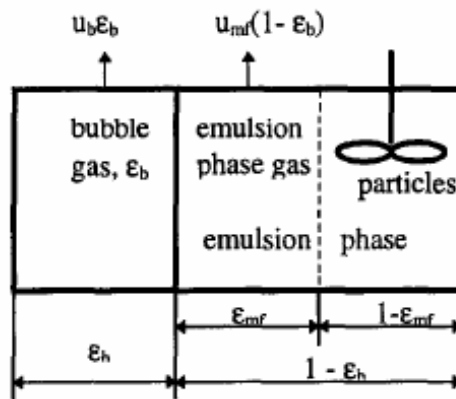


Figura 14. Esquema lecho [1]

6.5.1 Conservación de la masa.

- Fase de burbuja:

Se tiene en cuenta que hay transferencia de masa entre la fase de burbuja y la fase gaseosa de emulsión, que los productos de las reacciones de la fase de emulsión pasan a la de burbuja como se ha comentado anteriormente, y que sólo hay reacciones homogéneas.

$$\frac{df_{Bi}}{dz} = A \left(a_B k_{BEi} (C_{Ei} - C_{Bi}) + \Delta F_{Ei} + \varepsilon_b \sum_{j=1}^{N_B} \alpha_{ij} r_{Bj} \right)$$

- Fase de emulsión:

Respecto al anterior, en este caso se incluyen las reacciones homogéneas y heterogéneas de la fase de emulsión.

$$\frac{df_{Ei}}{dz} = A(a_B k_{BEi} (C_{Bi} - C_{Ei}) - \Delta F_{Ei} + (1 - \varepsilon_b) \times \left(\varepsilon_{mf} \sum_{j=1}^{N_E} \alpha_{ij} r_{Eij} + (1 - \varepsilon_{mf}) \times \left[\sum_{j=1}^{N_S} a_S \alpha_{ij} r_{Ecj} + \sum_{j=1}^{N_g} \alpha_{ij} r_{Egj} + \sum_{j=1}^{N_v} \alpha_{ij} r_{Evj} \right] \right) \right)$$

6.5.2 Balance másico del carbono.

Se realiza un balance másico sobre la fase de partículas en la emulsión considerando:

- Flujo de carbono en la entrada:

$$(f_C)_{IN} = f_{COAL} \cdot C$$

donde C se refiere a la fracción másica de carbono según el análisis químico.

- Flujo de carbono en partículas en la salida:

$$(f_C^S)_{OUT} = (1 - X_C) f_{COAL}$$

- Flujo de carbono contenido en los gases en la salida:

$$(f_C^G)_{OUT} = X_C f_{COAL}$$

- Flujo total de carbono fuera del lecho:

$$(f_C)_{OUT} = (f_C^S)_{OUT} + (f_C^G)_{OUT}$$

Es la suma de los flujos de carbono en la salida.

6.5.3 Conservación de la energía.

- Fase de burbuja:

De acuerdo al esquema de la figura (), se considera la transferencia de energía por convección entre las fases, el calor liberado o cedido de las reacciones, el calor sensible aportado por el flujo neto y el cedido por el flujo de gases en la salida del diferencial.

$$\frac{dT_B}{dz} = \frac{A \left[\varepsilon_b h_{BE} (T_E - T_B) - \varepsilon_b \sum_{j=1}^N \Delta H_{Bj}^0 r_{Bj} + \sum_{i=1}^N \Delta F_{Ei} \overline{Cp}_i (T_E - T_R) \right] - \left[\sum_{i=1}^N \Delta H_i \frac{df_{Bi}}{dz} \right]}{\sum_{i=1}^N f_{Bi} \langle z \rangle \overline{Cp}_i \langle T_B \rangle}$$

Cabe señalar, que la ecuación de la temperatura en la fase de burbuja, según la expresión de [3] era:

$$\frac{dT_B}{dz} = \frac{A \left[\varepsilon_b h_{BE} (T_E - T_B) - \varepsilon_b \sum_{j=1}^N \Delta H_{Bj}^0 r_{Bj} + \sum_{i=1}^N \Delta F_{Ei} \overline{Cp}_i (T_E - T_R) \right] - \left[\sum_{i=1}^N \Delta H_i \frac{df_{Bi}}{dz} \right]}{\sum_{i=1}^N f_{Bi} \langle z \rangle \left(\overline{Cp}_i \langle T_B \rangle + (T_B - T_R) \frac{d\overline{Cp}_i}{dT_B} \right)}$$

Sin embargo, de acuerdo con [6] se ha optado por eliminar el segundo término del denominador ya que refleja la variación del calor específico con la temperatura, lo que es despreciable.

- Fase de emulsión:

$$\frac{dT_B}{dz} = \frac{\text{term1} + \text{term2} + \text{term3} - \text{term4} - \text{term5} - \left[\sum_{i=1}^N \overline{Cp}_i (T_E - T_R) \frac{df_{Ei}}{dz} \right]}{\sum_{i=1}^N f_{Ei} \langle z \rangle Cp_i \langle T_E \rangle}$$

Los distintos términos son:

- Término 1: Transferencia de calor entre las fases de burbuja y de emulsión.

$$A \varepsilon_b h_{BE} (T_B - T_E)$$

- Término 2: Calor entre sólidos y gases.

$$A(1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{mf}) \alpha_s h_p (T_s - T_E)$$

- Término 3: Transferencia de calor por radiación.

$$A(1 - \varepsilon_b)(1 - \varepsilon_{mf}) \alpha_s e_E \sigma (T_s^4 - T_E^4)$$

- Término 4: Calor sensible transportado por el flujo neto.

$$A \Delta F_E \Delta H_E$$

- Término 5: Calor de las reacciones a 298 K.

$$A \varepsilon_{mf} (1 - \varepsilon_b) \sum_{j=1}^n \Delta H_{Ej}^0 r_{Ej}$$

Siendo T_R la temperatura de reacción de los gases en la fase de emulsión (298K).

CAPÍTULO 7

MODELO MATEMÁTICO

7. MODELO MATEMÁTICO.

7.1. Introducción.

Este modelo incluye 18 ecuaciones diferenciales con coeficientes variables y no lineales. Como se comentó anteriormente, los coeficientes de transporte, las propiedades físicas, y las velocidades de reacción se calculan en cada punto del lecho ya que son función de su composición y de la temperatura. Por tanto, se trata de un esquema numérico en el que pequeñas variaciones de cualquier variable tienen un gran efecto en el resto de parámetros.

Entre los métodos más comunes de resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias son:

- Métodos de un sólo paso: Euler, Runge-Kutta.
- Métodos multipaso: Adams-Bashforth-Moulton, Milne-Simpson.

Aquí se utilizará el método multipaso de Adams-Bashforth-Moulton, siguiendo las indicaciones de [10]

7.2. Esquema numérico.

A continuación se describe de forma general el algoritmo de resolución del modelo:

1. Se asumen como constantes los valores iniciales de la temperatura de los sólidos y de la conversión total de carbón a través del lecho, de acuerdo con la hipótesis del modelo de mezcla perfecta de los sólidos en la fase de emulsión.
2. Se considerarán 8 especies de gases: CO, CO₂, CH₄, H₂, H₂O, N₂, H₂S y O₂ en el sistema de reacciones. En cada iteración se resolverá un sistema de 18 ecuaciones diferenciales para calcular el flujo molar de cada especie y las temperaturas de la fase de emulsión y de burbuja. Para ello, se comenzará desde la entrada del lecho, en $z=0$, donde las temperaturas y los flujos molares son conocidos.
3. Las temperaturas y los flujos molares calculados en el paso anterior se tomarán como valores de entrada para el siguiente intervalo y las condiciones se tomarán como uniformes en un punto medio entre los valores de entrada y salida.

4. Los valores calculados incluyen la velocidad mínima de fluidización, la velocidad superficial, el diámetro de burbuja, la velocidad de crecimiento de la burbuja, la fracción volumétrica de burbujas, el flujo neto, el flujo en exceso, los coeficientes de transferencia de calor y de masa, y las velocidades de las reacciones en la fase de emulsión y de burbuja. Con estos valores, se resuelven los balances másicos y energéticos para obtener los nuevos valores del flujo y de la temperatura a la salida del volumen de control.
5. La condición de convergencia en el volumen de control será que la diferencia de cada una de las 18 variables con su valor anterior sea menor que el 0.5%. Si esto no se cumple, se generará una nueva estimación a través del método Predictor-Corrector.
6. La fracción de conversión del carbón se calcula a partir del flujo de carbón en la alimentación y del flujo de carbón a la salida, tanto en forma gaseosa como en partículas. Este resultado es comparado con la estimación anterior, y si resulta una diferencia mayor que el 0.5%, se calcula una nueva estimación de X_c mediante el método SOR y se realimentan los pasos del 1 al 5 hasta alcanzar la convergencia.

7.3. Método predictor-corrector.

El método de predicción y corrección de Adams-Bashforth-Moulton es un método multipaso que se genera a partir del teorema fundamental del cálculo:

$$y(t_{k+1}) = y(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(t, y(t)) dt$$

Para calcular el valor predictor se utiliza el polinomio de interpolación de Lagrange de $f(t, y(t))$ que pasa por los puntos (t_{k-3}, f_{k-3}) , (t_{k-2}, f_{k-2}) , (t_{k-1}, f_{k-1}) y (t_k, f_k) . Integrando este polinomio en el intervalo $[t_k, f_{k+1}]$ y sustituyendo el resultado en la expresión anterior, obtenemos lo que se conoce como valor predictor de Adams-Bashforth:

$$p_{k+1} = y_k + \frac{h}{24} (-9f_{k-3} + 37f_{k-2} - 59f_{k-1} + 55f_k)$$

El valor corrector se calcula de manera parecida, sólo que ahora usamos el valor predictor que acabamos de calcular. Se construye un segundo polinomio interpolador de Lagrange y se obtiene:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24} (f_{k-2} - 5f_{k-1} + 19f_k + 9f_{k+1})$$

Los términos del error de las fórmulas de integración numérica que se usan para obtener los valores predictor y corrector son de orden $O(h^5)$. Los errores de truncamiento local de las fórmulas de los valores predictor y corrector son:

$$y(t_{k+1}) - p_{k+1} = \frac{251}{720} y^{(5)}(c_{k+1}) h^5 \text{ (para el valor predictor)}$$

$$y(t_{k+1}) - y_{k+1} = \frac{-19}{720} y^{(5)}(d_{k+1}) h^5 \text{ (para el valor corrector)}$$

Si se supone que h es pequeño y que $y^{(5)}$ es prácticamente constante en el intervalo, entonces se pueden eliminar los términos de las fórmulas anteriores que contienen la derivada quinta para obtener:

$$y(t_{k+1}) - y_{k+1} \approx \frac{-19}{720} (y_{k+1} - p_{k+1})$$

De ahí se obtiene la razón de la importancia de este método, y es que proporciona una estimación aproximada del error basándose en los dos valores calculados p_{k+1} e y_{k+1} , y que no requiere conocer la derivada quinta.

El inconveniente de este método es que necesita 4 puntos iniciales de los que comenzar el cálculo. Éstos se han obtenido mediante la discretización de las ecuaciones diferenciales con diferencias finitas progresivas.

Cabe señalar, que debido a la interdependencia de todos los parámetros con las variables del flujo molar y de la temperatura, resueltas por ecuaciones diferenciales, en la aplicación del método numérico es necesario sustituir el valor predictor en las variables que dependían de éste; tal es el caso del coeficiente de transporte de masa entre la burbuja y la emulsión, la velocidad de la burbuja o su diámetro, entre otras variables.

7.4. Método SOR.

El método SOR (Sucessive Over Relaxation) es una variante del método Gauss-Seidel para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales que consigue una convergencia más rápida. También se suele utilizar en procesos iterativos de convergencia, como el caso que nos ocupa.

Respecto a la formulación para un proceso iterativo del tipo:

$$x_{n+1} = f(x_n)$$

El nuevo valor para reiniciar el cálculo queda como:

$$x_{n+1}^{SOR} = (1 - \omega)x_n^{SOR} + \omega f(x_{n+1}^{SOR})$$

En donde ω es el factor de relajación, que suele tomarse con valores $\omega > 1$ en procesos de convergencia lenta. Para la convergencia de este modelo se utilizará $\omega \approx 0.4$.

CAPÍTULO 8

PROGRAMACIÓN

8. PROGRAMACIÓN.

8.1. Introducción.

El programa ha sido implementado en MatLab, versión 7.6.0.324 (R2008a) siguiendo la estructura del esquema matemático explicado en el capítulo anterior. Se ha intentado utilizar matrices para la mayor parte de las variables y operaciones con el fin de obtener un menor tiempo de cálculo. Por otro lado, debido a los grandes diferenciales de masa y temperatura que se producen en las cercanías del distribuidor se ha escogido un tamaño de paso fijo igual a:

Número de nodos	150000
Altura del lecho	3.5 m
Tamaño del paso	$2.33 \cdot 10^{-5} m$

Tabla 7. Características discretización

8.2. Variables principales.

Al igual que otros modelos, se tienen los siguientes parámetros ajustables:

- I. El coeficiente de la reacción de combustión ϕ , que define el grado de combustión parcial del carbón. Este parámetro se puede estimar de acuerdo con correlaciones experimentales, tal y como se señala en [2]. Sin embargo, en este estudio se tomará un valor fijo de $\phi = 0.8$.
- II. El parámetro de reactividad a la gasificación del carbón, $f_0 = 10$. Que está definido en el modelo de gasificación de Johnson, citado anteriormente.
- III. Temperatura de los sólidos, al considerarse la hipótesis de mezcla perfecta se considera constante en todo el lecho. Su valor será impuesto según el caso de estudio.

8.3. Estructura del programa.

El programa está compuesto por un bucle que controla el factor de conversión del carbón.

En la siguiente figura se puede apreciar el esquema del proceso de cálculo:

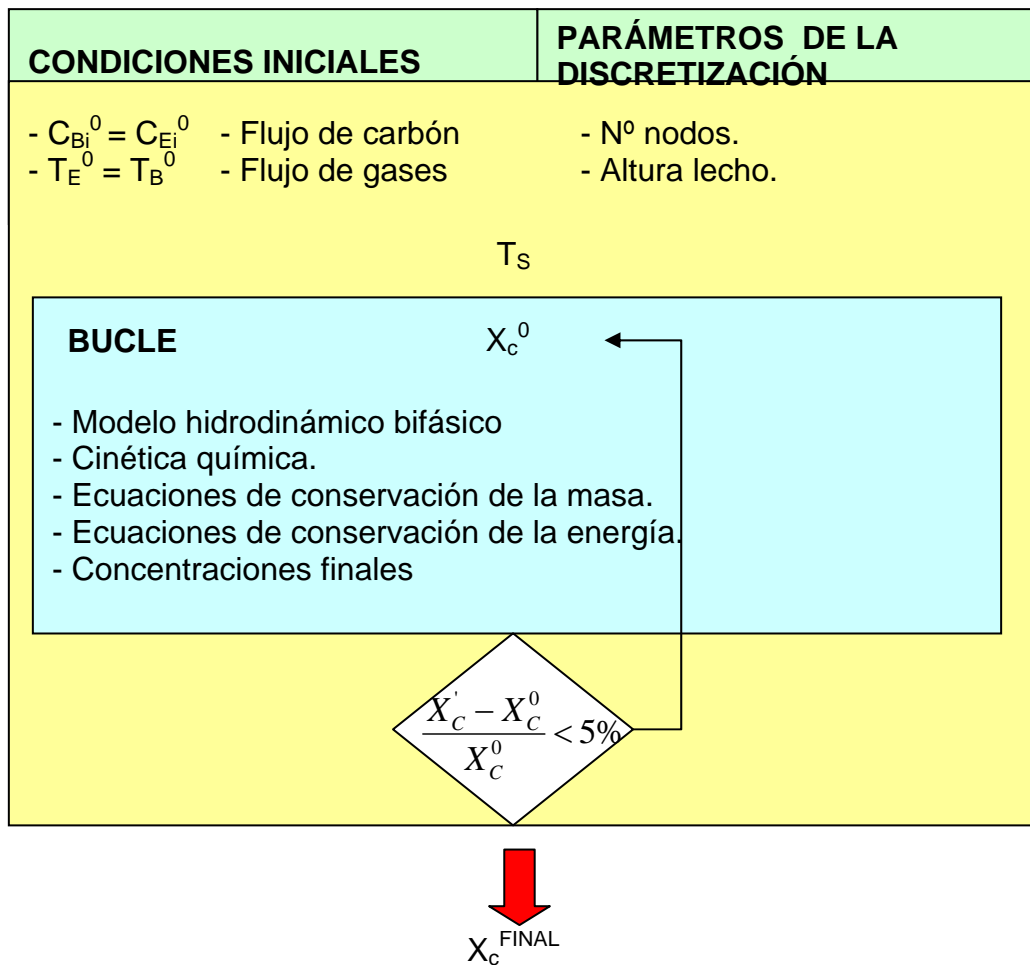


Figura 14. Esquema del programa.

Es decir, para cada temperatura de los sólidos, inicialmente se supondrá una fracción de conversión del carbón, y si la diferencia con la fracción obtenida al final del lecho es superior al 5%, se estimará un nuevo valor repitiendo todos los cálculos anteriores.

CAPÍTULO 9

ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

9. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS.

9.1. Introducción.

En este capítulo se estudiará el comportamiento de la gasificación de dos tipos de carbón, que serán los utilizados en [1] con el fin de contrastar la información. Además, se conocen los datos experimentales del gasificador Winkler [1] y [3].

Luego, en primer lugar se estudiará el comportamiento del modelo en relación con los datos experimentales, que siempre son más fiables; y seguidamente se comparará este modelo con el de [1], que como se ha señalado, tiene distintas cinéticas de reacción.

9.2. Datos iniciales.

Los casos simulados tratan de emular las condiciones del gasificador Winkler, y son:

- Caso 1, según los datos de entrada del [1].NF1
- Caso 2, con los datos propuestos del [1].NF2

Cada caso se subdivide en otros tres para estudiar el comportamiento del lecho frente a distintas temperaturas de los sólidos. Es decir:

		Temperatura de los sólidos (K)
Caso 1	Caso 1.1	1000
	Caso 1.2	1250
	Caso 1.3	1400
Caso 2	Caso 2.1	1000
	Caso 2.2	1250
	Caso 2.3	1400

Tabla 8. Características ejemplos de simulación

Los parámetros operativos referentes a las condiciones iniciales del lecho en cada modelo propuesto son:

	Unidades	Winkler	Caso 1	Caso 2
Flujo carbón inicial	<i>kg / s</i>	5-15	12.0	11.11
Flujo de oxígeno	<i>mol / s</i>	—	121	120.2
Flujo de vapor	<i>mol / s</i>	—	253	219
Flujo de nitrógeno	<i>mol / s</i>	—	4.1	4.0
Gas total	<i>mol / s</i>	—	409	383.32
Relación vapor/oxígeno	—	1-3.7	2.09	1.83
Presión	atm	1.0	1.0	1.0
Temperatura de entrada del gas	K	400-700	500	500
Proximate analysis (ar)	% en peso			
Carbono fijo		55.49	55.49	52.00
Partículas volátiles		35.27	35.27	32.00
Humedad		4.67	4.67	6.50
Cenizas		4.67	4.67	9.50
Ultimate analysis (daf)	% en peso			
C		64.70	64.70	72.50
H		4.90	4.90	4.76
O		24.00	24.00	10.60
N		0.50	0.50	1.62
S		1.00	1.00	0.36
Ash		4.90	4.90	10.16

Tabla 9. Propiedades

Otras condiciones del gasificador en lecho fluidizado Winkler, y que serán compartidas por el resto de casos son:

	Unidades	Valores
Diámetro de las partículas de carbón (d_p)	m	$1.25 \cdot 10^{-3}$
Fracción del lecho con partículas al comienzo de la fluidización (ε_{mf})	—	0.4
Densidad del carbón	<i>kg / m³</i>	836
Densidad de las cenizas	<i>kg / m³</i>	2500

Diámetro del gasificador (D_t)	m	3.90
Número de agujeros del distribuidor	—	3000

Tabla 10. Otras características

9.3. Caso 1.

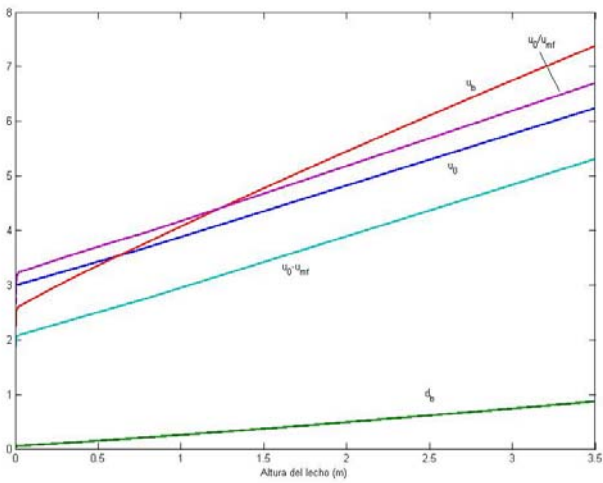
En primer lugar se analizarán los resultados obtenidos comparándolos con los de la referencia [1] de Yan et al. para después estudiar la dependencia con la temperatura de las variables.

9.3.1 Análisis hidrodinámico.

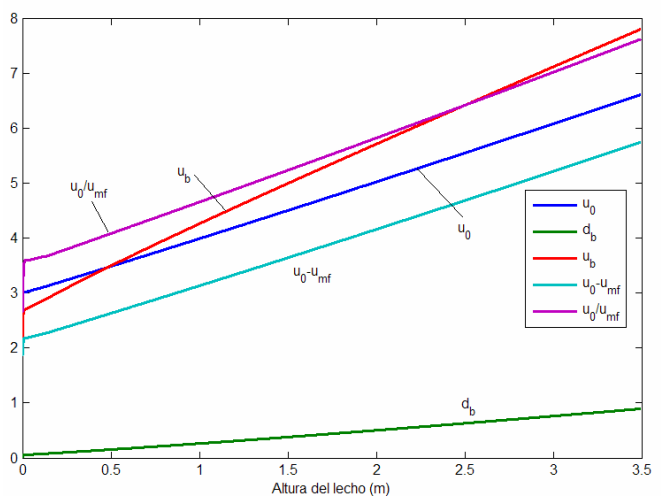
Tal y como se señaló en la teoría, los parámetros que describen el comportamiento hidrodinámico están sujetos a una serie de restricciones:

- $u_0 < u_{mf}$
- $d_b < 0.6D_t$

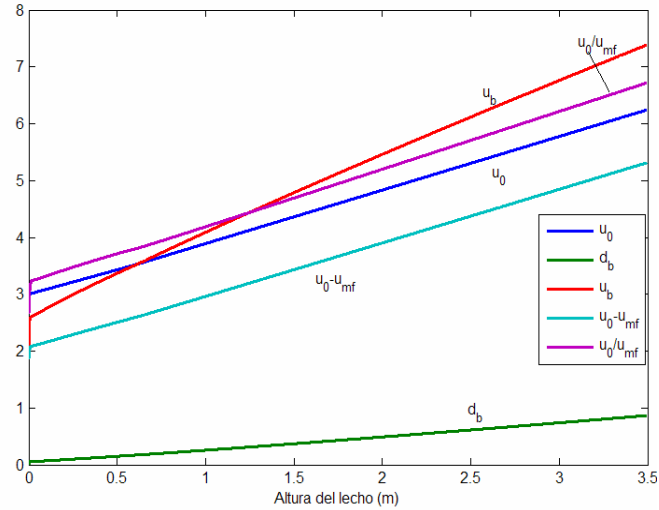
Para las distintas temperaturas se tiene:



(a) $T_s = 1000K$



(b) $T_s = 1250K$



(c) $T_s = 1400K$

Figura 15. Parámetros fluidodinámicos del lecho según la temperatura

Tal y como puede comprobarse, la temperatura no afecta a los parámetros hidrodinámicos del lecho. Además, se observa que se cumplen las condiciones de fluidización en lecho burbujeante ya que el estado fluidodinámico, definido por la relación u_0/u_{mf} , es menor que 10. Asimismo, no se dan ‘slugs’ por cumplirse que $d_b < 0.6D_t$.

Respecto al resto de parámetros, cumplen con la teoría y es que aumenten las velocidades de burbuja, la superficial y la del gas en exceso conforme aumenta la altura del lecho. El diámetro de la burbuja aumenta por coalescencia y por efecto del flujo neto.

9.3.2 Flujo neto.

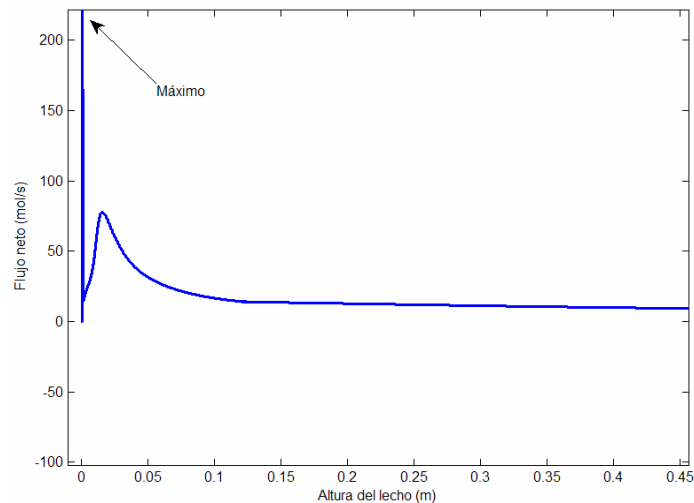


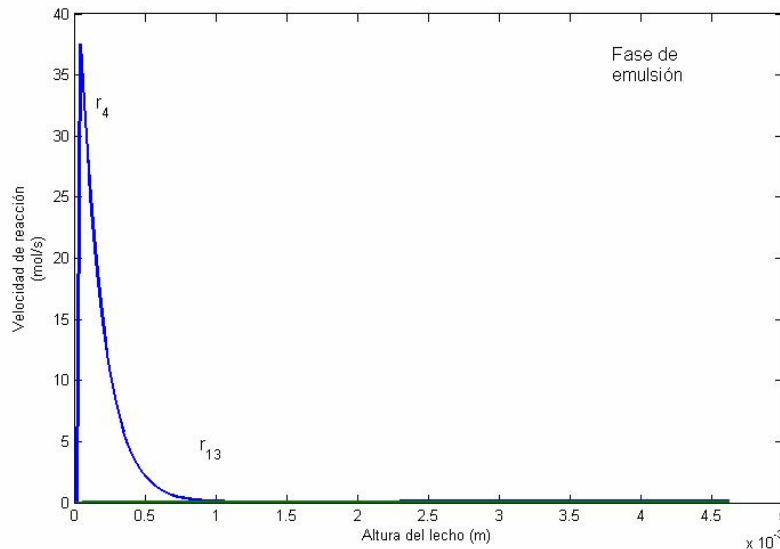
Figura 16. Flujo neto para $T_s=1250K$

El flujo neto es similar al propuesto en [1] y tiene un máximo en las cercanías del distribuidor porque es donde se producen las reacciones de combustión.

9.3.3 Análisis del modelo cinético.

Las gráficas de la referencia [1] están tomadas para una temperatura de los sólidos de 1250K y unos datos de entrada iguales a los del Caso 1, que es con el que se comparará.

- Reacciones de combustión:

Figura 17. Comparación combustión carbón vs hidrógeno ($T_s=1250K$)

La reacción de combustión es muy rápida al depender solamente del mecanismo de difusión, mientras que la del hidrógeno, como tiene en cuenta el equilibrio químico, es decir, depende de las concentraciones tanto de hidrógeno como de combustible, es más lenta porque el hidrógeno no está presente en el comienzo del lecho, sino que aparece tras la devolatilización y la gasificación del carbón. A mayor altura, la combustión del carbón se anula debido a que se agota rápidamente el oxígeno de la fase de emulsión y el que llega mediante la transferencia de masa entre la burbuja y la emulsión, es prácticamente insignificante..

Comparando la gráfica con la referencia [1], mostrada en la siguiente figura, se puede ver que la combustión del carbón es más lenta en el artículo. Como se verá más adelante, esto es debido a que la devolatilización no se considera totalmente instantánea.

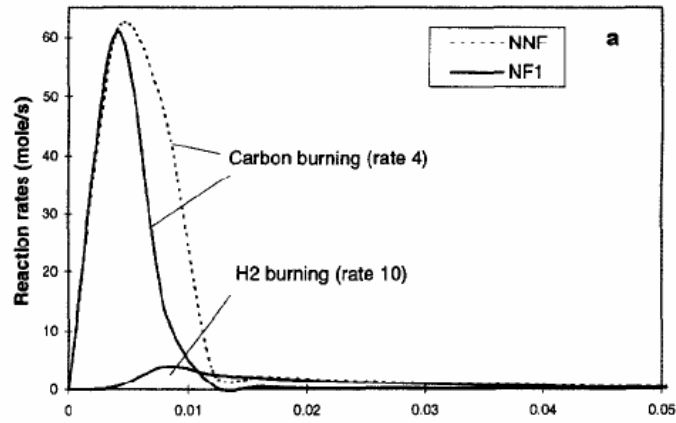


Figura 18. Comparación combustión carbón vs hidrógeno [1]

- Reacciones homogéneas:

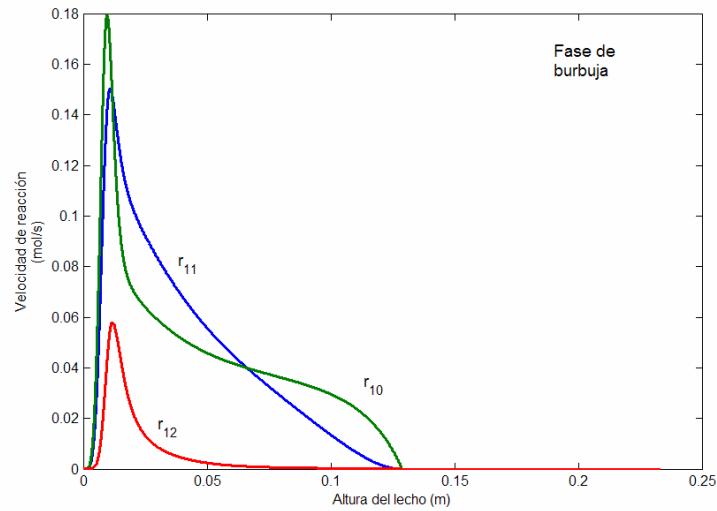


Figura 19. Velocidades de reacción homogéneas, burbuja.

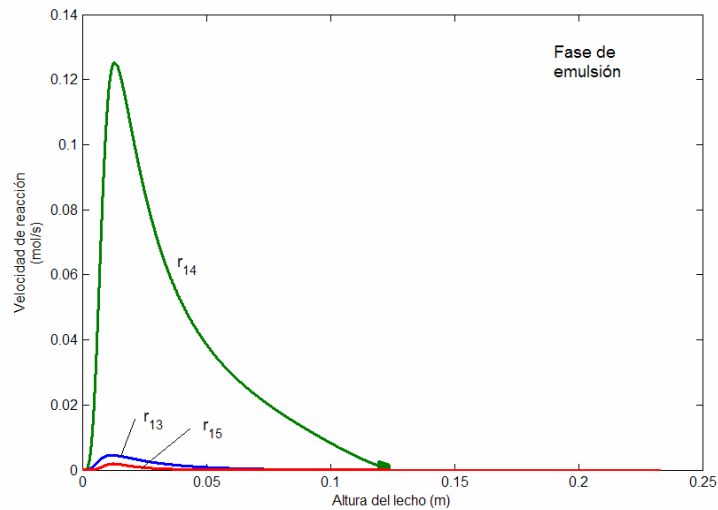


Figura 20. Velocidades de reacción homogéneas, emulsión.

En este caso, las velocidades de reacción de la fase de burbuja son mayores debido a la mayor cantidad de oxígeno. Por otra parte, se confirma lo establecido en la teoría, en donde se comentaba que en muchos modelos ni se incluía la combustión del metano por ser muy lenta.

Comparándolo con [1], no se cumple una condición impuesta por Yan et al. que se refería a que la velocidad de combustión del hidrógeno era entorno a 2.86 veces mayor que la oxidación del monóxido de carbono, tal y como puede apreciarse en la siguiente gráfica:

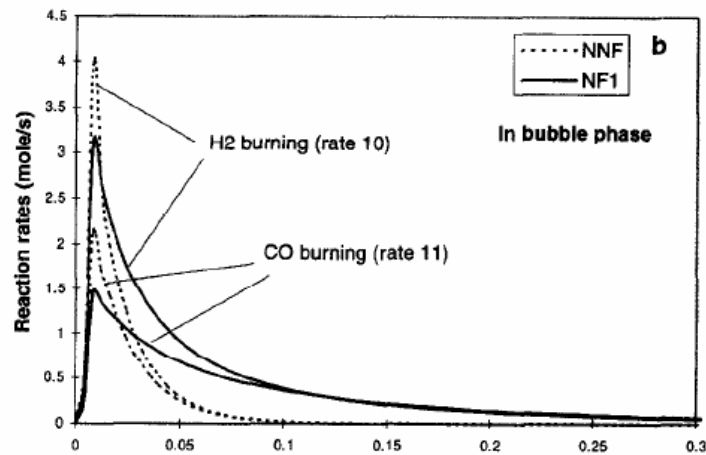


Figura 21. Reacciones homogéneas en la fase de burbuja [1]

Esta diferencia entre los resultados obtenidos y los de Yan et al. se debe a que se cambiaron la cinéticas de las reacciones debido a los numerosos errores presentes en [1].

- Reacciones de gasificación y WGSR:

De acuerdo con la siguiente figura, inicialmente estas reacciones crecen rápidamente, alcanzando un máximo, y disminuyendo con la altura del lecho debido a que las reacciones en la fase de burbuja tienden al equilibrio.

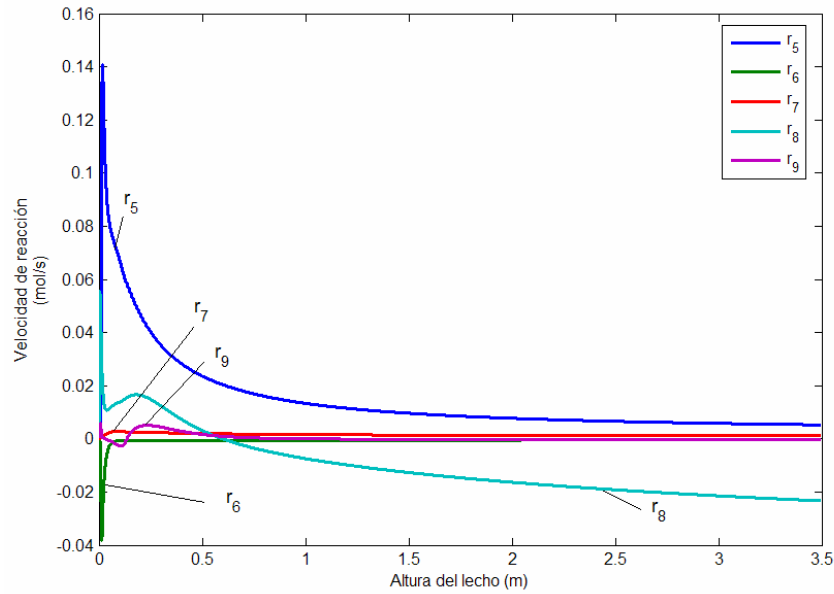


Figura 22. Velocidades de gasificación y WGSR.

Es decir, la reacción WGSR en la fase de burbuja (r_9) tiende a disminuir con la altura, lo que indica que se ha alcanzado el equilibrio en la superficie del lecho. Por otro lado, la reacción 6 tiende a ser negativa, lo que equivaldría a generar hidrógeno y carbono a partir del metano. Sin embargo, a lo que se refiere es a establecer el equilibrio global entre las reacciones del modelo de Johnson explicado anteriormente.

Por contra, la reacción WGSR en la fase de emulsión (r_8) no disminuye como cabría esperar y como sucede en [1]:

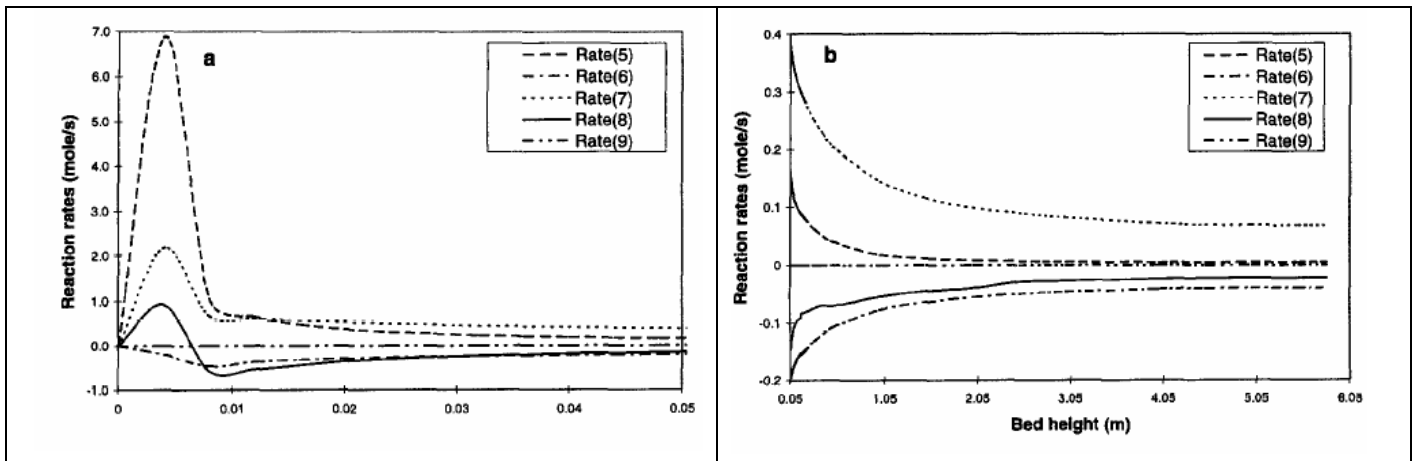


Figura 23. Velocidades de gasificación y WGSR [1]

De nuevo surge el problema de las expresiones incompletas en la referencia [1] con la complicación de que, la velocidad de reacción del artículo tiene en cuenta los efectos catalíticos de las cenizas, y por tanto, es un estudio muy específico y restringido

que no se ha podido obtener. Para sustituirla se optó por aplicar la expresión general de WGSR a la fase de emulsión, lo que producirá nuevas diferencias.

9.3.4 Análisis de la composición de gases.

Para la fase de emulsión, en línea continua, para la de burbuja, en línea quebrada, se obtienen las siguientes fracciones molares:

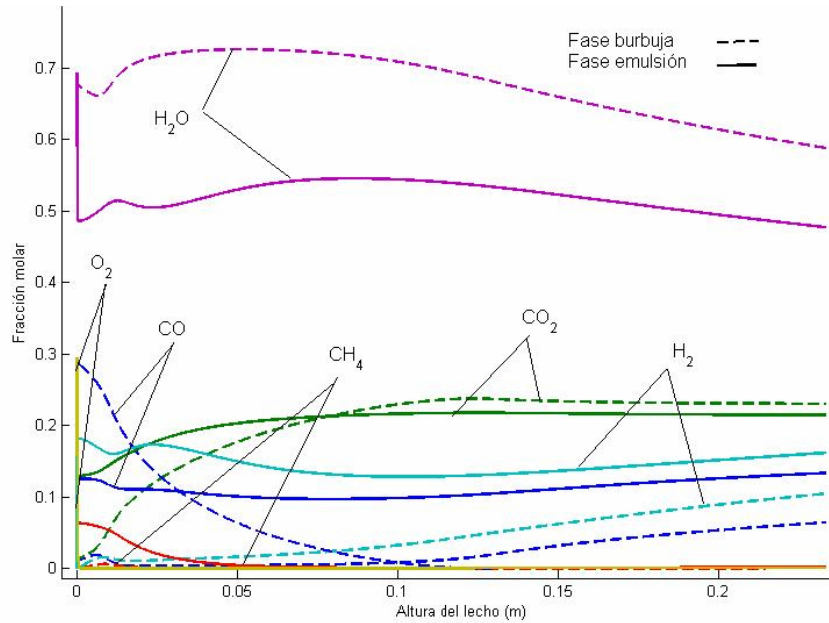


Figura 24. Fracciones molares cerca del distribuidor

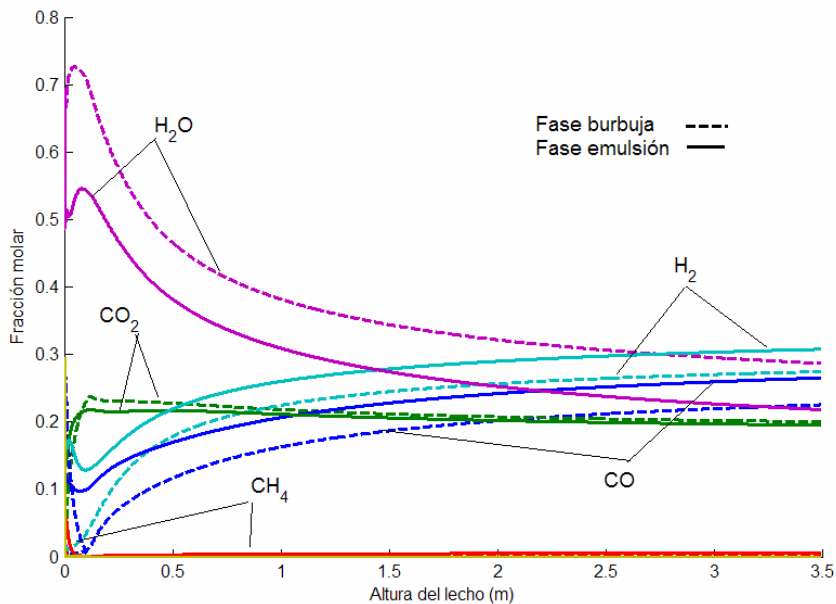


Figura 25. Fracciones molares

Comparándolo con [1] se encontrarán los efectos de los cambios en las velocidades de reacción:

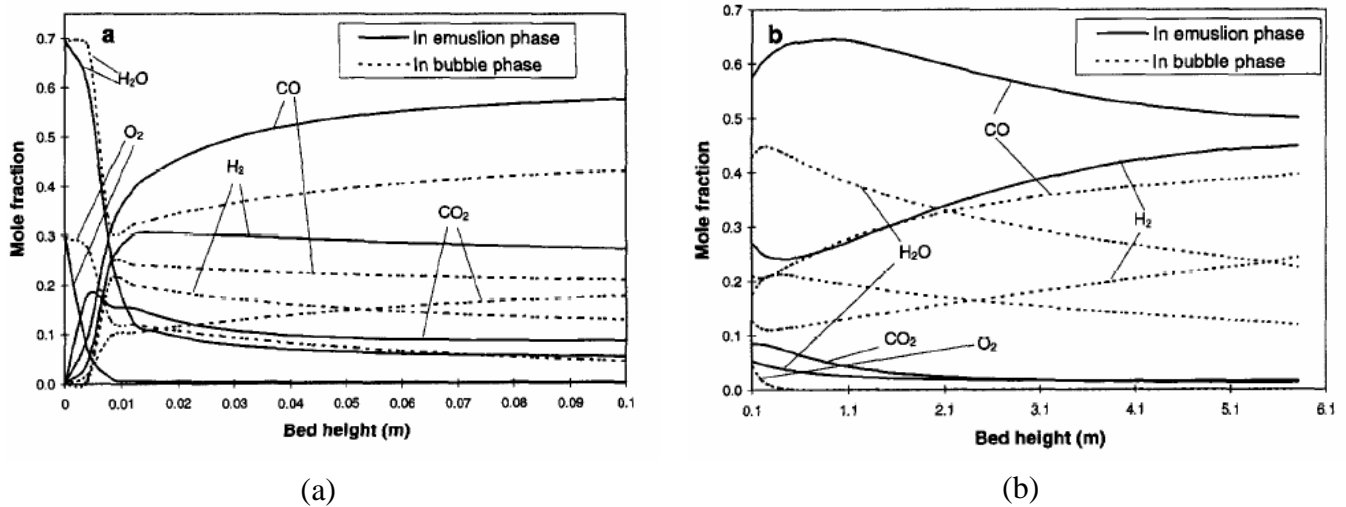


Figura 26. Fracciones molares [1]

Comparando con la simulación, la fracción molar de los gases en la burbuja es similar pero la principal diferencia con la simulación del Caso 1.1, se refiere a la alta concentración de CO que se alcanza rápidamente. Esto es debido a:

- La mayor velocidad de combustión del CO, lo elimina generando CO₂ en abundancia. Esto tiene especial efecto en la fase de emulsión ya que la diferencia entre las velocidades de combustión del CO de la simulación y de [1] es mucho mayor que en la fase de burbuja.
- Esta alta velocidad de combustión del CO, produce una alta concentración de CO₂ que afecta a r₈, ya que, según la expresión de su velocidad de reacción:

$$r_{WGSR} = 2.78 \cdot 10^3 e^{(-12.6/RT)} (C_{CO} C_{H_2O} - C_{CO_2} C_{H_2} / K)$$

Por lo que se hace negativa y trata de contrarrestar la presencia de dióxido de carbono produciendo agua y monóxido, aumentando ligeramente éste último.

- La velocidad de gasificación r₅ utiliza este vapor de agua generado en exceso para producir más hidrógeno y monóxido.

En resumen, el alto contenido en CO₂ influye en el resto de reacciones que tienden a consumirlo (r₈).

Además, cabe señalar que en [1] no se cumple la hipótesis de devolatilización instantánea, ya que no se produce salto en las fracciones molares, sino que es un cambio progresivo de las mismas.

Respecto a la fracción de oxígeno presente:

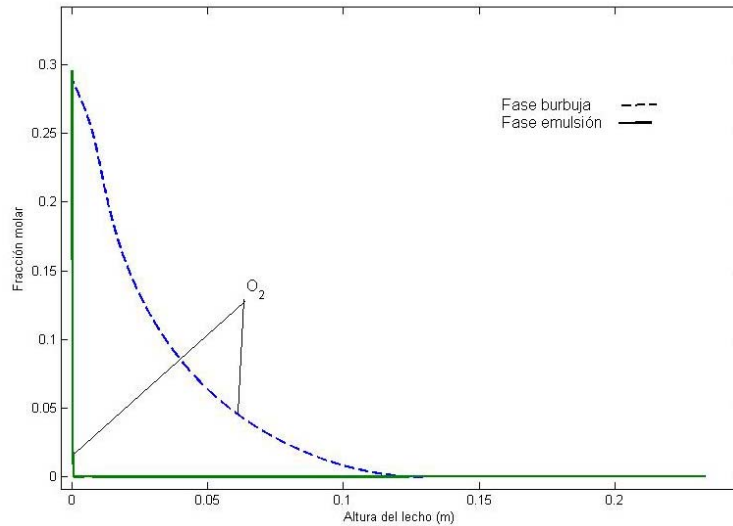
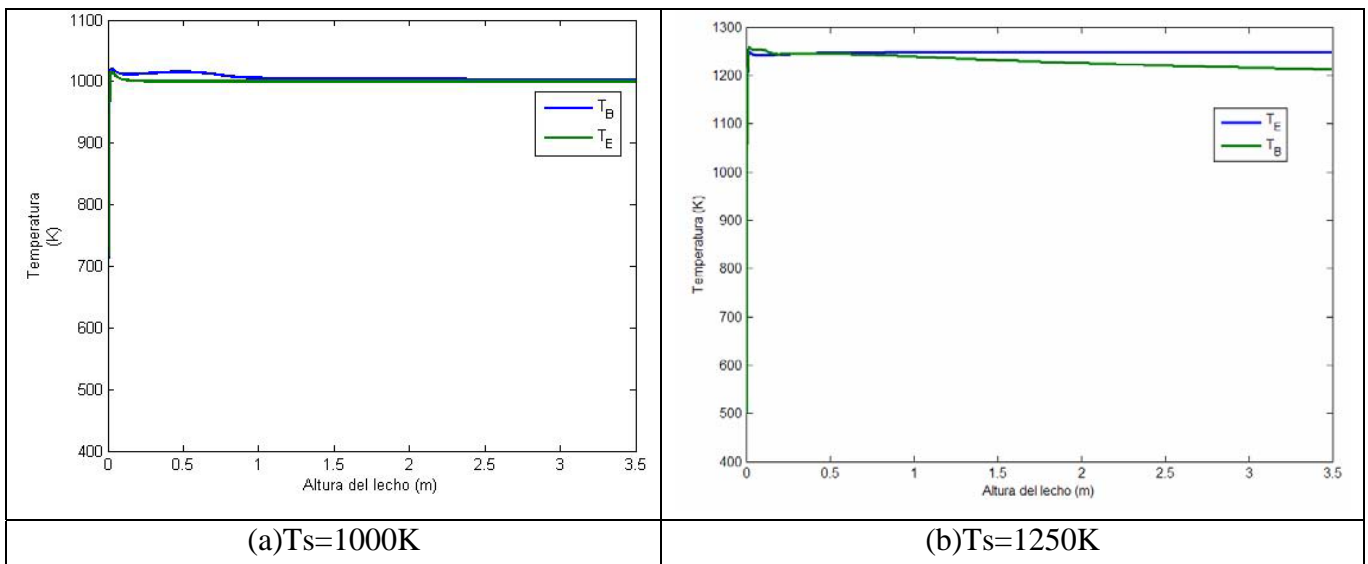


Figura 27. Fracciones molar oxígeno

Como se ha comentado, la combustión del carbón es muy rápida mientras hay oxígeno en la emulsión, y luego se mantiene con el que le llega desde la fase de burbuja.

9.3.5 Temperatura de los gases.

En función de la temperatura de los sólidos, se tiene:



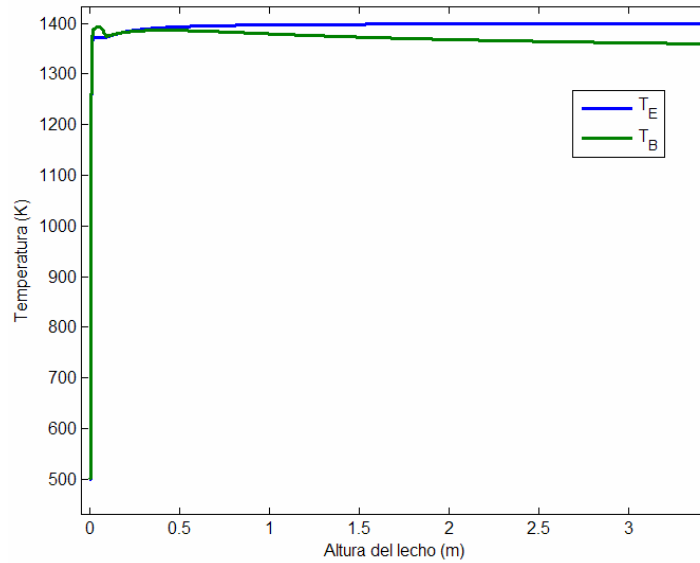
(c) $T_s=1400K$

Figura 28. Temperatura de los gases

En los tres casos se puede apreciar la disminución paulatina de la temperatura de los gases de la burbuja ya que, al no haber reacciones dentro de ésta, y ser el flujo neto muy bajo, se pierde calor transportado por el flujo a la salida.

El ligero aumento que se produce en la temperatura de los gases representa el lugar en el que las velocidades de las reacciones de combustión son máximas, lo que implica que se puedan expulsar bolsas de calor en la superficie del lecho, lo que se corresponde con los datos experimentales de [3]. Tras esta región, la combustión en la fase de burbuja decae al igual que la concentración de oxígeno, como se ha comentado.

9.3.6 Efecto la temperatura de los sólidos.

- Sobre las reacciones homogéneas:

En este caso, el aumento de la temperatura genera un aumento en las velocidades de reacción:

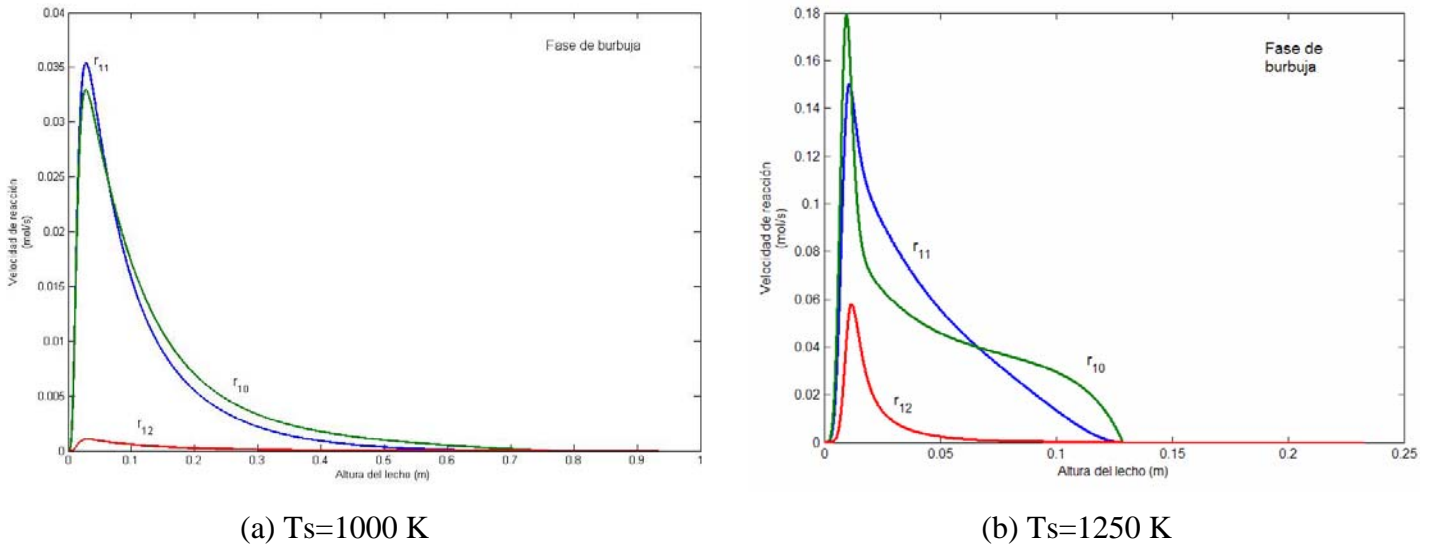


Figura 29. Velocidades de reacción homogéneas

Aumentan las velocidades con la temperatura, como indica la teoría.

- Sobre las de gasificación y WGSR:

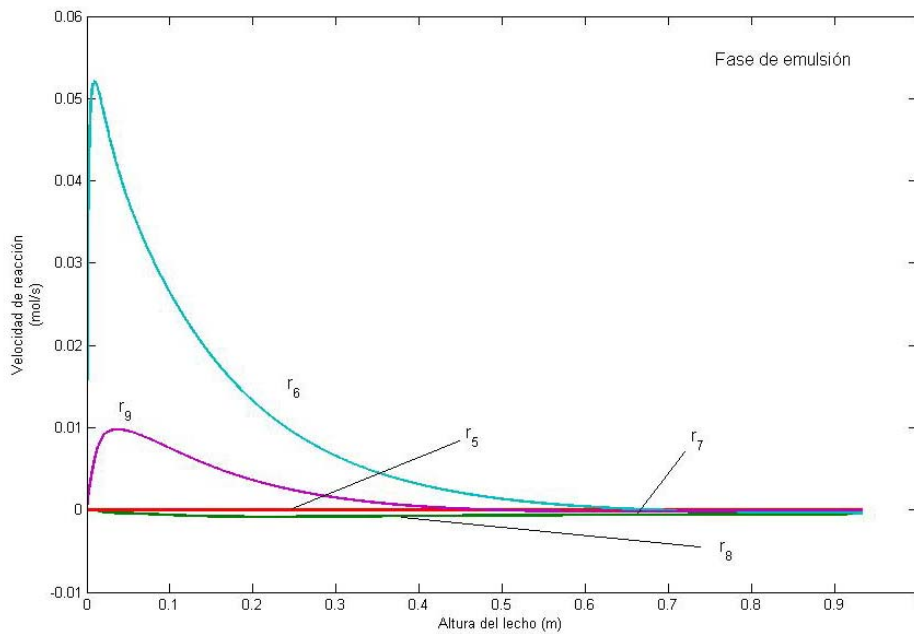


Figura 30. Velocidades de reacción de gasificación y WGSR ($T_s=1000\text{K}$)

A una temperatura de los sólidos baja, la gasificación apenas se produce, al igual que WGSR que tiende rápidamente a cero.

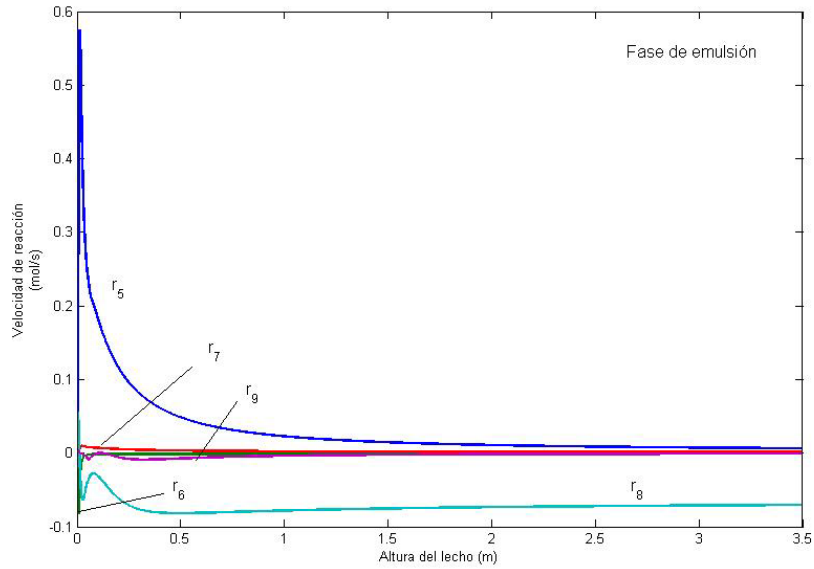


Figura 31. Velocidades de reacción de gasificación y WGSR ($T_s=1400K$)

El aumento de la temperatura hace aumentar la gasificación y la reacción WGSR en la fase de emulsión, pero no así en la de burbuja, que permanece constante e igual a cero. Es decir, incrementa las velocidades de reacción según su tendencia anterior; si se comportan como r_9 tienden a cero más rápidamente mientras que si tienden a -0.1, como r_8 , lo hacen a mayor velocidad.

- Sobre las composiciones:

En este caso, el efecto sumado sobre las distintas reacciones sí que deja ver su efecto sobre la composición. Tomando en primer lugar la correspondiente a $T_s=1000K$:

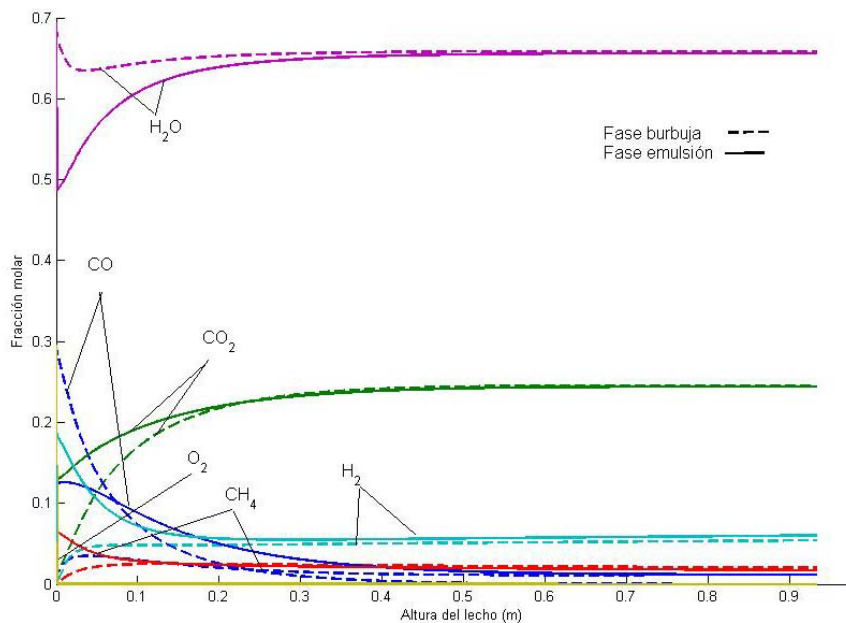


Figura 32. Fracción molar ($T_s=1000K$)

Se aprecia que no se produce la gasificación, con lo que el nivel de agua no disminuye y no se forma el hidrógeno o el monóxido de carbono propios de los gases a la salida del lecho.

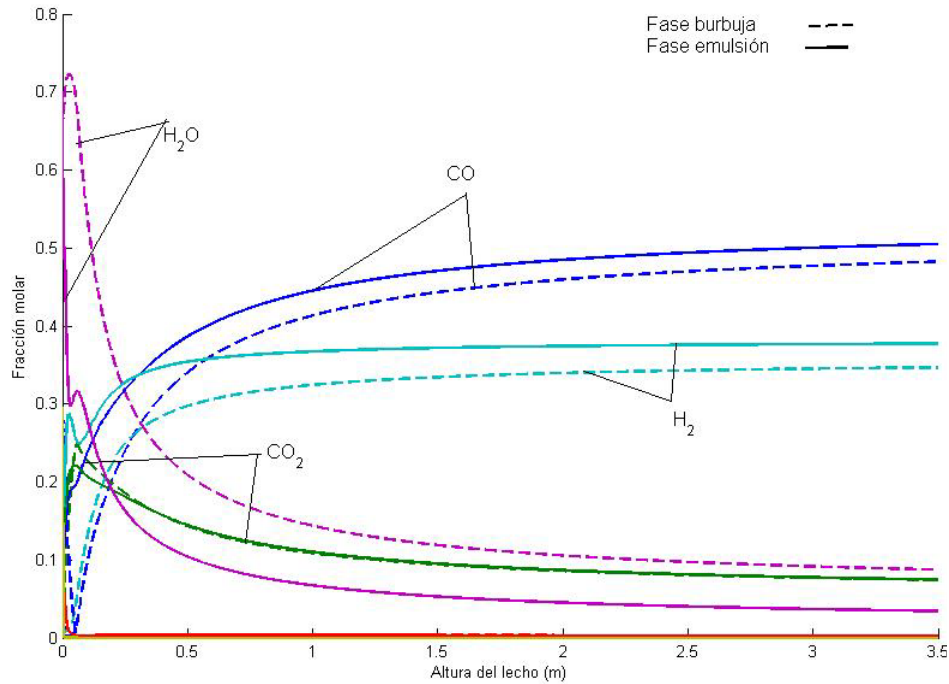


Figura 33. Fracción molar ($T_s=1400K$)

En este caso sí que se produce la combustión, de hecho se aproxima mejor a los perfiles de composición de [1].

9.3.7 Análisis del gasificador.

En este apartado se especifican los datos más relevantes del gasificador, comparándolos con las mediciones del modelo experimental Winkler [1]:

	Unidades	Winkler	Caso 1.1	Caso 1.2	Caso 1.3
Temperatura de los sólidos	K	1090-1220	1000	1250	1400
Temperatura de burbuja	K	—	500-1014 - 1000	500-1277- 1212	500-1391- 1359
Temperatura de emulsión	K	—	500-1020 - 1000	500-1275- 1248	500-1371- 1400

Fracción de conversión total del carbón	% en peso	57-88	22.94	37.98	65.00
Por la combustión del carbón		—	13.49	11.56	13.04
Por la volatilización		—	6.15	6.15	6.15
Por la gasificación		—	1.10	23.16	45.81
Estado fluidodinámico u_0 / u_{mf}		7-12	3.1-6	3.5-7.5	3-6.5
Composición del gas (húmedo)	% en volumen				
CO		35.2-37.5	8.81	34.97	55.63
CO_2		20.0-21.8	59.33	21.72	4.33
H_2		38.5-39.5	24.18	40.45	38.24
CH_4		1.5-1.8	5.14	2.02	1.24
N_2		1.1	1.9	0.63	0.42
H_2S		1.5	0.65	0.21	0.14
O_2		—	0	0	0
Flujo total de gases en la salida fase burbuja	mol/s	—	648.10	1104.1	1497.6
Flujo total de gases en la salida fase emulsión	mol/s	—	604.44	701.03	862.05
Flujo total de gases en la salida	mol/s	—	1252.5	1805.1	2359.7
Balance carbono					
Flujo carbono entrada	kg/s		7.7640	7.7640	7.7640
Flujo carbono salida en los gases			1.880	2.9490	4.7686
Flujo carbono salida en los sólidos			5.8840	4.8150	2.9954
Error relativo	%		$-8.579 \cdot 10^{-15}$	$-5.719 \cdot 10^{-14}$	$-1.1 \cdot 10^{-14}$

Tabla 16. Análisis del gasificador

La composición del gas en la salida en el caso 1.1 es tan baja porque un 57.47% es vapor de agua, ya que no se producen las reacciones de gasificación, como se ha comentado.

En general, el modelo responde bien a los datos experimentales Winkler. Salvo en el caso con la temperatura de 1000K, que no se alcanzan las composiciones mínimas en los productos, el resto de casos sí que tiene cumple con las condiciones.

Cabe señalar los bajos valores que se obtienen de la fracción de conversión del carbón, lo que es debido a las velocidades de reacción citadas anteriormente, que impiden desarrollar la gasificación por completo.

9.4. Caso 2.

Se efectúa el mismo análisis que en el anterior apartado, obviándose algunas gráficas porque el objetivo es la caracterización de la cinética del carbón utilizado que tiene un menor contenido en volátiles y una mayor cantidad de carbono.

9.4.1 Análisis hidrodinámico.

La composición del carbón no tiene demasiada influencia sobre los parámetros hidrodinámicos en el lecho, al igual que la temperatura tampoco la tiene. Sin embargo, para que sirva como comprobación:

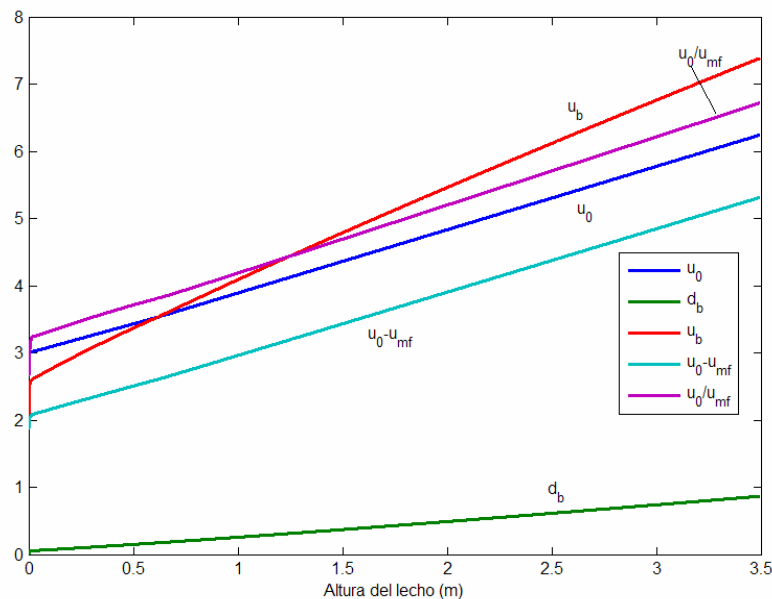


Figura 34. Parámetros fluidodinámicos del lecho para $T_s=1250K$

Se cumplen las hipótesis del estado de fluidización y del tamaño de las burbujas.

9.4.2 Flujo neto.

En la siguiente figura se muestra la influencia del tipo de carbón sobre el flujo neto:

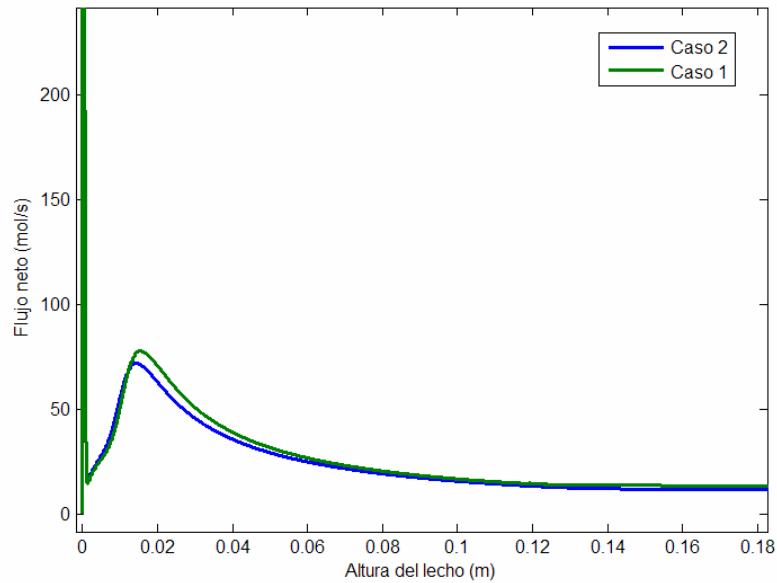
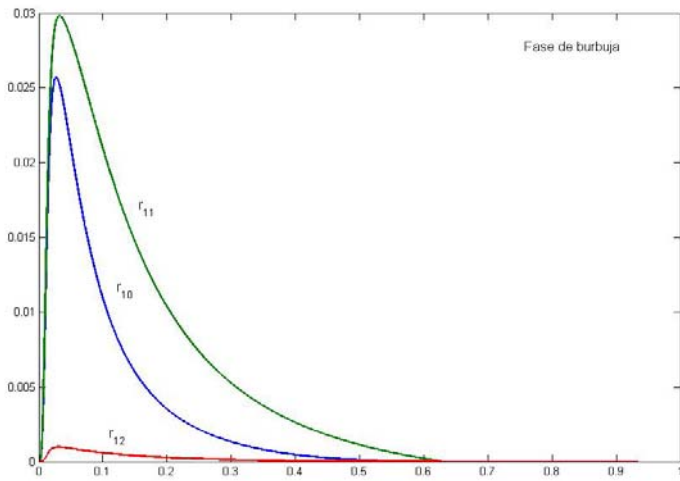


Figura 35. Flujo neto con $T_s=1250K$

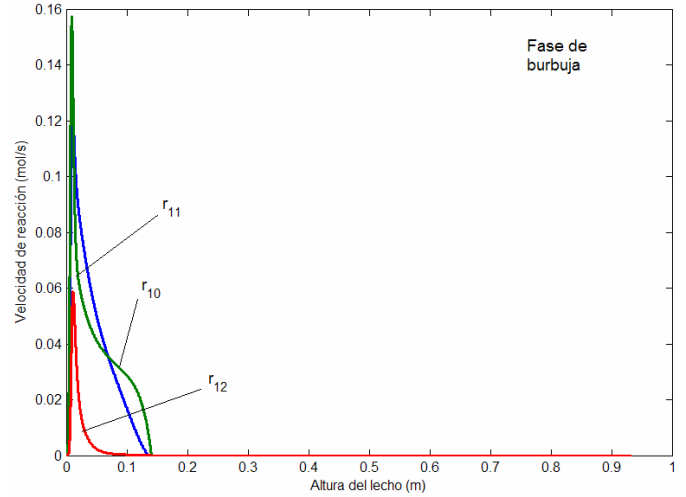
Como se puede apreciar, la diferencia es mínima a pesar de que el contenido de que varía aun poco el contenido en carbón del mismo, 64% en uno mientras que 72% en otro. No obstante, es un resultado lógico, ya que prácticamente son el mismo tipo de carbón.

9.4.3 Análisis del modelo cinético.

- Reacciones homogéneas:



(a) $T_s=1000K$

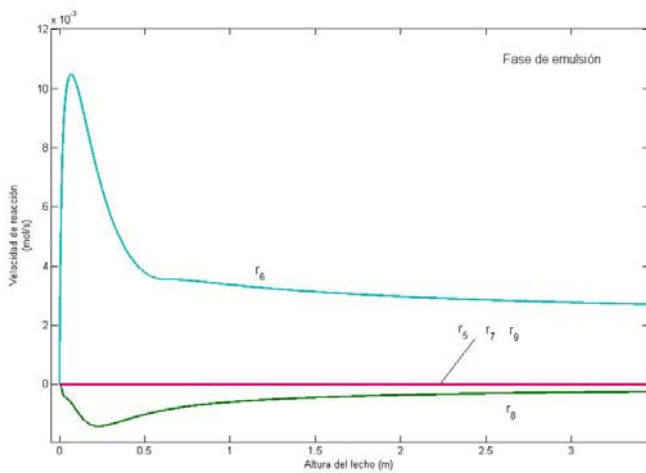


(b) $T_s=1250K$

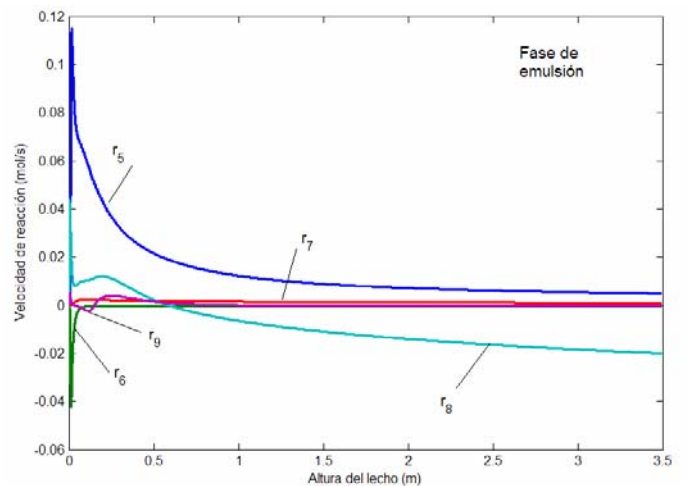
Figura 36. Velocidades de reacción homogéneas, burbuja.

Respecto al anterior carbón, el resultado es semejante en cuanto a órdenes de magnitud y en cuanto al efecto de la temperatura sobre la rapidez de la reacción. Por tanto, no es necesario representar los valores correspondientes a la fase de emulsión, ya que se obtendrá un resultado similar al anterior, es decir, unas velocidades de oxidación del monóxido de carbono superiores a las de combustión del hidrógeno.

- Reacciones de gasificación y WGSR:



(a) $T_s=1000K$



(b) $T_s=1250K$

Figura 37. Velocidades de gasificación y WGSR.

Respecto al caso anterior, se observa que es la temperatura el parámetro más influyente en estas velocidades de reacción, mientras que la composición del carbón no afecta tanto.

9.4.4 Análisis de la composición de gases.

Para la fase de emulsión, en línea continua, para la de burbuja, en línea quebrada, se obtienen las siguientes fracciones molares:

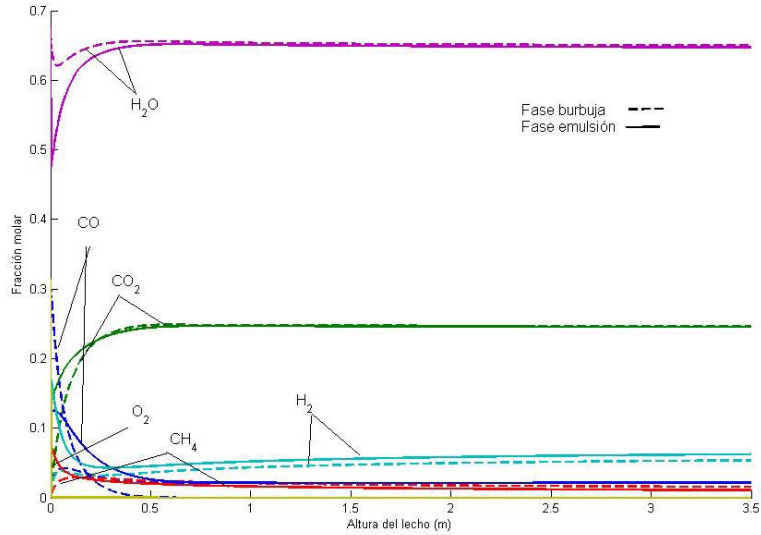


Figura 38. Fracciones molares $T_s=1000K$

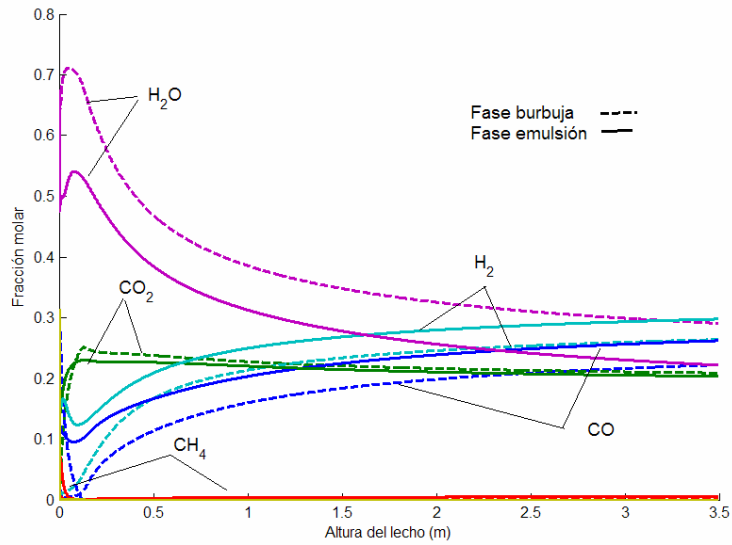


Figura 39. Fracciones molares $T_s=1250K$

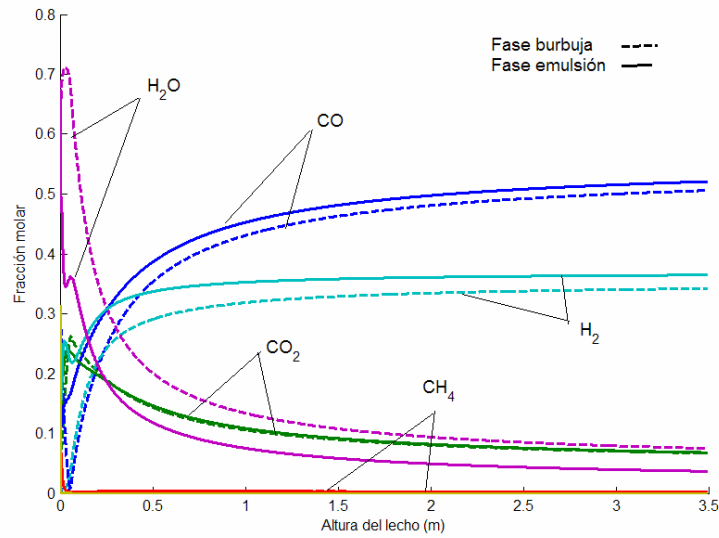
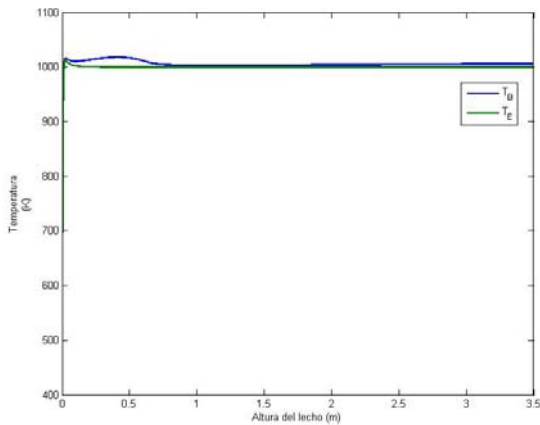


Figura 40. Fracciones molares $T_s=1400K$

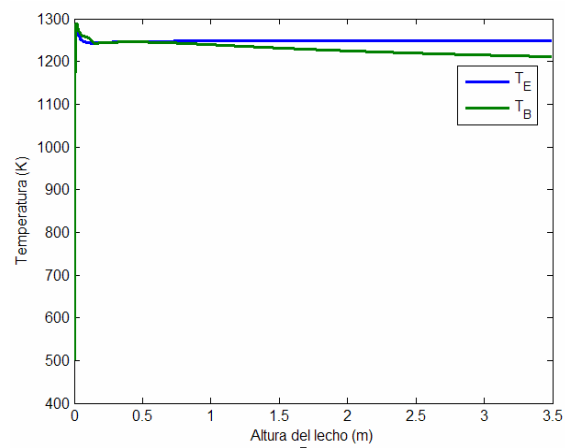
Igual que en el apartado anterior, la composición de los gases producto depende en mayor grado de la temperatura que en el tipo de carbón utilizado, ya que se tienen prácticamente las mismas composiciones al final del lecho.

9.4.5 Temperatura de los gases.

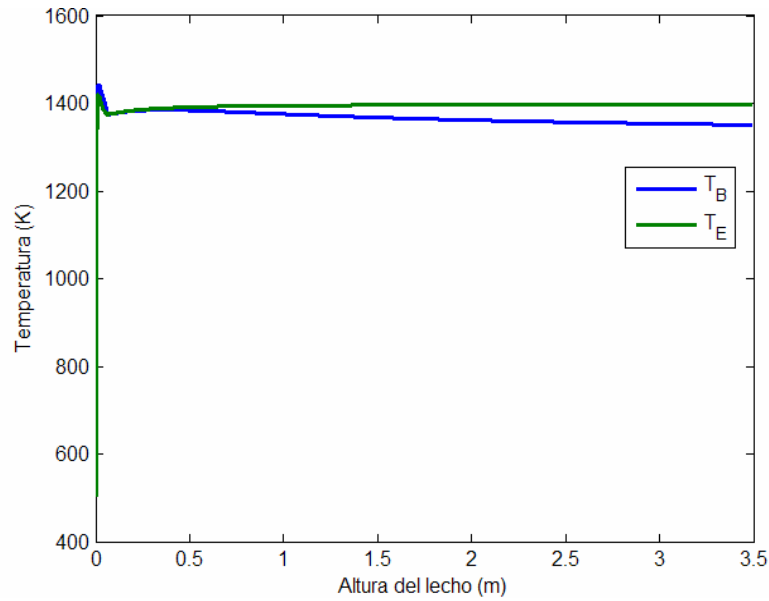
En función de la temperatura de los sólidos, se tiene:



(a) $T_s=1000K$



(b) $T_s=1250K$



(c) $T_s=1400K$

Figura 41. Temperatura de los gases

Al igual que con el anterior carbón, se pueden apreciar bolsas de calor en el inicio del lecho, sobre todo en el caso de $T_s=1000K$, pero en términos generales, la temperatura sigue la misma distribución.

9.4.6 Análisis del gasificador.

Los parámetros más importantes para este tipo de carbón, que no es igual al del modelo Winkler, pero cuyos resultados deben servirnos como guía, son:

	Unidades	Winkler	Caso 2.1	Caso 2.2	Caso 2.3
Temperatura de los sólidos	K	1090-1220	1000	1250	1400
Temperatura de burbuja	K	—	500-1014 - 1000	500-1291- 1211	500-1391- 1359
Temperatura de emulsión	K	—	500-1020 - 1000	500-1291- 1249	500-1371- 1400
Fracción de conversión total del carbón	% en peso	57-88	25.66	41.64	68.56
Por la combustión del carbón		—	18.45	13.49	11.57
Por la volatilización		—	5.22	5.22	5.22
Por la gasificación		—	0.0134	24.02	50.58

Estado fluidodinámico u_0 / u_{mf}		7-12	2.9-6.4	3.2 -7.9	3-6.5
Composición del gas (húmedo)	% en volumen				
CO		35.2- 37.5	8.49	34.75	55.40
CO_2		20.0- 21.8	60.27	22.74	1.46
H_2		38.5- 39.5	22.62	39.25	37.17
CH_4		1.5-1.8	5.65	2.22	5.28
N_2		1.1	2.75	0.97	0.64
H_2S		1.5	0.22	0.8	0.05
O_2		—	0	0	0
Flujo total de gases en la salida fase burbuja	mol / s	—	604.98	10152	1372.1
Flujo total de gases en la salida fase emulsión	mol / s	—	550.07	635.09	779.38
Flujo total de gases en la salida	mol / s	—	1155.1	1650.3	2151.5
Balance carbono					
Flujo carbono entrada	kg / s		8.0547	8.0547	8.0547
Flujo carbono salida en los gases	kg / s		5.988	3.354	5.5224
Flujo carbono salida en los sólidos	kg / s		2.0665	4.5008	2.5323
Error relativo	%		$-1 \cdot 10^{-15}$	$5.513 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-14}$

Tabla 17. Análisis del gasificador

La composición del gas en la salida en el caso 1.1 es tan baja porque un 57.47% es vapor de agua, ya que no se producen las reacciones de gasificación, como se ha comentado.

En general, el modelo responde bien a los datos experimentales Winkler. Salvo en el caso con la temperatura de 1000K, que no se alcanzan las composiciones mínimas en los productos, el resto de casos sí que tiene cumple con las condiciones.

Cabe señalar los bajos valores que se obtienen de la fracción de conversión del carbón, lo que es debido a las velocidades de reacción citadas anteriormente, que impiden desarrollar la gasificación por completo.

9.5. Comparación entre los carbones simulados.

Basándonos en el análisis de gasificador para cada caso:

	Unidades	Winkler	Caso 1.1	Caso 1.2	Caso 1.3	Caso 2.1	Caso 2.2	Caso 2.3
T_s	K	1090-1220	1000	1250	1400	1000	1250	1400
T_B	K	—	500-1014-1000	500-1277-1212	500-1391-1359	500-1034-1000	500-1291-1211	500-1391-1359
T_E	K	—	500-1020-1000	500-1275-1248	500-1371-1400	500-1046-1000	500-1291-1249	500-1371-1400
X_C	%	57-88	22.94	37.98	65.00	25.66	41.64	68.56
$X_C^{Combustión}$		—	13.49	11.56	13.04	18.45	13.49	11.57
$X_C^{Volatilización}$		—	6.15	6.15	6.15	5.22	5.22	5.22
$X_C^{Gasificación}$		—	1.10	23.16	45.81	0.0134	24.02	50.58
u_0 / u_{mf}		7-12	3.1-6	3.5-7.5	3-6.5	2.9-6.4	3.2 -7.9	3-6.5
Composición del gas	%							
CO		35.2-37.5	8.81	34.97	55.63	8.49	34.75	55.40
CO_2		20.0-21.8	59.33	21.72	4.33	60.27	22.74	1.46
H_2		38.5-39.5	24.18	40.45	38.24	22.62	39.25	37.17
CH_4		1.5-1.8	5.14	2.02	1.24	5.65	2.22	5.28
N_2		1.1	1.9	0.63	0.42	2.75	0.97	0.64
H_2S		1.5	0.65	0.21	0.14	0.22	0.8	0.05
O_2		—	0	0	0	0	0	0

$(f_B)_{TOTAL}$	mol/s	—	648.10	1104.1	1497.6	604.98	1015.2	1372.1
$(f_E)_{TOTAL}$	mol/s	—	604.44	701.03	862.05	550.07	635.09	779.38
f_{TOTAL}	mol/s	—	1252.5	1805.1	2359.7	1155.1	1650.3	2151.5
Balance carbono								
$(f_C)_{IN}$	kg/s		7.7640	7.7640	7.7640	8.0547	8.0547	8.0547
$(f_C^{GASES})_{OUT}$	kg/s		1.880	2.9490	4.7686	5.988	3.354	5.5224
$(f_C^{SÓLIDOS})_{OUT}$	kg/s		5.8840	4.8150	2.9954	2.0665	4.5008	2.5323
Error relativo	%		$-8.5 \cdot 10^{-15}$	$-5.719 \cdot 10^{-14}$	$-1.1 \cdot 10^{-14}$	$-1 \cdot 10^{-15}$	$5.513 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-14}$

Tabla 18. Comparación entre casos.

Analizando la tabla anterior:

- Se obtienen mayores picos en las temperaturas del Caso 2, lo que se debe al mayor contenido de carbón en su interior, que hace aumentar su poder calorífico.
- La fracción de conversión del carbón aumenta con el contenido en carbón debido a la combustión y a la gasificación; a pesar de que el carbón del caso 2 tiene un menor contenido en volátiles. Utilizando los datos obtenidos se puede observar su crecimiento:

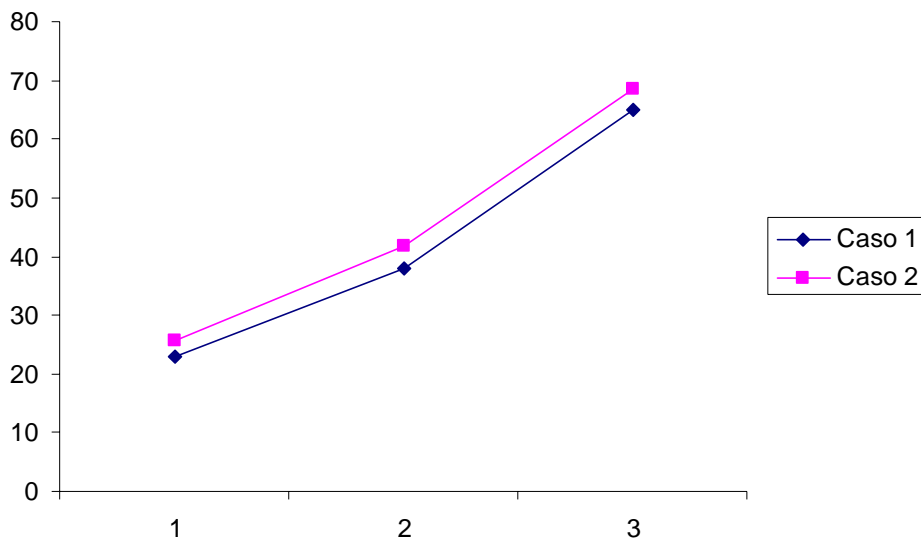


Figura 41. Relación temperatura de los sólidos-fracción de conversión.

Se puede observar que conforme aumenta la temperatura ('1'=1000K, '2'=1250 K y '3'=1400K), también aumenta la fracción de conversión. Y además, se aprecia la diferencia entre ambos factores de conversión por la distinta

- composición del carbón, cuyo aumento puede deberse al aumento de la humedad o de las cenizas del carbón del caso 2 respecto al del caso 1.
- Los parámetros fluidodinámicos se mantiene dentro de los límites válidos.
 - La composición del gas sí es un valor que dependa fuertemente de la temperatura, que hace variar la velocidad de reacción de cada proceso. Respecto a los valores Winkler, se ve que la temperatura de la simulación de 1250 K es la que mejor se aproxima a sus resultados. Por otro lado, el contenido en dióxido de carbono tiende a ser mayor en el caso 2, por su mayor contenido en carbono, mientras que el de hidrógeno menor por el menor porcentaje en peso.
 - Cabe señalar, que el descenso del contenido de CO₂ a altas temperaturas se debe a la reacción WGSR en la fase de emulsión, que como se ha visto en las gráficas anteriores, aumenta con la temperatura.
 - Por último, el flujo de gases de productos en el caso 1 es mayor debido a que las velocidades de reacción son ligeramente menores.

CAPÍTULO 10

CONCLUSIONES

10. CONCLUSIONES.

10.1. Sobre el modelo fluidodinámico.

Para los casos y temperaturas estudiadas, los parámetros fluidodinámicos han permanecido entre los valores correctos mostrando una clara tendencia a aumentar con la altura del lecho, tal y como señala la teoría.

Por otra parte, la temperatura de los sólidos afecta a las velocidades características, como la de burbuja y superficial, ya que dependen directamente de la cantidad de flujo reaccionado; mientras que la velocidad mínima de fluidización permanece constante, esto es debido a que depende de las propiedades físicas de las partículas del lecho, ya que, según su definición, es la velocidad mínima para contrarrestar la fuerza de gravedad de las partículas, por lo que no depende ni de velocidades de reacción ni de concentraciones de gases; y por tanto, tampoco de la temperatura de los sólidos.

10.2. Sobre el modelo cinético.

A pesar de los cambios en las velocidades de reacción, los resultados obtenidos son satisfactorios puesto que se obtienen composiciones de los gases semejantes a las del modelo Winkler, para la temperatura de 1250 K.

Sin embargo, es notorio que, al ser la oxidación del monóxido de carbono más rápida que la combustión del hidrógeno, influya tanto sobre el comportamiento del lecho impidiendo que se den las concentraciones exactas al final del lecho, y afectando a la fracción de conversión del carbón.

10.3. Sobre el gasificador.

La temperatura de los gases de emulsión y de burbuja cumple con los resultados de [3], que indica un descenso de la temperatura de burbuja debido a la evacuación de calor sensible por el flujo que sale de ésta.

10.4. Estudios posteriores.

El estudio se ha realizado en comparación con [1] sin sus expresiones de las velocidades de reacción, por lo que sería interesante conseguirlas y validar la veracidad de ese modelo. Además, se debería reflejar el efecto catalítico de las cenizas sobre la reacción WGSR, y no utilizar el equilibrio químico de la fase de burbuja en la de emulsión.

Por otro lado, en estudios más completos se debería incluir la variación del tamaño de la partícula como una variable más. Es decir, se debería obtener la distribución de tamaños de las partículas en el lecho, ya que aquí se ha supuesto un diámetro constante, lo cual es una gran simplificación.

Respecto al modelo fluidodinámico, es satisfactorio el bifásico por lo que no recomendaría la utilización de modelos trifásicos que consideren que la burbuja no está libre de sólidos, ya que como demuestra la experiencia, cuando una partícula entra en la burbuja reacciona rápidamente para dar productos gaseosos; por lo que un modelo trifásico aumentaría el grado de complejidad innecesariamente. Sí sería interesante incluir un modelo 'freeboard', o modelo de la zona libre superior al lecho, ya que se pueden dar procesos de post-combustión y suele disminuir el contenido de NO_x de los gases producto, aunque aquí no se hayan tenido en cuenta.

En relación con los datos experimentales, sería conveniente tener varias fuentes fiables para comparar el modelo, y además, utilizar distintos tipos de carbón para comprobar su estudio.

ANEXO A

PROPIEDADES

A. PROPIEDADES.

A.1. Calor específico.

La siguiente tabla muestra el calor específico de las partículas sólidas, teniéndose en cuenta que las cenizas se consideran con las propiedades del benceno, a pesar de tener una composición heterogénea.

Especie	Calor específico $C_{p_i} = [J/molK]$	Rango de temperaturas (K)
Carbón	1685	295-1575
Cenizas	1567	295-1500

Tabla 42. Calor específico carbón y cenizas

Para los gases se utiliza la siguiente expresión de la temperatura:

$$C_{p_i}(T) = 10^3 \left(C1 + C2 \left[\frac{C3}{T} / \sinh\left(\frac{C3}{T}\right) \right]^2 + C4 \left[\frac{C5}{T} / \cosh\left(\frac{C5}{T}\right) \right]^2 \right)$$

Especie	Calor específico $C_{p_i}(T) = [J/kmolK]$					Rango de temperaturas (K)
	C1 (10^{-5})	C2 (10^{-5})	C3 (10^{-3})	C4 (10^{-5})	C5	
CH_4	0.3330	0.7993	2.0369	0.4160	991.96	273-1500
CO	0.2911	0.0877	3.0851	0.0846	1538.2	273-2500
CO_2	0.2937	0.3454	1.4280	0.2640	588	273-1200
H_2	0.2762	0.0956	2.4660	0.0376	567.6	273-2500
H_2O	0.3336	0.2679	2.6105	0.0890	1169	300-2500
H_2S	0.3329	0.2609	0.9134	-0.1798	949.4	300-1500
N_2	0.2911	0.0861	1.7016	0.0010	909.79	300-3000
O_2	0.2910	0.1004	2.5265	0.0936	1153.8	300-500

Tabla 43. Calores específicos especies gaseosas

A.2. Viscosidad cinemática.

A.2.1. Gases.

La viscosidad cinemática de los gases se calcula utilizando la fórmula de Sutherland, propuesta en 1893, y que es:

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T_0 + S}{T + S} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}$$

donde:

- μ_0 es la viscosidad de referencia a la temperatura T_0 .
- S es la constante de Sutherland.
- T es la temperatura en grados Kelvin.

Gas	μ_0 [kg/(ms)]	T_0 [K]	S [K]	Rango de temperaturas [K] 2% error	Presión límite [kPa]
Aire	$1.716 \cdot 10^{-5}$	273	120	170 a 1900	<1800
O_2	$1.919 \cdot 10^{-5}$	273	127	190 a 2000	<2500
N_2	$1.663 \cdot 10^{-5}$	273	111	100 a 1500	<1600
CO	$1.749 \cdot 10^{-5}$	293	118	100 a 1500	<1600
CO_2	$1.370 \cdot 10^{-5}$	273	240	360 a 1700	<3600
H_2	$8.963 \cdot 10^{-6}$	300	72	100 a 1500	<1600
H_2O	$1.12 \cdot 10^{-5}$	350	1064	360 a 1500	<10000
CH_4	$1.092 \cdot 10^{-5}$	300	50	200 a 1600	<2600
H_2S	$1.179 \cdot 10^{-5}$	273	4.5	150 a 1500	<1600

Tabla 44. Viscosidad cinemática gases

A.2.2. Sistema multicomponente.

La estimación de la viscosidad de un sistema multicomponente de gases a bajas presiones se realiza con el método de Bromley and Wilke [12], siendo el error en torno al 3%:

$$\mu_{mezcla} = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left(Q_{ij} \frac{X_j}{X_i} \right)}$$

$$Q_{ij} = \frac{1 + \left[\left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2}{\sqrt{8} \left[1 + \frac{M_j}{M_i} \right]^2}$$

siendo M_i la masa molecular de cada especie, y X_i su fracción másica en la mezcla.

A.2.3. Fase de emulsión.

Se utiliza la ecuación de Mooney, según [13] Bird, para emulsión de partículas de tamaño constante:

$$\frac{\mu_{eff}}{\mu_0} = \exp \left(\frac{\frac{5}{2} \phi}{1 - (\phi / \phi_0)} \right)$$

donde $\phi_0 \approx 0.63$, ϕ es el valor del diámetro de la partícula supuesta completamente esférica y μ_{eff} se refiere a la viscosidad del medio continuo, que en este caso es la de la mezcla multicomponente de los gases.

A.3. Difusividad.

A.3.1. Gases.

La difusividad de un gas en aire se obtiene según la siguiente ecuación:

$$D_i = 0.1014 \frac{T^{3/2}}{P(V_A^{1/3} + V_B^{1/3})^2} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}} = \left[\frac{m^2}{s} \right]$$

siendo M_i sus masas atómicas, y V_i los volúmenes atómicos cuyos valores se muestran en la siguiente tabla:

Volúmenes atómicos	
Aire	20.1
O_2	16.6
N_2	17.9
CO	18.9
CO_2	26.9
H_2	7.07
H_2O	12.7
CH_4	25.5
H_2S	20.96

Tabla 45. Volúmenes atómicos

A.3.2. Sistema multicomponente.

La difusividad de la fase de burbuja, considerada ésta como un sistema multicomponente de gases a baja presión viene descrito según [12]:

$$D_g = \left(\sum_{j=1}^N \frac{X_j}{D_j} \right)^{-1}$$

A.4. Conductividad térmica.

A.4.1. Gases.

La conductividad térmica de los gases poliatómicos se estima de acuerdo con la siguiente expresión que es de tipo semiempírico y fue obtenida por Eucken:

$$k = \left(C_p + \frac{5}{4} \frac{R}{Mr} \right) \mu = \left[\frac{J}{m \cdot s \cdot K} \right]$$

Siendo R la constante universal de los gases, M el peso molecular de la especie y C_p su calor específico. Tal y como señala [13].

A.4.2. Sistema multicomponente.

La conductividad térmica de una mezcla de gases suele estimarse con un método similar al utilizado anteriormente con la viscosidad:

$$k_{mix} = \frac{\sum_{i=1}^N x_i k_i}{\sum_j x_j \Phi_{ij}}$$

Siendo x_i la fracción molar y k_i la conductividad térmica del gas de las especies. Los coeficientes adimensionales Φ_{ij} se calculan con la misma expresión que la utilizada en la viscosidad:

$$\Phi_{ij} = \frac{1 + \left[\left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2}{\sqrt{8} \left[1 + \frac{M_j}{M_i} \right]^2}$$

A.5. Entalpías estándar de formación.

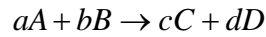
Entalpía estándar de formación se define como la cantidad de energía absorbida o desprendida que acompaña a la formación de 1 mol de una sustancia en condiciones normal o estándar, a partir de sus elementos en condiciones estándar. Luego, en condiciones estándar, a 298 K y a 1 atmósfera de presión:

Especie	$\Delta H^0 = kJ / mol$
<i>CO</i>	-110.6809
<i>CO₂</i>	-393.6463
<i>CH₄</i>	-74.9205
<i>H₂</i>	0
<i>H₂O</i>	-241.921
<i>N₂</i>	0
<i>H₂S</i>	-20.509
<i>O₂</i>	0

Tabla 46. Entalpías de formación

A.6. Entalpías estándar de reacción.

Son las utilizadas en el cálculo de las temperaturas de las fases de burbuja y de emulsión. Para una ecuación generalizada:



La entalpía estándar de reacción será:

$$\Delta H_r^0 = \sum (n_{\text{productos}} \Delta H_{\text{productos}}^0) - \sum (n_{\text{reactivos}} \Delta H_{\text{reactivos}}^0)$$

En la siguiente tabla se muestran las entalpías estándar de cada reacción:

Reacción	$\Delta H_r^0 = [kJ / mol]$
$C + \phi O_2 \rightarrow 2(1 - \phi)CO + (2\phi - 1)CO_2$	$\Delta H_r^0 = 2(1 - \phi)\Delta H^0(CO) + (2\phi - 1)\Delta H^0(CO_2)$
$C + H_2O = H_2 + CO$	131.3410
$C + 2H_2 = CH_4$	-74.9205
$C + \frac{1}{2}H_2O + \frac{1}{2}H_2 = \frac{1}{2}CO + \frac{1}{2}CH_4$	28.2103
$CO + H_2O = H_2 + CO_2$	-41.1435
$H_2 + 1/2O_2 \rightarrow H_2O$	-241.9219
$CO + 1/2O_2 \rightarrow CO_2$	-283.0654
$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	-802.5696

Tabla 47. Entalpías de reacción

ANEXO B

CÓDIGO

B. CÓDIGO.

A continuación se muestra el código implementado en Matlab:

```
%% MODELO NO ISOTÉRMICO DE GASIFICADORES DE LECHO FLUIDIZADO
% JESÚS GÓMEZ HERNÁNDEZ
% JULIO 2010
clear all

%% DATOS Y VARIABLES

%ANÁLISIS DEL CARBÓN EN PESO(%):
C=0.647;
Hi=0.049;
O=0.24;
N=0.005;
S=0.01;
Ashh=0.049;
%Proximate analysis
FC=0.5539;
Ash=0.0467;
Moisture=0.0467;
Xmv=0.3527; %Fracción másica de partículas volátiles en el carbón

%VARIABLES:
Yc=(C*(100-Ash))/100;
f0=10;%reactividad relativa del char (Johnson kinetics for char
gasification
Qloss=8;% En %
phi=0.8;
Xc=0.6142;
Ts_new=1400;
T_atm=500;

%DATOS DE LA DISCRETIZACIÓN:
H=3.5;
M=200000;
h=(H-0)/M;

P=1;%atm
P_t=101325; %Pascales
T_R=298;
tol=0.05;%Tolerancia
NR=15;
NT=8;
```

```
%DATOS DE LA BIBLIOGRAFÍA:
f_steam=253; %mol/s de vapor H2O
f_COAL=12; %kg/s, alimentación de carbón al gasificador
f_O2=121; %mol/s
f_N2=4.1;%mol/s
epsilon_mf=0.4;%Fracción de volumen mínima para la fluidización
u0=3;
e_E=0.86; %emisividad de las partículas
fwg=2.3; %Parámetro de reactividad
dp=1.25*10^-3;%m
nd=3000;
Dt=3.9;%m
A=(pi*Dt^2)/4;%m2
epsilon_s=1-epsilon_mf; %Fracción volumétrica ocupada por sólidos
(reacciones 5-6-7)

% DATOS DE PROPIEDADES FÍSICAS

rho_N2=1.2506;%kg/m3
rho_H2S=1.45;
rho0_ash=836;%kg/m3
rho_p=2500;
rho0_char=1800;%densidad inicial del char (Johnson kinetics for char
gasification
rho_aire=1.18;

%CONSTANTES:
R=0.00008205;%atm*m3/(mol*k)
G=9.81; %gravedad
sigma=5.67*10^-8;
Ea=9600; %J/mol energía de activación
Ra=8.315; %J/molK constante universal de los gases

%DATOS:
MrAire=28.9;
Mr_B=MrAire; %Valor inicial de la masa molecular de los gases de la
burbuja
MrC=12; % kg/kmol masa molar del carbono
MrAsh=12.011*6+1.0079*6;
Mr=zeros(NT,1);
Mr(1,1)=28.01;%CO
Mr(2,1)=44.01;%CO2
Mr(3,1)=16.043;%CH4
Mr(4,1)=2.016;%H2
Mr(5,1)=18.016;%H2O
Mr(6,1)=28.02;%N2
Mr(7,1)=34.04;%H2S
```

```
Mr(8,1)=32;%O2
MrH=1.0079;
MrO=15.999;
MrN=14.006;
MrS=32.06;
MrN2=14.006*2;
MrH2S=1.0079*2+32.06;
MrCO=28.01;
MrCO2=44.01;
MrCH4=16.043;
MrO2=32;

Mc=FC; %fixed carbon weighth fraction in the original char

%Volúmenes atómicos:
Vaire=20.1;
V(1)=18.9;%CO
V(2)=26.9;%CO2
V(3)=25.5;%CH4
V(4)=7.07;%H2
V(5)=12.7;%H2O
V(6)=17.9;%N2
V(7)=20.96;%H2S
V(8)=16.6;%O2
%Viscosidad del gas:
mu_f=1.82*10^-5;%viscosidad de la burbuja a la entrada (que es la del
aire a T_atm)
mu0=mu_f/(exp(5*dp*0.5/(1-dp/0.63)));
mu=zeros(NT,1);
mu_CO=1.749*10^-5;%kg/ms
mu_CO2=1.37*10^-5;
mu_CH4=1.092*10^-5;
mu_H2=8.963*10^-6;
mu_H2O=1.12*10^-5;
mu_N2=1.663*10^-5;
mu_H2S=1.179*10^-5;
mu_O2=1.919*10^-5;
%Viscosidad del aire
mu_aire=1.8*10^-5;

%Entalpías estándar de reacción: J/mol
H0=zeros(15,1);
H0(1)=0;
H0(2)=0;
H0(3)=0;
H0(4)=2*(1-phi)*(-110580.9)+(2*phi-1)*(-393646.3);
H0(5)=131341.0;
H0(6)=-74920.5;
H0(7)=28210.3;
```

```

H0(8)=-41134.5;
H0(9)=-41134.5;
H0(10)=-241921.9;
H0(11)=-283065.4;
H0(12)=-283000;
H0(13)=-241921.9;
H0(14)=-283065.4;
H0(15)=-283000;

%% MATRIZ DE COEFICIENTES

coef=[0 0 0 2*(1-phi)/phi 1 0 0.5 -1 -1 0 -1 0 0 -1
0; %CO
0 0 0 (2*phi-1)/phi 0 0 0 1 1 0 1 1 0 1
1; %CO2
0 0 0 0 0 1 0.5 0 0 0 0 -1 0 0
-1; %Ch4
0 0 0 0 1 -2 -0.5 1 1 -1 0 0 -1 0
0; %H2
0 0 0 0 -1 0 -0.5 -1 -1 1 0 2 1 0
2; %H2O
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0; %N2
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0; %H2S
0 0 0 -1 0 0 0 0 0 -0.5 -0.5 -2 -0.5 -
0.5 -2]; %O2

%% DEFINICIÓN DE MATRICES
rho_g=zeros(M+1,1);Ts_new2=zeros(M+1,1);
P_b=zeros(NT,M+1);P_e=zeros(NT,M+1);
Cp=zeros(NT,M+1);dCp_B=zeros(NT,1);CpE=zeros(NT,1);
Kt=zeros(NT,1);
C_E=zeros(NT,M+1);C_B=zeros(NT,M+1);

C_char_co=zeros(1,M+1);C_char_co2=zeros(1,M+1);
C_char_g=zeros(1,M+1);C_char_g5=zeros(1,M+1);C_char_g6=zeros(1,M+1);C_
char_g7=zeros(1,M+1);

f_B=zeros(NT,M+1);f_E=zeros(NT,M+1);
% f_dev=zeros(NT,M+1);
df_b=zeros(NT,M+1);df_e=zeros(NT,M+1);
gB_k=zeros(NT,M+1);gE_k=zeros(NT,M+1);
error_b=zeros(NT,M+1);error_e=zeros(NT,M+1);
r=zeros(NR,M+1);
inc_F=zeros(NT,M+1);
X_B=zeros(NT,M+1);
X_E=zeros(NT,M+1);

```

```

p_e=zeros(NT,M+1); p_b=zeros(NT,M+1);s
T_B=zeros(1,M+1);T_E=zeros(1,M+1);
dT_B=zeros(1,M+1);dT_E=zeros(1,M+1);
hB_k=zeros(1,M+1);hE_k=zeros(1,M+1);
error_Tb=zeros(1,M+1);error_Te=zeros(1,M+1);
p_Tb=zeros(1,M+1);p_Te=zeros(1,M+1);
z=zeros(1,M+1);
U0=zeros(1,M+1);u_ex=zeros(1,M+1);
inc_H_E=zeros(NT,1);inc_H_B=zeros(NT,1);
netflow=zeros(NT,1);

B=zeros(1,M+1);H_mf=zeros(1,M+1);
D_BM=zeros(1,M+1);D_B0=zeros(1,M+1);
epsilon_b=zeros(1,M+1);epsilon_f=zeros(1,M+1);
d_b=zeros(1,M+1);
u_b=zeros(1,M+1);
u_mf=zeros(1,M+1);

%% CONDICIONES INICIALES

T_B(1)=T_atm;
T_E(1)=T_atm;
as=6/(dp);
rho_g(1)=rho_aire;
u_mf(1)=(((25.25^2+(0.0651*(dp^3)*rho_g(1)*(rho_p-
rho_g(1))*G)/mu_f^2)^0.5)-25.25)*mu0/(dp*rho_g(1));%OJO con mu_f y mu0
U0(1)=u0;
B(1)=(1+10.978*((U0(1)-
u_mf(1))^0.738)*(rho_p^0.376)*(dp^1.006))/((u_mf(1)^0.937)*(rho_g(1)^0
.126));
u_b(1)=U0(1)-u_mf(1)+0.711*(G*d_b(1))^0.5;
u_ex(1)=U0(1)-u_mf(1);

f_E(5,1)=f_steam+f_COAL*Moisture*1000/Mr(5); %H2O
f_E(6,1)=f_N2; %N2
f_E(8,1)=f_O2; %O2

f_B(5,1)=f_steam+f_COAL*Moisture*1000/Mr(5); %H2O
f_B(6,1)=f_N2; %N2
f_B(8,1)=f_O2; %O2

C_B(5,1)=f_B(5,1)/(u_mf(1)*A); %Concentración de H2O
C_B(6,1)=f_B(6,1)/(u_mf(1)*A); %Concentración de N2
C_B(8,1)=f_B(8,1)/(u_mf(1)*A); %Concentración de O2

C_E(1:8,1)=C_B(1:8,1);

```

```

%% WHILE

contador=0;contador2=0;
dd1=1;
dd2=1;
Ts=Ts_new;

while dd2>tol

    contador=contador+1
    %% FOR
    for k=2:M+1
        %%Para un diferencial de z
        Xcold=Xc;
        %% Presiones parciales y totales y fracciones molares:
        C_Et=sum(C_E(1:8,k-1));
        CTb=sum(C_B(1:NT,k-1));
        X_E(1:NT,k-1)=C_E(1:8,k-1)./(C_Et);
        X_B(1:NT,k-1)=C_B(1:NT,k-1)/CTb;
        p_e(1:NT,k-1)=P.* X_E(1:NT,k-1);
        p_b(1:NT,k-1)=P.* X_B(1:NT,k-1);

        Pr_Tb=sum((p_b(1:NT,k-1)));%en atmósferas
        P_Te=sum((p_e(1:NT,k-1)));%en atmósferas

        %% Propiedades de las sustancias:
        Mr_B=sum(X_B(1:NT,k-1).*Mr(1:NT));
        rho_g(k)=10^-3*Mr_B*Pr_Tb/(R*T_B(k-1));

        % Calor específico J/molK
        T=(T_B(k-1)+T_E(k-1))/2; %Temperatura media

Cp(1,k)=(0.2911*10^5+0.0877*10^5*((3.0851*10^3/T)/sinh(3.0851*10^3/T))
^2+...
        0.0846*10^5*((1538.2/T)/cosh(1538.2/T))^2)*10^-3; %CO

Cp(2,k)=(0.2937*10^5+0.3454*10^5*((1.4280*10^3/T)/sinh(1.4280*10^3/T))
^2+...
        0.2640*10^5*((588/T)/cosh(588/T))^2)*10^-3; %CO2

Cp(3,k)=(0.333*10^5+0.7993*10^5*((2.0369*10^3/T)/sinh(2.0369*10^3/T))^
2+...
        0.4160*10^5*((991.96/T)/cosh(991.96/T))^2)*10^-3; %CH4

Cp(4,k)=(0.2762*10^5+0.0956*10^5*((2.4660*10^3/T)/sinh(2.4660*10^3/T))
^2+...

```



```

0.0376*10^5*((567.6/T)/cosh(567.6/T))^2)*10^-3; %H2

Cp(5,k)=(0.3336*10^5+0.2679*10^5*((2.6105*10^3/T)/sinh(2.6105*10^3/T))
^2+...
0.0890*10^5*((1169/T)/cosh(1169/T))^2)*10^-3; %H2O

Cp(6,k)=(0.2911*10^5+0.0861*10^5*((1.7016*10^3/T)/sinh(1.7016*10^3/T))
^2+...
0.0010*10^5*((909.79/T)/cosh(909.79/T))^2)*10^-3; %N2

Cp(7,k)=(0.3329*10^5+0.2609*10^5*((0.9134*10^3/T)/sinh(0.9134*10^3/T))
^2+...
-0.1798*10^5*((949.4/T)/cosh(949.4/T))^2)*10^-3; %H2S

Cp(8,k)=(0.2910*10^5+0.1004*10^5*((2.5265*10^3/T)/sinh(2.5265*10^3/T))
^2+...
0.0936*10^5*((1153.8/T)/cosh(1153.8/T))^2)*10^-3; %O2

Cp_g=sum(Cp(1:8,k).*X_B(1:8,k-1));

CpCoal=(0.403*4.18)*10^3;
CpAsh=(0.370*4.18)*10^3;%

%Viscosidad cinemática de los gases:
mu(1)=mu_CO*(293+118)/(T_B(k-1)+118)*(T_B(k-
1)/293)^1.5;%CO
mu(2)=mu_CO2*(273+240)/(T_B(k-1)+240)*(T_B(k-1)/273)^1.5;
mu(3)=mu_CH4*(300+50)/(T_B(k-1)+50)*(T_B(k-1)/300)^1.5;
mu(4)=mu_H2*(300+72)/(T_B(k-1)+72)*(T_B(k-1)/300)^1.5;
mu(5)=mu_H2O*(350+1064)/(T_B(k-1)+1064)*(T_B(k-
1)/350)^1.5;
mu(6)=mu_N2*(273+111)/(T_B(k-1)+111)*(T_B(k-1)/273)^1.5;
mu(7)=mu_H2S*(273+4.5)/(T_B(k-1)+4.5)*(T_B(k-1)/273)^1.5;
mu(8)=mu_O2*(273+127)/(T_B(k-1)+127)*(T_B(k-1)/273)^1.5;

%Viscosidad de la burbuja (mu_f)
mu_f=0;
sumS=0;
for i=1:NT
    for j=1:NT
        if j~=i
Sa=(1+((mu(i,1)/mu(j,1))^0.5*(Mr(j,1)/Mr(i,1))^0.25)^2)...
/((8^0.5)*(1+Mr(j,1)/Mr(i,1))^2);
sumS=sumS+Sa;
end
end
mu_f=mu_f+mu(i,1)/(1+sumS);

```

```

end

%Viscosidad de la fase de emulsión:
mu0=mu_f/(exp(5*dp*0.5/(1-dp/0.63)));%kg/(ms)

%Difusividad de los gases (bubble):
dif(1)=0.1014*(T_B(k-
1)^1.5)*sqrt(1/Mr(1)+1/MrAire)/(P_t*(V(1)^(1/3)+20.1^(1/3)));%m2/s
dif(2)=0.1014*(T_B(k-
1)^1.5)*sqrt(1/Mr(2)+1/MrAire)/(P_t*(V(2)^(1/3)+20.1^(1/3)));
dif(3)=0.1014*(T_B(k-
1)^1.5)*sqrt(1/Mr(3)+1/MrAire)/(P_t*(V(3)^(1/3)+20.1^(1/3)));
dif(4)=0.1014*(T_B(k-
1)^1.5)*sqrt(1/Mr(4)+1/MrAire)/(P_t*(V(4)^(1/3)+20.1^(1/3)));
dif(5)=0.1014*(T_B(k-
1)^1.5)*sqrt(1/Mr(5)+1/MrAire)/(P_t*(V(5)^(1/3)+20.1^(1/3)));
dif(6)=0.1014*(T_B(k-
1)^1.5)*sqrt(1/Mr(6)+1/MrAire)/(P_t*(V(6)^(1/3)+20.1^(1/3)));
dif(7)=0.1014*(T_B(k-
1)^1.5)*sqrt(1/Mr(7)+1/MrAire)/(P_t*(V(7)^(1/3)+20.1^(1/3)));
dif(8)=0.1014*(T_B(k-
1)^1.5)*sqrt(1/Mr(8)+1/MrAire)/(P_t*(V(8)^(1/3)+20.1^(1/3)));

%Difusividad del sistema multicomponente:
d=0;
for w=1:NT
    d=d+X_B(w,k-1)/dif(w);
end
Dg=d^-1;

%Conductividad térmica de los gases:
Kt(1)=(Cp(1,k)+5*Ra/(4*Mr(1,1)))*mu(1);
Kt(2)=(Cp(2,k)+5*Ra/(4*Mr(2,1)))*mu(2);
Kt(3)=(Cp(3,k)+5*Ra/(4*Mr(3,1)))*mu(3);
Kt(4)=(Cp(4,k)+5*Ra/(4*Mr(4,1)))*mu(4);
Kt(5)=(Cp(5,k)+5*Ra/(4*Mr(5,1)))*mu(5);
Kt(6)=(Cp(6,k)+5*Ra/(4*Mr(6,1)))*mu(6);
Kt(7)=(Cp(7,k)+5*Ra/(4*Mr(7,1)))*mu(7);
Kt(8)=(Cp(8,k)+5*Ra/(4*Mr(8,1)))*mu(8);

%Conductividad térmica del sistema multicomponente:
sumb=0;
suma=0;
for a=1:NT
    for b=1:NT
        ab=((1+Mr(a)/Mr(b))^(-
0.5))*(1+(mu(a)/mu(b))^(0.5)...
*(Mr(b)/Mr(a))^(0.25))^2)/sqrt(8);

```

```

        sumb=sumb+X_B(b,k-1)*ab;
    end
    suma=suma+X_B(a,k-1)*Kt(a);
end
k_mix=suma;
% Parámetros Lecho fluidizado
sum1=0;sum2=0;C_T=0;
for t=1:8
    sum1=f_B(t,k-1)+sum1;
    sum2=sum2+f_E(t,k-1);
    C_T=C_T+C_B(t,k-1)+C_E(t,k-1);
end

U0(k)=U0(k-1)+h*(sum1+sum2)/(A*C_T);

u_mf(k)=((25.25^2+(0.0651*(dp^3)*rho_g(k))*(rho_p-
rho_g(k))*G)/mu_f^2)^0.5-25.25)...
    *mu0/(dp*rho_g(k));
u_br=0.711*(G*d_b(k))^0.5;
u_b(k)=U0(k)-u_mf(k)+u_br;
u_ex(k)=U0(k)-u_mf(k);
z(k)=z(k-1)+h;
D_BM(k)=0.652*(A*(U0(k)-u_mf(k)))^0.4;
D_B0(k)=0.347*(A*(U0(k)-u_mf(k))/nd)^0.4;
d_b(k)=D_BM(k)-(D_BM(k)-D_B0(k))*exp(-0.3*z(k)/Dt);
B(k)=(1+14.314*((U0(k)-
u_mf(k))^0.738)*(rho_p^0.376)*(dp^1.006))...
    /((u_mf(k)^0.937)*(rho_g(k)^0.126));

H_mf(k)=H/B(k);
epsilon_b(k)=1-1/B(k);
epsilon_f(k)=epsilon_b(k)+(1-epsilon_b(k))*epsilon_mf;
% Parámetros de las ecuaciones de continuidad y de la
temperatura
a_b=6*epsilon_b(k)/d_b(k);

K_be=u_mf(k)/3+(4*Dg*epsilon_mf*u_b(k)/(pi*d_b(k)))^0.5;%ésta es la
correcta

Re_p=dp*U0(k)*rho_g(k)/mu_f;
Pr=CpCoal*mu_f/k_mix;
Nu=2+0.6*(Re_p^1/2)*(Pr^1/3);
h_p=k_mix*Nu/dp;%

h_be=4.5*(u_mf(k)*rho_g(k)*Cp_g/d_b(k))+5.85*...
    ((k_mix*rho_g(k)*Cp_g)^0.5)*(G^0.25)/(d_b(k)^5/4);

```

```

fc_in=f_COAL*FC; %kg/s Flujo de carbón que entra en el
lecho

%% Devolatilización en la entrada (k=2), instantánea
if k==2
    X_CO=0.428-2.653*Xmv+4.845*(Xmv)^2;
    X_CO2=0.135-0.90*Xmv+1.906*(Xmv)^2;
    X_H2=0.157-0.868*Xmv+1.388*(Xmv)^2;
    X_H2O=0.409-2.389*Xmv+4.554*(Xmv)^2;
    X_CH4=0.201-0.469*Xmv+0.241*(Xmv)^2;

    f_E(1,k)=f_E(1,k-1)+1000*X_CO*f_COAL/(Mr(1)); %CO
    f_E(2,k)=f_E(2,k-1)+1000*X_CO2*f_COAL/(Mr(2)); %CO2
    f_E(3,k)=f_E(3,k-1)+1000*X_CH4*f_COAL/(Mr(3)); %CH4
    f_E(4,k)=f_E(4,k-1)+1000*X_H2*f_COAL/(Mr(4)); %H2
    f_E(5,k)=f_E(5,k-1)+1000*X_H2O*f_COAL/(Mr(5)); %H2O
    f_E(6,k)=f_E(6,k-1)+1000*N*f_COAL/(Mr(6)); %N2
    f_E(7,k)=f_E(7,k-1)+1000*S*f_COAL/(Mr(7)); %H2S
    f_E(8,k)=f_E(8,k-1); %O2

    for i=1:NT
        f_B(i,k)=f_B(i,k-1);
        C_B(i,k)=f_B(i,k-1)/(u_b(k)*epsilon_b(k)*A);
    end

    C_E(1:8,k)=f_E(1:8,k)./(u_mf(k)*A/B(k));

    T_B(k)=T_B(k-1);
    T_E(k)=T_E(k-1);
else
    z(k)=z(k-1)+h;
    %% Fractor de conversión de la volatilización

X_cv=Xmv*(X_CO*MrC/Mr(1)+X_CO2*MrC/Mr(2)+X_CH4*MrC/Mr(3))/(FC+Ash);

    %%Factor de conversión para la combustión y la
gasificación
    X=Xc-X_cv;

    %% COMBUSTIÓN
    visc=mu0/rho_g(k);

kg=(2*epsilon_mf+0.69*((visc/Dg)^(1/3))*(Re_p/epsilon_b(k))^(0.5))*Dg/
dp;

    r(4,k)=kg*C_E(8,k-1)*phi; %*as;

```

```

%% GASIFICACIÓN
%Reacciones 5-6-7

K_IE=10^(7.49-7070/T_E(k-1));
K_IIE=10^(-5.373+4723/T_E(k-1));
K_IIIE=K_IE*K_IIE;

f_L=f0*exp(4704/Ts)/60;

if p_e(5,k-1)>0
    k_I=(exp(9.0201-17613/T_E(k-1))*(1-p_e(1,k-1)*p_e(4,k-1)/(p_e(5,k-1)*K_IE)))/...
        (1+exp(-22.216+24881/T_E(k-1))*...
        (1/p_e(5,k-1)+16.35*p_e(4,k-1)/p_e(5,k-1)+43.5*p_e(1,k-1)/p_e(5,k-1)))^2;
else
    k_I=0;
end

if p_e(4,k-1)>0
    k_II=(exp(2.6741-18375/T_E(k-1))*...
        (1-p_e(3,k-1)/((p_e(4,k-1)^2)*K_IIE)))/...
        (1+p_e(4,k-1)*exp(1-10.452+11097/T_E(k-1)));
else
    k_II=0;
end

if p_e(5,k-1)>0 && p_e(4,k-1)>0
    k_III=((p_e(4,k-1)^0.5)*p_e(5,k-1)*exp(12.4463-24746/T_E(k-1))*...
        (1-p_e(3,k-1)*p_e(1,k-1)/(p_e(4,k-1)*p_e(5,k-1)*K_IIIE)))/...
        (1+exp(-6.6696+8443/T_E(k-1))*...
        (p_e(4,k-1)^0.5+0.85*p_e(1,k-1)+18.62*p_e(3,k-1)/p_e(4,k-1)))^2;
else
    k_III=0;
end

alpha=52.7*p_e(4,k-1)/(1+54.3*p_e(4,k-1))+...
    0.521*(p_e(4,k-1)^0.5)*p_e(5,k-1)/...
    (1+0.707*p_e(4,k-1)+0.5*(p_e(4,k-1)^0.5)*p_e(5,k-1));

k_T=k_I+k_II+k_III;

```

```

g5=f_L*k_I;
g6=f_L*k_II;
g7=f_L*k_III;

rx=Mc*((1-X)^(2/3))*exp(-alpha*(X^2));

r(5,k)=10^3*epsilon_s*rho0_char*rx*g5/MrC;
r(6,k)=10^3*epsilon_s*rho0_char*rx*g6/MrC;
r(7,k)=10^3*epsilon_s*rho0_char*rx*g7/MrC;

%% Reacciones EMULSIÓN 8-13-14-15

% WGSR- r8

K8=(2.78*10^3)*exp(-12600/(8.315*T_E(k-1)));
Keqwg8=0.029*exp(4094/(T_E(k-1)));
r(8,k)=1000*K8*(0.001*C_E(1,k-1)*0.001*C_E(5,k-1)-
0.001*C_E(2,k-1)*0.001*C_E(4,k-1)/Keqwg8);%mol/(m3·s)

%r13
k13=(2.20*10^9)*exp(-109000/(8.315*T_E(k-1)));
r(13,k)=1000*k13*((C_E(4,k-1)*0.001))*((C_E(8,k-
1)*0.001));%mol/(m3·s)
%r14
k14=(1.0*10^10)*exp(-126000/(8.315*T_E(k-1)));
r(14,k)=1*k14*((C_E(1,k-1)*0.001)^1)*((C_E(8,k-
1)*0.001)^0.5)*((C_E(5,k-1)*0.001)^0.5);%mol/(m3·s)
r(14,k)=k14*((C_E(1,k-1))*C_E(8,k-1));

%r15
k15=(5.01*10^11)*exp(-203000/(8.315*T_E(k-1)));
r(15,k)=1000*k15*((C_E(3,k-1)*0.001)^0.7)*((C_E(8,k-
1)*0.001)^0.8);%mol/(m3·s)

%% Reacciones BUBBLE 9-10-11-12

% r9
%Opción1
K9=(2.78*10^3)*exp(-12600/(8.315*T_B(k-1)));
%mol/(kmol·s)
Keqwg9=0.029*exp(4094/(T_B(k-1)));
r(9,k)=1000*K9*(0.001*C_B(1,k-1)*0.001*C_B(5,k-1)-
0.001*C_B(2,k-1)*0.001*C_B(4,k-1)/Keqwg9);%mol/(m3·s)

%r10
k10=(2.20*10^9)*exp(-109000/(8.315*T_B(k-1)));

```

```

        r(10,k)=1000*k10*((C_B(4,k-1)*0.001))*((C_B(8,k-
1)*0.001));%mol/(m3*s

%           %r11
        k11=(1.0*10^10)*exp(-126000/(8.315*T_B(k-1)));
        r(11,k)=1*k11*((C_B(1,k-1)*0.001)^1)*((C_B(8,k-
1)*0.001)^0.5)*((C_B(5,k-1)*0.001)^0.5);%mol/(m3*s

%r12
        k12=(5.01*10^11)*exp(-203000/(8.315*T_B(k-1)));
        r(12,k)=1000*k12*((C_B(3,k-1)*0.001)^0.7)*((C_B(8,k-
1)*0.001)^0.8);%mol/(m3*s

%% Flujo Neto
Ctotal_E=sum(C_E(1:8,k-1));
coef_f=coef;
for i=1:NT
    Q=0;
    %Reacción 4
    coef_f(8,4)=0;
    %Reacciones 5-6-7
    if r(5,k)>0
        coef_f(5,5)=0;
    elseif r(5,k)<=0
        coef_f(1,5)=0;
        coef_f(4,5)=0;
    end
    if r(6,k)>0
        coef_f(4,6)=0;
    elseif r(6,k)<=0
        coef_f(3,6)=0;
    end
    if r(7,k)>0
        coef_f(4,7)=0;
        coef_f(5,7)=0;
    elseif r(7,k)<=0
        coef_f(1,7)=0;
        coef_f(3,7)=0;
    end
    if r(8,k)>0
        coef_f(1,8)=0;
        coef_f(5,8)=0;
    elseif r(8,k)<=0
        coef_f(4,8)=0;
        coef_f(2,8)=0;
    end
end

```

```

        if r(9,k)>0
            coef_f(1,9)=0;
            coef_f(5,9)=0;
        elseif r(9,k)<=0
            coef_f(4,9)=0;
            coef_f(2,9)=0;
        end
        %Reacción 10-11-12/13-14-15
        coef_f(4,10)=0;coef_f(4,13)=0;
        coef_f(8,10)=0;coef_f(8,13)=0;

        coef_f(1,11)=0;coef_f(1,14)=0;
        coef_f(8,11)=0;coef_f(8,14)=0;

        coef_f(3,12)=0;coef_f(3,15)=0;
        coef_f(8,12)=0;coef_f(8,15)=0;

        Q=(1-epsilon_b(k))*(epsilon_mf*...

(coef_f(i,13)*r(13,k)+coef_f(i,14)*r(14,k)+coef_f(i,15)*r(15,k))+...
        (1-epsilon_mf)*(as*(coef_f(i,4)*r(4,k))...

+coef_f(i,5)*r(5,k)+coef_f(i,6)*r(6,k)+coef_f(i,7)*r(7,k));
        inc_F(i,k)=C_E(i,k-1)*Q/Ctotal_E;
    end

        %% Conservación de la masa
    if k<7
        for i=1:NT
            df_b(i,k)=A*(epsilon_b(k)*a_b*K_be*(C_E(i,k-1)-
C_B(i,k-1))+inc_F(i,k)+...

epsilon_b(k)*(coef(i,9)*r(9,k)+coef(i,10)*r(10,k)+...
            coef(i,11)*r(11,k)+coef(i,12)*r(12,k)));%
        expresión con a_b que se utiliza
            f_B(i,k)=f_B(i,k-1)+h*df_b(i,k);
        end
        for i=1:NT
            Q=0;
            Q=(1-epsilon_b(k))*(epsilon_mf*...

(coef(i,13)*r(13,k)+coef(i,14)*r(14,k)+coef(i,15)*r(15,k))+(1-
epsilon_mf)*...

(as*(coef(i,4)*r(4,k))+coef(i,5)*r(5,k)+coef(i,6)*r(6,k)+coef(i,7)*r(7
,k)));

```



```

                df_e(i,k)=(A*(epsilon_b(k)*a_b*K_be*(C_B(i,k-1)-
C_E(i,k-1))-inc_F(i,k)+Q));
                end
                f_E(1:8,k)=f_E(1:8,k-1)+h*df_e(1:8,k);

                %% Conservación de la energía

                for t=1:NT
                    inc_H_E(t)=(T_E(k-1)-T_R)*Cp(t,k);
                    inc_H_B(t)=(T_B(k-1)-T_R)*Cp(t,k);
                end
                part1=A*epsilon_b(k)*h_be*(T_E(k-1)-T_B(k-1));

part2=A*epsilon_b(k)*(H0(9,1)*r(9,k)+H0(10,1)*r(10,k)+H0(11,1)*r(11,k)
+H0(12,1)*r(12,k));
                part3=0;
                part4=0;
                Den=0;
                for i=1:NT
                    part3=part3+inc_F(i,k)*inc_H_E(i);
                    part4=part4+(T_B(k-1)-T_R)*Cp(i,k)*df_b(i,k);
                    Den=Den+f_B(i,k-1)*Cp(i,k);
                end
                dT_B(k)=(part1-part2+A*part3-part4)/Den;

                T_B(k)=T_B(k-1)+h*dT_B(k);

                term1=A*epsilon_b(k)*h_be*(T_B(k-1)-T_E(k-1));
                term2=A*(1-epsilon_b(k))*(1-epsilon_mf)*(as*h_p*(Ts-T_E(k-
1)));
                term3=A*(1-epsilon_b(k))*(1-
epsilon_mf)*(as*e_E*sigma*(Ts^4-(T_E(k-1))^4));
                term4=A*(sum(inc_F(1:8,k).*inc_H_E(1:8)));
                term5=A*epsilon_mf*(1-epsilon_b(k))*...

(H0(4,1)*r(4,k)+H0(5,1)*r(5,k)+H0(6,1)*r(6,k)+H0(7,1)*r(7,k)+H0(8,1)*r
(8,k)...
                +H0(13,1)*r(13,k)+H0(14,1)*r(14,k)+H0(15,1)*r(15,k));
                W=0;
                for i=1:NT
                    W=W+Cp(i,k)*(T_E(k-1)-T_R)*df_e(i,k);
                end
                dT_E(k)=(term1+term2+term3-term4-term5-W)/(sum(f_E(1:8,k-
1).*CpE(1:8,1)));

                T_E(k)=T_E(k-1)+h*dT_E(k);

else

```

```

%% Método predictor-corrector: Masa
%Predictor
P_b(1:8,k)=f_B(1:8,k-1)+h*(-9*df_b(1:8,k-4)+37*df_b(1:8,k-
3)-59*df_b(1:8,k-2)...
+55*df_b(1:8,k-1))/24;
P_e(1:8,k)=f_E(1:8,k-1)+h*(-9*df_e(1:8,k-4)+37*df_e(1:8,k-
3)-59*df_e(1:8,k-2)...
+55*df_e(1:8,k-1))/24;

%Corrector
C_T=0;sum1=0; sum2=0;
for t=1:8
    sum1=P_b(t,k)+sum1;
    sum2=sum2+P_e(t,k);
    C_T=C_T+C_B(t,k-1)+C_E(t,k-1);
end
U_0=U0(k-1)+h*(sum1+sum2)/(A*C_T);
Be=(1+10.978*((U_0-
u_mf(k))^0.738)*(rho_p^0.376)*(dp^1.006))/((u_mf(k)^0.937)*(rho_g(k)^0
.126));

epsilonb=1-1/Be;
zeta=z(k)+h;
db=D_BM(k)-(D_BM(k)-D_B0(k))*exp(-0.3*zeta/Dt);
ab=6*epsilonb/db;
U_b=U_0-u_mf(k)+0.711*(G*db)^0.5;
Kbe=u_mf(k)/3+(4*Dg*epsilon_mf*U_b/(pi*db))^0.5;

for i=1:NT
    gB_k(i,k)=A*(epsilonb*ab*Kbe*(C_E(i,k-1)-C_B(i,k-
1))+inc_F(i,k)+...
    epsilonb*(coef(i,9)*r(9,k)+coef(i,10)*r(10,k)+...
    coef(i,11)*r(11,k)+coef(i,12)*r(12,k)));
end
for i=1:NT
    Q=0;
    Q=(1-epsilonb)*(epsilon_mf*...
    (coef(i,13)*r(13,k)+coef(i,14)*r(14,k)+coef(i,15)*r(15,k)))+(1-
    epsilon_mf)*...
    (as*(coef(i,4)*r(4,k))+coef(i,5)*r(5,k)+coef(i,6)*r(6,k)+coef(i,7)*r(7
    ,k)));
    gE_k(i,k)=(A*(epsilonb*ab*Kbe*(C_B(i,k-1)-C_E(i,k-1))-
    inc_F(i,k)+Q));
end
%Corrector:
f_B(1:8,k)=f_B(1:8,k-1)+h*(df_b(1:8,k-3)-5*df_b(1:8,k-
2)+19*df_b(1:8,k-1)+9*gB_k(1:8,k))/24;

```

```

        f_E(1:8,k)=f_E(1:8,k-1)+h*(df_e(1:8,k-3)-5*df_e(1:8,k-
2)+19*df_e(1:8,k-1)+9*gE_k(1:8,k))/24;

        error_e(1:8,k)=19*(P_e(1:8,k)-f_E(1:8,k))/270;
        error_b(1:8,k)=19*(P_b(1:8,k)-f_B(1:8,k))/270;

        %Reasignación de valores
        df_b(1:8,k)=gB_k(1:8,k);
        df_e(1:8,k)=gE_k(1:8,k);

    %% Método predictor-corrector: Energía
        %Valor predictor:
        p_Tb(k)=T_B(k-1)+h*(-9*dT_B(k-4)+37*dT_B(k-3)-
59*dT_B(k-2)...
            +55*dT_B(k-1))/24;
        p_Te(k)=T_E(k-1)+h*(-9*dT_E(k-4)+37*dT_E(k-3)-
59*dT_E(k-2)...
            +55*dT_E(k-1))/24;

        %Valor corrector:
        % Tb
        for t=1:NT
            inc_H_E(t)=(T_E(k-1)-T_R)*Cp(t,k);
            inc_H_B(t)=(T_B(k-1)-T_R)*Cp(t,k);
        end
        part1=A*epsilon_b(k)*h_be*(T_E(k-1)-p_Tb(k));

part2=A*epsilon_b(k)*(H0(9,1)*r(9,k)+H0(10,1)*r(10,k)+H0(11,1)*r(11,k)
+H0(12,1)*r(12,k));
        part3=0;
        part4=0;
        Den=0;
        for i=1:NT
            part3=part3+inc_F(i,k)*inc_H_E(i);
            part4=part4+(p_Tb(k)-T_R)*Cp(i,k)*df_b(i,k);
            Den=Den+f_B(i,k-1)*Cp(i,k);
        end

        hB_k(k)=(part1-part2+A*part3-part4)/Den;

        for t=1:NT
            inc_H_E(t)=(p_Te(k)-T_R)*Cp(t,k);
        end
        % Te
        term1=A*epsilon_b(k)*h_be*(p_Te(k)-T_E(k-1));
        term2=A*(1-epsilon_b(k))*(1-epsilon_mf)*(as*h_p*(Ts-
p_Te(k)));

```

```

        term3=A*(1-epsilon_b(k))*(1-
epsilon_mf)*(as*e_E*sigma*(Ts^4-(p_Te(k))^4));
        term4=A*(sum(inc_F(1:8,k).*inc_H_E(1:8)));
        term5=A*epsilon_mf*(1-epsilon_b(k))*...

(H0(4,1)*r(4,k)+H0(5,1)*r(5,k)+H0(6,1)*r(6,k)+H0(7,1)*r(7,k)+H0(8,1)*r
(8,k)...
        +H0(13,1)*r(13,k)+H0(14,1)*r(14,k)+H0(15,1)*r(15,k));
W=0;
for i=1:NT
    W=W+Cp(i,k)*(p_Te(k)-T_R)*df_e(i,k);
end
hE_k(k)=(term1+term2+term3-term4-term5-W)/(sum(f_E(1:8,k-
1).*Cp(1:8,k)));

T_B(k)=T_B(k-1)+h*(dT_B(k-3)-5*dT_B(k-2)+19*dT_B(k-
1)+9*hB_k(k))/24;
T_E(k)=T_E(k-1)+h*(dT_E(k-3)-5*dT_E(k-2)+19*dT_E(k-
1)+9*hE_k(k))/24;

error_Tb(k)=19*(p_Tb(k)-T_B(k))/270;
error_Te(k)=19*(p_Te(k)-T_E(k))/270;

    %Reasignación de valores
    dT_B(k)=hB_k(k);
    dT_E(k)=hE_k(k);
end

    %% Concentraciones finales
    C_B(1:8,k)=C_B(1:8,k-
1)+h*df_b(1:8,k)/(u_b(k)*epsilon_b(k)*A);
    C_E(1:8,k)=C_E(1:8,k-1)+h*df_e(1:8,k)/(u_mf(k)*A/B(k));

    for i=1:NT
        if C_E(i,k)<10^-5
            C_E(i,k)=0;
            f_E(i,k)=0;
        end
        if C_B(i,k)<10^-5
            C_B(i,k)=0;
            f_B(i,k)=0;
        end
    end
end

netflow(k)=0;
for i=1:NT
netflow(k)=inc_F(i,k)+netflow(k);
end

```

```

end
%% Contenido de carbón de los productos de combustión y
gasificación

%%Concentración de carbón tras la combustión:
C_char_co(k)=((1-epsilon_b(k))*(1-
epsilon_mf)*(as*(coef(1,4)*r(4,k))))*...
(h/u_ex(k))*(MrC/1000);%kg/m3

C_char_co2(k)=((1-epsilon_b(k))*(1-
epsilon_mf)*(as*(coef(2,4)*r(4,k))))*...
(h/u_ex(k))*(MrC/1000);
%%Concentraciones de carbón de los productos de la
gasificación:
if r(5,k)>0
C_char_g5(k)=(1-epsilon_b(k))*(1-
epsilon_mf)*(coef(1,5)*r(5,k))*(h/u_ex(k))*(MrC/1000);%kg/m3 CO
end
if r(6,k)>0
C_char_g6(k)=(1-epsilon_b(k))*(1-
epsilon_mf)*(coef(2,6)*r(6,k))*(h/u_ex(k))*(MrC/1000);%kg/m3 CO2
end
if r(7,k)>0
C_char_g7(k)=(1-epsilon_b(k))*(1-
epsilon_mf)*(coef(1,7)*r(7,k)+coef(3,7)*r(7,k))*...
(h/u_ex(k))*(MrC/1000);%kg/m3 CH4
end
C_char_g(k)=C_char_g5(k)+C_char_g6(k)+C_char_g7(k);
end
%% Factor de conversión de la gasificación
C_charin=fc_in/(u_mf(1)*(1-epsilon_mf)*A); % kg/m3 en la
entrada
X_cC=(sum(C_char_co(1:k-1))+sum(C_char_co2(1:k-1)))/C_charin;
%conversión en la combustión
X_cG=(sum(C_char_g(1:k-1)))/C_charin;

Xc_new=X_cv+X_cC+X_cG;

dd2=abs(Xc_new-Xcold);

%%Método SOR
WW=0.4;
Xc_new=(1-WW)*Xc+WW*Xc_new;
Xc=Xc_new;

end
% Comprobaciones
f_T=zeros(NT,1);C_Total=0;

```

```
Q=0;
for i=1:NT
    if i~=5
        ve=0;vb=0;
        ve=f_E(i,k-1);
        vb=f_B(i,k-1);
        if f_E(i,k-1)<0
            ve=0;
        end
        if f_B(i,k-1)<0
            vb=0;
        end
        C_Total(i)=(ve+vb)/(U0(k-1)*A);
        if C_Total(i)<0
            C_Total(i)=0;
        end
        f_T(i)=ve+vb;
    end
end
sumCT=sum(C_Total(1:8));
% Composición de los gases producto
for i=1:NT
    X_T(i)=C_Total(i)/sumCT;
end

%Balance carbon que entra
fc_in=f_COAL*C;
fc_s_out=fc_in*(1-Xc);
fc_g_out=fc_in*Xc;
error_masa=(fc_in-fc_s_out-fc_g_out)/fc_in*100;
```

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA.

- [1] Yan HM, Heidenreich C, Zahng DK, Mathematical modelling of a bubbling fluidised-bed coal gasifier and the significance of 'net flow', *Fuel* 1998; 77:1067-79
- [2] Yan HM, Heidenreich C, Zahng DK, Modelling of bubbling fluidised bed coal gasifiers, *Fuel* 1999; 78:1027-47
- [3] Ross DP, Yan HM, Zhong Z, Zhang DK, A non-isothermal model of a bubbling fluidised-bed coal gasifier, *Fuel* 2005;84:1469-1481
- [4] Kunii D, Levenspiel O, *Fluidization Engineering*, 2nd Edition, Butterworth-Heinemann, 1991
- [5] Gómez-Barea A, Leckner B, Modeling of biomass gasification in fluidized bed, *Progress in Energy and Combustion Science* 2010; 36:444-509
- [6] Ji P, Feng W, Chen B, Production of ultrapure hydrogen from biomass gasification with air, *Chemical Engineering Science*, 2009; 64:582-592
- [7] Johnson JL, *Kinetics of bituminous coal char gasification with gases containing steam and hydrogen*, Institute of Gas Technology, John Wiley & Sons, New York, 1979
- [8] Chejne F, Hernandez JP, Modelling and simulation of coal gasification process in fluidised bed, *Fuel* 2002; 81:1687-1702
- [9] Felder R, Ferrell JK, Modeling a pilot-scale fluidized bed coal gasification reactor, *Fuel Processing Technology* 1988; 19:265-290
- [10] Mathews JH, Fink KD, *Métodos Numéricos con Matlab*, 3^a Edición, Prentice-Hall, 2001
- [11] Nag P, *Power Plant Engineering*, 1st Edition, McGraw-Hill, 2008
- [12] Perry RH, Green DW, *Chemical Engineer's Handbook*, 7th Edition, McGraw-Hill Professional, 1997
- [13] Byron R, Stewart WE, Lightfoot EN, *Transport Phenomena*, 2nd Edition, John Wiley & Sons, 2002
- [14] Levenspiel O, *Ingeniería de las reacciones químicas*, 2^a Edición, Editorial Reverté, 1987
- [15] Oka S, Anthony EJ, *Fluidized Bed Combustion*, 2^a Edición, CRC Press, 2003
- [16] de Souza-Santos ML, *Solid fuels combustion and gasification: modeling, simulation and equipment operation*, CRC Press, 2004
- [17] The Chemkin Thermodynamic Database, Chemkin Collection Release 3.6, September 2000