

BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA EN UNA PLANTA DE CARBÓN ACTIVADO EN LECHO FLUIDIZADO.

Parte I: Deducción e implementación del sistema de ecuaciones

JAIIME AGUIRRE CARDONA
jaguirre@perseus.unalmed.edu.co

ALONSO OCAMPO OROZCO
aocampo@perseus.unalmed.edu.co

Facultad de Minas
Universidad Nacional de Colombia-Sede Medellín.

RESUMEN

El presente trabajo desarrolla de manera sistemática el conjunto de ecuaciones que representa un proceso de activación de carbonos minerales compuesto por una cámara de combustión, un evaporador y dos reactores en lecho fluidizado (de pirólisis y gasificación parcial).

El sistema de ecuaciones se obtiene a partir de los balances de materia y de energía en cada una de las unidades, al igual que en los puntos de derivación y mezcla. Es posible conocer, para un caso específico, las entalpias y temperaturas, como también los flujos básicos y las concentraciones de hidrógeno, metano, monóxido y dióxido de carbono, nitrógeno, agua y alquitrán en cualquiera de las corrientes del proceso.

Un segundo artículo, presentará los resultados de simulaciones obtenidas para diferentes condiciones de producción de carbón activado.

PALABRAS CLAVE

activación, carbón mineral, pirólisis, gasificación parcial, lecho fluidizado, carbón activado.

ABSTRACT

The present work develops in a systematic way the group of equations that represents a mineral coal

activation process; this one contains a combustor a vaporizer and two fluidized bed reactors (of pyrolysis and partial gasification).

The system of equations is obtained starting from the energy and mass balances in each one of the units, the same as in the derivation and mixing points. It is possible to know, for a specific case, the enthalpies and temperatures, as well as the massic flows and the concentrations of H₂, CH₄, CO, CO₂, N₂, H₂O and tar in anyone of the process flow lines.

A second paper will show the results obtained by simulations of different conditions of the activated carbon production.

KEY WORDS

activation, coal, pyrolysis, partial gasification, fluidized bed, activated carbon.

1. INTRODUCCIÓN

La activación física del carbón mineral involucra dos etapas fundamentales, pirólisis y gasificación parcial, las cuales son bastante complejas como para predecir sin mayor problema su comportamiento, máxime si éstas ocurren en lecho fluidizado.

Existen sin embargo algunos modelos globales de pirólisis los cuales, acoplados con las reacciones

principales de gasificación y con ecuaciones empíricas de *lechos* fluidizados, podrían brindar un acercamiento al fenómeno de activación.

1.1. FLUIDIZACIÓN

Cuando un flujo ascendente de gas pasa a través de un lecho de partículas sólidas a una velocidad tal que la fuerza de arrastre sobre las partículas contrabalancea su peso, los sólidos permanecen en un estado de suspensión con una ligera expansión del lecho. La velocidad del gas en esta situación se conoce como la *velocidad mínima de fluidización*.

Si se incrementa la velocidad del gas por encima de este valor se forman burbujas justo encima del distribuidor que al atravesar el lecho le confiere una apariencia de líquido en ebullición. Estas burbujas de gas permanecen prácticamente libres de partículas y van creciendo a medida que ascienden; al alcanzar la superficie libre del lecho se rompen arrojando sólidos a la región localizada por encima, obteniéndose un *lecho fluidizado burbujeante*. En algunos casos las burbujas pueden crecer hasta un tamaño igual al diámetro del lecho, especialmente cuando la relación de aspecto (altura/diámetro de lecho) es elevada⁽¹⁾, dando lugar a un *lecho fluidizado en flujo tapón*.

En un lecho fluidizado burbujeante el total de burbujas de gas conforman lo que se conoce como *fase burbuja* y la parte restante del lecho se conoce como *fase emulsión*. Algunos autores identifican una tercera fase: la *fase nube*, que es una región diluida en partículas alrededor de las burbujas.⁽²⁾

La velocidad mínima de fluidización es un parámetro importante en el diseño de lechos fluidizados y se han propuesto una variedad de expresiones para su estimación cuando no se dispone de datos experimentales. Algunas de ellas tienen en cuenta el grado de vacío en el mínimo de fluidización y el factor de esfericidad de los sólidos, mientras que otras evitan el empleo de dichos parámetros en aras de la simplificación de las ecuaciones obtenidas.^(3, 4)

En la práctica los lechos fluidizados operan con flujos de gas que corresponden a varias veces la velocidad

mínima de fluidización. La relación entre la velocidad de fluidización en la operación y la correspondiente a la fluidización incipiente se denomina por algunos autores como *número de fluidización*.

Se acepta comúnmente que el gas en exceso, respecto al mínimo de fluidización, se emplea en la formación de burbujas. La presencia de éstas da lugar a la expansión del lecho de sólidos. Existe un gran número de expresiones que permiten predecir la altura del lecho expandido.^(4, 5)

Los lechos fluidizados burbujeantes tienen varias ventajas que los hacen atractivos:

- Buen contacto gas-sólido.
- Altas velocidades de transferencia de calor y de masa.
- Temperatura prácticamente uniforme dentro del lecho.
- Facilidad de alimentación y descarga de sólidos.

Entre las desventajas se pueden citar:

- Corto-circuito de reactivos gaseosos a través de las burbujas.
- Dificultades de diseño y de escalado debido a la complejidad de los fenómenos involucrados.

1.2. ACTIVACIÓN

El proceso de producción de carbón activado consta generalmente de 2 etapas: la pirólisis del material carbonoso y la activación subsiguiente del carbonizado obtenido.

La pirólisis del carbón consiste en una descomposición térmica, en ausencia de agentes oxidantes, dando lugar a un residuo sólido poroso rico en carbono y a compuestos volátiles de muy diferente peso molecular. Este fenómeno engloba el conjunto no sólo de destilaciones destructivas sino también de reacciones químicas que sufre el carbón desde la temperatura ambiente hasta la temperatura final de operación, presentándose las transformaciones más profundas en

un intervalo de temperaturas relativamente estrecho. Entre 350 y 550°C ocurre el rompimiento de numerosos enlaces y por ende la liberación abundante de compuestos de alto peso molecular, los cuales al difundir del interior de las partículas sólidas hacia la superficie dan origen a una matriz de caminos porosos, muchos de los cuales se mantienen al aumentar la temperatura y algunos otros se bloquean debido a las reacciones de recondensación de compuestos aromáticos.

No existe una teoría de la pirólisis suficientemente sólida que permita explicar, especialmente para gránulos mayores de 0.5 mm, el acoplamiento irreductible que se presenta entre la difusión másica, el gradiente térmico y la superposición de diferentes reacciones químicas. Es por esto que la experimentación directa sigue siendo un medio obligatorio para allegar información.

El residuo sólido de la pirólisis se somete a una gasificación parcial en presencia de un gas oxidante tal como vapor de agua, dióxido de carbono o una combinación de ellos, a niveles de temperatura entre 800 y 1000°C.

Las reacciones básicas de gasificación son:



Las reacciones endotérmicas van acompañadas de la reacción de desplazamiento:



La cual se encuentra generalmente en equilibrio a las condiciones de operación comúnmente utilizadas en la práctica (>800°C).

Para la reacción C-H₂O existe una fuerte evidencia de inhibición por parte del H₂, mientras que la reacción con CO₂ resulta inhibida por el CO.

El hecho que la molécula de CO₂ sea de mayor tamaño que la de H₂O, se traduce tanto en una difusión más

lenta dentro de la estructura porosa del *semicoque*, como en un acceso restringido al sistema de microporos y una velocidad de reacción significativamente menor.⁽⁶⁾

El aporte calórico necesario para soportar las reacciones de gasificación endotérmicas se consigue, en algunos casos, agregando cantidades controladas de aire u oxígeno para quemar productos de gasificación (CO, H₂) y algo de carbono, mientras que en otros se suministra energía externamente.

El proceso de activación está fuertemente influenciado por el tipo de carbón, las condiciones reinantes durante la etapa de pirólisis, el tipo de agente oxidante y el nivel de temperatura utilizado.

En el presente artículo se propone una metodología para efectuar los balances de materia y energía en una planta piloto de activación de carbón, en lecho fluidizado.

2. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

La figura 1 muestra el diagrama de proceso de una planta de activación existente en la Facultad de Minas de la Universidad Nacional de Colombia - Sede Medellín. El carbón almacenado [1], se alimenta al reactor para la pirólisis por medio de un transportador de tornillo [2]. La alimentación [3] al reactor [4] es enfriada con agua para evitar la formación de alquitrán. Un dispositivo ajustable de descarga [5] en el pirolizador y un ensamblaje de tuberías de rebose [6] en el activador [7] permiten que los tiempos de residencia de los sólidos en ambos reactores puedan ser modificados según se requiera.

Los reactores poseen distribuidores de gas [8, 9] del tipo placas perforadas cuyos orificios tienen 1 mm de diámetro. Ambos reactores y las tuberías de conexión fueron fabricados en acero inoxidable.

Los calentadores eléctricos [10, 11], cada uno con su propio control, están sujetados de la parte exterior de cada reactor.

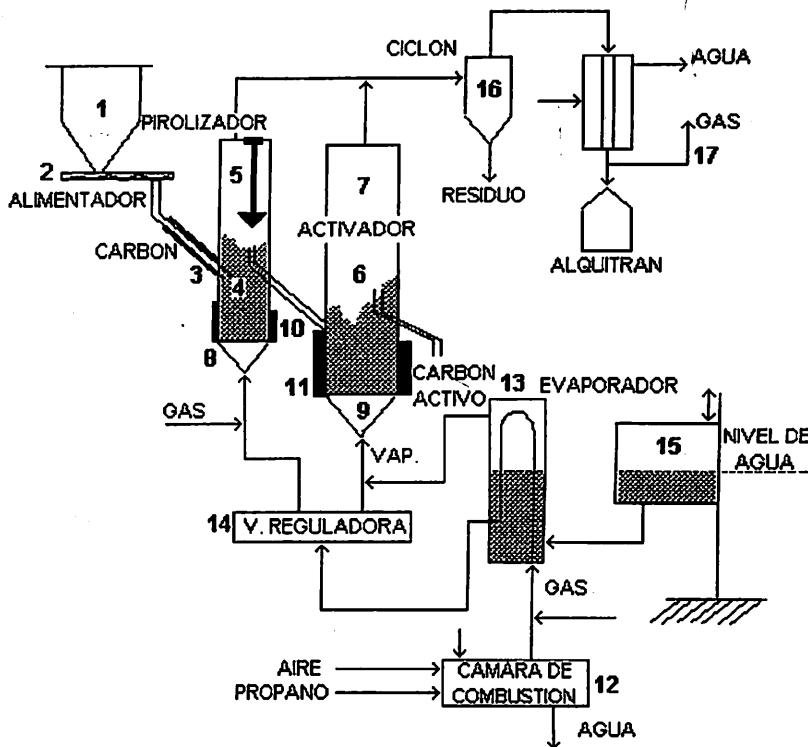


Figura 1. Diagrama del proceso.

El gas caliente para fluidizar el carbón y el carbonizado se obtiene quemando propano con aire en la cámara de combustión [12]. Los humos calientes sirven para producir vapor de agua, en el evaporador [13], para el proceso de activación. Luego el gas se divide en dos corrientes, una para cada reactor, por medio de una válvula divisora de flujo [14]. El vapor generado se añade a la corriente gaseosa que va al activador y allí sirve como principal agente de activación. El agua de alimentación entra al evaporador por medio de un tanque [15] que puede ser movido verticalmente para cambiar el nivel del líquido en el evaporador, variando así la velocidad de producción de vapor. Las partículas finas, producidas por el roce de sólidos dentro del lecho fluidizado y que pasan a la corriente de gas son retenidas por medio de un ciclón [16] que se mantiene a una temperatura adecuada para evitar condensación de alquitrán.

Un intercambiador de calor de tubos concéntricos [17] enfria el gas y condensa los alquitranes pesados producidos en la pirólisis. El gas desalquitranado es quemado en una antorcha con el propósito de recuperar energía.

3. BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

El diagrama de bloques (figura 2) sirve de referencia para los balances de materia y energía que se realizan a continuación.

3.1 CÁLCULOS EN LA CAMARA DE COMBUSTIÓN

3.1.1 Balance de Masa

Se determina una fórmula del tipo C_nH_m para la mezcla gaseosa combustible según la composición molar de la misma. También se evalúa su correspondiente peso molecular:

$$n = 2X'_1 + 3(X'_2 + X'_3) + 4(X'_4 + X'_5 + X'_6) + 5X'_7$$

$$m = 6(X'_1 + X'_3) + 8(X'_2 + X'_6) + 10(X'_4 + X'_5) + 12X'_7$$

$$PMC = 12n + 1m$$

Donde:

X'_i = Fracciones molares de los constituyentes del combustible gaseoso (1: etano=0.5% molar; 2: propano

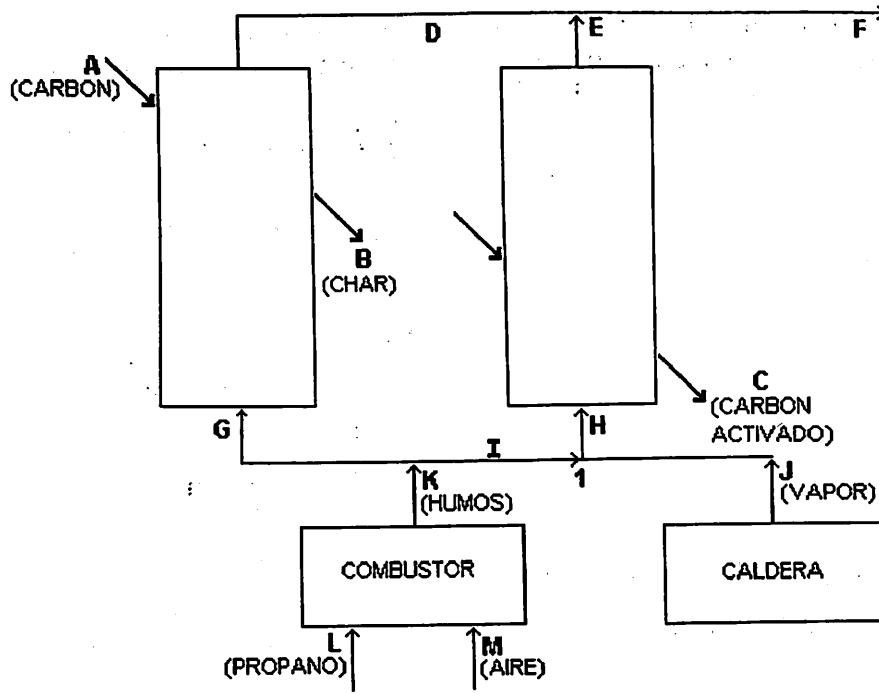


Figura 2 Diagrama de bloques

= 37.5%; 3: propeno = 16.8%; 4: isobutano = 19.3%;
5: butano=15.2%; 6:buteno=8.7%; 7: pentano = 0.2%).

Aire estequiométrico requerido. Se calcula el aire requerido para la combustión estequiométrica del combustible, considerando las respectivas reacciones de combustión para los constituyentes de la mezcla y la composición estándar del aire (79% N₂ y 21% O₂).

Se toma inicialmente como base de cálculo un kmol de combustible:

$$n_{O_2} = 3.5X'_1 + 5X'_2 + 4.5X'_3 + 6.5(X'_4 + X'_5) + 6X'_6 + 8X'_7$$

$$n_{N_2} = 3.762 \cdot n_{O_2} \quad n_{aire} = n_{O_2} + n_{N_2}$$

Donde:

$$n_{O_2} = \text{kmoles O}_2/\text{kmol de comb.}$$

$$n_{aire} = \text{kmoles de aire/kmol de comb.}$$

$$n_{N_2} = \text{kmoles N}_2/\text{kmol de comb.}$$

Humos de combustión y su composición. La cantidad y composición de los humos generados como resultado de dicha combustión se expresa como:

$$n_{CO_2} = n \quad n_{H_2O} = m/2 \quad n_{comb} = n_{N_2} + n_{CO_2} + n_{H_2O}$$

Donde:

$$n_{CO_2} = \text{kmol CO}_2/\text{kmol de comb.}$$

$$n_{H_2O} = \text{kmol H}_2\text{O}/\text{kmol de comb.}$$

$$n_{comb} = \text{kmol humos/kmol de comb.}$$

La composición molar será:

$$y_{CO_2} = n_{CO_2} / n_{comb} \quad y_{H_2O} = n_{H_2O} / n_{comb}$$

$$y_{N_2} = n_{N_2} / n_{comb}$$

Donde y_i = fracción molar del componente i en los humos.

El peso molecular promedio de los humos y su composición en peso pueden calcularse a partir de las siguientes expresiones:

$$PM_h = PM_{CO_2} y_{CO_2} + PM_{H_2O} y_{H_2O} + PM_{N_2} y_{N_2}$$

$$W_{CO_2} = PM_{CO_2} y_{CO_2} / PM_h$$

$$W_{H_2O} = PM_{H_2O} y_{H_2O} / PM_h$$

$$W_{N_2} = PM_{N_2} y_{N_2} / PM_h$$

Siendo:

PM_h = Peso molecular promedio de los humos.

W_i = Fracción mísica del componente i.

3.1.2 Balance de Energía

Calor de reacción y temperatura de llama. El calor de reacción del combustible se evalúa con la composición molar del mismo y el calor normal de combustión de cada uno de los componentes de la mezcla:

$$Q_c = \sum X'_i Q_{ci}$$

Donde:

Q_c = Calor de combustión de un kmol de combustible.

Q_{ci} = Calor de combustión normal del componente i, por kmol de i.

Se realiza luego un balance de entalpía para determinar la temperatura de los humos de combustión (T_k). asumiendo unas pérdidas (Q_L) de 1 - 3% del calor desprendido(7). Se supone inicialmente un valor de $T_k = 1000$ K, y se inicia un proceso iterativo que consiste en evaluar la entalpía total de la corriente de humos y compararla con el calor útil de combustión; si los valores son muy diferentes, se aumenta o se disminuye la temperatura T_k según el caso y se repiten los cálculos hasta obtener la convergencia, según el criterio de que entre dos iteraciones la diferencia de temperatura no sea mayor a un cierto valor asignado.

El cálculo de la temperatura (T_k) se hace mediante la siguiente ecuación resultante del balance ya mencionado:

$$[a(T_k - T_0) + b(T_k^2 - T_0^2)/2 + c(T_k^3 - T_0^3)/3 +$$

$$\lambda_0 y_{H_2O}] n_{comb} = Q_c \left(1 - \frac{Q_L}{100}\right)$$

Siendo:

T_0 = Temperatura de referencia

$a = \sum a_i y_i$

$b = \sum b_i y_i$

$c = \sum c_i y_i \quad i = CO_2, H_2O, N_2$

λ_0 = Calor de vaporización del agua a T_0 .

a_i, b_i, c_i : Coeficientes de las ecuaciones de capacidad calórica.

3.2 CÁLCULOS EN EL PIROLIZADOR

3.2.1 Balance de Masa

Cálculo de la corriente G. La corriente de fluidización en el pirolizador es parte de los humos provenientes de la cámara de combustión. La temperatura de entrada al pirolizador (T_G) se asume igual a T_k dado que la cámara de combustión está lo más cercana posible a los reactores.

Para el cálculo de la velocidad mínima de fluidización, a la temperatura T_p del pirolizador, se asume que los humos tienen las propiedades físicas del aire. La ecuación utilizada, en unidades del sistema C.G.S., es la propuesta por Wen y Yu⁽³⁾:

$$V_{mfp} = \frac{\mu_s}{\rho_s d} \left\{ \left[\left(33.7 \right)^2 + 0.0408 \frac{d^3 \rho_s (\rho_s - \rho_g) g}{\mu_s^2} \right]^{0.5} - 33.7 \right\}$$

Donde:

V_{mfp} = Velocidad mínima de fluidización a T_p .

μ_g = Viscosidad de los humos.

ρ_g = Densidad de los humos.

ρ_s = Densidad de los sólidos.

d = Diámetro de partícula.

g = Aceleración de la gravedad.

El flujo volumétrico a las condiciones del reactor está dado por:

$$U_p = N_p A_p V_{mfp}$$

Siendo:

U_p = Flujo volumétrico.

N_p = Número de fluidización.

A_p = Área de la sección transversal del pirolizador.

Los flujos másicos (MG) y molar (NG) son:

$$MG = U_p \rho_g \quad NG = MG/PM_h$$

Volátiles producidos por pirólisis. El cálculo de los volátiles generados por la pirólisis del carbón se hace con la expresión propuesta por Gregory y Littlejohn⁽⁸⁾:

$$V'_p = 100VM - R' - W'$$

$$\log(R') = 11.47 - 3.961 \cdot \log(T_p) + 0.5VM$$

$$W' = 0.20(100 \cdot VM - 10.9)$$

Donde:

V'_p = Materia volátil desprendida a la temperatura T_p en °C, en % en peso.

VM = Fracción en peso de materia volátil del carbón, en base seca y libre de cenizas.

$$V_p = M_c (1 - x_w - x_z) \cdot V'_p / 100$$

Siendo:

V_p = Masa de volátiles totales producidos en el pirolizador por unidad de tiempo.

M_c = Flujo másico de carbón.

x_w = Fracción másica de humedad en el carbón.

x_z = Fracción másica de cenizas.

Composición de los volátiles producidos. La composición de la materia volátil desprendida por pirólisis se obtiene de las expresiones empíricas propuestas por Field⁽⁹⁾:

$$X_{CH_4} = 0.201 - 0.469VM + 0.241VM^2$$

$$X_{H_2} = 0.157 - 0.868VM + 1.388VM^2$$

$$X_{CO_2} = 0.135 - 0.900VM + 1.906VM^2$$

$$X_{CO} = 0.428 - 2.653VM + 4.845VM^2$$

$$X_{H_2O} = 0.409 - 2.389VM + 4.554VM^2$$

$$X_{TAR} = -0.325 + 7.279VM - 12.880VM^2$$

Donde X_i = Fracción másica del compuesto i.

Determinación de la corriente gaseosa (D) que sale del pirolizador. Esta corriente está conformada por el gas de fluidización, los volátiles producidos por pirólisis y la humedad del carbón. El flujo másico (MD) es:

$$MD = MG + V_p + M_c x_w$$

La composición másica de esta corriente está dada por:

$$X_{CH_4,D} = V_p X_{CH_4} / MD$$

$$X_{H_2,D} = V_p X_{H_2} / MD$$

$$X_{CO,D} = V_p X_{CO} / MD$$

$$X_{TAR,D} = V_p X_{TAR} / MD$$

$$X_{CO_2,D} = (V_p X_{CO_2} + MG \cdot W_{CO_2}) / MD$$

$$X_{H_2O,D} = (V_p X_{H_2O} + MG \cdot W_{H_2O} + M_c x_w) / MD$$

$$X_{N_2,D} = MG \cdot W_{N_2} / MD$$

Igualmente el flujo molar (ND) y su composición se calculan como:

$$ND = MD \left(X_{CH_4,D} / 16 + X_{H_2,D} / 2 + X_{CO,D} / 28 + X_{TAR,D} / 479.6 + X_{CO_2,D} / 44 + X_{N_2,D} / 28 + X_{H_2O,D} / 18 \right)$$

$$y_{CH_4,D} = WD \left(X_{CH_4,D} / 16 \right)$$

$$y_{H_2,D} = WD \left(X_{H_2,D} / 2 \right) \quad y_{CO,D} = WD \left(X_{CO,D} / 28 \right)$$

$$y_{TAR,D} = WD \left(X_{TAR,D} / 479.6 \right)$$

$$y_{CO_2,D} = WD \left(X_{CO_2,D} / 44 \right) \quad WD = MD / ND$$

$$y_{H_2O,D} = WD \left(X_{H_2O,D} / 18 \right) \quad y_{N_2,D} = WD \left(X_{N_2,D} / 28 \right)$$

3.2.2 Balance de energía

Se evalúan los requerimientos energéticos necesarios para mantener la temperatura en el pirolizador en el valor deseado. El balance incluye los calores latente, sensible y de reacción.

La energía requerida para llevar la humedad del carbón hasta la temperatura del pirolizador está dada por:

$$Q_{H_2O} = M_c x_w \left[C_{p_i} (T_b - 21) + \lambda_b + \int_{T_b}^{T_p} C_{p_v} dT \right] / 18$$

Donde:

C_{p_i} = Capacidad calorífica molar del agua líquida.

T_b = Temperatura de ebullición del agua a la presión en el pirolizador.

λ_b = Calor latente molar de vaporización a T_b .

C_{p_v} = Capacidad calorífica molar del vapor de agua en función de temperatura.

El calor sensible de los humos (corriente G) se calcula como:

$$Q_G = NG \left[\int_{T_0}^{T_p} \sum y_i (a_i + b_i T + c_i T^2) dT \right]$$

Siendo:

T_G = Temperatura de la corriente de humos que entra al pirolizador.

El calor sensible del carbón y de los gases de pirólisis, y el calor de reacción se pueden englobar en un solo término (Q_p) haciendo uso del concepto de "capacidad pirocalórica" propuesto por Johnson⁽¹⁰⁾:

$$C_{mp} = 0.174 + 1.98 \cdot 10^{-4} T_p + (0.33 + 5.49 \cdot 10^{-4} T_p) \cdot x_v / (1 - x_w)$$

Donde:

C_{mp} = Capacidad pirocalórica media entre 21°C y T_p (cal/g°C)

T_p = en °C

x_v = Fracción mísica de volátiles.

$$Q_p = M_c (1 - x_w) \cdot C_{mp} (T_p - 21)$$

La energía que es necesario suministrar al pirolizador (Q_{pr}), asumiendo un proceso adiabático, es:

$$Q_{pr} = Q_{H_2O} + Q_G + Q_p$$

3.3 CÁLCULOS EN EL ACTIVADOR

3.3.1 Balance de Masa

Inicialmente se calcula la cantidad y composición de los volátiles desprendidos en el activador. Con esta información y el rendimiento global esperado en sólidos (variable de entrada) se obtiene la cantidad de carbono a gasificar y por lo tanto los requerimientos en vapor de agua.

Volátiles producidos por pirólisis. Se calculan con las expresiones utilizadas en el numeral 3.2.1,

asumiendo que los volátiles producidos en el activador (V_a) son iguales a la diferencia entre los generados a la temperatura de activación (T_a) y los desprendidos a la temperatura del pirolizador (T_p).

$$V'_a = 100VM - R' - W'$$

$$\log(R') = 11.47 - 3.961 \cdot \log(T_a) + 0.5VM$$

$$V_a = M'_c (V'_a - V'_p) / 100$$

Donde: $M'_c = M_c (1 - x_w - x_z)$

Carbono gasificado. Se tendrá en cuenta sólo la reacción C-H₂O ya que a las condiciones de operación su velocidad es considerablemente mayor que la de la reacción C-CO₂.

$$M_{cg} = M'_c (1 - x_s) - (V_p + V_a)$$

Donde:

- M_{cg} = Flujo mísico de carbono gasificado.
- x_s = Rendimiento en sólidos (base pura).

Requerimientos en humos y en vapor de agua. El vapor de agua requerido por la reacción de gasificación es:

$$M'_{H_2O} = 1.5 \cdot M_{cg}$$

La cinética de la reacción de gasificación se favorece al aumentar la presión parcial del vapor de agua, así que resulta ventajoso operar con exceso de vapor respecto al estequiométrico. Sin embargo, el exceso se traduce en mayores requerimientos energéticos ya que la capacidad calórica del vapor es mayor que la de los humos.

Si se utiliza un porcentaje de vapor de agua en exceso ε_{H_2O} , la cantidad de vapor presente en la corriente gaseosa que entra al activador está dado por:

$$M_{H_2O} = M'_{H_2O} \cdot (1 + \varepsilon_{H_2O} / 100)$$

La **velocidad** mínima de fluidización (V_{mfa}) se calcula con la misma ecuación utilizada para el pirolizador, evaluando las propiedades del gas a la temperatura del activador.

El **flujo** volumétrico (U_a) y el **mísico** (MH) correspondiente, a las condiciones del activador, están dados por:

$$U_a = N_a A_a V_{mfa}$$

$$MH = U_a \rho_g$$

Siendo:

U_a = Flujo volumétrico.

N_a = Número de fluidización.

A_a = Área de la sección transversal del activador.

ρ_g = Densidad del gas a T_a .

Inicialmente se asume que el gas tiene el peso molecular del aire y luego se corrige iterativamente, según la composición calculada en cada paso.

Los **flujos** mísicos de humos (MI) y de vapor de agua a agregar (MJ) resultan de los siguientes balances en el nodo 1 del diagrama de bloques:

$$MH = MI + MJ$$

$$MJ = M_{H_2O} - W_{H_2O} MI$$

De donde: $MI = (MH - M_{H_2O}) / (1 - W_{H_2O})$

Composición de la corriente H. Las fracciones mísicas están dadas por:

$$X_{H_2O,H} = M_{H_2O} / MH \quad X_{CO_2,H} = W_{CO_2} MI / MH$$

$$X_{N_2,H} = W_{N_2,H} MI / MH$$

El peso molecular promedio es:

$$PM_H = \left(X_{H_2O,H} / 18 + X_{CO_2,H} / 44 + X_{N_2,H} / 28 \right)^{-1}$$

El flujo molar se calcula de:

$$NH = MH / PM_H$$

Determinación de la corriente de salida (E). Esta corriente estará conformada por los humos secos, el vapor de agua en exceso, los volátiles generados por pirólisis y los productos de la reacción de gasificación ($H_2 + CO$).

$$ME = MH \left(1 - X_{H_2O,H} \right) + M_{H_2O} \cdot \varepsilon_{H_2O} / 100 + V_a + M_{cg} \quad (2,5)$$

$$\text{O su equivalente } ME = MH + V_a + M_{cg}$$

Para el cálculo de su composición se asume que la reacción de desplazamiento ($CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$) alcanza el equilibrio. Se resuelven las siguientes ecuaciones a la temperatura del activador:

$$K_E = \frac{N_{CO_2} N_{H_2}}{N_{H_2O} N_{CO}} \quad N_{CO_2} = \delta + (W_{CO_2} MI + X_{CO_2} V_a) / 44$$

$$N_{H_2} = \delta + (X_{H_2} V_a / 2 + M_{cg} / 12)$$

$$N_{CO} = (X_{CO} V_a / 28 + M_{cg} \cdot 1 / 12) - \delta$$

$$N_{H_2O} = \left(\frac{\dot{M}_{H_2O}}{18} \right) \left(\frac{\varepsilon_{H_2O}}{100} \right) - \delta \quad K_E = 10^{(1855.6/T_a - 1.6945)}$$

Siendo:

N_i = Flujos molares en equilibrio.

δ = Avance de la reacción.

K_E = Constante de equilibrio a T_a (K)

Se calcula K_E a la temperatura (T_a) del activador. Se supone un valor de δ y se calculan

N_{CO} , N_{CO_2} , N_{H_2} , N_{H_2O} . Con estos flujos molares se calcula K_E y se chequea la convergencia.

La composición mísica de la corriente E es entonces:

$$X_{CO_2,E} = N_{CO_2} \cdot 44 / ME \quad X_{H_2,E} = N_{H_2} \cdot 2 / ME$$

$$X_{H_2O,E} = N_{H_2O} \cdot 18 / ME$$

$$X_{CO,E} = N_{CO} \cdot 28 / ME \quad X_{CH_4,E} = X_{CH_4} \cdot V_a / ME$$

$$X_{TAR,E} = X_{TAR} \cdot V_a / ME$$

$$X_{N_2,E} = (X_{N_2,H} MH + X_{N_2} V_a) / ME$$

3.3.2 Balance de Energía

Para calcular la temperatura de la corriente gaseosa que entra al activador (T_H) se hace un balance de entalpía en el nodo 1 del diagrama de bloques, tomando como referencia la temperatura de la corriente J (T_J):

$$NH \left[\int_{T_J}^{T_H} \sum y_{i,H} (a_i + b_i T + c_i T^2) dT \right] =$$

$$NI \left[\int_{T_J}^{T_I} \sum y_{i,I} (a_i + b_i T + c_i T^2) dT \right]$$

Con:

$$y_{H_2O,H} = M_{H_2O} / (18NH)$$

$$y_{CO_2,H} = W_{CO_2} MI / (44NH)$$

$$y_{N_2,H} = W_{N_2} MI / (28NH)$$

Donde:

$y_{i,H}$ = Fracción molar del componente i en la corriente H.

$y_{i,I}$ = Fracción molar del componente i en la corriente I.

La energía necesaria para la desvolatilización en el activador (Q_a), incluyendo el calentamiento del sólido pirolizado, está dada por:

$$Q_a = M_c (1 - x_w) [C_{ma} (T_a - 21) - C_{mp} (T_p - 21)]$$

Donde C_{ma} se calcula de la misma manera como se hizo con C_{mp} (sección 3.2.2), cambiando T_p por T_a .

El calor (Q_H) necesario para calentar la corriente H desde su temperatura T_H hasta la temperatura del activador es:

$$Q_H = NH \left[\int_{T_H}^{T_o} \sum y_{i,H} (a_i + b_i T + c_i T^2) dT \right]$$

La gasificación de carbono requiere de la energía Q_{cg} que se calcula de:

$$Q_{cg} = M_{cg} (\Delta H_r)_a / 12$$

Siendo $(\Delta H_r)_a$ = Calor de reacción de gasificación ($C + H_2O \rightarrow CO + H_2$) a la temperatura del activador.

$$(\Delta H_r)_a = (\Delta H_r)_{T_o} + \int_{T_o}^{T_i} (Cp_{CO} + Cp_{H_2} - Cp_{H_2O} - Cp_C) dT$$

Donde: Cp_{CO} , Cp_{H_2} , Cp_{H_2O} , Cp_C : Capacidades caloricas en función de la temperatura.
 T_o = Temperatura de referencia.

La energía que es necesaria suministrar al activador (Q_{Ar}), asumiendo el proceso adiabático, está dado por:

$$Q_{Ar} = Q_H + Q_a + Q_{cg}$$

3.4 FLUJO MÁSICO Y COMPOSICIÓN DE LA CORRIENTE F

La corriente F resulta de mezclar los gases del pirolizador (MD) y del activador (ME). Se calcula su cantidad y composición másica, de la siguiente forma:

$$MF = MD + ME$$

$$X_{CO_2,F} = (X_{CO_2,D} MD + X_{CO_2,E} ME) / MF$$

$$X_{H_2,F} = (X_{H_2,D} MD + X_{H_2,E} ME) / MF$$

$$X_{H_2O,F} = (X_{H_2O,D} MD + X_{H_2O,E} ME) / MF$$

$$X_{CO,F} = (X_{CO,D} MD + X_{CO,E} ME) / MF$$

$$X_{CH_4,F} = (X_{CH_4,D} MD + X_{CH_4,E} ME) / MF$$

$$X_{TAR,F} = (X_{TAR,D} MD + X_{TAR,E} ME) / MF$$

$$X_{N_2,F} = (X_{N_2,D} MD + X_{N_2,E} ME) / MF$$

De esta manera se obtiene un sistema de ecuaciones resoluble en forma modular secuencial, el cual después de programarse al computador e introducirle la información básica (constantes, parámetros, variables de entrada y valores "semilla" para las iteraciones) permite simular el comportamiento del proceso de activación de hullas, como se verá en un próximo artículo.

4. BIBLIOGRAFÍA

1. Davidson, J.F. And Harrison, D., "Fluidization", Academic Press, London, 1971.
2. Kunii, D. and Levenspiel, O., "Fluidization Engineering" John Wiley and Sons, New York, 1969.
3. Wen, C.Y. and Yu, Y.H., "A Generalized Method for Predicting the Minimum Fluidization Velocity". AIChE J. 12(3), 610, 1966.

4. Babu, S.P., Shah, B. And Talwalkar, A., "Fluidization Correlations for Coal Gasification Materials - Minimum Fluidization Velocity and Fluidized Bed Expansion Ratio", AIChE Symp. Ser., 74(176), 176, 1978.
5. Xavier, A.M., Keairns, D.L., "Study of Kinetics of Carbon Gasification Reactions", Ind. Eng. Chem. Fundam., 20(1), 6, 1981.
6. Wimpress, N., "Generalized Method Predicts Fired-heater Performance". Chemical Engineering, May 22, 1978..
7. Wigmans, T., "Industrial Aspects of Production and Use of Activated Carbons", Carbon, 27(1), 13, 1989.
8. Gregory, D.R. and Littlejohn, R.F. "A Survey of Numerical Data on the Thermal Decomposition of Coal", the BCURA Monthly Bulletin, 29, 173, 1965.
9. Field, M.A., "Rate of Combustion of Size-graded Fractions of Char From a Low-rank Coal Between 1200 K y 2000 K", Comb and Flame, 13, 237, 1969.
10. Johnson, J.L., "Kinetics of Coal Gasification", J. Wiley and Sons, 1979.

**FACULTAD DE
MINAS
DE LA
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE
COLOMBIA**

**NUEVAS
CARRERAS**

◆ **INGENIERÍA DE
SISTEMAS E
INFORMÁTICA**

◆ **INGENIERÍA DE
CONTROL**

Para mayor información marque el número 2 en el desprendible final