

# MODELAMIENTO BIFÁSICO DE UN GASIFICADOR DE CARBÓN: BALANCE DE POBLACIONES SEGÚN EL ALGORITMO DE SUNDARESAN-ADMUNSON.

DOOLEY ARROYAVE

*Ingeniero Químico, Facultad Minas, Universidad Nacional de Colombia, Medellín*

DIEGO ALBERTO CASTAÑO

*Ingeniero Químico, Facultad Minas, Universidad Nacional de Colombia, Medellín*

JAIME AGUIRRE

*Departamento de Procesos Químicos, Facultad de Minas, Universidad Nacional de Colombia, Medellín*

Recibido para revisión 8 de Mayo de 2001, aceptado 20 de Noviembre de 2001, versión final recibida 29 de Noviembre de 2001

**RESUMEN:** En el presente artículo se realizan los balances de materia y energía de un modelo de reactor de dos (2) fases; una “fase emulsión” bien mezclada compuesta por partículas carbonizadas y gas en el mínimo de fluidización, y una segunda “fase burbuja” en flujo tapón sin presencia de sólidos. Los balances de población buscan predecir el rendimiento y concentración de los diferentes gases resultantes del proceso de gasificación. Finalmente se presentan algunos resultados del programa de simulación obtenido a partir del presente modelo; el efecto del tamaño de las burbujas es despreciable con respecto a los resultados obtenidos en un modelo globalizado (ver DYNA N° 130, julio de 2000).

**PALABRAS CLAVES:** Carbón, Modelos de gasificación, Lecho fluidizado, Balances de población de materia.

**ABSTRACT:** In this paper are carried out mass and energy balances in a model of a reactor of two (2) phases; a “emulsion” phase well-mixed with particles of char and gas in minimum of fluidization, and a second “bubble” phase in plug flow without presence of solids. The population balances allow to calculate the yield and concentration of the different gases resulting of the gasification process. Finally, some results of the simulation program obtained with the present model are presented; the effect of the bubble size is negligible in comparison with the results obtained in a lumped model (see DYNA N° 130, july 2000).

**KEYWORDS:** Coal, Gasification models, fluidized bed, Population balances.

## 1 HIPÓTESIS

El conjunto de suposiciones para nuestro caso se describe a continuación:

- El carbonizado alimentado al reactor contiene partículas de tamaño uniforme y conversión  $X_0$ .
- Las partículas arrastradas son capturadas y devueltas al lecho.
- Las partículas de carbonizado ingresan y salen de la zona de gasificación, luego de que una fracción de éstas pasa por la zona de combustión.
- La velocidad de intercambio de partículas entre la zona de gasificación y la zona de combustión es tal que: (a) la cantidad de carbono conducido al interior de la zona de combustión es el justo para completar el consumo de oxígeno en la alimentación y, (b) los gases que entran a

la zona de gasificación desde la zona de combustión no contienen oxígeno.

- Las resistencias al transporte de calor y masa dentro de las partículas, y entre el gas y el sólido, están incluidas en las correlaciones empíricas para la cinética.
- Las partículas reaccionan siguiendo el modelo de núcleo menguante, por lo tanto, la capa de ceniza formada no se desprende de la partícula.
- La fase emulsión tiene una porosidad (constante de vacío),  $\varepsilon_{mg}$  igual que la del lecho a las condiciones de mínima fluidización.
- La fase emulsión está uniformemente mezclada y la concentración de las diversas especies es uniforme en dicha fase.
- La fase burbuja está libre de sólidos.

- Los gases desde la zona de combustión, suben a la fase burbuja en forma de flujo tapón. (Se difiere aquí del modelo original de Davidson y Harrison).
- La temperatura de la zona de gasificación es uniforme.

## 2 BALANCE MÁSICO DEL MATERIAL VOLÁTIL

En la Figura 1 se presenta el diagrama de flujo de gases de alimento y de los productos de gasificación en el reactor.

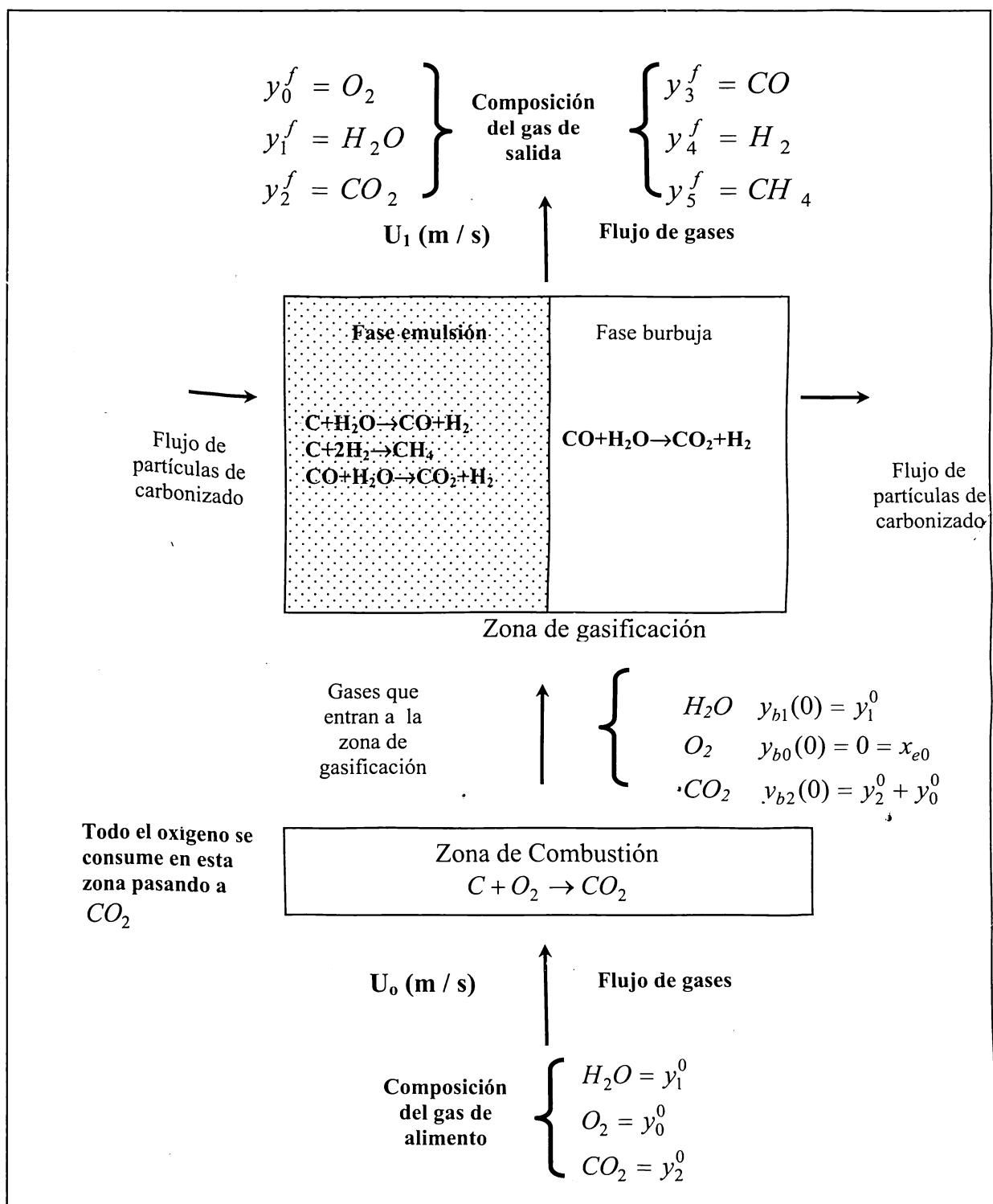


Figura 1. Flujo de gases en el reactor.

En la Tabla 1 se pueden observar los valores del coeficiente estequiométrico,  $\alpha_{ij}$ , para cada especie de acuerdo con el siguiente conjunto de reacciones:



Tabla 1. Coeficientes estequiométricos de los componentes gaseosos (Escobar y Rincón, 1999)

Componente	Reacción		
	Reacción 1 (j=1)	Reacción (j = 2)	Reacción (j = 3)
$O_2$ (i = 0)	$\alpha_{01} = 0$	$\alpha_{02} = 0$	$\alpha_{03} = 0$
$H_2O$ (i = 1)	$\alpha_{11} = -1$	$\alpha_{12} = 0$	$\alpha_{13} = -1$
$CO_2$ (i = 2)	$\alpha_{21} = 0$	$\alpha_{22} = 0$	$\alpha_{23} = 1$
$CO$ (i = 3)	$\alpha_{31} = 1$	$\alpha_{32} = 0$	$\alpha_{33} = -1$
$H_2$ (i = 4)	$\alpha_{41} = 1$	$\alpha_{42} = -2$	$\alpha_{43} = 1$
$CH_4$ (i = 5)	$\alpha_{51} = 0$	$\alpha_{52} = 1$	$\alpha_{53} = 0$

Un balance de masa para las especies gaseosas en la zona de gasificación está representado por el siguiente par de ecuaciones:

Para la fase burbuja:

$$\frac{d}{dL}[UC_{bi}] = \varepsilon_B(K_{be})_{b,i}(C_{ei} - C_{bi}) + F_e x_i^* \quad (1)$$

Para la fase emulsión:

$$\varepsilon_B(K_{be})_{b,i}(C_{ei} - C_{bi}) + F_e x_i^* - \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij} R_j = 0 \quad (2)$$

$$x_i^* = x_{ei} \text{ para } F_e \leq 0 \text{ y donde } F_e = (R_1 - R_2). \quad (3)$$

Como el valor de  $g_3$  es desconocido, éste se calcula utilizando la condición de equilibrio para la reacción de desplazamiento del agua (R3)

$$K_{ws} = \frac{x_{e4} \cdot x_{e2}}{x_{e1} \cdot x_{e3}} \quad (4)$$

Si suponemos que  $(K_{be})_{b,i} = (K_{be})_b$  para todo  $i$ ; y si se multiplica ambos lados de las ecuaciones (1) y (2) por  $L_f/U_0 C_t$  obtendremos:

Para la fase burbuja:

$$\frac{d}{dl}[uy_{bi}] = K(x_{ei} - y_{bi}) - Qx_i^* \quad (5)$$

$$\text{y } \frac{du}{dl} = Q \quad (6)$$

En la fase emulsión, la sumatoria de  $\alpha_{ij} g_j (T, P x_e)$  es para nuestro caso igual a  $(g_1 - g_2)$ , luego:

$$K(x_{ei} - \tilde{y}_{bi}) + Qx_i^* - \frac{\tau_s \alpha f_0}{(1 - X_0)} F(X)[g_1 - g_2] \quad (7)$$

Donde:

$$Q = \frac{\tau_s \alpha f_0}{(1 - X_0)} F(X)[g_1 - g_2] \quad (8)$$

$$K = \frac{\varepsilon_B L_f (K_{be})_b}{U_0} \quad (9)$$

Para el propósito de este trabajo tenemos:

$$y_i^0 = y_{bi}(0) = 0, \text{ para } i = 3, 4, 5$$

$$y_0^0 = x_{e0} = 0, \quad y_i^0 = y_{bi}(0)$$

$$y_2^0 + y_0^0 = y_{b3}(0)$$

$$\text{Siendo: } x_i^* = x_{ei} \quad (10)$$

Las ecuaciones (5) y (6) pueden ser fácilmente integradas para la condición de  $Q > 0$ , en este caso se considera como etapa lenta la gasificación.

Integrando la ecuación (6) con las siguientes condiciones  $u = 1$  a  $l = 0$  obtenemos:

$$u = 1 + Ql \quad (11)$$

Sustituyendo (10) y (11) en (5) obtenemos:

$$y_{bi}(l) = x_{ei} + [y_{bi}(0) - x_{ei}] (1 + Ql)^{(K/Q)-1} \quad (12)$$

La composición de salida de los gases efluentes está dada por la siguiente ecuación:

$$y_i^f = y_{bi}(l) = x_{ei} + [y_{bi}(0) - x_{ei}] (1 + Q)^{(K/Q)-1} \quad (13)$$

Al reemplazar la composición media molar del componente  $i$ -ésimo  $\tilde{y}_{bi}$  en la fase burbuja y llevando a la ecuación (7):

$$Q[y_{bi}(0) - x_{ei}] [1 - (1 + Q)^{K/Q}] - Qx_{ei} + \frac{\tau_s \alpha f_0}{(1 - X_0)} F(X) \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij} g_j (T, P x_e) = 0 \quad (14)$$

Expandiendo la ecuación (14) para cada una de las especies  $x_{ei}$  se tiene:

$$x_{ei} = y_{bi}(0) \left[ \frac{1 - (1+Q)^{-K/Q}}{1 - (1+Q)^{-K/Q} + Q} \right]^+ \\ (1-X_0) \left[ \frac{\tau_s \alpha f_0}{1 - (1+Q)^{-K/Q} + Q} \right] F(X) \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij} g_j(T, P x_e) \quad (15)$$

De la ecuación (8) sabemos que:

$\frac{Q}{[g_1 - g_2]} = \frac{\tau_s \alpha f_0}{(1-X_0)} F(X)$ , por lo tanto la ecuación (15) se transforma en:

$$x_{ei} = y_{bi}(0) \left[ \frac{1 - (1+Q)^{-K/Q}}{1 - (1+Q)^{-K/Q} + Q} \right]^+ \\ [g_1 - g_2] \left[ \frac{Q}{1 - (1+Q)^{-K/Q} + Q} \right] \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij} g_j(T, P x_e) \quad (16)$$

Haciendo:  $A = \left[ \frac{1 - (1+Q)^{-K/Q}}{1 - (1+Q)^{-K/Q} + Q} \right]$  y

$$C1 = \frac{Q}{[g_1 - g_2] \left[ 1 - (1+Q)^{-K/Q} + Q \right]}$$

La ecuación (16) se transforma en:

$$x_{ei} = y_{bi}(0)A + C1 \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij} g_j(T, P x_e) \quad (17)$$

Expandiendo la ecuación (17) para cada  $x_{ei}$  obtenemos:

$$x_{e0} = 0, \text{ (Todo se consume en la zona de combustión)} \quad (18)$$

$$x_{e1} = y_{b1}(0)A - C1 * (g_1 + g_3) \quad (19)$$

$$x_{e2} = y_{b2}(0)A + C1 * g_3 \quad (20)$$

$$x_{e3} = C1 * (g_1 - g_3) \quad (21)$$

$$x_{e4} = C1 * (g_1 - 2g_2 + g_3) \quad (22)$$

$$x_{e5} = C1 * g_2 \quad (23)$$

Tabla 2. Ecuaciones y parámetros utilizados en el modelo de dos fases. (Sundaresan and Admanson, 1979)

Velocidad mínima de fluidización  $U_{mf}$  propuesta por Wen and Yu:

$$U_{mf} = \frac{\mu}{d_P \rho_g} \cdot \left[ \left( \frac{(33.7)^2 + 0.0408 \frac{d_P^3 \rho_g (\rho_s - \rho_g) g}{\mu^2}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} - 33.7 \right]$$

Velocidad de ascenso de las burbujas  $u_b$ :

$$u_b = U_0 - U_{mf} + 0.71 \sqrt{g \cdot d_b}$$

Fracción en volumen de las burbujas en el reactor  $\varepsilon_b$ :

$$\varepsilon_b = \frac{(U_0 - U_{mf})}{u_b}$$

Altura del lecho  $L_f$ :

$$L_f = \frac{L_{mf}}{(1 - \varepsilon_b)}$$

Coeficiente de intercambio  $(K_{be})_b$  (por unidad de volumen de la fase de burbuja y por unidad de tiempo):

$$(K_{be})_b = 4.5 \cdot \frac{U_{mf}}{d_b} + 5.85 \cdot \frac{D^{\frac{1}{2}} g^{\frac{1}{4}}}{d_b^{\frac{5}{4}}}$$

$$\text{con } D = \frac{(8.677 * 10^{-5} \cdot T^{1.75})}{P * 101325.0}$$

Valor de parámetros usados en el trabajo:

$$d_P = 2.5 * 10^{-4} m$$

$$L_{mf} = 2.5 m$$

$$\varepsilon_{mf} = 0.5$$

$$\mu = 5.0 * 10^{-5} \text{ Kg.m/s}$$

## 2.1 Balance de carbono en el reactor

El balance de carbono se hace en todo el reactor (zona de gasificación y zona de combustión). El carbono se alimenta a través de las partículas de carbonizado, y en el gas de alimento si éste contiene  $CO_2$ ,  $CO$  y  $CH_4$ . El carbono sale en las partículas retiradas del reactor las cuales alcanzan un nivel de conversión promedio  $X$  y en los gases producto de las reacciones de gasificación, por lo tanto la conversión promedio del carbono en las partículas a la salida del reactor está dada por:

$$\bar{X} = X_0 + \frac{(1-X_0)}{\alpha} \left[ (1+Q) \left\{ y_2^f + y_3^f + y_5^f \right\} - \left\{ y_2^0 + y_3^0 + y_5^0 \right\} \right] \quad (24)$$

## 2.2 Balance de energía total en el sistema

Se supone que la entalpía, la densidad y el peso molecular de las cenizas son iguales a las del carbono; se trata de supuestos que facilitan los cálculos e introducen poco error siempre y cuando el contenido de cenizas del carbonizado sea bajo. La densidad del carbono ( $\rho_0$ ), la fracción de carbono base en la partícula ( $W_b$ ) y el volumen de partícula ( $V_p$ ) permanecen constantes.

La ecuación que nos determina la temperatura de salida de los gases ( $T$ ) está dada por la siguiente ecuación:

$$\frac{\alpha}{W_b(1-X_0)} \left[ (1-W_b X_0) H_C(T_s) - (1-W_b \bar{X}) H_C(T) \right] - (1+Q)^* \sum_{i=1}^6 y_i^f H_i(T) + \sum_{i=1}^6 y_i^0 H_i(T_g) = 0 \quad . \quad (25)$$

La entalpía total del componente  $i$  se calcula de la siguiente forma:

$$H_i(T) = \Delta H_f^0 + H_{s,i}(T), \text{ para } i = 0 - 6.$$

$\Delta H_{f,i}^0$  = Entalpía de formación del componente  $i$  a 298 K

$H_{s,i}(T)$  = Entalpía sensible del componente  $i$ , referida a  $T^0(298K)$ .

### 3 MÉTODO DE SOLUCIÓN.

En el programa de cálculo se debe especificar datos como la presión de operación del sistema ( $P$ ), el tiempo de residencia ( $\tau$ ), la composición de los gases de alimento (oxígeno ( $y^0_0$ ) y agua ( $y^0_1$ )), y el más característico del trabajo, el diámetro de burbuja ( $d_b$ ); el resto de datos son constantes y siempre van a estar especificados de una forma fija al comenzar el programa, aunque algunas veces pueden ser modificados para observar qué efectos pueden tener en los resultados finales. En nuestro caso las únicas variables que se cambian durante las corridas son las mencionadas anteriormente.

Con las ecuaciones descritas en la sección anterior, se puede calcular el valor de las composiciones de los gases producidos en el reactor ( $y_i^f$ ), la conversión promedio de las partículas ( $X$ ) y la temperatura en la zona de gasificación ( $T$ ), todo con la influencia del diámetro de burbuja ( $d_b$ ).

La solución del sistema de ecuaciones se hace a través de los siguientes pasos:

- Especificar los parámetros  $P, \tau, y_{0,i}^0$  y  $d_b$ . El programa escoge por si mismo una  $T$  y un vector  $x_{ei}$  para comenzar a iterar dependiendo básicamente de  $P$  y  $d_b$ . En nuestro caso  $T_p$  siempre es menor que  $T$ , luego hacemos  $T = T_p$ .
  - Calculamos  $G_1$  y  $G_2$  con base en la temperatura y las fracciones de las especies en la fase emulsión ( $x_{ei}$ ) con las que arranca el programa empleando las correlaciones de Johnson.
  - Determinar  $Z, \overline{F(X)}$  y  $X$  iterando hasta obtener la aproximación deseada.
  - Recalcular el vector de composiciones  $x_{ei}$ .
  - Recalcular el valor de  $G_1$  y  $G_2$  usando las correlaciones de Johnson y el vector  $x_{ei}$  calculado.
  - Comparar los valores de  $G_1$  y  $G_2$  con los valores supuestos, iterar hasta que se obtenga la precisión deseada.
  - Calcular la temperatura  $T$  del reactor, compararla con la temperatura supuesta, iterar hasta obtener la aproximación deseada, comenzando desde el primer paso.
  - Una vez se consigue el valor deseado de el vector  $x_{ei}$  y  $T$ , se procede a calcular el vector de fracciones mol de los productos  $y_i^f$ , que depende básicamente de  $x_{ei}$ .

#### **4 ETAPAS EN LA SOLUCIÓN DEL MODELO**

#### 4.1 Cálculo de la conversión promedio de las partículas:

Se remite al lector, en lo concerniente a este numeral, al artículo sobre el mismo tema presentado en el N° 130 de la revista *DYNA* de la Facultad de Minas (ver bibliografía).

#### 4.2 Fase emulsión: Vector inicial de composiciones - x

Después de muchos intentos con diferentes vectores de fracciones mol de la fase emulsión para comenzar a iterar, se obtuvieron dos que cumplían para un amplio intervalo de valores tanto para el tiempo de residencia como para la presión y el diámetro de burbuja. En el presente modelo se trabajó con tres presiones diferentes, 1, 5 y 10 atmósferas; tiempos de residencia que alcanzaban hasta 5000 seg. (83.3 min), más que suficiente para una gasificación en lecho fluidizado; y diámetros de burbuja que van desde 0.03 m hasta 0.4 m (más de 0.1m sólo sirve para efectos de comparación e influencia del diámetro de burbuja en la conversión del carbono, ya que experimentalmente se utilizan diámetros mucho menores, del orden de 5 mm).

En nuestro caso no hay necesidad de suponer un vector inicial de fracciones de productos. El programa escoge un

vector (uno de los dos  $x_{ei}$ ) para cada corrida dependiendo principalmente de la presión y del diámetro de burbuja, ya que cada uno posee una temperatura de inicio diferente. Cabe aclarar que los vectores deben dar valores válidos para  $G_1$  y  $G_2$ , de tal forma que la iteración pueda continuar. Cada vector tiene la posibilidad de ser utilizado para alimento de oxígeno entre 0.1 y 0.29 (de vapor de agua entre 0.9 y 0.71 respectivamente).

Suponiendo que los gases forman una mezcla ideal, la presión parcial de cada componente se calcula como:  $p_i = P x_{ei} \quad i = 0 - 5$

#### 4.3 Temperatura inicial del reactor, $T$

Al igual que en el punto anterior, el programa comienza con una temperatura dependiendo del vector de fracciones molar de la fase emulsión escogido por el mismo. No puede ser arbitraria, por lo que se determinó después de ensayar con varias temperaturas y comparando los resultados con pruebas ya realizadas y confirmadas, pero a pequeños diámetros de burbuja que es precisamente cuando los resultados de ambos modelos deben ser similares.

#### 4.4 Valores iniciales para $\bar{X}$ y $Z$ . Cálculo de $\bar{X}$

Inicialmente se supone  $Z = 1.5$  y luego se calcula  $\bar{F}(\bar{X})$ .

La resolución de la integral para  $\bar{F}(\bar{X})$  se encuentra explicada perfectamente en la página 62 de Escobar y Rincón, basta con decir que involucra series de Taylor y el método de Gauss - Legendre.

#### 4.5 Cálculo del vector final de composiciones, $x_{ei}$

Con los nuevos valores de  $Z$ ,  $\bar{X}$  y  $\bar{F}(\bar{X})$  y los demás que están involucrados en el ciclo, procedemos a recalcular las fracciones molares de cada componente en la fase emulsión del reactor. Según el algoritmo planteado en el capítulo anterior tenemos:

$$\text{Para el } O_2: \quad x_{e0} = 0$$

$$\text{Para el } H_2O: \quad x_{e1} = Cl(G_1 + g_3)$$

$$\text{Para el } CO_2: \quad x_{e2} = Clg_3$$

$$\text{Para el } CO: \quad x_{e3} = Cl(G_1 - g_3)$$

$$\text{Para el } H_2: \quad x_{e4} = Cl(G_1 - 2G_2 + g_3)$$

$$\text{Para el } CH_4: \quad x_{e5} = ClG_2$$

El valor de  $g_3$  se calcula empleando la constante de equilibrio para la reacción de desplazamiento del agua (reacción R3)  $Kws$ :

$$Kws = \frac{x_e(H_2)x_e(CO_2)}{x_e(H_2O)x_e(CO)}$$

La constante de equilibrio  $Kws$  está dada por la expresión de las correlaciones de Johnson. Reemplazando los  $x_{ei}$  por su respectiva expresión se obtiene:

$$Kws = \frac{[Cl(G_1 - 2G_2 + g_3)Clg_3]}{[Cl(G_1 + g_3)Cl(G_1 - g_3)]}$$

Multiplicando los términos y simplificando resulta una ecuación cuadrática:

$$aag^2 + bbg_3 + cc = 0, \text{ donde:}$$

$$aa = Cl(Kws - 1)$$

$$bb = 2ClG_2 - A_{b2}(0) - ClG_1 - Ay_{b1}(0)Kws$$

$$cc = Ay_{b1}(0)G_1Kws - ClG^2_1Kws - AG_1y_{b2}(0) + 2Ay_{b2}(0)G_2$$

Con los coeficientes se encuentran las dos raíces de la ecuación cuadrática correspondientes a dos posibles valores de  $g_3$ , se selecciona el valor positivo (al ser una constante cinética cuyas unidades son segundo<sup>-1</sup> no tiene sentido un valor negativo), si las dos raíces son positivas se analizan las ecuaciones para calcular las fracciones molares de los productos, seleccionando la raíz de tal forma que dichas fracciones sean positivas y menores que uno.

#### 4.6 Determinación de la temperatura del sistema

La nueva temperatura del reactor se obtiene a partir del balance de energía y calculando los coeficientes del polinomio final de grado cuatro por el método de Laguerre. En todos los casos se obtienen cuatro raíces, una raíz real positiva, una raíz real negativa y una raíz imaginaria con su complemento. De estas cuatro posibles temperaturas se selecciona la raíz real positiva.

La nueva temperatura se utiliza para recalcular la conversión promedio y las fracciones molares de los productos, con las cuales se recalcula a su vez la temperatura del reactor. El programa usa una aproximación de la temperatura de 0.01 K.

- **Cálculo de  $H_C(Ts)$**

$$H_C(Ts) = -269.67 - 0.57508Ts + 5.6321 * 10^{-3}Ts^2 - 2.3672 * 10^{-6}Ts^3 + 3.9768 * 10^{-10}Ts^4$$

- **Cálculo de  $H_i(Tg) \quad i = 0, 1, 2$**

$$H_0(Tg) = -59993.7 + 6.8803Tg + 1.6899 * 10^{-3}Tg^2 - 1.323 * 10^{-7}Tg^3$$

$$H_1(Tg) = -1958.6 + 6.1393Tg + 1.5535 \cdot 10^{-3} Tg^2 - 3.07799 \cdot 10^{-7} Tg^3$$

$$H_2(Tg) = -96263.9 + 5.655Tg + 6.6391 \cdot 10^{-3} Tg^2 - 2.4797 \cdot 10^{-6} Tg^3 + 3.8049 \cdot 10^{-10} Tg^4$$

- Cálculo de  $P_0$

$$P_0 = \frac{\alpha}{W_b(1-X_0)} \left[ (1-W_b)H_C(T_s) - a_6(1-W_b\bar{X}) \right] - (1+Q) \sum_{i=0}^5 y_i^f a_i + \sum_{i=0}^2 y_i^0 H_i(Tg)$$

- Cálculo de  $P_1$

$$P_1 = \left[ \frac{-\alpha(1-W_b\bar{X})b_6}{W_b(1-X_0)} \right] - (1+Q) \sum_{i=0}^5 y_i^f b_i$$

- Cálculo de  $P_2$

$$P_2 = \left[ \frac{-\alpha(1-W_b\bar{X})c_6}{W_b(1-X_0)} \right] - (1+Q) \sum_{i=0}^5 y_i^f c_i$$

- Cálculo de  $P_3$

$$P_3 = \left[ \frac{-\alpha(1-W_b\bar{X})d_6}{W_b(1-X_0)} \right] - (1+Q) \sum_{i=0}^5 y_i^f d_i$$

- Cálculo de  $P_4$

$$P_4 = \left[ \frac{-\alpha(1-W_b\bar{X})e_6}{W_b(1-X_0)} \right] - (1+Q) \sum_{i=0}^5 y_i^f e_i$$

- Solución de la ecuación de grado cuatro con respecto a  $T$

$$P_0 + P_1T + P_2T^2 + P_3T^3 + P_4T^4 = 0$$

Recalcular la conversión promedio y las fracciones molares de los productos, con las cuales se recalcula a su vez la temperatura del reactor, hasta que converja esta última.

En la siguiente tabla, el coeficiente  $a_i$  correspondiente a la suma de la entalpía de formación con el término independiente para el cálculo de la entalpía con la temperatura; los demás términos para el polinomio son exactamente iguales a los presentados en el artículo original de Sundaresan – Amundson del modelo poblacional (*Sundaresan and Admunsion, 1979*).

$$H_i(T) = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 + e_i T^4$$

Tabla 3. Coeficiente del polinomio de entalpía.

Componente	$a_i$
$O_2$ (i= 0)	-1958.6
$H_2O$ (i= 1)	-59993.7
$CO_2$ (i= 2)	-96263.9
$CO$ (i= 3)	-28334.3
$H_2$ (i= 4)	-2124.8
$CH_4$ (i= 5)	-19524.5
$C$ (i= 6)	-269.67

#### 4.7 Cálculo de las composiciones de los productos, $y_i^f$

Este último vector se calcula una vez haya convergido tanto la temperatura como el vector de composiciones de la fase emulsión, a través de las ecuaciones.

#### 5 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DEL MODELO BIFÁSICO DE SUNDARESAN–AMUNDSON.

El programa de cálculo del presente modelo, desarrollado y validado por los autores, permite simular diferentes escenarios y a su vez decidir sobre las condiciones de diseño y operación de un reactor bifásico con las características descritas inicialmente.

A continuación, y solo a título ilustrativo, se presentan en forma gráfica algunos de los puntos simulados. Las condiciones fueron las siguientes:

$$W_b = 0.8, X_0 = 0.0, f_0 = 1.0.$$

La temperatura de pre-tratamiento se toma igual a la de gasificación, esto se consigue en el programa introduciendo un valor pequeño para  $T_P$ , ( $T_P = 298K$ ),  $P = 1$  atm,  $\tau = 1500$  s, y ( $O_2$ ) = variable,  $\alpha = 0.9099$ ,  $T_g = 373$  K,  $d_b = 0.1$  m.

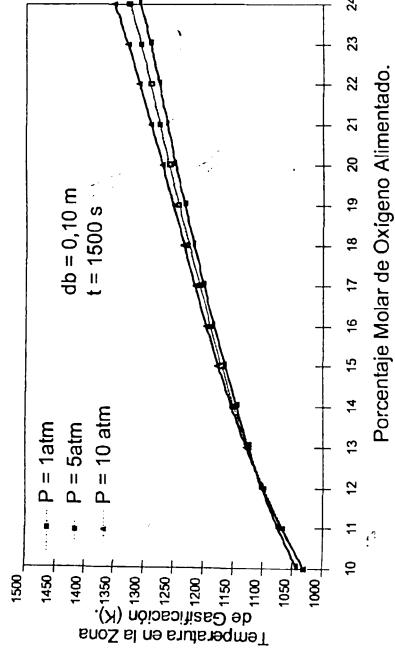


Figura 2. Efecto de la presión en la temperatura del reactor.

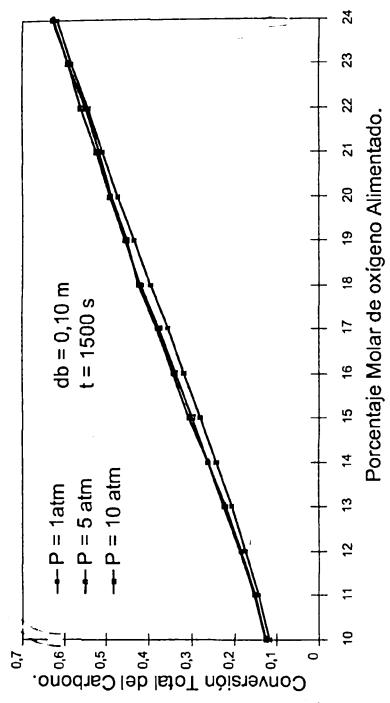


Figura 3. Efecto de la presión en la conversión del carbono.

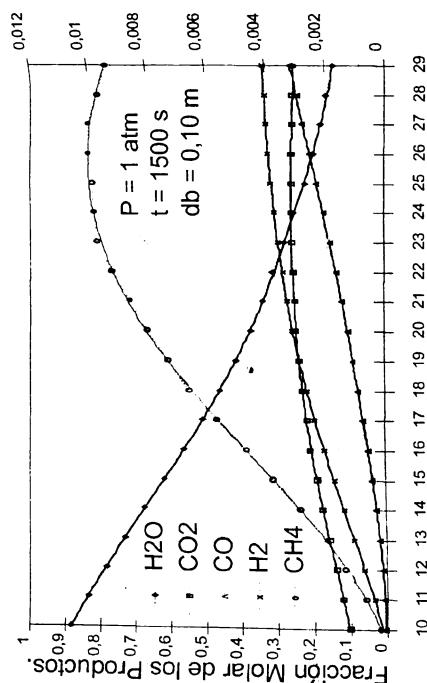


Figura 4. Composición molar de los gases.

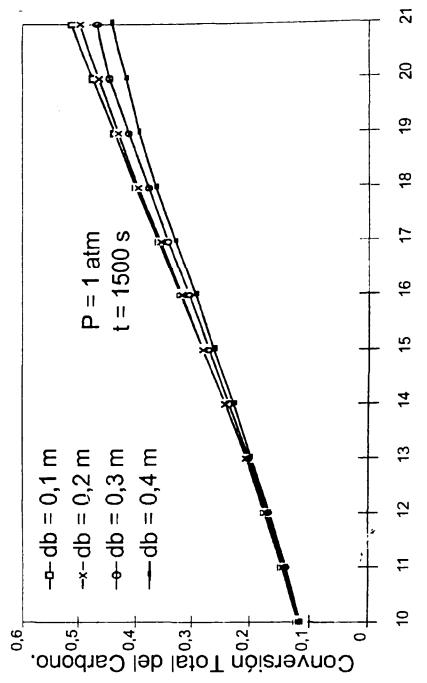


Figura 5. Efecto del diámetro de burbuja.

**6 NOTACIÓN**

$C_e$	Concentración en la fase emulsión, Kmol/m <sup>3</sup>	$u_T$	Velocidad terminal de los sólidos, m/s
$C_b$	Concentración en la fase burbuja, Kmol/m <sup>3</sup>	$U$	Velocidad superficial de los gases a la altura "l", m/s
$d_b$	Diámetro de burbuja, m	$U_o$	Velocidad superficial de los gases de alimento, m/s
$d_p$	Diámetro de las partículas de carbonizado alimentadas, m	$U_{mf}$	Velocidad de mínima fluidización, m/s
$D$	Difusividad del gas, m <sup>2</sup> /s	$W_b$	Fracción de carbono base en la partícula de carbonizado; carbono base/ (carbono base + ceniza)
$F_c$	Velocidad de generación de moles en exceso, Kgmol/m <sup>3</sup> (volumen del reactor) s	$X$	Conversión del carbono base en la partícula de carbonizado; carbono base que ha reaccionado/ carbono base alimentado
$f_0$	Factor de reactividad	$X_0$	Conversión del carbono base en partículas alimentadas.
$\overline{F(X)}$	Dependencia funcional de la velocidad de cambio de la conversión con la conversión	$\overline{X}$	Conversión promedio de las partículas en el lecho
$g$	Aceleración debida a la gravedad, m/s <sup>2</sup>	$x_e$	Vector de fracciones mol en la fase emulsión.
$g_j$	$j = 1,2,3$ Dependencia de R <sub>j</sub> de la temperatura y las presión parcial, s <sup>-1</sup>	$x^*$	Vector definido en la ecuación 10.
$H_c(T)$	Entalpía molar del carbono (sólido), Kcal/Kmol	$y^0$	Vector de fracciones mol en los gases de alimento
$H_i(T)$	Entalpía parcial molar del componente <i>i</i> , Kcal/Kmol	$y^f$	Vector de fracciones mol en los gases efluentes
$H_{s,i}(T)$	Entalpía sensible del componente <i>i</i> , referida a $T^0$ (298K)	$y_b$	Vector de fracciones mol en la fase burbuja
$H_{s,C}(T)$	Entalpía sensible del carbono a $T$ , referida a $T^0$	$y$	Vector de fracciones mol promedio sobre la fase burbuja
$k_{ws}$	Constante de equilibrio (reacción de desplazamiento del agua).		
$K$	Coeficiente de transferencia burbuja-emulsión (adimensional).		
$(K_{b,e})_b$	Coeficiente de transferencia de masa burbuja-emulsión, s <sup>-1</sup>		
$l$	Coordenada adimensional de la altura del reactor		
$L$	Coordenada de altura del reactor, m		
$L_f$	Altura del reactor a las condiciones de operación, m		
$L_{mf}$	Altura del reactor al mínimo de fluidización, m		
$P$	Presión en el reactor, atm		
$P_i$	Presión parcial del componente <i>i</i> , atm		
$Q$	Velocidad de generación de moles en exceso (adimensional)		
$R_j$	$j = 1,2$ Velocidad de reacción, Kmol de carbono/m <sup>3</sup> s		
$T$	Temperatura de la zona de gasificación, K		
$T_p$	Temperatura de pretratamiento del carbonizado, K		
$T_s, T_g$	Temperatura de sólidos y gases en el alimento, K		
$T^0$	Temperatura de referencia, 298 K		
$u$	Velocidad superficial a la altura "l", (adimensional)		
$u_b$	Velocidad de ascenso de la burbuja, m/s		
$u_f$	Velocidad superficial en la salida del reactor (adimensional)		
		$i$	Componente <i>i</i> -ésimo, 0: Oxígeno ( $O_2$ ), 1: Agua ( $H_2O$ ), 2: Dióxido de carbono ( $CO_2$ ), 3: Monóxido de carbono ( $CO$ ), 4: Hidrógeno ( $H_2$ ), 5: Metano ( $CH_4$ ), 6: Carbono ( $C$ ).

**SÍMBOLOS GRIEGOS:**

$\alpha$	Relación de flujo molar carbono-gases de alimentación
$\alpha_{ij}$	Coeficiente estequiométrico del componente <i>i</i> en la reacción <i>j</i> . (positivo para los productos y negativo para los reactivos)
$\alpha^*$	Parámetro de la cinética de Johnson
$\rho_0$	Densidad del carbonizado alimentado, Kg/m <sup>3</sup>
$\rho_g$	Densidad de los gases, Kg/m <sup>3</sup>
$\rho_s$	Densidad del sólido en el reactor, Kg/m <sup>3</sup>
$\tau$	Tiempo de residencia efectivo de las partículas, s
$\tau_s$	Tiempo medio de residencia de las partículas, s
$\varepsilon_B$	Fracción en volumen de burbujas en el reactor
$\varepsilon_{mf}$	Vacio a las condiciones de mínima fluidización
$\mu$	Viscosidad del gas, Kg/m s
$\Delta H^0_{f,C}$	Entalpía de formación del carbono a $T^0$
$\Delta H^0_{f,i}$	Entalpía de formación del componente <i>i</i> a $T^0$

**SUBÍNDICES:**

$i$	Componente <i>i</i> -ésimo, 0: Oxígeno ( $O_2$ ), 1: Agua ( $H_2O$ ), 2: Dióxido de carbono ( $CO_2$ ), 3: Monóxido de carbono ( $CO$ ), 4: Hidrógeno ( $H_2$ ), 5: Metano ( $CH_4$ ), 6: Carbono ( $C$ ).
-----	--

## 7 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Caram, H. and Admunson, N., *Fluidized bed gasification reactor modeling I. Model description and numerical results for a single bed*, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., vol 18, No. 1, pp 80-96., 1979.
- De Sousa, M., *Comprehensive Modelling and Simulation of Fluidized Bed Boiler and Gasifiers*, Fuel, vol. 68, pp 1507-1521, december 1989.
- Escobar, J., Rincón, J. y Aguirre, J., *Gasificación de carbonizados. Simulación aplicando el modelo monofásico de Sundaresan-Admudso*. Dyna, N° 130, pp. 1-12, julio de 2000.
- Escobar, P., Rincón J., *Modelo Simple de Gasificación de Residuo Carbonoso en Lecho Fluidizado*. Universidad Nacional de Colombia, sede Medellín, Facultad Nacional de Minas, Ingeniería Química, 1999.

- Froberg, C., *Introduction to Numerical Analysis*, Addison-Wesley Publishing Company, cap. 10, pp. 208-221, 1972.
- Johnson, J., *Kinetics of coal gasification*, John Wiley & Sons, cap. 6, New York, pp.296-298, 1979.
- Ocampo A., *Estado Actual de la Gasificación de Carbón*. Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Facultad Nacional de Minas, Medellín. 137 pgs. 1993.
- Sundaresan, S. and Admunson, N., *Studies in char gasification I, a lumped model*, Chemical Engineering Science, vol 34, pp 345-354., 1979.
- Sundaresan, S. and Admunson, N., *Studies in char gasification II, the Davidson-Harrison two phase model of fluidization*, Chemical Engineering Science, vol 34, pp 355-358., 1979.
- Sundaresan, S. and Admunson, N., *Studies in char gasification III, the combustion zone*, Chemical Engineering Science, vol 34, pp 359-364., 1979.