



Universidad
Zaragoza



Escuela de
Ingeniería y Arquitectura
Universidad Zaragoza

Trabajo Fin de Grado en Ingeniería de Tecnologías Industriales

Desarrollo de modelos matemáticos y diseño de los principales equipos de una planta de gasificación de biomasa para producción de electricidad.

Autor

Guillermo Figueruelo Malo

Director

Alberto Gonzalo Callejo



**Departamento de Ingeniería
Química y Tecnología
del Medio Ambiente**
Universidad Zaragoza

Escuela de Ingeniería y Arquitectura. Universidad de Zaragoza.
Septiembre 2014

TÍTULO: Desarrollo de modelos matemáticos y diseño de los principales equipos de una planta de gasificación de biomasa para producción de electricidad

AUTOR: Guillermo Figueruelo Malo

DIRECTOR: Alberto Gonzalo Callejo

DEPARTAMENTO: Ingeniería Química y Tecnologías del Medio Ambiente

Desarrollo de modelos matemáticos y diseño de los principales equipos de una planta de gasificación de biomasa para producción de electricidad.

RESUMEN

Este proyecto sigue la línea marcada por el trabajo de la asignatura Procesos Químicos Industriales y que llevó por título "Diagrama de bloques y balances para una planta de gasificación de biomasa en lecho fluidizado para 600kg/h de alimentación de madera de pino con el objetivo de producir electricidad en un motor".

El proyecto realizado es eminentemente teórico. Se ha generado una herramienta que permite predecir los productos resultantes de procesar cualquier biomasa vía gasificación.

Tras haber realizado una revisión bibliográfica y selección de datos de partida utilizando artículos científicos y bases de datos como Phillis del Energy research Center of the Netherlands (ECN), se ha desarrollado un modelo teórico del gasificador a partir de los balances de materia y energía y de los principales equilibrios de las reacciones de gasificación. Para la realización de esta tarea se ha utilizado el software Engineering Equation Solver (EES).

También se ha realizado el dimensionamiento del resto de equipos principales como son el separador ciclónico o el intercambiador de calor, así como un análisis del comportamiento mecánico del gasificador implementado en Abaqus.

Tras la fase de diseño, se ha procedido a la simulación del sistema completo, tanto en EES como en Aspen Hysys, comparando los parámetros y resultados obtenidos entre estas dos simulaciones y resultados experimentales encontrados en la bibliografía revisada. El sistema completo se trata de una planta de producción de electricidad a partir de la combustión, en un motor de combustión interna, del gas de síntesis generado a partir de la gasificación de 600 kg/h de biomasa.

ÍNDICE

1. OBJETIVO Y ALCANCE DEL PROYECTO.....	1
2. ANTECEDENTES	2
2.1 CONTEXTO GLOBAL.....	2
2.2 TIPOS DE BIOMASA	2
2.3 VENTAJAS DEL USO ENERGÉTICO DE LA BIOMASA.....	3
2.4 INCONVENIENTES DEL USO ENERGÉTICO DE LA BIOMASA.....	4
2.5 PROCESO DE GASIFICACIÓN DE BIOMASA	5
3. EQUIPOS DE LA PLANTA	6
3.1 REACTOR DE GASIFICACIÓN	6
3.2 SEPARADOR CICLÓNICO	7
3.3 INTERCAMBIADOR DE CALOR.....	7
4. DESARROLLO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS.....	9
4.1 REACTOR DE GASIFICACIÓN	10
4.1.1 DISEÑO MECÁNICO DEL REACTOR DE GASIFICACIÓN	14
4.2 SEPARADOR CICLÓNICO	17
4.3 INTERCAMBIADOR DE CALOR.....	20
5. RESULTADOS.....	23
6. CONCLUSIONES.....	27
7. REFERENCIAS	28
8. ANEXOS	30
8.1 TABLAS PARA EL CÁLCULO DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO	30
8.2 ENTORNO DE ABAQUS	31
8.3 ENTORNO DE HYSYS.....	33
8.4 ENTORNO DE EES.....	35

1. OBJETIVO Y ALCANCE DEL PROYECTO

1. OBJETIVO Y ALCANCE DEL PROYECTO

El Grado en Ingeniería de Tecnologías Industriales tiene una clara singularidad que lo diferencia del resto de títulos de grado de Ingeniería por su carácter multidisciplinar e integrador de todas las tecnologías industriales y su amplia base formativa generalista.

Este Trabajo Fin de Grado intenta seguir la senda marcada durante estos cuatro años de formación y huye de la especialización en un tema concreto, para abarcar en cantidad y fondo suficiente, varias de las ramas incluidas dentro del plan de estudios como son la Ingeniería Química, Energías, Ingeniería Térmica o la Ingeniería Mecánica entre otras.

En vista del considerable interés que está adquiriendo mundialmente el proceso de gasificación de biomasa, y más recientemente de residuos, se ha hecho preciso el desarrollo de modelos matemáticos que permitan predecir el comportamiento de los equipos incluidos en dicho proceso. Igualmente, se pretende realizar el diseño básico de alguno de los equipos utilizados para el acondicionamiento del gas producto como el separador ciclónico o el intercambiador de calor.

2. ANTECEDENTES

2. ANTECEDENTES

2.1 CONTEXTO GLOBAL

El incremento demográfico y el constante aumento de la producción de bienes y servicios, generan un alza sostenida de la demanda de energía a escala global. Si queremos satisfacer esta creciente necesidad y a la vez respetar el equilibrio de los ecosistemas de la Tierra, resulta imprescindible investigar nuevas formas de producción y gestión de la energía que nos permitan conciliar el crecimiento con el respeto al medio ambiente.

Desde la revolución industrial, acaecida a finales del Siglo XVIII, la capacidad humana de alterar su entorno ha crecido exponencialmente. En la última década, más de dos siglos después de que Watt desarrollase su máquina de vapor, comenzamos a ser conscientes de los problemas ecológicos que se han derivado de recorrer la senda industrial. Los combustibles fósiles siguen siendo actualmente, al igual que en el inicio del proceso de industrialización, las fuentes básicas de energía. La continua emisión a la atmósfera de toneladas de CO₂, derivadas de la quema de combustibles fósiles está dando lugar a una transformación del clima de la Tierra cuyas consecuencias ecológicas, económicas y sociales son imprevisibles.

El viento, el sol y el oleaje son recursos que hemos aprendido a aprovechar para producir energía de forma limpia. Pero existe otro recurso que también se renueva continuamente, la biomasa. Del total de las energías renovables, que suponen el 13% del consumo energético mundial, el 80% corresponde al consumo de biomasa suponiendo el 10% del consumo energético mundial. La siguiente energía renovable más utilizada es la hidroeléctrica con un 16% [1]. En la Comunidad Autónoma de Aragón, se disponen actualmente de aproximadamente 3 MW de potencia instalada de gasificación con biomasa, existiendo algunos proyectos en distintos estados de ejecución, lo que hace que puedan estimarse para 2020 los 15 MW de potencia instalada, lo cual supondría una producción acumulada de energía a lo largo de todo el periodo de 94.864 MWh, con 30.000 MWh en 2020 [2].

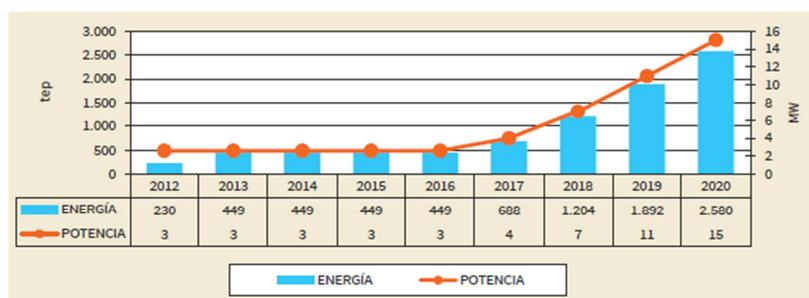


Fig 1. *Prospectiva de potencia instalada y de producción de energía eléctrica en Aragón en gasificación con biomasa. Periodo 2013 - 2020.*

2.2 TIPOS DE BIOMASA

La biomasa puede definirse como todo material orgánico no mineralizado que pueda ser usado para la producción de energía.

Habitualmente la biomasa es clasificada en dos grandes grupos: primaria y residual [3]. La primaria se refiere a cultivos energéticos, es decir, la producción y gestión de diversos tipos de vegetales con el fin último de obtener energía. Con biomasa residual o de proceso, denominamos a aquella que se extrae del material de desecho resultante de diversas actividades productivas, ya sean agrícolas, industriales o forestales.

En cuanto al origen y tipos de residuos generados, se distinguen cuatro categorías generales:

- Residuos agrícolas, forestales y cultivos energéticos. Los residuos agrícolas se obtienen de la planta cultivada al separar la parte utilizada por la industria alimentaria de la que no se destina a ese fin, que es la interesante desde el punto de vista energético. Por su parte los residuos forestales provienen del mantenimiento de bosques y de su explotación para el uso industrial de la madera. Por último, los cultivos energéticos, clasificados en herbáceos, de madera y acuáticos; se generan con el único fin de producir biomasa transformable en combustible. Es por ello que su rentabilidad energética y competencia con el sector alimenticio son bastantes discutidas sobre todo en países en vías de desarrollo como Brasil.
- Residuos de industrias forestales y agroalimentarias. Estos residuos pueden ser valorados energéticamente tras ser originados en industrias madereras, papeleras, agroalimentarias...
- Residuos urbanos. Los denominados RSU (Residuos Sólidos Urbanos) se generan en los núcleos de población como consecuencia de la actividad humana diaria y a pesar de tener una composición muy variable, su contenido en materia orgánica suele ser del orden del 50%.
- Residuos ganaderos. La actividad ganadera genera los comúnmente denominados purines, compuestos por deyecciones líquidas, excrementos, sólidos y el agua utilizada en las granjas. Se puede obtener una valoración energética del residuo mediante el tratamiento biológico al que debe ser sometido para ser empleado como abono en campos de cultivo.

2.3 VENTAJAS DEL USO ENERGÉTICO DE LA BIOMASA

La energía renovable con biomasa tiene un enorme potencial de desarrollo en España, segundo país de la Unión Europea en superficies forestales. De hecho, es la única energía renovable que presenta un balance económico positivo por los beneficios generados [4].

La producción de energía eléctrica a partir de biomasa tiene un rendimiento neto prácticamente cero en lo referido al ciclo del carbono (no es nulo debido a la energía invertida en transporte, pretratamientos,...). Los cultivos forestales energéticos explotan determinadas especies que por su veloz ritmo de crecimiento, mayor capacidad de rebrote, alta acumulación de energía por unidad de peso y gran adaptabilidad a diversas condiciones edafológicas, son energéticamente eficientes y económicamente rentables. Los cultivos energéticos están todavía poco desarrollados en nuestro país, sin embargo el aprovechamiento de biomasa residual está cobrando cada vez un papel más importante. España cuenta con millones de toneladas de residuos forestales que se pudren en los bosques y que podrían ser empleados en la producción de energía.

La biomasa lleva implícitas las tres patas de la sostenibilidad.

- La sostenibilidad ambiental en todos aquellos aprovechamientos de biomasa residual forestal como combustible, incide en:

- Cumplimiento de los objetivos ambientales fijados internacionalmente.
- La reducción de riesgos de incendios, pues supone la retirada de masa forestal de los bosques. El aprovechamiento de los residuos de origen biológico es además económico y aumenta la puesta en valor del bosque.
- Captura de CO₂.

- La sostenibilidad económica es muy importante porque:

- Estas nuevas actividades que se incorporan al sistema productivo primario, generan rentas, sobre todo en el medio rural.
- El cumplimiento del Plan de Energías Renovables 2020 (PER 2020) en cuanto a la ampliación de la potencia instalada para el aprovechamiento de la biomasa supondrá la creación de 15.000 nuevos empleos directos e indirectos en zonas rurales, a través de una inversión de 3.000 millones de euros que generarán 671 millones de euros anuales de nuevos ingresos y ahorros.

- La sostenibilidad social se fundamenta en el desarrollo rural de este tipo de energía, que fija la población en núcleos de tierras agrícolamente no rentables, que no compiten con usos agroalimentarios. Además, la biomasa podría participar en la sustitución progresiva del carbón nacional creando empleo en las cuencas mineras afectadas, dada la proximidad de dichas cuencas con zonas forestales con potencial de producción de biomasa.

2.4 INCONVENIENTES DEL USO ENERGÉTICO DE LA BIOMASA

El gas natural o el gasóleo de origen fósil son sustancias fáciles de transportar, provocan en su combustión pocos problemas de cenizas e inquemados y son muy homogéneos en su composición. Ello significa que la automatización de la producción de calor es fácilmente conseguible, la cadena comercial es fiable y los costes asequibles. Sin embargo, desde el punto de vista tecnológico, usar los biocombustibles sólidos es lo más difícil de llevar a cabo [3]. La estacionalidad de los restos biomásicos, su variabilidad, el hecho de que sean sólidos, y sus características fisicoquímicas (bajo poder calorífico, alto contenido en agua y cenizas, heterogeneidad, producción dispersa en el territorio y en pequeñas cantidades...) hacen que la competencia comercial real por el mercado calefactor sea un reto casi insuperable.

Además, para poder emplear el gas obtenido de forma eficiente, son necesarias una serie de operaciones posteriores a su salida del gasificador para acondicionarlo (enfriamiento, limpieza...) y es que uno de los principales problemas a resolver en el proceso de gasificación es la formación de alquitranes.

Por último, cabe reseñar que las ventajas ecológicas de la biomasa no favorecen la economía de escala y no son suficientes para su penetración en el mercado. Pero su conversión en electricidad o su gasificación pueden ser buenas rutas de desarrollo. Sin embargo, debe garantizarse la recuperación de la biomasa al mismo ritmo que se consume, puesto que si se hace un mal uso de la misma, pierde su carácter renovable y puede llegar a ser devastador para el medio ambiente (deforestación, pérdida de hábitats, desertización...).

2.5 PROCESO DE GASIFICACIÓN DE BIOMASA

Entre todos los procesos de conversión de biomasa, la gasificación es uno de los más prometedores, ya que la eficiencia energética es mayor que en el proceso de combustión. Se trata de una tecnología muy compleja que tiene como principal ventaja un potencial de alto rendimiento, pero por el contrario se trata de plantas con altos costes de inversión y que requieren un aprovisionamiento de biomasa muy homogéneo.

La gasificación es un proceso termoquímico en el que la materia carbono es transformada en un gas combustible (syngas) con cierto poder calorífico mediante una serie de reacciones que ocurren a elevadas temperaturas en presencia de un agente gasificante (existen una gran variedad, como son vapor de agua, oxígeno o aire).

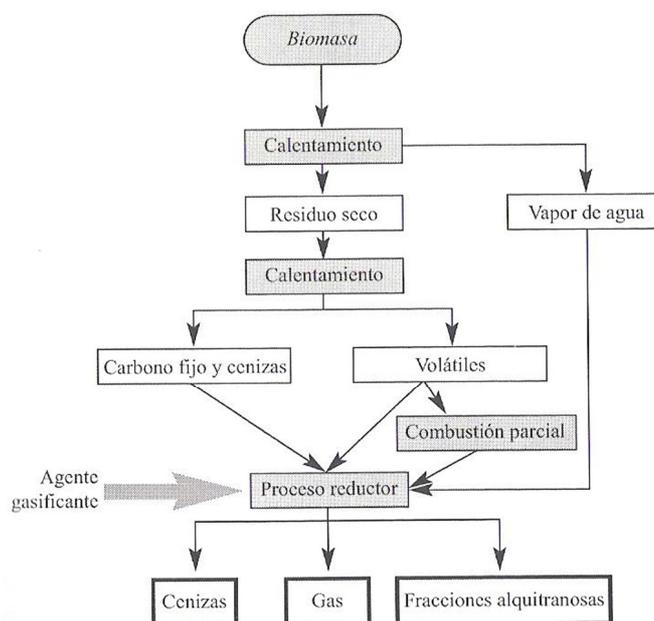


Fig 2. Fases existentes en un proceso de gasificación [3].

La operación de un gasificador de biomasa depende de las complejas reacciones químicas que se llevan a cabo en su interior. Una partícula de biomasa que entra a un gasificador sufre inicialmente un proceso de secado seguido de una descomposición térmica (pirólisis o desvolatilización). Posteriormente tienen lugar diversas reacciones sólido-gas o gas-gas entre todos los componentes presentes. Finalmente, se obtiene el syngas, que se compone de CO_2 , CO , H_2 , H_2O y otros hidrocarburos junto con otros subproductos que es necesario eliminar antes de su uso final (sólidos parcialmente quemados o *char*, cenizas y compuestos condensables o *tars*). Puesto que la etapa de pirólisis es más rápida que la de gasificación, es esta última la que controla el proceso global.

En comparación con la combustión, la gasificación es más eficiente en la producción de energía eléctrica y térmica [5], por lo que, considerándose neutra al balance de CO_2 , es la única que puede reemplazar directamente a los combustibles fósiles. Además se puede considerar su instalación tanto en aplicaciones avanzadas de países desarrollados como para la electrificación rural de instalaciones aisladas o países en vías de desarrollo.

3. EQUIPOS DE LA PLANTA

3. EQUIPOS DE LA PLANTA

A continuación se presentan los equipos que se van a considerar en este trabajo de la planta de producción de electricidad a partir de la combustión en un motor de combustión interna del gas de síntesis generado a partir de la gasificación de 600 kg/h de biomasa.

3.1 REACTOR DE GASIFICACIÓN

Los gasificadores se utilizan para transformar la biomasa en un gas combustible. El movimiento relativo entre el agente gasificante y el sólido marca el tipo de reactor del que se trata:

- Lecho móvil: el sólido se mueve lentamente.
 - Gasificador downdraft o de corrientes paralelas: el aire entra por la parte superior y el gas se extrae por la inferior. Este es la configuración de gasificador más empleada en la obtención de electricidad y la que se toma como referencia en este trabajo.
 - Gasificador updraft o de contracorriente: el agente gasificante se introduce por la parte inferior y atraviesa el reactor de lecho móvil mientras que la biomasa se introduce por arriba y desciende alcanzando cada vez temperaturas más altas. Este tipo de gasificador es sencillo y su eficiencia es alta, además de que los gases no tienen tiempo de craquearse por lo que se transforman en fracciones ligeras no condensables, lo que también tiene su punto negativo, la alta tendencia a formar alquitranes.

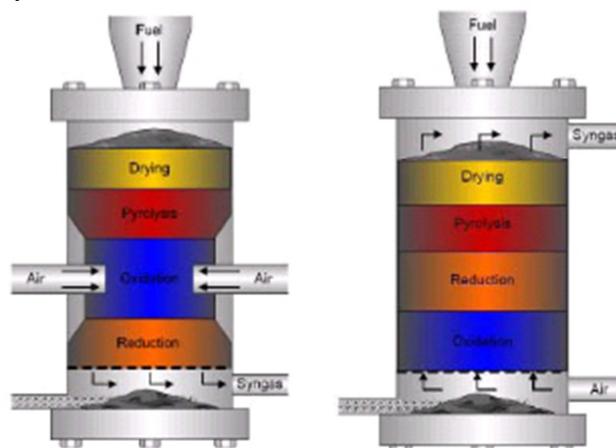


Fig 3. Gasificador downdraft y updraft [6]

- Lecho fluidizado: las partículas sólidas se encuentran en suspensión gracias a una corriente ascendente de fluido, de gas. Idealmente, cuando una partícula entra en este tipo de reactores, se supone que sufre instantáneamente todas las fases del proceso de gasificación, por lo que se considera que la temperatura del reactor es constante y que la transformación se produce de forma homogénea dentro del mismo. Dependiendo de su diseño, existen dos tipos:
 - Burbujeante.

- Circulante: la fluidización es rápida, sin burbujas y se recircula toda la material sólida que no es expulsada a través del ciclón.

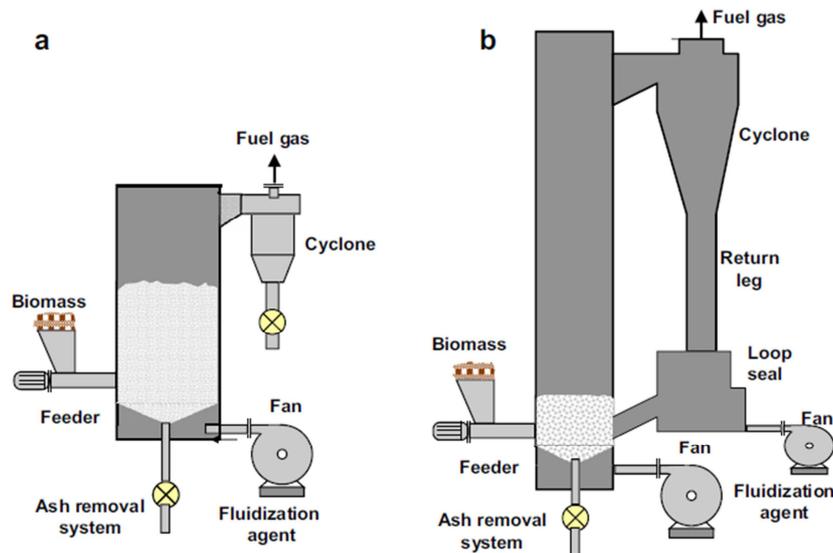


Fig 4. Gasificadores de lecho fluidizado: (a) Burbujeante; (b) Circulante [7].

3.2 SEPARADOR CICLÓNICO

Para la limpieza de la corriente de gas contaminada por partículas, la mejor opción entre los equipos de colección es un separador ciclónico [8]. Los ciclones usan la fuerza centrífuga generada por un torbellino para separar las partículas del gas con una baja pérdida de carga, un diseño sencillo y barato y una alta eficiencia para partículas con un diámetro mayor a $10 \mu\text{m}$, como es el caso de este trabajo (en la bibliografía revisada se habla de tamaños de partículas de $250 - 350 \mu\text{m}$ [9] y hasta incluso de $500 \mu\text{m}$ [10]).

Es un equipo que no presenta mayores complicaciones en su diseño, que se detalla en el siguiente capítulo.

3.3 INTERCAMBIADOR DE CALOR

Tras la salida del gasificador y el paso del gas de síntesis por el separador ciclónico, se tiene una corriente gaseosa caliente que se considera que mantiene la temperatura a su salida del reactor. Por ello, tanto para la producción de electricidad como para el precalentamiento del aire de entrada al secadero, es necesario enfriar dicho flujo.

Se requiere de un intercambio de calor líquido-gas, por lo se rehúye la instalación de un intercambiador de carcasa y tubos, los más abundantes en el mercado, pues su uso se centra principalmente en aquellos casos en que ambos fluidos son líquidos. La mejor opción en este caso se trata de un intercambiador compacto recuperador de calor de tubos con aletas exteriores anulares. El gas de síntesis, el fluido caliente, circula por el exterior de los tubos mientras que el fluido frío, en este caso agua de refrigeración, circula por el interior de los tubos. En estos equipos el orden de magnitud del coeficiente de convección en el lado frío puede estar en torno a $10^4 \text{ W/m}^2\text{K}$ mientras que en el lado caliente en torno a $100 \text{ W/m}^2\text{K}$ [11]. Es esta descompensación la que hace conveniente el uso de las aletas en el lado del gas. Si el gas es suficientemente limpio, se puede utilizar una densidad de aletas elevada (200-240 aletas por

metro), pero si la diferencia entre ambos coeficientes de convección no es tan acusada, conviene rebajar esta relación puesto que ya no resulta efectiva, hasta valores de 75-120 aletas por metro.

4. DESARROLLO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS

4. DESARROLLO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS

El objeto de este proyecto no es estudiar con detalle el proceso que tiene lugar en el gasificador, sino generar modelos que puedan predecir la composición de salida y cómo varía esta ante cambios en las condiciones de entrada.

Teniendo esto presente, la mejor opción son los modelos 0-D. Son modelos teóricos en los que se incluyen algunas correlaciones experimentales, que permiten establecer una relación entre las variables de entrada y salida del volumen de control sin considerar el proceso que tiene lugar en el interior del mismo. [12]

Este modelo considera que se alcanza el equilibrio termodinámico, lo que es una hipótesis aceptable teniendo en cuenta que las reacciones principales son rápidas e irreversibles. Los modelos de equilibrio predicen el máximo rendimiento de un sistema a partir de los productos de entrada, mientras que los cinéticos se centran en el progreso de la composición en las diferentes zonas del reactor. Los modelos de equilibrio son computacionalmente más sencillos y sirven para este trabajo pues son una buena aproximación para simular gasificadores downdraft, sin embargo se debe tener en cuenta que el modelo, por lo general, sobrestima los rendimientos de H_2 y CO , subestima los de CO_2 y predice una salida de gases libre de CH_4 , tars y char.

Este trabajo presenta un modelo teórico matemático para gasificación de biomasa implementado en el programa Engineering Equation Solver (EES) [13]. Se ha escogido este programa porque contiene todas las funciones termodinámicas necesarias. El modelo está basado en los modelos de equilibrio termodinámico aunque incluye algunas modificaciones obtenidas a partir de resultados experimentales para adaptarlo a un proceso real, en el cual solo se alcanza parcialmente el equilibrio.

Es de reseñar que se han introducido conceptos propios de programación al escribir el código en EES puesto que ha sido necesario definir algunas funciones para calcular distintas propiedades de las materias presentes en el proceso, procedimientos para simplificar cálculos que se repetían a lo largo del programa o funciones que se han denominado “espera” y que sirven para separar el código en distintos bloques de forma que la compilación resulte más rápida y eficiente. Tanto la potencia de cálculo como la imposibilidad de llamar a funciones dentro de funciones, características de la versión del EES facilitada por la Universidad de Zaragoza con la que he trabajado, han requerido de esta solución. Además, en esta fase de diseño cada equipo se ha desarrollado en un archivo distinto, por lo que se han generado las funciones *\$Export* y *\$Import* necesarias para exportar e importar respectivamente los datos de origen con los que se trabaja, o bien las incógnitas resueltas de un equipo y que suponen los datos de partida del equipo siguiente. Estas líneas de código se muestran como comentario en el trabajo puesto que de lo contrario no aparecerían en la impresión.

A continuación, se exponen los distintos códigos de diseño de equipos realizados en EES, comenzando por el equipo principal, el reactor de gasificación, y continuando en el orden en el que se encuentran en la planta de producción de electricidad, el separador ciclónico y el intercambiador de calor. Los códigos de los mismos se encuentran en el Anexo 4.

4.1 REACTOR DE GASIFICACIÓN

El reactor de gasificación se plantea tal y como se muestra en la Figura 5, de forma que se tienen dos corrientes de entrada (F1 es la biomasa de origen cuyas composiciones se corresponden con las obtenidas en el conversor explicado a continuación, y F2 es el caudal de agente gasificante, en este caso, aire) y otras dos de salida (F3 es la salida de sólidos mientras que F4 es la corriente que nos interesa puesto que se trata del gas de síntesis o *syngas*).

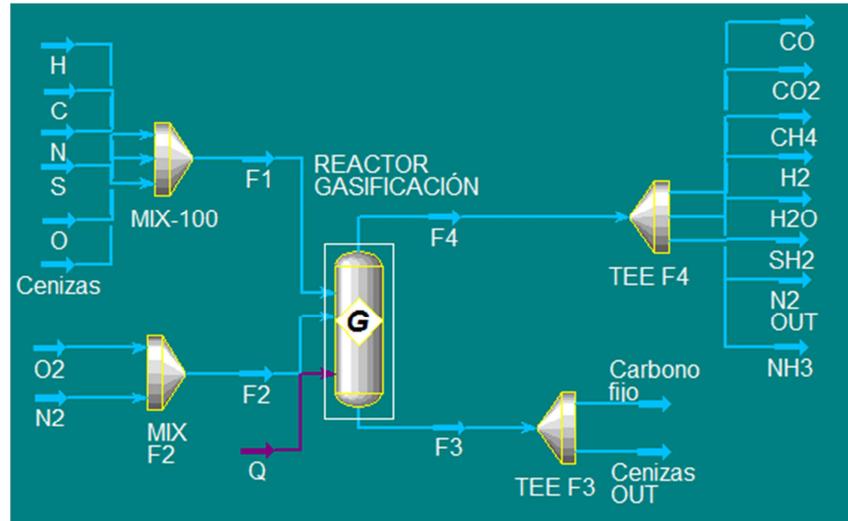


Fig 5. Esquema del reactor de gasificación.

El primer bloque del código en EES incluye las ecuaciones necesarias para expresar la biomasa de origen sobre una base común. Las composiciones de las maderas y residuos forestales con las que se trabaja se obtienen de la base de datos de ECN [14]. Los datos de la composición de la biomasa utilizada, introducidos en el modelo de EES son los siguientes:

Tabla 1. Composición de la biomasa de la simulación.

Pine sawdust (#1267)	
W_{ar} (wt%)	6,00
ash_{dry} (wt%)	0,10
VM_{daf} (wt%)	83,18
FC_{daf} (wt%)	16,82
C_{daf} (wt%)	51,05
H_{daf} (wt%)	6,01
N_{daf} (wt%)	0,10
S_{daf} (wt%)	0,01
O_{daf} (wt%)	42,83
LHV_{daf} (MJ/kg)	19,02
HHV_{daf} (MJ/kg)	20,33

En la base de datos de ECN se expresan las composiciones en masa (% en peso, expresado en la bibliografía y en lo que sigue como % wt) de la biomasa seleccionada en varias bases:

- *As Received* (ar), que expresa a la biomasa en su totalidad tal y como se encuentra en la naturaleza contando su humedad y cenizas.
- *Dry*, las composiciones no tienen en cuenta la humedad del material.
- *Dry Ash Free* (daf), las composiciones no tienen en cuenta ni la humedad ni las cenizas del material.

wood, pine (#128)

ID-number	#128
Material	wood, pine
Classification	ECN Phyllis classification - untreated wood - fir/pine/spruce - wood, pine NTA 8003 classification - [100] hout - [110] vers hout - [130] naaldhout - [131] naaldhout
Submitter organisation	ECN (Netherlands)
Literature	H. F. Feldmann, M. A. Paisley, H. R. Appelbaum and D. R. Taylor: Conversion of forest residues to Battelle, Columbus, OH (USA), DE88013138, 108 p. (1988).

Values

Property	Unit	Value			Std dev	Det lim	Lab	Date	Method
		ar	dry	daf					
▼ Fuel Properties									
▼ Proximate Analysis									
Moisture content	wt%	7.57	← Edit						
Ash content	wt%	0.95	1.03						
Volatile matter	wt%	75.64	81.83	82.68					
Fixed carbon	wt%	15.84	17.14	17.32					Calculated
▼ Ultimate Analysis									
Carbon	wt%	47.02	50.87	51.40					Measured
Hydrogen	wt%	5.80	6.27	6.34					Measured
Nitrogen	wt%	0.17	0.18	0.18					Measured
Sulphur	wt%	0.04	0.04	0.04					Measured
Oxygen	wt%	38.43	41.58	42.01					Calculated
Total (with halides)	wt%	100.00	100.00	100.00					Calculated
▼ Calorific Values									
Net calorific value (LHV)	MJ/kg	17.47	19.10	19.30					
Gross calorific value (HHV)	MJ/kg	18.92	20.47	20.68					
HHV _{wilne}	MJ/kg	19.05	20.61	20.83					Calculated
▼ Chemical Analyses									
▼ Halides									
Chlorine (Cl)	mg/kg	277.3	300.0	303.1					Measured

Fig 6. Base de datos para biomasa y residuos forestales de ECN.

En la base de datos utilizada, la mayor parte de las biomásas tienen datos de composición en las diferentes bases. Sin embargo ha sido necesario incluir este módulo de conversión ya que en algunos casos, como en el ejemplo de la tabla 1, los diferentes valores de composición son expresados en diferentes bases.

Tabla 2. Bases empleadas en la expresión de la composición de madera.

Análisis inmediato (% wt)	
Humedad	ar
Cenizas	dry
Materia volátil	daf
Carbono fijo	daf
Análisis elemental (% wt)	
C	daf
H	daf
N	daf
S	daf
O	daf
Cenizas	dry

Tras ello, se sitúa un procedimiento de espera (*Procedure CONVERTOR*. Ver Anexo 4), de forma que la compilación del código se realice en bloques porque de lo contrario el programa comete errores debido a la acotación incorrecta que realiza de las variables incógnitas. Así, se pueden comenzar los cálculos siguientes con la composición de la biomasa de origen como dato y no como incógnita.

En segundo lugar se realiza el ajuste estequiométrico de la reacción de combustión de la biomasa. Hay que tener en cuenta que durante la combustión de una especie orgánica, el S produce SO_2 y el N NO_x (mezcla de NO_2 y NO), que se puede considerar como NO_2 en su totalidad, para estos cálculos. De esta forma se conoce el aire estequiométrico necesario para la combustión completa, dato necesario, posteriormente, para calcular el defecto de aire con el que se realiza la gasificación. Las ecuaciones planteadas para conocer la relación estequiométrica, consistentes en aplicar los balances de materia al proceso de combustión, son las siguientes:

- Relación entre O_2 y N_2 en la entrada de aire.

$$N_{2,F2\ estq} = \frac{79}{21} O_{2,F2\ estq}$$

- Balance al carbono.

$$C_{F1} = CO_{2,F4\ estq}$$

- Balance al hidrógeno.

$$H_{F1} = 2H_2O_{F4\ estq}$$

- Balance al oxígeno.

$$O_{F1} + 2O_{2,F2\ estq} = 2CO_{2,F4\ estq} + H_2O_{F4\ estq} + 2SO_{2,F4\ estq}$$

- Balance al azufre.

$$S_{F1} = SO_{2,F4\ estq}$$

A continuación, se procede a expresar las ecuaciones linealmente independientes necesarias para resolver las 9 incógnitas restantes en el sistema.

Se plantean los siguientes balances de materia:

- Relación entre O_2 y N_2 en la entrada de aire.

$$N_{2,F2} = \frac{79}{21} O_{2,F2}$$

- Pérdida de materia sólida desglosada en la del carbono fijo y cenizas. Se supone una pérdida del 5% del carbono fijo con respecto al existente en el caudal de entrada (aunque este dato se puede modificar puesto que no es una incógnita) y que se extraen todas las cenizas.
- Balance al carbono.

$$C_{F1} = CO_{F4} + CO_{2,F4} + CH_{4,F4} + C_{F3}$$

- Balance al hidrógeno.

$$H_{F1} = 4CH_{4,F4} + 2H_{2,F4} + 2H_2O_{F4} + 3NH_{3,F4} + 2SH_{2,F4}$$

- Dos balances al nitrógeno. Hay que tener en cuenta que durante la gasificación de una especie orgánica el N de la biomasa va a NH_3 mientras que el N_2 del aire actúa como una sustancia inerte, es decir, no reacciona.

$$N_{F1} = NH_{3,F4}$$

$$2N_{2,F2} = 2N_{2,F4}$$

- Balance al azufre. Hay que tener en cuenta que durante la gasificación de una especie orgánica el S va a SH_2 .

$$S_{F1} = SH_{2,F4}$$

- Balance al oxígeno.

$$O_{F1} + 2O_{2,F2} = CO_{F4} + 2CO_{2,F4} + H_2O_{F4}$$

Por su parte, se plantea el balance de energía al reactor, de forma que el calor del mismo es proporcional a la entalpía de formación aparente de la biomasa, al aplicar un coeficiente denominado El cálculo de las entalpías de cada compuesto está detallado en el Anexo 4 mientras que se consideran unas pérdidas de calor del 10% [15]. La ecuación del balance de energía resulta:

$$Q_{reactor\ gasificación} = \sum_{productos} \Delta H_p \cdot F_p - \sum_{reactivos} \Delta H_r \cdot F_r$$

$$\Delta H_i = h_{f,i}^o + h_{i,T_F} - h_{i,ref}$$

La entalpía de los sólidos, compuestos principalmente por carbono, que salen del gasificador se calcula a partir de una relación experimental [5] basada en la entalpía del grafito:

$$h_{char} \left(\frac{kJ}{kg - K} \right) = 0,0004T + 0,8679 - \frac{381,61}{T}$$

Por último, se tienen dos ecuaciones más para completar el sistema. Se trata de las ecuaciones de equilibrio, de dos de las reacciones mas representativas del proceso de gasificación son:

- Reacción de metanación.



- Reacción water-gas shift.



La constante de equilibrio se puede relacionar con el cambio en la energía libre de Gibbs mediante las siguientes ecuaciones:

$$K_i = e^{\frac{-\Delta GT^0}{RT}}$$

$$\frac{\Delta G_m^0(T)}{T} = F_0(T) + \frac{\Delta H_m^0(T^*)}{T} - \left[\frac{\Delta H_m^0(T^*) - \Delta H_m^0(0 \text{ K})}{T} \right]$$

A partir de las ecuaciones anteriores y la tabla 4 (ver Anexo 1) se pueden calcular las constantes de equilibrio de las dos reacciones para una temperatura determinada.

Los parámetros obtenidos del diseño han sido los siguientes:

En el reactor gasificador, para un flujo másico de entrada de $600 \text{ kg}/\text{h}$ de dicha biomasa y una temperatura de salida del reactor de 1.073 K , con un porcentaje de aire respecto del estequiométrico para la combustión de $ER = 25,92\%$ mientras que el ratio biomasa/aire es de $Fr_g = 2,569$.

El poder calorífico del gas de síntesis es:

$$LHV_{F_4} = \sum F_{4,i} \Delta H_i = 3,678 \cdot 10^6 \text{ kJ}/\text{h} = 1.021,67 \text{ kW}.$$

Por lo tanto, la eficiencia del gasificador es de $\eta_{reactor} = \frac{HLV_{F_4}}{HLV_{ar}} = \frac{3,678 \cdot 10^6}{9,036 \cdot 10^6} = 40,7\%$. ($HLV_{ar} = 15,06 \cdot 10^3 \text{ kJ}/\text{kg} \cdot 600 \text{ kg}/\text{h} = 9,036 \cdot 10^6 \text{ kJ}/\text{h}$). La eficiencia total de la planta, definida como

$\eta_{total} = \eta_{motor,CI} \eta_{generador} \eta_{reactor}$, teniendo en cuenta que la eficiencia tipo de un motor de combustión interna es $\eta_{motor,CI} = 30\%$ mientras que la de un generador eléctrico se puede considerar $\eta_{generador} = 95\%$, se tiene $\eta_{total} = 11,6\%$.

Teniendo todo lo anterior en cuenta, la potencia eléctrica que genera la planta en este caso es $P_e = \eta_{motor,CI} \eta_{generador} HLV_{F_4} = 291,175 \text{ kW}$.

4.1.1 DISEÑO MECÁNICO DEL REACTOR DE GASIFICACIÓN

Se ha implementado el diseño mecánico del reactor de gasificación en el software Abaqus que permite realizar cálculos estructurales estáticos mediante la aplicación de elementos finitos.

El diseño se presenta como un sistema axisimétrico, es por ello que se simula $\frac{1}{8}$ del reactor cuyo proceso se detalla en el Anexo 2. Se ha diseñado, a partir de la bibliografía consultada sobre plantas de gasificación experimentales situadas en laboratorios ([38], [16], [17], [18]) un reactor gasificador downdraft de las siguientes dimensiones:

- 1.400 *mm* de altura total.
- 8 *cm* de diámetro en la zona del lecho, con una altura de 420 *mm*.
- 12 *cm* de diámetro en el resto del reactor, con una altura de 980 *mm*.
- 1,5 *mm* de espesor de la pared y 50 *mm* de espesor de las tapas.

El material empleado es acero inoxidable, mientras que se ha simulado la presión interior imponiendo una carga uniforme en sentido positivo hacia el exterior de valor 1,05 *atm*, es decir, algo más alta que la presión atmosférica. Se ha realizado además un mallado cuadrático estructurado "A 4-node doubly curved general-purpose shell, finite membrane strains", idóneo para definir las paredes del cilindro y la membrana o *shell*, puesto que lo que se simula en este modelo es la superficie media, es decir, el plano que está a la misma distancia del diámetro interior que del exterior.

A continuación se exponen los resultados obtenidos de la simulación. En cuanto a la distribución de la presión a la que se ven finalmente sometidas las paredes, se observa en la figura 7 que estas son mayores en la zona del freeboard donde tiene lugar la oxidación, se estrecha la sección y se introduce el gas gasificante. Es por ello que esta zona deberá estar reforzada o tener un espesor mayor al del resto de la pared y similar al de las tapas. Por su parte, en la figura 8 se observa que las tensiones son prácticamente constantes a lo largo del gasificador, sin embargo estas se disparan en la zona cercana a las tapas (Figura 9). Se produce una excesiva distorsión del mallado en las zonas cercanas a las tapas debido a las altas tensiones que allí aparecen y que no reflejan la realidad y anulan el modelo en esa zona. La solución, que se escapa del objetivo de este trabajo, sería realizar un afinado de la malla en esas zonas, con distintos tipos de elementos de malla.

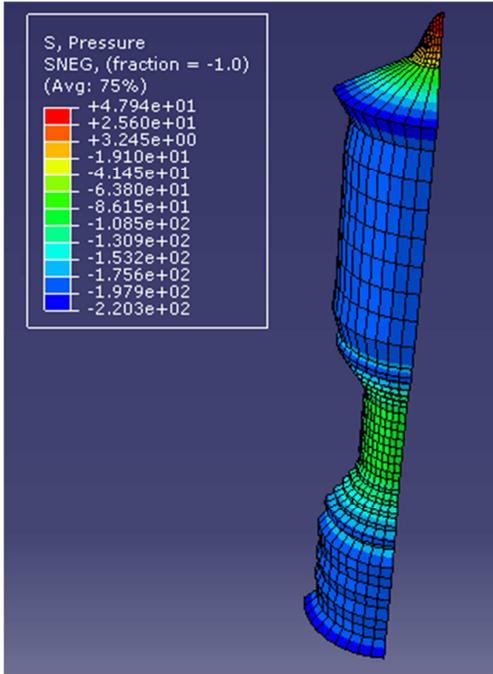


Fig 7. Distribución de presiones.

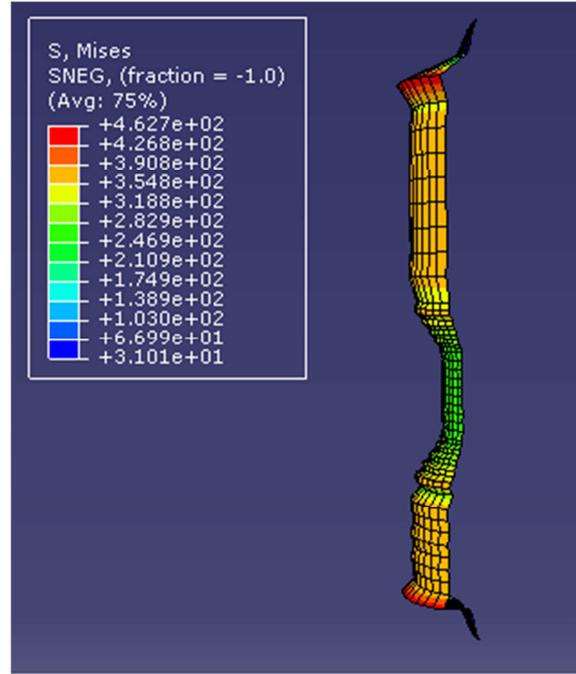


Fig 8. Distribución de tensiones

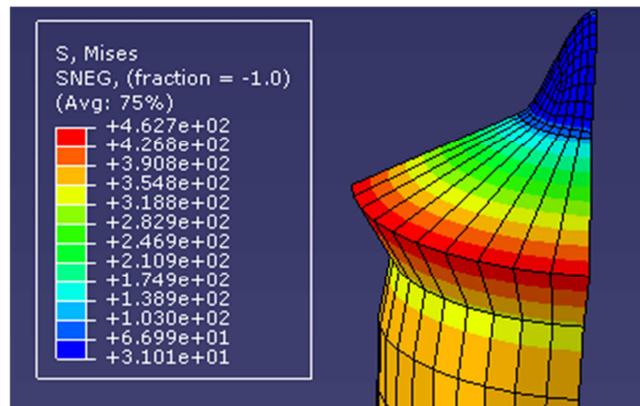


Fig 9. Detalle de la distribución de tensiones en la zona cercana a la tapa.

Por último, los desplazamientos (Figura 10) también muestran un comportamiento constante a lo largo del gasificador, sin embargo se puede decir que se alcanzan los máximos desplazamientos en las zonas de inflexión de la membrana.

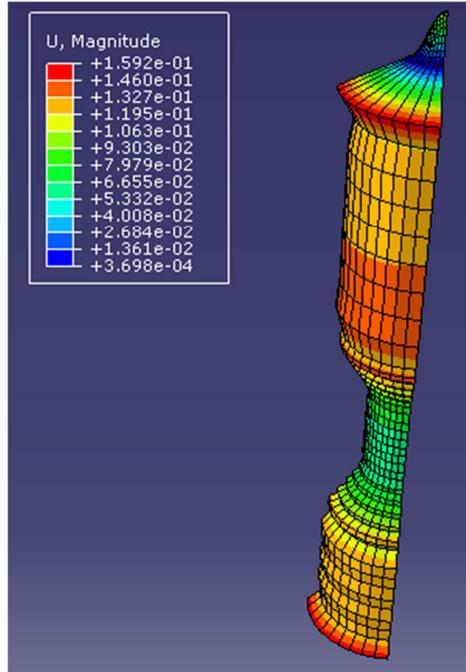


Fig 10. Distribución de desplazamientos.

4.2 SEPARADOR CICLÓNICO

Por lo general, las dimensiones de un separador de ciclón se basan en:

- Número de giros efectivos N_e . Se demuestra que es igual a 8, para un separador tipo de alta eficiencia, a partir de las dimensiones que se enumeran posteriormente.

$$N_e = \frac{1}{H} \left(H_1 + \frac{H_1 + H_2}{2} \right) = \frac{2}{D_c} \left(2D_c + \frac{2D_c + 2D_c}{2} \right) = 8$$

- Densidad de las partículas de entrada al ciclón, ρ_p .

Se considera que es $\rho_p = 1.050 \text{ kg/m}^3$, tomada como valor medio de la bibliografía revisada [7].

- Caudal de entrada al ciclón, Q_{F4} .

Tomados como relaciones a estas dimensiones, se tienen el resto que definen el diseño del separador [19]:

$$W_i = D_o/4; D_e = D_o/2; H = D_o/2; H_1 = 2D_o; S = 0,625D_o; H_2 = 2D_o; D_d = D_o/4$$

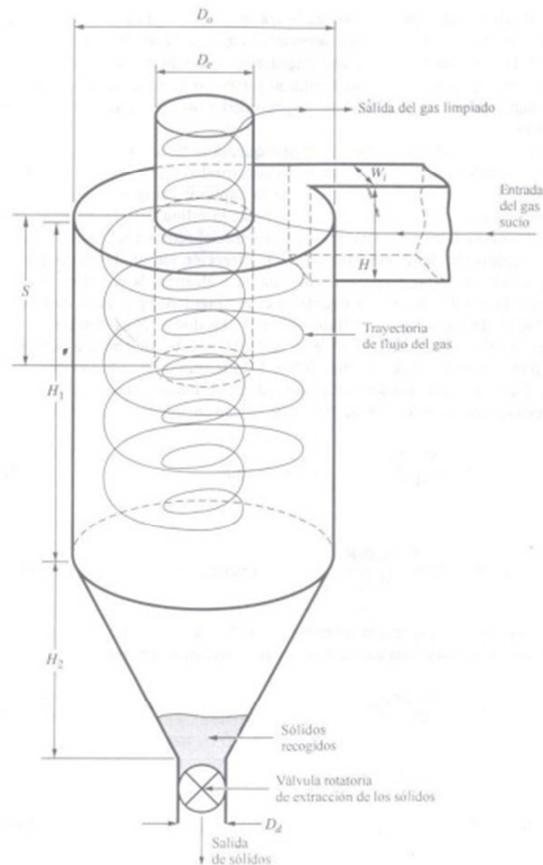


Fig 11. Esquema de un separador de ciclón [NEVERS].

Por último, se definen parámetros como el diámetro de corte D_{p50} , el área efectiva $A_{ciclón}$, la velocidad del gas u en la entrada del ciclón y la eficiencia η_i del equipo:

$$A_{ciclón} = W_i H; \quad u = \frac{Q_{F4}}{A_{ciclón}}$$

$$D_{p50} = \left[\frac{9\mu W_i}{2\pi N_e u (\rho_s - \rho)} \right]^{1/2}; \quad \eta_i = \frac{\left(D_{p_i} / D_{p50} \right)^2}{1 + \left(D_{p_i} / D_{p50} \right)^2}$$

El cálculo de las propiedades de la mezcla gaseosa de entrada al ciclón requiere conocer la composición y los valores de dos propiedades intensivas independientes tales como la temperatura y la presión [20]. Las propiedades extensivas de la mezcla, tales como la energía interna U , la entalpía H o la entropía S , se pueden obtener sumando la contribución de cada componente en la condición en la que éste existe en la mezcla. Por ejemplo, la entalpía de los gases ideales es función exclusiva de la temperatura y se tiene:

$$H = H_1 + H_2 + \dots + H_j = \sum_{i=1}^j H_i$$

Sin embargo, para conocer otras propiedades de la mezcla de gases, como la viscosidad o la conductividad, se requiere de otros cálculos que se aproximen mejor al modelo. A finales de los años 40, el ingeniero químico C.R Wilke describió junto con su compañero Pin Chang una correlación experimental que determinaba los coeficientes de difusión en mezclas de gases [21]. Se ha implementado la misma en un procedimiento de EES (Ver Anexo 4, ya en el código del separador ciclónico) para calcular con mayor exactitud la viscosidad de una mezcla de gases de siete moléculas distintas, en concreto la del gas de entrada al ciclón (se ha eliminado el SH₂ de estos cálculos pues generaba problemas de convergencia por sus valores de viscosidad y conductividad tan cercanos a cero y representaba un porcentaje muy pequeño de la composición del gas de síntesis).

Con los datos expuestos anteriormente, se tienen las siguientes características del separador ciclónico:

Tabla 3. Dimensiones principales del separador ciclónico.

D_o (m)	2
W_i (m)	0,5
D_e (m)	1
H (m)	1
H_1 (m)	1
S (m)	1,25
H_2 (m)	4
D_d (m)	0,5

El diámetro de corte resulta ser de $D_{p50} = 36,36 \mu\text{m}$ mientras que se logran separar partículas de hasta $109,1 \mu\text{m}$ con una eficiencia del 90%. En la figura X se puede observar la curva de eficiencia del separador ciclónico diseñado.

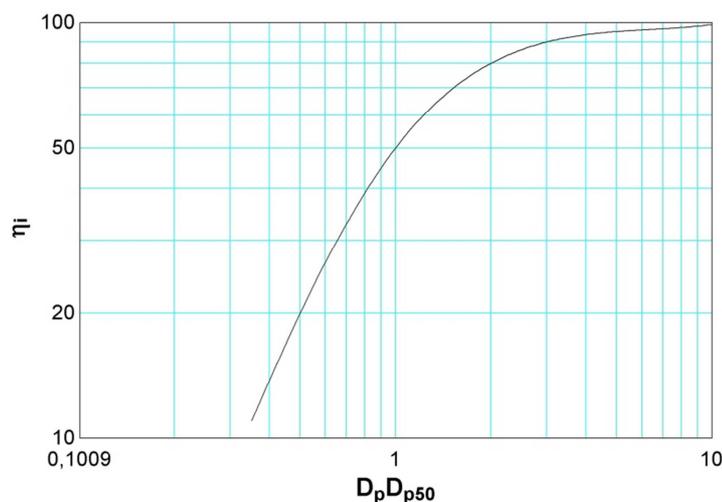


Fig 12. Eficiencia del separador ciclónico obtenida en el diseño en EES.

4.3 INTERCAMBIADOR DE CALOR

Para realizar un primer diseño, se emplea el método MLDT en el que se conocen todas las temperaturas. En este caso, se conoce la temperatura de entrada caliente, que se supone que coincide con la de salida del reactor y la temperatura de entrada fría, que es agua a 20°C. Se debe fijar por otra parte la temperatura de salida del gas, que marcará el volumen de intercambio de calor y el flujo de agua necesarios para alcanzar las condiciones deseadas. Por último, a partir de los balances de energía aplicados a cada fluido, se obtiene la temperatura de salida de la corriente fría.

$$q[kW] = F_4 cp_c (T_{c,e} - T_{c,s}) = \frac{\dot{m}_f}{M_{agua}} cp_f (T_{f,s} - T_{f,e})$$

Tras ello, se estima un área superficial exterior tal que:

$$A_{sup,ext,est} = \frac{q}{U_{est} \Delta_{ml}}$$

Se estima un valor de coeficiente de transferencia de calor U_{est} en base a las diferentes sustancias involucradas en el intercambio de calor [11]. En este caso, al tratarse el fluido caliente de un gas a baja presión ($\sim 1 \text{ bar}$) y el frío de agua de refrigeración, se tiene un $U_{est} = 105 \text{ W/m}^2\text{K}$. Por su parte, el salto medio logarítmico de temperaturas se calcula como el de flujo a contracorriente corregido por un factor F que depende de las temperaturas de entrada y salida de ambos fluidos, pero que en este caso se considera igual a la unidad porque la circulación de ambos fluidos es globalmente a contracorriente, hecho que se corrobora obteniendo el perfil de temperaturas que se genera en el intercambiador diseñado.

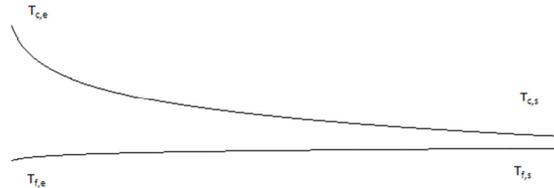


Fig 13. Perfil de temperaturas en el intercambiador de calor. Flujo a contracorriente.

Tras esto, se calcula el área superficial exterior por unidad de longitud de tubo $A_{sup,ext}$, pues se relaciona con la anterior proporcionalmente al número de tubos por el ancho del intercambiador de calor:

$$N_t L_t = \frac{A_{sup,ext,est}}{A_{sup,ext}}$$

Con este dato se calculan las dimensiones previas del intercambiador como son el número de tubos N_t , número de circuitos N_c , número de tubos por fila $N_{t,filas}$ y número de filas de tubos N_L . Hay que añadir, que desde el punto de vista termo-fluidodinámico es preferible una disposición de los tubos alternada, en triángulos, porque se optimiza el coeficiente de convección, de forma que $S_T = S_D$.

Para el recálculo y diseño definitivo es necesario hallar los dos coeficientes de convección. El del lado interior de los tubos se corresponde con un caso de convección forzada interior. Se desarrolla un procedimiento (se sitúa en la parte superior del código del intercambiador de calor. Ver Anexo 4) para tener en cuenta todos los casos tal y como sigue [22]. En el caso de que el flujo se encuentre en régimen laminar y teniendo en cuenta que el flujo de calor en la pared interior del tubo se puede considerar constante ($q_p = cte$) al ser h_e apreciablemente menor que h_i [11], se ha de determinar si la entrada es puramente térmica, en cuyo caso se aplica la correlación de Hausen; o si es combinada térmica-hidráulica, en cuyo caso se aplica la correlación de Kays. Si por el contrario se está ante un caso de régimen turbulento, la correlación a aplicar será la de Gnielinski. Por su parte, el cálculo del coeficiente de convección en el lado exterior de los tubos se corresponde con un caso de convección forzada exterior y la correlación a aplicar, con una disposición del banco de tubos en triángulos, es la de Briggs y Young. Las correlaciones empleadas son, respectivamente:

$$\text{Hausen: } Nu_f = 4,36 + 0,023 \ln \left(1 + (0,012 Gz_f)^{-1} \right), Gz_f = \frac{Re_f Pr_f D_i}{L_t}$$

$$\text{Kays: } Nu_f = 4,36 + 0,036 \ln \left(1 + (0,011 Gz_f)^{-1} \right)$$

$$\text{Gnielinski: } Nu_f = \left[\frac{\frac{f}{8} (Re_f - 1000) Pr_f}{1 + 12,7 \left(\frac{f}{8} \right)^{0,5} (Pr_f^{2/3} - 1)} \right] \left[1 + \left(\frac{D_i}{L_t} \right)^{2/3} \right]$$

$$\text{Briggs y Young: } Nu_c = 0,134 Re_c^{0,681} Pr_c^{1/3} \left[\frac{S}{L_a} \right]^{0,2} \left[\frac{S}{t} \right]^{0,11}$$

Finalmente, se calcula el coeficiente global de transferencia de calor, mediante la ecuación general aplicada al lado caliente. Se desprecia la resistencia de enfriamiento del fluido frío (lado interior de los tubos) pero no así la del fluido caliente (gas con restos de partículas y cenizas), por lo que queda:

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{\eta_{o,c} h_c} + \frac{R_{e,c}''}{\eta_{o,c}} + A_c R_p + \frac{A_c}{\eta_{o,f} h_f A_f}$$

La eficiencia de la superficie en el lado frío es la unidad puesto que no hay aletas, mientras que la del lado caliente se basa en el concepto de aleta de punta adiabática, anular rectangular [22] cuyo cálculo en EES se simplifica al tener incorporadas las funciones de Bessel. Por su parte, la resistencia de enfriamiento del fluido caliente, considerado como gas de combustión, se puede estimar como $4 \cdot 10^{-4} m^2 K/W$ [22] mientras que la de conducción de la pared que separa ambos fluidos, considerando la conductividad del material del tubo, resulta

$$R_p = \frac{\ln(D_e/D_i)}{2\pi L_t \lambda}$$

Se deben realizar varias iteraciones, modificando parámetros del diseño del intercambiador de calor para obtener un coeficiente global de transferencia de calor cercano al estimado. Por

ejemplo, se comprueba que la diferencia entre ambos coeficientes de convección no es tan grande como la comentada anteriormente, por lo que la estimación de 275 Aletas por unidad de longitud del tubo se ha rebajado a 100. Aumentar la superficie de intercambio no implica necesariamente una mayor transferencia de calor porque el coeficiente de convección exterior puede disminuir con un aumento de la superficie o de la densidad de aletas. Se ha observado esto tras varias iteraciones realizadas sobre las variables Diámetro exterior de las aletas D_a , Diámetro exterior de los tubos D_e y Número de aletas por unidad de longitud del tubo $N_{aletas,L}$ en una tabla paramétrica en EES, de la cual se presenta en la siguiente figura. Del diseño del intercambiador de calor se obtiene un $UA=120,69$ W/K.

I iteración	II iteración	III iteración					
1.40	D_a [m]	D_e [m]	D_i [m]	$N_{aletas,L}$ [m ⁻¹]	σ	U_c [W/m ² -K]	t [m]
Run 1	0,02	0,0164	0,0138	100	0,1	214	0,000254
Run 2	0,02022	0,0164	0,0138	100	0,1	205,7	0,000254
Run 3	0,02044	0,0164	0,0138	100	0,1	197,9	0,000254
Run 4	0,02065	0,0164	0,0138	100	0,1	190,5	0,000254
Run 5	0,02087	0,0164	0,0138	100	0,1	183,5	0,000254
Run 6	0,02109	0,0164	0,0138	100	0,1	176,9	0,000254
Run 7	0,02131	0,0164	0,0138	100	0,1	170,6	0,000254
Run 8	0,02153	0,0164	0,0138	100	0,1	164,6	0,000254
Run 9	0,02174	0,0164	0,0138	100	0,1	158,9	0,000254
Run 10	0,02196	0,0164	0,0138	100	0,1	153,4	0,000254
Run 11	0,02218	0,0164	0,0138	100	0,1	148,2	0,000254
Run 12	0,0224	0,0164	0,0138	100	0,1	143,3	0,000254
Run 13	0,02262	0,0164	0,0138	100	0,1	138,6	0,000254
Run 14	0,02283	0,0164	0,0138	100	0,1	134	0,000254
Run 15	0,02305	0,0164	0,0138	100	0,1	129,7	0,000254
Run 16	0,02327	0,0164	0,0138	100	0,1	125,6	0,000254
Run 17	0,02349	0,0164	0,0138	100	0,1	121,6	0,000254
Run 18	0,02371	0,0164	0,0138	100	0,1	117,8	0,000254
Run 19	0,02392	0,0164	0,0138	100	0,1	114,2	0,000254
Run 20	0,02414	0,0164	0,0138	100	0,1	110,7	0,000254
Run 21	0,02436	0,0164	0,0138	100	0,1	107,3	0,000254
Run 22	0,02458	0,0164	0,0138	100	0,1	104,1	0,000254
Run 23	0,02479	0,0164	0,0138	100	0,1	101	0,000254
Run 24	0,02501	0,0164	0,0138	100	0,1	98,06	0,000254
Run 25	0,02523	0,0164	0,0138	100	0,1	95,2	0,000254

Fig 14. Iteraciones en EES para recálculo y diseño definitivo del intercambiador de calor.

5. RESULTADOS

5. RESULTADOS

Tras el diseño realizado anteriormente, ahora se procede a simular la planta de producción de electricidad tomando como parámetros las características de los equipos diseñados. A continuación se van a validar los modelos del reactor de gasificación implementados tanto en EES como en Hysys, con la bibliografía revisada.

Una primera comparación entre el modelo implementado en EES y la simulación llevada a cabo en Hysys, simulados bajo las condiciones expuestas en el apartado anterior, valida los modelos implementados pues las composiciones del gas de síntesis, a excepción del metano, son muy parecidas. Estos son los resultados obtenidos:

Tabla 4. Composiciones del gas de síntesis en ambas simulaciones.

	EES	HYSYS
CO (mol %)	21,470	22,610
CO ₂ (mol %)	4,350	4,973
CH ₄ (mol %)	5,892	12,460
H ₂ (mol %)	13,300	10,020
H ₂ O (mol %)	6,767	4,607
SH ₂ (mol %)	0,003	0,000
N ₂ (mol %)	41,140	45,330
NH ₃ (mol %)	0,068	0,000

Los resultados obtenidos son parecidos, excepto la concentración de metano, que es la que más diferencias presenta entre los dos resultados. Esto se puede deber principalmente a que las reacciones elegidas para el modelo del EES son diferentes de las que emplea Hysys.

Por otra parte, se decidió hacer una validación del modelo implementado con datos experimentales encontrados en la bibliografía sobre gasificación de biomasa. La primera referencia consultada corresponde con los trabajos de Magín Lapuerta y cols. [23] sobre gasificación en un reactor de lecho fluidizado circulante de distintos residuos forestales y agrícolas (poda de pinos, olivos y vides, serrín...) con aire como agente gasificante. Las condiciones de operación del proceso son a presión atmosférica mientras que la temperatura del reactor se mantiene constante a aproximadamente 1.523 K Aunque los autores trabajan con un reactor de tipo diferente, esto afectaría a las condiciones de alimentación de la biomasa, o a la producción de alquitranes o char, pero no al equilibrio. Si, los resultados experimentales se acercasen a este, los resultados tendrían que ser comparables.

Se analizan dos de las biomásas expuestas en la investigación, *Pinus pruning wastes* y *Olive pruning wastes* ya que se tienen dos biomásas con unas características muy similares en la base de datos ECN, como son *Pine sawdust* (#1267) y *Olive branches* (#3347) respectivamente.

Las figuras 15 y 16 muestran la composición en volumen del gas de síntesis para distintos valores del ratio biomasa/aire o *Frg* definido como $Frg = \frac{\text{Flujo molar biomasa entrada } (F_1)}{\text{Flujo molar aire entrada } (Air)}$. En la parte superior de la imagen se muestran los resultados obtenidos en el modelo de EES, mientras que en la parte inferior se sitúan los resultados de la investigación.

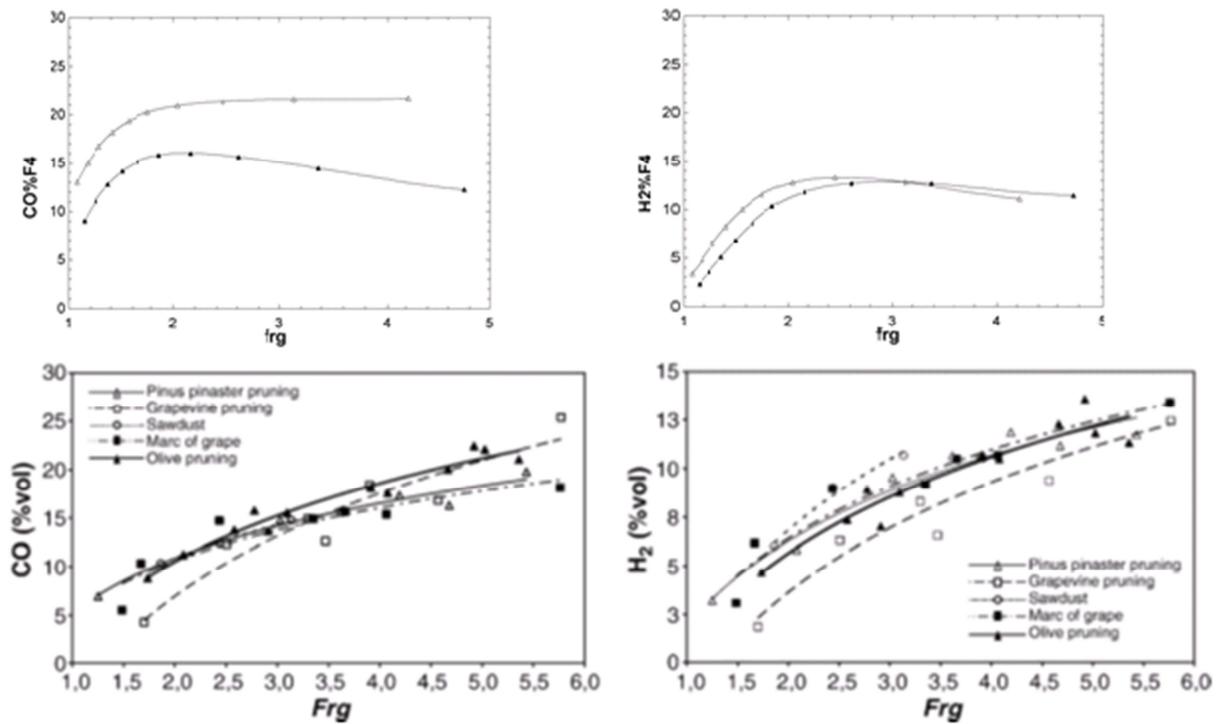


Fig 15. Concentraciones de CO y H₂ para las diferentes biomosas y valores de Frg.

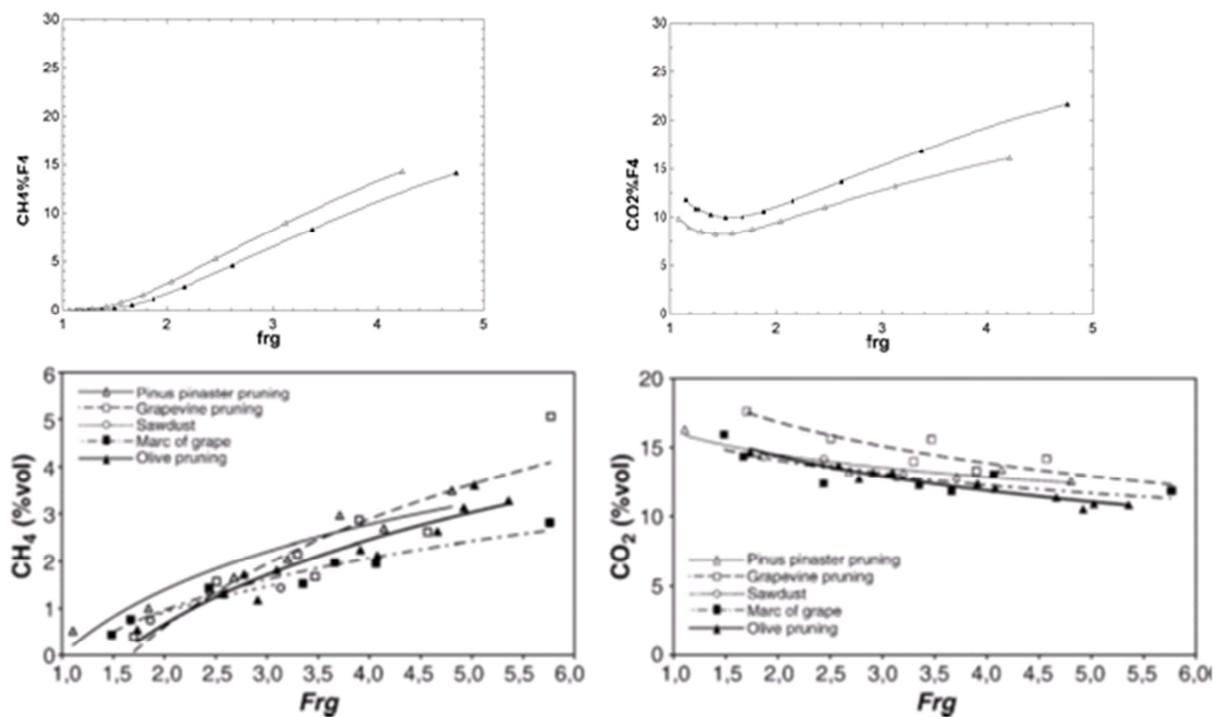


Fig 16. Concentraciones de CH₄ y CO₂ para las diferentes biomosas y valores de Frg.

Se observa que los resultados son buenos, ya que todas las tendencias son similares excepto en el caso del CO_2 , donde las trayectorias son opuestas.

La segunda referencia consultada corresponde con los trabajos de Jun Xie y cols. [15] sobre la gasificación en un reactor de laboratorio de lecho fluidizado de *Pine sawdust* o Serrín de pino con aire como agente gasificante. Las condiciones de operación del proceso son a presión atmosférica mientras que la temperatura del reactor se mantiene constante a aproximadamente 1.073 K. Por su parte, en la investigación se trabaja con un ER entre 0,21 – 0,25 mientras que en el modelo el rango aumentaba desde 0,22 – 0,35. Además, el flujo de entrada de biomasa se mantiene en el rango entre 0,445 – 0,552 kg/h , a diferencia de los 600 kg/h con los que se habían realizado las simulaciones anteriores.

En el modelo de EES se vuelve a analizar el *Pine sawdust* (#1267) ya que tiene unas características muy similares a la biomasa expuesta en la investigación. Las figuras 17 y 18 muestran la composición en volumen del gas de síntesis para distintas temperaturas del reactor. Las líneas continuas con símbolos cerrados corresponden a los datos experimentales mientras que las líneas discontinuas y símbolos abiertos lo hacen a las predicciones [15].

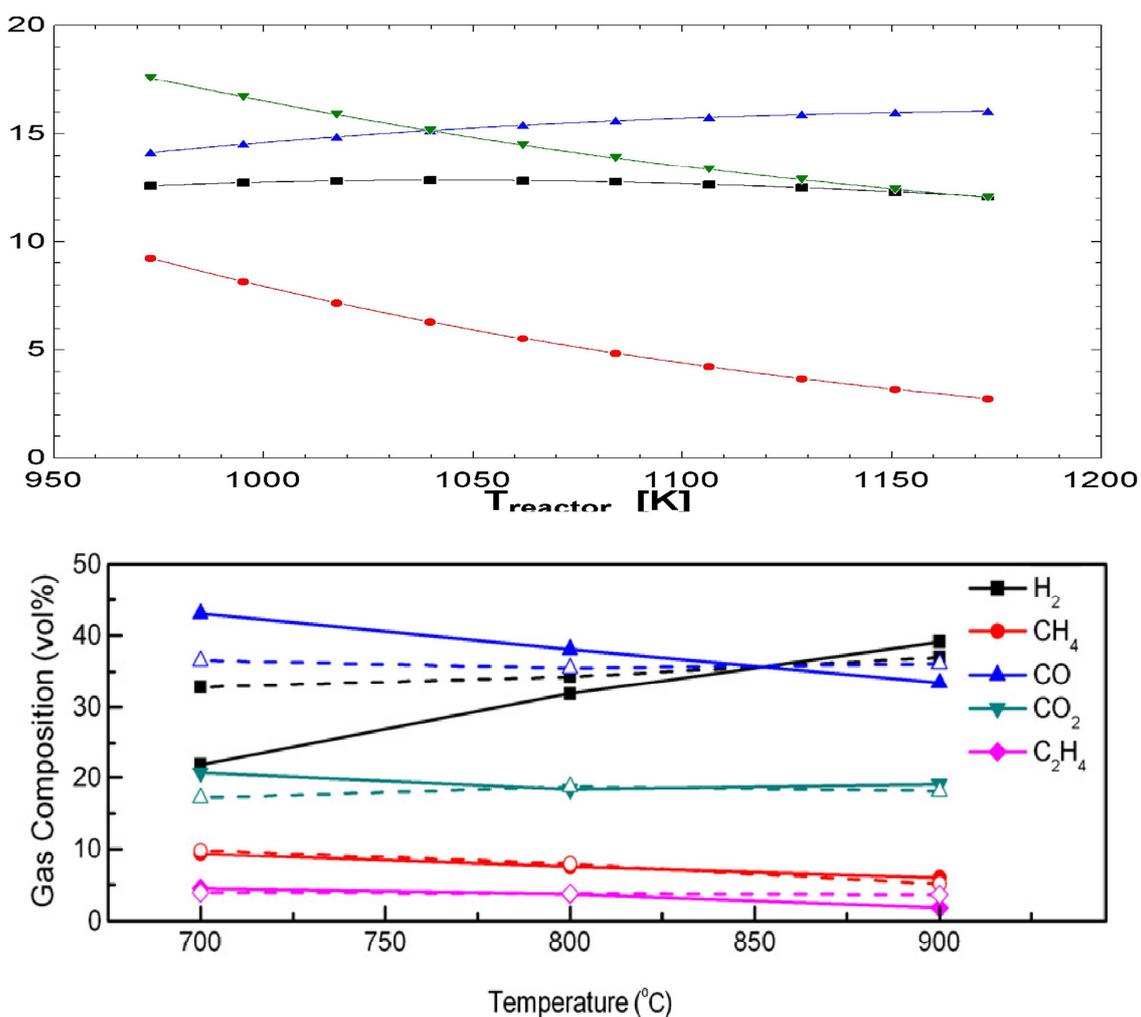


Fig 17. Concentraciones del gas de síntesis para diferentes temperaturas del reactor.

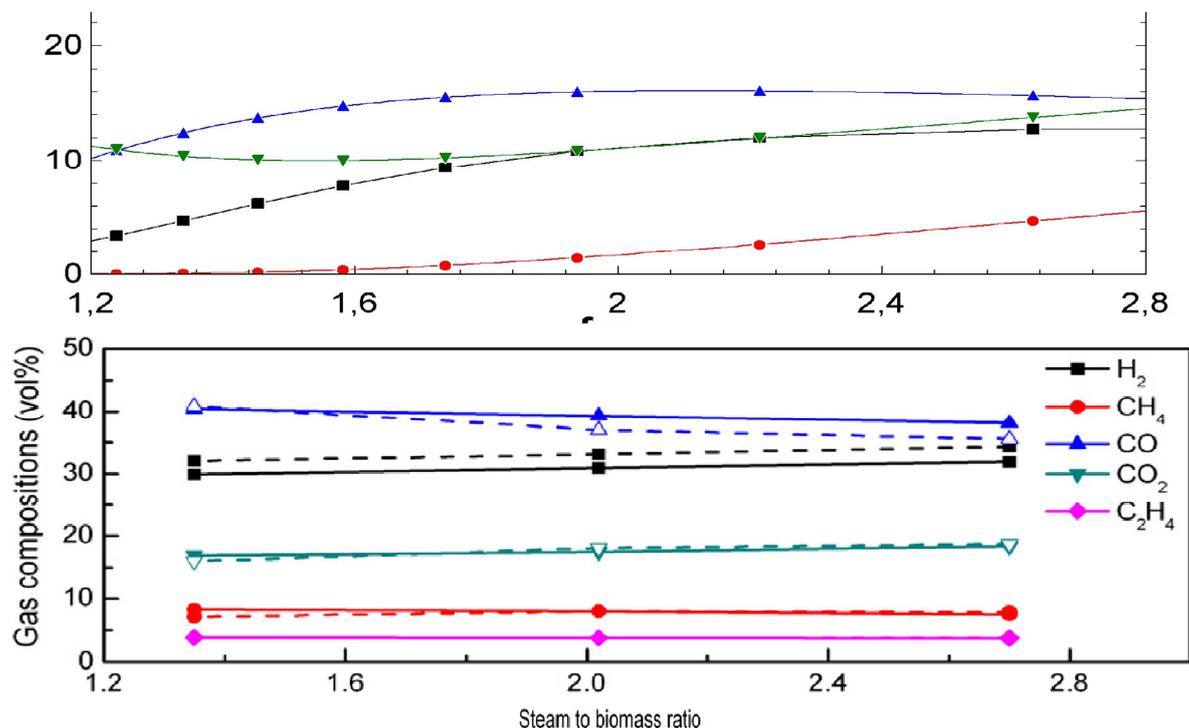


Fig 18. Concentraciones del gas de síntesis para diferentes valores de Frq.

Se observa que el modelo teórico de EES se ajusta perfectamente a las predicciones obtenidas del modelo desarrollado en la investigación, sin embargo éste se aleja de sus resultados experimentales especialmente con respecto al H₂ y al CO, aunque es aceptable el comportamiento que se observa tanto en el CH₄ como en el CO₂. Un aumento en la temperatura conduce a un ligero aumento en las concentraciones de hidrógeno y monóxido de carbono, así como a una disminución de las de dióxido de carbono y metano (se observan estas tendencias en el modelo en EES, sin embargo el de la bibliografía presenta alguna discrepancia). Esto se debe a un desplazamiento del equilibrio hacia los productos en las reacciones endotérmicas y hacia los reactivos en las exotérmicas [12].

La gasificación es un proceso complejo en el que entran en juego numerosos factores por lo que no hay una única explicación clara sobre la dependencia de los compuestos con las variables. Las diferencias entre modelos teóricos y experimentales se deben principalmente a la suposición de los modelos de equilibrio de que todas las reacciones transcurren al mismo tiempo, lo cual no es cierto. A temperaturas altas (en torno 900°C), las concentraciones teóricas se acercan mucho a las experimentales, lo que puede significar que en procesos reales únicamente a altas temperaturas se llega a alcanzar el equilibrio.

6. CONCLUSIONES

6. CONCLUSIONES

Las conclusiones que pueden deducirse del presente trabajo son:

- Se ha simulado una planta de producción de electricidad a partir de la combustión en un motor de combustión interna del gas de síntesis generado a partir de la gasificación de 600 kg / h de biomasa.
- Se ha calculado la eficiencia global del sistema y la potencia generada por la planta de producción de electricidad.
- El modelo se ajustan bien a los datos reales cuando se alcanzan las condiciones de equilibrio. A temperaturas bajas, por debajo de 750°C, el modelo no es capaz de reproducir de un modo tan exacto el proceso real de gasificación. Las diferencias observadas se deben principalmente a que los modelos implementados en este trabajo no pueden predecir la producción de alquitranes, mientras que estos se generan en las simulaciones consultadas en la bibliografía.

En procesos reales, no suele ser habitual que el metano alcance su concentración de equilibrio aun cuando el resto de componentes del gas de síntesis sí que llegan a valores muy similares. Los resultados obtenidos con respecto al metano tienen una gran variabilidad y, por tanto, una gran incertidumbre.

- La temperatura de gasificación tiene un importante efecto sobre la composición y calidad del gas de síntesis obtenido. Un aumento en la temperatura conduce a un aumento en las concentraciones de hidrógeno y monóxido de carbono, así como a una disminución de las de dióxido de carbono y metano.
- Se ha realizado el diseño mecánico del reactor de gasificación y se ha comprobado que la distribución de presiones indica que estas son mayores en la zona de oxidación o freeboard, por lo que la sollicitación mecánica de esta parte singular del reactor obliga a reforzar con un mayor espesor que en el resto de la pared.
- Se han diseñado otros equipos presentes en la planta de producción de electricidad, como son el separador ciclónico y el intercambiador de calor. Se ha obtenido el diámetro de corte del separador ciclónico para el caso expuesto en el diseño y su eficiencia de recolección, mientras que se han obtenido los principales parámetros de diseño y las características térmicas del intercambiador de calor.

7. REFERENCIAS

7. REFERENCIAS

- [1] Key World Energy Statistics. [Internet] *International Energy Agency (IEA)* [consultado 12 junio 2014]. Disponible en:
<http://www.iea.org/publications/freepublications/publication/kwes.pdf>
- [2] Plan energético de Aragón 2.013-2.020. [Internet] *Boletín Oficial Provincial de Aragón*, 22 de mayo de 2014, núm. 98, pp. 16.208-16.608 [consultado 27 mayo 2014]. Disponible en:
<http://www.boa.aragon.es/cgi-bin/EBOA/BRSCGI?CMD=VEROBJ&MLKOB=793166000404>
- [3] SEBASTIÁN NOGUÉS, FERNANDO. 2010a. *Energías De La Biomasa (Volumen I)*. 1ª edn. Anon. Zaragoza: Prensas Universitarias de Zaragoza.
- [4] Informe de sostenibilidad 2012. [Internet] *Ence* [consultado 16 agosto 2014]. Disponible en:
http://www.ence.es/pdf/Ence_Informe%20Sostenibilidad%202012_baja-1705483.pdf
- [5] PUIG-ARNAVAT, M., J. CARLOS BRUNO, A. CORONAS. ISSN 0887-0624. 2012. Modified Thermodynamic Equilibrium Model for Biomass Gasification: A Study of the Influence of Operating Conditions. *Energy & Fuels*. 26(2), pp 1385-1394.
- [6] MORENO GONZÁLEZ, JAVIER. 2010. Simulación de gasificación de biomasa en lecho fluidizado burbujeante. Proyecto Fin de Carrera. Universidad Carlos III de Madrid. Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos. Ingeniería Industrial: Tecnologías Energéticas.
- [7] GOMEZ-BAREA, A., LECKNER, B. ISSN 0360-1285. 2010. Modelling of Biomass Gasification in Fluidized Bed. *Progress in Energy and Combustion Science*. 36(4), pp 444-509.
- [8] PROFESORES DEL DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y TECNOLOGÍA DEL MEDIO AMBIENTE. Ingeniería del Medio Ambiente. Escuela de Ingeniería y Arquitectura de Zaragoza. Zaragoza, 2013. Tema 5, Colección de partículas.
- [9] AZNAR, M., MANYÀ, J. J., GARCÍA, G., SÁNCHEZ, J. L., MURILLO, M. B. ISSN 0887-0624. 2008. Influence of Freeboard Temperature, Fluidization Velocity, and Particle Size on Tar Production and Composition during the Air Gasification of Sewage Sludge. *Energy & Fuels*. 22(4), pp 2840-2850.
- [10] TINAUT, F. V., MELGAR, A., PÉREZ, J. F., HORRILLO, A. ISSN 0378-3820. 2008. Effect of Biomass Particle Size and Air Superficial Velocity on the Gasification Process in a Downdraft Fixed Bed Gasifier. An Experimental and Modelling Study. *Fuel Processing Technology*. 89(11), pp 1076-1089.
- [11] MARÍN, J. M., GUILLÉN, S. Diseño y cálculo de intercambiadores de calor monofásicos. 2013. Ed. Paraninfo.
- [12] BORNIQUEL MORENO, DANIEL. Desarrollo de modelos matemáticos para gasificación de biomasa. Proyecto Fin de Carrera de Ingeniería Química. Universidad de Zaragoza. 2014.
- [13] F-Chart Software. Engineering Equation Solver (EES), Academic Professional Version V 8.649; F-Chart Software: Madison, WI, 2010.

- [14] Database for biomass and waste. [Internet] ECN [consultado 20 febrero 2014]. Disponible en: <https://www.ecn.nl/phyllis2/Browse/Standard/ECN-Phyllis>
- [15] XIE, J., *et al.* ISSN 0960-8524. 2012. Simulation on Gasification of Forestry Residues in Fluidized Beds by Eulerian-Lagrangian Approach. *Bioresource technology*. 121 pp 36-46.
- [16] JAIN, V., D. GROULX, P. BASU. ISSN 0306-2619. 2010. Study of Heat Transfer between an Over-Bed Oil Burner Flame and a Fluidized Bed during Start-Up: Determination of the Flame to Bed Convection Coefficient. *Applied Energy*. 87(8), pp 2605-2614.
- [17] PROFESORES DEL DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA. Mecánica del Sólido Deformable. Escuela de Ingeniería y Arquitectura de Zaragoza. Zaragoza, 2012.
- [18] Dossier del laboratorio. [Internet] CIRCE [consultado 5 junio 2014]. Disponible en: <http://www.fcirce.es/web/page.aspx?id=labgas>
- [19] DE NERVERS, N. Ingeniería de control de la contaminación del aire. 1998. Ed. McGraw-Hill Interamericana, México.
- [20] MORAN, M. J., SHAPIRO, H. N. Fundamentos de termodinámica técnica, vol. 2, p. 695-705. 1999. Reverté, S.A.
- [21] WILKE, C. ISSN 0021-9606. 1950. A Viscosity Equation for Gas Mixtures. *Journal of Chemical Physics*. 18(4), pp 517-519.
- [22] MARÍN, J. M., MONNÉ, C., UCHE, J. Transferencia de calor. Área de Máquinas y Motores Térmicos. Universidad de Zaragoza. Ed. Kronos.
- [23] LAPUERTA, M., *et al.* ISSN 0378-3820. 2008. Gasification and Co-Gasification of Biomass Wastes: Effect of the Biomass Origin and the Gasifier Operating Conditions. *Fuel Processing Technology*. 89(9), pp 828-837.

8. ANEXOS

8. ANEXOS

8.1 TABLAS PARA EL CÁLCULO DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO

La obtención de los valores de las constantes de equilibrio de la Reacción de metanación y la Reacción water-gas shift se lleva a cabo mediante la energía libre de Gibbs.

En la tabla 4 se encuentran los datos de energía libre de Gibbs de formación, entalpía de formación y entalpía de combustión estándar de los distintos compuestos presentes durante las reacciones de gasificación. De la misma forma, se muestra en la tabla 4 las funciones de energía libre necesarias. A partir de estos datos se puede obtener una ecuación para la constante de reacción dependiente de la temperatura.

Tabla 4. Energías libre de Gibbs, entalpías de formación y funciones de energía libre.

	ΔG_f° [kJ/kmol]	ΔH_f° [kJ/kmol]	$-F_0$ [kJ/kmol - K]	$\Delta H_m^\circ(T^*) - \Delta H_m^\circ(0 K)$ [kJ/kmol]
C	0	0	11,6	1050
CO	-137,24	-110,6	204,1	8670
CO_2	-394,64	-393,78	226,4	9360
H_2	0	0	137	8500
H_2O	-228,76	-241,98	196,7	9910
CH_4	-50,85	-74,86	199,4	10030

8.2 ENTORNO DE ABAQUS

Se ha implementado el diseño mecánico del reactor de gasificación en el software Abaqus siguiendo el siguiente procedimiento.

Se ha dibujado el perfil del reactor con las siguientes dimensiones:

- 1.400 *mm* de altura.
- 12 *cm* de diámetro en la zona de freeboard, con una altura de 980 *mm*.
- 8 *cm* de diámetro en la zona del lecho, con una altura de 420 *mm*.
- 1,5 *mm* de espesor de la pared y 50 *mm* de espesor de las tapas.

Como el diseño se trata como un problema axisimétrico, no hace falta revolucionar 360° la figura, sino que sirve con hacerlo 90° tras haber escogido la opción de membrana deformable en 3D. Tras ello, se generan las secciones Pared y Tapa, cada una con el espesor correspondiente. Se les aplica a ambas el material creado Acero Inoxidable y se ensambla el conjunto.

Para simular la presión interior uniforme de 1,05 *atm* y las condiciones de contorno según la figura 19, es necesario crear un paso de simulación posterior al inicial e indicar que dichas propiedades se propagan linealmente.

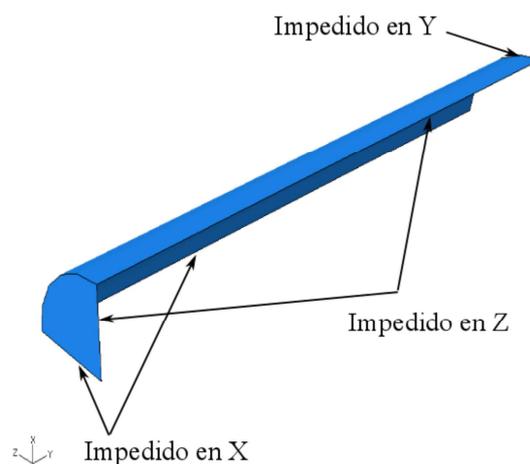


Fig 19. Condiciones de contorno tipo para un diseño de membrana o shell.

Por último, se debe mallar el conjunto para poder compilar el trabajo, ya que Abaqus resuelve los problemas por elementos finitos. El mallado escogido se puede ver en la Figura X y se trata de un mallado cuadrático estructurado "A 4-node doubly curved general-purpose shell, finite membrane strains", idóneo para definir las paredes del cilindro y la membrana o *shell*.

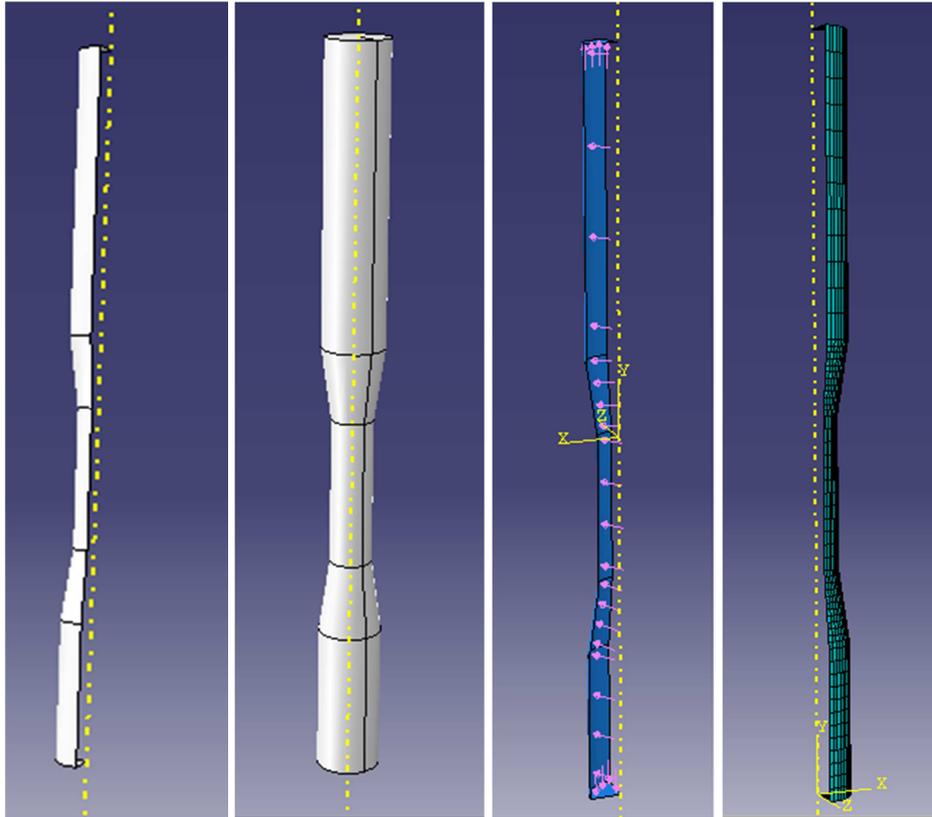


Fig 20. Diseño del reactor de gasificación en Abaqus. Detalles del perfil revolucionado 90°, perfil revolucionado, presión interior y mallado.

8.3 ENTORNO DE HYSYS

Se ha implementado la planta descrita a lo largo del trabajo en Aspen Hysys, una herramienta informática que permite diseñar y modelar distintos procesos y operaciones químicas. El objetivo de desarrollar el modelo en Hysys es aportar otro modelo teórico, aparte del desarrollado en EES, para validarlo conjuntamente con la bibliografía revisada.

En la figura 21 se muestra el diagrama de bloques del entorno de Hysys generado para el modelo, cuyo proceso se detalla a continuación.

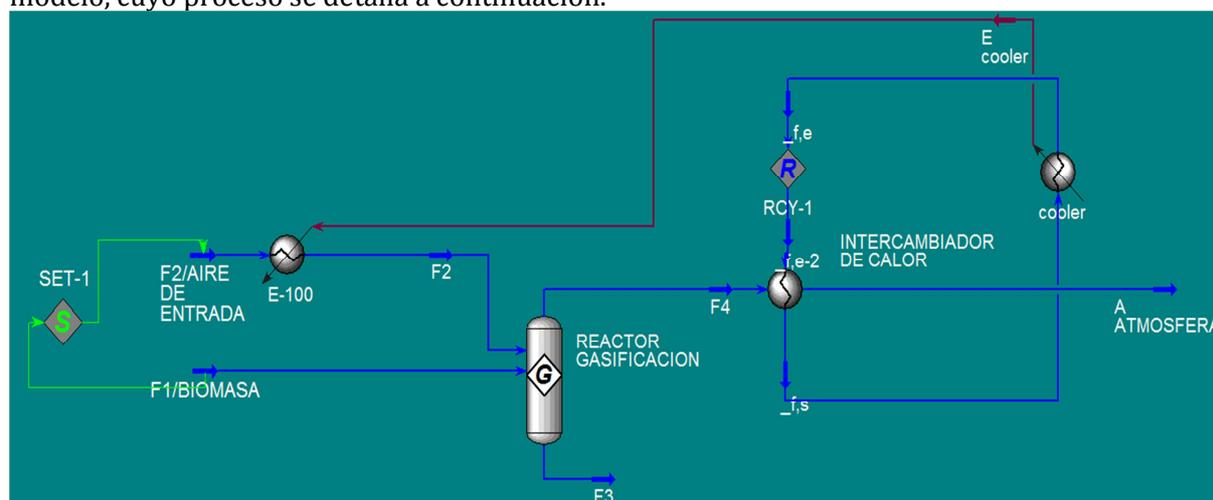


Fig 21. Simulación de la planta en Hysys.

Primero, se incorporan a la lista todos los componentes con los que se va a trabajar así como las dos reacciones de equilibrio, Water-gas shift y Metanación, que se introducirán en el gasificador. Después se define el paquete termodinámico que usará el programa y se asocia a las reacciones definidas anteriormente. Se escoge el PRSV como mejora del Peng-Robinson.

Tras estos pasos se pasa ya a la pantalla de diseño. Se crean dos corrientes que se corresponden con las de entrada al gasificador. La primera, a 25°C y $101,3\text{ kPa}$ es la biomasa de entrada, cuyo flujo másico y composición son conocidas. La segunda, la del aire de entrada, se define con las mismas características que la anterior, pero no se conoce su flujo. Estas dos corrientes se incluyen en el gasificador como entradas, así como se crean otras dos corrientes, F3 y F4, de las cuales no se conoce nada, como salidas. Es de reseñar el módulo Set introducido entre estas dos corrientes, de forma que hace las veces del *Frg* definido previamente, puesto que relaciona el flujo molar de ambas corrientes. De este modo, se asegura la operación del gasificador en defecto de aire. De lo contrario, si la corriente F2 se dejara sin ninguna otra restricción, se produciría realmente una combustión pues el aire de entrada sería el estequiométrico, pues esa es la solución que da Hysys al aplicar los balances de materia.

El gasificador es un reactor de Gibbs, que simplemente opera minimizando la energía libre de Gibbs del sistema a resolver aunque en el trabajo se ha intentado modificar ligeramente esas condiciones para acercarlo más al modelo de EES incluyéndole como tipo las dos ecuaciones de equilibrio.

La corriente F4, el gas de síntesis que sale por la parte superior del reactor, se lleva a un intercambiador de calor, cuya corriente fría es agua a 20°C y $101,3\text{ kPa}$. El calor absorbido por la misma se utiliza para precalentar la corriente de aire, colocando un *Cooler* (la corriente de agua

caliente que sale del intercambiador de calor pasa a la temperatura inicial, 20°C) y un *Heater* posteriormente (la energía del Cooler, el calor cedido, es el que se emplea para calentar la corriente de aire). Además es de reseñar que al existir una recirculación, puesto que por simplicidad se ha decidido diseñar un circuito cerrado de agua de refrigeración, se debe colocar un módulo *Recycle* en la corriente de agua.

8.4 ENTORNO DE EES

A continuación se expone el código generado en EES para el diseño del reactor de gasificación, separador ciclónico e intercambiador de calor respectivamente.

***** PROCEDURES *****

ESPERA CONVERSOR

Procedure **CONVERSOR** (alimentacion; C%ar; N%ar; H%ar; S%ar; O%ar; ash%ar; HHV_{ar} : C_{F1}; N_{F1}; H_{F1}; S_{F1}; O_{F1}; ash_{F1}; F1; HHV_{F1})

Masas molares que entran en juego

$$MC := \text{MolarMass} [C] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$MH := \text{MolarMass} [H] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$MN := \text{MolarMass} [N] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$MS := \text{MolarMass} [s] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$MO := \text{MolarMass} [O] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$MW := \text{MolarMass} [\text{water}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$MA := \text{MolarMass} [\text{Air}_{\text{ha}}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

1 Entrada reactor

$$C_{F1} := \text{alimentacion} \cdot \frac{C_{\%ar}}{100 \cdot MC} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$N_{F1} := \text{alimentacion} \cdot \frac{N_{\%ar}}{100 \cdot MN} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$H_{F1} := \text{alimentacion} \cdot \frac{H_{\%ar}}{100 \cdot MH} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$S_{F1} := \text{alimentacion} \cdot \frac{S_{\%ar}}{100 \cdot MS} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$O_{F1} := \text{alimentacion} \cdot \frac{O_{\%ar}}{100 \cdot MO} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$\text{ash}_{F1} := \text{alimentacion} \cdot \frac{\text{ash}_{\%ar}}{100} \quad [\text{kg/h}]$$

$$F1 := C_{F1} + N_{F1} + H_{F1} + S_{F1} + O_{F1} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$\text{HHV}_{F1} := \text{HHV}_{ar}$$

End **CONVERSOR**

ESPERA PORCENTAJES

Procedure **PORCENTAJES**_{F4} (CO_{F4}; CO2_{F4}; CH4_{F4}; H2_{F4}; H2O_{F4}; N2_{F4}; NH3_{F4}; SH2_{F4} : CO%F4; CO2%F4; CH4%F4; H2%F4; H2O%F4; N2%F4; NH3%F4; SH2%F4)

$$F4 := \text{CO}_{F4} + \text{CO2}_{F4} + \text{CH4}_{F4} + \text{H2}_{F4} + \text{H2O}_{F4} + \text{N2}_{F4} + \text{NH3}_{F4} + \text{SH2}_{F4}$$

$$\text{CO}\%F4 := 100 \cdot \frac{\text{CO}_{F4}}{F4}$$

$$\text{CO2\%F4} := 100 \cdot \frac{\text{CO2}_{\text{F4}}}{\text{F4}}$$

$$\text{CH4\%F4} := 100 \cdot \frac{\text{CH4}_{\text{F4}}}{\text{F4}}$$

$$\text{H2\%F4} := 100 \cdot \frac{\text{H2}_{\text{F4}}}{\text{F4}}$$

$$\text{H2O\%F4} := 100 \cdot \frac{\text{H2O}_{\text{F4}}}{\text{F4}}$$

$$\text{N2\%F4} := 100 \cdot \frac{\text{N2}_{\text{F4}}}{\text{F4}}$$

$$\text{NH3\%F4} := 100 \cdot \frac{\text{NH3}_{\text{F4}}}{\text{F4}}$$

$$\text{SH2\%F4} := 100 \cdot \frac{\text{SH2}_{\text{F4}}}{\text{F4}}$$

End **PORCENTAJES**_{F4}

ESPERA MASAS

Procedure **MASAS**_{F4} (CO_{F4}; CO2_{F4}; CH4_{F4}; H2_{F4}; H2O_{F4}; N2_{F4}; NH3_{F4}; SH2_{F4}; CO_{m4}; CO2_{m4}; CH4_{m4}; H2_{m4}; H2O_{m4}; N2_{m4}; NH3_{m4}; SH2_{m4}; m4)

Masas molares que entran en juego

$$\text{MCO} := \text{MolarMass} [\text{CarbonMonoxide}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$\text{MCO2} := \text{MolarMass} [\text{CarbonDioxide}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$\text{MCH4} := \text{MolarMass} [\text{Methane}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$\text{MH2} := \text{MolarMass} [\text{Hydrogen}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$\text{MH2O} := \text{MolarMass} [\text{water}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$\text{MN2} := \text{MolarMass} [\text{Nitrogen}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$\text{MNH3} := \text{MolarMass} [\text{Ammonia}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$\text{MSH2} := \text{MolarMass} [\text{HydrogenSulfide}] \quad [\text{kg/kmol}]$$

$$\text{CO}_{\text{m4}} := \text{MCO} \cdot \text{CO}_{\text{F4}} \quad [\text{kg/h}]$$

$$\text{CO2}_{\text{m4}} := \text{MCO2} \cdot \text{CO2}_{\text{F4}} \quad [\text{kg/h}]$$

$$\text{CH4}_{\text{m4}} := \text{MCH4} \cdot \text{CH4}_{\text{F4}} \quad [\text{kg/h}]$$

$$\text{H2}_{\text{m4}} := \text{MH2} \cdot \text{H2}_{\text{F4}} \quad [\text{kg/h}]$$

$$\text{H2O}_{\text{m4}} := \text{MH2O} \cdot \text{H2O}_{\text{F4}} \quad [\text{kg/h}]$$

$$\text{N2}_{\text{m4}} := \text{MN2} \cdot \text{N2}_{\text{F4}} \quad [\text{kg/h}]$$

$$\text{NH3}_{m4} := \text{MNH3} \cdot \text{NH3}_{F4} \quad [\text{kg/h}]$$

$$\text{SH2}_{m4} := \text{MSH2} \cdot \text{SH2}_{F4} \quad [\text{kg/h}]$$

$$m4 := \text{CO}_{m4} + \text{CO2}_{m4} + \text{CH4}_{m4} + \text{H2}_{m4} + \text{H2O}_{m4} + \text{N2}_{m4} + \text{NH3}_{m4} + \text{SH2}_{m4} \quad [\text{kg/h}]$$

End **MASAS**_{F4}

***** DATOS DE PARTIDA *****

Se introducen los datos de la biomasa a tratar, obtenido de la base ECN

COMPOSICIÓN: Porcentajes dados en el analisis inmediato, proximate analysis

$$W_{\%ar} = 13,83$$

$$\text{ash}_{\%dry} = 2,23$$

$$\text{VM}_{\%daf} = 82,23$$

$$\text{FC}_{\%daf} = 16,77$$

COMPOSICIÓN: Porcentajes dados en el analisis elemental, ultimate analysis

$$\text{C}_{\%daf} = 48,77$$

$$\text{H}_{\%daf} = 5,98$$

$$\text{N}_{\%daf} = 0,59$$

$$\text{S}_{\%daf} = 0,05$$

$$\text{O}_{\%daf} = 44,55$$

Poderes caloríficos [MJ/kg]

$$\text{LHV}_{daf} = 18,03 \quad [\text{MJ/kg}]$$

$$\text{HHV}_{daf} = 19,35 \quad [\text{MJ/kg}]$$

$$\text{alimentacion} = 600 \quad [\text{kg/h}]$$

Datos de presiones y temperaturas

$$P_{atm} = 101,3 \quad [\text{kPa}]$$

$$T_{amb} = 298 \quad [\text{K}]$$

$$T_{ref} = 298 \quad [\text{K}]$$

$$T_{F1} = 298 \quad [\text{K}]$$

$$T_{F2} = 298 \quad [\text{K}]$$

$$T_{F3} = 1523 \quad [\text{K}]$$

$$T_{\text{reactor}} = 1073 \text{ [K]}$$

*******CONVERSION** daf -> ar *****

Los cálculos finales se deben realizar con la composición de la madera tal y como se recibe (AR) y no como se mide (DAF). Se pasan las composiciones a AR para lo que hace falta tenerlas también en DRY,AF&DAF

Balances ar

$$100 = W_{\%ar} + \text{ash}_{\%ar} + VM_{\%ar} + FC_{\%ar}$$

Balances dry

$$100 = \text{ash}_{\%dry} + VM_{\%dry} + FC_{\%dry}$$

$$\text{ash}_{\%dry} = 100 \cdot \left[\frac{\text{ash}_{\%ar}}{\text{ash}_{\%ar} + VM_{\%ar} + FC_{\%ar}} \right]$$

$$VM_{\%dry} = 100 \cdot \left[\frac{VM_{\%ar}}{\text{ash}_{\%ar} + VM_{\%ar} + FC_{\%ar}} \right]$$

Balances af

$$100 = W_{\%af} + VM_{\%af} + FC_{\%af}$$

$$W_{\%af} = 100 \cdot \left[\frac{W_{\%ar}}{W_{\%ar} + VM_{\%ar} + FC_{\%ar}} \right]$$

$$VM_{\%af} = 100 \cdot \left[\frac{VM_{\%ar}}{W_{\%ar} + VM_{\%ar} + FC_{\%ar}} \right]$$

Balances daf

$$VM_{\%daf} = 100 \cdot \left[\frac{VM_{\%ar}}{VM_{\%ar} + FC_{\%ar}} \right]$$

Composiciones elementales AR

$$C_{\%ar} = C_{\%af} \cdot \left[\frac{100 - \text{ash}_{\%ar}}{100} \right]$$

$$H_{\%ar} = H_{\%af} \cdot \left[\frac{100 - \text{ash}_{\%ar}}{100} \right]$$

$$N_{\%ar} = N_{\%af} \cdot \left[\frac{100 - \text{ash}_{\%ar}}{100} \right]$$

$$S_{\%ar} = S_{\%af} \cdot \left[\frac{100 - \text{ash}_{\%ar}}{100} \right]$$

$$O_{\%ar} = O_{\%af} \cdot \left[\frac{100 - \text{ash}_{\%ar}}{100} \right]$$

Composiciones elementales DRY

$$C_{\%dry} = C_{\%daf} \cdot \left[\frac{100 - ash_{\%dry}}{100} \right]$$

$$H_{\%dry} = H_{\%daf} \cdot \left[\frac{100 - ash_{\%dry}}{100} \right]$$

$$N_{\%dry} = N_{\%daf} \cdot \left[\frac{100 - ash_{\%dry}}{100} \right]$$

$$S_{\%dry} = S_{\%daf} \cdot \left[\frac{100 - ash_{\%dry}}{100} \right]$$

$$O_{\%dry} = O_{\%daf} \cdot \left[\frac{100 - ash_{\%dry}}{100} \right]$$

Composiciones elementales AF

$$C_{\%af} = C_{\%daf} \cdot \left[\frac{100 - W_{\%af}}{100} \right]$$

$$N_{\%af} = N_{\%daf} \cdot \left[\frac{100 - W_{\%af}}{100} \right]$$

$$S_{\%af} = S_{\%daf} \cdot \left[\frac{100 - W_{\%af}}{100} \right]$$

Se parte de 1kg de entrada en AF

$$H_{\%af} = \frac{1}{10} \cdot [H_{daf;inherente} + H_{af;humedad}]$$

$$H_{daf;inherente} = \frac{H_{\%daf}}{100} \cdot [1000 - 10 \cdot W_{\%af}]$$

$$H_{af;humedad} = 10 \cdot \frac{W_{\%af}}{9}$$

$$100 = C_{\%af} + H_{\%af} + N_{\%af} + S_{\%af} + O_{\%af}$$

$$HHV_{ar} = HHV_{af} \cdot \left[\frac{100 - ash_{\%ar}}{100} \right]$$

$$HHV_{dry} = HHV_{daf} \cdot \left[\frac{100 - ash_{\%dry}}{100} \right]$$

$$HHV_{af} = HHV_{daf} \cdot \left[\frac{100 - W_{\%af}}{100} \right]$$

$$\lambda_{H_2O;25^\circ C} = 2,44 \text{ [MJ/kg]}$$

Balances ar

$$m_{ar;H_2O} = 9 \cdot \frac{H_{\%ar}}{100} \cdot \left[1 - \frac{W_{\%ar}}{100} \right]$$

$$LHV_{ar} = HHV_{ar} - m_{ar;H_2O} \cdot \lambda_{H_2O;25^\circ C}$$

Balances dry

$$m_{\text{dry,H}_2\text{O}} = 9 \cdot \frac{H_{\% \text{dry}}}{100}$$

$$\text{LHV}_{\text{dry}} = \text{HHV}_{\text{dry}} - m_{\text{dry,H}_2\text{O}} \cdot \lambda_{\text{H}_2\text{O};25^\circ\text{C}}$$

Balances af

$$m_{\text{af,H}_2\text{O}} = 9 \cdot \frac{H_{\% \text{af}}}{100} \cdot \left[1 - \frac{W_{\% \text{af}}}{100} \right]$$

$$\text{LHV}_{\text{af}} = \text{HHV}_{\text{af}} - m_{\text{af,H}_2\text{O}} \cdot \lambda_{\text{H}_2\text{O};25^\circ\text{C}}$$

Call **CONVERSOR** [alimentacion; C_{%ar}; N_{%ar}; H_{%ar}; S_{%ar}; O_{%ar}; ash_{%ar}; HHV_{ar}; C_{F1}; N_{F1}; H_{F1}; S_{F1}; O_{F1}; ash_{F1}; F₁; HHV_{F1}]

*****AJUSTE ESTEQUIOMÉTRICO DE LA COMBUSTIÓN DE LA BIOMASA*****

4 Gases salida

$$C_{F1} = \text{CO}_{2\text{F4;estq}} \quad \text{Balance a la especie C} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$H_{F1} = 2 \cdot \text{H}_2\text{O}_{\text{F4;estq}} \quad \text{Balance a la especie H} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$O_{F1} + 2 \cdot \text{O}_{2\text{F2;estq}} = 2 \cdot \text{CO}_{2\text{F4;estq}} + \text{H}_2\text{O}_{\text{F4;estq}} + 2 \cdot \text{SO}_{2\text{F4;estq}} \quad \text{Balance a la especie O} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$S_{F1} = \text{SO}_{2\text{F4;estq}} \quad \text{Balance a la especie S} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$N_{2\text{F2;estq}} = \frac{79}{21} \cdot \text{O}_{2\text{F2;estq}}$$

$$\text{ER} = 100 \cdot \frac{\text{O}_{2\text{F2}}}{\text{O}_{2\text{F2;estq}}}$$

*****REACCIÓN GASIFICACIÓN EN DEFECTO DE AIRE*****

2 Entrada aire

$$N_{2\text{F2}} = \frac{79}{21} \cdot \text{O}_{2\text{F2}} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$\text{Air} = \text{O}_{2\text{F2}} + N_{2\text{F2}}$$

3 Salida reactor a depósito de residuos

$$\text{perdida}\% \text{FC} = 5 \quad \text{Pérdida de FC del 5\% en masa del caudal de entrada}$$

$$C_{F3} = \frac{\text{perdida}\% \text{FC}}{100} \cdot C_{F1} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$\text{ash}_{F3} = \text{ash}_{F1} \quad [\text{kg/h}]$$

4 Syngas

$$C_{F1} = \text{CO}_{F4} + \text{CO}_{2\text{F4}} + \text{CH}_{4\text{F4}} + C_{F3} \quad \text{Balance a la especie C} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$H_{F1} = 4 \cdot \text{CH}_{4\text{F4}} + 2 \cdot \text{H}_{2\text{F4}} + 2 \cdot \text{H}_2\text{O}_{F4} + 3 \cdot \text{NH}_{3\text{F4}} + 2 \cdot \text{SH}_{2\text{F4}} \quad \text{Balance a la especie H} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$N_{F1} = NH_{3F4} \quad \text{Balance a la especie N (I)} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$2 \cdot N_{2F2} = 2 \cdot N_{2F4} \quad \text{Balance a la especie N (II)} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$S_{F1} = SH_{2F4} \quad \text{Balance a la especie S} \quad [\text{kmol/h}]$$

$$O_{F1} + 2 \cdot O_{2F2} = CO_{F4} + 2 \cdot CO_{2F4} + H_2O_{F4} \quad \text{Balance a la especie O} \quad [\text{kmol/h}]$$

CÁLCULOS CONSTANTES DE EQUILIBRIO

$F_{o,xx}$: funciones de ENERGÍA LIBRE necesarias para los cálculos

$$- F_{o,C} = 11,6 \quad [\text{kJ/kmol-K}]$$

$$- F_{o,CO} = 204,1 \quad [\text{kJ/kmol-K}]$$

$$- F_{o,CO_2} = 226,4 \quad [\text{kJ/kmol-K}]$$

$$- F_{o,CH_4} = 199,4 \quad [\text{kJ/kmol-K}]$$

$$- F_{o,H_2} = 137 \quad [\text{kJ/kmol-K}]$$

$$- F_{o,H_2O} = 196,7 \quad [\text{kJ/kmol-K}]$$

$difH^0_{m,xx} = \Delta H^0_{m(T^*)} - \Delta H^0_{m(0K)}$: diferencias de ENTALPÍA DE REACCIÓN necesarias para los cálculos

$$difH^0_{m,C} = 1050 \quad [\text{kJ/kmol}]$$

$$difH^0_{m,CO} = 8670 \quad [\text{kJ/kmol}]$$

$$difH^0_{m,CO_2} = 9360 \quad [\text{kJ/kmol}]$$

$$difH^0_{m,CH_4} = 10030 \quad [\text{kJ/kmol}]$$

$$difH^0_{m,H_2} = 8500 \quad [\text{kJ/kmol}]$$

$$difH^0_{m,H_2O} = 9910 \quad [\text{kJ/kmol}]$$

REACCIÓN DE METANACIÓN (met): $C+2H_2 \leftrightarrow CH_4$

$$\Delta H_{met,298K} = -74900 \quad [\text{kJ/kmol}]$$

$$F_{o,met} = F_{o,CH_4} - F_{o,C} - 2 \cdot F_{o,H_2}$$

$$difH^0_{m,met} = difH^0_{m,CH_4} - difH^0_{m,C} - 2 \cdot difH^0_{m,H_2}$$

$$StMolarGibbs_{met} = F_{o,met} + \frac{\Delta H_{met,298K}}{T_{reactor}} - \frac{difH^0_{m,met}}{T_{reactor}}$$

$$\ln [MET] = \frac{StMolarGibbs_{met}}{8,314 \quad [\text{kJ/kmol-K}]}$$

$$K_{met} = \frac{1}{MET}$$

$$K_{met} = \frac{CH_{4F4}}{H_{2F4}^2}$$

REACCIÓN DE WATER-GAS SHIFT (wgs): $CO+H_2O \leftrightarrow CO_2+H_2$

$$\Delta H_{\text{wgs};298\text{K}} = -41200 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$F_{\text{o};\text{wgs}} = F_{\text{o};\text{CO}_2} + F_{\text{o};\text{H}_2} - F_{\text{o};\text{CO}} - F_{\text{o};\text{H}_2\text{O}}$$

$$\text{dif}H^{\circ}_{\text{m};\text{wgs}} = \text{dif}H^{\circ}_{\text{m};\text{CO}_2} + \text{dif}H^{\circ}_{\text{m};\text{H}_2} - \text{dif}H^{\circ}_{\text{m};\text{CO}} - \text{dif}H^{\circ}_{\text{m};\text{H}_2\text{O}}$$

$$\text{StMolarGibbs}_{\text{wgs}} = F_{\text{o};\text{wgs}} + \frac{\Delta H_{\text{wgs};298\text{K}}}{T_{\text{reactor}}} - \frac{\text{dif}H^{\circ}_{\text{m};\text{wgs}}}{T_{\text{reactor}}}$$

$$\ln [\text{WGS}] = \frac{\text{StMolarGibbs}_{\text{wgs}}}{8,314 \text{ [kJ/kmol-K]}}$$

$$K_{\text{wgs}} = \frac{1}{\text{WGS}}$$

$$K_{\text{wgs}} = \frac{\text{CO}_{2\text{F}_4} \cdot \text{H}_{2\text{F}_4}}{\text{CO}_{\text{F}_4} \cdot \text{H}_{2\text{O}_{\text{F}_4}}}$$

Cálculo de la entalpía aparente del fuel (biomasa) a partir de: $-\text{PCS}=(n\Delta\text{TAH}^{\circ}_{\text{f,productoscombustioncompleta}})-\Delta\text{TAH}^{\circ}_{\text{f,aparente,biomasa}}$

$$h^{\circ}_{\text{f};\text{SO}_2} = -296900 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$-\text{HHV}_{\text{F}_1} \cdot \left| 1000 \cdot \frac{\text{kJ}}{\text{MJ}} \right| \cdot \text{alimentacion} = \text{CO}_{2\text{F}_4;\text{estq}} \cdot h^{\circ}_{\text{f};\text{CO}_2} + \text{H}_2\text{O}_{\text{F}_4;\text{estq}} \cdot h^{\circ}_{\text{f};\text{H}_2\text{O};\text{l}} + \text{SO}_{2\text{F}_4;\text{estq}} \cdot h^{\circ}_{\text{f};\text{SO}_2} - h^{\circ}_{\text{f};\text{aparente};\text{biomasa}} \cdot \text{alimentacion}$$

BALANCE DE ENERGÍA

CALOR del reactor

$$\text{perdidascalor}\% = 10$$

$$Q = \frac{\text{perdidascalor}\%}{100} \cdot h^{\circ}_{\text{f};\text{aparente};\text{biomasa}} \text{ [kJ/kg]}$$

$$E_{\text{F}_4} = \text{CO}_{\text{F}_4} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{COF}_4} + \text{CO}_{2\text{F}_4} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{CO}_2\text{F}_4} + \text{CH}_{4\text{F}_4} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{CH}_4\text{F}_4} + \text{H}_{2\text{F}_4} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{H}_2\text{F}_4} + \text{H}_{2\text{O}_{\text{F}_4}} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{H}_2\text{OF}_4} + \text{N}_{2\text{F}_4} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{N}_2\text{F}_4} + \text{NH}_{3\text{F}_4} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{NH}_3\text{F}_4} + \text{SH}_{2\text{F}_4} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{SH}_2\text{F}_4}$$

ECUACIÓN BdE COMO: CALOR PERDIDO = SUMATORIO ENTALPÍAS DE PRODUCTOS CON SUS FLUJOS MOLARES - SUMATORIO ENTALPÍAS DE REACTIVOS CON SUS FLUJOS MOLARES

$$Q \cdot \text{alimentacion} = E_{\text{F}_4} + C_{\text{F}_3} \cdot \Delta H^{\circ}_{\text{f};\text{C};\text{F}_3} + \text{ash}_{\text{F}_3} \cdot h_{\text{solidos}} \cdot T_{\text{F}_3} - \text{alimentacion} \cdot h^{\circ}_{\text{f};\text{aparente};\text{biomasa}} \text{ [kJ/h]}$$

CÁLCULOS DE LAS ENTALPÍAS NECESARIAS PARA LOS BdE

ENTALPÍA DE LOS GASES CALCULADA COMO: ENTALPÍA DE FORMACIÓN COMPUESTO + ENTALPÍA A TEMPERATURA GAS (TF4) - ENTALPÍA A TEMPERATURA REFERENCIA (298K)

$$\text{CO}_{\text{F}_4}$$

$$\Delta H_{f,COF4}^0 = h_{f,CO}^0 + h_{COF4,TF4} - h_{COF4,T;ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,CO}^0 = -110400 \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{COF4,TF4} = h \text{ [CarbonMonoxide ; } T=T_{reactor} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{COF4,T;ref} = h \text{ [CarbonMonoxide ; } T=T_{ref} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

CO₂F₄

$$\Delta H_{f,CO2F4}^0 = h_{f,CO2}^0 + h_{CO2F4,TF4} - h_{CO2F4,T;ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,CO2}^0 = -393500 \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{CO2F4,TF4} = h \text{ [CarbonDioxide ; } T=T_{reactor} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{CO2F4,T;ref} = h \text{ [CarbonDioxide ; } T=T_{ref} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

CH₄F₄

$$\Delta H_{f,CH4F4}^0 = h_{f,CH4F4}^0 + h_{CH4F4,TF4} - h_{CH4F4,T;ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,CH4F4}^0 = -74800 \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{CH4F4,TF4} = h \text{ [Methane ; } T=T_{reactor} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{CH4F4,T;ref} = h \text{ [Methane ; } T=T_{ref} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

H₂F₄

$$\Delta H_{f,H2F4}^0 = h_{f,H2}^0 + h_{H2F4,TF4} - h_{H2F4,T;ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,H2}^0 = 0$$

$$h_{H2F4,TF4} = h \text{ [Hydrogen ; } T=T_{reactor} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{H2F4,T;ref} = h \text{ [Hydrogen ; } T=T_{ref} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

H₂O(l)_{F4}

$$\Delta H_{f,H2OF4}^0 = h_{f,H2O,l}^0 + h_{H2OF4,TF4} - h_{H2OF4,T;ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,H2O,l}^0 = -285500 \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{H2OF4,TF4} = h \text{ [water ; } T=T_{reactor} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{H2OF4,T;ref} = h \text{ [water ; } T=T_{ref} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

N₂F₄

$$\Delta H_{f,N2F4}^0 = h_{f,N2}^0 + h_{N2F4,TF4} - h_{N2F4,T;ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,N2}^0 = 0$$

$$h_{N2F4,TF4} = h \text{ [Nitrogen ; } T=T_{reactor} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{N2F4,T;ref} = h \text{ [Nitrogen ; } T=T_{ref} \text{ ; } P=P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

NH₃F₄ (gas)

$$\Delta H_{f,NH_3F_4}^0 = h_{f,NH_3}^0 + h_{NH_3F_4,TF_4} - h_{NH_3F_4,T,ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,NH_3}^0 = -46200 \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{NH_3F_4,TF_4} = h \text{ [Ammonia ; } T = T_{reactor} \text{ ; } P = P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{NH_3F_4,T,ref} = h \text{ [Ammonia ; } T = T_{ref} \text{ ; } P = P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

SH₂F₄

$$\Delta H_{f,SH_2F_4}^0 = h_{f,SH_2}^0 + h_{SH_2F_4,TF_4} - h_{SH_2F_4,T,ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,SH_2}^0 = -20200 \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{SH_2F_4,TF_4} = h \text{ [HydrogenSulfide ; } T = T_{reactor} \text{ ; } P = P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{SH_2F_4,T,ref} = h \text{ [HydrogenSulfide ; } T = T_{ref} \text{ ; } P = P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

C_{F3}

$$h_{solidos} = 0,84 \quad [kJ/kg-K] \quad \text{ENTALPÍA DE LOS SÓLIDOS, OBTENIDA DE ARTÍCULO [26]}$$

$$MC = \text{MolarMass} [C] \quad [kg/kmol]$$

$$\Delta H_{f,C;F_3}^0 = h_{solidos} \cdot MC \cdot T_{F_3} \quad [kJ/kmol]$$

N₂F₂

$$\Delta H_{f,N_2F_2}^0 = h_{f,N_2}^0 + h_{N_2F_2,TF_2} - h_{N_2F_2,T,ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{N_2F_2,TF_2} = h \text{ [Nitrogen ; } T = T_{F_2} \text{ ; } P = P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{N_2F_2,T,ref} = h \text{ [Nitrogen ; } T = T_{ref} \text{ ; } P = P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

O₂F₂

$$\Delta H_{f,O_2F_2}^0 = h_{f,O_2}^0 + h_{O_2F_2,TF_2} - h_{O_2F_2,T,ref} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{f,O_2}^0 = 0 \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{O_2F_2,TF_2} = h \text{ [Oxygen ; } T = T_{F_2} \text{ ; } P = P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

$$h_{O_2F_2,T,ref} = h \text{ [Oxygen ; } T = T_{ref} \text{ ; } P = P_{atm} \text{]} \quad [kJ/kmol]$$

Call **PORCENTAJES**_{F4} [CO_{F4} ; CO₂_{F4} ; CH₄_{F4} ; H₂_{F4} ; H₂O_{F4} ; N₂_{F4} ; NH₃_{F4} ; SH₂_{F4} ; CO%F4 ; CO2%F4 ; CH4%F4 ; H2%F4 ; H2O%F4 ; N2%F4 ; NH3%F4 ; SH2%F4]

\$export 'C:\Users\guillermo\Desktop\TFG\EXPORTARPORCENTAJES.txt' CO%F4;CO2%F4;CH4%F4;H2%F4;H2O%F4;N2%F4;N3%F4;SH2%F4

Call **MASAS**_{F4} [CO_{F4} ; CO₂_{F4} ; CH₄_{F4} ; H₂_{F4} ; H₂O_{F4} ; N₂_{F4} ; NH₃_{F4} ; SH₂_{F4} ; CO_{m4} ; CO₂_{m4} ; CH₄_{m4} ; H₂_{m4} ; H₂O_{m4} ; N₂_{m4} ; NH₃_{m4} ; SH₂_{m4} ; m4]

\$export 'C:\Users\guillermo\Desktop\TFG\EXPORTARMASAS.txt' m4

\$export 'C:\Users\guillermo\Desktop\TFG\EXPORTARGASIFICADOR.txt' P_{atm};T_{amb};T_{ref};T_{F1};T_{F2};T_{F3};T_{reactor};CO_{F4};CO₂_{F4};CH₄_{F4};H₂_{F4};H₂O_{F4};N₂_{F4};NH₃_{F4}

CÁLCULOS PARA GRAFOS

RELATIVE BIOMASS/AIR RATIO

$$\text{frg} = \frac{F1}{\text{Air}}$$

RATIO CO-H2

$$\text{ratioCOH2} = \frac{\text{CO}_{m4}}{\text{H2}_{m4}}$$

******* PROCEDURE WILKE PARA EL CÁLCULO DE LA VISCOSIDAD Y CONDUCTIVIDAD MEDIA DE UNA MEZCLA DE GASES*******

Procedure **WILKE** (F4; CO_{F4}; CO₂_{F4}; CH₄_{F4}; H₂_{F4}; H₂O_{F4}; N₂_{F4}; NH₃_{F4}; T_{reactor}; P_{atm}; μ_{media})

PROPIEDADES DE MATERIALES NECESARIAS EN EL PROCEDURE

MW₁ := **MolarMass** [CarbonMonoxide]

μ₁ := **Visc** [CarbonMonoxide ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]

$$x_1 := \frac{CO_{F4}}{F4}$$

MW₂ := **MolarMass** [CarbonDioxide]

μ₂ := **Visc** [CarbonDioxide ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]

$$x_2 := \frac{CO2_{F4}}{F4}$$

MW₃ := **MolarMass** [Methane]

μ₃ := **Visc** [Methane ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]

$$x_3 := \frac{CH4_{F4}}{F4}$$

MW₄ := **MolarMass** [Hydrogen]

μ₄ := **Visc** [Hydrogen ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]

$$x_4 := \frac{H2_{F4}}{F4}$$

MW₅ := **MolarMass** [water]

μ₅ := **Visc** [water ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]

$$x_5 := \frac{H2O_{F4}}{F4}$$

MW₆ := **MolarMass** [Nitrogen]

μ₆ := **Visc** [Nitrogen ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]

$$x_6 := \frac{N2_{F4}}{F4}$$

MW₇ := **MolarMass** [Ammonia]

μ₇ := **Visc** [Ammonia ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]

$$x_7 := \frac{NH3_{F4}}{F4}$$

Duplicate i=1;7

CÁLCULO MATRIZ DEL NÚMERO ADIMENSIONAL

Duplicate j=1;7

If [i = j] Then PHI_{i;j} := 1 Else

$$PHI_{i,j} := \frac{1}{\sqrt{8}} \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{MW_i}{MW_j}}} \right] \cdot \left[1 + \left(\frac{mu_i}{mu_j} \right)^{(1/2)} \cdot \left(\frac{MW_i}{MW_j} \right)^{(1/4)} \right]^2 \quad \text{EndIf}$$

End

End

Duplicate i=1;7

CALCULO VECTOR DENOMINADOR

Duplicate j=1;7 $d_j := x_j \cdot PHI_{i,j}$ End

$den_i := \sum_{j=1}^7 d_j$ End

RESULTADO FINAL

Duplicate i=1;7 $mu_{media\ i} := x_i \cdot \frac{mu_i}{den_i}$ End

$\mu_{media} := \sum_{i=1}^7 \mu_{media\ i}$

End **WILKE**

*******FIN PROCEDURE WILKE*******

\$import 'C:\Users\guillermo\Desktop\TFG\exportargasificador.txt' /skiplines=15 P_{atm};T_{amb};T_{ref};T_{F1};T_{F2};T_{F3};T_{reactor};CO_{F4};CO₂;F₄;CH₄;F₄;H₂;F₄;H₂O;F₄;N₂;F₄;NH₃;F₄

*******Cálculo volúmenes especificos en F4 necesarios para calcular Q_{F4}*******

$v_{COF4} = v [\text{CarbonMonoxide} ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]$

$v_{CO2F4} = v [\text{CarbonDioxide} ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]$

$v_{CH4F4} = v [\text{Methane} ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]$

$v_{H2F4} = v [\text{Hydrogen} ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]$

$v_{H2OF4} = v [\text{water} ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]$

$v_{N2F4} = v [\text{Nitrogen} ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]$

$v_{NH3F4} = v [\text{Ammonia} ; T = T_{reactor} ; P = P_{atm}]$

~~~~~  
 \*\*\*\*\* **CICLÓN** \*\*\*\*\*  
 ~~~~~

Dimensiones fijadas

$N_e = 8$ *Número de giros efectivos. Demostrado a partir de su definición*

$\rho_{F4;p} = 1050$ [kg/m³] *Densidad de las partículas de entrada al ciclón [14]*

$$Q_{F4} = \left| 0,000277778 \cdot \frac{h}{s} \right| \cdot [CO_{F4} \cdot v_{COF4} + CO_{2F4} \cdot v_{CO2F4} + CH_{4F4} \cdot v_{CH4F4} + H_{2F4} \cdot v_{H2F4} + H_{2O_{F4}} \cdot v_{H2OF4} + N_{2F4} \cdot v_{N2F4} + NH_{3F4} \cdot v_{NH3F4}]$$

*Caudal gas de entrada al ciclón: [m³/s]=kmol/h*1h/3600s*m³/kmol*

Viscosidad del gas de entrada al ciclón PROCEDURE WILKE

$$F4 = CO_{F4} + CO_{2F4} + CH_{4F4} + H_{2F4} + H_{2O_{F4}} + N_{2F4} + NH_{3F4}$$

Call **WILKE** [F4 ; CO_{F4} ; CO_{2F4} ; CH_{4F4} ; H_{2F4} ; H_{2O_{F4}} ; N_{2F4} ; NH_{3F4} ; T_{reactor} ; P_{atm} ; μ_{media}]

Dimensionamiento

D_o Diámetro total

$$W_i = \frac{D_o}{4}$$

$$D_e = \frac{D_o}{2}$$

$$H = \frac{D_o}{2}$$

$$H_1 = 2 \cdot D_o$$

$$S = 0,625 \cdot D_o$$

$$H_2 = 2 \cdot D_o$$

$$D_d = \frac{D_o}{4}$$

Parámetros

$$N_e = \frac{1}{H} \cdot \left[H_1 + \frac{H_1 + H_2}{2} \right]$$

$$A_{ciclón} = W_i \cdot H$$

$$u = \frac{Q_{F4}}{A_{ciclón}} \text{ Velocidad del gas a la entrada del ciclón}$$

$$D_{p50} = \left[\frac{9 \cdot \mu_{media} \cdot W_i}{2 \cdot 3,142 \cdot N_e \cdot u \cdot \rho_{F4;p}} \right]^{[1 / 2]} \text{ Diámetro de corte}$$

$$\eta_i = 90$$

$$\frac{\eta_i}{100} = \frac{\left[\frac{D_{pi}}{D_{p50}} \right]^2}{1 + \left[\frac{D_{pi}}{D_{p50}} \right]^2}$$

$$D_{p|D;p50} = \frac{D_{pi}}{D_{p50}} \quad \text{Defino la variable } D_{p|D;p50} \text{ para poder representar en un grafo la eficacia del ciclón en función del tamaño de partícula}$$

***** PROCEDURE NUSSELT PARA EL CÁLCULO DEL NUSSELT EN EL INTERIOR DE LOS TUBOS*****

Procedure **NUSSELT** (Re_f; D_i; Pr_f; L_t : Nusselt_f)

If [Re_f < 2300] Then *Régimen LAMINAR*

$$x_{cdh} := 0,056 \cdot Re_f \cdot D_i \quad \text{Longitud entrada hidráulica}$$

$$x_{cdt} := 0,043 \cdot Re_f \cdot Pr_f \cdot D_i \quad \text{Longitud entrada térmica}$$

$$Gz_f := \frac{Re_f \cdot Pr_f \cdot D_i}{L_t}$$

If [x_{cdt} > 10 · x_{cdh}] Then *Entrada puramente térmica*

$$Nusselt_f := 4,36 + 0,023 \cdot \ln [1 + (0,0012 \cdot Gz_f)^{-1}] \quad \text{Correlación de Hausen}$$

Else *Entrada combinada térmica/hidráulica*

$$Nusselt_f := 4,36 + 0,036 \cdot \ln [1 + (0,0011 \cdot Gz_f)^{-1}] \quad \text{Correlación de Kays}$$

EndIf

Else *Régimen TURBULENTO*

$$\varepsilon := 0,00004 \quad [\text{m}] \quad \text{Rugosidad de la pared del tubo interior de acero comercial}$$

$$f := \left[-0,8685 \cdot \ln \left(\frac{1,964 \cdot \ln [Re_f] - 3,8215}{Re_f} + \frac{\varepsilon}{3,71 \cdot D_i} \right) \right]^{-2} \quad \text{Factor de fricción}$$

$$Nusselt_f := \left[\frac{\frac{f}{8} \cdot (Re_f - 1000) \cdot Pr_f}{1 + 12,7 \cdot \left(\frac{f}{8} \right)^{0,5} \cdot (Pr_f^{2/3} - 1)} \right] \cdot \left[1 + \left(\frac{D_i}{L_t} \right)^{(2/3)} \right] \quad \text{Correlación de Gnielinski para régimen turbulento}$$

EndIf

End **NUSSELT**

*****FIN PROCEDURE NUSSELT*****

***** PROCEDURE WILKE PARA EL CÁLCULO DE LA VISCOSIDAD Y CONDUCTIVIDAD MEDIA DE UNA MEZCLA DE GASES*****

Procedure **WILKE** (F4; CO_{F4}; CO_{2F4}; CH_{4F4}; H_{2F4}; H_{2O}_{F4}; N_{2F4}; NH_{3F4}; T_{c,m}; P_{atm} : μ_c)

PROPIEDADES DE MATERIALES NECESARIAS EN EL PROCEDURE

$$MW_1 := \text{MolarMass} [\text{CarbonMonoxide}]$$

$$\mu_1 := \text{Visc} [\text{CarbonMonoxide} ; T = T_{c,m} ; P = P_{atm}]$$

$$x_1 := \frac{CO_{F4}}{F4}$$

$$MW_2 := \text{MolarMass} [\text{CarbonDioxide}]$$

$$\mu_2 := \text{Visc} [\text{CarbonDioxide}; T = T_{c,m}; P = P_{atm}]$$

$$x_2 := \frac{CO2_{F4}}{F4}$$

$$MW_3 := \text{MolarMass} [\text{Methane}]$$

$$\mu_3 := \text{Visc} [\text{Methane}; T = T_{c,m}; P = P_{atm}]$$

$$x_3 := \frac{CH4_{F4}}{F4}$$

$$MW_4 := \text{MolarMass} [\text{Hydrogen}]$$

$$\mu_4 := \text{Visc} [\text{Hydrogen}; T = T_{c,m}; P = P_{atm}]$$

$$x_4 := \frac{H2_{F4}}{F4}$$

$$MW_5 := \text{MolarMass} [\text{water}]$$

$$\mu_5 := \text{Visc} [\text{water}; T = T_{c,m}; P = P_{atm}]$$

$$x_5 := \frac{H2O_{F4}}{F4}$$

$$MW_6 := \text{MolarMass} [\text{Nitrogen}]$$

$$\mu_6 := \text{Visc} [\text{Nitrogen}; T = T_{c,m}; P = P_{atm}]$$

$$x_6 := \frac{N2_{F4}}{F4}$$

$$MW_7 := \text{MolarMass} [\text{Ammonia}]$$

$$\mu_7 := \text{Visc} [\text{Ammonia}; T = T_{c,m}; P = P_{atm}]$$

$$x_7 := \frac{NH3_{F4}}{F4}$$

Duplicate 17 j=1;7

CÁLCULO MATRIZ DEL NÚMERO ADIMENSIONAL

Else

$$PHI_{i,j} := \frac{1}{\sqrt{8}} \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{MW_i}{MW_j}}} \right] \cdot \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{(1/2)} \cdot \left(\frac{MW_i}{MW_j} \right)^{(1/4)} \right]^2$$

Endif

End

Duplicate 17 j=1;7

CÁLCULO VECTOR DENOMINADOR

End

$$\text{den}_i := W_i \cdot \rho_i \quad \rho_i \text{ [051; 1; 7]}$$

Enduplicate i=1;7

RESULTADO FINAL

$$\mu_{c,i} := x_i \cdot \frac{\mu_i}{\text{den}_i}$$

End

$$\mu_c := W_c \cdot \rho_c \quad \rho_c \text{ [053; 1; 7]}$$

End **WILKE**

*******FIN PROCEDURE WILKE*******

***** **PROCEDURE PROPIEDADES MEDIAS DEL GAS. FLUIDO EXTERIOR*******

Procedure **PROPIEDADES** (CO%F4; CO2%F4; CH4%F4; H2%F4; H2O%F4; N2%F4; NH3%F4; SH2%F4; T_{c,m}; P_{atm}; λ_c; Pr_c)

CONDUCTIVIDAD

$$\lambda_{CO} := k \text{ [CarbonMonoxide ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\lambda_{CO2} := k \text{ [CarbonDioxide ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\lambda_{CH4} := k \text{ [Methane ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\lambda_{H2} := k \text{ [Hydrogen ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\lambda_{H2O} := k \text{ [water ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\lambda_{N2} := k \text{ [Nitrogen ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\lambda_{NH3} := k \text{ [Ammonia ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\lambda_{SH2} := k \text{ [HydrogenSulfide ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\lambda_c := \frac{\lambda_{CO} \cdot \text{CO}\%F4 + \lambda_{CO2} \cdot \text{CO2}\%F4 + \lambda_{CH4} \cdot \text{CH4}\%F4 + \lambda_{H2} \cdot \text{H2}\%F4 + \lambda_{H2O} \cdot \text{H2O}\%F4 + \lambda_{N2} \cdot \text{N2}\%F4 + \lambda_{NH3} \cdot \text{NH3}\%F4 + \lambda_{SH2} \cdot \text{SH2}\%F4}{\text{CO}\%F4 + \text{CO2}\%F4 + \text{CH4}\%F4 + \text{H2}\%F4 + \text{H2O}\%F4 + \text{N2}\%F4 + \text{NH3}\%F4 + \text{SH2}\%F4}$$

100

PRANDTL

$$\text{Pr}_{CO} := \text{Pr} \text{ [CarbonMonoxide ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\text{Pr}_{CO2} := \text{Pr} \text{ [CarbonDioxide ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\text{Pr}_{CH4} := \text{Pr} \text{ [Methane ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\text{Pr}_{H2} := \text{Pr} \text{ [Hydrogen ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\text{Pr}_{H2O} := \text{Pr} \text{ [water ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$\text{Pr}_{N2} := \text{Pr} \text{ [Nitrogen ; T = T}_{c,m} \text{ ; P = P}_{atm} \text{]}$$

$$Pr_{NH_3} := Pr [\text{Ammonia} ; T = T_{c,m} ; P = P_{atm}]$$

$$Pr_{SH_2} := Pr [\text{HydrogenSulfide} ; T = T_{c,m} ; P = P_{atm}]$$

$$Pr_c := \frac{Pr_{CO} \cdot CO\%F4 + Pr_{CO_2} \cdot CO_2\%F4 + Pr_{CH_4} \cdot CH_4\%F4 + Pr_{H_2} \cdot H_2\%F4 + Pr_{H_2O} \cdot H_2O\%F4 + Pr_{N_2} \cdot N_2\%F4 + Pr_{NH_3} \cdot NH_3\%F4 + Pr_{SH_2} \cdot SH_2\%F4}{Pr_{air}}$$

100

End PROPIEADAESC

*****FIN PROCEDURE PROPIEADAESC*****

\$import 'C:\Users\guillermo\Desktop\TFG\exportargasificador.txt' /skiplines=15 P_{atm};T_{amb};T_{ref};T_{F1};T_{F2};T_{F3};T_{reactor};CO_{F4};CO₂_{F4};CH₄_{F4};H₂_{F4};H₂O_{F4};N₂_{F4};NH₃_{F4}

\$import 'C:\Users\guillermo\Desktop\TFG\exportarporcentajes.txt' /skiplines=9 CO_{F4};CO₂_{F4};CH₄_{F4};H₂_{F4};H₂O_{F4};N₂_{F4};N₃_{F4};SH₂_{F4}

DATOS DE PARTIDA*FLUIDO CALIENTE. GASES DE SALIDA DEL REACTOR. EXTERIOR DE LOS TUBOS*

$$T_{c,e} = T_{reactor}$$

$$T_{c,s} = 473 \text{ [K]}$$

$$T_{c,m} = \frac{T_{c,e} + T_{c,s}}{2}$$

Viscosidad del gas de entrada al Intercambiador de calor PROCEDURE WILKE

$$F_4 = CO_{F4} + CO_2_{F4} + CH_4_{F4} + H_2_{F4} + H_2O_{F4} + N_2_{F4} + NH_3_{F4}$$

$$\text{Call } \mathbf{WILKE} [F_4 ; CO_{F4} ; CO_2_{F4} ; CH_4_{F4} ; H_2_{F4} ; H_2O_{F4} ; N_2_{F4} ; NH_3_{F4} ; T_{c,m} ; P_{atm} ; \mu_c]$$

$$cp_c = \mathbf{Cp} [\text{Air}_{ha} ; T = T_{c,m} ; P = P_{atm}]$$

FLUIDO FRÍO. AGUA A EVAPORAR

$$T_{f,e} = 293 \text{ [K]}$$

$$m_f = 1 \text{ [kg/s]}$$

$$u_f = 1,3 \text{ [m/s] } \mathbf{MARÍN}$$

$$\lambda_f = \mathbf{k} [\text{water} ; T = T_{f,m} ; P = P_{atm}]$$

$$\mu_f = \mathbf{Visc} [\text{water} ; T = T_{f,m} ; P = P_{atm}]$$

$$v_f = \mathbf{v} [\text{water} ; T = T_{f,m} ; P = P_{atm}]$$

$$cp_f = \mathbf{Cp} [\text{water} ; T = T_{f,e} ; P = P_{atm}]$$

$$MW = \mathbf{MolarMass} [\text{water}]$$

$$\rho_f = \rho [\text{water} ; T = T_{f,m} ; P = P_{atm}]$$

$$Pr_f = Pr [\text{water}; T = T_{f,m}; P = P_{atm}]$$

Balances de Energía

$$q_{BdE} = \left| 0,000277778 \cdot \frac{h}{s} \right| \cdot F4 \cdot cp_c \cdot [T_{c,e} - T_{c,s}]$$

$$q_{BdE} = \frac{m_f}{MW} \cdot cp_f \cdot [T_{f,s} - T_{f,e}]$$

$$T_{f,m} = \frac{T_{f,e} + T_{f,s}}{2}$$

DISEÑO PREVIO

ÁREA SUPERFICIAL EXTERIOR ESTIMADA

$$A_{sup,ext,est} = \left| 1000 \cdot \frac{W}{kW} \right| \cdot \frac{q_{BdE}}{U_{est} \cdot \Delta_{ml}}$$

$$U_{est} = 150 \quad \text{Se estima un valor de coeficiente global de transferencia, para hallar un área estimada de intercambio. MARÍN p.10}$$

$$\Delta_{ml} = F \cdot \Delta_{ml,cc}$$

$$\Delta_{ml,cc} = \frac{T_{c,s} - T_{f,e} - [T_{c,e} - T_{f,s}]}{\ln \left[\frac{T_{c,s} - T_{f,e}}{T_{c,e} - T_{f,s}} \right]}$$

$$F = 1$$

ÁREA SUPERFICIAL EXTERIOR POR UNIDAD DE LONGITUD DE TUBO

$$A_{sup,ext} = [1 - N_{aletas,L} \cdot t] \cdot 3,142 \cdot D_e + N_{aletas,L} \cdot \left[\frac{3,142}{2} \cdot (D_a^2 - D_e^2) + 3,142 \cdot D_a \cdot t \right]$$

Dimensiones

$$D_i = 0,0138 \quad [m] \quad \text{Diámetro interior de los tubos}$$

$$D_e = 0,0164 \quad [m] \quad \text{Diámetro exterior de los tubos}$$

$$D_a = 0,022 \quad [m] \quad \text{Diámetro exterior de las aletas. El interior es igual a } D_e$$

$$L_a = \frac{D_a - D_e}{2}$$

$$t = 0,000254 \quad [m] \quad \text{Espesor de las aletas}$$

$$N_{aletas,L} = 100 \quad [m^{-1}] \quad \text{Número de aletas por unidad de longitud del tubo}$$

$$s = \frac{1 - N_{aletas,L} \cdot t}{N_{aletas,L}} \quad \text{Distancia entre aletas}$$

$$\sigma = 0,1 \quad \text{sigma} = A_{min,transv} / A_{sup,ext}; A_{min,transv} \text{ es Área mínima transversal \& } A_{sup,ext} \text{ es el área total de intercambio de calor}$$

$$\sigma = \frac{A_{min,transv}}{A_{sup,ext}}$$

$$A_{c,\min} = A_{\min,\text{transv}} \cdot L_t$$

$$k = k [\text{Aluminum}; T = T_{c,m}]$$

Cálculo del banco de tubos y de la carcasa

$$S_T = 1,5 \cdot D_e \quad \text{Distancia entre centro de los tubos en disposición triángulo}$$

Número de tubos

$$N_t = \text{Ceil} \left[\frac{A_{\text{sup,ext;est}}}{A_{\text{sup,ext}} \cdot L_t} \right] \quad \text{Número de tubos por ancho IdQ}$$

Número de circuitos

$$N_c = \text{Ceil} \left[4 \cdot \frac{m_f}{\rho_f \cdot MW \cdot v_f \cdot 3,142 \cdot D_i^2} \right]$$

Carcasa

$$N_{t,\text{fila}} = N_c$$

MARÍN. Se puede empezar considerando que cada circuito se encuentra en posición horizontal, de forma que el número de tubos por fila coincide con el número de circuitos

$$N_{t,\text{fila}} \cdot S_T = L_t$$

$$N_L = \text{Ceil} \left[\frac{N_t}{N_{t,\text{fila}}} \right] \quad \text{Número de filas de tubos}$$

RECÁLCULO Y DISEÑO DEFINITIVO

COEFICIENTE DE CONVECCIÓN DEL CALOR EN EL INTERIOR DE LOS TUBOS

$$h_f = \frac{\text{Nusselt}_f \cdot \lambda_f}{D_i}$$

$$\text{Re}_f = u_f \cdot D_i \cdot \frac{MW}{\mu_f \cdot v_f}$$

$$\text{Call NUSSELTf} [\text{Re}_f; D_i; \text{Pr}_f; L_t : \text{Nusselt}_f]$$

COEFICIENTE DE CONVECCIÓN DEL CALOR EN EL EXTERIOR DEL BANCO DE TUBOS

$$h_c = \frac{\text{Nusselt}_c \cdot \lambda_c}{D_e}$$

$$\text{Call PROPIEADAESC} [\text{CO}\%F_4; \text{CO}_2\%F_4; \text{CH}_4\%F_4; \text{H}_2\%F_4; \text{H}_2\text{O}\%F_4; \text{N}_2\%F_4; \text{NH}_3\%F_4; \text{SH}_2\%F_4; T_{c,m}; P_{\text{atm}}; \lambda_c; \text{Pr}_c]$$

$$\text{Nusselt}_c = 0,134 \cdot \text{Re}_c^{0,681} \cdot \text{Pr}_c^{[1/3]} \cdot \left[\frac{s}{L_a} \right]^{0,2} \cdot \left[\frac{s}{t} \right]^{0,11} \quad \text{Correlación de Briggs y Young para disposición del banco de tubos en triángulo}$$

$$\text{Re}_c = \left| 0,000277778 \cdot \frac{h}{s} \right| \cdot \frac{m_4 \cdot D_e}{A_{c,\min} \cdot \mu_c}$$

\$import 'C:\Users\guillermo\Desktop\TFG\exportarmasas.txt' /skiplines=2 m4

CÁLCULO COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR, U. Ecuación general: $1/U_j \cdot A_j = R_{\text{total}} = 1/(\eta_{o,c} \cdot h_{o,c})$

$$A_c) + R''_{e,c} / (\eta_{o,c} \cdot A_c) + R_p + R''_{e,f} / (\eta_{o,f} \cdot A_f) + 1 / (\eta_{o,f} \cdot h_f \cdot A_f)$$

Se desprecia la resistencia de enfriamiento del fluido frío (lado interior de los tubos) pero no así la del fluido caliente (gas con restos de partículas y cenizas), quedando

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{\eta_{o,c} \cdot h_c} + \frac{R''_{e,c}}{\eta_{o,c}} + A_c \cdot R_p + \frac{A_c}{\eta_{o,f} \cdot h_f \cdot A_f}$$

$$A_c = A_{\text{sup;ext}} \cdot L_t$$

$$A_f = 3,142 \cdot D_i \cdot L_t$$

$$A_a = \left[\frac{3,142}{2} \cdot (D_a^2 - D_e^2) + 3,142 \cdot D_a \cdot t \right] \cdot N_{\text{aletas;L}} \cdot L_t$$

Eficiencia de una superficie con aletas. En el lado frío es $\eta_{o,f} = 1$ porque no hay aletas

$$\eta_{o,f} = 1$$

$$\eta_{o,c} = 1 - \frac{A_a}{A_c} \cdot [1 - \eta_a]$$

Eficiencia de una aleta. Se calcula con las funciones de Bessel

$$m = \left[\frac{h_c}{\lambda_c \cdot t} \right]^{1/2}$$

$$mr1 = \frac{m \cdot D_e}{2}$$

$$mr2 = \frac{m \cdot D_a}{2}$$

$$\eta_a = \left[\frac{\frac{D_e}{m}}{\left(\frac{D_a}{2}\right)^2 - \left(\frac{D_e}{2}\right)^2} \right] \cdot \left[\frac{K_1(mr1) \cdot I_1(mr2) - I_1(mr1) \cdot K_1(mr2)}{K_0(mr1) \cdot I_1(mr2) + I_0(mr1) \cdot K_1(mr2)} \right]$$

Resistencia de enfriamiento del fluido caliente

$$R''_{e,c} = 0,0004 \text{ [m}^2\text{*K/W]}$$

Resistencia de conducción de la pared que separa ambos fluidos

$$R_p = \frac{\ln \left[\frac{D_e}{D_i} \right]}{2 \cdot 3,142 \cdot L_t \cdot k}$$