

Estudio y simulación de un gasificador con captura de CO₂ para la producción de hidrógeno azul partiendo de carbón colombiano

Study and simulation of a gasifier with CO₂ capture for the production of blue hydrogen starting from Colombian coal

Orlando Castiblanco-Urrego ^{1a}, Harvey Andrés Milquez-Sanabria ^{1b}

¹ Ingeniería Química, Fundación Universidad de América, Colombia. Correos electrónicos:

^a orlando.castiblanco@profesores.uamerica.edu.co, ^b harvey.milquez@profesores.uamerica.edu.co.

Orcid: ^a 0000-0002-3238-0912, ^b 0000-0003-4515-7039.

Recibido: 10 febrero, 2021. Aceptado: 3 abril, 2021. Versión final: 25 junio, 2021.

Resumen

En esta investigación se hizo el diseño y la simulación de un gasificador de carbón con captura de dióxido de carbono para la obtención de hidrógeno, mediante el *software* Aspen HYSYS versión 9.0; se utilizó como materia prima carbón antracítico y bituminoso, procedente de diferentes regiones de Colombia. Las características del carbón, así como las condiciones de los demás flujos de alimentación al reactor, inciden en las condiciones finales del gas producto en la simulación. Una vez iniciado el análisis de sensibilidad en el simulador, se logra observar el comportamiento de estas variables, es decir, las condiciones de la alimentación, con lo cual se pueden fijar los intervalos de operación para el proceso. Los resultados obtenidos son teóricamente viables, y pueden ser utilizados como base para casos reales en la industria energética, ya que en la actualidad Colombia posee una de las mayores reservas de carbón en Latinoamérica.

Palabras clave: carbón; hidrógeno; gas de síntesis; gasificación; dióxido de carbono; carbón colombiano; Aspen HYSYS; antracítico; bituminoso.

Abstract

In this research, the design and simulation of a carbon gasifier with carbon dioxide capture to obtain hydrogen was carried out using Aspen HYSYS version 9.0 software. For this study, it was used anthracitic and bituminous coal as raw material from different regions of Colombia. The characteristics of the coal, as well as the conditions of the other feed streams to the reactor, affect the final conditions of the product gas in the simulation. Once the sensitivity analysis started in the simulator, it was possible to observe the behavior of these variables, that were the feeding conditions, where the operation intervals for the process could be set. These results obtained are theoretically feasible and can be used as a basis for real cases in the energy industry since Colombia currently has one of the largest coal reserves in Latin America.

Keywords: coal; hydrogen; syngas; gasification; carbon dioxide; Colombian coal; Aspen HYSYS; anthracitic; bituminous.

ISSN impreso: 1657 - 4583. ISSN en línea: 2145 - 8456, CC BY-ND 4.0 

Como citar: O. Castiblanco-Urrego, H. A. Milquez-Sanabria, "Estudio y simulación de un gasificador con captura de CO₂ para la producción de hidrógeno azul partiendo de carbón colombiano," *Rev. UIS Ing.*, vol. 20, no. 4, pp. 91-100, 2021, doi: [10.18273/revuin.v20n4-2021007](https://doi.org/10.18273/revuin.v20n4-2021007).

1. Introducción

La energía limpia y la energía alternativa se han convertido en áreas importantes de investigación en todo el mundo para el desarrollo energético sostenible. Entre las áreas importantes de investigación y desarrollo se encuentran la producción y purificación de hidrógeno y gas de síntesis, así como el procesamiento de combustible para pilas de combustible [1].

El hidrógeno es un importante portador de energía y, cuando se utiliza como combustible, puede considerarse una alternativa a los principales combustibles fósiles: petróleo crudo, gas natural, carbón y sus derivados [2].

El hidrógeno se considera un medio de almacenamiento de energía limpio y eficiente, ya que su combustión solo produce agua como subproducto y tiene un alto contenido energético por unidad de masa, en comparación con otros combustibles (140,4 MJ/kg) [3], [4]. Sin embargo, tiene algunas desventajas, pues el hidrógeno es inflamable y explosivo y, por lo tanto, debe almacenarse en contenedores especiales y transportarse en condiciones bien controladas, ya que forma una mezcla poderosamente explosiva con el aire [5].

Los aspectos importantes de la economía del hidrógeno son la producción de hidrógeno, la energía total consumida y el CO₂ generado en el proceso [4]. Las vías de producción de hidrógeno han sido clasificadas en cuatro categorías principales: electrólisis, fotólisis, biólisis y termólisis; además, se subcategorizan según los tipos de energía combinados utilizados en el proceso [6]. Alrededor del 48 % de la demanda mundial de hidrógeno se satisface mediante reformado con vapor de gas natural; el 30 % procede del reformado de petróleo; el 18 %, de la gasificación del carbón, y el 4 %, de la electrólisis del agua y otras fuentes renovables [7].

El hidrógeno y el gas de síntesis son indispensables en las industrias química, petrolera y energética. En el campo de la energía, los desarrollos realizados recientemente en IGCC (ciclo combinado de gasificación integrada) y en tecnologías de pilas de combustible han generado la necesidad de convertir los combustibles convencionales como el carbón en hidrógeno puro o gas de síntesis para una generación de energía eficiente en el futuro [1]. El uso del hidrógeno en pilas de combustible ofrece varias ventajas. Estas incluyen alta eficiencia, bajas emisiones de gases de efecto invernadero y contaminantes, economías de escala (siendo de naturaleza modular) y generación de energía y calor distribuida y combinada [8].

El carbón se utiliza actualmente para satisfacer alrededor del 40 % de la demanda total de electricidad mundial y se prevé que siga siendo una fuente importante de generación de energía durante muchas décadas, debido a su bajo costo y sus vastas reservas. Sin embargo, su demanda parece estar disminuyendo debido al aumento de la generación de energía de bajas emisiones a partir de fuentes renovables [8].

La gasificación del carbón es una tecnología bien establecida para la producción de hidrógeno. El carbón se gasifica para producir gas de síntesis y a partir de este se obtiene hidrógeno, que contiene inevitablemente impurezas como el CO₂ [9]. La producción de hidrógeno con captura de CO₂ podría ser una tecnología de transición clave para avanzar en dirección de una sociedad sostenible que utilice hidrógeno. La producción de hidrógeno a partir de energías renovables hace parte de los objetivos que se han marcado países de todo el mundo para la descarbonización del planeta, por ello, el aprovechamiento de las considerables reservas de carbón en Colombia para la producción de hidrógeno azul se plantea como una tecnología de transición

Después de la producción de gas de síntesis, el hidrógeno y el CO₂ deben separarse de los otros componentes y purificarse. Las tecnologías de separación relevantes para la producción de hidrógeno con captura de CO₂ son adsorción, absorción, membranas y procesos criogénicos o de baja temperatura [10].

La producción de hidrógeno a partir de gas de síntesis es un paso importante en la hoja de ruta de la tecnología del carbón limpio, como lo han realizado muchos países, incluidos Canadá, Japón y Estados Unidos. Cuando la demanda de hidrógeno sea igual a la de petróleo en el sector del transporte o a la de electricidad en el sector de la energía, el carbón probablemente tendrá un papel importante que desempeñar debido a su abundancia y bajo precio en el mercado [11].

El objetivo de este estudio es simular y diseñar un gasificador de carbón con captura de CO₂, utilizando como materia prima carbón antracítico y bituminoso, procedente de diferentes regiones de Colombia, a partir de los datos de un trabajo experimental y consultando literatura disponible, utilizando el *software* Aspen HYSYS versión 9.0 y simultáneamente haciendo su validación. El proceso de simulación se lleva a cabo asumiendo un gasificador de flujo arrastrado en estado estacionario, considerando una condición de equilibrio químico.

Estudios similares, donde se plantea la posibilidad de aprovechar el carbón para la producción de hidrógeno, se han realizado en Australia, India, Perú, así como en Colombia; lo cual justifica la propuesta del presente trabajo [12], [13], [14], [15].

2. El carbón y su importancia en Colombia

Por no tener una fórmula química definida, el carbón se considera como un agregado de diferentes componentes, lo que no coincide con la definición de mineral, pero sí con la definición de roca. De esta manera, el carbón es una roca sedimentaria que, según el medio donde se forma, permite la acumulación tanto de materia mineral como de materia orgánica, por lo cual corresponde a una roca de origen biogénico [16].

Se pueden distinguir distintos tipos de carbón, que de menor a mayor rango y poder calorífico son: turba, lignito, hulla (carbón bituminoso) y antracita [17]. La norma ASTM D388-12 es una de las de mayor aceptación en cuanto a la clasificación del carbón; dicha norma define como carbones de alto rango aquellos cuyo poder calorífico, en base húmeda, es mayor a 26,8 MJ/kg.

Cuanto más altas son las presiones y temperaturas (grado de metamorfismo) durante la formación del carbón, este será más compacto y rico en carbono y con mayor poder calorífico. En relación con el uso y dependiendo de su calidad, el carbón puede destinarse a usos térmicos, metalúrgicos o industriales [16], [18].

La densidad del carbón es variable y depende del tipo. Por ejemplo, la densidad de la antracita es del orden de 1,55 g/cm³; la del carbón bituminoso, de 1,35 g/cm³, y la del lignito, de 1,25 g/cm³. La densidad real del carbón generalmente se determina mediante el desplazamiento de helio y, por lo tanto, a menudo se denomina densidad de helio (ρ_{He}). La densidad real se ha correlacionado con la composición elemental del carbón así [19]:

$$\rho_{He} = 1,534 - 0,05196 H + 0,007375 O - 0,02472 N + 0,003853 S \quad (1)$$

En Colombia, se produce carbón térmico y metalúrgico; el carbón de La Guajira y buena parte de la zona carbonífera de la Costa Atlántica es térmico, mientras que gran parte del carbón del Altiplano cundiboyacense es metalúrgico [20]. Colombia posee una de las mayores reservas de carbón en Latinoamérica, se encuentra entre los principales productores (ocupa el puesto 11 en el mundo) y es el cuarto exportador neto de carbón térmico del mundo, después de Indonesia, Australia y Rusia [21]. Holanda es el mayor comprador de carbón colombiano, seguido de cerca por Turquía [22].

Ante la volatilidad de los mercados y los altos precios en la importación de combustibles, la gasificación de carbón surge como una alternativa en el país para la producción de energía. Investigar sobre las tecnologías de producción de hidrógeno a partir de carbón con captura de CO₂ abre la posibilidad de que el carbón sea una fuente de generación de energía más limpia, con el beneficio adicional de que los productores de carbón pueden continuar con su actividad y seguir aportando a la economía del país (inversión extranjera, regalías, tributación y empleo), ya que se debe analizar la viabilidad de un modelo de negocio en el que se cambie la exportación de carbón por la exportación de hidrógeno. De acuerdo con esto, el hidrógeno azul producido a partir de carbón se presenta como una opción económica y ambientalmente atractiva para ser integrada a la matriz energética colombiana. El hidrógeno azul es aquel que se produce a partir de combustibles fósiles, donde el CO₂ se captura en lugar de ser emitido a la atmósfera, por lo que se considera de baja emisión de carbono.

La coproducción de hidrógeno y electricidad puede proporcionar sinergias dentro de la planta de producción y ayudar a hacer frente a la variabilidad en las demandas de los dos productos. Una de las tecnologías más prometedoras para la producción de electricidad e hidrógeno con bajas emisiones de CO₂ es precisamente la gasificación del carbón con captura y almacenamiento de CO₂ [23].

3. Modelo de gasificación

La gasificación es un proceso mediante el cual el carbón se convierte en gas de síntesis (*syngas*), que es predominantemente una mezcla de monóxido de carbono e hidrógeno, junto con vapor de agua y dióxido de carbono [24]. La gasificación es una combustión incompleta de carbón u otra materia prima sólida, que tiene como objetivos principales: convertir toda la fracción sin cenizas de la alimentación en gas y producir gases que conservan, tanto como sea posible, el valor de calor de combustión de la materia prima. Estos gases pueden quemarse para producir energía o convertirse químicamente en otros productos [25].

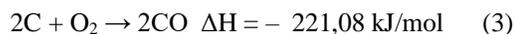
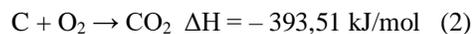
El gasificador es el reactor termoquímico encargado de convertir el material carbonoso en gas mediante diversos procesos físicos y químicos. De acuerdo con el tipo de lecho en donde el carbón se gasifica, los gasificadores se pueden clasificar en tres grupos: gasificadores de lecho fijo, lecho fluidizado y lecho arrastrado [13]. La tecnología de gasificación de lecho o flujo arrastrado es la tecnología de gasificación más utilizada, permite generar las mayores potencias térmicas por altas tasas de producción de gas libre de alquitranes, y la ceniza se

transforma en escoria, ya que las temperaturas de operación pueden superar la temperatura de fusión de las cenizas [18]. Adicionalmente, es el proceso más adecuado para el carbón colombiano, el cual es reconocido por tener bajo contenido de cenizas y azufre, y ser alto en materiales volátiles y en valor calorífico [20]. La naturaleza y distribución de la materia mineral en el carbón es significativa en la tecnología de preparación y uso, así como en el impacto ambiental de la minería, utilización y manejo de desechos [26].

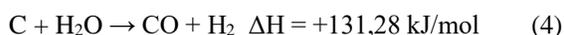
El carbón previamente triturado, cribado y pulverizado se mezcla con agua para formar una sustancia acuosa (*slurry*), que tiene un contenido promedio de agua del 30 % en masa, el cual se bombea y atomiza para entrar al gasificador, donde a su vez reacciona con oxígeno que previamente se ha presurizado. El agua mezclada con el carbón promueve la producción de hidrógeno, ya que el líquido pasa a vapor sobrecalentado en el interior del reactor, gracias a las altas temperaturas y presiones de operación [18]. El gasificador de flujo arrastrado, que normalmente opera a una temperatura de entre 1400 y 1500 °C, requiere un suministro continuo de oxígeno de alta pureza (95 % a 99 %), posee flexibilidad para trabajar con todo tipo de carga y una alta conversión de carbono [18], [25]. La tecnología de destilación criogénica es la de uso más extendido en la actualidad para la obtención de oxígeno del aire. La reacción de gasificación del carbón dentro de este gasificador se puede considerar en tres procesos químicos: desvolatilización, gasificación del carbón y reacciones en fase gaseosa [27].

La gasificación del carbón consta de varias reacciones de oxidación y gasificación con vapor. Las principales reacciones químicas que ocurren dentro del gasificador con las condiciones apropiadas de energía son [25], [13]:

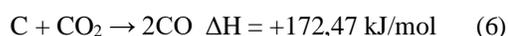
Reacciones de oxidación



Gasificación con vapor



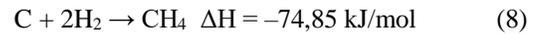
Reacción de Boudouard



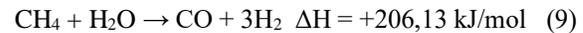
Reacción de desplazamiento de agua



Metanación



Reformado de metano con vapor



Aunque la mayor parte de los modelos de gasificación encontrados en la literatura suponen la condición de un equilibrio químico, quienes abordan el problema mediante un enfoque cinético llegan a la conclusión de que los resultados obtenidos son muy compatibles con los obtenidos mediante equilibrio químico [18].

4. Separación del hidrógeno y captura de CO₂

La producción de hidrógeno con captura de CO₂ implica la producción de dos flujos de productos: hidrógeno con la pureza deseada y CO₂ con la calidad de transporte y almacenamiento. Por lo tanto, se deben combinar de la mejor manera posible las tecnologías de separación de hidrógeno y CO₂ [10].

El hidrógeno se puede producir con una pureza muy alta utilizando tecnologías PSA (adsorción con oscilación de presión) o de membrana; estas tecnologías son las preferidas para la producción de hidrógeno. Sin embargo, la corriente de gases residuales será una mezcla de CO₂, hidrógeno y otras impurezas, y se debe agregar al proceso una unidad de separación adicional dedicada a la captura de CO₂ [10], [11]. La tecnología más promisoría en la actualidad es la separación por membranas, en la cual se incluyen estudios relacionados con membranas con soportes de fluidos iónicos, polímeros líquidos iónicos, geles poliméricos iónicos, entre otros [28].

Las membranas son barreras selectivas, ideales para fines de separación porque permiten que ciertos componentes pasen más fácilmente que otros. Las características esenciales de las membranas son: alta selectividad, alto flujo, bajo costo, alta estabilidad mecánica y alta estabilidad química [10]. Las membranas de paladio (Pd) son una tecnología prometedora para la generación de energía y la producción de hidrógeno con captura de CO₂ [29]. Algunos autores presentan los resultados de capacidad de absorción de CO₂ para diferentes tecnologías relacionadas con membranas, incluyendo tipos de absorción y diferentes tipos de mezclas iónicas absorbentes [28].

Cuando se consideran membranas selectivas de hidrógeno y la captura de CO₂, se suele introducir el concepto de reactor de membrana. En los reactores de membrana para la producción de hidrógeno, el hidrógeno o el CO₂ se eliminan de forma selectiva. Esto desplaza la reacción de equilibrio limitado hacia el lado del producto, lo que aumenta la conversión y/o permite llevar a cabo las reacciones en condiciones térmicas menos severas. Pero la motivación para la eliminación de hidrógeno es mayor, porque tendrá un efecto mayor en la conversión (para la reacción general) en comparación con la eliminación de CO₂. La membrana del reactor debe poder funcionar en las condiciones térmicas en las que tiene lugar la reacción. También es importante que la membrana pueda soportar alta presión y tenga una gran durabilidad [10].

Un reactor de membrana logra la conversión y la separación simultánea de hidrógeno, pero si se utilizan módulos separadores de membrana, se tienen ventajas tecno-económicas y de operatividad; además, la sustitución de membranas es más sencilla, ya que la vida útil de la membrana es menor que la vida útil de una planta [30].

En lo que respecta a las membranas de Pd, la separación de hidrógeno se puede realizar a temperaturas medias (350-500 °C) y el gas de alimentación siempre debe tratarse para reducir el nivel de azufre a valores de ppm o ppb [30].

5. Metodología

En el modelado de la gasificación del carbón se hicieron las siguientes suposiciones:

- El proceso está en estado estacionario.
- El agente oxidante seleccionado es el oxígeno.
- La temperatura y el volumen del reactor dentro del gasificador permanecen constantes.
- La desvolatilización del carbón se da instantáneamente.
- El azufre está incluido en las cenizas, pero este no presenta ninguna reacción.
- El nitrógeno está incluido en los gases, pero este tampoco reacciona, ya que una posible reacción con hidrógeno requiere de un catalizador.
- No se considera la formación de alquitrán.

Los diferentes pasos del proceso de gasificación se simulan en Aspen Hysys, tomando de la literatura disponible los datos de los análisis próximo y último para diez muestras de carbón procedentes de diferentes lugares de Colombia, como se muestra en las **tablas 1 y 2**.

La simulación se realiza bajo determinadas condiciones de operación, como se muestra en la **tabla 3**. La determinación de los análisis próximo y último se hizo de acuerdo con los protocolos establecidos por las normas ASTM 3175, ASTM D 3172, ASTM D 73174, ASTM D 3302, ASTM D 5865 y ASTM D 5865.

En el simulador, el carbón se toma como un sólido hipotético con una densidad aproximada de 1,53 g/cm³ (véase **figura 1**). El paquete de fluidos escogido es Peng-Robinson, la ecuación de estado más usada en este tipo de simulaciones, con la cual se pueden calcular las propiedades de los componentes puros, mezclas binarias, ternarias y multicomponentes [14]. El flujo de *slurry* se mantiene constante en 15 kg/h; la relación másica oxidante/carbón se toma como 1,5, y la relación vapor/carbón toma valores entre 0,05 y 0,3 [13].

Tabla 1. Carbones colombianos tenidos en cuenta en este estudio y clasificación

Código	Mina de carbón	Clasificación ASTM D388-12
C1	Alejandría manto 5 Cogua (Cauca)	Bituminoso alto en volátiles A
C2	Carboland (Santander)	Semi-antracita
C3	San Martín manto 1 y 2 (Cesar)	Bituminoso alto en volátiles A
C4	Trinidad manto 5 Sutatausa (Cundinamarca)	Bituminoso alto en volátiles A
C5	Trinidad Ciscuda Sutatausa (Cundinamarca)	Bituminoso alto en volátiles A
C6	San Francisco Palmar N4 Cuaca (Cundinamarca)	Bituminoso medio en volátiles
C7	San Francisco Campo Alegre Cauca (Cundinamarca)	Semi-antracita
C8	San Francisco Patía Cauca (Cundinamarca)	Bituminoso alto en volátiles B
C9	San Francisco Cajibío Cauca (Cundinamarca)	Bituminoso alto en volátiles A
C10	Nechí manto 1 Amagá (Antioquia)	Bituminoso alto en volátiles C

Fuente: elaboración propia adaptada de [15].

Tabla 2. Análisis próximo y último de los carbones colombianos (% en base seca)

Muestra	Materia volátil	Carbono fijo	Cenizas	C	H	N	O	S	PCS (kJ/kg)	M (kg/kmol)
C1	31,84	58,35	9,91	68,43	4,90	0,14	15,64	1,07	32.281	15,80
C2	8,83	85,21	5,97	69,87	3,68	0,00	19,63	0,85	33.879	16,16
C3	33,70	45,38	20,91	58,97	4,80	0,04	13,77	1,51	27.670	16,10
C4	33,19	54,49	12,33	68,01	5,00	0,00	13,77	0,89	31.115	15,48
C5	33,42	49,74	16,84	53,51	4,77	0,00	24,09	0,79	29.358	18,66
C6	21,90	59,99	18,11	58,88	4,25	0,00	17,36	1,40	29.258	16,70
C7	11,22	70,63	18,15	60,54	3,50	0,00	16,71	1,10	28.835	16,23
C8	38,59	48,22	13,19	58,01	5,00	0,09	22,90	0,82	27.749	17,98
C9	46,37	48,65	4,99	70,17	5,56	0,07	17,46	1,76	32.879	16,27
C10	45,53	46,77	7,70	65,34	5,66	0,02	20,89	0,40	28.160	16,95

Fuente: elaboración propia adaptada de [18].

Tabla 3. Condiciones de las corrientes de alimentación

Corriente	Temperatura (°C)	Presión (kPa)
<i>Slurry</i> (74 % carbón)	99,68	3242
Oxígeno (95 % de pureza)	14,85	3242
Vapor	300	3242

Fuente: elaboración propia adaptada de [14].

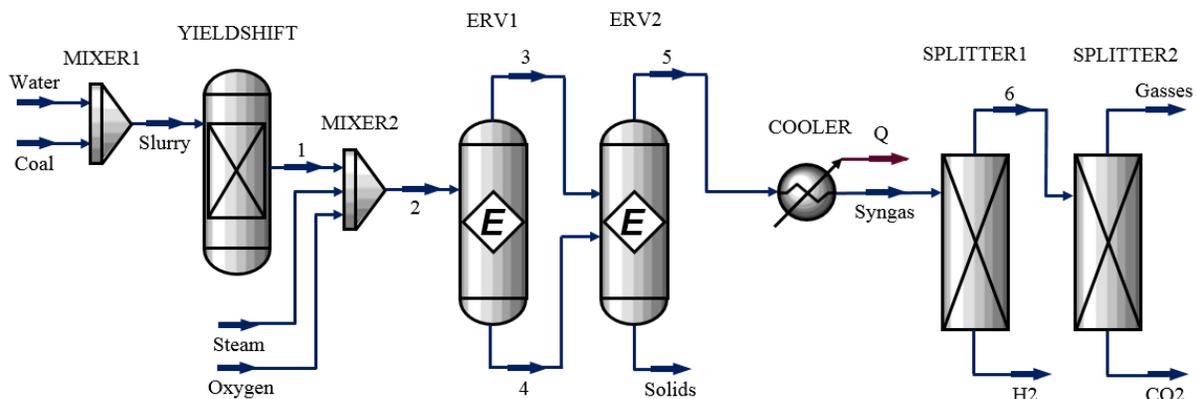


Figura 1. Diagrama de flujo de la simulación del proceso de gasificación del carbón con captura de CO₂.

Fuente: elaboración propia basada en [31].

Estos parámetros hidrodinámicos se tomaron de los datos experimentales publicados como resultado de otras investigaciones. El proceso de gasificación se divide en tres secciones: la descomposición del carbón, la gasificación del residuo carbonoso o *char* y la separación gas-sólido.

El carbón y el agua se mezclan por medio de un MIXER para formar el *slurry* en la simulación de Aspen Hysys. Para la descomposición del carbón se utiliza el reactor

YIELDSHIFT. En este reactor, el carbón se descompone en sus componentes elementales y cenizas, especificando la distribución del rendimiento de acuerdo con la información del análisis último del carbón. Se asume que el residuo contiene solo cenizas.

En seguida, el carbón se mezcla con oxígeno y vapor por medio de un MIXER. Para la gasificación del residuo carbonoso se utilizan dos reactores ERV dispuestos en serie. Esta etapa se divide en una fase de reacciones de

oxidación y una de reacciones de gasificación; en cada una se utiliza un reactor con el mismo volumen, en donde al final se separan los gases producto y las cenizas.

Posteriormente, los gases se enfrían por medio de un COOLER. Para separar el hidrógeno y el CO₂ de la corriente gaseosa (*syngas*) se utilizan dos unidades de separación de componentes SPLITTER. Estos fraccionadores de corriente representan el uso de membranas para la separación y recuperación de las sustancias de interés, ya que son la tecnología preferida para la producción de hidrógeno y la captura de CO₂. El uso de las diferentes unidades de operación en la simulación de Aspen Hysys se describe en la **tabla 4**.

6. Resultados

La temperatura es un parámetro importante que influye en el proceso de gasificación, y, como tal, en el cambio de la composición del gas de síntesis. Las cantidades de hidrógeno y CO₂ aumentan principalmente al aumentar

la temperatura, luego comienzan a disminuir [13]. Por otra parte, con el exceso de oxígeno, las cantidades de hidrógeno y CO disminuyen, lo que se debe a que la gasificación se aproxima a la combustión, y genera un aumento en la producción de CO₂. Además, un aumento en el flujo de oxígeno, provoca que la temperatura del *syngas* aumente [14].

Durante el proceso de simulación, la temperatura de gasificación y la temperatura de descomposición del carbón fueron calculadas por el simulador, manteniendo constantes la velocidad de alimentación del carbón y la relación oxidante/carbón. En la **tabla 5** se reportan estas temperaturas para cada uno de los carbones estudiados. Allí se evidencia que la muestra C3 presenta la mayor temperatura de descomposición y la muestra C2, la mayor temperatura de gasificación, para una relación vapor/carbón de 0,3. Estos valores de temperatura no difieren de forma significativa entre las distintas muestras de carbón.

Tabla 4. Unidades de operación de Aspen Hysys usadas en la simulación

Unidad	Descripción
R. YIELDSHIFT	Este modelo se utiliza cuando se desconocen la estequiometría y la cinética de las reacciones y solo se conoce la distribución del rendimiento.
R. ERV	Este modelo se prefiere cuando se conoce la estequiometría de las reacciones, pero no la cinética. Este reactor se fundamenta en la constante de equilibrio de las reacciones.
MIXER	Este modelo se utiliza para mezclar diferentes corrientes como carbón, oxígeno y vapor con especificaciones de temperatura y presión.
COOLER	Este modelo de intercambiador de calor unilateral se utiliza para enfriar una corriente a las condiciones de salida requeridas. Se determina cuánta energía se requiere para el enfriamiento del <i>syngas</i> .
SPLITTER	Este modelo se utiliza para separar componentes de una corriente, como H ₂ y CO ₂ del <i>syngas</i> , en donde se imponen las fracciones molares de salida.

Fuente: elaboración propia basada en [31].

Tabla 5. Temperatura de descomposición del carbón, calor retirado y composición del *syngas*

Muestra	Descomposición del carbón (°C)	Salida del gasificador (°C)	Q (kJ/h)	H ₂	CO	CO ₂	H ₂ (kg/h)	CO ₂ (kg/h)
C1	1255	1918	85.580	0,1697	0,4749	0,1219	0,4873	7,62
C2	1157	2144	97.680	0,1252	0,4862	0,1558	0,3413	9,271
C3	1517	1732	70.730	0,141	0,3924	0,1713	0,369	9,79
C4	1308	1834	79.920	0,1792	0,475	0,1175	0,515	7,375
C5	1408	1946	85.450	0,0825	0,29	0,2506	0,2043	13,55
C6	1450	1823	75.460	0,1124	0,3778	0,2037	0,2846	11,27
C7	1442	1822	73.470	0,1012	0,3965	0,2184	0,2493	11,75
C8	1326	1988	89.940	0,1085	0,3506	0,2027	0,2847	11,61
C9	1161	2065	98.770	0,1862	0,4783	0,1051	0,561	6,91
C10	1192	2092	101.000	0,1589	0,4292	0,1339	0,4617	8,49

Fuente: elaboración propia.

Respecto a la relación vapor/carbón, al aumentar esta proporción, aumenta la cantidad de hidrógeno y se reduce la cantidad de CO y CH₄, debido a la mayor disponibilidad de vapor de agua, lo que resulta en una mayor conversión en las reacciones de gasificación con vapor, así como en las reacciones de desplazamiento de agua y de reformado de metano con vapor. Por otro lado, la cantidad de CO₂ inicialmente disminuye al aumentar la proporción vapor/carbón hasta alrededor de 875 °C y luego aumenta, ya que, a una mayor proporción de vapor disponible, se facilita la reacción de Boudouard y las reacciones de gasificación con vapor [13].

La utilización de vapor es un factor importante que influye en la reducción de la temperatura del gasificador, lo que permite estabilizar el proceso, y, además, favorece la producción de hidrógeno. En la *tabla 5* se reportan los flujos de hidrógeno y CO₂, además de las fracciones molares de los principales productos de la corriente de salida (*syngas*), para cada uno de los carbones estudiados. Allí se evidencia que con la muestra C9 se obtiene el mayor flujo de hidrógeno y con la muestra C5, el mayor flujo de CO₂, para una relación vapor/carbón de 0,3.

La gasificación con vapor comprende las principales reacciones del proceso, en donde principalmente se da lugar a la formación de CO y H₂. En la *figura 2* se evidencia que el aumento del flujo de vapor alimentado permite que se incremente la fracción molar de hidrógeno en el *syngas*. Con respecto a la formación de CO₂, en la *figura 3* se aprecia que para las muestras C1, C2, C3, C4, C9 y C10, la fracción molar se incrementa ligeramente con el aumento del flujo de vapor; para las muestras C5 y C8, la fracción molar disminuye, y para las muestras C6 y C7, la fracción molar aumenta inicialmente y luego disminuye, bajo las condiciones establecidas.

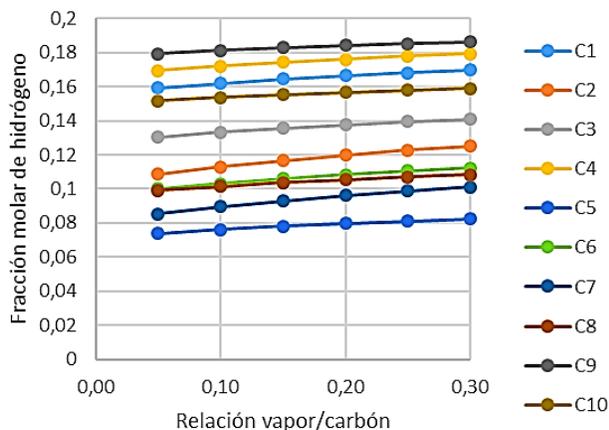


Figura 2. Variación de la fracción molar de hidrógeno con el flujo de vapor. Fuente: elaboración propia.

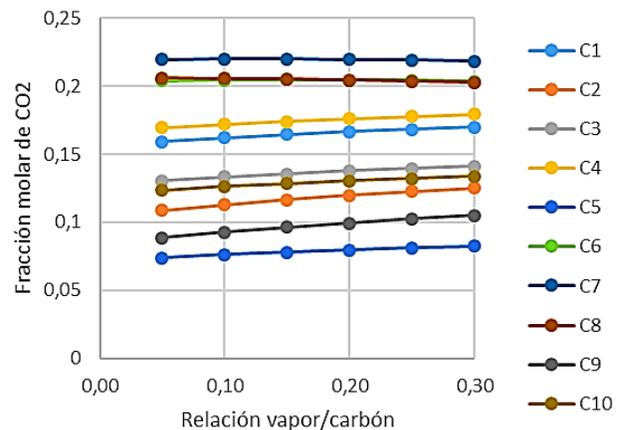


Figura 3. Variación de la fracción molar de CO₂ con el flujo de vapor. Fuente: elaboración propia.

La tecnología de gasificación de carbón es una alternativa para las aplicaciones energéticas. El hidrógeno y la electricidad pueden coproducirse fácilmente en plantas de gasificación. El diseño de un sistema de aprovechamiento de la energía generada en la gasificación se convierte en un elemento de análisis para los sistemas de gasificación. Se puede aumentar la eficiencia energética y global del proceso a través del uso de las diferentes alternativas que presenta el mercado y de los diseños novedosos que se pueden generar en próximas investigaciones.

En algunos procesos de gasificación, el gas de síntesis se debe enfriar, de tal manera que no afecte su sistema de separación. En la presente investigación, los gases de salida se enfrían hasta 400 °C, con el fin de realizar la separación mediante membranas y la recuperación del hidrógeno y el CO₂, por lo que debe retirarse una corriente de calor que puede ser aprovechada (véase *tabla 5*). Sin embargo, este proceso puede ser optimizado desde el punto de vista energético. En [32] se propone un sistema de recuperación energética del gas de síntesis a través del calentamiento del aire que se usa en el proceso de gasificación con eficiencia energética del 26 al 38 %; aunque también evaluaron los procesos de recuperación a través de la generación de vapor de baja potencia.

Desde el punto de vista ambiental, la baja concentración de compuestos de azufre, inherente a la composición de los carbones colombianos, no implica omitir las emisiones de material particulado, para lo cual se tendría que emplear alguna tecnología de control de contaminación atmosférica.

7. Conclusiones

Colombia posee una de las mayores reservas de carbón en Latinoamérica; ante la volatilidad de los mercados y los altos precios en la importación de combustibles, la gasificación de carbón surge como una alternativa en el país para la producción de energía.

En esta investigación se desarrolló un modelo para la gasificación de carbones colombianos utilizando el *software* Aspen Hysys 9.0. Las propiedades de las muestras de carbón se tomaron de la literatura disponible, y a partir de esta información se construyó el modelo, conectando varios bloques de operación por flujo de material. Los parámetros hidrodinámicos y los datos necesarios se tomaron de los datos experimentales publicados como resultado de otras investigaciones.

Aunque la simulación se llevó a cabo, en términos generales, considerando varios supuestos, entre estos, optar por la tecnología de gasificación de lecho o flujo arrastrado y tener en cuenta una condición de equilibrio químico, los resultados estuvieron acorde con lo que se encuentra en la literatura. La temperatura del *syngas* es directamente proporcional al flujo del oxígeno e inversamente proporcional al flujo de vapor. Por esto, la relación oxidante/carbón se mantuvo constante y se verificó que con una mayor relación vapor/carbón aumentan las cantidades de hidrógeno y CO₂ en los gases de salida.

Para una relación vapor/carbón de 0,3 se encontró que la muestra C3 presenta la mayor temperatura de descomposición y la muestra C2, la mayor temperatura de gasificación. Con el aumento del flujo de vapor alimentado se encontró que se incrementa la fracción molar de hidrógeno en el gas de síntesis para todas las muestras de carbón, y para las muestras C1, C2, C3, C4, C9 y C10, la fracción molar de CO₂ incrementa ligeramente.

La separación del hidrógeno y del CO₂ de los gases de salida se consideró utilizando membranas, preferiblemente de paladio, cuya selectividad favorece la producción de gas de hidrógeno puro; por esto, se hizo necesario enfriar esta corriente hasta una temperatura media de 400 °C. Este enfriamiento implica plantear un sistema de recuperación energética que permita optimizar el proceso de gasificación y que se pueda concebir en próximas investigaciones.

Referencias

- [1] K. Liu, C. Song, V. Subramani, *Hydrogen and syngas production and purification technologies*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley and Sons, 2010.
- [2] R. A. Huggins, *Energy storage, 2nd ed.* New York, NY, USA: Springer, 2010.
- [3] S. Dutta, “A review on production, storage of hydrogen and its utilization as an energy resource”, *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 20, no. 4, pp. 1148-1156, 2014, doi: [10.1016/j.jiec.2013.07.037](https://doi.org/10.1016/j.jiec.2013.07.037).
- [4] R. B. Gupta, *Hydrogen fuel: production, transport, and storage*. Boca Raton, FL, USA: Crc Press, 2008.
- [5] E. E. S. Michaelides, *Alternative energy sources*. Fort Worth, TX, USA: Springer Science & Business Media, 2012.
- [6] F. Dawood, M. Anda, G. M. Shafiullah, “Hydrogen production for energy: An overview”, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 7, pp. 3847-3869, 2020, doi: [10.1016/j.ijhydene.2019.12.059](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.12.059).
- [7] L. Cao *et al.*, “Biorenewable hydrogen production through biomass gasification: A review and future prospects”, *Environmental research*, vol. 186, pp. 109547, 2020, doi: [10.1016/j.envres.2020.109547](https://doi.org/10.1016/j.envres.2020.109547).
- [8] H. Ju, S. Badwal, S. Giddey, “A comprehensive review of carbon and hydrocarbon assisted water electrolysis for hydrogen production”, *Applied Energy*, vol. 231, pp. 502-533, 2018, doi: [10.1016/j.apenergy.2018.09.125](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2018.09.125).
- [9] H. Lin *et al.*, “CO₂-selective membranes for hydrogen production and CO₂ capture—Part I: Membrane development”, *Journal of membrane science*, vol. 457, pp. 149-161, 2014, doi: [10.1016/j.memsci.2014.01.020](https://doi.org/10.1016/j.memsci.2014.01.020).
- [10] M. Voldsund, K. Jordal, R. Anantharaman. “Hydrogen production with CO₂ capture”, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 9, pp. 4969-4992, 2016, doi: [10.1016/j.ijhydene.2016.01.009](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.01.009).
- [11] N. V. Gnanapragasam, B. V. Reddy, M. A. Rosen, “Hydrogen production from coal gasification for effective downstream CO₂ capture”, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 10, pp. 4933-4943, 2010, doi: [10.1016/j.ijhydene.2009.07.114](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.07.114).

- [12] A. Boretti, "Production of hydrogen for export from wind and solar energy, natural gas, and coal in Australia", *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 7, pp. 3899-3904, 2020, doi: [10.1016/j.ijhydene.2019.12.080](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.12.080).
- [13] T. R. Paul, H. Nath, V. Chauhan, A. Sahoo, "Gasification studies of high ash Indian coals using Aspen plus simulation", *Materials Today: Proceedings*, 2020, doi: [10.1016/j.matpr.2020.04.033](https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.04.033).
- [14] T. R. Cruzado Urbina, L. M. García Rodríguez, "Diseño y simulación de un gasificador para el aprovechamiento de las reservas de carbón del alto chicama", trabajo de grado, Universidad Nacional de Trujillo, 2017.
- [15] R. B. Zapata, J. F. P. Bayer, C. S. Jiménez, "Carbones colombianos: clasificación y caracterización termoquímica para aplicaciones energéticas", *Revista ION*, vol. 27, no. 2, pp. 43-54, 2014.
- [16] L. J. M. Umaña, *El carbón: origen, atributos, extracción y usos actuales en Colombia*. Bogotá, Colombia: Universidad Nacional de Colombia, 2014.
- [17] *American Society for Testing and Materials (ASTM), Standard Classification of Coals by Rank*, ASTM D388-12, 2012.
- [18] J. F. P. Bayer, R. B. Zapata, C. S. Jiménez, *Producción de gas natural sintético mediante gasificación de carbones colombianos: análisis termodinámico con Aspen Plus®*. Colombia: Editorial Universidad de Antioquia, 2015.
- [19] J. G. Speight, *Handbook of coal analysis*, 2nd ed. USA: John Wiley and Sons, 2015.
- [20] U. D. UPME, "La cadena del carbón", Ministerio de Minas y Energía, 2012 [En línea]. Disponible en: https://www.upme.gov.co/Docs/Cadena_carbon.pdf.
- [21] IEA-International Energy Agency, "Key Coal Trends, Excerpt from: Coal information", 2016 [En línea]. Disponible en: <https://euagenda.eu/upload/publications/untitled-69166-ea.pdf>.
- [22] A. Cardoso, "Valuation languages along the coal chain from Colombia to the Netherlands and to Turkey", *Ecological Economics*, vol. 146, pp. 44-59, 2018, doi: [10.1016/j.ecolecon.2017.09.012](https://doi.org/10.1016/j.ecolecon.2017.09.012).
- [23] J. Davison, S. Arienti, P. Cotone, L. Mancuso, "Co-production of hydrogen and electricity with CO2 capture", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 4, no. 2, pp. 125-130, 2010, doi: [10.1016/j.ijggc.2009.10.007](https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2009.10.007).
- [24] D. Osborne, *The Coal Handbook: Towards Cleaner Production: Volume 2: Coal Utilisation*. India: Elsevier, 2013.
- [25] D. A. Bell, B. F. Towler, y M. Fan, *Coal gasification and its applications*. Great Britain: William Andrew, 2010.
- [26] I. C. López, C. R. Ward, "Composition and mode of occurrence of mineral matter in some Colombian coals", *International Journal of Coal Geology*, vol. 73, no. 1, pp. 3-18, 2008, doi: [10.1016/j.coal.2007.03.005](https://doi.org/10.1016/j.coal.2007.03.005).
- [27] H. Watanabe, R. Kurose, "Modeling and simulation of coal gasification on an entrained flow coal gasifier", *Advanced Powder Technology*, vol. 31, no. 7, pp. 2733-2741, 2020, doi: [10.1016/j.apt.2020.05.002](https://doi.org/10.1016/j.apt.2020.05.002).
- [28] Z. Dai, R. D. Noble, D. L. Gin, X. Zhang, L. Deng, "Combination of ionic liquids with membrane technology: A new approach for CO2 separation", *Journal of Membrane Science*, vol. 497, pp. 1-20, 2016, doi: [10.1016/j.memsci.2015.08.060](https://doi.org/10.1016/j.memsci.2015.08.060).
- [29] T. A. Peters *et al.*, "Palladium (Pd) membranes as key enabling technology for pre-combustion CO2 capture and hydrogen production", *Energy Procedia*, vol. 114, pp. 37-45, 2017, doi: [10.1016/j.egypro.2017.03.1144](https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.1144).
- [30] M. Gazzani, G. Manzolini, "Using palladium membranes for carbon capture in integrated gasification combined cycle (IGCC) power plants", en *Palladium Membr. Technol. Hydrog. Prod. Carbon Capture Other Appl. Princ. Energy Prod. Other Appl.*, United Kingdom: Elsevier, 2014.2014, pp. 221-246.
- [31] AspenTech, Aspen HYSYS Help Section, Aspen Technology, Inc., Burlington, MA, USA: 2011.
- [32] C. F. Palma, A. D. Martin, "Model based evaluation of six energy integration schemes applied to a small-scale gasification process for power generation", *Biomass and Bioenergy*, vol. 54, pp. 201-210, 2013, doi: [10.1016/j.biombioe.2013.03.024](https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2013.03.024).