

ÍNDICE

ACRÓNIMOS.

NOMENCLATURA.

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.	1
1.1. FUENTES DE ENERGÍA.	1
1.2. ENERGÍA Y MEDIO AMBIENTE.	2
1.3. EVALUACIÓN DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS ACTUALES SOBRE EL CAMBIO CLIMÁTICO.	4
1.4. EL COMPROMISO DE ESPAÑA EN EL PROTOCOLO DE KYOTO.	6
1.5. ESTRATEGIA COMUNITARIA. PROGRAMAS RELACIONADOS CON LA REDUCCIÓN DE EMISIONES.	7
1.6. INSERCIÓN DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN ORIGEN DE LA TESIS EN LOS PROGRAMAS EUROPEOS.	8
1.7. ALTERNATIVAS EN EL COMBUSTIBLE PARA LA GENERACIÓN DE ENERGÍA.	8
1.8. GASIFICACIÓN DE CARBÓN.	9
1.9. PLANTAS DE GASIFICACIÓN COMERCIALES.	12
1.10. GASIFICADORES PARA OBTENCIÓN DE ENERGÍA.	12
1.11. GASIFICACIÓN INTEGRADA EN CICLO COMBINADO.	14
1.12. PROBLEMÁTICA DE LOS COMPUESTOS DE AZUFRE EMITIDOS AL USAR CARBÓN.	17
1.13. LEGISLACIÓN MEDIOAMBIENTAL REFERENTE A LOS COMPUESTOS DE AZUFRE.	18
1.14. PERSPECTIVAS DE LA TECNOLOGÍA IGCC. JUSTIFICACIÓN DE TESIS.	20
1.15. REDUCCIÓN DE LAS EMISIONES DE CO ₂ CON LA EFICIENCIA ASOCIADA A LA DEPURACIÓN A ALTA TEMPERATURA.	22
1.16. OBJETIVOS DE LA TESIS.	23
CAPÍTULO 2. DEPURACIÓN DEL GAS.	25
2.1. INTRODUCCIÓN.	25
2.2. PURIFICACIÓN DEL GAS DE SÍNTESIS. ESTADO DE LA TÉCNICA.	25
2.2. PROCESOS DE PURIFICACIÓN PARA GAS DE BAJO Y MEDIO PODER CALORÍFICO.	26
2.3. DESCRIPCIÓN DE LOS PROCESOS DE TRATAMIENTO DEL GAS.	26
2.4. ELIMINACIÓN DE GASES ÁCIDOS: MÉTODOS A BAJA TEMPERATURA.	27
2.4.1. SISTEMAS DE ABSORCIÓN QUÍMICA.	27
2.4.2. SISTEMAS DE ABSORCIÓN FÍSICA.	28
2.4.3. SISTEMAS DE OXIDACIÓN HÚMEDA.	30
2.5. MÉTODOS A ALTA TEMPERATURA (HOT GAS CLEAN-UP).	30
2.5.1. ANTECEDENTE HISTÓRICO DE LOS PROCESOS DE ABSORCIÓN-OXIDACIÓN POR VÍA SECA.	31
2.6. EVALUACIÓN DE SÓLIDOS PARA DESULFURIZACIÓN DE GAS DE SÍNTESIS A ALTA TEMPERATURA.	33
2.6.1. ÓXIDOS DE HIERRO.	37
2.6.2. ÓXIDO DE ZINC.	38
2.6.3. FERRITA DE CINC.	39
2.6.4. ÓXIDOS DE CALCIO Y MAGNESIO.	41
2.6.5. ÓXIDOS DE COBRE Y MANGANESO.	42
2.6.6. TITANATO DE ZINC.	44
2.6.7. OTROS ÓXIDOS.	46

CAPÍTULO 3. MODELIZACIÓN NUMÉRICA DEL PROCESO DE ABSORCIÓN.	47
3.1. INTRODUCCIÓN.	47
3.2. ESTUDIO CINÉTICO CON VARIACIÓN DE LA ESTRUCTURA DEL SÓLIDO	47
3.2.1. REACCIÓN EN UNA PARTÍCULA DE SÓLIDO (PELLET).	52
3.2.2. EVOLUCIÓN DE LA ESTRUCTURA DEL SÓLIDO.	53
3.2.3. DIFUSIVIDAD EN LOS POROS DE LA ESTRUCTURA.	56
3.2.4. RESOLUCIÓN SECUENCIAL DE LOS MODELOS ESTRUCTURA Y PARTÍCULA.	56
3.2.5. OTROS MODELOS DE REACCIÓN GAS-SÓLIDO.	57
3.3. ALGORITMOS DE RESOLUCIÓN DEL MODELO DE PORO O GRÁNULO DISTRIBUIDO.	58
3.4. RESOLUCIÓN DE MODELO DE PARTÍCULA O PELLET.	63
3.4.1. RESOLUCIÓN NUMÉRICA.	63
3.4.2. MÉTODO EXPLÍCITO.	63
3.4.3. MÉTODO IMPLÍCITO.	67
3.5. MODELIZACIÓN DE UN REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO.	71
3.5.1. MODELO FLUIDODINÁMICO.	71
3.5.2. ZONA DEL DISTRIBUIDOR.	72
3.5.3. ZONA DE BURBUJAS.	73
3.5.4. REGIÓN SOBRE EL LECHO DE PARTÍCULAS (CÁMARA O FREEBOARD).	74
3.5.5. SISTEMA DE CICLONES.	75
3.5.6. FENÓMENOS DE ATRICIÓN.	76
3.6. BALANCE DE UN REACTANTE GAS EN UN LECHO FLUIDIZADO DE BURBUJAS.	76
3.6.1. BALANCES DE MASA Y CALOR.	76
3.6.3. PREPARACIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES PARA LA RESOLUCIÓN DEL BALANCE MOLAR DE GAS.	81
3.6.4. BALANCE TÉRMICO.	83
3.6.5. CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO.	85
3.7. RESULTADOS.	86
3.7.1. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD.	87
3.7.2. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS DE MODELIZACIÓN.	104
CAPÍTULO 4. PROCESO EXPERIMENTAL: MATERIAL Y MÉTODOS.	105
4.1. INTRODUCCIÓN.	105
4.2. CONSIDERACIONES SOBRE LA ELECCIÓN DEL EQUIPO EXPERIMENTAL.	105
4.3. BASES DE DISEÑO DEL EQUIPO DE REACCIÓN DE LABORATORIO.	107
4.3.1. COMPOSICIÓN DE LOS GASES EMPLEADOS.	108
4.3.2. SÓLIDO.	110
4.4. SUMINISTRO DE GASES.	113
4.5. MEDICIÓN DE CAUDAL Y PRESIÓN.	114
4.6. CALEFACCIÓN.	114
4.7. ALIMENTACIÓN DE AGUA, AMONÍACO Y HCl.	115
4.8. TOMA DE MUESTRAS.	115
4.9. VENTEO DE GASES.	115
4.10. SISTEMA DE SEGURIDAD.	115
4.11. DISEÑO DEL REACTOR	115
4.11.1. CÁLCULOS FLUIDODINÁMICOS.	122
4.11.2. GAMA DE CAUDALES.	123
4.11.3. PARQUE DE GASES.	124
4.11.4. DIMENSIONADO DE CONDUCTOS.	124
4.11.5. CÁLCULO DEL CICLÓN.	125

4.12. CALENTADOR DE GASES.	127
4.13. ACONDICIONADOR DE GAS.	130
4.14. ADICIÓN DE AGUA Y AMONÍACO.	130
4.14.1. VAPOR DE AGUA.	130
4.14.2. AMONÍACO.	130
4.14.3. CROMATOGRAFIA DE GASES	133
4.14. DIAGRAMA DE FLUJOS DE LA INSTALACIÓN.	134
4.15. PRUEBA DEL SISTEMA DE CALEFACCIÓN.	136
4.16. ENSAYOS DE FLUIDIZACIÓN.	139
4.16.1. TRATAMIENTO DE LOS DATOS EXPERIMENT. DE FLUIDIZACIÓN.	144
4.17. PRUEBAS EN BLANCO.	148
CAPÍTULO 5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.	153
5.1. INTRODUCCIÓN.	153
5.2. OBTENCIÓN DE PARÁMETROS CINÉTICOS, DIFUSIONALES Y DE TRANSFERENCIA DE MASA PARA LA REACCIÓN DE SULFIDACIÓN DE TITANATO DE CINC.	153
5.2.1. EQUIPO UTILIZADO.	153
5.2.2. RESULTADOS EXPERIMENTALES DE TERMOGRAVIMETRÍA EN SULFIDACIÓN.	157
5. 3. TRATAMIENTO DE LOS DATOS EXPERIMENTALES DE TERMOGRAVIMETRÍA.	161
5.3.1. EFECTO DEL TAMAÑO DE PARTÍCULA O DIFUSIÓN EN INTERIOR DE LA MISMA.	161
5.3.2. EFECTO DE LA TRANSFERENCIA DE MASA GAS-SUPERFICIE DE SÓLIDO O DIFUSIÓN INTRAPARTÍCULA.	162
5.3.3. EFECTO DE LA PRESIÓN.	163
5.3.4. COEFICIENTE CINÉTICO INTRÍNSECO.	163
5.4. COMPARACIÓN CON COEFICIENTES CINÉTICOS PUBLICADOS.	185
5.5. EVOLUCIÓN DE PARÁMETROS DE ESTRUCTURA Y DIFUSIVOS PARA EL SORBENTE RTI.	186
5.6. EFECTO DE PARÁMETROS DEL SÓLIDO EN SU COMPORTAMIENTO.	191
5.6.1. INFLUENCIA DE LA POROSIDAD DE LA PARTÍCULA.	191
5.6.2. INFLUENCIA DEL ÁREA SUPERFICIAL (TAMAÑO DE GRÁNULO O DE PORO).	196
5.6.3. CONCLUSIONES DEL ESTUDIO DEL EFECTO DEL VALOR DE LOS PARÁMETROS EN EL COMPORTAMIENTO DEL SÓLIDO.	199
5.7. EXPERIMENTACIÓN CON REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO.	200
5.7.1. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL.	200
5.7.2. TIPOS DE PRUEBAS REALIZADAS.	201
5.7.3. RESULTADOS DE LAS PRUEBAS EXPERIMENTALES DE ABSORCIÓN-REGENERACIÓN.	203
5.7.4. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES.	217
5.8. VALIDACIÓN DEL MODELO BFB PARA LA REACCIÓN DE ABSORCIÓN DE H ₂ S.	223
5.8.1. CONCLUSIONES DE VALIDACIÓN DE LOS MODELOS.	230
CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES.	231
ANEXO I: PLANOS CONSTRUCTIVOS DEL REACTOR EXPERIMENTAL.	233
ANEXO II. EJEMPLOS DE RESULTADOS NUMÉRICOS OBTENIDOS DE MODELIZACIÓN.	239
ANEXO II.1: DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑOS.	248
RESULTADOS DE SIMULACIÓN PARA 7 cm/s	248
RESULTADOS DE SIMULACIÓN PARA 14 cm/s	256

ANEXO III. METODOLOGÍA EMPLEADA EN CROMATOGRAFÍA.	263
ANEXO IV. SIMULACIÓN HIDRODINÁMICA DE UN BFB CON ECUACIONES DE CONSERVACIÓN DE MASA Y MOMENTO, Y MEDIANTE MODELIZACIÓN BASADA EN IMPLEMENTACIÓN DE REGLAS.	269
AIV.1. MODELIZACIÓN BASADA EN ECUACIONES DE CONSERVACIÓN.	269
AIV.2. MODELIZACIÓN BASADA EN REGLAS.	271
PUBLICACIONES.	275
BIBLIOGRAFÍA.	279
