



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**“ESTIMACIÓN DE LA GENERACIÓN
DE ALQUITRANES OBTENIDOS EN
LA GASIFICACIÓN DE BIOMASA
PARA SU USO EN MOTORES DE
COMBUSTIÓN INTERNA”**

TESIS

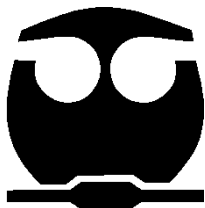
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA

Efrén Jesús Durán Moreno

Director: Dr. Javier E. Aguillón Martínez

México D.F., Marzo 2013





Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Jurado asignado:

PRESIDENTE: Profesor: Valiente Barderas Antonio

VOCAL: Profesor: Martin Rivera Toledo

SECRETARIO: Profesor: Aguillón Martínez Javier Eduardo

1er. SUPLENTE: Profesor: Alfonso Durán Moreno

2° SUPLENTE: Profesor: José Agustín Garcia Reynoso

SITIO EN DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INSTITUTO DE INGENIERÍA

ASESOR DEL TEMA:

Dr. Javier E. Aguillón Martínez

SUSTENTANTE:

Efrén Jesús Durán Moreno

ÍNDICE DE CONTENIDO

RESUMEN	8
1. INTRODUCCIÓN	10
1.2. Objetivo general	13
1.2.1 Objetivos particulares	14
2. ANTECEDENTES	14
2.1. BIOMASA.....	14
2.1.2 Tipo de biomasa	15
2.1.3 Propiedades químicas	16
2.1.4 Propiedades físicas	18
2.1.4.1 Tamaño de partícula	18
2.1.4.2 Humedad.....	19
2.1.5 Fuentes de residuos de madera	20
2.1.6 Combustible Biomásico	23
3. Gasificación.....	24
3.1.2 Secado	25
3.1.3 Pirolisis	26
3.1.3.1 Combustión / oxidación	26
3.2. Proceso de gasificación	27
3.2.2 Unidad de preparación de biomasa	28
3.2.3 Unidad de gasificación.....	28
3.2.4 Sistema de acondicionamiento de gas	28
3.2.5 Sistema de generación eléctrica.....	29
3.3. Tipos de gasificadores	29
3.3.1 Gasificador de corriente ascendente o tiro directo.....	29

3.3.2	Gasificadores de corriente descendente o tiro invertido	31
3.3.3	Gasificados de tiro transversal.....	32
3.3.4	Gasificador de lecho fluidizado	33
4.	ALQUITRÁN.....	35
4.1.	Composición del alquitrán	35
4.1.2	Clasificación de alquitrán.....	36
4.2.	Formas de separación o eliminación de alquitranes	37
4.2.2	Métodos mecánicos.....	39
4.2.2.1	Depuradores o Scrubber	39
4.2.2.2	Venturi-Scrubber	40
4.2.2.3	Filtros de tela y otros.....	40
4.2.2.4	Ciclón	41
4.2.3	Métodos termoquímicos	41
4.2.3.1	Desintegración térmica	42
4.2.3.2	Desintegración catalítica	42
4.2.3.3	Reformación con vapor	44
4.3.	Análisis de alquitrán	44
5.	GASIFICADOR (CASO DE ESTUDIO)	47
5.2.	Localización	48
5.3.	Equipos	48
5.3.2	Gasificador de Biomasa (RA-101).	51
5.3.3	Ciclón (CP-101)	52
5.3.4	Intercambiador de calor	52
5.3.5	Filtro de bolsas	53
5.3.6	Motor de combustión interna	54

5.4.	Descripción del proceso	56
5.4.1	Influyente	56
5.4.2	Efluente	56
5.5.	Simulación de la planta piloto en Aspen Plus.....	58
5.5.1	Elementos no convencionales	58
5.5.2	Reactores	59
5.5.3	Calculator	60
5.5.4	Programación en Fortran.....	61
5.5.5	Descripción de proceso	61
5.5.5.1	Alimentación.....	62
5.5.5.2	Secado	64
5.5.5.3	Desvolatilización o pirolisis primaria.....	64
5.5.5.4	Modelación matemática de la generación de alquitrán	65
5.5.5.5	Combustión	69
5.5.5.6	Reacciones secundarias	69
5.5.5.7	Gasificación.....	70
6.	Resultados	71
6.2.	Análisis de resultados	74
7.	Conclusiones.....	77
8.	Bibliografía	80
9.	Anexos	83
9.1.1	Anexo 1	83
9.1.1.1	Modelo 1 (Bain).....	83
9.1.1.2	Modelo 2 (Jie)	97
9.1.2	Anexo 2	111

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Combustibles usados en los Estados Unidos para el suministro energético en el año 2009. (IEA, 2011).....	11
Figura 2. Combustibles usados en México para el suministro energético en el año 2009. (IEA, 2011)	11
Figura 3. Combustibles usados en México para el suministro energético para el año 2030. (SENER, 2006).....	12
Figura 4. Ejemplos del origen de la biomasa (Opex-Energy, 2011).....	15
Figura 5. Diagrama de productos de una gasificación (Steam reforming of tar from a biomass gasification process over Ni/olivine catalyst using toluene as a model compound, 2007).....	25
Figura 6. Proceso típico de una planta de gasificación de biomasa (Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)	27
Figura 7. Motor de combustión interna alimentado con gas pobre (Dresser-Rand, 2012).....	29
Figura 8. Gasificador de corriente ascendente o tiro directo (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004)	30
Figura 9. Gasificador de corriente descendente o de tiro invertido (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004)	31
Figura 10. Gasificador de tiro transversal. (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004)	33
Figura 11. Gasificador de lecho fluidizado burbujeante. (Val Gento, 2011).....	34
Figura 12. Esquema de maduración del alquitrán propuesta por Elliot. (Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)	36

Figura 13.	Métodos de conversión química del alquitrán. (Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)	39
Figura 14.	Ejemplo de un Scrubber (Hkvac) (López Guadarrama, 2008).....	39
Figura 15.	Sistema Venturi – Scrubber. (López Guadarrama, 2008).....	40
Figura 16.	Vista frontal de la planta de gasificación.	47
Figura 17.	Planta piloto de gasificación de biomasa del Instituto de Ingeniería de la UNAM. (Barrera Galván, 2008)	49
Figura 18.	Vista Frontal izquierda (Barrera Galván, 2008)	50
Figura 19.	Vista del gasificador y el tornillo sin fin.	51
Figura 20.	Vista del gasificador y el ciclón.....	52
Figura 21.	Vista del filtro y el soplador de aire.....	54
Figura 22.	Vista del motor de combustión interna.	55
Figura 23.	Vista del Generador eléctrico.	55
Figura 24.	Simulación de la planta piloto de gasificación en Aspen Plus	63
Figura 25.	Generación de benceno	74
Figura 26.	Generación de Naftaleno.....	75

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.	Análisis elemental del pino (Gamiño Calvillo , 2005)	17
Tabla 2.	Análisis elemental de cenizas de corteza de pino (Gamiño Calvillo , 2005)	18
Tabla 3.	Tamaño, humedad y contenido de cenizas en los residuos de madera. (Gamiño Calvillo , 2005).....	19
Tabla 4.	Fuentes de residuos de madera (Gamiño Calvillo , 2005).....	20

Tabla 5.	Contenido energético de la biomasa residual y otros combustibles (Gamiño Calvillo , 2005).....	21
Tabla 6.	Poder calorífico de las especies utilizadas en la mezcla de biomasa (Gamiño Calvillo , 2005).....	23
Tabla 7.	Clasificación típica de alquitranes (Simulation of biomass gasification in dual fluidized bed gasifier, 2012)	37
Tabla 8.	Equipos principales del gasificador (Barrera Galván, 2008)	48
Tabla 9.	Características del motor de combustión interna. (Gamiño Calvillo, 2011)	54
Tabla 10.	Análisis elemental de la biomasa y de los residuos carbonosos (Char) (Bain, 1992).....	59
Tabla 11.	Reactores usados en Aspen Plus.....	60
Tabla 12.	Coeficientes de las correlaciones de desvolatilización. (Bain, 1992).	65
Tabla 13.	Composición elemental de la biomasa utilizada para el modelo de Bain originalmente y la del Instituto de ingeniería de la UNAM.	67
Tabla 14.	Gas producto de la gasificación.....	71
Tabla 15.	Resultado de desvolatilización modelo 1	72
Tabla 16.	Resultado de desvolatilización modelo 2.....	73

**RESUMEN**

La gasificación de biomasa representa para el mundo una alternativa para la disminución del uso de combustibles fósiles para la generación de energía eléctrica, esto implica a su vez una disminución en la generación de gases de efecto invernadero que promueven el deterioro de la capa de ozono y adicionalmente son la principal causa de enfermedades en las vías respiratorias.

La gasificación de biomasa en general es el proceso de transformación termoquímica de la biomasa a gas de síntesis, el cual es usado como combustible en motores a diésel modificados para accionar generadores eléctricos. El gas de síntesis está compuesto principalmente de hidrógeno, metano, dióxido de carbono, monóxido de carbono, hidrocarburos de ligeros y alquitranes. Éstos últimos son un subproducto no deseado de la gasificación, dado que el proceso de gasificación se lleva a cabo a temperaturas superiores a los 500°C, por lo que la mayoría de los alquitranes se encuentran en fase gaseosa y se mezclan con el gas de síntesis.

En el momento en el que el gas de síntesis se enfría a una temperatura menor a los 200°C, los alquitranes se condensan y en caso de no existir un buen sistema de limpieza del gas de síntesis, los alquitranes se acumulan en las tuberías y en los accesorios del sistema, llegando a tapar tuberías y provocar daños en los motores de combustión y en casos extremos puede hasta alcanzar la destrucción de éstos últimos.

El presente trabajo se centra en el desarrollo de una simulación computacional del proceso de gasificación en donde se realiza la comparación de dos modelos matemáticos para la estimación de la producción de alquitranes en una planta piloto de gasificación de biomasa, para realizar la comparación se desarrolló la simulación en Aspen Plus de la planta, este software es especial para la simulación de procesos químicos, unitarios y físicos.

Ambos modelos matemáticos fueron programados en Fortran y añadidos al motor de simulación de Aspen Plus. Cabe señalar que los modelos matemáticos se



encuentran en función de la temperatura a la cual se lleve a cabo el proceso de gasificación, dado que la producción y desintegración térmica de alquitranes dependen esencialmente de la temperatura. Con ello se busca encontrar el mejor modelo matemático que permita en un futuro comparar este modelo con las pruebas experimentales para conocer cómo es el comportamiento real de la producción de alquitranes.



1. INTRODUCCIÓN

La utilización de combustibles fósiles constituye una de las principales causas de la producción de gases de efecto invernadero (dióxido de carbono CO₂, gas metano CH₄ y óxido nitroso N₂O) y de la contaminación del aire causante de enfermedades respiratorias y del deterioro del medio ambiente, por ello se ha buscado el desarrollo de fuentes alternativas de energías renovables. Una de ellas es la gasificación de biomasa y el uso de este gas en motores de combustión interna para la generación de energía eléctrica.

Es importante destacar que la biomasa representa una fracción importante en la generación eléctrica mundial, la cual llega a figurar el 11% del consumo energético total a nivel mundial (IEA, 1998). Los países desarrollados se encuentran incrementando e impulsando el uso de la biomasa como combustible para reducir sus emisiones de CO₂ y respetar así los convenios mundiales para la reducción de gas de efecto invernadero.

En la Figura 1 y Figura 2 se representan las distribuciones de los tipos de combustibles usados para la generación eléctrica en los Estados Unidos y en México para el año 2009, los datos han sido tomados de la Agencia Internacional de Energía (IEA en sus siglas en inglés) donde se destaca el porcentaje del uso de los biocombustibles, en el cual se incluye la biomasa.



Suministro primario total de energía total en el 2009

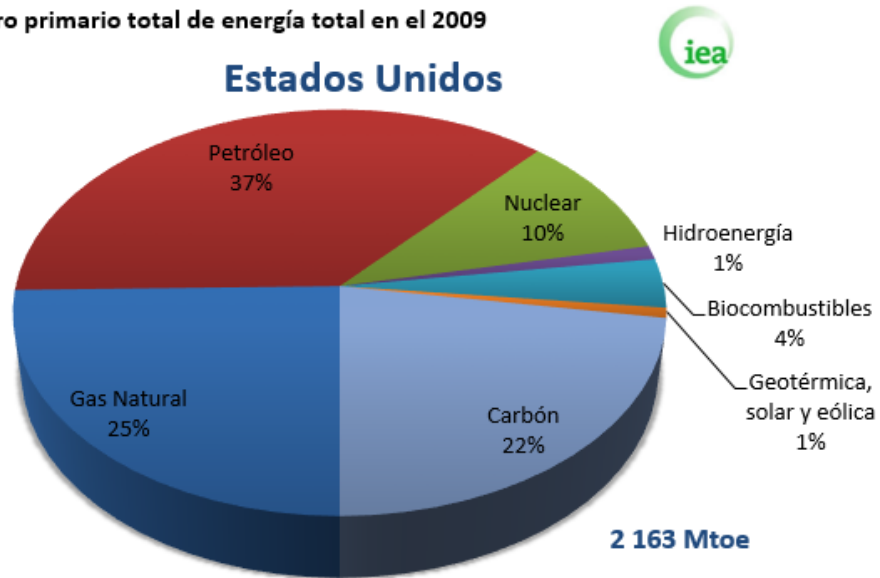


Figura 1. Combustibles usados en los Estados Unidos para el suministro energético en el año 2009. (IEA, 2011)

Suministro primario total de energía total en el 2009

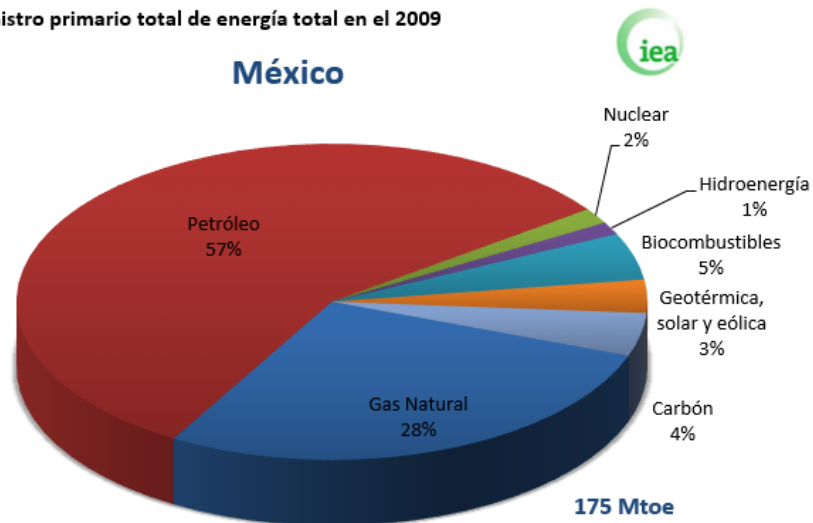


Figura 2. Combustibles usados en México para el suministro energético en el año 2009. (IEA, 2011)



En México la Secretaría de Energía (SENER) en el año 2006 publicó el programa de *Energía Renovables para el Desarrollo Sustentable en México*, el cual indica la importancia que tendrán las energías renovables en el futuro de México, en la Figura 3 se representa una proyección de la distribución del uso de combustibles para el año 2030, donde se ve un aumento de la participación de los biocombustibles del 4.8% en el 2009 a un 7% para el 2030.

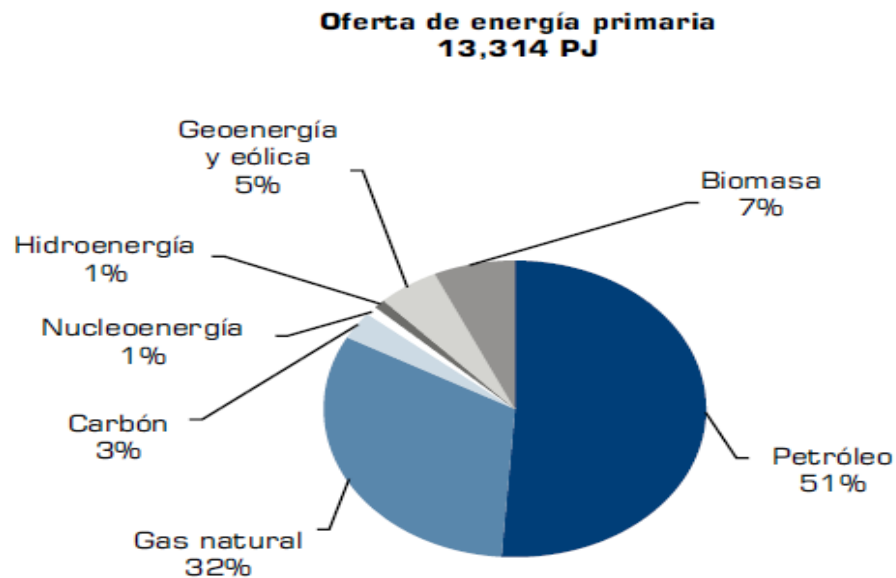


Figura 3. Combustibles usados en México para el suministro energético para el año 2030. (SENER, 2006)

Nota: *toe*, es una unidad de energía cuyo nombre en español es *Tonelada Equivalente de petróleo*, la cual su valor equivale a la energía que rinde un tonelada de petróleo, la cual, como varía según la composición química de éste, se ha tomado un valor convencional de:

$$41\ 868\ 000\ 000\ \text{J (julios)} = 11\ 630\ \text{kWh (kilovatios-hora)}$$

$$1\ \text{Mtoe} = 1\ 000\ 000\ \text{toe}$$



En el mundo la importancia del uso de los biocombustibles se ve reflejado en los siguientes datos:

- 11 millones de hogares se iluminan con biogás
- 250 millones de estufas eficientes de leña
- 38,000 MWe de capacidad instalada para producción de electricidad
- 30 mil millones de litros/año de etanol
- 180 millones de personas viven en países con normas para mezclar etanos con gasolina

Por ello es necesario un estudio profundo para impulsar el uso de biocombustibles como una alternativa al uso de combustibles fósiles y a su vez resolver las problemáticas que actualmente tienen las tecnologías para el aprovechamiento de los biocombustibles.

En la gasificación de biomasa uno de los principales problemas que presenta esta tecnología es el bajo poder calorífico del gas combustible, así como el contenido de impurezas como ácidos, polvos y trazas de hidrocarburos pesados (alquitranes). Estos últimos representan un grave problema, ya que pueden causar bloqueo y ensuciamiento de las tuberías y válvulas en los sistemas de gasificación y de los motores de combustión interna provocando un mal funcionamiento o un colapso de estos.

1.2. Objetivo general

Generar una metodología de simulación computacional para la estimación de la generación de alquitranes en el proceso de gasificación de biomasa, y estudiar las condiciones de operación de un gasificador que determinen la menor concentración de los alquitranes presentes en el gas de síntesis.



1.2.1 Objetivos particulares

- I. Descripción general de los procedimientos para gasificación de biomasa y determinación de los principales factores termodinámicos y químicos en la formación de alquitranes.
- II. Simular la planta de gasificación del Instituto de Ingeniería de la UNAM y agregar al motor de simulación la programación de modelos matemáticos para realizar su comparación con un análisis paramétrico variando la temperatura.
- III. Estudiar los sistemas de tratamiento actuales de los gases combustibles para la reducción de la concentración de alquitranes.

2. ANTECEDENTES

2.1. BIOMASA

La Biomasa según el diccionario de la Real Academia Española, tiene dos acepciones:

- f. Biol. Materia total de los seres que viven en un lugar determinado, expresada en peso por unidad de área o de volumen.
- f. Biol. Materia orgánica originada en un proceso biológico, espontáneo o provocado, utilizable como fuente de energía.

Esta segunda definición es la que evoca a la biomasa como una fuente de energía, si bien también se puede entender a la biomasa como una “materia viva” o “materia derivada de seres vivos”, la cual está constituida por un amplio número de productos que pueden ser utilizados como combustibles, desde combustibles sólidos como la leña, el carbón o residuos agrícolas, los cuales se pueden quemar directamente o gasificarse para producir calor y electricidad, hasta los *residuos municipales* y el *estiércol* de los cuales se obtienen muchos productos tales como el biogás (Matera Cerutti, y otros, 2005).



Se considera que la biomasa es una fuente renovable de energía porque su valor proviene del Sol. A través del proceso de fotosíntesis, la clorofila de las plantas captura su energía, y convierte el dióxido de carbono (CO_2) del aire y el agua del suelo en carbohidratos, para formar la materia orgánica. Cuando estos carbohidratos se queman, regresan a su forma de dióxido de carbono y agua, liberando la energía que contienen. En la Figura 4 se observa algunos ejemplos del origen de la biomasa. (Network, 2002)

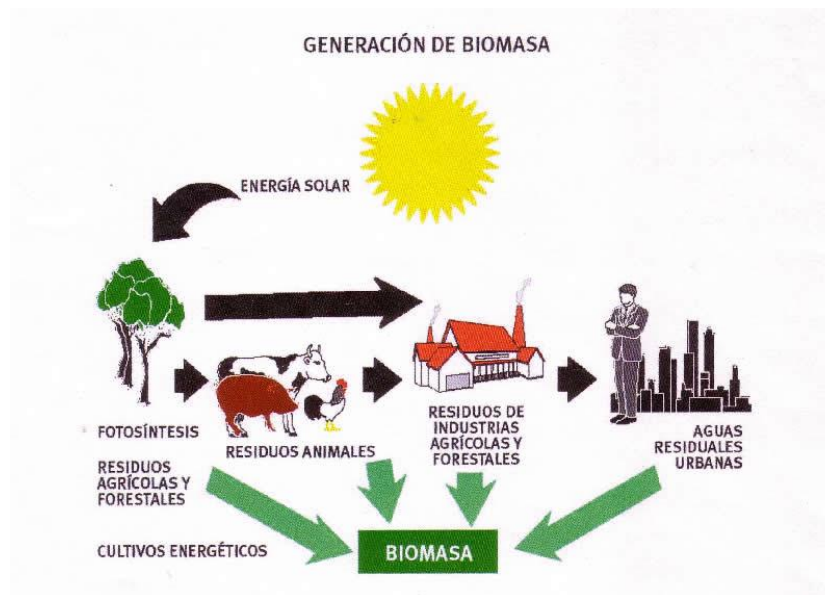


Figura 4. Ejemplos del origen de la biomasa (Opex-Energy, 2011)

2.1.2 Tipo de biomasa

El tipo de biomasa utilizado en la gasificación es uno de los factores que determinan el poder calorífico del gas combustible

Residuos agrícolas: Pasto, desechos de la producción de maíz y de frutas, cáscara de arroz, cáscara de nueces, residuos de la producción de aceite de soya y de girasol, bagazo de la producción de la caña de azúcar (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004).



Desechos orgánicos: Basura doméstica e industrial y desechos de papel (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004)

Madera: Madera de desecho de la industria de muebles, desechos de los jardines y de parques naturales, madera de demolición (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004).

Lodos: Residuos del tratamiento de aguas negras y líneas de conducción de las mismas (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004).

2.1.3 Propiedades químicas

Las propiedades químicas de la biomasa, al ser una mezcla de materia orgánica, se pueden determinar a partir de un análisis elemental de la composición en función de su contenido de Carbono, Hidrógeno, Oxígeno, Nitrógeno y Azufre (CHONS), con lo que se facilita el cálculo del balance de materia en las reacciones químicas que se llevan a cabo durante la gasificación (Pérez Bayer, 2009).

El poder calorífico superior de la biomasa es la cantidad de energía liberada durante su combustión sin considerar la humedad, este parámetro se mide en kJ/kg y se determina a partir de un estudio de calorimetría. Entre mayor sea su poder calorífico, la cantidad de energía que requiera la biomasa para su gasificación será menor. (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004)

En la 2.1.3Tabla 1 se puede observar el análisis elemental para el pino utilizado como biomasa así como algunas de sus características físicas.

**Tabla 1.** Análisis elemental del pino (Gamiño Calvillo , 2005)

	%
PROPIEDADES	
Volátiles	72,9
Carbón fijo	24,2
Cenizas	2,90
ANÁLISIS ELEMENTAL	
Carbono	52,9
Hidrógeno	6,3
Nitrógeno	0,5
Azufre	0,05
Cloro	0,01
Oxígeno	37,6

Un factor importante durante la gasificación es la generación de cenizas, ya que dependiendo de la biomasa que se seleccione se tendrá diferente composición. Las cenizas son un subproducto de la gasificación la cual es inerte y su presencia no afecta las reacciones químicas que se desarrollan durante este proceso.

La presencia de cenizas como partículas suspendidas en el gas síntesis puede provocar obstrucción de tuberías por acumulación de partículas, por lo que se debe contar con un sistema de limpieza del gas, un dispositivo típico de limpieza es el ciclón el cual separa más del 90% de partículas suspendidas en el gas. En la Tabla 2 se muestra el análisis elemental de cenizas para la corteza de pino.



Tabla 2. Análisis elemental de cenizas de corteza de pino (Gamiño Calvillo , 2005)

ANÁLISIS DE CENIZAS (%)	PINO
SiO ₂	17,1
Al ₂ O ₃	5,12
Fe ₂ O ₃	0,2
TiO ₂	-
CaO	34,22
MgO	4,18
Na ₂ O	2,34
K ₂ O	6,65
P ₂ O ₅	0,30

2.1.4 Propiedades físicas

2.1.4.1 Tamaño de partícula

El tamaño de partícula de la biomasa influye en la selección del tipo de gasificador más apropiado para su aprovechamiento energético o, en los pretratamientos necesarios para adecuar sus características al tipo de reactor seleccionado. La dimensión de partícula influye en el tiempo necesario para que se tenga lugar un proceso determinado, dado que, partículas de mayor tamaño poseen más inercia térmica y afectan de forma directa el dimensionamiento del reactor (Pérez Bayer, 2009).



2.1.4.2 Humedad

El contenido de humedad relativa en la biomasa es otro parámetro importante a medir, ya que dependiendo del porcentaje de humedad relativa se determinará si la biomasa requerirá un pre tratamiento de deshumidificación antes de ingresar al reactor o puede prescindir de éste. Se recomienda que la biomasa tenga una humedad relativa inferior al 30% para poder entrar al gasificador, una cantidad mayor a este porcentaje pone en riesgo que el sistema no sea autosustentable térmicamente, ya que el sistema estaría destinando una gran cantidad de energía para la evaporación del agua presente en la biomasa.

En la Tabla 3 se muestran las características de tamaño, contenido de humedad y contenido de cenizas para residuos de forestales (o de madera).

Tabla 3. Tamaño, humedad y contenido de cenizas en los residuos de madera. (Gamiño Calvillo , 2005)

RESIDUOS	TAMAÑO (mm)	CONTENIDO DE HUMEDAD (%)	CONTENIDO DE CENIZAS Y SUCIEDAD (%)
Lijaduras	0-1	2-10	0.1-0.5
Virutas	1-12	10-20	0.1-1.0
Aserrín	1-10	10-40	0.5-2.0
Corteza (desmenuzada)	1-100	25-75	1.0-2.0
Limpiezas de apiladeros	Hasta 100	40-60	5.0-50.0
Otros residuos forestales		30-60	3.0-20.0



2.1.5 Fuentes de residuos de madera

Los residuos de madera se pueden clasificar de dos maneras:

- Los que proceden de la recolección y extracción de trozas de los montes (bosque).
- Los que generan las propias industrias forestales durante el proceso de procesamiento de la madera (aserraderos, fábrica de muebles, carpinterías, etc.)

En la Tabla 4 se muestra el tipo de residuo y la fuente de la que procede.

Tabla 4. Fuentes de residuos de madera (Gamiño Calvillo , 2005).

FUENTE	TIPO DE RESIDUO
Operaciones forestales	Ramas, hojas, troncos, raíces, madera de mala calidad, madera podrida, recortes y aserrín.
Fabricación de madera	Corteza, aserrín, recortes, madera partida, virutas, lijaduras

Dependiendo de la humedad relativa de la biomasa se afecta la capacidad calorífica y su eficiencia de combustión en un quemador corriente. En la Tabla 5 se muestran las diferentes capacidades caloríficas de la biomasa en función de su contenido de humedad y del tipo de biomasa.



Tabla 5. Contenido energético de la biomasa residual y otros combustibles (Gamiño Calvillo , 2005).

COMBUSTIBLE	CONTENIDO HUMEDAD %	PODER CALORÍFICO (MJ/kg)	EFICIENCIA DE UN QUEMADOR CORRIENTE (%)	PODER CALORÍFICO NETO (MJ/kg)
Madera y residuos de pino				
Madera	0	19.80	80.0	15.84
Madera	10	17.80	78.0	13.88
Madera	20	15.90	76.0	12.08
Madera	30	14.50	74.0	10.73
Madera	40	12.00	72.0	8.64
Madera	50	10.00	67.0	6.70
Aserrín	0	19.00	80.6	15.31
Aserrín	13	16.20	77.4	12.54
Aserrín	15	15.84	76.9	12.18
Aserrín	35	11.53	72.1	8.31
Aserrín	50	10.00	68.4	6.84
Virutas	0	19.06	80.6	15.36
Virutas	13	16.20	77.4	12.54
Virutas	15	15.84	76.9	12.18
Virutas	35	11.53	72.1	8.31
Corteza	0	19.60	80.0	15.68
Corteza	20	15.25	76.0	11.59
Corteza	40	11.07	72.0	7.97
Leñas y ramas	0	19.35	80.0	15.48



COMBUSTIBLE	CONTENIDO HUMEDAD %	PODER CALORÍFICO (MJ/kg)	EFICIENCIA DE UN QUEMADOR CORRIENTE (%)	PODER CALORÍFICO NETO (MJ/kg)
Leñas y ramas	20	15.00	76.0	11.40
Leñas y ramas	40	10.66	72.0	7.67
Otros tipos de madera				
Madera seca no resinosa	0	19.00	80.0	15.20
Madera seca resinosa	0	22.50	80.0	18.00
Madera Abedul	0	18.79	80.0	15.03
Corteza seca no resinosa	0	20.00	80.0	16.00
Corteza seca resinosa	0	22.50	80.0	18.00
Otros combustibles				
Petróleo pesado	N/A	42.60	82.5	35.15
Petróleo ligero	N/A	43.50	82.5	35.89
Butano	N/A	49.30	79.0	38.95
Propano	N/A	50.00	78.7	39.35

El gasificador del Instituto de Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) es alimentado por una biomasa que se compone principalmente de la mezcla de residuos de madera y de pasto del tipo kikuyo, esta mezcla se obtiene del producto de recolección y de podas en las áreas verdes dentro de la Ciudad Universitaria de la UNAM.



En la Tabla 6 se presenta el poder calorífico del pasto kikuyo, así como especies de árboles que abundan en Ciudad Universitaria

Tabla 6. Poder calorífico de las especies utilizadas en la mezcla de biomasa (Gamiño Calvillo , 2005).

NOMBRE COMÚN	NOMBRE CIENTÍFICO	% HR	PODER CALORÍFICO (MJ/kg)
Pasto Kikuyo	Pennusetum Clandestinum	1-5	19.64725
Eucalipto 2	Eucalyptus Globulus	1-5	17.21475
Eucalipto 3	Eucalyptus Cinerca	1-5	16.9448
Cedro Blanco	Cupressus Lusitania	1-5	21.1048
Acacia Cochiliacantha	Cubata Prieta	1-5	19.052
Grevillea Robusta	Roble Australiano, pino de oro	1-5	20.051
Pasto	Pennisetum Clandestinum	1-5	18.5813
Tehuiztle Rojo	Acacia Bilimekii	1-5	16.4146
Tehuiztle Blanco	Acacia Bilimekii	1-5	15.1556
Hule	Picus Elastica	1-5	18.4673
Jacaranda	Jacaranda Mimosifolia	1-5	19.2186

2.1.6 Combustible Biomásico

Un combustible biomásico es la materia orgánica originada en un proceso biológico, espontáneo o provocado, utilizable como fuente renovable de energía, la cual tiene carbonos fijos en su composición debido a la transformación química de la energía solar, por medio de un proceso de fotosíntesis. Esta energía almacenada en forma de materia orgánica, puede recuperarse quemándola directamente o transformándola en combustible.



3. GASIFICACIÓN

Se define como gasificación al proceso termoquímico de conversión de un combustible sólido en un combustible gaseoso mediante su oxidación parcial a altas temperaturas. Dependiendo del oxidante que se utilice, durante la oxidación se generan distintos tipos de gas, en el caso de la utilización de aire como oxidante se genera el llamado “gas pobre” llamado así por su bajo poder calorífico (4-7 MJ/Nm³), en el caso de utilizar oxígeno o vapor de agua se genera el llamado gas de síntesis o “syngas” que tiene un poder calorífico de (10-18 MJ/Nm³). Ambos gases contienen variables concentración de CO, H₂, metano CH₄, dióxido de carbono CO₂, Nitrógeno, así como la generación de trazas de hidrocarburos pesados llamados alquitranes (Pérez Bayer, 2009).

Un sustrato carbonoso, tal como la biomasa es transformado en un gas combustible de bajo poder calorífico, mediante una serie de reacciones en presencia de un agente gasificante (aire, oxígeno y/o vapor de agua), el gas pobre resultante puede ser utilizado en turbinas de gas o en motores de combustión interna. Ambos motores térmicos pueden ser acoplados a un generador para la producción de electricidad.

La gasificación consiste en varias etapas de transformación de la biomasa, el orden en que se lleven a cabo dependerá del tipo de gasificador con el que se esté trabajando, las principales etapas de transformación son las siguientes:

- Secado
- Pirolisis/Desvolatilización
- Combustión / Oxidación
- Gasificación

En la Figura 5 se muestra el proceso global de gasificación, así como algunos posibles productos obtenidos de la gasificación de la biomasa.

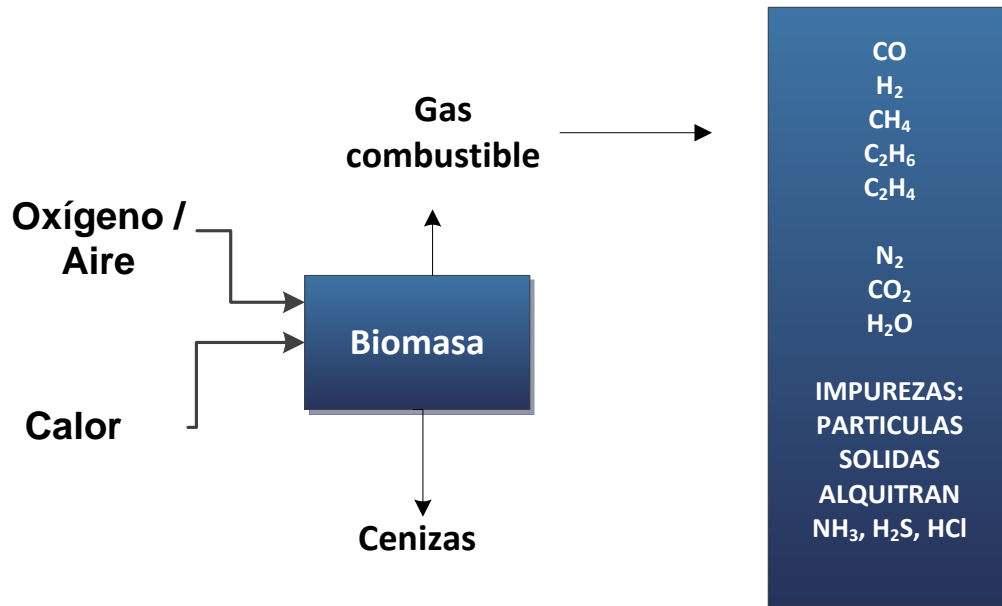


Figura 5. Diagrama de productos de una gasificación (Steam reforming of tar from a biomass gasification process over Ni/olivine catalyst using toluene as a model compound, 2007)

3.1.2 Secado

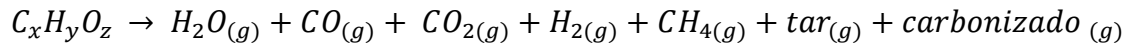
El proceso de secado se efectúa en una pequeña parte del gasificador en donde se evapora el agua presente en la biomasa como humedad relativa. En el proceso de gasificación se recomienda que el contenido de humedad relativa presente en la biomasa sea de máximo un 30%, dado que durante el secado se destina una cantidad de la energía total de la gasificación para evaporar el agua presente en la biomasa, para que ésta pueda continuar al proceso de pirolisis. La humedad es un compuesto que resta energía térmica al sistema, por lo que una cantidad excesiva de humedad relativa puede poner en riesgo que la gasificación no sea autosostenible en energía.



3.1.3 Pirolisis

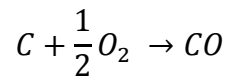
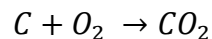
La descomposición térmica de la biomasa en ausencia de oxígeno, es llamada pirolisis o desvolatilización, tiene una fuerte influencia sobre el proceso total de gasificación/combustión, toda vez que la cantidad de volátiles puede ser hasta del 86% de la masa total de la biomasa (Barrera Galván, 2008).

La biomasa se descompone térmicamente en gases, alquitranes y carbonizado. Este proceso se puede describir por:



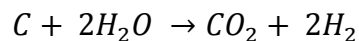
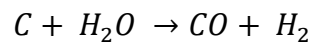
3.1.3.1 Combustión / oxidación

Una parte de conversión del carbono presente en la biomasa es a través de la oxidación y su reacción química es la siguiente:



Estas reacciones son exotérmicas por lo que generan calor que permite mantener la temperatura del sistema y proporciona energía al gasificador. (de Andrés Almeida, 2010)

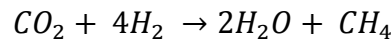
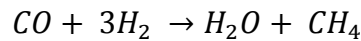
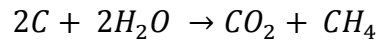
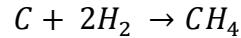
La oxidación con vapor permite la presencia de agua en la gasificación por lo que se favorece la formación de hidrógeno y aumenta el poder calorífico del gas combustible y se describe con la siguiente reacción:



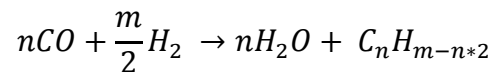
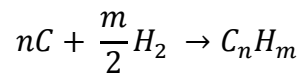
Esta reacción con vapor de agua se le denomina “*water gas reaction*”. (de Andrés Almeida, 2010)



Al existir presencia de hidrógeno, monóxido de carbono, dióxido de carbono y agua se genera otra reacción en cadena para la producción de metano y se describe de la siguiente manera:



La formación de alquitranes parte de la formación de largas cadenas de hidrocarburos y se representa como sigue:



3.2. Proceso de gasificación

La gasificación consiste principalmente en una unidad de preparación de biomasa, una unidad gasificadora, un sistema de acondicionamiento de gas y un sistema de generación eléctrica, en la Figura 6 se observa a mayor detalle el proceso típico de gasificación.

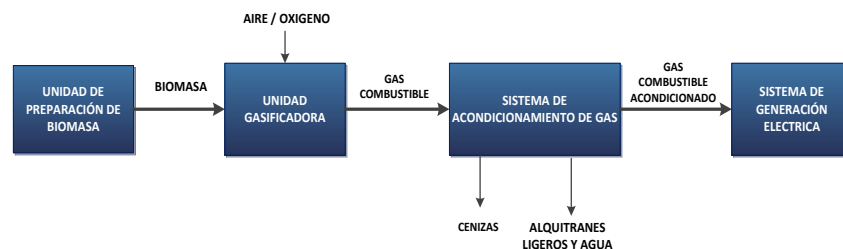


Figura 6. Proceso típico de una planta de gasificación de biomasa (Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)



3.2.2 Unidad de preparación de biomasa

Esta unidad es donde se prepara la biomasa para poder ingresar a la unidad de gasificación, la cual consiste primero en triturar la biomasa hasta obtener virutas, esto se hace para facilitar la gasificación y aumentar la eficiencia de conversión, posteriormente las virutas se hacen pasar por una unidad secadora en donde se pretende quitar la mayor humedad posible presente en las virutas, típicamente la humedad requerida para la gasificación va de un 10 % a un 30%. Finalmente las virutas de la biomasa continúan con el siguiente paso que es el ingreso a la unidad de gasificación.

3.2.3 Unidad de gasificación

La unidad de gasificación es donde se lleva a cabo el proceso termodinámico de transformación de la materia orgánica en gas de síntesis (gas combustible), a altas temperaturas la biomasa comienza el proceso de oxidación y como se describió anteriormente se llevan a cabo un conjunto de reacciones químicas para obtener como producto final el gas combustible, más adelante se describirá algunos de los principales tipos de gasificadores que pueden emplearse para este proceso.

3.2.4 Sistema de acondicionamiento de gas

El gas combustible que sale del gasificador arrastra consigo partículas en suspensión (cenizas alquitranes, entre otros residuos particulados) así como alquitranes en estado gaseoso, la importancia de esta unidad recae principalmente en la limpieza del gas para no afectar los equipos subsecuentes como los motores para la generación de electricidad, a su vez evitar el ensuciamiento u obstrucción de la tubería.

El sistema puede consistir en la utilización de métodos mecánicos, termoquímicos y cinéticos, los que permiten depurar el gas combustible y remover la mayoría de los residuos no deseados, más adelante se describirá cada uno de estos métodos y su finalidad.



3.2.5 Sistema de generación eléctrica

El sistema consiste en la generación de energía eléctrica a través de motores de combustión interna alimentados con el gas combustible, estos motores mueven un generador eléctrico, en la Figura 7 se observa una imagen de un motor de combustión interna para operar con gases pobres.



Figura 7. Motor de combustión interna alimentado con gas pobre (Dresser-Rand, 2012)

3.3. Tipos de gasificadores

Los principales tipos de gasificadores que se utilizan para el proceso de gasificación de biomasa son los siguientes:

- a) Gasificador de corriente ascendente o tiro directo
- b) Gasificadores de corriente descendente o tiro invertido
- c) Gasificados de tiro transversal
- d) Gasificador de lecho fluidizado

3.3.1 Gasificador de corriente ascendente o tiro directo

El tipo de gasificador más antiguo y sencillo es el de tiro directo o gasificador ascendente que se presenta esquemáticamente en la Figura 8.

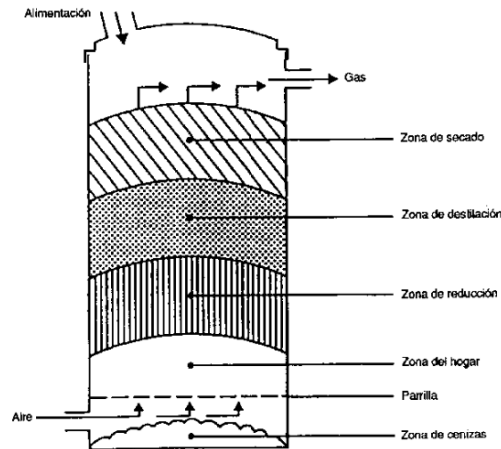


Figura 8. Gasificador de corriente ascendente o tiro directo (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004)

La toma de aire se encuentra en el fondo y los gases salen por arriba. Cerca de la parrilla, en el fondo, tienen lugar las reacciones de combustión, que van seguidas de reacciones de reducción algo más arriba, en el gasificador. En la parte alta del gasificador tiene lugar el calentamiento y pirolisis de la carga, como resultado de la transferencia de calor, por convección forzada y radiación, de las zonas inferiores. Los alquitranes y productos volátiles producidos durante este proceso son transportados por la corriente de gas. Se remueven las cenizas del fondo del gasificador.

Las principales ventajas de este tipo de gasificador consisten en su simplicidad, alta proporción de carbón vegetal quemado e intercambio interno de calor que motiva las bajas temperaturas de salida del gas y la alta eficiencia del equipo y también la posibilidad de funcionar con muchos tipos de carga (aserrín, cascaras de cereales, etc.).

Los principales inconvenientes provienen de la posibilidad de que se produzcan "chimeneas" en el equipo, lo que puede motivar la salida de oxígeno y situaciones explosivas peligrosas y la necesidad de instalar parrillas de movimiento automático



y también problemas relacionados con la eliminación de líquidos condensados que contienen alquitranes, resultantes de las operaciones de depuración del gas. Esto último tiene poca importancia si el gas se emplea para aplicaciones directas del calor, en cuyo caso los alquitranes simplemente se queman.

3.3.2 Gasificadores de corriente descendente o tiro invertido

Se ha encontrado una solución al problema del arrastre de alquitrán con la corriente de gas, diseñando gasificadores de tiro invertido o corriente descendente, en los cuales el aire de primera gasificación se introduce en la zona de oxidación del gasificador o por encima de ésta. El gas pobre sale por el fondo del aparato de modo que el combustible y el gas se mueven en la misma dirección, como se muestra en la Figura 9.

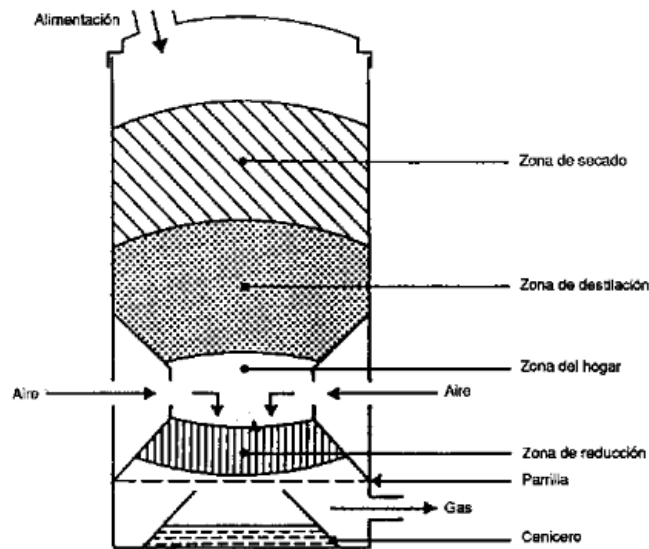


Figura 9. Gasificador de corriente descendente o de tiro invertido (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004)

En su camino hacia abajo, los productos ácidos y alquitranes de la destilación procedentes del combustible deben pasar a través de un lecho incandescente de



carbón vegetal y se transforman por ello en gases permanentes de hidrógeno, dióxido de carbono, monóxido de carbono y metano.

Dependiendo de la temperatura de la zona incandescente y del tiempo de paso de los vapores con alquitrán, se logra una descomposición más o menos completa de los alquitranes.

La principal ventaja de los gasificadores de tiro invertido radica en la posibilidad de producir un gas sin alquitrán apropiado para aplicarlo a motores.

3.3.3 Gasificados de tiro transversal

Los gasificadores de tiro transversal, que se ilustran en la Figura 10. Son una adaptación para el empleo de biomasa compuesta de carbón vegetal. La gasificación del carbón vegetal produce temperaturas muy elevadas (1 500°C y más) en la zona de oxidación que pueden producir problemas en los materiales. En los gasificadores de tiro transversal, el propio combustible (carbón vegetal) sirve de aislamiento contra estas altas temperaturas.

Las ventajas del sistema residen en poder funcionar en muy pequeña escala (instalaciones inferiores a 10 kW, potencia en el eje), pudiendo resultar económicamente viables, en ciertas condiciones. La razón está en la gran sencillez del conjunto de depuración del gas (sólo un quemador de ciclón y un filtro caliente) que se puede emplear cuando se utiliza este tipo de gasificador junto con motores pequeños.

Un inconveniente de los gasificadores de tiro transversal es su capacidad mínima de transformación del alquitrán y la necesidad consiguiente de emplear carbón vegetal de alta calidad (bajo contenido de productos volátiles).



Debido a la incertidumbre sobre la calidad del carbón, cierto número de gasificadores de carbón vegetal emplean el sistema de corriente descendente para mantener al menos una capacidad mínima de cracking del alquitrán.

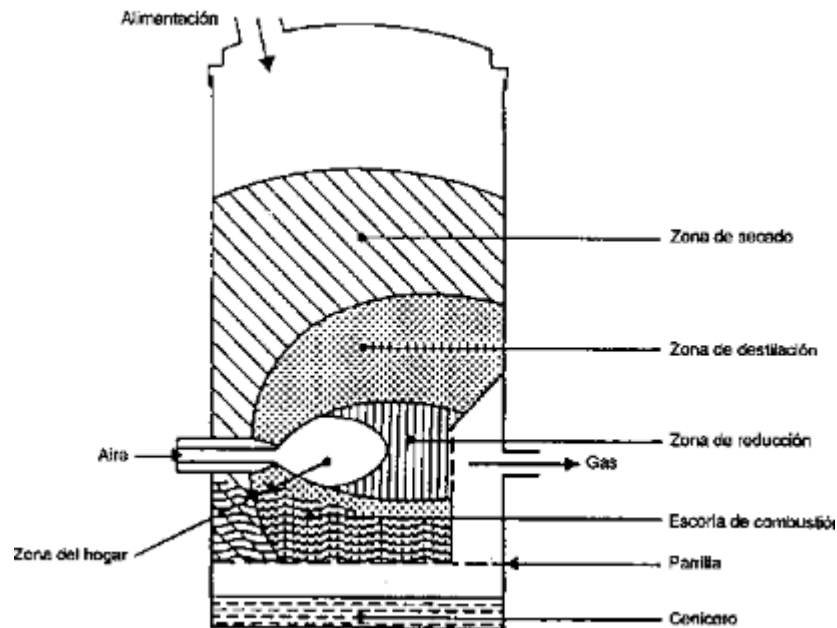


Figura 10. Gasificador de tiro transversal. (Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo, 2004)

3.3.4 Gasificador de lecho fluidizado

Se introduce aire a través de un lecho de partículas sólidas a velocidad suficiente para mantenerlas en estado de suspensión. Se comienza por calentar externamente el lecho y el material de alimentación se introduce tan pronto como se alcanza una temperatura suficientemente elevada. Las partículas del combustible se introducen por el fondo del reactor, se mezclan muy rápidamente con el material del lecho y se calientan casi instantáneamente alcanzando la temperatura del lecho. Como resultado de este tratamiento, el combustible se piroliza muy rápidamente, dando como resultado una mezcla de componentes,



con una cantidad relativamente elevada de materiales gaseosos. En la fase de gas, se produce una nueva gasificación y reacciones de transformación de los alquitranes. La mayoría de los sistemas van equipados con un ciclón interno, a fin de reducir al mínimo el escape de alquitrán. Las partículas de ceniza se transportan también por la parte superior del reactor, debiendo extraerse de la corriente de gas si este se emplea en aplicaciones para motores.

Los gasificadores de lecho fluidizado se pueden clasificar dependiendo de la velocidad de fluidización, en el lecho fluidizado burbujeante (velocidad de fluidización de 1-2 m/s) y de lecho fluidizado circulante (velocidad de fluidización mayor de 5 m/s), en la Figura 11 se puede observar un ejemplo de gasificador de lecho fluidizado burbujeante.

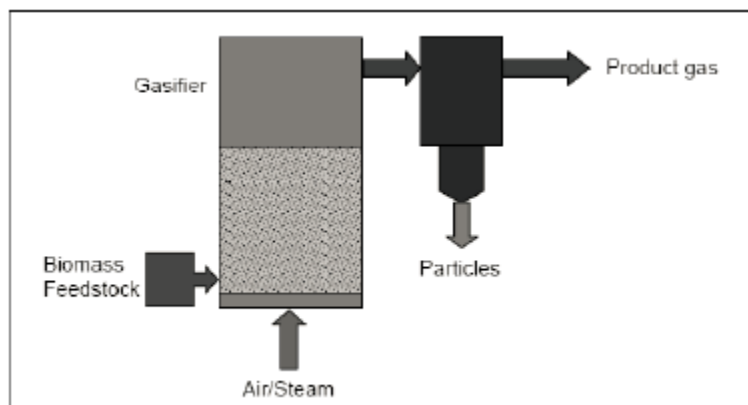


Figura 11. Gasificador de lecho fluidizado burbujeante. (Val Gento, 2011)



4. ALQUITRÁN

El gas producto de la gasificación de biomasa está compuesto por componentes orgánicos e inorgánicos, mayoritariamente de CO, H₂, CO₂, CH₄, H₂O y N₂ y adicionalmente H₂S, HCl, NH₃ y metales alcalinos. Los compuestos orgánicos están constituidos por moléculas de baja masa molecular (hidrocarburos de cadena corta) hasta moléculas de alta masa molecular (hidrocarburos aromáticos polinucleares). Los hidrocarburos de baja masa molecular pueden ser utilizados como combustible para turbinas de gas, así como combustible para motores de combustión interna. Los compuestos orgánicos de alta masa molecular son también conocidos como alquitranes, los cuales representan compuestos indeseados, dado que durante la gasificación, la cual se lleva a temperaturas mayores a las 600°C, los alquitranes se encuentran en fase vapor y al momento de enfriarse comienza a condensarse, lo que puede provocar daños en el gasificador tapando tuberías, válvulas y accesorios, así también, si el gas combustible obtenido en la gasificación no recibe un tratamiento de remoción de alquitranes eficientes, los alquitranes pueden provocar daños graves en los motores de combustión interna y llegar incluso a su destrucción. (Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)

4.1. Composición del alquitrán

La composición del alquitrán depende directamente de las condiciones de operación del gasificador por lo que es difícil determinar una composición general para los alquitranes, por ejemplo una de las condiciones que afectan principalmente a la composición del alquitrán es la temperatura de operación del gasificador, dependiendo de la temperatura se formarán diferentes tipos de hidrocarburos de cadena larga, en la Figura 12 se puede observar algunos ejemplos de los componentes del alquitrán en función de la temperatura de la gasificación.

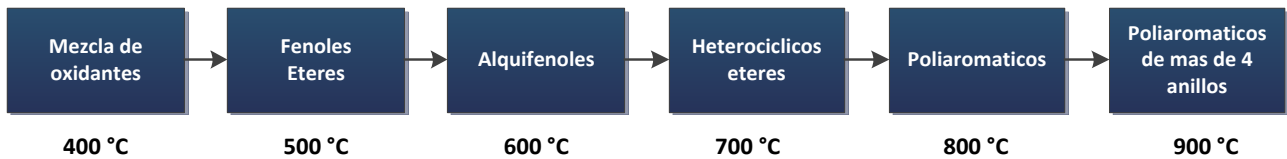


Figura 12. Esquema de maduración del alquitrán propuesta por Elliot. (Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)

4.1.2 Clasificación de alquitrán

Dado que el alquitrán es sólo el nombre de un conjunto de componentes de hidrocarburos de cadena larga resulta más fácil clasificarlo por la composición mayoritaria de los hidrocarburos de cadena larga presentes en éste.

En la Tabla 7 se puede se observar la clasificación típica del alquitrán de acuerdo a su estructura molecular y sus puntos de rocío.



Tabla 7. Clasificación típica de alquitranes (Simulation of biomass gasification in dual fluidized bed gasifier, 2012)

	Alquitranes pesados	Alquitranes ligeros			
	Clase 1	Clase 2	Clase 3	Clase 4	Clase 5
	Indetectable con cromatografía de gases	Aromáticos heterocíclicos	Aromáticos (1 anillo)	Componentes ligeros poliaromáticos (2-3 anillos)	Componentes pesados poliaromáticos (4-7 anillos)
Componentes representativos	No aplica	Fenol o/m/p-Cresol 2,3/2,6/2,4/3,4/2,5/ 3,5-Xilenol	Benceno Tolueno o/m/p-Xilenol	Indan indene Naftaleno 1/2-Metilnapfteno Acenafteno Acenaftileno Fluoreno Fenantreno Antraceno	Fluoranteno Pireno

4.2. Formas de separación o eliminación de alquitranes

Existen dos formas básicas para la eliminación de los alquitranes: por desintegración catalítica utilizando, por ejemplo dolomita o níquel y por desintegración térmica, por ejemplo por oxidación parcial o por contacto térmico directo.



Las tecnologías de remoción de alquitrán se dividen principalmente en dos enfoques de acuerdo a dónde se lleve el tratamiento: dentro del gasificador (tratamiento primario) y fuera del gasificador: en el gas combustible caliente que sale del proceso (tratamiento secundario).

El tratamiento primario consiste en la modificación de los parámetros de operación para así encontrar los parámetros apropiados para reducir la formación de alquitrán.

El tratamiento secundario puede ser por métodos termoquímicos como la desintegración del alquitrán, ya sea catalítico o térmico, reformación y por hidrogenación o por métodos mecánicos de separación usando ciclones, filtros o depuradores. (Steam reforming of tar from a biomass gasification process over Ni/olivine catalyst using toluene as a model compound, 2007)

En la Figura 13 se muestra los diferentes métodos de conversión química del alquitrán.

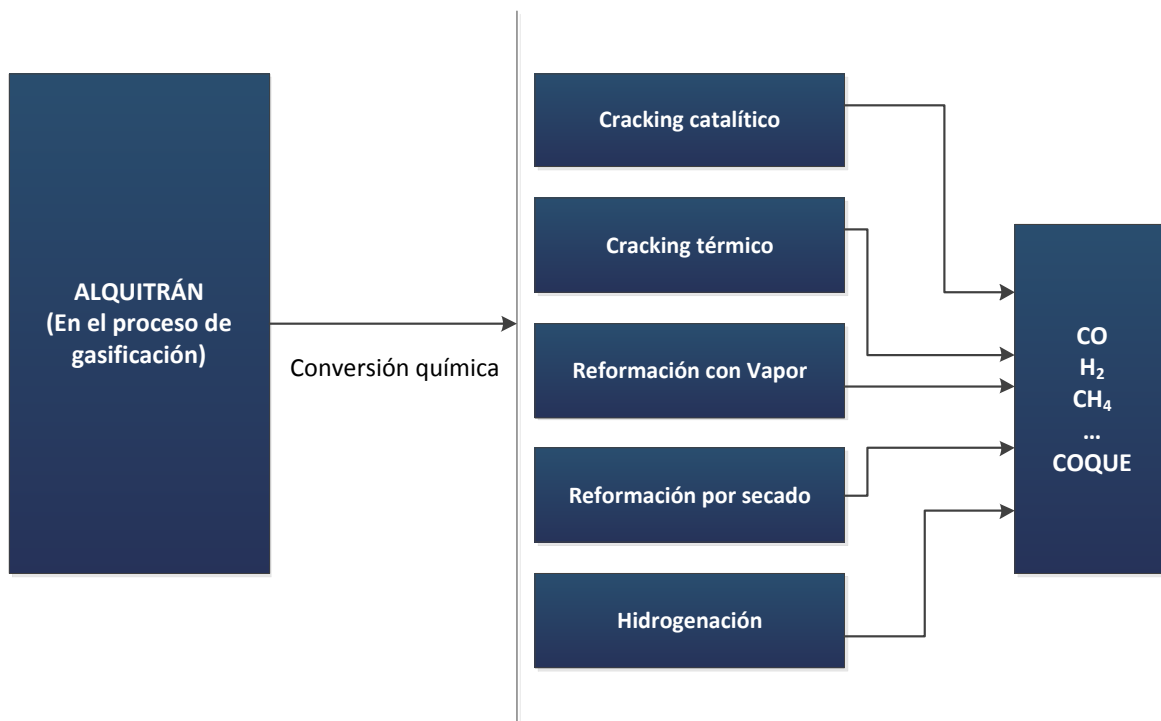




Figura 13. Métodos de conversión química del alquitrán. (Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)

4.2.2 Métodos mecánicos

Los métodos mecánicos sirven para la separación de los alquitranes en estado sólido y cualquier partícula en suspensión (cenizas) en el gas combustible, este método incluye ciclones, filtros, lavadores de gases (scrubbers) y precipitadores electrostáticos.

4.2.2.1 Depuradores o Scrubber

El principio en un Scrubber es aumentar el tamaño de las partículas para que estas sean removidas fácilmente. El mecanismo secundario consiste en atrapar las partículas en suspensión en una película líquida para que sean arrastrados y removidos por la corriente líquida. El problema de estos equipos es el agua residual, la cual es contaminante y requiere de tratamientos especiales y caros. En la Figura 14 se muestra un ejemplo del principio del Scrubber.

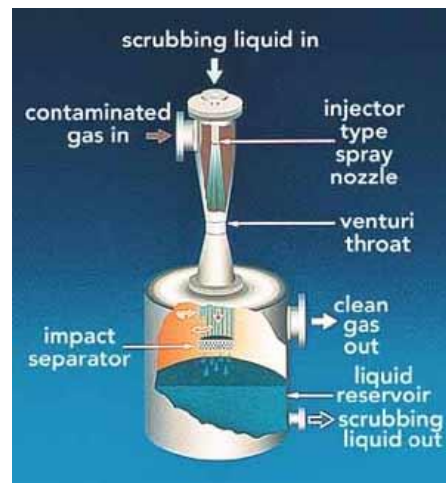


Figura 14. Ejemplo de un Scrubber (Hkvac) (López Guadarrama, 2008)



4.2.2.2 Venturi-Scrubber

Es la combinación de un Venturi con un Scrubber, el Venturi provoca un cambio en el área por la que pasa el gas, lo que provoca un aumento en la velocidad del gas, al mismo tiempo se le añade una lluvia fina de agua, la velocidad con la que atraviesa el gas provoca que el agua se rompa en gotas las cuales arrastran consigo las partículas en suspensión del gas, posteriormente el gas se hace pasar a un separador de ciclón, lo que provoca que el gas se separe del agua y con ella de las partículas y alquitranes que se encontraban en suspensión. En la Figura 15 se muestra un ejemplo de este método.

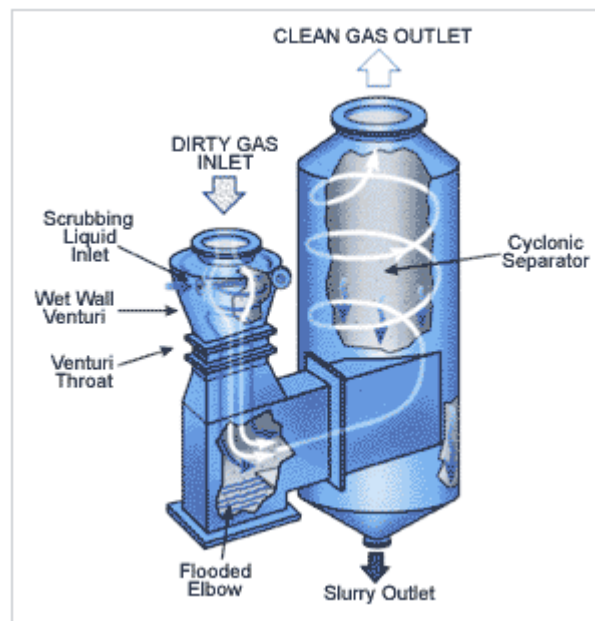


Figura 15. Sistema Venturi – Scrubber. (López Guadarrama, 2008)

4.2.2.3 Filtros de tela y otros

Corresponden a una barrera que se opone al flujo del gas, el cual pasa por una capa de material de filtro (lana, tela, etc.). La caída de presión que se genera dentro del equipo (por efecto de la suciedad acumulada) se puede solucionar mediante pulsos de presión en contra-corriente. Según el material, pueden



funcionar a altas o bajas temperaturas, pero se va encareciendo a medida que se aumenta la exigencia de operación. (PALATNIC AMPUERO, 2011)

4.2.2.4 Ciclón

Equipo que mediante la fuerza centrífuga separa el material particulado y el gas, las partículas más pesadas caen por gravedad. Un inconveniente a considerar para implementar este método radica en el hecho de que durante la separación el gas combustible baje su temperatura hasta el punto en el que los alquitranes que se encontraban en fase gaseosa condensen en las paredes del ciclón, provocando la disminución en el rendimiento de la separación y aumentando los costos y los tiempos de mantenimiento para este equipo. (PALATNIC AMPUERO, 2011)

Precipitador electrostático: Los gases pasan por un campo eléctrico hecho por electrodos, donde las partículas líquidas y los sólidos contenidos en el gas se cargan eléctricamente, luego son capturados por ánodos separándolos del gas. Los ánodos se limpian mecánicamente cada cierto tiempo, dependiendo del régimen de operación. Existen variantes de este equipo, a los cuales se les agrega humedad, mejorando la eficiencia de captura de alquitranes y material particulado. La caída de presión es menor que en los precipitadores secos y además son fáciles de corregir. Pese a ser mucho más caro que cualquiera de sus alternativas, requiere de menos potencia de ventilación y aumenta cuantiosamente la seguridad del sistema. (PALATNIC AMPUERO, 2011)

4.2.3 Métodos termoquímicos

Los métodos termoquímicos consisten en provocar la descomposición de los alquitranes rompiendo sus enlaces C-H y formando alquitranes de cadenas más cortas, coque, hidrógeno y CO.

Existen cuatro métodos de reformación del alquitrán:

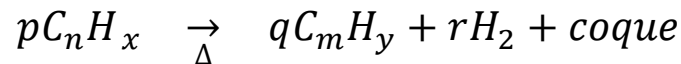
- Desintegración térmica
- Desintegración catalítica



- Reformación con vapor de agua
- Reformación seca
- Reformación carbón

4.2.3.1 Desintegración térmica

Este proceso tiene como objetivo la ruptura (cracking) de cadenas de hidrocarburos de alto peso molecular, mediante la adición de energía en forma de calor elevando el gas a altas temperaturas, lo que provoca la ruptura de los enlaces C-H y se obtiene como productos hidrógeno, hidrocarburos de cadena más corta y coque.

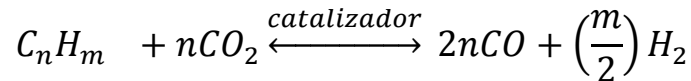
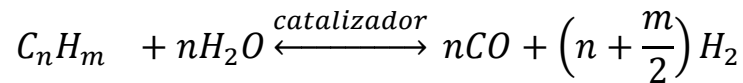


(Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)

Se debe considerar que la temperatura máxima para la descomposición de alquitranes es de 1250°C. A mayores temperaturas baja el PCI (poder calorífico inferior) del gas, ya que se comienza a combustionar el gas. (PALATNIC AMPUERO, 2011)

4.2.3.2 Desintegración catalítica

El cracking catalítico es similar al cracking térmico en donde se inyecta vapor de agua a alta temperatura, el cracking se llevaba a cabo con la ayuda de un catalizador metálico, en el cual los hidrocarburos son absorbidos de manera disociada sobre un metal, lo cual inicia la reacción conocida como deshidrogenación metálica, mientras esto sucede el agua en forma de vapor también es absorbida en la superficie del metal pero de forma disociada, hidrogenando la superficie. A una cierta temperatura los radicales ^-OH migran de la superficie metálica, dejando en la superficie CO y H₂, las reacciones que se llevan a cabo se ejemplifican de la siguiente manera: (Longoria Treviño, y otros)



Algunos ejemplos de los catalizadores usados pueden estar hechos de dolomita, de níquel o algún metal alcalino, en la tesis de Palatnic Ampuero (2011) se mencionan algunas de las características de estos catalizadores:

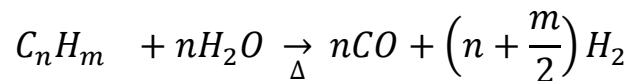
- 1) Base Níquel: Reducen el NOx y eliminan más del 99% de los alquitranes pesados. Su operación puede producir altos niveles de amoniaco y nitruro, dañinos para la salud.
- 2) Base de metales alcalinos: Carbonatos, óxidos e hidróxidos de metales alcalinos, tales como potasio, sodio y litio. Los resultados muestran que dependiendo de la biomasa utilizada es el resultado del catalizador sobre el gas producido, por lo que se recomienda hacer pruebas.
- 3) Base de Dolomita: En el tiempo se ha demostrado que tiene alta eficiencia, pero no puede transformar alquitranes pesados y tampoco puede trabajar con altas temperaturas, ya que la temperatura de fusión de la dolomita es relativamente baja.
- 4) Catalizador de metales nobles: Aún están en estudio, pero se han tenido buenos resultados con Rodio, Paladio, Platino y Radón (este último produce similares resultados que el níquel). La conversión ha sido de un 88% para el caso de Rh/CeO₂/SiO₂ a 823°K y de 97% a 873°K, este catalizador es estable, aún bajo altas concentraciones de H₂S. Su principal problema surge



cuando el área efectiva se reduce porque deja de funcionar. (PALATNIC AMPUERO, 2011)

4.2.3.3 Reformación con vapor

El principio es similar al cracking térmico pero la fuente de energía en forma de calor para la elevación de la temperatura mayor a los 800 °C proviene de la inyección de vapor de agua a alta temperatura, a su vez la presencia del agua en forma de vapor provoca la formación de CO e hidrógeno, como se muestra en la siguiente reacción:



Así como la desintegración térmica, la reformación con vapor requiere una gran cantidad de energía para la ruptura de los enlaces C-H, por lo que puede llegar a encarecer el procedimiento de gasificación, por lo que es más recomendable un cracking catalítico.

4.3. Análisis de alquitrán

El alquitrán ha sido uno de los problemas principales de la gasificación de biomasa, por lo que diversas instituciones han buscado una forma de analizar la presencia de este en el gas combustible, en la actualidad existen dos métodos de análisis principales que dependen del lugar en donde se tome la muestra a analizar: los métodos *on-line* es donde la muestra se toma continuamente a la salida del gas, por lo que se puede tener la concentración de alquitranes presentes en tiempo real en el gas combustible, los métodos *off-line* consisten principalmente en tomar una muestra del gas y recolectar los alquitranes condensándolos en una superficie fría o a través de filtros, o utilizar la absorción en donde se hace pasar el gas combustible en solventes orgánicos fríos o en algún absorbente adecuado, dado que sólo se toma una muestra del gas, este método no indica la concentración de alquitranes de forma continua, a menudo una vez que se



recolectaron los alquitranes el análisis se lleva a cabo en un cromatógrafo de gases (GC en sus siglas en inglés) o por gravimetría en donde se pesa el alquitrán recolectado después de una evaporación cuidadosa del solvente y condensando en agua. (Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)

Fernández López propone una metodología basada en el Protocolo Europeo de Alquitranes (Guideline for Sampling and Analysis of Tar and Particles in Biomass Producer Gases, 2002) la cual es la siguiente:

La recogida del agua y alquitranes presente en el gas de síntesis se realiza en una serie de 8 frascos borboteadores por absorción en isopropanol colocados en dos baños. El primero es un baño de hielo a 0 °C, donde son colocados los dos 2 primeros frascos borboteadores. El primer frasco está vacío y el segundo contiene 50 ml de isopropanol. En estos frascos se recupera la mayoría del agua, los compuestos aromáticos de alquitrán (estireno, indeno, benceno, etc.) y PAHs ligeros (Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos) como naftaleno. El segundo baño consta de 6 frascos borboteadores a -18 °C. Cinco frascos contienen de 100 a 50 ml de isopropanol, mientras que el sexto está vacío.

El flujo de gas de la muestra se obtiene con una bomba de succión y se mide con un medidor volumétrico tras el paso del gas por el último frasco. El caudal de gas de la muestra se controla con un rotámetro a valores de 0.4-0.8 LN / min, según el valor deseado. Además se coloca un filtro de algodón tras la serie de frascos borboteadores para capturar el posible escape de alquitranes. Aproximadamente 60 LN de gas seco de proceso es el volumen de muestra que se ha tomado para cada experimento realizado en la planta piloto.

Después del experimento, se recupera todo el líquido presente en los diferentes frascos borboteadores y se mezcla. Los frascos y la línea de la toma de muestras de alquitranes se lavan con isopropanol y se añade a la mezcla anterior. Las muestras se agitan para asegurar la homogeneidad y se almacenan en botellas oscuras selladas a temperaturas inferiores a 5 °C, para ser posteriormente



analizadas y siempre en periodos inferiores a dos semanas. Por lo general, alrededor de 400 a 600 g de muestra son finalmente recogidos para cada experimento.

El contenido de agua de las muestras se determina mediante el método de valoración de Karl-Fischer. Para la determinación cuantitativa de las concentraciones de los diferentes compuestos de alquitranes de la muestra se utiliza un cromatógrafo de gases, junto con un espectrómetro de masas. El CG está equipado con una columna capilar y un detector de ionización de llama. Las muestras recuperadas de los frascos borboteadores se caracterizaron con el sistema GCMS y se selecciona al Naftaleno y al Fenantreno para la calibración externa del procedimiento. El análisis cuantitativo se lleva a cabo suponiendo un factor de respuesta similar al del naftaleno para los compuestos de alquitranes de 1 y 2 anillos y un tiempo de respuesta similar al del Fenantreno para los compuestos de 3 anillos. (Fernández López, 2011)



5. GASIFICADOR (CASO DE ESTUDIO)

El caso de estudio es un gasificador de flujos paralelos descendientes (downdraft), el cual se encuentra ubicado en la planta de gasificación del Instituto de Ingeniería de la UNAM, el gasificador tiene la capacidad de generar 200-300kW de electricidad, a través de la combustión del gas producto de la gasificación de 10-40 kg/h de mezcla de biomasa, la combustión se lleva a cabo en un motor de combustión interna conectado a un generador eléctrico. En la Figura 16 se muestra la planta de gasificación.



Figura 16. Vista frontal de la planta de gasificación.



5.2. Localización

La planta de gasificación de biomasa del Instituto de Ingeniería se encuentra ubicada en el Jardín Botánico de Ciudad Universitaria de la UNAM.

La planta de gasificación es producto del Proyecto 2006-12/95-3915 UNAM, Instituto de Ingeniería, cuyo nombre es “Generación de energía eléctrica para el alumbrado de algunas calles de Ciudad Universitaria por medio de la gasificación de residuos biomásicos”.

5.3. Equipos

Los equipos principales que integran la planta de gasificación se enlistan en la Tabla 8.

Tabla 8. Equipos principales del gasificador (Barrera Galván, 2008)

TAG	EQUIPO
B-101	Molino de cuchillas
TV-101	Tolva de alimentación
RA-101	Gasificador
CO-101	Soplador de aire
CP-101	Ciclón
FA-101	Filtro de gas
TA-101	Intercambiador de calor
M-101/R	Motores de combustión interna
GE-101	Generador de electricidad

En la Figura 17 y Figura 18 se esquematiza la planta de gasificación y se indican la ubicación de los equipos principales que lo componen.

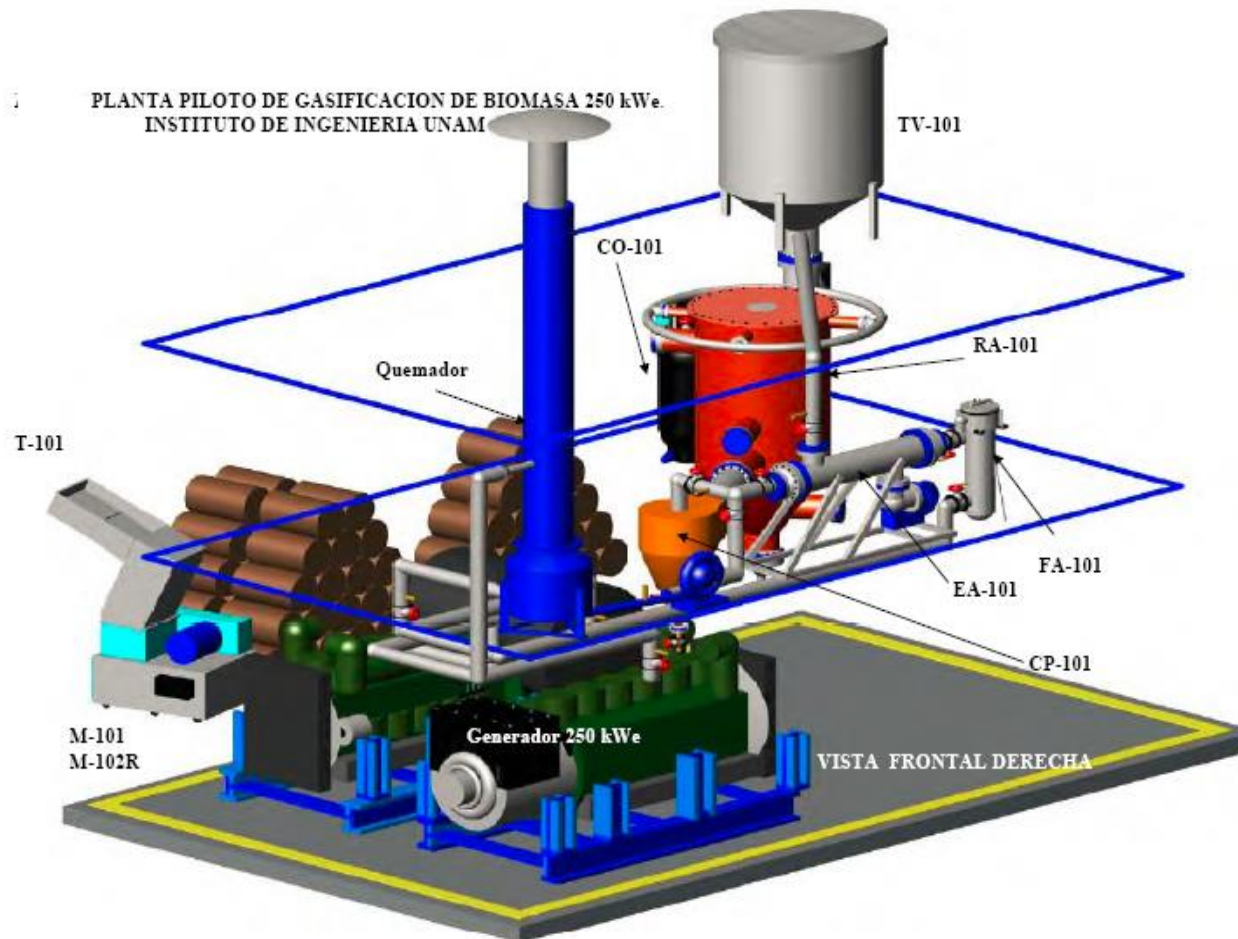


Figura 17. Planta piloto de gasificación de biomasa del Instituto de Ingeniería de la UNAM. (Barrera Galván, 2008)

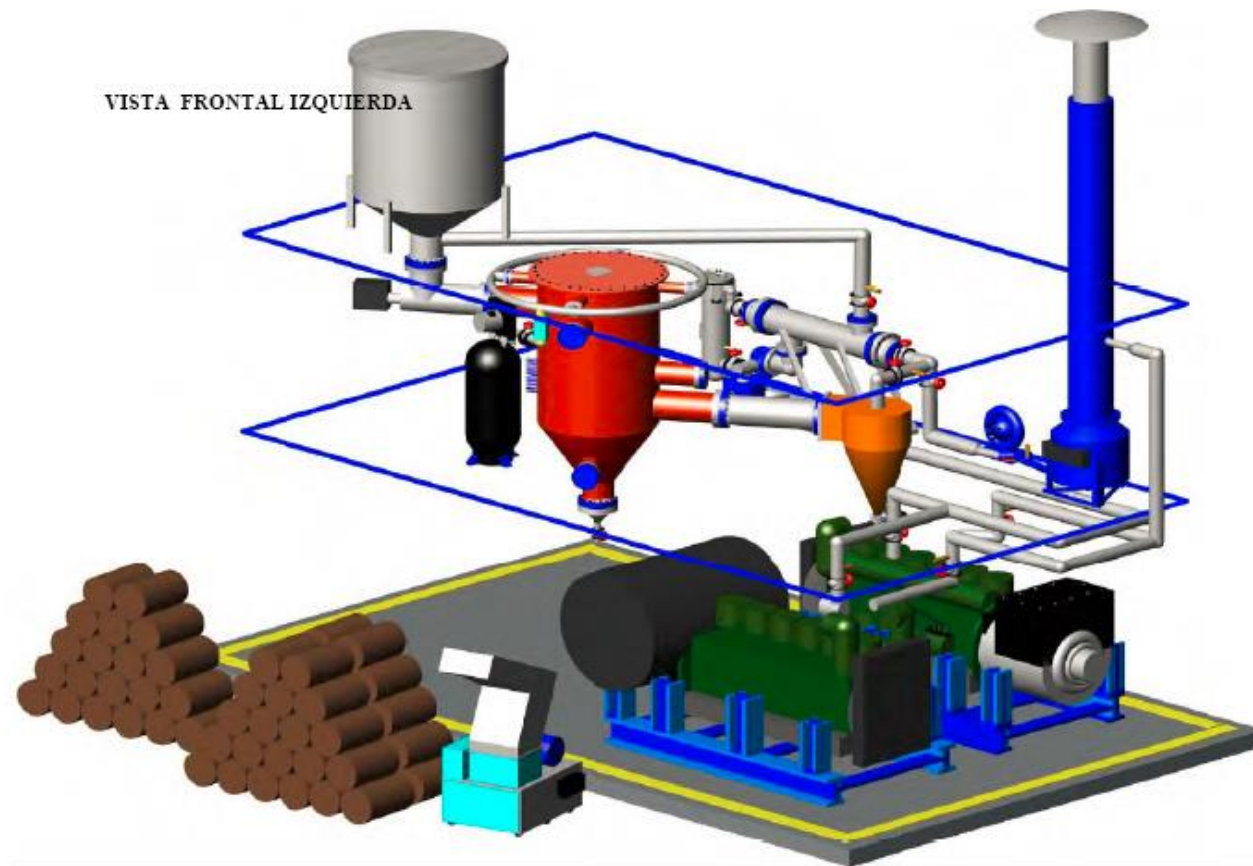


Figura 18. Vista Frontal izquierda (Barrera Galván, 2008)



5.3.2 Gasificador de Biomasa (RA-101).

El gasificador fue construido de acero A-516-70, con cuatro entradas de aire en la parte superior donde es introducido el aire, una entrada de alimentación conectada a la carcasa del tornillo sinfín, una salida de gas producto hacia el limpiador de gases, dos entradas de agente gasificante colocadas en la parte inferior, 15 orificios para termopares justo debajo de la alimentación. El gasificador tiene un diámetro de 30" y está recubierto de material refractario de alta alúmina DIDURIT 18 en su interior reduciendo el diámetro interior a 20". El lecho de biomasa está soportado por una rejilla de 14", con perforaciones de 1" a través de la cual salen las cenizas. El gasificador junto con el tornillo sin fin de alimentación de la biomasa se muestra en la Figura 19. (Barrera Galván, 2008)



Figura 19. Vista del gasificador y el tornillo sin fin.



5.3.3 Ciclón (CP-101)

El ciclón es una parte importante de la planta de gasificación, el cual integra la primera etapa de limpieza del gas de síntesis, separando las partículas suspendidas en el gas. El ciclón está construido en acero inoxidable y con lámina de acero al carbón 1010 calibre 14, se encuentra al igual que el gasificador recubierto con material refractario con espesor de 8cm, debido a las altas temperaturas del gas que salen del gasificador (superiores a los 500 °C), el volumen óptimo de gas de síntesis es 0.05 m³/s para la colección del 90% de las partículas suspendidas presentes en el gas. En la Figura 20 se muestra al ciclón junto con el gasificador. (Barrera Galván, 2008)



Figura 20. Vista del gasificador y el ciclón.

5.3.4 Intercambiador de calor

El intercambiador de calor tiene como función disminuir la temperatura de salida del gas de síntesis intercambiando el calor con el aire que precalienta a la biomasa a la entrada del gasificador. El intercambiador de calor es del tipo de tubos y coraza construido en acero inoxidable, con una constante global de transferencia de calor $U = 9.8 \text{ kcal/h}^\circ\text{Cm}^2$, longitud de 1.12 m, el fluido caliente (gas de síntesis) circula por los tubos, mientras que el fluido frío (aire) impulsado mediante un ventilador es



pasado por la coraza, la temperatura que entra al intercambiador es de aproximadamente 600°C y por diseño se espera una temperatura de 130° C a la salida, la caída de presión a través de los tubos se estima alrededor de 0.014 lb/in². En la Figura 21 se muestra el intercambiador conectado al soplador de aire y al filtro de bolsas. (Barrera Galván, 2008)

5.3.5 Filtro de bolsas

El filtro de bolsas es la segunda y última etapa de limpieza del gas de síntesis, su función es la eliminación de partículas finas, como los alquitranes, que una vez enfriado el gas de síntesis a una temperatura menor a los 200°C algunos de los alquitranes se condensan y son separados del gas en el filtro. El filtro tiene las siguientes características:

- Diseño “Over the top” el cual previene fugas del producto no filtrado.
- Construida en código ASME en acero al carbón, grado industrial.
- Tapa con Manija
- Canasta perforada y graduada longitudinalmente
- Conexión para manómetros, venteo y drenaje
- Dos válvulas de globo 2” de acero inoxidable instaladas, una en la salida y otra en la entrada de cada carcasa.
- Bolsa filtrante de nylon de 7” de diámetro y 33” de longitud (Barrera Galván, 2008)

En la Figura 21 se muestra el intercambiador conectado al soplador de aire y al filtro de bolsas.



Figura 21. Vista del filtro y el soplador de aire

5.3.6 Motor de combustión interna

Para la combustión del gas de síntesis se adaptaron dos motores a diesel, uno en operación y otro en relevo, el motor en operación acciona al generador de electricidad, en la Tabla 9 se muestran las características del motor a diesel y en las 0 y Figura 23 se muestran los motores en su estado actual.

Tabla 9. Características del motor de combustión interna. (Gamiño Calvillo, 2011)

Parámetro	Característica
Cantidad de cilindros	6
Disposición de los cilindros	En línea
Ciclo de funcionamiento	4 Tiempos
Diámetro de los cilindros	128 mm
Carrera de los émbolos	155 mm
Cilindrada total	11967 cm ³
Relación de compresión	17.25:1
Presión de compresión normal	26 bar
Presión de compresión mínima	20 bar
Presión de compresión variación máxima	4 bar
Revoluciones Ralenti	600
Revolución nominal máxima	2400
Inicio de inyección	12 ° APMS
Combustible indicado	Diesel
Sistema de inyección	Electrónico
Sentido de rotación del volante	A la derecha
Juego de válvulas de admisión	0.30 mm
Juego de válvulas de escape	0.50 mm
Par motor máximo	204 mkg _r @ 2000/min
Consumo específico	192 g/ kWh (141 g/cvh) @ 1500/min
Potencia máxima	265 kW (360 cv) @ 2300/min



Figura 22. Vista del motor de combustión interna.



Figura 23. Vista del Generador eléctrico.



5.4. Descripción del proceso

El propósito primordial del proceso de gasificación de biomasa es convertir la mayor cantidad de biomasa en gas de síntesis y posteriormente la generación de energía eléctrica a través de la combustión del gas en los motores a diesel conectados al generador eléctrico, los motores diesel han sido adaptados para trabajar con el gas.

5.4.1 Influyente

El proceso comienza con la alimentación de 10-40 kg/h de mezcla de biomasa o residuos municipales a la tolva de alimentación TV-101, a las condiciones de tamaño (virutas de madera) y humedad (10-30% HR) requeridas. El tamaño es obtenido mediante el uso de un molino de cuchillas B-101 y la deshumidificación de la madera es lograda mediante la introducción de aire seco y caliente proveniente del intercambiador de calor EA-101.

La tolva galvanizada para evitar corrosión se encuentra acondicionada con un tornillo sin fin de acero inoxidable, el cual se encarga de transportar la biomasa triturada a la boquilla de alimentación del gasificador RA-101, en donde mediante gravedad se introduce la carga de alimentación a control de flujo. Una vez introducida la carga comienzan a llevarse a cabo las reacciones de reducción, combustión y volatilización, utilizando gas LP a control de flujo como agente gasificante y alimentando aire proveniente del compresor CO-101 a 3 kPA igualmente sometido a control de flujo.

5.4.2 Efluente

Se retiran constantemente las cenizas acumuladas en la parte inferior del gasificador como subproducto de la reacción de combustión de los residuos biomásicos. Los gases producto de la gasificación están conformados principalmente de CO, CO₂, H₂, CH₄, N₂, cenizas y alquitranes y abandonan el gasificador a una temperatura de 500 a 600°C, la limpieza del gas se lleva a cabo inicialmente en un ciclón CP-101 en donde se eliminan las partículas de cenizas



arrastradas en la mezcla gaseosa, para posteriormente retirar las partículas más pequeñas con la ayuda del filtro FA-101.

Los gases libres de partículas son enfriados al pasar por el intercambiador de calor TA-101 el cual cuenta con un ventilador que le alimenta aire a contracorriente, obteniendo un gas a la salida del equipo con temperaturas menores a los 200 °C, el cual es analizado en su composición con un cromatógrafo de gases BUCK 910 con detector TCD y que utiliza gas He como acarreador. La composición del gas obtenido es comparada con una mezcla estándar cuya composición es la ideal para el funcionamiento de los motores de combustión interna M-101/R. Los motores están conectados al generador de electricidad GE-101 en donde se producen de 200-300kW.



5.5. Simulación de la planta piloto en Aspen Plus

Se implementó la simulación de la planta gasificación en Aspen Plus para la determinación de la generación de alquitranes durante la gasificación. Cabe destacar que Aspen Plus es un software especializado en la simulación de procesos físicos, químicos y unitarios.

Durante la simulación se usaron características especiales con las que cuenta Aspen Plus permitiendo usar parámetros teóricos y experimentales, se usaron las siguientes características:

- Elementos no convencionales
- Reactores
- Calculator
- Programación en Fortran

5.5.1 Elementos no convencionales

La biomasa al ser obtenida de una mezcla de desechos de madera con pasto del tipo kikuyo, dado que no existe en la base de datos de Aspen Plus un compuesto que se asemeje a la biomasa, ésta es simulada como un componente orgánico no convencional. La estimación de las propiedades físicas y químicas de la biomasa fueron calculadas por el simulador al ingresar su análisis elemental.

Adicionalmente los residuos carbonosos o también llamados “Char” al ser residuos sólidos del proceso de la gasificación se han simulado como componentes no convencionales, al igual que la biomasa, se usó el análisis elemental del Char para determinar sus propiedades físicas y químicas de éste. En la Tabla 10 se muestra el análisis elemental de la biomasa y el char.



Tabla 10. Análisis elemental de la biomasa y de los residuos carbonosos (Char) (Bain, 1992).

	BIOMASA	CHAR
C	48.13	65.894
H	6	3.064
O	44.76	27.444
N	0.1	0.281
Cenizas	0.92	3.168
Azufre	0.09	0.149
Total	100	100

5.5.2 Reactores

Para la simulación del proceso de gasificación se usaron diferentes tipos de reactores existentes en Aspen Plus, dado que en el software no existe un reactor de gasificación en específico, el proceso se dividió en diferentes reactores en donde cada uno de ellos representa una fase en el proceso de gasificación de la biomasa, en la Tabla 11 se describe cada uno de los reactores usados y el proceso que representan en el proceso.

**Tabla 11.** Reactores usados en Aspen Plus

REACTOR	DESCRIPCIÓN
RYIELD	Este reactor se usa cuando se desconocen las reacciones químicas que se llevan a cabo, pero se conocen datos de la distribución de formación de los productos de la reacción, correlaciones, formulas empíricas donde se determina la formación de cada uno de los productos.
REQUIL	Este reactor utiliza el principio de Le Châtelier de equilibrio en las reacciones químicas , donde las reacciones son del siguiente tipo: $aA + bB \longleftrightarrow cC + dD$ Donde la variable a modificar es la temperatura en la que se lleve a cabo la reacción, por lo que dependiendo de esta variable se favorecerá la reacción hacia alguno de los dos sentidos.
RSTOIC	El reactor RStoic tiene dos funciones principales: simulación de reacciones de combustión y reacciones en donde se conoce su fracción de conversión o de producción de alguno de los elementos que participan en la reacción.

5.5.3 Calculator

Una de las opciones con las que cuenta Aspen Plus es la posibilidad de definir las propiedades de una corriente (flujo total o por componente, temperatura y presión) a través de cálculos programados en códigos de Fortran o Excel sin necesidad de crear una subrutina exterior, permitiendo ingresar correlaciones o ecuaciones.



Esta programación se lleva a cabo en la sección de *Flowsheeting options* y en la subsección *Calculator*, en donde se ingresa las variables a importar y/o exportar para una o varias corrientes.

5.5.4 Programación en Fortran

Aspen Plus tiene la opción de incrementar sus capacidades de cálculo, de modelación de reacciones químicas y de procesos unitarios especiales, con subrutinas programadas y compiladas en Fortran o Excel, posibilitando ingresar principalmente a los módulos de reactores, torres de destilación y bombas, formulas empíricas, correlaciones, ecuaciones cinéticas, ecuaciones especiales de diseño y operación, basados en datos experimentales o teóricos.

Para este trabajo se realizaron dos subrutinas exteriores en Fortran y posteriormente compilados y añadidos a la simulación con el programa *Aspen Plus Simulation Engine*. En la descripción del proceso se indica las subrutinas que fueron programas, así como una descripción de su funcionamiento.

5.5.5 Descripción de proceso

El proceso de gasificación se dividió en seis secciones:

1. Alimentación.
2. Secado.
3. Desvolatilización o pirolisis.
4. Combustión.
5. Reacciones heterogéneas.
6. Gasificación.

En cada una de estas etapas se utilizaron datos experimentales, subrutinas y reacciones químicas de equilibrio y de combustión. En seguida se describe cada una de estas etapas. En la Figura 24 se muestra la simulación realizada.



5.5.5.1 Alimentación

Para definir la corriente de alimentación de biomasa, se ingresó el análisis elemental de la biomasa y del Char en la sección de *Component Attr.*, como se explicó anteriormente, debido a que ambos compuestos no existen en la base de datos de compuestos de Aspen Plus por lo que deben ser simulados como componentes no convencionales.

La corriente de biomasa que se alimenta al gasificador es de 40 kg/h, la alimentación se especificó en la sección de *Calculator* en donde se definió como variable independiente el flujo de biomasa seca y como variable dependiente el flujo de agua, que representa la humedad relativa presente en la biomasa.

Se definió que la humedad relativa en la biomasa sea de un 30% y la ecuación que se programó fue la siguiente:

$$\text{Flujo de agua} = \frac{\text{Flujo de biomasa seca} * (0.3)}{(1 - 0.3)}$$

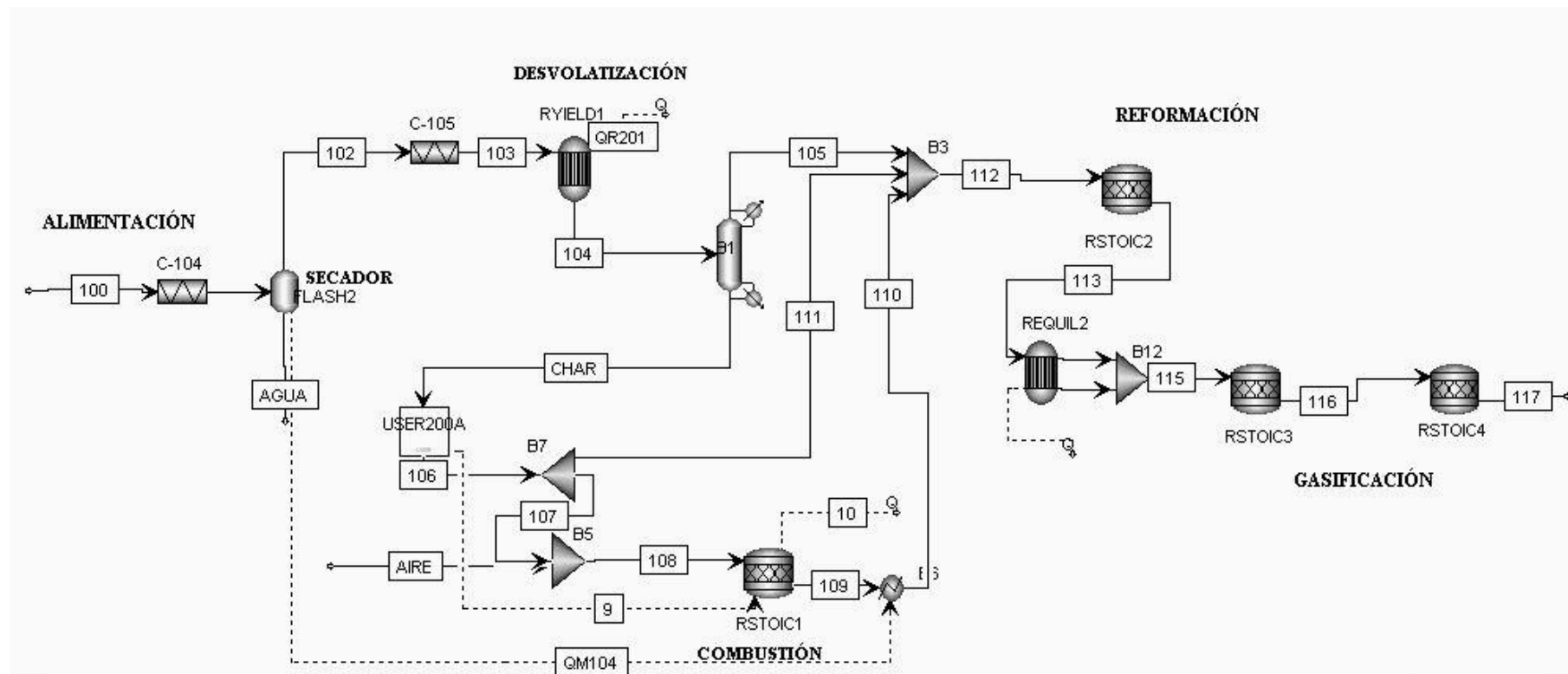


Figura 24. Simulación de la planta piloto de gasificación en Aspen Plus



5.5.5.2 Secado

En el proceso de gasificación se recomienda que el contenido de humedad relativa presente en la biomasa sea de máximo un 30%, dado que durante el secado se destina una cantidad de la energía total de la gasificación para evaporar el agua presente en la biomasa, para que esta pueda continuar al proceso de pirolisis. La humedad es un compuesto que resta energía térmica al sistema, por lo que una cantidad excesiva de humedad relativa puede poner en riesgo que la gasificación no sea auto sostenible en energía.

Para asegurar este parámetro, se añade un separador Flash, el cual obtiene la energía necesaria para llevar a cabo esta separación de la combustión del Char residual de la gasificación, creando un sistema autosuficiente en energía calorífica.

5.5.5.3 Desvolatilización o pirolisis primaria

El proceso de desvolatilización se llevó a cabo en el reactor Ryield1, en el cual se programó una subrutina en Fortran para el cálculo de la descomposición de la biomasa en H₂, CH₄, N₂, H₂O, CO₂, CO, C₂H_x, Alquitrán y Char.

Las correlaciones usadas en la programación de la desvolatilización son ecuaciones de segundo grado que representan el volumen estandarizado del compuesto por cada libra de biomasa seca (sft³/lb_{biomasa}) en función de la temperatura a la que se lleve a cabo la desvolatilización, las correlaciones tienen la siguiente forma:

$$C_{Componente} \left[\frac{sft^3}{lb_{biomasa(seca)}} \right] = a + bT + cT^2$$

En el caso especial del Char la ecuación da como resultado los kilogramos de Char producidos por cada kilogramo de biomasa alimentada al gasificador (kg_{char}/kg_{biomasa}).



En la Tabla 12 se muestran los coeficientes correspondientes a la producción de cada uno de los componentes convencionales en los que se descomponen la biomasa.

Tabla 12. Coeficientes de las correlaciones de desvolatilización. (Bain, 1992)

Compuesto	a	b	c
CO	133.46	-0.1029	2.88E-05
CO ₂	-9.5251	0.037889	-1.49E-05
CH ₄	-13.82	0.044179	-1.62E-05
C ₂ H ₄	-38.258	0.058435	-1.99E-05
C ₂ H ₆	11.114	-0.011667	3.06E-06
H ₂	17.996	-0.026448	1.89E-05
C ₂ H ₂	-4.3114	5.45E-03	-1.56E-06
Char	0.75503	-3.02E-04	-3.12E-08

5.5.5.4 Modelación matemática de la generación de alquitrán

La formación del alquitrán en la gasificación se encuentra principalmente en función de:

- La composición y las propiedades de la biomasa.
- Diseño y tipo del gasificador.
- Temperatura de operación.
- Tiempo de residencia.

El tratamiento primario de los alquitranes, el cual consiste en la modificación y control de las variables y condiciones de operación, es la forma más práctica y económica para el control de la generación de los alquitranes, en comparación del



tratamiento secundario de alquitranes, el cual implementa un sistema de limpieza del gas una vez que abandona el gasificador o por medios termoquímicos, lo cual implica un aumento de la inversión y costo de operación del gasificador.

La temperatura de la operación del gasificador una de las variables de operación más fáciles y económicas de controlar y modificar durante la operación del gasificador, por lo que una modelación matemática de la formación de los alquitranes en función de la temperatura permitirá encontrar la temperatura óptima de operación en donde la formación de alquitranes sea el mínimo, disminuyendo la necesidad de un complejo sistema de tratamiento secundario.

La importancia de modelar la generación del alquitrán en la gasificación de biomasa viene dado por el hecho de que el proceso de gasificación se lleva a cabo a altas temperaturas por arriba de los 500 °C por lo que el alquitrán en su mayoría se encuentra en fase vapor y se mezcla junto con el gas combustible, al enfriarse la mezcla gas combustible, el alquitrán comienza a condensarse y su presencia puede provocar graves daños en los motores de combustión interna que hayan sido alimentados por la mezcla.

Ante la necesidad de conocer el comportamiento de la generación de alquitranes en función de la temperatura se realizó una investigación bibliográfica de publicaciones científicas de modelos matemáticos de la generación de alquitrán, cuyo modelo haya sido validado con datos experimentales, los modelos encontrados son los siguientes:

Modelo 1 (Bain):

Cabe destacar que este modelo fue usado para en la programación realizada por el Laboratorio de Energía Nacional Renovable en Golden Colorado (Bain, 1992), obteniendo buenos resultados. Cuya composición elemental de la biomasa que



utilizo como combustible es muy similar a la que usa el gasificador del Instituto de Ingeniería como se muestra en la Tabla 13.

$$C_{Alquitran} \left[\frac{lb}{lb_{biomasa(seca)}} \right] = 0.045494 + (-1.9759 \times 10^{-5}) T_f$$

(Bain, 1992)

Donde:

T_f = Temperatura en Fahrenheit.

Tabla 13. Composición elemental de la biomasa utilizada para el modelo de Bain originalmente y la del Instituto de ingeniería de la UNAM.

COMPONENTE	BAIN	II, UNAM
C	48.13	50.88
H	6	6.04
O	44.76	41.9
N	0.1	0.17
Cenizas	0.92	0.92
Azufre	0.09	.009
Total	100	100

**Modelo 2 (Jie):**

$$C_{Alquitran} \left[\frac{kg}{kg_{biomasa(seca)}} \right] = 0.35 * \exp[-3.04 \times 10^{-3}(T - 500)] * \exp \left\{ -4.34 * \exp \left[\frac{-2.34x^4}{R * (T + 273.15)} \right] * \tau \right\}$$

(Simulation of biomass gasification in dual fluidized bed gasifier, 2012)

Donde:

$C_{Alquitran}$: Es la concentración másica del alquitrán

$kg_{biomasa(seca)}$: Son los kilogramos de biomasa seca y libre de cenizas

τ : Tiempo de residencia dentro del gasificador, [s]

T : Temperatura de operación [°C]

R : Constante de los gases [8.314472 J/mol K]

La finalidad de este trabajo es estudiar el comportamiento de ambos modelos en el simulador Aspen Plus y estimar la generación de alquitranes para que en un futuro se determine cuál de estos modelos se acerca más a un comportamiento real del gasificador.

Ambos modelos matemáticos fueron programados en la subrutina de desvolatilización para la generación de alquitranes a partir de la biomasa alimentada en el reactor *Ryield1*.

La corriente que sale del reactor *Ryield1* lleva una mezcla de gases, alquitranes, char, cenizas y biomasa remanente, por lo que, para facilidad de simulación se agregó un módulo *Sep2*, en el cual se especifica dos corrientes de salida y se indica la separación parcial o total de los componentes en cada una de las corrientes de salida.

La parte sólida es separada de la fase gaseosa, la corriente que lleva la parte sólida es dirigida hacia la sección de combustión, mientras que la parte gaseosa es dirigida hacia los siguientes reactores de reformación y gasificación.



5.5.5.5 Combustión

En la etapa anterior una de las corrientes de salida del *Sep2* contiene sólo la parte sólida producto de la desvolatilización, esta corriente es enviada a un módulo *User model*, el cual tiene como función simular la descomposición del Char en elementos convencionales (H_2 , CH_4 , N_2 , H_2O , CO_2 , CO , C_2H_x y Carbon), la subrutina que se programó se puede ver en el Anexo 2.

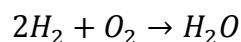
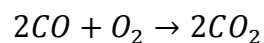
Posteriormente la corriente de Char transformado es mezclada con una corriente de aire comprimido, la corriente resultante es ingresada al reactor *Rstoic1* el cual simula la combustión de carbón, las reacciones de combustión son las siguientes:



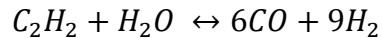
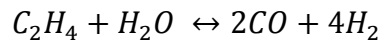
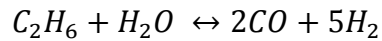
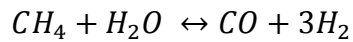
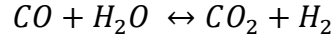
5.5.5.6 Reacciones secundarias

Para facilitar la simulación de las reacciones secundarias, esta etapa se separó en dos unidades: *Rstoic2* y *Requil1*, por lo que, la corriente que contiene la fase gaseosa del *Sep2* es mezclada con la corriente que contiene los gases generados en la combustión del Carbón, la corriente resultante de la mezcla es ingresada al reactor *Rstoic2*.

En el reactor *Rstoic2* es donde se efectúan dos de las reacciones heterogéneas, donde las reacciones químicas que se llevan a cabo son las siguientes:



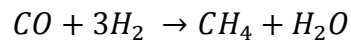
La corriente producto del reactor *Rstoic2* es alimentada al reactor *Requil1* donde se efectúa la segunda etapa de las reacciones heterogéneas, las reacciones que se llevan a cabo son las siguientes:



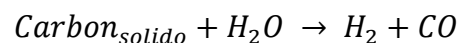
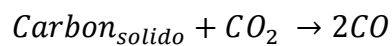
5.5.5.7 Gasificación

La gasificación es donde se lleva la transformación del carbón restante en gas de síntesis y la formación de metano a partir del monóxido de carbono y el hidrógeno, este proceso se realiza en dos etapas para facilitar su simulación, en ambas etapas se utiliza el reactor tipo *Rstoic*.

En el reactor *Rstoic3* se lleva a cabo la reacción de formación de metano, la reacción es la siguiente:



La segunda etapa de la gasificación se realiza en el reactor *Rstoic4* donde se consume el carbón sólido que no fue consumido en durante la combustión, las reacciones asignadas a este reactor fueron las siguientes:





6. RESULTADOS

El gas producto de la simulación se comparó con la composición experimental del gasificador, la cual se obtiene con un cromatógrafo de gases (SRI Instruments, modelo 1910). En la Tabla 14 se muestra la composición del gas de salida del gasificador simulado en Aspen Plus.

Tabla 14. Gas producto de la gasificación

Componente	Teórico %	Simulación %	Diferencia
CO ₂	11	10.4	0.6
CO	20	19.6	0.4
H ₂	12	9.2	2.8
CH ₄	5	3	2
N ₂	52	57.7	5.7
TOTAL	100	100	

Para la comparación de los modelos matemáticos se aplicó un análisis de sensibilidad paramétrica donde la variable es la temperatura, por lo que realizaron distintas simulaciones a diferentes temperaturas, la temperatura inicial fue de 650°C temperatura en la cual se asegura una desvolatilización casi total de la biomasa, partiendo de esta temperatura inicial se fue aumentando 50°C en cada una de las simulaciones, en la Tabla 15 se muestra los resultados de la desvolatilización/pirolisis usando el modelo matemático 1, en la Tabla 16 se muestra los resultados usando el modelo matemático 2.



Tabla 15. Resultado de desvolatilización modelo 1

	T (°C)	700	750	800	850	871
	T(°F)	1250	1382	1472	1562	1600
Componente	Unidad	Resultados modelo 1				
H2	kg/h	0.401	0.401	0.401	0.402	0.401
CO	kg/h	10.802	10.800	10.802	10.808	10.802
CO2	kg/h	5.257	5.256	5.257	5.260	5.257
H2O	kg/h	3.818	3.818	3.818	3.818	3.818
NH3	kg/h	0.032	0.032	0.032	0.032	0.032
CH4	kg/h	2.269	2.268	2.269	2.270	2.269
C2H6	kg/h	0.108	0.108	0.108	0.108	0.108
C2H4	kg/h	1.152	1.151	1.152	1.152	1.152
C2H2	kg/h	0.089	0.089	0.089	0.089	0.089
C6H6	kg/h	0.112	0.112	0.112	0.112	0.112
C10H8	kg/h	0.336	0.336	0.336	0.336	0.336



Tabla 16. Resultado de desvolatilización modelo 2

	T (°C)	650	700	750	800	850	871
	T(°F)	1202	1250	1382	1472	1562	1600
Componente	Unidad	Resultados modelo 2					
H ₂	kg/h	0.401	0.400	0.401	0.401	0.402	0.402
CO	kg/h	10.801	10.784	10.799	10.802	10.808	10.808
CO ₂	kg/h	5.257	5.250	5.256	5.257	5.260	5.260
H ₂ O	kg/h	3.818	3.818	3.818	3.818	3.818	3.818
NH ₃	kg/h	0.032	0.032	0.032	0.032	0.032	0.032
CH ₄	kg/h	2.269	2.265	2.268	2.269	2.270	2.270
C ₂ H ₆	kg/h	0.108	0.109	0.108	0.108	0.108	0.108
C ₂ H ₄	kg/h	1.152	1.150	1.151	1.152	1.152	1.152
C ₂ H ₂	kg/h	0.089	0.088	0.089	0.089	0.089	0.089
C ₆ H ₆	kg/h	0.112	0.112	0.112	0.112	0.112	0.112
C ₁₀ H ₈	kg/h	0.336	0.337	0.336	0.336	0.336	0.336



6.2. Análisis de resultados

En la Figura 25 y Figura 26 se muestra cómo varía la producción de benceno y naftaleno dependiendo de la temperatura, ambos compuestos representan el alquitrán generado durante la gasificación.

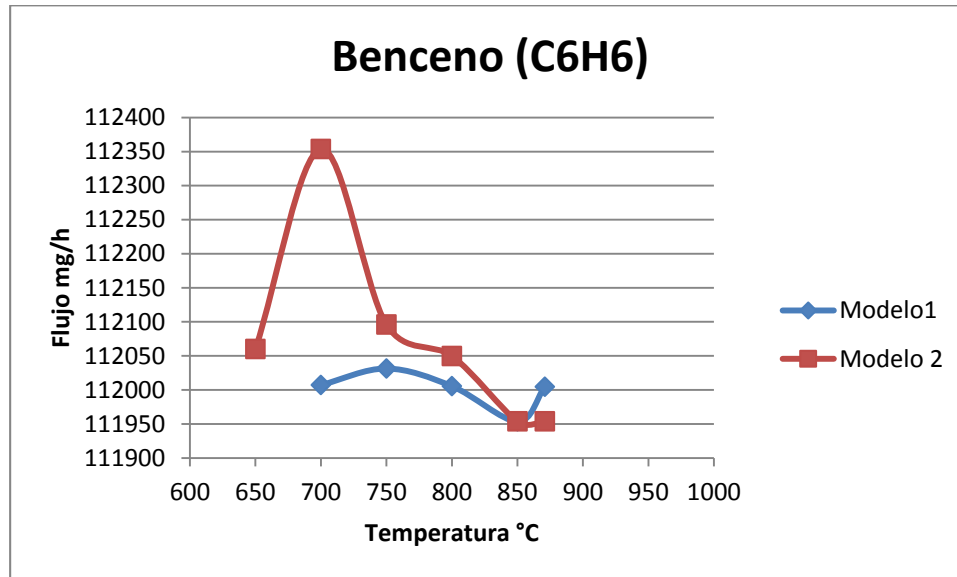


Figura 25. Generación de benceno

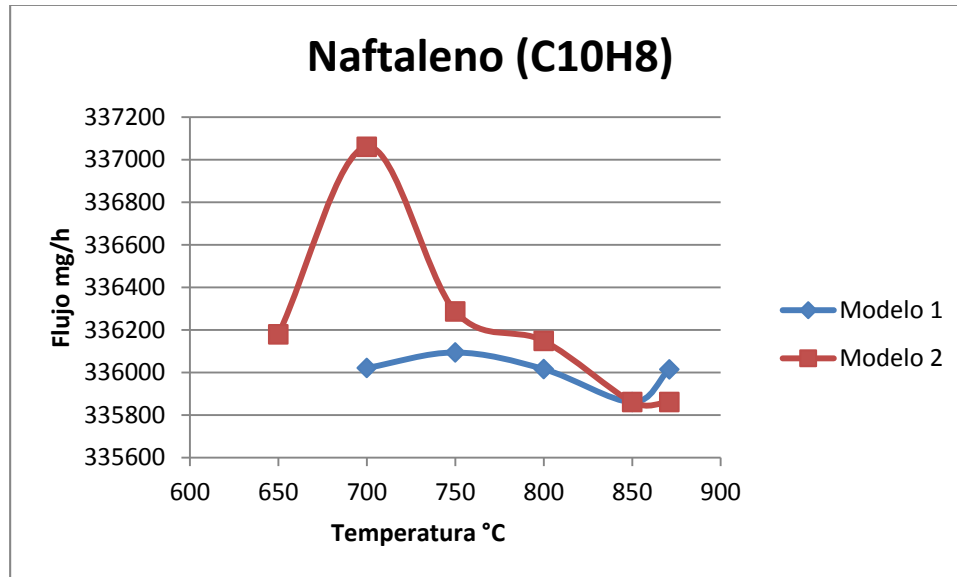
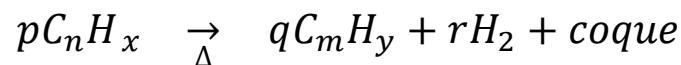


Figura 26. Generación de Naftaleno

Ambas graficas muestran como el modelo 1 y el modelo 2 tienen tendencias diferentes, donde el modelo 1 tiene una tendencia casi lineal, donde la máxima producción de alquitranes se encuentra a los 750 °C y una disminución de la producción a temperaturas mayores a ésta, pero a partir de los 850 °C comienza un aumento en la producción. El modelo 2 indica que a los 700 °C se llega a la máxima producción de alquitranes y a temperaturas mayores de esta comienza una disminución de la producción de los alquitranes.

Con el modelo 1, al indicar que a temperaturas mayores a 850 °C aumenta la producción de alquitranes, se llega a una incongruencia, dado que el gas de síntesis a altas temperaturas se favorece el cracking térmico, donde se provoca la ruptura de los enlaces C-H y se obtiene como productos hidrógeno, hidrocarburos de cadena más corta y coque.





(Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification, 2008)

Mientras que el modelo 2 muestra una tendencia a la disminución de la producción de alquitranes a temperaturas mayores a 700°C, lo que representa el comienzo del cracking térmico de los alquitranes.



7. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se cumplieron con los objetivos planteados y se obtuvieron las siguientes conclusiones.

Basados en los resultados obtenidos de la simulación que se desarrolló de la planta piloto de gasificación de biomasa del Instituto de Ingeniería, se puede observar que la simulación tiene una alta aproximación a los datos experimentales de la composición del gas de síntesis que se obtienen durante la operación de la planta, como se muestra en la Tabla 14

Estos resultados permiten concluir que la simulación ha sido exitosamente desarrollada permitiendo realizar la validación de los modelos matemáticos para la producción de alquitranes. Los modelos que se programaron fueron los siguientes:

Modelo 1 (Bain):

$$C_{Alquitran} \left[\frac{lb}{lb_{biomasa(seca)}} \right] = 0.045494 + (-1.9759 \times 10^{-5}) T_f$$

(Bain, 1992)

Modelo 2 (Jie):

$$C_{Alquitran} \left[\frac{kg}{kg_{biomasa(seca)}} \right] = 0.35 * \exp[-3.04 \times 10^{-3} (T - 500)] * \exp \left\{ -4.34 * \exp \left[\frac{-2.34x^4}{R * (T + 273.15)} \right] * \tau \right\}$$

(Simulation of biomass gasification in dual fluidized bed gasifier, 2012)

Adicionalmente se definió una metodología para realizar la simulación del proceso de gasificación en Aspen Plus, permitiendo tener una flexibilidad y adaptabilidad a cualquier tipo de gasificador, tamaño de planta y tipo de biomasa que se use como materia prima.



La simulación que se realizó en el presente trabajo permite la adición y modificación de cualquier modelo matemático no solo de la generación de alquitranes sino también de cualquiera de los componentes del gas de síntesis, en cualquier etapa de la planta de gasificación, ya sea, desvolatilización-pirolisis, combustión, reformación y gasificación. Facilitando para estudios futuros la comparación y validación de los modelos, con una mayor aproximación a los datos experimentales.

El principal objetivo de la simulación del gasificador es poder observar como varia la composición de gas de síntesis variando los parámetros de operación y de la biomasa que se alimente al gasificador, uno de los parámetros a estudiar es la temperatura con la que se opere el gasificador, la simulación permite un análisis de sensibilidad de este parámetro y observar como varia la composición no solo de los alquitranes sino de los componentes generales del gas de síntesis.

Adiciónamele otro de los parámetros a estudiar es el tipo de biomasa que se alimenta al gasificador. En la simulación es posible variar la composición elemental de la biomasa, lo que le da una mayor flexibilidad al simulador para trabajar con cualquier tipo de biomasa, siempre y cuando se realice un estudio previo de su composición elemental y de la humedad que contenga, con ello es posible conocer la composición aproximada del gas de síntesis que se obtiene como producto de la gasificación.

Se debe recordar además que la humedad relativa de la biomasa es uno de los parámetros importantes a controlar durante la operación de la planta de gasificación, ya que una humedad mayor al 30% del peso total de la biomasa pondrá en riesgo a que la operación no sea térmicamente autosustentable. Por lo que si la humedad relativa de la biomasa excede el 30% se debe hacer un pretratamiento de secado antes de que ingrese al gasificador.

Por otra parte, se concluye que el modelo 1 propuesto por Bain no considera en el craqueo térmico la producción de alquitranes dado que a temperaturas mayores de



850°C muestra una tendencia al aumento de la producción de alquitranes, sin embargo este modelo fue usado para en la programación realizada por el Laboratorio de Energía Nacional Renovable en Golden Colorado (Bain, 1992), obteniendo buenos resultados. En contraste el modelo 2 propuesto por Jie indica que a temperaturas mayores de 700 °C va decreciendo la producción de alquitranes, lo que indica que el modelo toma en cuenta el craqueo térmico, adicionalmente el modelo 2 muestra que a la 700°C se obtiene la máxima producción de alquitranes en concordancia a otras referencias en la literatura. Dado lo anterior se recomienda la utilización del modelo 2 para la estimación de la generación de alquitranes en un gasificador de flujo descendente que opera con biomasa.

Un trabajo a futuro es la realizar un ajuste de parámetros con métodos de mínimos cuadrados no lineales para mejorar la predicción de los modelos, con ello obtener una mayor aproximación al comportamiento real.

Actualmente la planta de gasificación del Instituto de Ingeniería no cuenta con un sistema de análisis para la producción de alquitranes, se espera que en un futuro se implemente una metodología para la toma de muestra y análisis de la producción de alquitranes como lo propone Fernández López basada en el Protocolo Europeo de Alquitranes (Guideline for Sampling and Analysis of Tar and Particles in Biomass Producer Gases, 2002), para poder validar cualquier modelo de la generación de alquitranes (Fernández López, 2011).



8. BIBLIOGRAFÍA

Bain, Richard L. 1992. *Material and energy balance for methanol from biomass using biomass gasifiers.* 1992.

Barrera Galván, Mario Alberto. 2008. *Instrumentación de una planta piloto de gasificación de residuos biomásicos de 250 kwe.* México : UNAM, 2008.

de Andrés Almeida, Juan Manuel. 2010. *Gasificación de lodos de estaciones depuradoras de aguas residuales urbanas.* Madrid : UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID, 2010.

Dresser-Rand. 2012. Dresser-Rand. [En línea] 2012. [Citado el: 18 de 06 de 2012.] http://www.guascorpower.com/bioenergia_sintesis.php.

Fernández López, Javier. 2011. *Eliminación de alquitranes en el proceso de gasificación de biomasa en lecho fluidizado.* [ed.] Tesis de nivel licenciatura. Zaragoza : Universidad de Zaragoza, Centro Politécnico Superior, 2011.

Gamiño Calvillo , Romulo Benjamin. 2005. *Estudio de la viabilidad de cogeneración con biomasa en la comunidad indígena de San Juan Parangaricutiro, Michoacan.* México : s.n., 2005. Tesis de Maestría en Maestría en Ingeniería (Área energética).

Gamiño Calvillo, Rómulo Benjamín. 2011. *Estudio del proceso de combustión del gas de síntesis proveniente de desecho biomásicos en motores diesel previamente adaptados para la producción de energía eléctrica.* D.F. : UNAM, 2011.

Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo. **Estrada, Carlos Augusto y Zapata Meneses, Alberto. 2004.** 25, Colombia : Scientia Et Technica, 2004, Redalyc, Vol. X, págs. 155-159.



Guideline for Sampling and Analysis of Tar and Particles in Biomass Producer Gases. Paasen, S.V.B. van, Kie, J.H.A y Neeft, J.P.A. 2002. ECN-C-02-090, 2002.

Hkvac. H.K.Industries. [En línea] [Citado el: 24 de 06 de 2012.] <http://www.hkvac.co.in/scrubber.htm>.

IEA. 2011. International Energy Agency. [En línea] 2011. [Citado el: 18 de Marzo de 2013.] <http://www.iea.org>.

Longoria Treviño, Pablo A. y Martínez Ramos, Ricardo. *Energías Alternativas.* s.l. : Génesis. Vol. II.

López Guadarrama, Dulce Maria. 2008. *Estudio calorimetrico y del cromatograma base de la mezcla patron del gas e sisntesis generada en un gasificador que opera con biomasa.* México : s.n., 2008. Tesis de licenciatura en Ingeniería química.

Masera Cerutti, Omar R., y otros. 2005. *La bioenergía en México.* Distrito Federal : Mundi-Prensa, 2005.

Network, Biomass Users. 2002. *Manuales sobre energía renovable: Biomasa.* San Jose : BUN-CA, 2002. pág. 42.

Opex-Energy. 2011. [En línea] 2011. [Citado el: 20 de Marzo de 2013.] <http://www.opex-energy.com/biomasa/index.html>.

PALATNIC AMPUERO, MARIA ESMERALDA . 2011. *DISEÑO Y DESARROLLO DE PEQUEÑAS UNIDADES DE GASIFICACIÓN DE MADERA PARA APLICACIONES DE GENERACIÓN DE ENERGÍA TÉRMICA Y COGENERACIÓN A BAJA ESCALA.* [ed.] UNIVERSIDAD DE CHILE. s.l. : Tesis de Licenciatura , 2011.

Pérez Bayer, Juan Fernando. 2009. *Gasificación de biomasa. Estudios teórico-experimentales en lecho fijo equicorriente.* Colombia : Universidad de Antioquia, 2009.



Primera planta de gasificación en México (análisis de riesgo). . **Carlos M. Nava S., Alejandro Rodríguez V., Arturo Palacio P., Javier E. Aguillón M., Octavio P. Reyes G. 2009.** [ed.] MEMORIAS DEL XV CONGRESO INTERNACIONAL ANUAL DE LA SOMIM. México D.F : s.n., 2009.

SENER. 2006. Secretaria de Energía. [En línea] 2006. [Citado el: 18 de Marzo de 2013.] http://www.energia.gob.mx/res/PE_y_DT/pe/FolletoERenMex-SENER-GTZ_ISBN.pdf.

Simulation of biomass gasification in dual fluidized bed gasifier. **Jie, He, y otros. 2012.** s.l. : Springer-Verlag, 19 de January de 2012.

Steam reforming of tar from a biomass gasification process over Ni/olivine catalyst using toluene as a model compound. **Swierczynski, D, y otros. 2007.** Becquerel, France : ScienceDirect, 29 de January de 2007.

Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification. **Li, Chunshan y Suzuki, Kenzi. 2008.** Japan : EcoTapia Science Institute, 7 de January de 2008, Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification.

Val Gento, Verónica. 2011. *Planta de cogeneración mediante gasificación de biomasa residual*. Madrid : s.n., 2011.



9. ANEXOS

9.1.1 Anexo 1

9.1.1.1 Modelo 1 (Bain)

Código de programación en Fortran para la simulación de la desvolatilización de la biomasa para el Modelo 1.

```

C
  SUBROUTINE  BATYD4  (SIN  ,SOUT  ,
NSUBS,IDXSUB,ITYPE,NINT,INT,NREAL,
  1          REAL,IDS,NPO,NBOPST,NIW,IW,NW,W)
C
C
C  MODULE TITLE: WOOD DEVOLATILIZATION AND
PYROLYSIS
C
C  VARIABLES IN ARGUMENT LIST
C
C  VAR I/O TYPE DIM DESCRIPTION
C
C  SIN I/O R      INLET MATERIAL STREAM VECTOR
C  SOUT O R      OUTLET MATERIAL STREAM
VECTOR
C  NSUBS I I      NUMBER OF SUBSTREAMS
C  IDXSUB I I     NSUBS SUBSTREAM INDEX VECTOR
C  ITYPE I I     NSUBS SUBSTREAM TYPE VECTOR
C  NINT I I      LENGTH OF INTEGER VECTOR
C  INT I/O I     NINT INTEGER VECTOR
C  NREAL I I     LENGTH OF REAL VECTOR
C  REAL I R     NREAL REAL ARRAY
C  REAL(1) I R   GASIFIER      OUTLET
TEMPERATURE
C  REAL(2) I R   GASIFIER      OUTLET
PRESSURE
C  REAL(3) I R   PERCENT OF NITROGEN IN
WOOD GOING TO THE CHAR
C  REAL(4) I R   PERCENT OF SULFUR IN
WOOD GOING TO THE CHAR
C  REAL(5) I R   H/C MASS RATIO IN THE
CHAR
C  REAL(6) I R   PERCENT OF OXYGEN IN
WOOD GOING TO THE CHAR

```

```

C  IDS I I 2,NCC ID VECTOR
C  NPO I I      NUMBER OF PHYSICAL PROPERTY
OPTIONS
C  NBOPST I I 3,NPO PHYSICAL PROPERTY OPTION
SET POINTERS
C  NIW I I      LENGTH OF THE INTEGER WORK
VECTOR
C  IW I I NIW  INTEGER WORK VECTOR
C  NW I I      LENGTH OF THE REAL WORK VECTOR
C  W I R  NW  REAL WORK VECTOR
C
C
C  IMPORTANT INTERNAL VARIABLES
C
C  VAR TYPE DIM DESCRIPTION
C
C  IDX I 99 COMPONENT INDEX VECTOR
C  X R 99 COMPONENT MOLAR FRACTION
VECTOR
C  L1 I POINTER TO MIXED SUBSTREAM
C  L2 I POINTER TO CISOLID SUBSTREAM
C  L3 I POINTER TO NC SUBSTREAM
C
C *****
C          ERROR CONDITIONS:
C *****
C
C  NUMBER LEVELTYPE
C
C  86000 0          TERMINAL
C
C  IMPROPER STREAM STRUCTURE.
C  STREAM STRUCTURE MUST BE MIXED + CISOLID + NC,
IN THAT ORDER.
C
C  86001 1          SEVERE
C
C  ULTIMATE ANALYSIS IS MISSING FOR ONE OR MORE
OF THESE COMPONENTS:
C  WOOD, ASH, CHAR.
C
C  86002 2          ERROR
C
C  ULTANAL MUST NOT CONTAIN CHLORINE. MASS
BALANCE WILL BE IN ERROR.
C
C  86003 3          WARNING

```



```

C
C      PREDICTED GASEOUS CARBON YIELD EXCEEDS
CARBON AVAILABLE
C      GASEOUS CARBON COMPOUND YIELD ADJUSTED BY A
FACTOR OF
C      AND CHAR CARBON SET TO ZERO
C
C      86004 1          SEVERE
C
C      PREDICTED HYDROGEN YIELD EXCEEDS
HYDROGEN AVAILABLE
C      STEAM TO WOOD RATIO MUST BE INCREASED
C
C *****
C      SUBROUTINES AND FUNCTIONS
C *****
C
C      NAME - DMS_LOCATI
C      TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C      DESC - LOCATES THE INTEGER INDEX OF A SPECIFIC
BEAD AND
C      TO READ THE BEAD INTO CORE, IF NECESSARY
C      CALL - LBI = DMS_LOCATI(NBX)
C      INPUT:
C      NBX      INT      BEAD NUMBER
C      OUTPUT:
C      DMS_LOCATI      INT      LOCATION      OF
BEAD IN INTEGER PLEX
C
C      NAME - SHS_LOCATS
C      TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C      DESC - LOCATES A STREAM BEAD, GIVEN ITS BEAD
NUMBER
C      AND FINDS THE BEAD NUMBER AND LOCATION OF
THE
C      DESCRIPTOR BEAD
C      CALL - CALL SHS_LOCATS(NB,LVI,LVR,LD,NBD)
C      INPUT:
C      NB          INT      STREAM      BEAD
NUMBER
C      OUTPUT:
C      LVI      INT      INTEGER PLEX LOCATION
OF STREAM BEAD
C      LVR      INT      REAL PLEX LOCATION OF
THE REAL PORTION
C      OF THE BEAD
C      LD          INT      INTEGER      PLEX
LOCATION OF THE DESCRIPTOR
C      BEAD.
C      NBD      INT      DESCRIPTOR BEAD NUMBER
C
C      NAME - SHS_APSCPY
C      TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C      DESC - STREAM COPIER
C      CALL - CALL SHS_APSCPY(LD,LVR1,LVR2)
C      INPUT:
C      LD          INT      STARTING PLEX
LOCATION FOR STREAM
C      CLASS DESCRIPTOR BEAD.
C      LVR1      INT      STARTING PLEX LOCATION
FOR REAL PART
C      OF THE STREAM TO BE COPIED
C      LVR2      INT      STARTING PLEX LOCATION
FOR REAL PART
C      OF STREAM WHERE 1ST STREAM IS
COPIED
C
C      NAME - DMS_UCONV1
C      TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C      DESC - CONVERTS VALUE TO SI UNITS
C      CALL - CALL DMS_UNCONV1(LUNCD,RVALN)
C      INPUT:
C      LUNCD      INT      UNIT CODE = TABLE ROW #
(OBTAINED FROM TABLE IN RCUNITS.DAT FILE
IN )
C      RVALN      REAL      VALUE TO BE CONVERTED
C      OUTPUT:
C      RVALN      REAL      CONVERTED VALUE
C
C      NAME - SHS_CPACK
C      TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C      DESC - PACKS A STREAM VECTOR
C      CALL - CALL SHS_CPACK(SUBSTR, NCP, IDX, X, FLOW)
C      INPUT:
C      SUBSTR      REAL      VECTOR OF COMPONENT
FLOWS
C      OUTPUT:
C      NCP          INT      NUMBER OF COMPONENTS
PRESENT
C      IDX          INT      COMPONENT      INDEX
VECTOR DIM = NCP
C      X            REAL      PACKED MOLE FRACTION
DIM = NCP
C      FLOW         REAL      TOTAL SUBSTREAM FLOW
(KG-MOL/S)
C

```



```

C NAME - PPUTL_AVEMW
C TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C DESC - AVERAGE SUBSTREAM MOLECULAR WEIGHT
C CALL - AMW = PPUTL_AVEMW(N, IDX, X)
C INPUT:
C N INT NUMBER OF COMPONENTS
C IDX INT COMPONENT INDEX ARRAY
  DIM = N
C X REAL MOLE FRACTION ARRAY
  DIM = N
C OUTPUT:
C AMW REAL AVERAGE MOLECULAR
WEIGHT
C
C NAME - SHS_TOTENT
C TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C DESC - CALCULATES TOTAL STREAM ENTHALPY
C CALL - SHS_TOTENT(SIN, NSUBS, IDXSUB, ITYPE, TENTH)
C INPUT:
C SIN REAL STREAM VECTOR DIM = 1
C NSUBS INT NUMBER OF SUBSTREAMS
C IDXSUB INT INDEX VECTOR OF
SUBSTREAM DIM=NSUBS
C ITYPE INT SUBSTREAM TYPE VECTOR
DIM=NSUBS
C OUTPUT:
C TENTH REAL TOTAL STREAM ENTHALPY
C
C NAME - FLSH_FLASH
C TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C DESC - GENERAL PURPOSE FLASH INTERFACE
ROUTINE FROM ASPEN PLUS
C CALL - CALL FLSH_FLASH(SVEC, NSUBS, IDXSUB,
ITYPE, NBOPST,
C KODE, NPKODE, KPHASE, MAXIT, TOL,
C SPEC1, SPEC2, GUESS, LMSG, LPMSG,
C JRES, KRESLT, RETN, IRETN, LCFLAG)
C INPUT:
C SVEC REAL STREAM VECTOR
C NSUBS INT NUMBER OF SUBSTREAMS
C IDXSUB INT LOCATION OF SUBSTREAMS
DIM=NSUBS
C ITYPE INT SS TYPE VECTOR
DIM=NSUBS
C NBOPST INT PHYSICAL PROPERTY SET
ARRAY DIM=6
C KODE INT FLASH OPTION CODE
C NPKODE INT MAXIMUM PHASES IN MIXED
SS
C KPHASE INT PHASE WHEN NPKODE=1
C MAXIT INT MAXIMUM NUMBER OF
ITERATIONS
C TOL REAL CONVERGENCE
TOLERANCE
C SPEC1 REAL 1ST SPECIFIED VARIABLE
C SPEC2 REAL 2ND SPECIFIED VARIABLE
C GUESS REAL INITIAL GUESS
C LMSG INT LOCAL DIAGNOSTIC
MESSAGE LEVEL
C LPMSG INT LOCAL PHYSICAL
PROPERTY DIAGNOSTIC LVL
C JRES INT SIMULATION RESTART FLAG
C KRESLT INT RESULT CALCULATION FLAG
C RETN REAL REAL RETENTION VECTOR
C IRETN INT INTEGER RETENTION
VECTOR
C OUTPUT:
C SVEC REAL STREAM VECTOR
C RETN REAL REAL RETENTION VECTOR
C IRETN INT INTEGER RETENTION
VECTOR
C LCFLAG INT LOCAL CONVERGENCE
FLAG
C
C NAME - DMS_IRRCHK
C TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C DESC - ERROR CHECKING ROUTINE
C CALL - IRPT = DMS_IRRCHK(IPROG, ISEV, ICODE,
LDIAG, LTERM,
C IESCAL, IPHYS, NHEAD)
C INPUT:
C IPROG INT CALLING SUBROUTINE
NAME DIM=2
C ISEV INT ERROR SEVERITY
C ICODE INT ERROR NUMBER
C LDIAG INT DIAGNOSTIC LEVEL
C LTERM INT TERMINAL DIAGNOSTIC
LEVEL
C IESCALINT ERROR ESCALATION LEVEL
C IPHYS INT TYPE OF S/R (PHYS PROP
OR NOT)
C NHEAD INT AMOUNT OF HEADER INFO
PRINTED
C OUTPUT:
C IPRT INT PRINTING INFO (0=DON'T
PRINT; 1=PRINT)
C

```



```

C NAME - DMS_ERROR
C TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C DESC - COUNTS THE TYPES OF ERRORS FOUND AND
TERMINATES
C     ASPEN IF THE ERRORS EXCEED A MAXIMUM
C CALL - DMS_ERROR(ISEV,ICLASS)
C INPUT:
C     ISEV     INT     SEVERITY CODE
C     ICLASS  INT     ERROR CLASS CODE
C
C NAME - DMS_IFCMNC
C TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C DESC - PLEX OFFSET UTILITY
C CALL - IOFF = DMS_IFCMNC(CNAME)
C INPUTS:
C     CNAME - COMPONENT DATA NAME
C OUTPUT:
C     INTEGER OR REAL DATA OFFSET. REAL DATA AT
B(IOFF+1).
C     INTEGER DATA AT IB(IOFF+1).
C
C NAME - DMS_KCCIDC (CONV COMPS) AND KNCIDC (NC
COMPS)
C TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C DESC - DETERMINES COMP SEQ NUMBER IN
DMS_NCOMPS
C     CALL - J = DMS_KCCIDC(CIDC) OR J =
DMS_KCCIDC(CIDNC)
C INPUT:
C     CIDC     CHAR     CONVENTIONAL COMP ID
C     CIDNC    CHAR     NC COMP ID
C OUTPUT:
C     J        INT     COMPONENT INDEX
C *****
C USING THIS MODEL:
C
C     WOOD, CHAR, AND ASH ARE EXPECTED TO HAVE
ULTIMATE ANALYSES
C     ANY CHLORINE IN THE ULTIMATE ANALYSES WILL
C     BE IGNORED, RESULTING IN A MASS BALANCE ERROR.
C     THE ASSUMED STREAM STRUCTURE IS MIXED +
CISOLID + NC
C
C     THE NC COMPONENTS WOOD, ASH AND CHAR MUST
BE ENTERED
C INTO THE COMPONENT SECTION OF THE SIMULATION
IN THAT
C ORDER: WOOD, ASH CHAR

```

```

C
C     THE SIMULATION CALLING THIS ROUTINE MUST USE
ENGLISH
C     UNITS (I.E., F) FOR TEMPERATURE AS THE YIELD
EQUATION
C IS BASED ON FAHRENHEIT.
C
C *****
C *
C *     THE COMPONENTS LISTED BELOW ARE REQUIRED.
*
C *     ALL OTHERS ARE CONSIDERED INERT.
*
C *
C *     NON-CONVEN  CONVEN
C *     WOOD      CO
C *     ASH      H2
C *     CHAR      N2
C *     SULFUR
C *     CONVEN    NH3
C *     CARBON    H2O
C *     TAR (C10H8) H2S
C *     C2H2      NH3
C *     C2H4      C2H6
C *     C6H6
C *****
C
C *****
C     DECLARATIONS & COMMONS
C *****
C
C ***** REAL VARIABLES/FUNCTIONS*****
C (DESCRIPTIONS OF FUNCTIONS ABOVE)
C     IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C     REAL*8 PPUTL_AVEMW
C
C *****
C     VARIABLES/FUNCTIONS*****
C (DESCRIPTIONS OF FUNCTIONS ABOVE)
C     INTEGER DMS_LOCATI
C     INTEGER DMS_KCCIDC
C     INTEGER DMS_KNCIDC
C     INTEGER LULT, LSUL, LPRX, LGEN
C     INTEGER DMS_IFCMNC
C
C ***** # INCLUDE STATEMENTS
*****

```




```

C THESE ARE ASPEN PLUS COMMON BLOCKS
C USED BY VARIOUS UTILITIES WITHIN THE SUBROUTINE
C
#include "ppexec_user.cmn"
C STORES RUN CONTROL FLAGS
#include "dms_ncomp.cmn"
C NUMBERS OF COMPONENTS AND LENGTHS OF
COMPONENT-RELATED
C STREAM SEGMENTS
#include "dms_rglob.cmn"
C CONTAINS REAL, GLOBAL SPECIFICATIONS SUCH AS THE
MISSING
C CODE FOR REAL NUMBERS, RGLOB_RMISS
#include "dms_plex.cmn"
C IN-CORE STORAGE AREA FOR THE PLEX. STORES RUN-
TIME INFO.
C CONSISTS OF INTEGER, IB(1), AND REAL B(1) ARRAYS
C EQUIVALENCED TO EACH OTHER.
C
C ***** ARRAY SPECIFICATIONS *****
      DIMENSION   SIN(1),   SOUT(1),   IDXSUB(NSUBS),
      ITYPE(NSUBS),
      1   INT(NINT), REAL(NREAL), NBOPST(3,NPO),
      2   IW(NIW), W(NW), IDS(2,12)
      DIMENSION RETN(337),IRETN(6)
      DIMENSION IPROG(2)
      DIMENSION IDX(99),X(99)
      DIMENSION
      XH2(3),XCO(3),XCO2(3),XCH4(3),XC2H2(3),XC2H4(3),
      1   XC2H6(3),XCHAR(3),XTAR(2),XDGAS(3)
      DIMENSION B(1)
      DIMENSION PLXANT (9)
C
C ***** EQUIVALENCE STATEMENTS *****
      EQUIVALENCE (RMISS, USER_RUMISS)
      EQUIVALENCE (IMISS, USER_IUMISS)
C USER_RUMISS IS A REAL VARIABLE FOR A MISSING
CODE
C USER_IUMISS IS AN INTEGER VARIABLE FOR A MISSING
CODE.
      EQUIVALENCE (IB(1), B(1))
C IB AND B ARE THE ARRAYS FOR STORING INFO IN THE
PLEX.
C
C
C *****
C          DATA STATEMENTS

```

```

C *****
C THE FOLLOWING DATA ARE USED TO COMPUTE THE
YIELD OF EACH COMPONENT
C AND THE TOTAL AMOUNT OF GAS, XDGAS,; AS WELL AS
THE AMOUNT OF CHAR
C AND TAR BASED ON AN EQUATION WITH THE FORM OF:
C (A + B*T + C*T^2)*(DRY GAS FLOW)
C XDGAS, XCHAR, AND XTAR USE (A + B*T + C*T^2) BUT
ARE IN DIFFERENT UNITS
C XDGAS IS IN UNITS OF SCF/LB OF MAF WOOD
C XCHAR AND XTAR ARE IN UNITS OF LB/LB OF DRY WOOD
C ALL OTHERS ARE MOL% OF DRY GAS FOR THE
CORRELATION (A + B*T + C*T^2)
C THIS WILL BE TAKEN INTO ACCOUNT IN THE LATER
CALCULATIONS
C THE DATA STATEMENTS BELOW CONTAIN A, B, AND C IN
ORDER
C IN THE CORRELATION, T IS IN FAHRENHEIT
C
C THE CORRELATION WAS A REGRESSION(USING A
POLYNOMIAL FUNCTION)
C OF PILOT PLANT DATA FROM BATTELLE COLUMBUS
LABORATORIES. THIS
C METHOD, THE DATA, AND AN EXPLANATION CAN BE
FOUND IN: BAIN, R.
C (JANUARY 14, 1992) "MATERIAL AND ENERGY BALANCE
FOR METHANOL FROM
C BIOMASS USING BIOMASS GASIFIERS". EXPERIMENTAL
RUNS WERE FOR
C VARIOUS TYPES OF WOOD (APPENDIX 7 CONTAINS
EXPERIMENTAL DATA).
C APPENDIX 8 CONTAINS RESULTS OF THE REGRESSION.
THE ORIGINAL
C PILOT PLANT DATA IS REFERENCED IN BAIN (1992) BUT
CAN BE FOUND IN:
C FELDMANN, H.F., PAISLEY, M.A., APPELBAUM, H.R.,
TAYLOR, D.R. (MAY 1988)
C "CONVERSION OF FOREST RESIDUES TO A METHANE-
RICH GAS IN A HIGH-THROUGHPUT
C GASIFIER" PNL 6570. DE 012138. THE TEMPERATURE
RANGE OF THE DATA
C IS 1280-1857F AND THE PRESSURE RANGE IS 2.4-14.4
PSIG.
C THE CORRELATION WAS DEVELOPED USING ALL OF THE
DATA SETS.
C ADDITIONALLY, THERE IS A SPREADSHEET CONTAINING
THE DATA AND GRAPHS
C FOR EACH COMPONENT.
C
C
      DATA XDGAS / 2.8993D+01, -4.3325D-02, 2.0966D-05 /
      2, XCO / 133.46, -0.10290, 2.8792D-5 /

```



```
4, XCO2 / -9.5251, 0.037889, -1.4927D-5 /
6, XCH4/ -13.82, 0.044179, -1.6167D-5 /
8, XC2H4/ -38.258, 0.058435, -1.9868D-5 /
1, XC2H6/ 11.114, -0.011667, 3.064D-6 /
3, XH2 / 17.996, -0.026448, 1.8930D-5 /
9, XC2H2 / -4.3114, 5.4499D-3, -1.561D-6 /
5, XCHAR/ 0.75503, -3.0212D-4, -3.1178D-8 /
7, XTAR/ 0.045494, -1.9759D-5 /

C
C CHECK FOR REPORT PASS
C
  IF (USER_IPASS .EQ. 4) RETURN
C
C CHECK FOR IMPROPER STREAM STRUCTURE
C
  IF (NSUBS.NE.3) GOTO 820
  IF (ITYPE(1).NE.1 .OR. ITYPE(2).NE.2 .OR. ITYPE(3).NE.3)
GOTO 820
C
C *****
C DETERMINE LOCATION OF AND ACCESS COMPONENT
DATA
C *****
C
C INITIALIZE VARIABLES AND POINTERS
C
C INITIALIZE ATTRIBUTE POINTERS
C IULTCH - POINTER TO ULTIMATE ANALYSIS OF CHAR
C IULTWD - POINTER TO ULTIMATE ANALYSIS OF WOOD
C IPRXWD - POINTER TO PROXIMATE ANALYSIS OF WOOD
C IPRXCH - POINTER TO PROXIMATE ANALYSIS OF CHAR
C
  IULTCH = 0
  IPRXWD = 0
  IPRXCH = 0
  IULTWD = 0
C
C
C ***** FIND COMPONENT INDEX NUMBERS IN
DMS_NCOMP *****
C
C CONVENTIONAL COMPONENTS
C REPLACED NSQNCC AND NSQCC CALLS WITH KNCIDC
AND KCCIDC FUNCTIONS,
C RESPECTIVELY 6/28/99
C
  NTAR = DMS_KCCIDC('C10H8')
  NC6H6 = DMS_KCCIDC('C6H6')
  NCARBN = DMS_KCCIDC('CARBON')
  NH2S = DMS_KCCIDC('H2S')
  NH2O = DMS_KCCIDC('H2O')
  NNH3 = DMS_KCCIDC('NH3')
  NCO = DMS_KCCIDC('CO')
  NCO2 = DMS_KCCIDC('CO2')
  NH2 = DMS_KCCIDC('H2')
  NO2 = DMS_KCCIDC('O2')
  NC2H6 = DMS_KCCIDC('C2H6')
  NC2H4 = DMS_KCCIDC('C2H4')
  NC2H2 = DMS_KCCIDC('C2H2')
  NCH4 = DMS_KCCIDC('CH4')
  NS = DMS_KCCIDC('SULFUR')
  NN2 = DMS_KCCIDC('N2')
C NON-CONVENTIONAL COMPONENTS
  NWOOD = DMS_KNCIDC('WOOD')
  NASH = DMS_KNCIDC('ASH')
  NCHAR = DMS_KNCIDC('CHAR')
C
C *****DETERMINE MOLECULAR AND ATOMIC
WEIGHTS *****
C
C DETERMINE PLEX OFFSET FOR MW
C
  LMW = DMS_IFCMNC('MW')
C LMW IS THE OFFSET IN THE PLEX FOR THE MW OF NON-
CONVENTIONAL
C COMPONENTS
C
C RETRIEVE MW'S OF CONVENTIONAL COMPONENTS
FROM THE PLEX VIA
C MW = B(MW OFFSET + COMPONENT INDEX)
C CONVERT MOLECULAR WEIGHTS FOR HYDROGEN,
NITROGEN,
C AND OXYGEN TO ATOMIC WEIGHTS.
C
  CMW = B(LMW+NCARBN)
  H2MW = B(LMW+NH2)
  HMW = H2MW/2.0
  XN2MW = B(LMW+NN2)
  XNMW = XN2MW/2.0
  SMW = B(LMW+NS)
  O2MW = B(LMW+NO2)
  OMW = O2MW/2.0
```



```
H2OMW = B(LMW+NH2O)
TARMW = B(LMW+NTAR)
COMW = B(LMW+NCO)
CO2MW = B(LMW+NCO2)
CH4MW = B(LMW+NCH4)
      C6H6MW = B(LMW+NC6H6)
C
C ***** FIND LOCATION OF COMPONENT ATTRIBUTES
*****
C
DO 150 I=1,NSUBS
  ILOC = ITYPE(I)
  NCT = NCOMP_NCC
  IF (ILOC .EQ. 3) NCT = NCOMP_NNCC
  GOTO (120,130,140), ILOC

C MIXED SUBSTREAM
120 CONTINUE
  L1 = IDXSUB(I) - 1
  GOTO 150

C CISOLID SUBSTREAM
130 CONTINUE
  L2 = IDXSUB(I) - 1
  GOTO 150

C NC SUBSTREAM
140 CONTINUE
  L3 = IDXSUB(I) - 1

C
C IATLST IS THE INDEX OF THE LAST STREAM ATTRIBUTE
C EACH STREAM VECTOR CONTAINS THE FLOW OF EACH
COMPONENT
C (NCT) AND 8 ATTRIBUTES.
C
      IATLST = IDXSUB(I) + NCT + 8

C
C NEW OFF-SETS BASED ON INFO FROM M. JARVIS OF
ASPENTECH
C VLP 6/22/99
C
C SET NC COMPONENT ATTRIBUTE VECTORS INTO SIN
C
C LENGTHS OF COMPONENT ATTRIBUTES
  LULT = 7
  LPRX = 4
  LSUL = 3

      LGEN = 20
C
C ORDER OF ATTRIBUTES: GENERAL, ULTIMATE, SULFUR,
PROXIMATE
C ASH IS THE ONLY COMPONENT WITH GENERAL
ANALYSIS
C CHAR IS 3RD COMPONENT: SKIP OVER 2 SETS OF
ULTIMATE, PROXIMATE, SULFUR
C AND GENERAL
C
      IULTCH= IATLST + 2*LULT + 2*LPRX + 2*LSUL + LGEN
      ISLFCH= IULTCH + LULT
      IPRXCH= ISLFCH + LSUL

C
C WOOD IS 1ST COMPONENT
      IULTWD= IATLST
      ISLFWD = IULTWD + LULT

C FIXED INDEX IPRXWD BY PLS 3/14/00
      IPRXWD= ISLFWD + LSUL

C
C ASH IS 2ND COMPONENT
      IGENAS = IATLST + LULT + LPRX + LSUL
      IULTAS = IGENAS + LGEN
      ISLFAS = IULTAS + LULT
      IPRXAS = ISLFAS + LSUL

C END OF NEW LINES ADDED BY VLP AND M. JARVIS 6/22/99
C
150 CONTINUE

C
      CHKSUM = IULTCH
      WRITE(USER_NHSTRY,*)'RMISS= ',RMISS
      IF (CHKSUM.LT.RMISS) GOTO 170
      ISEV=1
      IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86001,USER_LMSG,IMISS,0,0,2)
+ .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,160)
160 FORMAT(6X,'ULTIMATE ANALYSIS IS MISSING FOR
ONE OR MORE OF '
& 'THESE COMPONENTS:'/9X'WOOD, CHAR, ASH.')
```



```

IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86002,USER_LMSG,USER_IMISS,
0,0,2)
+ .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,180)
180 FORMAT(6X,'ULTANAL MUST NOT CONTAIN CHLORINE.
MASS BALANCE '
& 'WILL BE IN ERROR.')
```

C

```
190 CONTINUE
```

C

C

C *****

C DETERMINATION OF INLET AND FLOWRATES

C *****

C COPY INLET STREAM INTO OUTLET STREAM

C

C LOCATE BLOCK BEAD

```
LPROC = DMS_LOCATI(2)
LBSMB = DMS_LOCATI(IB(LPROC+3))
LBLK = IB(LBSMB+5)
```

C LOCATE STREAM BEADS

```
NBSIN = IB(LBLK + IB(LBLK+17))
NBSOUT = IB(LBLK + IB(LBLK+19))
CALL SHS_LOCATS(NBSIN,LV11,LVR1,LD,NBD)
CALL SHS_LOCATS(NBSOUT,LVI2,LVR2,LD,NBD)
```

C COPY THE STREAM

```
CALL SHS_APSCPY(LD,LVR1,LVR2)
```

C

C SET OUTLET TEMPERATURE AND PRESSURE (IN SI UNITS)

C

```
TOUTF= REAL(1)
```

C TOUTF IS THE OUTLET TEMPERATURE IN FAHRENHEIT

```
TOUT = REAL(1)
POUT = REAL(2)
CALL DMS_UCONV1(22,TOUT)
CALL DMS_UCONV1(20,POUT)
```

C DMS_UNCONV1 CONVERTS THE UNITS TO SI

C

C SET OUTLET PRESSURE BASED ON A PRESSURE DROP (I.E., POUT IS NEGATIVE)

```
IF (POUT .LE. 0.0) POUT=SIN(NCOMP_NNCC+3)+POUT
```

C

```
TOTAL = SIN(L3 + NWOOD)
```

C TOTAL IS THE TOTAL FLOWRATE OF WOOD ENTERING THE GASIFIER

C

C GET MOISTURE CONTENT OF WOOD AND DRY WEIGHT OF WOOD.

C

```
WATER = SIN(IPRXWD+1)*TOTAL/100.
BDW = TOTAL - WATER
```

C BDW - BONE DRY WOOD

```
H2O = WATER /H2OMW
TMULT = BDW/100.
```

C TMULT IS THE FRACTION OF BONE DRY WOOD.

C

C SIMULATION PROGRESS CHECKING WRITE STATEMENTS

```
write(USER_NHSTRY,992) total,water,(sin(iultwd+i),i=1,7)
+ ,cmw,hmw, xnmw,smw,omw
```

```
992 format(/,' wood flow=',g12.5, ' moisture=',g12.5,
1 ' ash %=' ,g12.5,/, ' carb%=' ,g12.5,
2 ' hyd%=' ,g12.5, ' nitr%=' , g12.5,
3 /,' cl%=' ,g12.5, ' sulf%=' ,g12.5,
4 ' oxygen%=' ,g12.5,/, ' cmw=' ,g12.5,
5 ' hmw=' ,g12.5, ' xnmw=' ,g12.5,
6 /,' smw=' ,g12.5, ' omw=' ,g12.5,)
```

C

C GET TOTAL FLOWS OF INDIVIDUAL ELEMENTS INTO THE GASIFIER

C

```
TASH = SIN(IULTWD+1) * TMULT
TCARB = SIN(IULTWD+2) * TMULT / CMW
THYD = SIN(IULTWD+3) * TMULT / HMW
TRNIT = SIN(IULTWD+4) * TMULT / XNMW
TSULF = SIN(IULTWD+6) * TMULT / SMW
TOXY = SIN(IULTWD+7) * TMULT / OMW
```

C

C SIMULATION CHECKING WRITE STATEMENTS

```
WRITE(USER_NHSTRY,999)
TASH,TCARB,THYD,TRNIT,TSULF,TOXY
```

```
999 FORMAT(/,' WRITE: WOOD ELEMENTS',/
1 ' MOLES OF ATOMS',/, ' ASH ',G12.5,' CARBON ',G12.5,
2 ' HYDROGEN ',G12.5,/, ' NITROGEN ',G12.5,' SULFUR ',
3 G12.5,' OXYGEN ',G12.5)
```

C

C

C *****

C *

C YIELD CALCULATIONS



```
C
*****
*
C
C YIELD OF HYDROCARBONS BASED ON A MOISTURE AND
ASH FREE BASIS
C DGAS AND GAS COMPONENTS IN SCF (59 F, 1 ATM)
C CHAR AND TAR IN LB
C
  ZMAF = BDW - TASH
C ZMAF - MOISTURE AND ASH FREE WOOD (KG/SEC)
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'ZMAF = ',ZMAF
  ZLBMFAF = ZMAF*2.20462*3600
C ZLBMFAF - MOISTURE AND ASH FREE WOOD (LB/HR)
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'ZLBMFAF = ',ZLBMFAF
  ZLBBDW = BDW * 2.20462 *3600
C ZLBBDW - BONE DRY WOOD (LB/HR)
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'ZLBBDW = ',ZLBBDW
C
  T2 = TOUTF**2
  T1 = TOUTF
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'TOUT = ',TOUT
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'T1 = ',T1
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'T2 = ',T2
C
C CALCULATE YIELDS BASED ON DRY, ASH-FREE GAS,
DGAS (SCF)
  DGAS = (XDGAS(1) + T1*XDGAS(2) + T2*XDGAS(3)) *
ZLBMFAF
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'DGAS IN SCF = ',DGAS
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'MAF IN LB = ',ZLBMFAF
C
C CALCULATE YIELDS OF INDIVIDUAL COMPONENTS
BASED ON:
C COMPONENT = (A + B*T1 + C*T**2)*DGAS/100
C TO GIVE SCF OF EACH COMPONENT; CHAR AND TAR ARE
A LITTLE DIFFERENT
C SEE NOTE AND CALCULATION BELOW
C A,B, AND C WERE PROVIDED EARLIER IN THE DATA
STATEMENTS
C T MUST BE IN FAHRENHEIT
C
  H2 = (XH2(1) + T1*XH2(2) + T2*XH2(3)) * DGAS/100
  write(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: bdw= ',bdw,' h2= ',h2,' DGAS= ',DGAS
  CO = (XCO(1) + T1*XCO(2) + T2*XCO(3)) * DGAS/100
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: CO(scf)=',CO
  CO2 = (XCO2(1) + T1*XCO2(2) + T2*XCO2(3)) * DGAS/100
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: CO2(scf)=',CO2
  CH4 = (XCH4(1) + T1*XCH4(2) + T2*XCH4(3)) * DGAS/100
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: CH4(scf)=',CH4
  C2H2 = (XC2H2(1) + T1*XC2H2(2) + T2*XC2H2(3)) *
DGAS/100
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: C2H2(scf)=',C2H2
  C2H4 = (XC2H4(1) + T1*XC2H4(2) + T2*XC2H4(3)) *
DGAS/100
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: C2H4(scf)=',C2H4
  C2H6 = (XC2H6(1) + T1*XC2H6(2) + T2*XC2H6(3)) *
DGAS/100
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: C2H6(scf)=',C2H6
C CHAR AND TAR ARE CALCULATED IN TERMS OF LBS
  CHAR = (XCHAR(1) + T1*XCHAR(2) + T2*XCHAR(3)) *
ZLBBDW
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'WRITE: CHAR (LB) = ',CHAR
  TAR = (XTAR(1) + T1*XTAR(2)) * ZLBBDW
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: TAR(LB)=',TAR
C ASSUME THAT 25% OF TAR YIELD IS BENZENE
  C6H6 = 0.25*TAR
  TAR = 0.75*TAR
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: TAR(LB)=',TAR
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: C6H6(LB)=',C6H6
C
C CONVERT PRODUCT GAS FLOWS IN SCF AND TAR AND
CHAR IN LB
C TO MOLAR BASIS
C
  H2MOL = H2 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwh= ',HMW
+ ', h2mol= ',h2mol
  COMOL = CO / 379.4630 / 2.20462 / 3600
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwCO= ',COMW
+ ', COmol= ',COmol
  CO2MOL = CO2 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwCO2 = ',CO2MW
+ ', CO2mol= ',CO2mol
  CH4MOL = CH4 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
  write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwCH4 = ',CH4MW
+ ', CH4mol= ',CH4mol
  C2H2MOL = C2H2 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
  C2H4MOL = C2H4 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
  C2H6MOL = C2H6 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
  C6H6MOL = C6H6 / C6H6MW / 2.20462 / 3600
  TARMOL = TAR/TARMW/2.20462/3600
```



```

write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwTAR = ',TARMW
+   ', TARmol= ',TARmol
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwC6H6 = ',C6H6MW
+   ', C6H6mol= ',C6H6mol
if (h2mol .lt. 0.d0) h2mol = 0.d0
if (h2mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: H2MOL = 0 (407) '
if (comol .lt. 0.d0) comol = 0.d0
if (comol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: COMOL = 0 (409) '
if (co2mol .lt. 0.d0) co2mol = 0.d0
if (co2mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: CO2MOL = 0 (411) '
if (ch4mol .lt. 0.d0) ch4mol = 0.d0
if (ch4mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: CH4MOL = 0 (413) '
if (c2h4mol .lt. 0.d0) c2h4mol = 0.d0
if (c2h4mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: CH24MOL = 0 (415) '
if (c2h2mol .lt. 0.d0) c2h2mol = 0.d0
if (c2h2mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: C2H2MOL = 0 (415) '
if (c2h6mol .lt. 0.d0) c2h6mol = 0.d0
if (c2h6mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: C2H6MOL = 0 (417) '
      if (C6H6mol .lt. 0.d0) C6H6mol = 0.d0
if (C6H6mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: C6H6MOL = 0 (416) '
      if (TARmol .lt. 0.d0) TARmol = 0.d0
if (TARmol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: TARMOL = 0 (421) '
WRITE(USER_NHSTRY,998)
+           H2MOL,COMOL,CO2MOL,CH4MOL,C2H4MOL,
C2H6MOL,TARMOL, C6H6MOL
998 FORMAT(/,' GASIF. PRODUCTS',/
1  ' MOLES ',/, ' H2 ',G12.5,' CO ',G12.5,
2  ' CO2 ',G12.5,/, ' CH4 ',G12.5,' C2H4 ',
3  ' G12.5,' C2H6 ',G12.5,/,
4  ' TAR ',G12.5,' C6H6 ',G12.5)
C
C
C
C
C *****

```

```

C           ELEMENTAL BALANCES
C *****
C
C DETERMINE THE AMOUNT OF STEAM FED TO GASIFIER
      STM = SIN(L1 + NH2O)
      WRITE(USER_NHSTRY,*) 'STEAM FED TO GASIFIER = ',
STM
C
C CALCULATE THE TOTAL AMOUNT OF WATER IN
GASIFIER
C (WATER IN WOOD (H2O - CALC EARLIER) + WATER AS
STEAM (STM))
      H2OTOT = H2O + STM
C
C *****
C           CARBON BALANCE
C *****
C
C The carbon balance determines the amount of carbon left in
the char (CCARB)
C from the total carbon in (TCARB) minus the gaseous carbon
(GCARB) based on
C the yields of all carbon-containing gases.
C
C GCARB - GASEOUS CARBON FROM THE
GASIFIER(KMOL/HR)
C TCARB - TOTAL CARBON IN THE WOOD INTO THE
GASIFIER (KMOL/HR)
C CCARB - CHAR CARBON (KMOL/HR)
C
C CCARB = TCARB - GCARB
C
      GCARB = COMOL + CO2MOL + CH4MOL +
2.D0*(C2H4MOL+C2H6MOL) +
&           10.D0*TARMOL + 2.D0*(C2H2MOL) +
6.D0*(C6H6MOL)
      CCARB = TCARB - GCARB
C
C WRITE OUT CARBON BALANCE VALUES
C
      WRITE(USER_NHSTRY,996) TCARB,GCARB,CCARB
996 FORMAT(/,' TOTAL CARBON= ',G12.5,/, ' GASEOUS
CARBON= ',G12.5,
&           /,' CHAR CARBON= ',G12.5)
C
C CHECK FOR MASS IMBALANCE FOR CARBON
C
C If the amount of carbon produced based on the yield functions
C is greater than that available in the feed, then an adjustment

```



C factor, CFACT, is calculated and the amount of char carbon is set

C to zero. The yield of each carbon component is modified downwards

C by CFACT and a warning (86003) is generated in the history file.

C

```
IF ( CCARB .LE. 0.D0) THEN
```

```
  CFACT = TCARB/GCARB
```

```
  CCARB = 0.D0
```

```
  ISEV=3
```

```
  IF
```

```
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86003,USER_LMSG,USER_IMISS,0,0,2)
```

```
  + .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,162) CFACT
```

```
162  FORMAT(6X,'PREDICTED GASEOUS CARBON YIELD EXCEEDS CARBON '
```

```
  & 'AVAILABLE ',/,
```

```
  & 6X,' GASEOUS CARBON COMPOUND YIELD ADJUSTED BY A FACTOR OF ',
```

```
  & G12.5,' AND CHAR CARBON SET TO ZERO')
```

C

C ADJUST MOLAR FLOWS TO CORRECT MASS IMBALANCE

C

```
163  COMOL = CFACT * COMOL
```

```
  CO2MOL = CFACT * CO2MOL
```

```
  CH4MOL = CFACT * CH4MOL
```

```
  C2H4MOL = CFACT * C2H4MOL
```

```
  C2H6MOL = CFACT * C2H6MOL
```

C ***Following line added (W.AMOS)

```
  C2H2MOL = CFACT * C2H2MOL
```

```
  TARMOL = CFACT * TARMOL
```

```
  C6H6 = CFACT * C6H6MOL
```

```
  ENDIF
```

C

```
C ***** OXYGEN BALANCE *****
```

C

C First, the total oxygen available (OAVAIL) is determined from all sources:

C inlet stream, steam, and oxygen in the wood. The amount of oxygen from

C the wood that ends up in the char (COXY) is based on REAL(6). Next, the

C amount of oxygen required (OREQD) is determined based on the oxygen needed

C for all of the gaseous components (i.e., CO and CO2) and char.

C

C OAVAIL IS THE TOTAL OXYGEN MOLES AVAILABLE FROM ALL SOURCES = INLET

C STREAM (L1 - MIXED COMPONENT O2) + OXYGEN IN WOOD (TOXY - VARIABLE GIVEN

C EARLER) + OXYGEN IN THE STEAM/WATER (H2OTOT - CALC EARLIER = H2O [MOISTURE

C IN THE WOOD] + STM [STEAM TO GASIFIER])

C

```
OAVAIL = 2.D0*SIN(L1 + NO2) + TOXY + H2OTOT
```

C

C REAL(6) IS MOL% OF O IN WOOD RETAINED IN CHAR

C

```
COXY = TOXY * (REAL(6)/100.D0)
```

```
OREQD = COMOL + 2.D0*CO2MOL + COXY
```

C

```
WRITE(USER_NHSTRY,993)
```

```
COMOL,CO2MOL,COXY,OAVAIL,OREQD
```

```
993 FORMAT(/,' COMOL = ',G12.5,' CO2MOL = ',G12.5,' COXY = ',G12.5,
```

```
& /,' OAVAIL = ',G12.5,' OREQD = ',G12.5,/) )
```

C

C If the amount of oxygen required is greater than that in the wood

C (i.e., OREQD > TOXY), then steam is decomposed (to hydrogen and oxygen)

C to meet the oxygen demand (STMDEC) and the total amount of steam is reduced

C by this amount (H2OTOT = H2OTOT - STMDEC). If there is insufficient steam

C to meet the demand, then an error message is written to the history file

C asking for more steam. Finally, if there is an excess of oxygen (which is

C the case if OREQD < TOXY), then the excess oxygen is calculated (OXY = TOXY

C - OREQD) and added to the existing char oxygen (COXY = COXY + OXY).

C

```
IF (OREQD .GT. TOXY) THEN
```

```
  STMDEC = (OREQD - TOXY)
```

```
  H2OTOT = H2OTOT - STMDEC
```

```
  IF (H2OTOT .LT. 0) THEN
```

```
    WRITE(USER_NHSTRY,*) 'NEED MORE STEAM FOR ELEMENTAL BALANCE'
```

```
  ENDIF
```

```
  WRITE (USER_NHSTRY,994) STMDEC
```

```
994  FORMAT(/,' STEAM DECOMPOSITION = ',G12.5,' MOLES',/)
```

```
  OXY = 0
```

```
ELSE
```



```

OXY = TOXY - OREQD
ENDIF
C
      IF (OXY .GT. 0) THEN
        WRITE(USER_NHSTRY,*)
          +      'MOLES OF ADDITIONAL OXYGEN (O) TO CHAR =
',OXY
        COXY = COXY + OXY
        OXY = 0
      ENDIF
C
C
C
C ***** SULFUR BALANCE *****
C
C All gaseous sulfur is present as H2S and all solid sulfur
appears
C in the char. The amount of H2S is calculated as the difference
between
C the total sulfur in the wood and the percentage of sulfur
retained in
C the char, REAL(4).
C
      H2SMOL = TSULF * ( 1.D0 - REAL(4)/100.D0 )
      CSULF = TSULF * (REAL(4)/100.D0)
C
C
C ***** HYDROGEN BALANCE *****
C
C First, the hydrogen present in the char is determined from the
specification
C for nitrogen in the char, REAL(3), as well as the H/C ratio,
REAL(5). Any
C nitrogen in the product gas is assumed to be as ammonia.
C
C AMMOL - AMMONIA NITROGEN MOLE FLOW (KMOL/S)
C CNIT - NITROGEN IN CHAR (KMOL/S) - USED LATER IN
CHAR OUTPUT
C TRNIT - NITROGEN IN THE WOOD (KMOL/S)
C REAL(3) IS % OF NITROGEN RETAINED IN CHAR.
C
      AMMOL = TRNIT * (1.D0 - REAL(3)/100.D0)
      CNIT = TRNIT * (REAL(3)/100.D0)
C
C REAL(5) IS H/C MASS RATIO IN CHAR
C CCARB - IS THE CHAR CARBON

```

```

C CHRHYD - IS THE CHAR HYDROGEN
C GASHYD - IS THE GASEOUS HYDROGEN
C THYD - IS THE HYDROGEN IN THE WOOD
C STMDEC - IS ANY STEAM DECOMPOSED TO H2 AND O IN
OXYGEN BALANCE ABOVE
C
C The hydrogen required (HREQD) is the sum of the hydrogen in
the char and
C the hydrogen in the product gas. The amount of hydrogen
available (HAVAIL)
C is calculated as the hydrogen in the feed (THYD) plus the
hydrogen from any
C steam decomposition from the oxygen balance (STMDEC).
C
      CHRHYD = ( CCARB*CMW * REAL(5) ) / HMW

      GASHYD = 2.D0*H2MOL + 4.D0*CH4MOL +
6.D0*(C2H6MOL) + 6.D0*C6H6MOL
      & + 3*AMMOL + 2*H2SMOL + 8*TARMOL + 4*C2H4MOL
      + 2*C2H2MOL
      HREQD = GASHYD + CHRHYD
      HAVAIL = THYD + STMDEC*2.D0
      WRITE(USER_NHSTRY,995)
      + AMMOL,H2SMOL,GASHYD,CHRHYD,HAVAIL,HREQD
995 FORMAT(/,' MOLES',/, ' NH3 ',G12.5,' H2S ',G12.5,
& ' GASEOUS HYDROGEN',G12.5,/, ' CHAR HYDROGEN
',G12.5,
& ' AVAIL. HYDROGEN',G12.5,
& ' REQ. HYDROGEN',G12.5)
C
C CHECK IF THERE IS ENOUGH HYDROGEN AVAILABLE
C
C The amount of hydrogen available should be equal to or greater
than the
C hydrogen required (HAVAIL >= HREQD). If it is not, the routine
C cannot decompose or generate steam to balance the equation
and so a severe
C error (86004) is generated and the user is instructed to increase
the steam
C to wood ratio.
C
      IF (HREQD .GT. HAVAIL) THEN
        ISEV=1
        IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86004,USER_LMSG,USER_IMISS,
0,0,2)
+ .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,164)
C

```




```
164 FORMAT(6X,'PREDICTED HYDROGEN YIELD EXCEEDS
HYDROGEN AVAILABLE '
```

```
& ,/6X,' STEAM TO WOOD RATIO MUST BE INCREASED ')
C
```

```
C CHECK IF HYDROGEN REQUIRED EXCEEDS THAT IN THE
WOOD
```

```
C
```

```
C If HREQD is less than HAVAIL, but greater than that in the
wood (THYD),
```

```
C calculate hydrogen which does not come from steam
decomposition in the
```

```
C oxygen balance and write a message to the history file with that
amount.
```

```
C
```

```
C H2STM - IS THE EXCESS HYDROGEN THAT IS NOT IN THE
WOOD
```

```
C XSHYD - IS INFORMATIONAL ONLY AND IS THE AMOUNT
OF EXCESS HYDROGEN THAT
```

```
C DOES NOT COME FROM STEAM DECOMPOSITION IN THE
OXYGEN BALANCE.
```

```
C
```

```
ELSE IF (HREQD .GT. THYD) THEN
```

```
H2STM = HREQD - THYD
```

```
XSHYD = (2.D0*STMDEC) - H2STM
```

```
WRITE (USER_NHSTRY,950) XSHYD
```

```
950 FORMAT(/,'NOTE:H2 BALANCE HAD ',G12.5, ' EXCESS
MOLES HYDROGEN
```

```
& NOT FROM STEAM DECOMPOSITION FOR
OXYGEN BALANCE',/)
```

```
END IF
```

```
C
```

```
C HYD - IS THE EXCESS HYDROGEN.
```

```
C
```

```
HYD = (HAVAIL - HREQD)
```

```
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'Excess hydrogen, HYD = ',HYD
```

```
C
```

```
C CHRHYD - IS THE CHAR HYDROGEN
```

```
C THE EXCESS HYDROGEN IS ADDED TO CHAR
```

```
C
```

```
CHRHYD = HYD + CHRHYD
```

```
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHRHYD = ',CHRHYD
```

```
C
```

```
C
```

```
C *****
```

```
C DEFINE OUTLET STREAM
```

```
C *****
```

```
C
```

```
C
```

```
C ***** FILL IN OUTLET FLOWS*****
```

```
C
```

```
DO 250 I=1,NSUBS
```

```
GOTO (200,210,220), ITYPE(I)
```

```
C
```

```
C ***** MIXED SUBSTREAM *****
```

```
C
```

```
200 CONTINUE
```

```
SOUT(L1 + NO2) = OXY/2.D0
```

```
SOUT(L1 + NCO) = SOUT(L1 + NCO) + COMOL
```

```
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CO X MOLES OUT =
',SOUT(L1+NCO)
```

```
SOUT(L1 + NCO2) = SOUT(L1 + NCO2) + CO2MOL
```

```
C
```

```
C
```

```
SOUT(L1 + NH2) = SOUT(L1 + NH2) + H2MOL
```

```
SOUT(L1 + NH2O) = H2OTOT
```

```
SOUT(L1 + NH2S) = SOUT(L1 + NH2S) + H2SMOL
```

```
SOUT(L1 + NNH3) = SOUT(L1 + NNH3) + AMMOL
```

```
SOUT(L1 + NTAR) = SOUT(L1 + NTAR) + TARMOL
```

```
SOUT(L1 + NC2H2) = SOUT(L1 + NC2H2) + C2H2MOL
```

```
SOUT(L1 + NC2H6) = SOUT(L1 + NC2H6) + C2H6MOL
```

```
SOUT(L1 + NC2H4) = SOUT(L1 + NC2H4) + C2H4MOL
```

```
SOUT(L1 + NCH4) = SOUT(L1 + NCH4) + CH4MOL
```

```
SOUT(L1 + NC6H6) = SOUT(L1 + NC6H6) +
C6H6MOL
```

```
C
```

```
C FILL IN TOTAL FLOW AND AVERAGE MOLECULAR
WEIGHT
```

```
C
```

```
CALL SHS_CPACK(SOUT(IDXSUB(1)),NCP,IDX,X,FLOW)
```

```
SOUT(L1+NCOMP_NCC+1)=FLOW
```

```
SOUT(L1+NCOMP_NCC+9)=PPUTL_AVEMW(NCP,IDX,X)
```

```
GOTO 250
```

```
C
```

```
C ***** CISOLID SUBSTREAM *****
```

```
C
```

```
210 CONTINUE
```

```
DO J=1 ,NCOMP_NCC
```

```
SOUT(L2 + J) = SIN(L2 + J)
```

```
ENDDO
```

```
CALL SHS_CPACK(SOUT(IDXSUB(2)),NCP,IDX,X,FLOW)
```

```
SOUT(L2+NCOMP_NCC+1)=FLOW
```

```
SOUT(L2+NCOMP_NCC+9)=PPUTL_AVEMW(NCP,IDX,X)
```

```
GOTO 250
```



```

C
C ***** NC SUBSTREAM *****
C
220 CONTINUE
C
C CALCULATE CHAR FLOW AND ULTIMATE ANALYSIS
(%ASH, %CARBON, %HYDROGEN,
%NITROGEN, %SULFUR,
%OXYGEN)
C CHAR OUT = TOTAL ASH IN + (CHAR CARBON)*(CARBON
MW) +
C (CHAR HYDROGEN)*(HYDROGEN MW) +
C (CHAR OXYGEN)*(OXYGEN MW) +
C (CHAR NITROGEN)*(NITROGEN MW) +
C (CHAR SULFUR)*(SULFUR MW)
C
C **** FOLLOWING LINE ADDED (WAMOS 6/16/98)
C **** AND ASH IN ADDED TO CHAR AND CHAR ULTANAL
C
TASH2 = SIN(L3 + NASH)
CHAR = TASH + TASH2 + CCARB*CMW +
1 CHRHYD*HMW +
2 COXY*OMW +
3 CNIT*XNMW +
4 CSULF*SMW
WRITE(USER_NHSTRY,*)TASH,TASH2= ',TASH, TASH2
SOUT(IULTCH+1) = (TASH + TASH2) / CHAR * 100.D0
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR ASH = ',SOUT(IULTCH+1)
SOUT(IULTCH+2) = CCARB*CMW / CHAR * 100.D0
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR CARBON =
',SOUT(IULTCH+2)
SOUT(IULTCH+3) = CHRHYD*HMW / CHAR * 100.D0
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR HYDROGEN =
',SOUT(IULTCH+3)
SOUT(IULTCH+4) = CNIT*XNMW / CHAR * 100.D0
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR NITROGEN =
',SOUT(IULTCH+4)
SOUT(IULTCH+6) = CSULF*SMW / CHAR * 100.D0
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR SULFUR =
',SOUT(IULTCH+6)
SOUT(IULTCH+7) = COXY*OMW / CHAR * 100.D0
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR OXYGEN =
',SOUT(IULTCH+7)
C
C SET THE OUTLET CHAR SULFANAL (Sum must add up to %
in char ultimate
C analysis for sulfur)
C SET THE SULFANAL SO THAT 50% OF THE SULFUR IS
SULFAT AND 50% IS ORGANIC
C NO PYRITIC
C
SOUT(ISLFC+1) = 0
SOUT(ISLFC+2) = 0.5*SOUT(IULTCH+6)
SOUT(ISLFC+3) = 0.5*SOUT(IULTCH+6)
WRITE(USER_NHSTRY,*)'ISLFC1= ',SOUT(ISLFC+1)
WRITE(USER_NHSTRY,*)'ISLFC2= ',SOUT(ISLFC+2)
WRITE(USER_NHSTRY,*)'ISLFC3= ',SOUT(ISLFC+3)
C
C SET OUTLET NC COMPONENT FLOWS
C
SOUT(L3 + NWOOD) = 1.D-10
SOUT(L3 + NASH) = 1.D-10
SOUT(L3 + NCHAR) = SOUT(L3 + NCHAR) + CHAR
C
C DETERMINE TOTAL OUTLET NC SUBSTREAM FLOW
C
TOTNC = 0.D0
DO 230 J=1,NCOMP_NNCC
TOTNC = TOTNC + SOUT(L3+J)
230 CONTINUE
SOUT(L3+NCOMP_NNCC+1) = TOTNC
250 CONTINUE
C
C *****
C HEAT BALANCE
C *****
C
C ADD UP INLET ENTHALPY
C
CALL SHS_TOTENT(SIN,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,ENTHIN)
C
C FIND OUTLET STREAM ENTHALPY (TP FLASH)
C
CALL FLSH_FLASH(
+ SOUT,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,NBOPST,2,2,1,30,1.D-4,
+
TOUT,POUT,GUESS,USER_LMSG,USER_LPMSG,USER_IRES
TR,2,RETN,
+ IRETN,LCFLAG)
CALL
SHS_TOTENT(SOUT,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,ENTOUT)

```



```

C
C CALCULATE DUTY AND RETURN
C
  Q = ENTHIN-ENTOUT
  IF (USER_LMSG .GE. 4) WRITE(USER_NHSTRY,300)
  + ENTHIN,ENTOUT,Q
300 FORMAT(6X,'HIN =',E13.5,' HOUT =',E13.5,' Q =',E13.5)
  RETURN
C
C *****
C          TERMINAL ERROR SECTION
C *****
C
  820 ISEV=0
  IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86001,USER_LMSG,USER_IMISS,
0,0,2)
  + .NE. 0) GOTO 840
  WRITE(USER_NHSTRY,825)
  825          FORMAT(6X,'IMPROPER          STREAM
STRUCTURE.',/,'6X,'STREAM STRUCTURE '
  1 'MUST BE MIXED + CISOLID + NC, IN THAT ORDER.')
840 RETURN
  END

```

9.1.1.2 Modelo 2 (Jie)

Código de programación en Fortran para la simulación de la desvolatilización de la biomasa para el Modelo 2.

```

C
  SUBROUTINE BATYD4 (SIN ,SOUT ,
NSUBS,IDXSUB,ITYPE,NINT,INT,NREAL,
  1 REAL,IDS,NPO,NBOPST,NIW,IW,NW,W)
C
C
C  MODULE TITLE: WOOD DEVOLATILIZATION AND
PYROLYSIS
C
C  PURPOSE: USER ROUTINE TO MODEL FIXED-BED
GASIFICATION WOOD
C          DEVOLATILIZATION BASED ON THE ULTIMATE
ANALYSIS OF
C          THE WOOD, ASH, AND CHAR.
C

```

```

C WRITTEN BY: K. R. CRAIG          DATE WRITTEN:
5/21/93
C
C  BASED ON NYLD ROUTINE WRITTEN BY M.I.T. FOR
CONOCO STUDY (12/15/81)
C
C
C  VARIABLES IN ARGUMENT LIST
C
C  VAR  I/O TYPE DIM  DESCRIPTION
C
C  SIN  I/O  R      INLET MATERIAL STREAM VECTOR
C  SOUT O  R      OUTLET MATERIAL STREAM
VECTOR
C  NSUBS I  I      NUMBER OF SUBSTREAMS
C  IDXSUB I  I      NSUBS SUBSTREAM INDEX VECTOR
C  ITYPE I  I      NSUBS SUBSTREAM TYPE VECTOR
C  NINT  I  I      LENGTH OF INTEGER VECTOR
C  INT  I/O  I      NINT  INTEGER VECTOR
C  NREAL I  I      LENGTH OF REAL VECTOR
C  REAL  I  R      NREAL REAL ARRAY
C  REAL(1) I      R      GASIFIER      OUTLET
TEMPERATURE
C  REAL(2) I      R      GASIFIER      OUTLET
PRESSURE
C  REAL(3) I      R      PERCENT OF NITROGEN IN
WOOD GOING TO THE CHAR
C  REAL(4) I      R      PERCENT OF SULFUR IN
WOOD GOING TO THE CHAR
C  REAL(5) I      R      H/C MASS RATIO IN THE
CHAR
C  REAL(6) I      R      PERCENT OF OXYGEN IN
WOOD GOING TO THE CHAR
C  IDS  I  I      2,NCC ID VECTOR
C  NPO  I  I      NUMBER OF PHYSICAL PROPERTY
OPTIONS
C  NBOPST I  I      3,NPO PHYSICAL PROPERTY OPTION
SET POINTERS
C  NIW  I  I      LENGTH OF THE INTEGER WORK
VECTOR
C  IW  I  I      NIW  INTEGER WORK VECTOR
C  NW  I  I      LENGTH OF THE REAL WORK VECTOR
C  W  I  R      NW  REAL WORK VECTOR
C
C
C  IMPORTANT INTERNAL VARIABLES
C
C  VAR  TYPE DIM  DESCRIPTION
C

```



```

C  IDX  I  99  COMPONENT INDEX VECTOR
C  X    R  99  COMPONENT MOLAR FRACTION
C  VECTOR
C  L1  I    POINTER TO MIXED SUBSTREAM
C  L2  I    POINTER TO CISOLID SUBSTREAM
C  L3  I    POINTER TO NC SUBSTREAM
C
C *****
C          ERROR CONDITIONS:
C *****
C
C  NUMBER LEVELTYPE
C
C  86000 0          TERMINAL
C
C  IMPROPER STREAM STRUCTURE.
C  STREAM STRUCTURE MUST BE MIXED + CISOLID + NC,
C  IN THAT ORDER.
C
C  86001 1          SEVERE
C
C  ULTIMATE ANALYSIS IS MISSING FOR ONE OR MORE
C  OF THESE COMPONENTS:
C  WOOD, ASH, CHAR.
C
C  86002 2          ERROR
C
C  ULTANAL MUST NOT CONTAIN CHLORINE.  MASS
C  BALANCE WILL BE IN ERROR.
C
C  860033          WARNING
C
C  PREDICTED GASEOUS CARBON YIELD EXCEEDS
C  CARBON AVAILABLE
C  GASEOUS CARBON COMPOUND YIELD ADJUSTED BY A
C  FACTOR OF
C  AND CHAR CARBON SET TO ZERO
C
C  86004 1          SEVERE
C
C  PREDICTED HYDROGEN YIELD EXCEEDS
C  HYDROGEN AVAILABLE
C  STEAM TO WOOD RATIO MUST BE INCREASED
C
C *****
C          SUBROUTINES AND FUNCTIONS
C *****

```

```

C
C  NAME - DMS_LOCATI
C  TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C  DESC - LOCATES THE INTEGER INDEX OF A SPECIFIC
C  BEAD AND
C  TO READ THE BEAD INTO CORE, IF NECESSARY
C  CALL - LBI = DMS_LOCATI(NBX)
C  INPUT:
C  NBX      INT      BEAD NUMBER
C  OUTPUT:
C  DMS_LOCATI      INT      LOCATION      OF
C  BEAD IN INTEGER PLEX
C
C  NAME - SHS_LOCATS
C  TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C  DESC - LOCATES A STREAM BEAD, GIVEN ITS BEAD
C  NUMBER
C  AND FINDS THE BEAD NUMBER AND LOCATION OF
C  THE
C  DESCRIPTOR BEAD
C  CALL - CALL SHS_LOCATS(NB,LVI,LVR,LD,NBD)
C  INPUT:
C  NB              INT      STREAM      BEAD
C  NUMBER
C  OUTPUT:
C  LVI      INT      INTEGER PLEX LOCATION
C  OF STREAM BEAD
C  LVR      INT      REAL PLEX LOCATION OF
C  THE REAL PORTION
C  OF THE BEAD
C  LD              INT      INTEGER PLEX
C  LOCATION OF THE DESCRIPTOR
C  BEAD.
C  NBD      INT      DESCRIPTOR BEAD NUMBER
C
C
C  NAME - SHS_APSCPY
C  TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C  DESC - STREAM COPIER
C  CALL - CALL SHS_APSCPY(LD,LVR1,LVR2)
C  INPUT:
C  LD              INT      STARTING PLEX
C  LOCATION FOR STREAM
C  CLASS DESCRIPTOR BEAD.
C  LVR1      INT      STARTING PLEX LOCATION
C  FOR REAL PART
C  OF THE STREAM TO BE COPIED
C  LVR2      INT      STARTING PLEX LOCATION
C  FOR REAL PART

```



```

C          OF STREAM WHERE 1ST STREAM IS
C COPIED
C
C NAME - DMS_UNCONV1
C TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C DESC - CONVERTS VALUE TO SI UNITS
C CALL - CALL DMS_UNCONV1(LUNCD,RVALN)
C INPUT:
C LUNCD INT UNIT CODE = TABLE ROW #
C (OBTAINED FROM TABLE IN RCUNITS.DAT FILE
C IN )
C RVALN REAL VALUE TO BE CONVERTED
C OUTPUT:
C RVALN REAL CONVERTED VALUE
C
C NAME - SHS_CPACK
C TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C DESC - PACKS A STREAM VECTOR
C CALL - CALL SHS_CPACK(SUBSTR, NCP, IDX, X, FLOW)
C INPUT:
C SUBSTR REAL VECTOR OF COMPONENT
C FLOWS
C OUTPUT:
C NCP INT NUMBER OF COMPONENTS
C PRESENT
C IDX INT COMPONENT INDEX
C VECTOR DIM = NCP
C X REAL PACKED MOLE FRACTION
C DIM = NCP
C FLOW REAL TOTAL SUBSTREAM FLOW
C (KG-MOL/S)
C
C NAME - PPUTL_AVEMW
C TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C DESC - AVERAGE SUBSTREAM MOLECULAR WEIGHT
C CALL - AMW = PPUTL_AVEMW(N, IDX, X)
C INPUT:
C N INT NUMBER OF COMPONENTS
C IDX INT COMPONENT INDEX ARRAY
C DIM = N
C X REAL MOLE FRACTION ARRAY
C DIM = N
C OUTPUT:
C AMW REAL AVERAGE MOLECULAR
C WEIGHT
C
C NAME - SHS_TOTENT
C TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C DESC - CALCULATES TOTAL STREAM ENTHALPY
C CALL - CALL SHS_TOTENT(SIN,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,TENTH)
C INPUT:
C SIN REAL STREAM VECTOR DIM = 1
C NSUBS INT NUMBER OF SUBSTREAMS
C IDXSUB INT INDEX VECTOR OF
C SUBSTREAM DIM=NSUBS
C ITYPE INT SUBSTREAM TYPE VECTOR
C DIM=NSUBS
C OUTPUT:
C TENTH REAL TOTAL STREAM ENTHALPY
C
C NAME - FLSH_FLASH
C TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C DESC - GENERAL PURPOSE FLASH INTERFACE
C ROUTINE FROM ASPEN PLUS
C CALL - CALL FLSH_FLASH(SVEC, NSUBS, IDXSUB,
C ITYPE, NBOPST,
C KODE, NPKODE, KPHASE, MAXIT, TOL,
C SPEC1, SPEC2, GUESS, LMSG, LPMSG,
C JRES, KRESLT, RETN, IRETN, LCFLAG)
C INPUT:
C SVEC REAL STREAM VECTOR
C NSUBS INT NUMBER OF SUBSTREAMS
C IDXSUB INT LOCATION OF SUBSTREAMS
C DIM=NSUBS
C ITYPE INT SS TYPE VECTOR
C DIM=NSUBS
C NBOPST INT PHYSICAL PROPERTY SET
C ARRAY DIM=6
C KODE INT FLASH OPTION CODE
C NPKODE INT MAXIMUM PHASES IN MIXED
C SS
C KPHASE INT PHASE WHEN NPKODE=1
C MAXIT INT MAXIMUM NUMBER OF
C ITERATIONS
C TOL REAL CONVERGENCE
C TOLERANCE
C SPEC1 REAL 1ST SPECIFIED VARIABLE
C SPEC2 REAL 2ND SPECIFIED VARIABLE
C GUESS REAL INITIAL GUESS
C LMSG INT LOCAL DIAGNOSTIC
C MESSAGE LEVEL
C LPMSG INT LOCAL PHYSICAL
C PROPERTY DIAGNOSTIC LVL
C JRES INT SIMULATION RESTART FLAG
C KRESLT INT RESULT CALCULATION FLAG
C RETN REAL REAL RETENTION VECTOR

```



```

C   IRETN   INT   INTEGER   RETENTION
VECTOR
C   OUTPUT:
C   SVEC    REAL   STREAM VECTOR
C   RETN    REAL   REAL RETENTION VECTOR
C   IRETN   INT   INTEGER   RETENTION
VECTOR
C   LCFLAG  INT   LOCAL    CONVERGENCE
FLAG
C
C   NAME - DMS_IRRCHK
C   TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C   DESC - ERROR CHECKING ROUTINE
C   CALL - IRPT = DMS_IRRCHK(IPROG, ISEV, ICODE,
LDIAG, LTERM,
C           IESCAL, IPHYS, NHEAD)
C   INPUT:
C   IPROG   INT   CALLING   SUBROUTINE
NAME     DIM=2
C   ISEV    INT   ERROR SEVERITY
C   ICODE   INT   ERROR NUMBER
C   LDIAG   INT   DIAGNOSTIC LEVEL
C   LTERM   INT   TERMINAL   DIAGNOSTIC
LEVEL
C   IESCALINT   ERROR ESCALATION LEVEL
C   IPHYS       INT   TYPE OF S/R (PHYS PROP
OR NOT)
C   NHEAD       INT   AMOUNT OF HEADER INFO
PRINTED
C   OUTPUT:
C   IPRT        INT   PRINTING INFO (0=DON'T
PRINT; 1=PRINT)
C
C   NAME - DMS_ERROR
C   TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C   DESC - COUNTS THE TYPES OF ERRORS FOUND AND
TERMINATES
C   ASPEN IF THE ERRORS EXCEED A MAXIMUM
C   CALL - DMS_ERROR(ISEV,ICLASS)
C   INPUT:
C   ISEV       INT   SEVERITY CODE
C   ICLASS     INT   ERROR CLASS CODE
C
C   NAME - DMS_IFCMNC
C   TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C   DESC - PLEX OFFSET UTILITY
C   CALL - IOFF = DMS_IFCMNC(CNAME)
C   INPUTS:
C   CNAME - COMPONENT DATA NAME
C   OUTPUT:
C   INTEGER OR REAL DATA OFFSET. REAL DATA AT
B(IOFF+1).
C   INTEGER DATA AT IB(IOFF+1).
C
C   NAME - DMS_KCCIDC (CONV COMPS) AND KNCIDC (NC
COMPS)
C   TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C   DESC - DETERMINES COMP SEQ NUMBER IN
DMS_NCOMPS
C   CALL - J = DMS_KCCIDC(CIDC) OR J =
DMS_KCCIDC(CIDNC)
C   INPUT:
C   CIDC     CHAR   CONVENTIONAL COMP ID
C   CIDNC    CHAR   NC COMP ID
C   OUTPUT:
C   J        INT   COMPONENT INDEX
C *****
C USING THIS MODEL:
C
C   WOOD, CHAR, AND ASH ARE EXPECTED TO HAVE
ULTIMATE ANALYSES
C   ANY CHLORINE IN THE ULTIMATE ANALYSES WILL
C   BE IGNORED, RESULTING IN A MASS BALANCE ERROR.
C   THE ASSUMED STREAM STRUCTURE IS MIXED +
CISOLID + NC
C
C   THE NC COMPONENTS WOOD, ASH AND CHAR MUST
BE ENTERED
C   INTO THE COMPONENT SECTION OF THE SIMULATION
IN THAT
C   ORDER: WOOD, ASH CHAR
C
C   THE SIMULATION CALLING THIS ROUTINE MUST USE
ENGLISH
C   UNITS (I.E., F) FOR TEMPERATURE AS THE YIELD
EQUATION
C   IS BASED ON FAHRENHEIT.
C *****
C * *
C * THE COMPONENTS LISTED BELOW ARE REQUIRED.
*
C * ALL OTHERS ARE CONSIDERED INERT. *
C * *
C * NON-CONVEN  CONVEN *
C * WOOD CO *
C * ASH H2 *

```



```

C *      CHAR      N2      *
C *              SULFUR    *
C *      CONVEN   NH3      *
C *      CARBON   H2O      *
C *      TAR (C10H8) H2S   *
C *      C2H2     NH3      *
C *      C2H4     C2H6     *
C *      C6H6                      *
C *****
C
C *****
C      DECLARATIONS & COMMONS
C *****
C ***** REAL VARIABLES/FUNCTIONS*****
C (DESCRIPTIONS OF FUNCTIONS ABOVE)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      REAL*8 PPUTL_AVEMV
C
C *****          INTEGER
C VARIABLES/FUNCTIONS*****
C (DESCRIPTIONS OF FUNCTIONS ABOVE)
      INTEGER DMS_LOCATI
      INTEGER DMS_KCCIDC
      INTEGER DMS_KNCIDC
      INTEGER LULT, LSUL, LPRX, LGEN
      INTEGER DMS_IFCMNC
C
C *****          #      INCLUDE      STATEMENTS
C *****
C THESE ARE ASPEN PLUS COMMON BLOCKS
C USED BY VARIOUS UTILITIES WITHIN THE SUBROUTINE
C
#include "ppexec_user.cmn"
C STORES RUN CONTROL FLAGS
#include "dms_ncomp.cmn"
C NUMBERS OF COMPONENTS AND LENGTHS OF
COMPONENT-RELATED
C STREAM SEGMENTS
#include "dms_rglob.cmn"
C CONTAINS REAL, GLOBAL SPECIFICATIONS SUCH AS THE
MISSING
C CODE FOR REAL NUMBERS, RGLOBAL_RMIS
#include "dms_plex.cmn"
C IN-CORE STORAGE AREA FOR THE PLEX. STORES RUN-
TIME INFO.

```

```

C CONSISTS OF INTEGER, IB(1), AND REAL B(1) ARRAYS
C EQUIVALENCED TO EACH OTHER.
C
C ***** ARRAY SPECIFICATIONS *****
      DIMENSION SIN(1), SOUT(1), IDXSUB(NSUBS),
ITYPE(NSUBS),
      1 INT(NINT), REAL(NREAL), NBOPST(3,NPO),
      2 IW(NIW), W(NW), IDS(2,12)
      DIMENSION RETN(337),IRETN(6)
      DIMENSION IPROG(2)
      DIMENSION IDX(99),X(99)
      DIMENSION
XH2(3),XCO(3),XCO2(3),XCH4(3),XC2H2(3),XC2H4(3),
      1 XC2H6(3),XCHAR(3),XTAR(2),XDGAS(3)
      DIMENSION B(1)
      DIMENSION PLXANT (9)
C
C ***** EQUIVALENCE STATEMENTS *****
      EQUIVALENCE (RMISS, USER_RUMISS)
      EQUIVALENCE (IMISS, USER_IUMISS)
C USER_RUMISS IS A REAL VARIABLE FOR A MISSING
CODE
C USER_IUMISS IS AN INTEGER VARIABLE FOR A MISSING
CODE.
      EQUIVALENCE (IB(1), B(1))
C IB AND B ARE THE ARRAYS FOR STORING INFO IN THE
PLEX.
C
C
C *****
C      DATA STATEMENTS
C *****
C THE FOLLOWING DATA ARE USED TO COMPUTE THE
YIELD OF EACH COMPONENT
C AND THE TOTAL AMOUNT OF GAS, XDGAS,; AS WELL AS
THE AMOUNT OF CHAR
C AND TAR BASED ON AN EQUATION WITH THE FORM OF:
C (A + B*T + C*T^2)*(DRY GAS FLOW)
C XDGAS, XCHAR, AND XTAR USE (A + B*T + C*T^2) BUT
ARE IN DIFFERENT UNITS
C XDGAS IS IN UNITS OF SCF/LB OF MAF WOOD
C XCHAR IS IN UNITS OF LB/LB OF DRY WOOD
C ALL OTHERS ARE MOL% OF DRY GAS FOR THE
CORRELATION (A + B*T + C*T^2)
C THIS WILL BE TAKEN INTO ACCOUNT IN THE LATER
CALCULATIONS
C THE DATA STATEMENTS BELOW CONTAIN A, B, AND C IN
ORDER
C IN THE CORRELATION, T IS IN FAHRENHEIT

```



```

C
C THE CORRELATION WAS A REGRESSION(USING A
POLYNOMIAL FUNCTION)
C OF PILOT PLANT DATA FROM BATTELLE COLUMBUS
LABORATORIES. THIS
C METHOD, THE DATA, AND AN EXPLANATION CAN BE
FOUND IN: BAIN, R.
C (JANUARY 14, 1992) "MATERIAL AND ENERGY BALANCE
FOR METHANOL FROM
C BIOMASS USING BIOMASS GASIFIERS". EXPERIMENTAL
RUNS WERE FOR
C VARIOUS TYPES OF WOOD (APPENDIX 7 CONTAINS
EXPERIMENTAL DATA).
C APPENDIX 8 CONTAINS RESULTS OF THE REGRESSION.
THE ORIGINAL
C PILOT PLANT DATA IS REFERENCED IN BAIN (1992) BUT
CAN BE FOUND IN:
C FELDMANN, H.F., PAISLEY, M.A., APPELBAUM, H.R.,
TAYLOR, D.R. (MAY 1988)
C "CONVERSION OF FOREST RESIDUES TO A METHANE-
RICH GAS IN A HIGH-THROUGHPUT
C GASIFIER" PNL 6570. DE 012138. THE TEMPERATURE
RANGE OF THE DATA
C IS 1280-1857F AND THE PRESSURE RANGE IS 2.4-14.4
PSIG.
C THE CORRELATION WAS DEVELOPED USING ALL OF THE
DATA SETS.
C ADDITIONALLY, THERE IS A SPREADSHEET CONTAINING
THE DATA AND GRAPHS
C FOR EACH COMPONENT.
C
C
DATA XDGAS / 2.8993D+01, -4.3325D-02, 2.0966D-05 /
2, XCO / 133.46, -0.10290, 2.8792D-5 /
4, XCO2 / -9.5251, 0.037889, -1.4927D-5 /
6, XCH4/ -13.82, 0.044179, -1.6167D-5 /
8, XC2H4/ -38.258, 0.058435, -1.9868D-5 /
1, XC2H6/ 11.114, -0.011667, 3.064D-6 /
3, XH2 / 17.996, -0.026448, 1.8930D-5 /
9, XC2H2 / -4.3114, 5.4499D-3, -1.561D-6 /
5, XCHAR/ 0.75503, -3.0212D-4, -3.1178D-8 /
C
C CHECK FOR REPORT PASS
C
IF (USER_IPASS .EQ. 4) RETURN
C
C CHECK FOR IMPROPER STREAM STRUCTURE
C
IF (NSUBS.NE.3) GOTO 820
IF (ITYPE(1).NE.1 .OR. ITYPE(2).NE.2 .OR. ITYPE(3).NE.3)
GOTO 820
C
C *****
C DETERMINE LOCATION OF AND ACCESS COMPONENT
DATA
C *****
C
C INITIALIZE VARIABLES AND POINTERS
C
C INITIALIZE ATTRIBUTE POINTERS
C IULTCH - POINTER TO ULTIMATE ANALYSIS OF CHAR
C IULTWD - POINTER TO ULTIMATE ANALYSIS OF WOOD
C IPRXWD - POINTER TO PROXIMATE ANALYSIS OF WOOD
C IPRXCH - POINTER TO PROXIMATE ANALYSIS OF CHAR
C
IULTCH = 0
IPRXWD = 0
IPRXCH = 0
IULTWD = 0
C
C ***** FIND COMPONENT INDEX NUMBERS IN
DMS_NCOMP *****
C
C CONVENTIONAL COMPONENTS
C REPLACED NSQNCC AND NSQCC CALLS WITH KNCIDC
AND KCCIDC FUNCTIONS,
C RESPECTIVELY 6/28/99
C
NTAR = DMS_KCCIDC('C10H8')
NC6H6 = DMS_KCCIDC('C6H6')
NCARBN = DMS_KCCIDC('CARBON')
NH2S = DMS_KCCIDC('H2S')
NH2O = DMS_KCCIDC('H2O')
NNH3 = DMS_KCCIDC('NH3')
NCO = DMS_KCCIDC('CO')
NCO2 = DMS_KCCIDC('CO2')
NH2 = DMS_KCCIDC('H2')
NO2 = DMS_KCCIDC('O2')
NC2H6 = DMS_KCCIDC('C2H6')
NC2H4 = DMS_KCCIDC('C2H4')
NC2H2 = DMS_KCCIDC('C2H2')
NCH4 = DMS_KCCIDC('CH4')
NS = DMS_KCCIDC('SULFUR')
NN2 = DMS_KCCIDC('N2')

```




```
C NON-CONVENTIONAL COMPONENTS
  NWOOD = DMS_KNCIDC('WOOD')
  NASH = DMS_KNCIDC('ASH')
  NCHAR = DMS_KNCIDC('CHAR')
C
C *****DETERMINE MOLECULAR AND ATOMIC
WEIGHTS *****
C
C DETERMINE PLEX OFFSET FOR MW
C
  LMW = DMS_IFCMNC('MW')
C LMW IS THE OFFSET IN THE PLEX FOR THE MW OF NON-
CONVENTIONAL
C COMPONENTS
C
C RETRIEVE MW'S OF CONVENTIONAL COMPONENTS
FROM THE PLEX VIA
C MW = B(MW OFFSET + COMPONENT INDEX)
C CONVERT MOLECULAR WEIGHTS FOR HYDROGEN,
NITROGEN,
C AND OXYGEN TO ATOMIC WEIGHTS.
C
  CMW = B(LMW+NCARBN)
  H2MW = B(LMW+NH2)
  HMW = H2MW/2.0
  XN2MW = B(LMW+NN2)
  XNMW = XN2MW/2.0
  SMW = B(LMW+NS)
  O2MW = B(LMW+NO2)
  OMW = O2MW/2.0
  H2OMW = B(LMW+NH2O)
  TARMW = B(LMW+NTAR)
  COMW = B(LMW+NCO)
  CO2MW = B(LMW+NCO2)
  CH4MW = B(LMW+NCH4)
  C6H6MW = B(LMW+NC6H6)
C
C ***** FIND LOCATION OF COMPONENT ATTRIBUTES
*****
C
DO 150 I=1,NSUBS
  ILOC = ITYPE(I)
  NCT = NCOMP_NCC
  IF (ILOC .EQ. 3) NCT = NCOMP_NNCC
  GOTO (120,130,140), ILOC
C MIXED SUBSTREAM
120 CONTINUE
  L1 = IDXSUB(I) - 1
  GOTO 150
C CISOLID SUBSTREAM
130 CONTINUE
  L2 = IDXSUB(I) - 1
  GOTO 150
C NC SUBSTREAM
140 CONTINUE
  L3 = IDXSUB(I) - 1
C
C IATLST IS THE INDEX OF THE LAST STREAM ATTRIBUTE
C EACH STREAM VECTOR CONTAINS THE FLOW OF EACH
COMPONENT
C (NCT) AND 8 ATTRIBUTES.
C
  IATLST = IDXSUB(I) + NCT + 8
C
C NEW OFF-SETS BASED ON INFO FROM M. JARVIS OF
ASPENTECH
C VLP 6/22/99
C
C SET NC COMPONENT ATTRIBUTE VECTORS INTO SIN
C
C LENGTHS OF COMPONENT ATTRIBUTES
  LULT = 7
  LPRX = 4
  LSUL = 3
  LGEN = 20
C
C ORDER OF ATTRIBUTES: GENERAL, ULTIMATE, SULFUR,
PROXIMATE
C ASH IS THE ONLY COMPONENT WITH GENERAL
ANALYSIS
C CHAR IS 3RD COMPONENT: SKIP OVER 2 SETS OF
ULTIMATE, PROXIMATE, SULFUR
C AND GENERAL
C
  IULTCH= IATLST + 2*LULT + 2*LPRX + 2*LSUL + LGEN
  ISLFC= IULTCH + LULT
  IPRXCH= ISLFC + LSUL
C
C WOOD IS 1ST COMPONENT
  IULTWD= IATLST
  ISLFW= IULTWD + LULT
```



```
C FIXED INDEX IPRXWD BY PLS 3/14/00
  IPRXWD= ISLFW + LSUL
C
C ASH IS 2ND COMPONENT
  IGENAS = IATLST + LULT + LPRX + LSUL
  IULTAS = IGENAS + LGEN
  ISLFAS = IULTAS + LULT
  IPRXAS = ISLFAS + LSUL
C END OF NEW LINES ADDED BY VLP AND M. JARVIS 6/22/99
C
150 CONTINUE
C
  CHKSUM = IULTCH
  WRITE(USER_NHSTRY,*)'RMISS= ',RMISS
  IF (CHKSUM.LT.RMISS) GOTO 170
  ISEV=1
  IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86001,USER_LMSG,IMISS,0,0,2)
  + .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,160)
160 FORMAT(6X,'ULTIMATE ANALYSIS IS MISSING FOR
ONE OR MORE OF '
& 'THESE COMPONENTS:/'9X'WOOD, CHAR, ASH.')
C
170 CONTINUE
C
  CHKSUM = SIN(IULTCH+5)
  WRITE(USER_NHSTRY,*)'RGLOB_RMIN= ',RGLOB_RMIN
  IF (CHKSUM .LT. RGLOB_RMIN) GOTO 190
  ISEV=2
  IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86002,USER_LMSG,USER_IMISS,
0,0,2)
  + .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,180)
180 FORMAT(6X,'ULTANAL MUST NOT CONTAIN CHLORINE.
MASS BALANCE '
& 'WILL BE IN ERROR.')
```

```
C
190 CONTINUE
C
C
C
*****
C      DETERMINATION OF INLET AND FLOWRATES
C
*****
C
C
C COPY INLET STREAM INTO OUTLET STREAM
C
C LOCATE BLOCK BEAD
  LPROC = DMS_LOCATI(2)
  LBSMB = DMS_LOCATI(IB(LPROC+3))
  LBLK = IB(LBSMB+5)
C LOCATE STREAM BEADS
  NBSIN = IB(LBLK + IB(LBLK+17))
  NBSOUT = IB(LBLK + IB(LBLK+19))
  CALL SHS_LOCATS(NBSIN,LV11,LVR1,LD,NBD)
  CALL SHS_LOCATS(NBSOUT,LV12,LVR2,LD,NBD)
C COPY THE STREAM
  CALL SHS_APSCPY(LD,LVR1,LVR2)
C
C SET OUTLET TEMPERATURE AND PRESSURE (IN SI
UNITS)
C
  TOUTF= REAL(1)
C TOUTF IS THE OUTLET TEMPERATURE IN FAHRENHEIT
  TOUT = REAL(1)
  POUT = REAL(2)
  CALL DMS_UNCONV1(22,TOUT)
  CALL DMS_UNCONV1(20,POUT)
C DMS_UNCONV1 CONVERTS THE UNITS TO SI
C
C SET OUTLET PRESSURE BASED ON A PRESSURE DROP
(I.E., POUT IS NEGATIVE)
  IF (POUT .LE. 0.0) POUT=SIN(NCOMP_NNCC+3)+POUT
C
  TOTAL = SIN(L3 + NWOOD)
C TOTAL IS THE TOTAL FLOWRATE OF WOOD ENTERING
THE GASIFIER
C
C GET MOISTURE CONTENT OF WOOD AND DRY WEIGHT
OF WOOD.
C
  WATER = SIN(IPRXWD+1)*TOTAL/100.
  BDW = TOTAL - WATER
C BDW - BONE DRY WOOD
  H2O = WATER /H2OMW
  TMULT = BDW/100.
C TMULT IS THE FRACTION OF BONE DRY WOOD.
C
C SIMULATION PROGRESS CHECKING WRITE STATEMENTS
  write(USER_NHSTRY,992) total,water,(sin(iultwd+i),i=1,7)
  + ,cmw,hmw, xnmw,smw,omw
```



```

992 format(/,' wood flow=',g12.5, ' moisture=',g12.5,
1 ' ash %=' ,g12.5,/, ' carb%=' ,g12.5,
2 ' hyd%=' ,g12.5, ' nitr%=' ,g12.5,
3 /,' cl%=' ,g12.5, ' sulf%=' ,g12.5,
4 ' oxygen%=' ,g12.5,/, ' cmw=' ,g12.5,
5 ' hmw=' ,g12.5, ' xnmw=' ,g12.5,
6 /,' smw=' ,g12.5, ' omw=' ,g12.5,/)

C
C GET TOTAL FLOWS OF INDIVIDUAL ELEMENTS INTO THE
GASIFIER
C
TASH = SIN(IULTWD+1) * TMULT
TCARB = SIN(IULTWD+2) * TMULT / CMW
THYD = SIN(IULTWD+3) * TMULT / HMW
TRNIT = SIN(IULTWD+4) * TMULT / XNMW
TSULF = SIN(IULTWD+6) * TMULT / SMW
TOXY = SIN(IULTWD+7) * TMULT / OMW
C
C SIMULATION CHECKING WRITE STATEMENTS
WRITE(USER_NHSTRY,999)
TASH,TCARB,THYD,TRNIT,TSULF,TOXY
999 FORMAT(/,' WRITE: WOOD ELEMENTS',/
1 ' MOLES OF ATOMS',/, ' ASH ',G12.5, ' CARBON ',G12.5,
2 ' HYDROGEN ',G12.5,/, ' NITROGEN ',G12.5, ' SULFUR ',
3 G12.5, ' OXYGEN ',G12.5)

C
C
C
*****
*
C YIELD CALCULATIONS
C
*****
*
C
C YIELD OF HYDROCARBONS BASED ON A MOISTURE AND
ASH FREE BASIS
C DGAS AND GAS COMPONENTS IN SCF (59 F, 1 ATM)
C CHAR AND TAR IN LB
C
ZMAF = BDW - TASH
C ZMAF - MOISTURE AND ASH FREE WOOD (KG/SEC)
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'ZMAF = ',ZMAF
ZLBMFAF = ZMAF*2.20462*3600
C ZLBMFAF - MOISTURE AND ASH FREE WOOD (LB/HR)
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'ZLBMFAF = ',ZLBMFAF
ZLBBKB = BDW * 3600

C ZLBBDW - BONE DRY WOOD (KG/HR)
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'ZLBBDW = ',ZLBBKB
ZLBBDW = BDW * 2.20462 *3600
C ZLBBDW - BONE DRY WOOD (LB/HR)
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'ZLBBDW = ',ZLBBDW
C
T2 = TOUTF**2
T1 = TOUTF
TC = (TOUTF-32)/1.8
TK = TC+273.15
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'TOUT = ',TOUT
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'T1 = ',T1
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'T2 = ',T2
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'TC = ',TC
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'TK = ',TK
C
C CALCULATE YIELDS BASED ON DRY, ASH-FREE GAS,
DGAS (SCF)
DGAS = (XDGAS(1) + T1*XDGAS(2) + T2*XDGAS(3)) *
ZLBMFAF
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'DGAS IN SCF = ',DGAS
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'MAF IN LB = ',ZLBMFAF
C
C CALCULATE YIELDS OF INDIVIDUAL COMPONENTS
BASED ON:
C COMPONENT = (A + B*T1 + C*T**2)*DGAS/100
C TO GIVE SCF OF EACH COMPONENT; CHAR AND TAR ARE
A LITTLE DIFFERENT
C SEE NOTE AND CALCULATION BELOW
C A,B, AND C WERE PROVIDED EARLIER IN THE DATA
STATEMENTS
C T MUST BE IN FAHRENHEIT
C
H2 = (XH2(1) + T1*XH2(2) + T2*XH2(3)) * DGAS/100
write(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: bdw= ',bdw, ' h2= ',h2, ' DGAS= ',DGAS
CO = (XCO(1) + T1*XCO(2) + T2*XCO(3)) * DGAS/100
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: CO(scf)=',CO
CO2 = (XCO2(1) + T1*XCO2(2) + T2*XCO2(3)) * DGAS/100
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: CO2(scf)=',CO2
CH4 = (XCH4(1) + T1*XCH4(2) + T2*XCH4(3)) * DGAS/100
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: CH4(scf)=',CH4
C2H2 = (XC2H2(1) + T1*XC2H2(2) + T2*XC2H2(3)) *
DGAS/100
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: C2H2(scf)=',C2H2
C2H4 = (XC2H4(1) + T1*XC2H4(2) + T2*XC2H4(3)) *
DGAS/100

```



```

write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: C2H4(scf)=' ,C2H4
C2H6 = (XC2H6(1) + T1*XC2H6(2) + T2*XC2H6(3)) *
DGAS/100
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: C2H6(scf)=' ,C2H6
C CHAR AND TAR ARE CALCULATED IN TERMS OF LBS
CHAR = (XCHAR(1) + T1*XCHAR(2) + T2*XCHAR(3)) *
ZLBBDW
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'WRITE: CHAR (LB) = ',CHAR
C TAR
TAR = (0.35*exp(-0.0034*(TC-500))*exp(-4.34*exp(-
23400/(8.314*(TK
+ )))))*ZLBBKB
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: TAR(KG)=' ,TAR
C ASSUME THAT 25% OF TAR YIELD IS BENZENE
C6H6 = 0.25*TAR/2.204622622
TAR = 0.75*TAR/2.204622622
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: TAR(LB)=' ,TAR
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: C6H6(LB)=' ,C6H6
C
C CONVERT PRODUCT GAS FLOWS IN SCF AND TAR AND
CHAR IN LB
C TO MOLAR BASIS
C
H2MOL = H2 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwh= ',HMW
+ ', h2mol= ',h2mol
COMOL = CO / 379.4630 / 2.20462 / 3600
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwCO= ',COMW
+ ', COmol= ',COMol
CO2MOL = CO2 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwCO2 = ',CO2MW
+ ', CO2mol= ',CO2mol
CH4MOL = CH4 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwCH4 = ',CH4MW
+ ', CH4mol= ',CH4mol
C2H2MOL = C2H2 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
C2H4MOL = C2H4 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
C2H6MOL = C2H6 / 379.4630 / 2.20462 / 3600
C6H6MOL = C6H6 / C6H6MW / 2.20462 / 3600
TARMOL = TAR/TARMW/2.20462/3600
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwTAR = ',TARMW
+ ', TARmol= ',TARmol
write(USER_NHSTRY,*) ' WRITE: mwC6H6 = ',C6H6MW
+ ', C6H6mol= ',C6H6mol
if (h2mol .lt. 0.d0) h2mol = 0.d0
if (h2mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: H2MOL = 0 (407)'
if (comol .lt. 0.d0) comol = 0.d0
if (comol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: COMOL = 0 (409) '
if (co2mol .lt. 0.d0) co2mol = 0.d0
if (co2mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: CO2MOL = 0 (411) '
if (ch4mol .lt. 0.d0) ch4mol = 0.d0
if (ch4mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: CH4MOL = 0 (413) '
if (c2h4mol .lt. 0.d0) c2h4mol = 0.d0
if (c2h4mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: CH24MOL = 0 (415) '
if (c2h2mol .lt. 0.d0) c2h2mol = 0.d0
if (c2h2mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: C2H2MOL = 0 (415) '
if (c2h6mol .lt. 0.d0) c2h6mol = 0.d0
if (c2h6mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: C2H6MOL = 0 (417) '
if (C6H6mol .lt. 0.d0) C6H6mol = 0.d0
if (C6H6mol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: C6H6MOL = 0 (416) '
if (TARMol .lt. 0.d0) TARMol = 0.d0
if (TARMol .lt. 0.d0) WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ ' WRITE: TARMOL = 0 (421) '
WRITE(USER_NHSTRY,998)
+ H2MOL,COMOL,CO2MOL,CH4MOL,C2H4MOL,
C2H6MOL,TARMOL, C6H6MOL
998 FORMAT(/,' GASIF. PRODUCTS',/
1 ' MOLES ',/, ' H2 ',G12.5,' CO ',G12.5,
2 ' CO2 ',G12.5,/, ' CH4 ',G12.5,' C2H4 ',
3 G12.5,' C2H6 ',G12.5,/,
4 ' TAR ',G12.5,' C6H6 ',G12.5)
C
C
C
C
C *****
C ELEMENTAL BALANCES
C *****
C
C DETERMINE THE AMOUNT OF STEAM FED TO GASIFIER
STM = SIN(L1 + NH2O)
WRITE(USER_NHSTRY,*) ' STEAM FED TO GASIFIER = ',
STM

```



```

C
C CALCULATE THE TOTAL AMOUNT OF WATER IN
GASIFIER
C (WATER IN WOOD (H2O - CALC EARLIER) + WATER AS
STEAM (STM))
      H2OTOT = H2O + STM
C
C
C ***** CARBON BALANCE *****
*****
C
C The carbon balance determines the amount of carbon left in
the char (CCARB)
C from the total carbon in (TCARB) minus the gaseous carbon
(GCARB) based on
C the yields of all carbon-containing gases.
C
C GCARB - GASEOUS CARBON FROM THE
GASIFIER(KMOL/HR)
C TCARB - TOTAL CARBON IN THE WOOD INTO THE
GASIFIER (KMOL/HR)
C CCARB - CHAR CARBON (KMOL/HR)
C
C CCARB = TCARB - GCARB
C
      GCARB = COMOL + CO2MOL + CH4MOL +
2.D0*(C2H4MOL+C2H6MOL) +
&      10.D0*TARMOL + 2.D0*(C2H2MOL) +
6.D0*(C6H6MOL)
      CCARB = TCARB - GCARB
C
C WRITE OUT CARBON BALANCE VALUES
C
      WRITE(USER_NHSTRY,996) TCARB,GCARB,CCARB
      996 FORMAT(/,' TOTAL CARBON= ',G12.5,/, ' GASEOUS
CARBON= ',G12.5,
&      /,' CHAR CARBON= ',G12.5)
C
C CHECK FOR MASS IMBALANCE FOR CARBON
C
C If the amount of carbon produced based on the yield functions
C is greater than that available in the feed, then an adjustment
C factor, CFACT, is calculated and the amount of char carbon is
set
C to zero. The yield of each carbon component is modified
downwards
C by CFACT and a warning (86003) is generated in the history
file.
C
      IF ( CCARB .LE. 0.D0) THEN
          CFACT = TCARB/GCARB
          CCARB = 0.D0
          ISEV=3
          IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86003,USER_LMSG,USER_IMISS,
0,0,2)
+ .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,162) CFACT
          162 FORMAT(6X,'PREDICTED GASEOUS CARBON YIELD
EXCEEDS CARBON '
& 'AVAILABLE ',/,
& 6X,' GASEOUS CARBON COMPOUND YIELD ADJUSTED
BY A FACTOR OF ',
& G12.5,' AND CHAR CARBON SET TO ZERO')
C
C ADJUST MOLAR FLOWS TO CORRECT MASS IMBALANCE
C
      163 COMOL = CFACT * COMOL
          CO2MOL = CFACT * CO2MOL
          CH4MOL = CFACT * CH4MOL
          C2H4MOL = CFACT * C2H4MOL
          C2H6MOL = CFACT * C2H6MOL
C ***Following line added (W.AMOS)
          C2H2MOL = CFACT * C2H2MOL
          TARMOL = CFACT * TARMOL
          C6H6 = CFACT * C6H6MOL
      ENDIF
C
C ***** OXYGEN BALANCE *****
*****
C
C First, the total oxygen available (OAVAIL) is determined from all
sources:
C inlet stream, steam, and oxygen in the wood. The amount of
oxygen from
C the wood that ends up in the char (COXY) is based on REAL(6).
Next, the
C amount of oxygen required (OREQD) is determined based on
the oxygen needed
C for all of the gaseous components (i.e., CO and CO2) and char.
C
C OAVAIL IS THE TOTAL OXYGEN MOLES AVAILABLE FROM
ALL SOURCES = INLET
C STREAM (L1 - MIXED COMPONENT O2) + OXYGEN IN
WOOD (TOXY - VARIABLE GIVEN
C EARLIER) + OXYGEN IN THE STEAM/WATER (H2OTOT -
CALC EARLIER = H2O [MOISTURE
C IN THE WOOD] + STM [STEAM TO GASIFIER])
C

```



```
OAVAIL = 2.D0*SIN(L1 + NO2) + TOXY + H2OTOT
C
C REAL(6) IS MOL% OF O IN WOOD RETAINED IN CHAR
C
COXY = TOXY * (REAL(6)/100.D0)
OREQD = COMOL + 2.D0*CO2MOL + COXY
C
WRITE(USER_NHSTRY,993)
COMOL,CO2MOL,COXY,OAVAIL,OREQD
993 FORMAT(/,' COMOL = ',G12.5,' CO2MOL = ',G12.5,' COXY
= ',G12.5,
& /,' OAVAIL = ',G12.5,' OREQD = ',G12.5,/)
C
C If the amount of oxygen required is greater than that in the
wood
C (i.e., OREQD > TOXY), then steam is decomposed (to
hydrogen and oxygen)
C to meet the oxygen demand (STMDEC) and the total amount of
steam is reduced
C by this amount (H2OTOT = H2OTOT - STMDEC). If there is
insufficient steam
C to meet the demand, then an error message is written to the
history file
C asking for more steam. Finally, if there is an excess of oxygen
(which is
C the case if OREQD < TOXY), then the excess oxygen is
calculated (OXY = TOXY
C - OREQD) and added to the existing char oxygen (COXY =
COXY + OXY).
C
IF (OREQD .GT. TOXY) THEN
STMDEC = (OREQD - TOXY)
H2OTOT = H2OTOT - STMDEC
IF (H2OTOT .LT. 0) THEN
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'NEED MORE STEAM FOR
ELEMENTAL BALANCE'
ENDIF
WRITE (USER_NHSTRY,994) STMDEC
994 FORMAT(/,' STEAM DECOMPOSITION = ',G12.5,'
MOLES',/)
OXY = 0
ELSE
OXY = TOXY - OREQD
ENDIF
C
IF (OXY .GT. 0) THEN
WRITE(USER_NHSTRY,*)
+ 'MOLES OF ADDITIONAL OXYGEN (O) TO CHAR =
',OXY
COXY = COXY + OXY
OXY = 0
ENDIF
C
C ***** SULFUR BALANCE *****
C
C All gaseous sulfur is present as H2S and all solid sulfur
appears
C in the char. The amount of H2S is calculated as the difference
between
C the total sulfur in the wood and the percentage of sulfur
retained in
C the char, REAL(4).
C
H2SMOL = TSULF * ( 1.D0 - REAL(4)/100.D0 )
CSULF = TSULF * (REAL(4)/100.D0)
C
C ***** HYDROGEN BALANCE *****
C
C First, the hydrogen present in the char is determined from the
specification
C for nitrogen in the char, REAL(3), as well as the H/C ratio,
REAL(5). Any
C nitrogen in the product gas is assumed to be as ammonia.
C
C AMMOL - AMMONIA NITROGEN MOLE FLOW (KMOL/S)
C CNIT - NITROGEN IN CHAR (KMOL/S) - USED LATER IN
CHAR OUTPUT
C TRNIT - NITROGEN IN THE WOOD (KMOL/S)
C REAL(3) IS % OF NITROGEN RETAINED IN CHAR.
C
AMMOL = TRNIT * (1.D0 - REAL(3)/100.D0)
CNIT = TRNIT * (REAL(3)/100.D0)
C
C REAL(5) IS H/C MASS RATIO IN CHAR
C CCARB - IS THE CHAR CARBON
C CHRHYD - IS THE CHAR HYDROGEN
C GASHYD - IS THE GASEOUS HYDROGEN
C THYD - IS THE HYDROGEN IN THE WOOD
C STMDEC - IS ANY STEAM DECOMPOSED TO H2 AND O IN
OXYGEN BALANCE ABOVE
C
```



C The hydrogen required (HREQD) is the sum of the hydrogen in the char and

C the hydrogen in the product gas. The amount of hydrogen available (HAVAIL)

C is calculated as the hydrogen in the feed (THYD) plus the hydrogen from any

C steam decomposition from the oxygen balance (STMDEC).

C

```
CHRHYD = ( CCARB*CMW * REAL(5) ) / HMW
```

```
GASHYD = 2.D0*H2MOL + 4.D0*CH4MOL +
6.D0*(C2H6MOL) + 6.D0*C6H6MOL
```

```
& + 3*AMMOL + 2*H2SMOL + 8*TARMOL + 4*C2H4MOL
+ 2*C2H2MOL
```

```
HREQD = GASHYD + CHRHYD
```

```
HAVAIL = THYD + STMDEC*2.D0
```

```
WRITE(USER_NHSTRY,995)
```

```
+ AMMOL,H2SMOL,GASHYD,CHRHYD,HAVAIL,HREQD
```

```
995 FORMAT(/, ' MOLES',/, ' NH3 ',G12.5, ' H2S ',G12.5,
```

```
& ' GASEOUS HYDROGEN',G12.5,/, ' CHAR HYDROGEN
',G12.5,
```

```
& ' AVAIL. HYDROGEN',G12.5,
```

```
& ' REQ. HYDROGEN',G12.5)
```

C

C CHECK IF THERE IS ENOUGH HYDROGEN AVAILABLE

C

C The amount of hydrogen available should be equal to or greater than the

C hydrogen required (HAVAIL >= HREQD). If it is not, the routine

C cannot decompose or generate steam to balance the equation and so a severe

C error (86004) is generated and the user is instructed to increase the steam

C to wood ratio.

C

```
IF (HREQD .GT. HAVAIL) THEN
```

```
ISEV=1
```

```
IF
```

```
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86004,USER_LMSG,USER_IMISS,
0,0,2)
```

```
+ .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,164)
```

C

```
164 FORMAT(6X,'PREDICTED HYDROGEN YIELD EXCEEDS
HYDROGEN AVAILABLE '
```

```
& ,/,6X,' STEAM TO WOOD RATIO MUST BE INCREASED ')
```

C

C CHECK IF HYDROGEN REQUIRED EXCEEDS THAT IN THE WOOD

C

C If HREQD is less than HAVAIL, but greater than that in the wood (THYD),

C calculate hydrogen which does not come from steam decomposition in the

C oxygen balance and write a message to the history file with that amount.

C

C H2STM - IS THE EXCESS HYDROGEN THAT IS NOT IN THE WOOD

C XSHYD - IS INFORMATIONAL ONLY AND IS THE AMOUNT OF EXCESS HYDROGEN THAT

C DOES NOT COME FROM STEAM DECOMPOSITION IN THE OXYGEN BALANCE.

C

```
ELSE IF (HREQD .GT. THYD) THEN
```

```
H2STM = HREQD - THYD
```

```
XSHYD = (2.D0*STMDEC) - H2STM
```

```
WRITE (USER_NHSTRY,950) XSHYD
```

```
950 FORMAT(/,'NOTE:H2 BALANCE HAD ',G12.5, ' EXCESS
MOLES HYDROGEN
```

```
& NOT FROM STEAM DECOMPOSITION FOR
OXYGEN BALANCE',/)
```

```
END IF
```

C

C HYD - IS THE EXCESS HYDROGEN.

C

```
HYD = (HAVAIL - HREQD)
```

```
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'Excess hydrogen, HYD = ',HYD
```

C

C CHRHYD - IS THE CHAR HYDROGEN

C THE EXCESS HYDROGEN IS ADDED TO CHAR

C

```
CHRHYD = HYD + CHRHYD
```

```
WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHRHYD = ',CHRHYD
```

C

C

```
C *****
```

```
DEFINE OUTLET STREAM
```

```
C *****
```

C

C

```
C ***** FILL IN OUTLET FLOWS*****
```

C

```
DO 250 I=1,NSUBS
```

```
GOTO (200,210,220), ITYPE(I)
```

C

```
C ***** MIXED SUBSTREAM *****
```



```
C
200 CONTINUE
  SOUT(L1 + NO2) = OXY/2.D0
  SOUT(L1 + NCO) = SOUT(L1 + NCO) + COMOL
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CO X MOLS OUT =
,SOUT(L1+NCO)
  SOUT(L1 + NCO2) = SOUT(L1 + NCO2) + CO2MOL
C
C
  SOUT(L1 + NH2) = SOUT(L1 + NH2) + H2MOL
  SOUT(L1 + NH2O) = H2OTOT
  SOUT(L1 + NH2S) = SOUT(L1 + NH2S) + H2SMOL
  SOUT(L1 + NNH3) = SOUT(L1 + NNH3) + AMMOL
  SOUT(L1 + NTAR) = SOUT(L1 + NTAR) + TARMOL
  SOUT(L1 + NC2H2) = SOUT(L1 + NC2H2) + C2H2MOL
  SOUT(L1 + NC2H6) = SOUT(L1 + NC2H6) + C2H6MOL
  SOUT(L1 + NC2H4) = SOUT(L1 + NC2H4) + C2H4MOL
  SOUT(L1 + NCH4) = SOUT(L1 + NCH4) + CH4MOL
  SOUT(L1 + NC6H6) = SOUT(L1 + NC6H6) +
C6H6MOL
C
C FILL IN TOTAL FLOW AND AVERAGE MOLECULAR
WEIGHT
C
  CALL SHS_CPACK(SOUT(IDXSUB(1)),NCP,IDX,X,FLOW)
  SOUT(L1+NCOMP_NCC+1)=FLOW
  SOUT(L1+NCOMP_NCC+9)=PPUTL_AVEMW(NCP,IDX,X)
  GOTO 250
C
C ***** CISOLID SUBSTREAM *****
C
210 CONTINUE
  DO J=1 ,NCOMP_NCC
    SOUT(L2 + J) = SIN(L2 + J)
  ENDDO
  CALL SHS_CPACK(SOUT(IDXSUB(2)),NCP,IDX,X,FLOW)
  SOUT(L2+NCOMP_NCC+1)=FLOW
  SOUT(L2+NCOMP_NCC+9)=PPUTL_AVEMW(NCP,IDX,X)
  GOTO 250
C
C ***** NC SUBSTREAM *****
C
220 CONTINUE
C
C CALCULATE CHAR FLOW AND ULTIMATE ANALYSIS
(%ASH, %CARBON, %HYDROGEN,
%NITROGEN, %SULFUR,
%OXYGEN)
C CHAR OUT = TOTAL ASH IN + (CHAR CARBON)*(CARBON
MW) +
C (CHAR HYDROGEN)*(HYDROGEN MW) +
C (CHAR OXYGEN)*(OXYGEN MW) +
C (CHAR NITROGEN)*(NITROGEN MW) +
C (CHAR SULFUR)*(SULFUR MW)
C
C **** FOLLOWING LINE ADDED (WAMOS 6/16/98)
C **** AND ASH IN ADDED TO CHAR AND CHAR ULTANAL
C
  TASH2 = SIN(L3 + NASH)
  CHAR = TASH + TASH2 + CCARB*CMW +
1 CHRHYD*HMW +
2 COXY*OMW +
3 CNIT*XNMW +
4 CSULF*SMW
  WRITE(USER_NHSTRY,*)'TASH,TASH2= ',TASH, TASH2
  SOUT(IULTCH+1) = (TASH + TASH2) / CHAR * 100.D0
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR ASH = ',SOUT(IULTCH+1)
  SOUT(IULTCH+2) = CCARB*CMW / CHAR * 100.D0
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR CARBON =
,SOUT(IULTCH+2)
  SOUT(IULTCH+3) = CHRHYD*HMW / CHAR * 100.D0
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR HYDROGEN =
,SOUT(IULTCH+3)
  SOUT(IULTCH+4) = CNIT*XNMW / CHAR * 100.D0
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR NITROGEN =
,SOUT(IULTCH+4)
  SOUT(IULTCH+6) = CSULF*SMW / CHAR * 100.D0
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR SULFUR =
,SOUT(IULTCH+6)
  SOUT(IULTCH+7) = COXY*OMW / CHAR * 100.D0
  WRITE(USER_NHSTRY,*) 'CHAR OXYGEN =
,SOUT(IULTCH+7)
C
C SET THE OUTLET CHAR SULFANAL (Sum must add up to %
in char ultimate
C analysis for sulfur)
C SET THE SULFANAL SO THAT 50% OF THE SULFUR IS
SULFAT AND 50% IS ORGANIC
C NO PYRITIC
C
  SOUT(ISLFCH+1) = 0
  SOUT(ISLFCH+2) = 0.5*SOUT(IULTCH+6)
  SOUT(ISLFCH+3) = 0.5*SOUT(IULTCH+6)
```




```

WRITE(USER_NHSTRY,*)'ISLFCH1= ',SOUT(ISLFCH+1)
WRITE(USER_NHSTRY,*)'ISLFCH2= ',SOUT(ISLFCH+2)
WRITE(USER_NHSTRY,*)'ISLFCH3= ',SOUT(ISLFCH+3)

C
C SET OUTLET NC COMPONENT FLOWS
C
SOUT(L3 + NWOOD) = 1.D-10
SOUT(L3 + NASH) = 1.D-10
SOUT(L3 + NCHAR) = SOUT(L3 + NCHAR) + CHAR
C
C DETERMINE TOTAL OUTLET NC SUBSTREAM FLOW
C
TOTNC = 0.D0
DO 230 J=1,NCOMP_NNCC
TOTNC = TOTNC + SOUT(L3+J)
230 CONTINUE
SOUT(L3+NCOMP_NNCC+1) = TOTNC
250 CONTINUE
C
C *****
C HEAT BALANCE
C *****
C
C ADD UP INLET ENTHALPY
C
CALL SHS_TOTENT(SIN,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,ENTHIN)
C
C FIND OUTLET STREAM ENTHALPY (TP FLASH)
C
CALL FLSH_FLASH(
+ SOUT,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,NBOPST,2,2,1,30,1.D-4,
+
TOUT,POUT,GUESS,USER_LMSG,USER_LPMSG,USER_IRES
TR,2,RETN,
+ IRETN,LCFLAG)
CALL
SHS_TOTENT(SOUT,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,ENTOUT)
C
C CALCULATE DUTY AND RETURN
C
Q = ENTHIN-ENTOUT
IF (USER_LMSG .GE. 4) WRITE(USER_NHSTRY,300)
+ ENTHIN,ENTOUT,Q
300 FORMAT(6X,'HIN =',E13.5,' HOUT =',E13.5,' Q =',E13.5)

```

```

RETURN
C
C *****
C TERMINAL ERROR SECTION
C *****
C
820 ISEV=0
IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86001,USER_LMSG,USER_IMISS,
0,0,2)
+ .NE. 0) GOTO 840
WRITE(USER_NHSTRY,825)
825 FORMAT(6X,'IMPROPER STREAM
STRUCTURE.',/,'6X','STREAM STRUCTURE ',
1 'MUST BE MIXED + CISOLID + NC, IN THAT ORDER.')
840 RETURN
END

```

9.1.2 Anexo 2

En este anexo se presenta el código programado en Fortran para la simulación de la etapa de la descomposición del producto carbonado (Char) para su separación en componentes convenciones.

```

C
SUBROUTINE USRDC1
(NSIN,NINFI,SIN1,SIN2,SIN3,SIN4,
1 SINFI,NSOUT,NINFO,SOUT1,SOUT2,SOUT3,SOUT4,
2 SINFO,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,NINT,INT,NREAL,
3 REAL,IDS,NPO,NBOPST,NIW,IW,NW,W,NSIZE,SIZE)
C
C
C MODULE TITLE: COAL DECOMPOSITION UNIT
OPERATION BLOCK
C
C PURPOSE: DECOMPOSE ATTRIBUTED
COMPONENTS TO THEIR CONSTITUENT
C ELEMENTS ON COMPONENT'S ULTIMATE
ANALYSIS
C
C WRITTEN BY: K. R. STONE DATE
WRITTEN: 8/20/84

```



```

C
C   BASED ON CODE WRITTEN BY OAK RIDGE
NATIONAL LAB
C
C
C
C   VARIABLES IN ARGUMENT LIST
C
C   VAR I/O TYPE DIM DESCRIPTION
C
C   SINFI I R      INLET HEAT STREAM VECTOR
C   SIN1 I/O R      INLET MATERIAL STREAM
VECTOR
C   SOUT1 O R      OUTLET MATERIAL
STREAM VECTOR
C   NSUBS I I      NUMBER OF SUBSTREAMS
C   IDXSUB I I      NSUBS SUBSTREAM INDEX
VECTOR
C   ITYPE I I      NSUBS SUBSTREAM TYPE
VECTOR
C   NINT I I      LENGTH OF INTEGER VECTOR
C   INT I/O I NINT INTEGER VECTOR
C   NREAL I I      LENGTH OF REAL VECTOR
C   REAL I/O R NREAL REAL VECTOR
C   IDS I I 2,13 ID VECTOR
C   NPO I I      NUMBER OF PHYSICAL
PROPERTY OPTIONS
C   NBOPT I I 3,NPO PHYSICAL PROPERTY
OPTION SET POINTERS
C   NIW I I      LENGTH OF THE INTEGER
WORK VECTOR
C   IW I I NIW INTEGER WORK VECTOR
C   NW I I      LENGTH OF THE REAL WORK
VECTOR
C   W I R NW REAL WORK VECTOR
C
C
C
C   IMPORTANT INTERNAL VARIABLES
C
C   VAR TYPE DIM DESCRIPTION
C
C   LOC1 I      LOC1=IDXSUB(1)-1, WHERE
IDXSUB(1) = BEGINNING
C
C
C   OF THE FIRST SUBSTREAM
(MIXED)
C   LOC2 I      LOC2=IDXSUB(2)-1, WHERE
IDXSUB(2) = BEGINNING
C
C   OF THE SECOND SUBSTREAM
(CISOLID)
C   LOC3 I      LOC3=IDXSUB(3)-1, WHERE
IDXSUB(3) = BEGINNING
C
C   OF THE THIRD SUBSTREAM (NC)
C   LULT I      OFFSET IN THE STREAM VECTOR
TO THE ULTIMATE
C
C   ANALYSIS OF THE DESIRED
COMPONENT
C   IDX O 99 COMPONENT INDEX VECTOR
C   X O 99 COMPONENT MOLAR FRACTION
VECTOR
C
C
C
*****
*
C   ERROR CONDITIONS:
C
*****
*
C   NUMBER LEVEL TYPE
C
C   86000 0 TERMINAL
C
C   FORMULAS ARE REQUIRED FOR H2, O2, N2,
H2O, C, S.
C   CHECK FORMULA STATEMENT IN INPUT FILE.
C
C   86001 0 TERMINAL
C
C   IMPROPER STREAM STRUCTURE.
C   STREAM STRUCTURE MUST BE MIXED +
CISOLID + NC, IN THAT ORDER.
C
C
C   86020 2 ERROR
C
C   CL2 MUST NOT BE PRESENT IN ULTANAL.
CHLORINE FRACTION
C   WILL BE SET TO ZERO AND THE OTHER
COMPONENTS NORMALIZED.
C
C   86021 2 ERROR

```



```

C
C   SUM OF ULTANAL (XX) DOES NOT EQUAL 100
C   PERCENT. VALUES NORMALIZED.
C
C
C
C
*****
C           SUBROUTINES AND FUNCTIONS
C
*****
C
C   NAME - DMS_LOCATI
C   TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C   DESC - LOCATES THE INTEGER INDEX OF A
C   SPECIFIC BEAD AND
C           TO READ THE BEAD INTO CORE, IF
C   NECESSARY
C   CALL - LBI = DMS_LOCATI(NBX)
C   INPUT:
C   NBX      INT      BEAD NUMBER
C   OUTPUT:
C   DMS_LOCATI  INT      LOCATION OF
C   BEAD IN INTEGER PLEX
C
C   NAME - SHS_LOCATS
C   TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C   DESC - LOCATES A STREAM BEAD, GIVEN ITS
C   BEAD NUMBER
C           AND FINDS THE BEAD NUMBER AND
C   LOCATION OF THE
C   DESCRIPTOR BEAD
C   CALL - CALL SHS_LOCATS(NB,LVI,LVR,LD,NBD)
C   INPUT:
C   NB           INT      STREAM BEAD
C   NUMBER
C   OUTPUT:
C   LVI      INT      INTEGER      PLEX
C   LOCATION OF STREAM BEAD
C   LVR      INT      REAL PLEX LOCATION
C   OF THE REAL PORTION
C           OF THE BEAD
C   LD           INT      INTEGER PLEX
C   LOCATION OF THE DESCRIPTOR
C           BEAD.
C
C   NBD      INT      DESCRIPTOR      BEAD
C   NUMBER
C
C
C   NAME - SHS_APSCPY
C   TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C   DESC - STREAM COPIER
C   CALL - CALL SHS_APSCPY(LD,LVR1,LVR2)
C   INPUT:
C   LD           INT      STARTING PLEX
C   LOCATION FOR STREAM
C           CLASS DESCRIPTOR BEAD.
C   LVR1      INT      STARTING      PLEX
C   LOCATION FOR REAL PART
C           OF THE STREAM TO BE COPIED
C   LVR2      INT      STARTING      PLEX
C   LOCATION FOR REAL PART
C           OF STREAM WHERE 1ST
C   STREAM IS COPIED
C
C   NAME - DMS_KCCIDC (CONV COMPS) AND
C   KNCIDC (NC COMPS)
C   TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C   DESC - DETERMINES COMP SEQ NUMBER IN
C   DMS_NCOMPS
C   CALL - J = DMS_KCCIDC(CIDC) OR J =
C   DMS_KCCIDC(CIDNC)
C   INPUT:
C   CIDC      CHAR      CONVENTIONAL COMP
C   ID
C   CIDNC     CHAR      NC COMP ID
C   OUTPUT:
C   J           INT      COMPONENT INDEX
C
C   NAME - SHS_CPACK
C   TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C   DESC - PACKS A STREAM VECTOR
C   CALL - CALL SHS_CPACK(SUBSTR, NCP, IDX, X,
C   FLOW)
C   INPUT:
C   SUBSTR REAL VECTOR      OF
C   COMPONENT FLOWS
C   OUTPUT:
C   NCP      INT      NUMBER      OF
C   COMPONENTS PRESENT

```



```

C      IDX      INT      COMPONENT      INDEX      C      TOL,
VECTOR DIM = NCP                                KODE, NPKODE, KPHASE, MAXIT,
C      X              REAL  PACKED  MOLE      C      SPEC1, SPEC2, GUESS, LMSG,
FRACTION              DIM = NCP                LPMSG,
C      FLOW      REAL  TOTAL      SUBSTREAM      C      JRES, KRESLT, RETN, IRETN,
FLOW (KG-MOL/S)                                     LCFLAG)
C
C      INPUT:
C      NAME - PPUTL_AVEMW
C      TYPE - ASPEN PLUS FUNCTION
C      DESC - AVERAGE SUBSTREAM MOLECULAR
WEIGHT
C      CALL - AMW = PPUTL_AVEMW(N, IDX, X)
C      INPUT:
C      N      INT      NUMBER      OF
COMPONENTS
C      IDX      INT      COMPONENT      INDEX
ARRAY DIM = N
C      X              REAL  MOLE
FRACTION ARRAYDIM = N
C      OUTPUT:
C      AMW      REAL  AVERAGE  MOLECULAR
WEIGHT
C
C      NAME - SHS_TOTENT
C      TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C      DESC - CALCULATES TOTAL STREAM
ENTHALPY
C      CALL - CALL
SHS_TOTENT(SIN, NSUBS, IDXSUB, ITYPE, TENTH)
C      INPUT:
C      SIN      REAL  STREAM VECTOR DIM = 1
C      NSUBS      INT  NUMBER      OF
SUBSTREAMS
C      IDXSUB      INT  INDEX      VECTOR      OF
SUBSTREAM DIM=NSUBS
C      ITYPE      INT  SUBSTREAM      TYPE
VECTOR DIM=NSUBS
C      OUTPUT:
C      TENTH      REAL  TOTAL      STREAM
ENTHALPY
C
C      NAME - FLSH_FLASH
C      TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C      DESC - GENERAL PURPOSE FLASH INTERFACE
ROUTINE FROM ASPEN PLUS
C      CALL - CALL FLSH_FLASH(SVEC, NSUBS,
IDXSUB, ITYPE, NBOPST,
C      TOL,
SPEC1, SPEC2, GUESS, LMSG,
JRES, KRESLT, RETN, IRETN,
LCFLAG)
C      INPUT:
C      SVEC      REAL  STREAM VECTOR
C      NSUBS      INT  NUMBER      OF
SUBSTREAMS
C      IDXSUB      INT  LOCATION      OF
SUBSTREAMS DIM=NSUBS
C      ITYPE      INT  SS      TYPE
VECTOR DIM=NSUBS
C      NBOPST      INT  PHYSICAL  PROPERTY
SET ARRAY DIM=6
C      KODE      INT  FLASH OPTION CODE
C      NPKODE      INT  MAXIMUM  PHASES  IN
MIXED SS
C      KPHASE      INT  PHASE WHEN NPKODE=1
C      MAXIT      INT  MAXIMUM NUMBER OF
ITERATIONS
C      TOL      REAL  CONVERGENCE
TOLERANCE
C      SPEC1      REAL  1ST      SPECIFIED
VARIABLE
C      SPEC2      REAL  2ND      SPECIFIED
VARIABLE
C      GUESS      REAL  INITAL GUESS
C      LMSG      INT  LOCAL  DIAGNOSTIC
MESSAGE LEVEL
C      LPMSG      INT  LOCAL
PHYSICAL PROPERTY DIAGNOSTIC LVL
C      JRES      INT  SIMULATION  RESTART
FLAG
C      KRESLT      INT  RESULT  CALCULATION
FLAG
C      RETN      REAL  REAL      RETENTION
VECTOR
C      IRETN      INT  INTEGER  RETENTION
VECTOR
C      OUTPUT:
C      SVEC      REAL  STREAM VECTOR
C      RETN      REAL  REAL      RETENTION
VECTOR
C      IRETNINT      INTEGER  RETENTION
VECTOR
C      LCFLAG      INT  LOCAL  CONVERGENCE
FLAG

```



```

C
C   NAME - DMS_IRRCHK
C   TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C   DESC - ERROR CHECKING ROUTINE
C   CALL - IRPT = DMS_IRRCHK(IPROG, ISEV,
C   ICODE, LDIAG, LTERM,
C           IESCAL, IPHYS, NHEAD)
C   INPUT:
C   IPROG  INT    CALLING  SUBROUTINE
C   NAME   DIM=2
C   ISEV   INT    ERROR SEVERITY
C   ICODE  INT    ERROR NUMBER
C   LDIAG  INT    DIAGNOSTIC LEVEL
C   LTERM  INT    TERMINAL  DIAGNOSTIC
C   LEVEL
C   IESCAL INT    ERROR
C   ESCALATION LEVEL
C   IPHYS  INT    TYPE OF S/R (PHYS
C   PROP OR NOT)
C   NHEAD INT    AMOUNT OF HEADER
C   INFO PRINTED
C   OUTPUT:
C   IPRT   INT    PRINTING INFO (0=DON'T
C   PRINT; 1=PRINT)
C
C   NAME - DMS_ERROR
C   TYPE - ASPEN PLUS SUBROUTINE
C   DESC - COUNTS THE TYPES OF ERRORS
C   FOUND AND TERMINATES
C   ASPEN IF THE ERRORS EXCEED A
C   MAXIMUM
C   CALL - DMS_ERROR(ISEV,ICLASS)
C   INPUT:
C   ISEV   INT    SEVERITY CODE
C   ICLASS INT    ERROR CLASS CODE
C
C
C *****
C **
C   USING THIS MODEL:
C
C   CL2 IS NOT USED, AS IT WOULD THEN BE A
C   REQ'D COMP IN THE SIMULATION
C   ANY CHLORINE IN THE COAL WILL BE LOST.
C

```

```

C   ALL NC COMPONENTS EXCEPT 'ASH' ARE
C   DECOMPOSED, SO MORE THAN ONE TYPE
C   OF COAL MAY BE PRESENT.
C
C   STREAMS MUST BE MIXED, CISOLID AND NC.
C
C   FORMULAS MUST BE AVAILABLE FOR H2O, H2,
C   O2, N2, CARBON AND SULFUR.
C
C
C *****
C ***
C *****
C   DECLARATIONS & COMMONS
C *****
C
C           ***** REAL
C   VARIABLES/FUNCTIONS*****
C (DESCRIPTIONS OF FUNCTIONS ABOVE)
C   IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C   REAL*8 PPUTL_AVEMW
C
C           ***** INTEGER
C   VARIABLES/FUNCTIONS*****
C (DESCRIPTIONS OF FUNCTIONS ABOVE)
C
C   INTEGER DMS_LOCATI
C   INTEGER DMS_KCCIDC
C   INTEGER DMS_KNCIDC
C   INTEGER IDSCCX
C   INTEGER IDSNCX
C   INTEGER XMW
C   INTEGER IDXNCX
C   INTEGER IPROX
C   INTEGER IULT
C   INTEGER DMS_IRRCHK
C   INTEGER DMS_IFCMNC
C
C           INTEGER LFRMU, LIDSC, LIDSN, LMW,
C   LIDXN, LPRXA, LULTA
C   INDEX VARIABLES FOR ACCESSING COMPONENT
C   DATA IN THE PLEX
C   LFRMU - INDEX FOR COMPONENT FORMULA

```



C LIDSC - INDEX FOR CONVENTIONAL COMPONENT ID

C LIDSN - INDEX FOR NON-CONVENTIONAL COMPONENT ID

C LMW - INDEX FOR MW

C LIDXN - INDEX FOR POINTER TO COMPONENT ATTRIBUTE ARRAY

C FOR ATTRIBUTED COMPONENTS

C LPRXA - INDEX FOR PROXIMATE ANALYSIS

C LULTA - INDEX FOR ULTIMATE ANALYSIS

C

C ***** #INCLUDE STATEMENTS

C THESE ARE ASPEN PLUS COMMON BLOCKS

C USED BY VARIOUS UTILITIES WITHIN THE SUBROUTINE

C

#include "ppexec_user.cmn"

C STORES RUN CONTROL FLAGS

#include "dms_plex.cmn"

C IN-CORE STORAGE AREA FOR THE PLEX. STORES RUN-TIME INFO.

C CONSISTS OF INTEGER, IB(1), AND REAL B(1) ARRAYS

C EQUIVALENCED TO EACH OTHER.

#include "dms_ncomp.cmn"

C NUMBERS OF COMPONENTS AND LENGTHS OF COMPONENT-RELATED

C STREAM SEGMENTS

#include "dms_rglob.cmn"

C DMS_RGLOB CONTAINS REAL, GLOBAL SPECIFICATIONS SUCH AS THE MISSING

C CODE FOR REAL NUMBERS, RGLOB_RMISS

#include "dms_rptglob.cmn"

C DMS_RPTGLB CONTAINS REPORT WRITER FLAGS AND SPACE FOR SUBSECTION

C HEADINGS

C

C ***** ARRAY SPECIFICATIONS

C

DIMENSION IPROG(2)

DIMENSION SIN1(1), SIN2(1), SIN3(1), SIN4(1), SINFI(1),

1 SOUT1(1), SOUT2(1), SOUT3(1), SOUT4(1), SINFO(1),

2 IDXSUB(NSUBS), ITYPE(NSUBS), INT(NINT), REAL(NREAL),

3 IDS(2,13), NBOPST(3,NPO), IW(NIW), W(NW), SIZE(NSIZE)

DIMENSION RETN(337), IRETN(6)

DIMENSION IDX(99), X(99)

DIMENSION B(1)

DIMENSION PLXANT(9)

C

C ***** EQUIVALENCE STATEMENTS

EQUIVALENCE (RMISS, USER_RUMISS)

EQUIVALENCE (IMISS, USER_IUMISS)

C USER_RUMISS IS A REAL VARIABLE FOR A MISSING CODE

C USER_IUMISS IS AN INTEGER VARIABLE FOR A MISSING CODE

EQUIVALENCE (IB(1), B(1))

C IB AND B ARE THE ARRAYS FOR STORING INFO IN THE PLEX.

C

C ***** COMMON BLOCKS

COMMON /COALMS/ IMISC(1)

C

C ***** STATEMENT FUNCTIONS

C

C THESE ARRAYS HOLD COMPONENT INFORMATION.

C FRMULX - FORMULA (E.G., H₂O)

C IDSCCX - CONVENTIONAL COMPONENT IDS

C IDSNCX - NON-CONVENTIONAL COMPONENT IDS

C IDXNCX - POINTERS INTO THE COMPONENT ATTRIBUTE ARRAY FOR

C ATTRIBUTED COMPONENTS

C IPROX - PROXIMATE ANALYSIS

C IULT - ULTIMATE ANALYSIS

C

FRMULX(I,J) = LFRMU + 3*(J - 1) + I

IDSCCX(I,J) = LIDSC + 2*(J - 1) + I

IDSNCX(I,J) = LIDSN + 2*(J - 1) + I

XMW(I) = LMW + I



```

IDXNCX(I) = LIDXN + I
IPROX(I) = LPRXA + I
IULT(I) = LULTA + I
C
C *****
C          PROGRAM START
C *****
C
C
C CHECK FOR REPORT PASS
      IF (USER_IPASS .EQ. 4) RETURN
C
C CHECK FOR IMPROPER STREAM STRUCTURE
C STREAM MUST BE MIXED, CISOLID, AND NC OR
PROGRAM IS TERMINATED.
C
      IF (NSUBS.NE.3) GOTO 820
      IF (ITYPE(1).NE.1 .OR. ITYPE(2).NE.2 .OR.
ITYPE(3).NE.3) GOTO 820
C
C
C *****
C          DETERMINE LOCATION OF AND ACCESS
COMPONENT DATA
C *****
C
C          DETERMINE PLEX OFFSETS FOR EACH
COMPONENT PARAMETER
C
      LFRMU = DMS_IFCMNC('FRMULA')
      LIDSC = DMS_IFCMNC('IDSCC')
      LIDSN = DMS_IFCMNC('IDSNCC')
      LMW = DMS_IFCMNC('MW')
      LIDXN = DMS_IFCMNC('IDXNCC')
      LPRXA = DMS_IFCMNC('PRXANL')
      LULTA = DMS_IFCMNC('ULTANL')
C
C
C FORMULAS SHOULD BE AVAILABLE FOR H2, O2,
N2, H2O, C, AND S.
C
C FIND COMPONENT INDEX NUMBERS
C
      NASH = DMS_KCCIDC('ASH')
      NH2 = DMS_KCCIDC('H2')
      NO2 = DMS_KCCIDC('O2')
      NN2 = DMS_KCCIDC('N2')
      NH2O = DMS_KCCIDC('H2O')
      NCAR = DMS_KCCIDC('CARBON')
      NSUL = DMS_KCCIDC('SULFUR')
C
C CHECK FOR MISSING FORMULAS
C
      IF (IB(FRMULX(1,NH2)).NE.'H2') IERROR=1
      IF (IB(FRMULX(1,NO2)).NE.'O2') IERROR=1
      IF (IB(FRMULX(1,NN2)).NE.'N2') IERROR=1
      IF (IB(FRMULX(1,NH2O)).NE.'H2O') IERROR=1
      IF (IB(FRMULX(1,NCAR)).NE.'C') IERROR=1
      IF (IB(FRMULX(1,NSUL)).NE.'S') IERROR=1
C
C CALL ERROR ROUTINE AND TERMINATE
PROGRAM
C IF ANY FORMULAS ARE MISSING
C
      IF (USER_LMSG .GE. 8 .OR. IERROR .EQ. 1)
WRITE(
+          USER_NHSTRY,120) NH2,NO2,NN2,
NCAR,NSUL,NASH
      120 FORMAT(6X,'NH2 =',I2,' NO2 =',I2,' NN2 =',I2,'
NCAR =',I2,
      1 ' NSUL =',I2,' NASH =',I2,/)
      121 FORMAT(6X,'IH2 =',I4,' IO2 =',I4,' IN2 =',I4,/'
      1 6X,'ICAR =',I4,' ISUL =',I4,' IASH =',I4,/)
      IF (IERROR.EQ.1) GOTO 800
C
C *****
C          DETERMINE INLET AND INITIAL OUTLET
STREAMS
C *****
C
C COPY INLET STREAM INTO OUTLET STREAM
C
C LOCATE BLOCK BEAD
      LPROC = DMS_LOCATI(2)

```



```

LBSMB = DMS_LOCATI(IB(LPROC+3))
LBLK = IB(LBSMB+5)
C LOCATE STREAM BEADS
NBSIN = IB(LBLK + IB(LBLK+17))
NBSOUT = IB(LBLK + IB(LBLK+19))
CALL SHS_LOCATS(NBSIN,LVI1,LVR1,LD,NBD)
CALL SHS_LOCATS(NBSOUT,LVI2,LVR2,LD,NBD)
C COPY THE STREAM
CALL SHS_APSCPY(LD,LVR1,LVR2)
C
C LOCATE SUBSTREAM ADDRESSES
C
LOC1=IDXSUB(1)-1
LOC2=IDXSUB(2)-1
LOC3=IDXSUB(3)-1
C
C *****
C DECOMPOSITIONS
C *****
C
C DECOMPOSE EVERY NC COMPONENT EXCEPT
'ASH'
C
C INITIALIZE DECOMPOSITION VARIABLES
DECASH=0.0
DECCAR=0.0
DECSUL=0.0
DECH2=0.0
DECN2=0.0
DECO2=0.0
DECH2O=0.0
C DETERMINE THE ULTIMATE ANALYSIS
DO 170 I=1,NCOMP_NNCC
IF (USER_LMSG .GE. 6)
WRITE(USER_NHSTRY,140) I,IB(IDSNXC(
+ 1,I)),IB(IDSNXC(2,I)), IB(IDXNCX(I))
140 FORMAT(6X,'I=',I3,3X,2A4,' IDXNCX(I)=' ,I3)
IF (I .EQ. NASH .OR. SIN1(LOC3+I) .LT.
RGLOBAL_RMIN)
+ GOTO 170
SOUT1(LOC3+I)=0.0
LULT = LOC3+NCOMP_NNCC+9 +
IB(IULT(IB(IDXNCX(I))))
WRITE(USER_NHSTRY,*)'LULT=' ,LULT
IF (LULT.EQ.IMISS .OR. LULT.LT.0) GOTO 170
C
C CHECK THAT ULTANAL SUMS TO 100%
C
SUM = 0.0
DO 141 J=1,7
141 SUM = SUM + SIN1(LULT+J)
IF (SUM.GT.99.99 .AND. SUM.LT.100.01) GOTO 944
IF
(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86021,USER_LMSG,USER
_KFLAG,0,0,0)
+ .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,142) SUM
142 FORMAT(6X,'SUM OF ULTANAL (',F8.4,') DOES
NOT EQUAL 100 PERCENT.',
& ' VALUES NORMALIZED.')
```

```

CALL DMS_ERROR(2,3)
DO 144 J=1,7
SIN1(LULT+J)=SIN1(LULT+J)/(SUM/100.0)
144 CONTINUE
944 CONTINUE
C
C CHECK ULTANAL FOR CHLORINE. IF PRESENT,
SET IT TO ZERO AND
C NORMALIZE THE OTHER COMPONENTS.
C
IF (SIN1(LULT+5) .LE. RGLOBAL_RMIN) GOTO 955
ISEV=2
IF(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86020,USER_LMSG,US
ER_KFLAG,0,0,0)
+ .NE. 0) WRITE(USER_NHSTRY,145)
145 FORMAT(6X,'CL2 MUST NOT BE PRESENT IN
ULTANAL. CHLORINE ',
1 'FRACTION',/,6X,'WILL BE SET TO ZERO AND
THE OTHER COMPONENTS',
2 ' NORMALIZED.')
```

```

150 CALL DMS_ERROR(ISEV,3)
CLFRAC=SIN1(LULT+5)/100.0
SIN1(LULT+5)=0.0
DO 155 J=1,7
SIN1(LULT+J)=SIN1(LULT+J)/(1.0-CLFRAC)

```




```

155 CONTINUE
955 CONTINUE
C
  IF (USER_LMSG .GE. 6)
WRITE(USER_NHSTRY,160) (SIN1(LULT+J)
+ ,J=1,7)
160
      FORMAT(/,6X,'ULTIMATE
ANALYSIS',/,6X,'ASH',F10.6/,6X,
1 'C ',F10.6/,6X,'H2 ',F10.6/,6X,'N2 ',F10.6/,6X,'CL
',
2 F10.6/,6X,'S ',F10.6/,6X,'O2 ',F10.6/,)
C
C *****
C MATERIAL BALANCE
C *****
C
C CALCULATE DRY FLOW
  PCTH2O = SIN1(LOC3+NCOMP_NNCC+9 +
IB(IPROX(IB(IDXNCX(I
+ ))) +1)
  DRYFLO = SIN1(LOC3+I) * (1.D0 - PCTH2O/100.D0)
C
C CALCULATE THE CONVERTED NC COMPS TO
OTHER COMPS:
  DECASH = DECASH + DRYFLO *
SIN1(LULT+1)/100.
  DECH2O = DECH2O + SIN1(LOC3+I) *
PCTH2O/(100.D0*B(XMW(NH2O)))
  DECCAR = DECCAR + DRYFLO *
SIN1(LULT+2)/(100.*B(XMW(NCAR)))
  DECH2 = DECH2 + DRYFLO *
SIN1(LULT+3)/(100.*B(XMW(NH2)))
  DECN2 = DECN2 + DRYFLO *
SIN1(LULT+4)/(100.*B(XMW(NN2)))
  DECSUL = DECSUL + DRYFLO *
SIN1(LULT+6)/(100.*B(XMW(NSUL)))
  DECO2 = DECO2 + DRYFLO *
SIN1(LULT+7)/(100.*B(XMW(NO2)))
170 CONTINUE
  IF (USER_LMSG .GE. 8)
WRITE(USER_NHSTRY,180)
+ DECASH,DECCAR,DECH2,DECN2,
DECSUL,DECO2,DECH2O
180 FORMAT(/,6X,'DECASH =',E15.6,10X,'DECCAR
=',E14.6,
1 /,6X,'DECH2 =',E15.6,10X,'DECN2 =',E15.6,
2 /,6X,'DECSUL =',E15.6,10X,'DECO2 =',E15.6,
3 /,6X,'DECH2O =',E15.6,/)
C
C ADJUST ELEMENTAL FLOW RATES
C
  SOUT1(LOC3+NASH) = SOUT1(LOC3+NASH) +
DECASH
  SOUT1(LOC2+NCAR) = SOUT1(LOC2+NCAR) +
DECCAR
  SOUT1(LOC1+NH2) = SOUT1(LOC1+NH2) +
DECH2
  SOUT1(LOC1+NN2) = SOUT1(LOC1+NN2) +
DECN2
  SOUT1(LOC2+NSUL) = SOUT1(LOC2+NSUL) +
DECSUL
  SOUT1(LOC1+NO2) = SOUT1(LOC1+NO2) +
DECO2
  SOUT1(LOC1+NH2O) = SOUT1(LOC1+NH2O) +
DECH2O
C
C CALCULATE TOTAL FLOW FOR NC SUBSTREAM
C
  SOUT1(LOC3+NCOMP_NNCC+1)=0.0
  DO 320 I=1,NCOMP_NNCC
320
  SOUT1(LOC3+NCOMP_NNCC+1)=SOUT1(LOC3+NCO
MP_NNCC+1) + SOUT1(
+ LOC3+I)
C
C CALCULATE TOTAL FLOW AND AVE MW FOR
CONVENTIONAL SUBSTREAMS
C
  CALL
SHS_CPACK(SOUT1(IDXSUB(1)),NCP,IDX,X,FLOW)
  SOUT1(LOC1+NCOMP_NCC+1)=FLOW
SOUT1(LOC1+NCOMP_NCC+9)=PPUTL_AVEMW(NCP,
IDX,X)
  CALL
SHS_CPACK(SOUT1(IDXSUB(2)),NCP,IDX,X,FLOW)
  SOUT1(LOC2+NCOMP_NCC+1)=FLOW
SOUT1(LOC2+NCOMP_NCC+9)=PPUTL_AVEMW(NCP,
IDX,X)
C
C *****

```



```
C          HEAT BALANCE                                POUT=SIN1(LOC3+NCOMP_NNCC+3)
C
C *****
C
C ADD UP INLET ENTHALPY                                +
C                                                       SOUT1,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,NBOPST,2,2,1,30,1.D-4
C                                                       ,
C                                                       +
CALL SHS_TOTENT(SIN1,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,ENTHIN)        TOUT,POUT,GUESS,USER_LMSG,USER_LPMSG,USE
R_IRSTR,2,RETN,
C                                                       + IRETN,LCFLAG)
C
C WRITE FLOWRATES AND COMPONENT IDS TO                C
HISTORY FILE                                           C ADD UP OUTLET ENTHALPY
C
C IF (USER_LMSG .GE. 8)                                C
WRITE(USER_NHSTRY,330)                                  CALL
330 FORMAT(/,6X,'OUTLET STREAM FLOWRATES              SHS_TOTENT(SOUT1,NSUBS,IDXSUB,ITYPE,ENTOUT
(KGMOL/S)')                                           )
C
C IF (USER_LMSG .GE. 8)                                C
WRITE(USER_NHSTRY,340) (IB(IDSCCX(1,J)                C CALCULATE DUTY AND RETURN
+
),IB(IDSCCX(2,J)),SOUT1(J),J=1,NCOMP_NCC),(IB(IDS      C
NCX(1,J)),IB
+
(IDSNCX(2,J)),SOUT1(LOC3+J),J=1,NCOMP_NNCC)          SINFO(1)=ENTHIN-ENTOUT
340 FORMAT(6X,2A4,E15.5)                               IF (NINFI.GT.0 .AND. SINFI(1).LT.RMISS)
C                                                       SINFO(1)=SINFO(1)+SINFI(1)
C                                                       IF (USER_LMSG .GE. 4)
C FIND INLET STREAM TEMPERATURE. IF IT IS NOT         WRITE(USER_NHSTRY,350)
SPECIFIED,                                             + ENTHIN,ENTOUT,SINFO(1)
C PERFORM A (PQ FLASH)                                350 FORMAT(/,6X,'HIN =',E13.5,' HOUT =',E13.5,' Q
C                                                       =',E13.5,/)
C                                                       USER_ICONVG = 0
C                                                       RETURN
C
C IF (SIN1(LOC3+NCOMP_NNCC+2) .LT. RMISS)            C
GOTO 345                                               C
C                                                       *****
C                                                       ***
C          TERMINAL ERROR SECTION
C
C *****
C                                                       ***
C
C 800 ISEV=0
C
C IF(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86000,USER_LMSG,US        C
ER_KFLAG,0,0,0)
+ .EQ. 0) GOTO 810
C
C WRITE(USER_NHSTRY,805)
C
C 805 FORMAT(6X,'FORMULAS ARE REQUIRED FOR            C
H2, O2, N2, H2O, C, S.',
C
C TOUT=SIN1(LOC3+NCOMP_NNCC+2)
```



```
1 /,6X,'CHECK FORMULA STATEMENT IN INPUT
FILE.')
```

```
810 CALL DMS_ERROR(ISEV,3)
      USER_ICONVG = -10
      RETURN
```

```
C
```

```
820 ISEV=0
```

```
IF(DMS_IRRCHK(IPROG,ISEV,86001,USER_LMSG,US
ER_KFLAG,0,0,0)
+ .EQ. 0) GOTO 830
      WRITE(USER_NHSTRY,825)
      825      FORMAT(6X,'IMPROPER      STREAM
STRUCTURE.',/,6X,'STREAM STRUCTURE ',
1 'MUST BE MIXED + CISOLID + NC, IN THAT
ORDER.')
```

```
830 CALL DMS_ERROR(ISEV,3)
      USER_ICONVG = -20
      RETURN
```

```
END
```