

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS ESPE SEDE LATACUNGA

CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

“MODELADO Y SIMULACIÓN DE UNA COLUMNA PARA LA ABSORCIÓN DE CO₂ GENERADO EN LA PRODUCCIÓN DE ENERGÍA ELÉCTRICA EN LA CENTRAL TÉRMICA DE ESMERALDAS, USANDO UNA SOLUCIÓN DE AMINOMETILPROPANOL (AMP)”

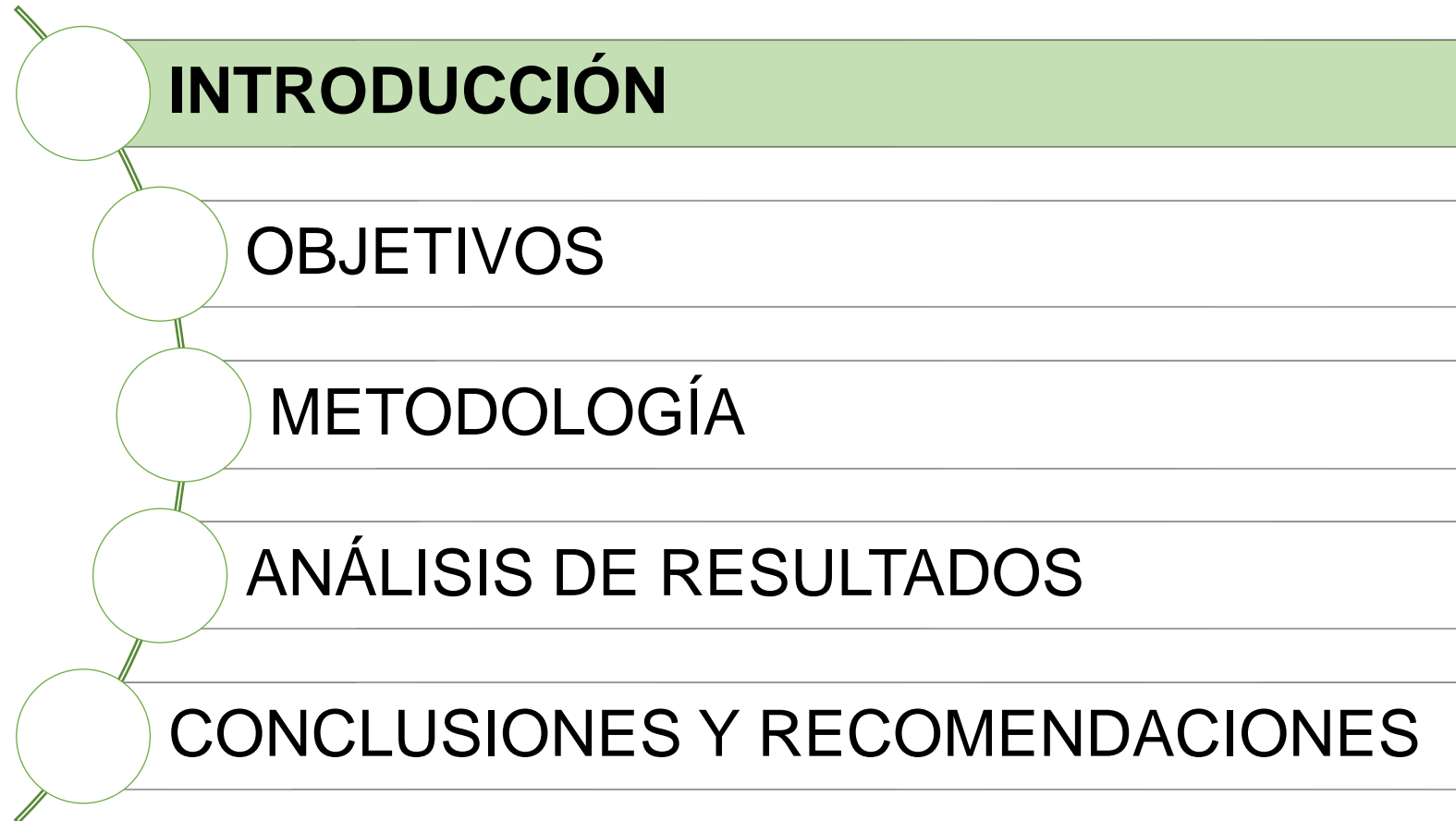
AUTOR: GALLO TAPIA, MARCELO JAVIER

DIRECTOR: Ph.D. RODRÍGUEZ MAECKER, ROMÁN NICOLAY

,

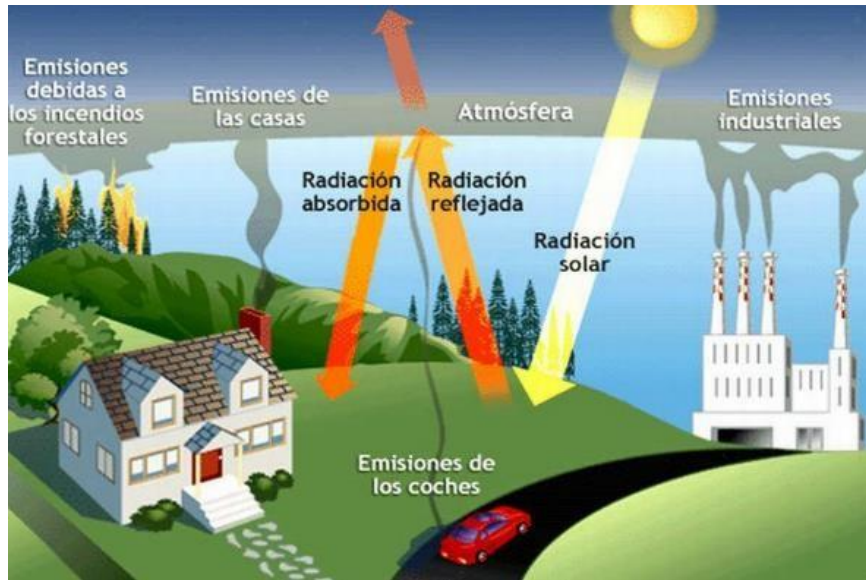


CONTENIDO



INTRODUCCIÓN

- Efecto Invernadero

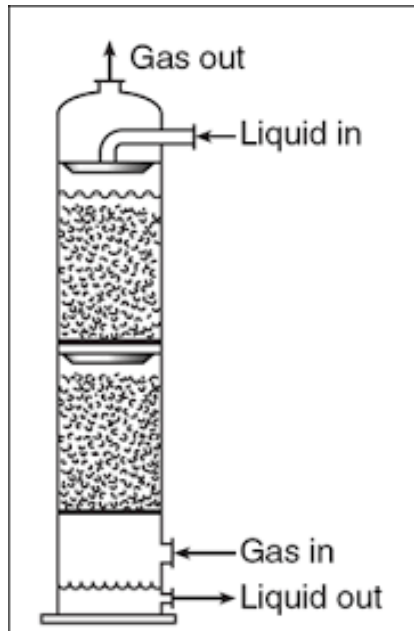


- Centrales Térmicas

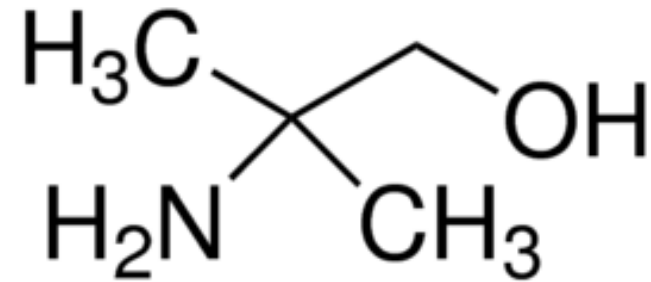


INTRODUCCIÓN

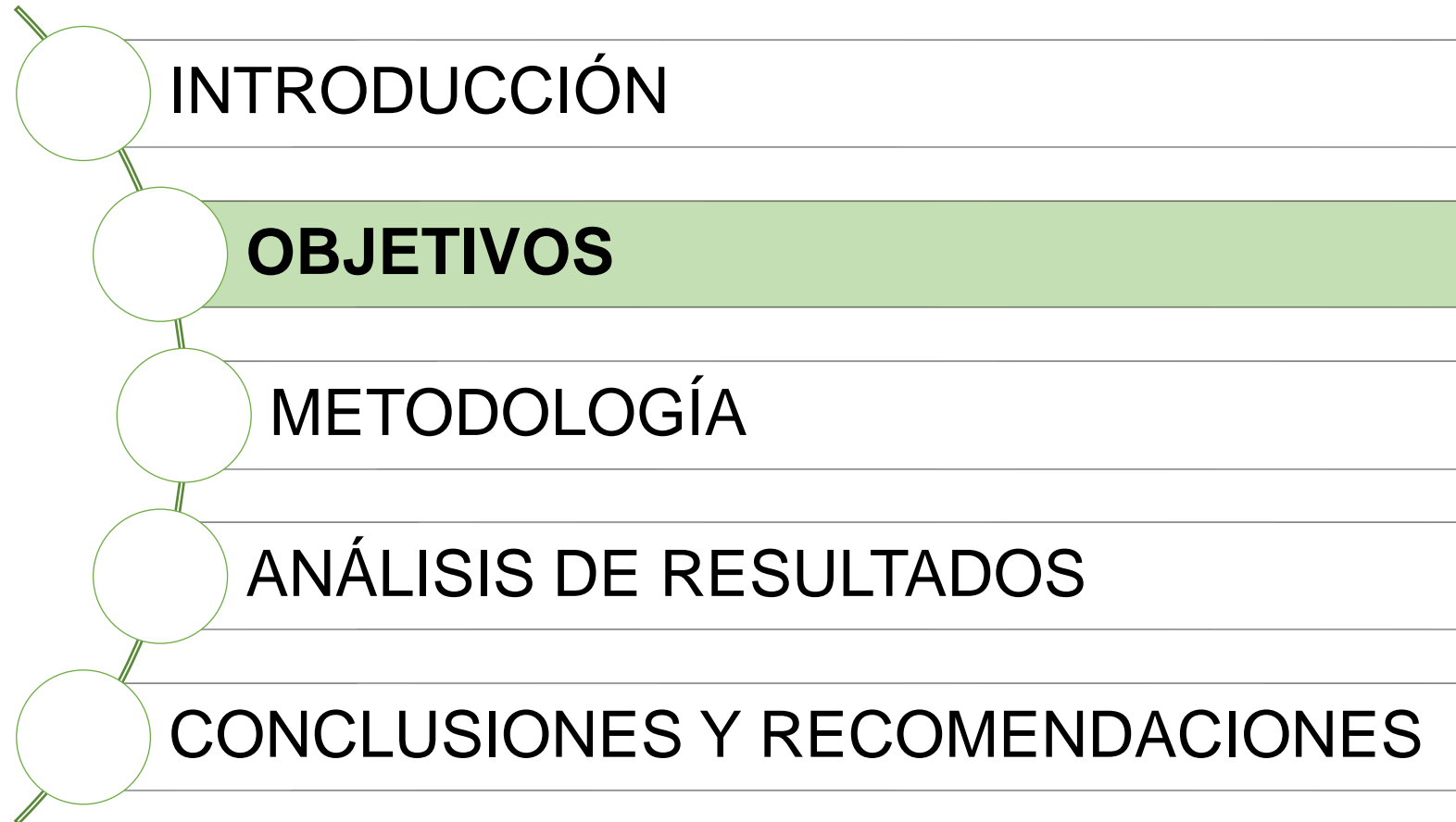
- Columna de absorción



- Aminometilpropanol



CONTENIDO



OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

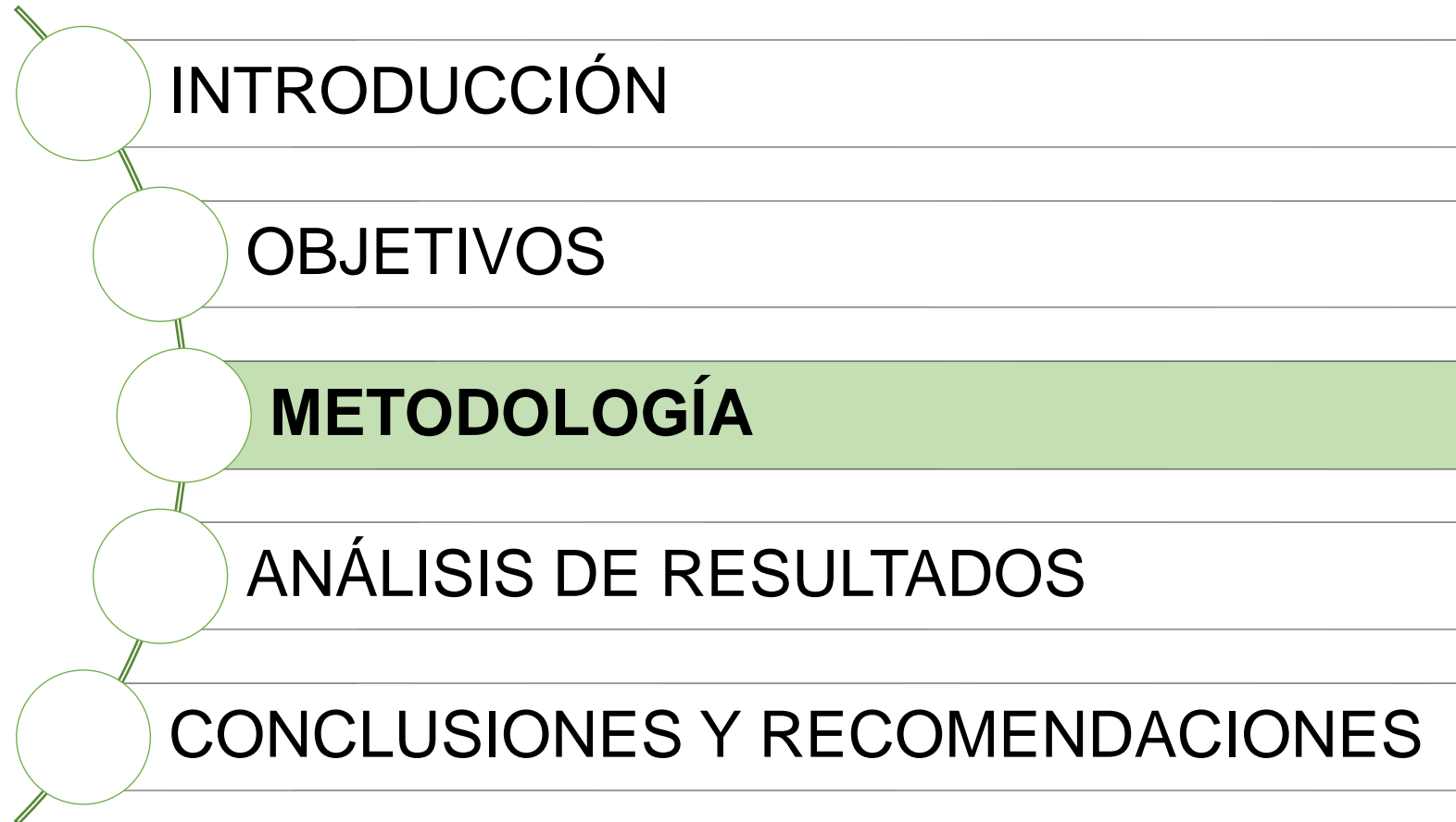
- Modelar y simular una columna para la absorción de CO_2 generado en la producción de energía eléctrica en la central térmica de Esmeraldas, usando una solución de aminometilpropanol (AMP).

OBJETIVOS

OBJETIVO ESPECÍFICOS

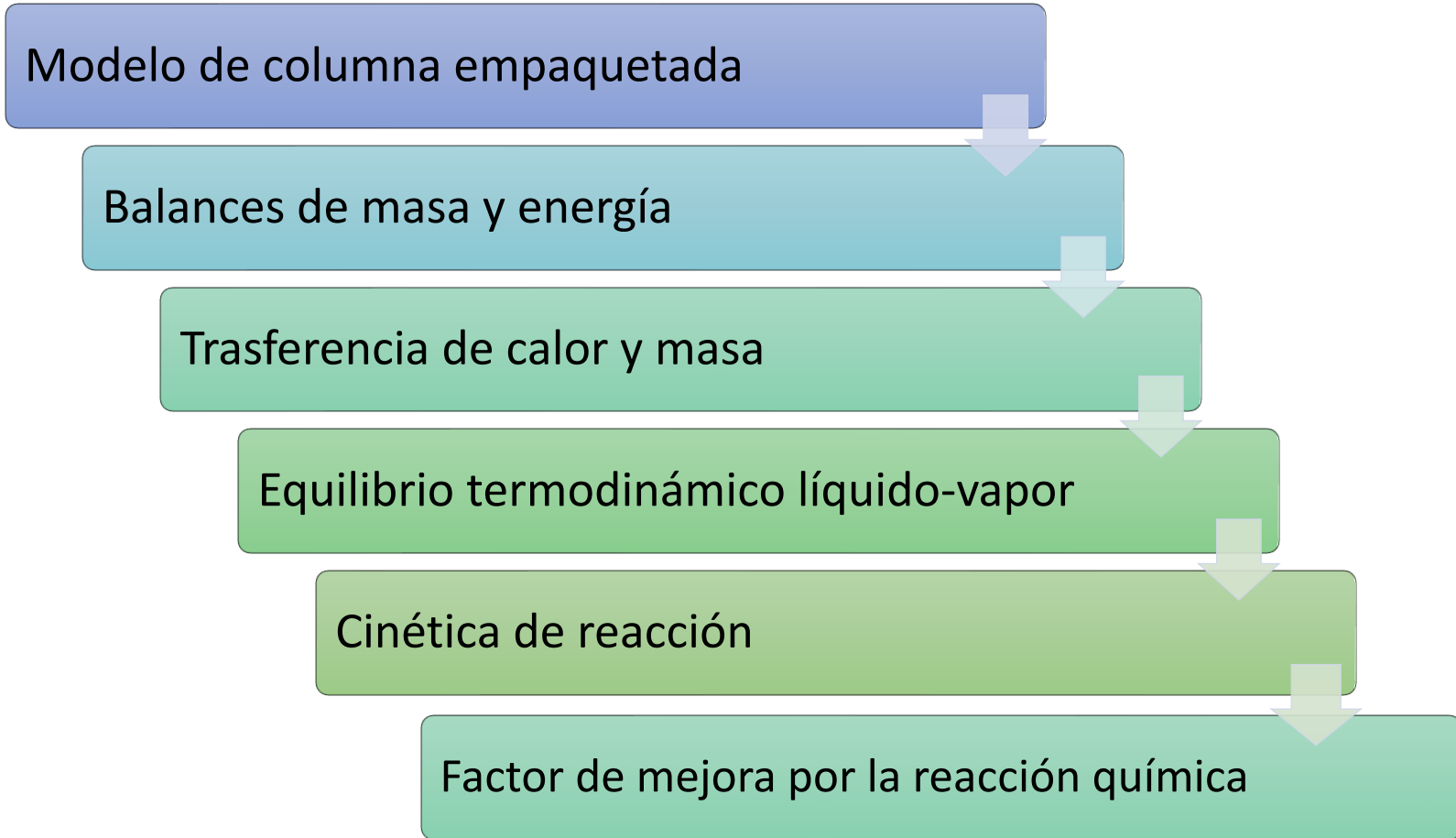
- Construir un modelo matemático en estado estable que describa la variación de la concentración de CO_2 con la longitud de la columna.
- Simular el proceso de absorción de CO_2 con una solución de AMP.
- Validar el modelo matemático comparando los resultados de solubilidad con datos bibliográficos obtenidos de experimentación en plantas piloto.
- Comparar los resultados de solubilidad del modelo matemático con los resultados obtenidos mediante el simulador.
- Determinar la influencia de los principales parámetros de operación en la eficiencia de la columna.

CONTENIDO



METODOLOGÍA

CONSTRUCCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO



METODOLOGÍA

MODELO DE COLUMNA EMPAQUETADA

La reacción se lleva a cabo en la película líquida

La resistencia para el solvente volátil en el líquido es significativa

La temperatura en la interfase es la misma que la temperatura de la película líquida

El área de transferencia de masa y de calor es el mismo

No se considera la dispersión axial

La columna de absorción trabaja de forma adiabática

Ambas fases serán consideradas ideales

BALANCE DE MASA Y ENERGÍA

FASE GASEOSA

- $\frac{dG}{dz} = -S(N_{CO_2} + N_{H_2O})$
- $\frac{dy_{CO_2}}{dz} = \frac{S(N_{CO_2}(y_{CO_2}-1) + N_{H_2O}y_{CO_2})}{G}$
- $\frac{dy_{H_2O}}{dz} = \frac{S(N_{H_2O}(y_{H_2O}-1) + N_{CO_2}y_{H_2O})}{G}$
- $\frac{dT_G}{dz} = \frac{-Sa_Wq}{Gc_{p,G}}$

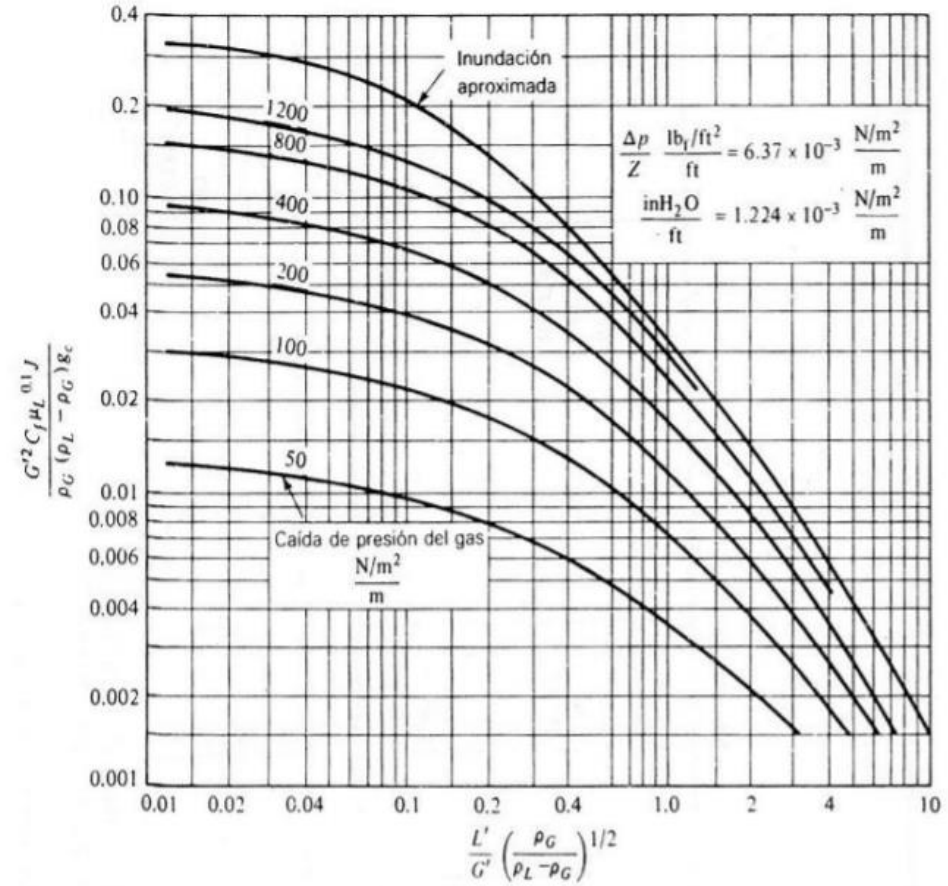
FASE LÍQUIDA

- $\frac{dL}{dz} = -SN_{H_2O}$
- $\frac{dx_{CO_2}}{dz} = \frac{S(N_{CO_2} - N_{H_2O}x_{CO_2})}{L}$
- $\frac{dx_{H_2O}}{dz} = \frac{S(N_{H_2O}(x_{H_2O}-1) + N_{CO_2})}{L}$
- $\frac{dT_G}{dz} = \frac{S(N_{CO_2}c_{p,CO_2} + N_{H_2O}c_{p,H_2O})(T_L - T_G) - Sq + (N_{CO_2}\Delta H_{CO_2} + N_{H_2O}\Delta H_{H_2O})}{Lc_{p,L}}$

METODOLOGÍA

TRANSFERENCIA DE CALOR Y MASA

Coordenadas de Eckert



Analogías de Chilton-Colburn

$$St_{H, pr} Pr^{2/3} = \frac{h_{pr}}{C_p \bar{u}_x \rho} Pr^{2/3} = j_H = \frac{1}{2} f = \psi(Re)$$

$$St_{D, pr} Sc^{2/3} = \frac{F_{pr}}{c \bar{u}_x} Sc^{2/3} = j_D = \frac{1}{2} f = \psi(Re)$$

Correlaciones de Billet y Schultes

$$k_L = C_L \left(\frac{\rho_L g}{\mu_L} \right)^{1/6} \left(\frac{a_T D_L}{4\epsilon} \right)^{1/2} \left(\frac{U_L}{a_T} \right)^{1/3}$$

$$k_G = C_G \frac{a_T D_G}{(4\epsilon^2 - 4\epsilon h_T)^{1/2}} \left(\frac{\rho_G U_G}{a_T \mu_G} \right)^{3/4} \left(\frac{\mu_G}{\rho_G D_G} \right)^{1/3}$$

$$\frac{a_w}{a_T} = 1.5 (4\epsilon)^{1/2} \left(\frac{\rho_L U_L}{a_T \mu_L} \right)^{-2/10} \left(\frac{\rho_L U_L^2}{a_T \sigma_L} \right)^{3/4} \left(\frac{a_T U_L^2}{g} \right)^{-0.45}$$

METODOLOGÍA

EQUILIBRIO TERMODINÁMICO LÍQUIDO-VAPOR

$$p_{CO_2}^* = K_{CO_2} x_{CO_2} \frac{\alpha}{(1-\alpha)}$$

$$K_{CO_2} = 37.30 - \frac{8161}{T} + 23826 \frac{\alpha}{T^2}$$

CINÉTICA DE REACCIÓN

$$\ln(k) = 23.69 - 5176.49/T$$

298-318 K

METODOLOGÍA

FACTOR DE MEJORA POR LA REACCIÓN QUÍMICA

Correlación de Krevelen y Hoftijzer

$$E_A = \frac{\phi_{A,2} \sqrt{\frac{E_{A,\infty}^{film} - E_A}{E_{A,\infty}^{film} - 1}}}{\tanh\left(\phi_{A,2} \sqrt{\frac{E_{A,\infty}^{film} - E_A}{E_{A,\infty}^{film} - 1}}\right)}$$

$$\phi_{A,2} = \frac{\sqrt{D_A k_2 C_B}}{k_{L0}}$$

$$E_{A,\infty}^{film} = 1 + \frac{D_B C_{B,L}}{v_B D_A C_{A,Li}}$$

Coeficiente global de transferencia de energía en la fase gaseosa

$$\frac{1}{K_{GaW}} = \frac{1}{k_{GaW}} + \frac{H}{E_A k_{LaW}}$$

METODOLOGÍA

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE ABSORCIÓN

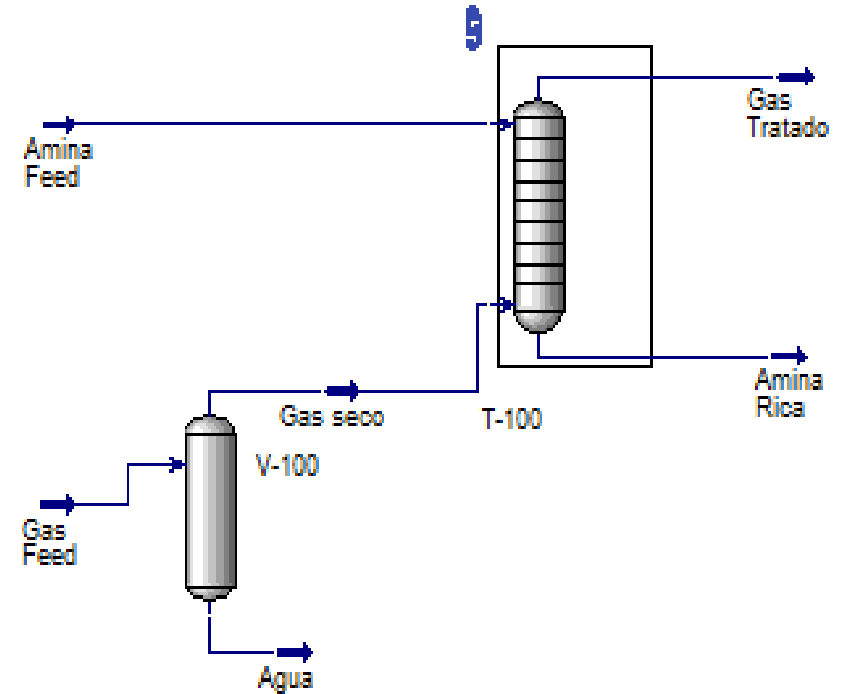
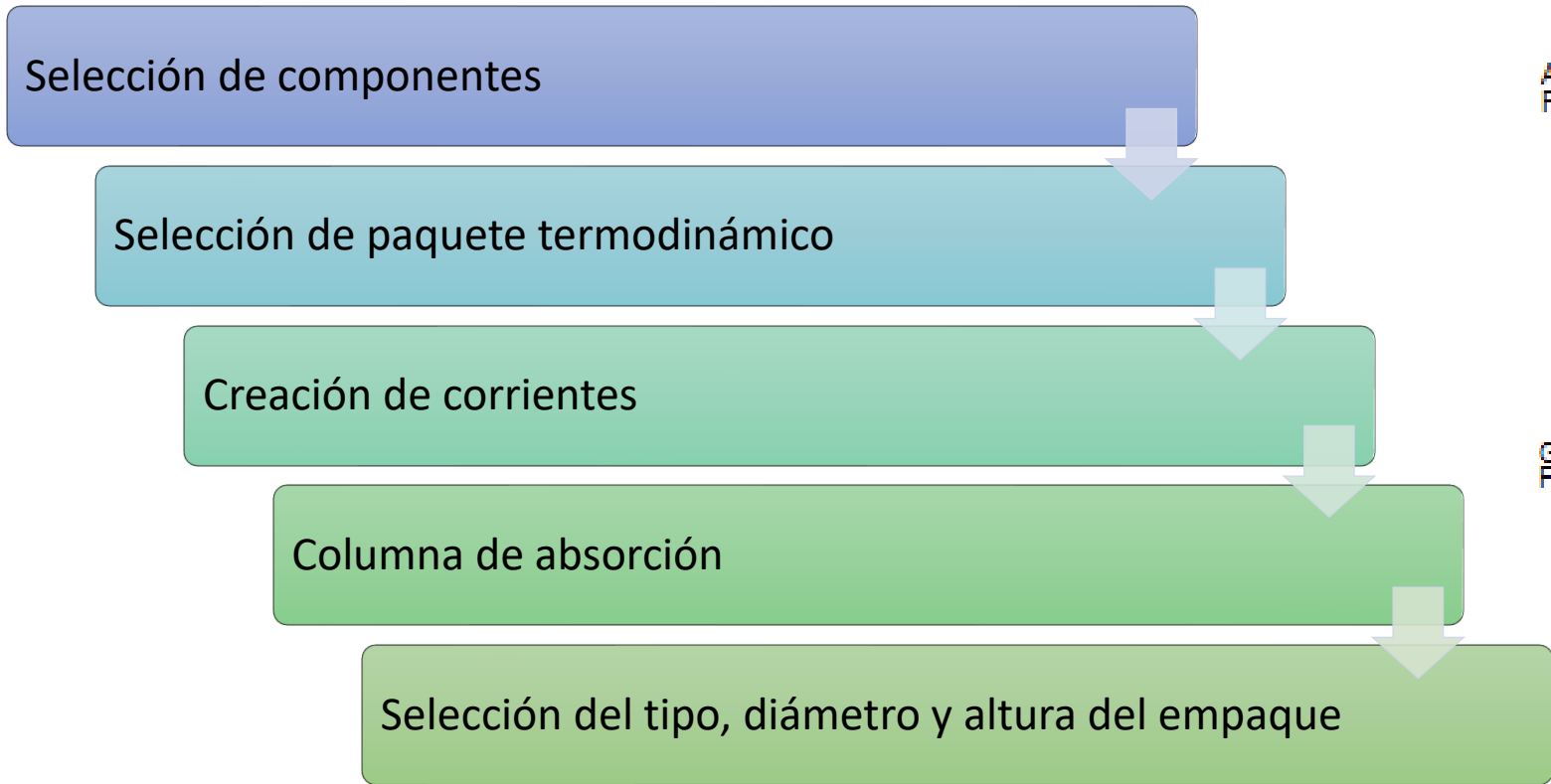


Diagrama final del proceso de absorción

CONTENIDO

- INTRODUCCIÓN
- OBJETIVOS
- METODOLOGÍA
- ANÁLISIS DE RESULTADOS**
- CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

RESULTADOS

MODELO MATEMÁTICO

Composición de la corriente de gas seco

Compuesto	Fracción molar
CO ₂	0.1387
H ₂ O	0.0557
N ₂	0.8003
CO	0.0022
NO ₂	0.0031

Flujos Molares de operación

Concentración de la amina	Flujo min Kmol/h	Flujo Kmol/h
2.5 mol/dm ³	13.2	15.85
3.4 mol/dm ³	11.1	13.32
4.9 mol/dm ³	9.4	11.28

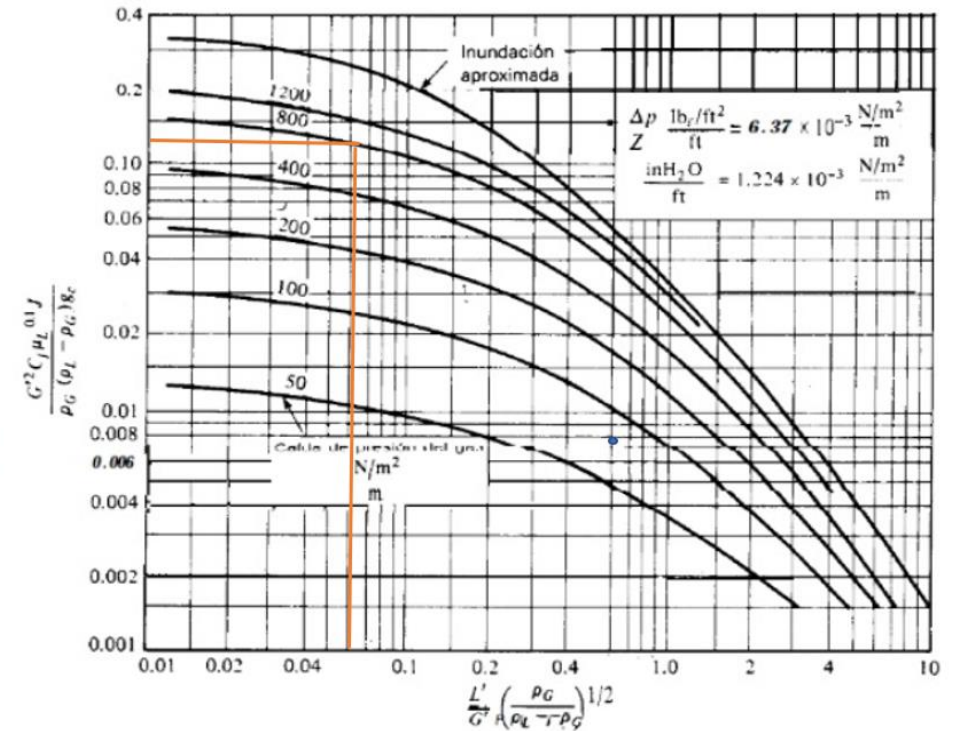
Diámetro y selección de empaque

El diámetro y selección de empaque se determinó para cada uno de los flujos de amina con la curva de caída de presión de $800 \frac{N/m^2}{m}$

Diámetro de la columna y tipo de empaque

Concentración	Empaque	D_c (in)	x	y	D_c (cm)	Relación D_c / D_a
2.5 mol/dm ³	Rasching	0.75	0.0973	0.11	21.02	11.03
	Ceramico					
3.4 mol/dm ³	Rasching	0.75	0.0818	0.12	20.57	10.80
	Ceramico					
4.9 mol/dm ³	Rasching	0.75	0.0693	0.13	20.16	10.58
	Ceramico					

Estimación del diámetro de la columna para una solución 2.5 mol/ dm³



Coeficiente de transferencia de calor

Concentración	2.5 mol/dm ³	3.4 mol/dm ³	4.9 mol/dm ³
Sc	1366.59920 6	1366.599206	1366.59921
Sh	12.83980834	12.42809374	12.0571349
Re	382.4362824	374.2490166	366.793831
St	2.45673E-05	2.42998E-05	2.4054E-05
Jd	0.00302542	0.002992472	0.00296216
Pr	0.750132099	0.750132099	0.7501321
h	4.028266011	3.984396422	3.94403524

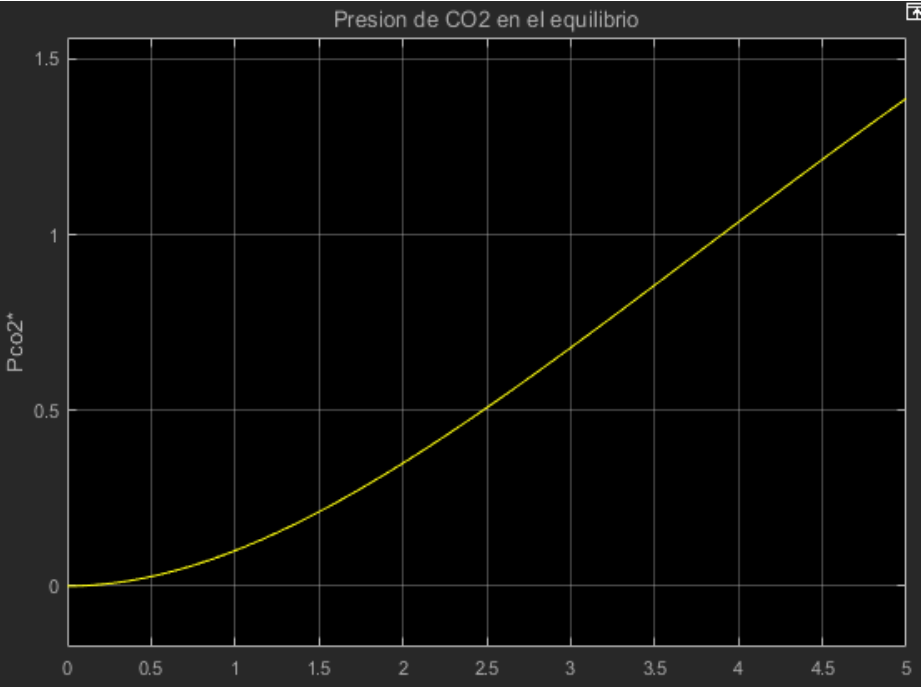
Coeficientes y área interfacial de transferencia de masa

Concentración	2.5 mol/dm ³	3.4 mol/dm ³	4.9 mol/dm ³
a_w (m ² /m ³)	53.6635289	56.9256943	59.6121686
k_{L,CO_2} (m/s)	0.000107046	0.00010861	0.00011007
k_{G,H_2O} (m/s)	0.089623351	0.09265525	0.09553567
k_{G,CO_2} (m/s)	0.060251203	0.06228946	0.06422589

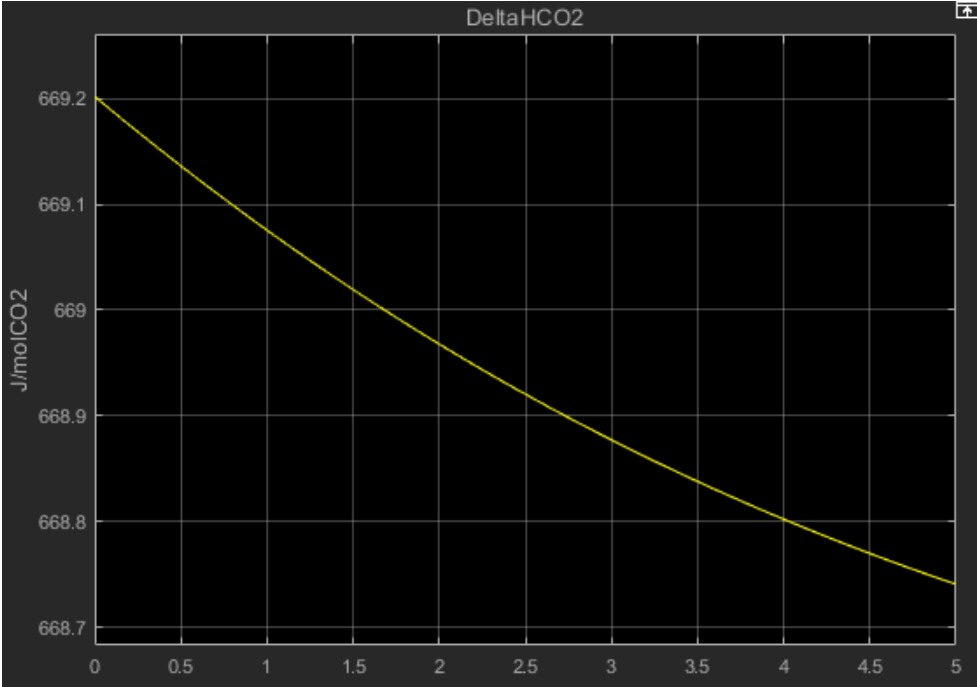
RESULTADOS

Equilibrio termodinámico Líquido-Vapor

Presión parcial de CO₂, Solución 2.5 mol/dm³



Calor de absorción del CO₂, solución 2,5 mol/dm³

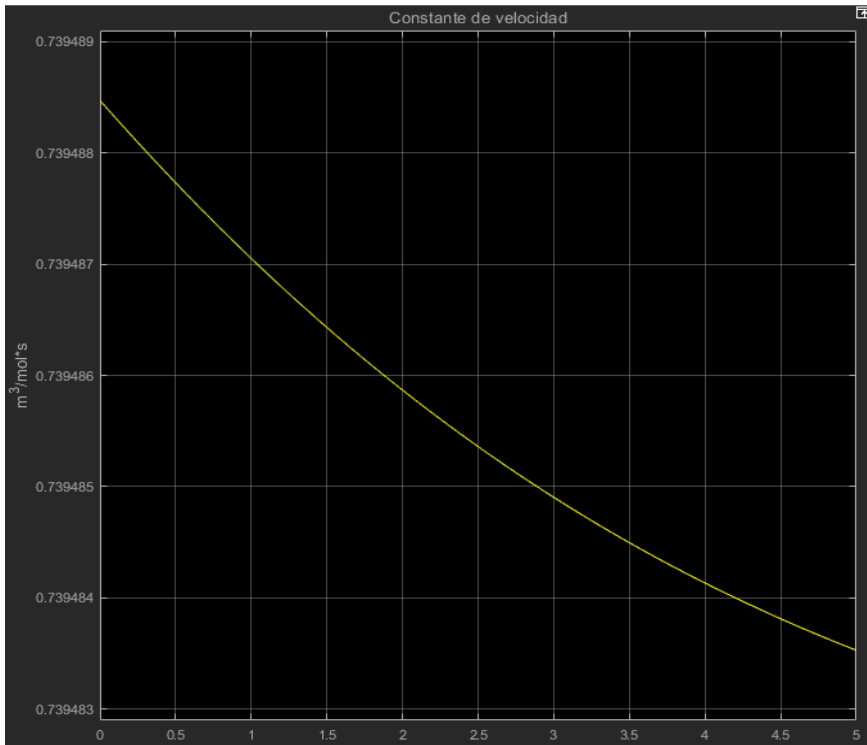


RESULTADOS

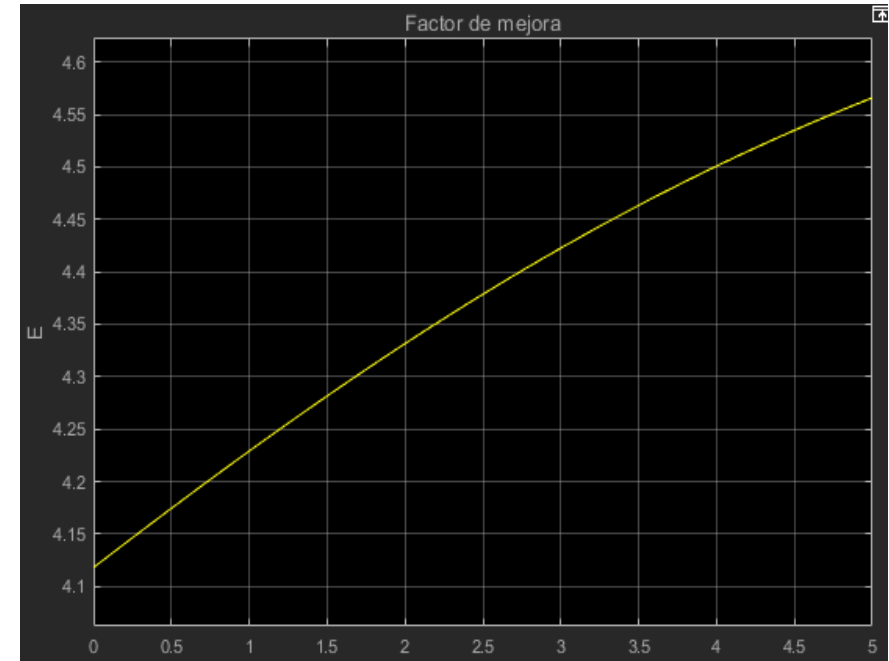
Factor de mejora por la reacción química

Valor del factor de mejora (E_A) por la reacción química

Constante de velocidad

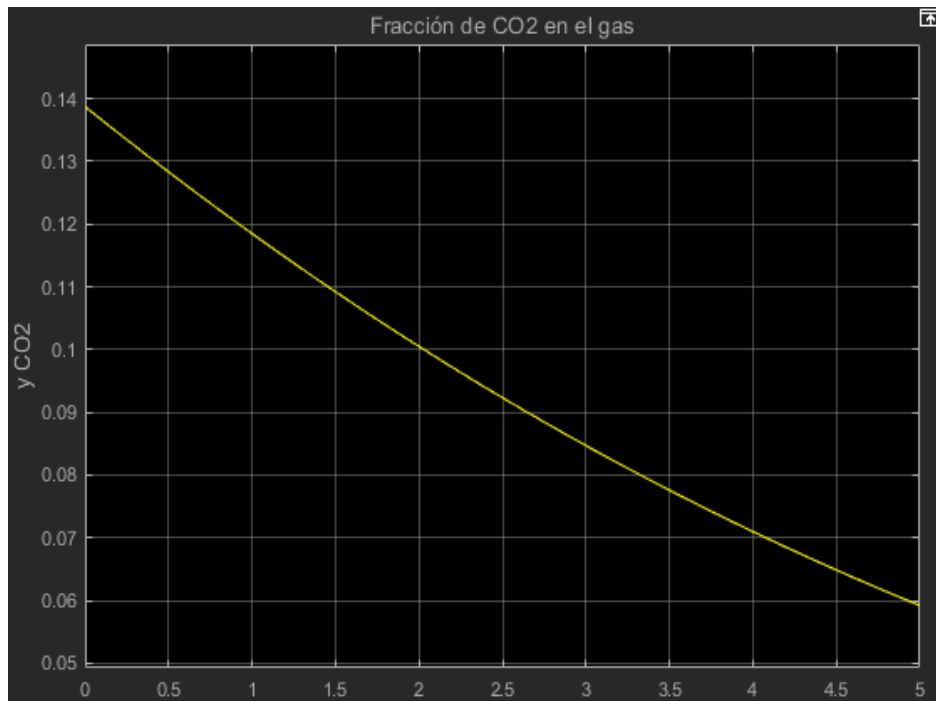


Concentración	E_A
2.5 mol/dm ³	4.12-4.56
3.4 mol/dm ³	5.63-6.01
4.9 mol/dm ³	7.03-7.42



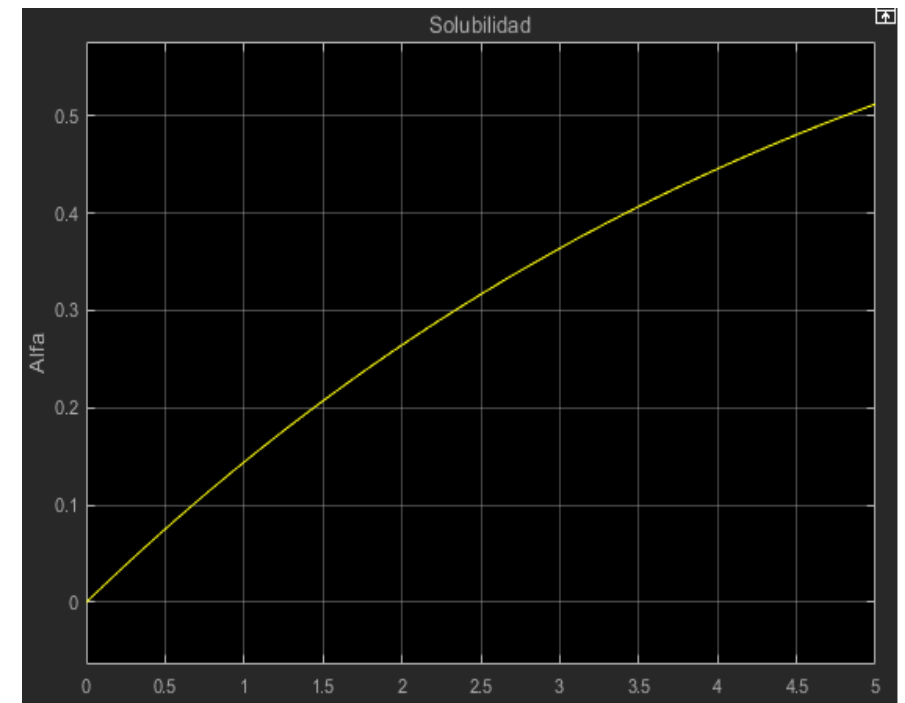
Variación en la concentración de CO₂

Variación de la fracción molar de CO₂ en el Gas, solución 2,5 mol/dm³



Solubilidad

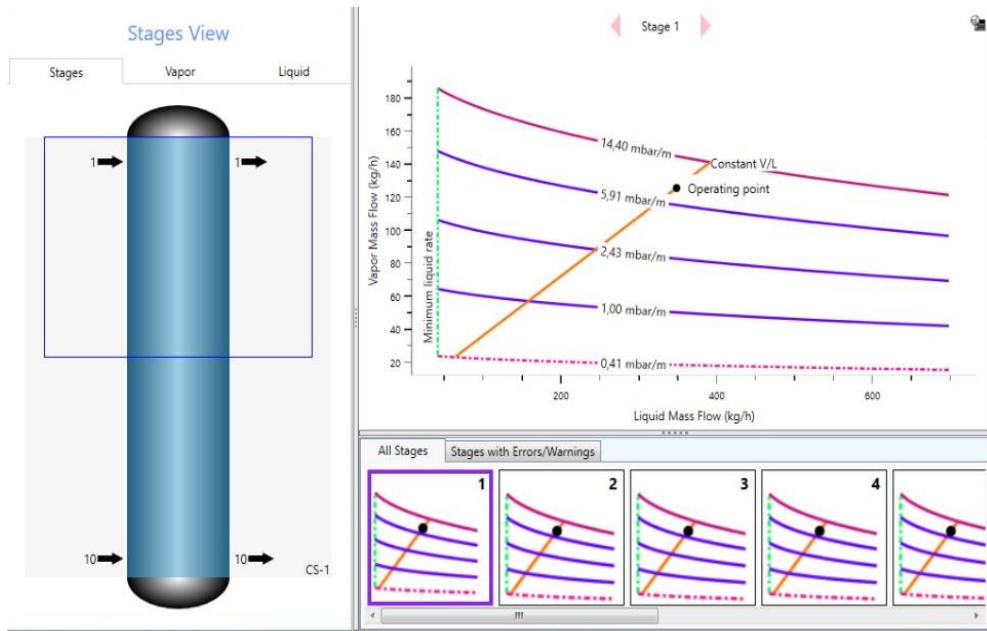
Solubilidad del CO₂ en la solución 2,5 mol/dm³ de AMP



RESULTADOS

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE ABSORCIÓN

Análisis de flujos internos de la columna en el simulador



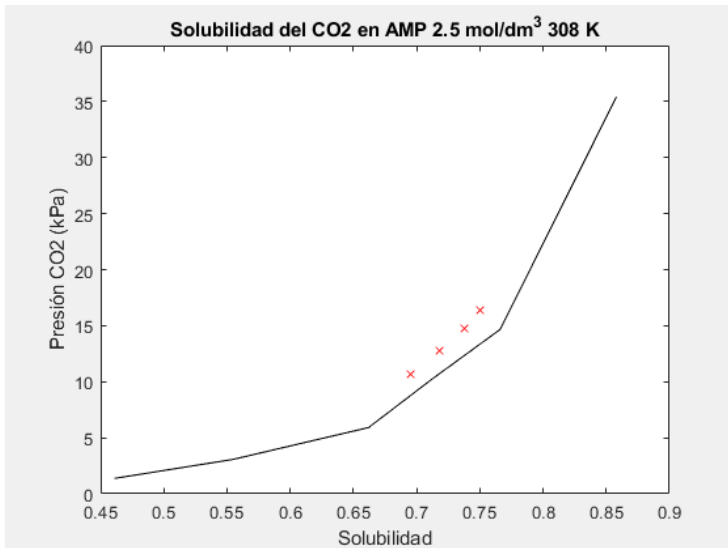
Composición de CO₂ en la corriente liquida

Worksheet Attachments Dynamics			
Worksheet	Mole Fractions		Aqueous Phase
Conditions	CO2	0,0001	0,0001
Properties	H2O	0,9492	0,9492
Composition	Nitrogen	0,0000	0,0000
Oil & Gas Feed	CO	0,0000	0,0000
Petroleum Assay	NO2	0,0008	0,0008
K Value	AMP	0,0499	0,0499
User Variables			
Notes			
Cost Parameters			
Normalized Yields			

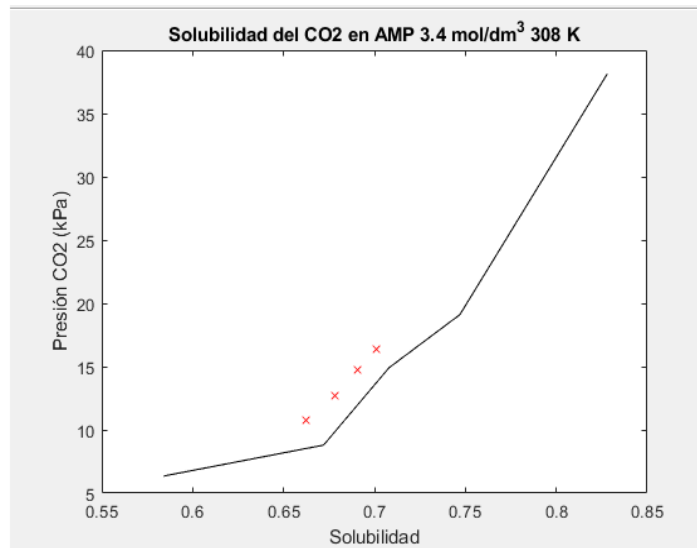
Worksheet Attachments Dynamics			
Worksheet	Stream Name	Amina Rica	Aqueous Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Properties	Temperature [C]	35,63	35,63
Composition	Pressure [kPa]	100,0	100,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	15,88	15,88
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	342,8	342,8
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,3483	0,3483
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,847e+005	-2,847e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	11,51	11,51
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-4,520e+006	-4,520e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	0,3450	0,3450
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

RESULTADOS

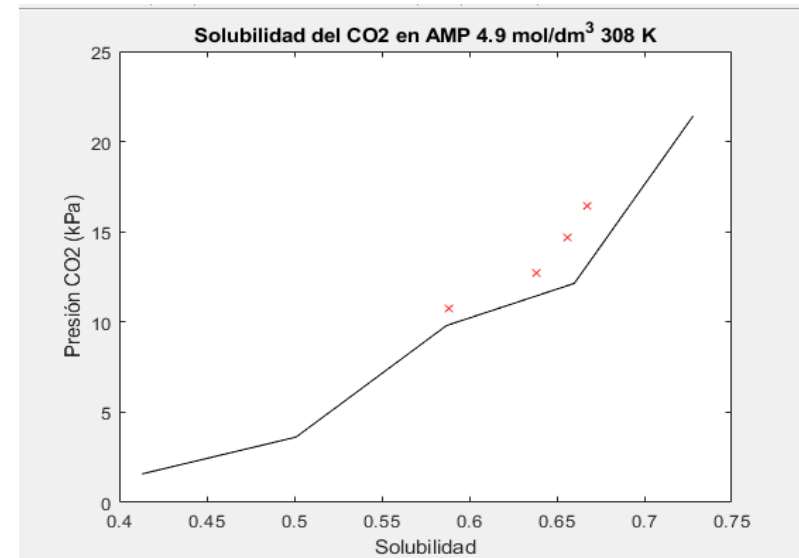
COMPARACIÓN DE LAS SOLUBILIDADES OBTENIDAS DEL MODELO MATEMÁTICO Y DATOS EXPERIMENTALES



Solubilidad de CO₂ en una solución 2.5 mol/dm³



Solubilidad de CO₂ en una solución 3.4 mol/dm³



Solubilidad de CO₂ en una solución 4.9 mol/dm³

MODELADO DE LA COLUMNA DE ABSORCIÓN

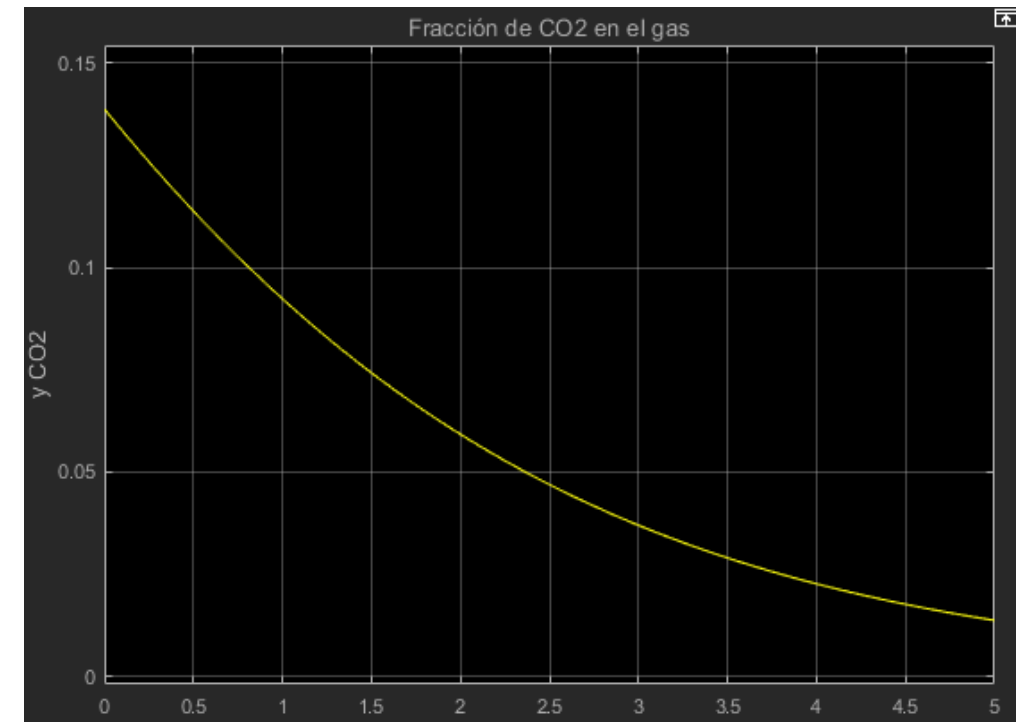
Diámetro de la columna y tipo de empaque

Concentración	Empaque	D_c (in)	x	y	D_c (cm)	Relación D_c / D_a
2.5 mol/dm ³	Rasching	0.75	0.16	0.057	24.78	13.005
	Ceramico					

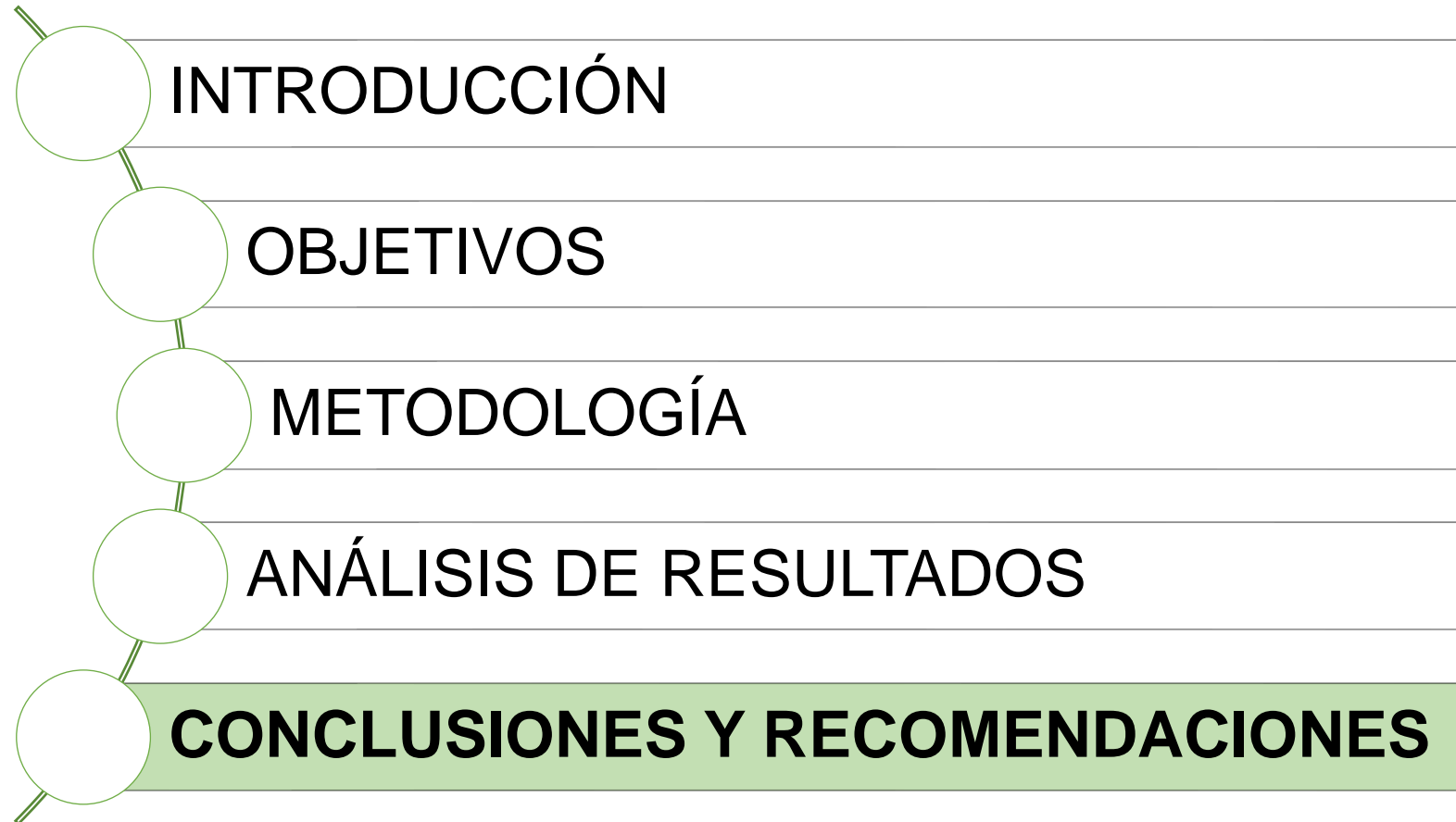
Área interfacial, coeficiente de transferencia de masa y coeficiente de transferencia de calor

Concentración	2.5 mol/dm ³
a_w (m ² /m ³)	71.02956
k_{L,CO_2} (m/s)	0.000127374
k_{G,H_2O} (m/s)	0.070631085
k_{G,CO_2} (m/s)	0.047483249
h (W/m ² *°C)	1.721168205

Variación en la concentración de CO₂ en el gas



CONTENIDO



CONCLUSIONES

- El modelo se ha resuelto con éxito en la operación de absorción de CO_2 con soluciones de AMP y se ha validado con datos obtenidos de plantas piloto de literatura, los resultados de solubilidad obtenidos tuvieron errores por debajo del 10%.
- El proceso de simulación arrojó resultados muy por debajo de la solubilidad establecida en trabajos experimentales para cada una de las concentraciones de AMP.
- Parámetros como la tensión superficial, el factor de mejora por la reacción y la difusividad del CO_2 produce cambios significativos en la fracción molar de salida del CO_2 , esto se debe a que afectan de forma directa el coeficiente global de transferencia de masa.

RECOMENDACIONES

- Validar el modelo para nuevas condiciones de temperatura y expresar como es afectada la fracción molar de CO_2 a la salida del absorbedor.
- Modificar el tamaño y tipo de empaque para ver cómo afecta a parámetros como los coeficientes de transferencia de masa, coeficientes de transferencia de calor y área interfacial de transferencia de masa.
- Realizar un análisis de costos del proceso de absorción-desorción para poder establecer un flujo óptimo de entrada del absorbente y su concentración.

**GRACIAS POR SU
ATENCIÓN**