

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)

Gallo Tapia, Marcelo Javier

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Ingeniería Petroquímica

Trabajo de titulación, previo a la obtención del título de Ingeniero en Petroquímica

Dr. Ret. Nat., PhD. Rodríguez Maecker, Román Nicolay

Latacunga, 17 de marzo del 2021



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA PETROQUÍMICA

CERTIFICACIÓN

Certifico que el trabajo de titulación, "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)" fue realizado por la señor Gallo Tapia, Marcelo Javier el mismo que ha sido revisado en su totalidad, analizado por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto cumple con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, 17 de marzo de 2021

ROMAN digitalmente por ROMAN NICOLAY RODRIGUE MAECKER
Z MAECKER Fecha: 2021.03.16

PhD. Román N. Rodríguez M.

DIRECTOR DE CARRERA

C.C.: 1712082120

Reporte Urkund



Urkund Analysis Result

Analysed Document: TESIS MARCELO GALLO.pdf (D98554760)

Submitted: 3/16/2021 6:26:00 PM Submitted By: terasalepou@gmail.com

Significance: 1 %

4

Sources included in the report:

https://editorial.universidadean.edu.co/acceso-abierto/generalidades-y-aplicaciones-delequipo-de-absorcion-de-gases-gunt-ean.pdf

http://ri.ues.edu.sv/id/eprint/19508/1/Modelaci%C3%B3n%20y%20Simulaci%C3%B3n%20de% 20procesos%20de%20transferencia%20de%20masa%20en%20Ingenier%C3%ADa%20Qu%C3% ADmica.pdf

http://ruja.ujaen.es/bitstream/10953/545/1/9788484398424.pdf

Instances where selected sources appear:

mistances where selected sources appear

ROMAN Firmado digitalmente por ROMAN NICOLAY RODRIGUE MAECKER Fecha: 2021.03.16 15:00:11-05'00'



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA PETROQUÍMICA

AUTORÍA DE RESPONSABILIDAD

Yo, Gallo Tapia, Marcelo Javier, declaro que el contenido de ideas y criterios del trabajo de titulación: "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)" es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, 17 de marzo de 2021

Gallo Tapia, Marcelo Javier

C.C.: 050389028-7



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA PETROQUÍMICA

AUTORIZACIÓN

Yo, Gallo Tapia, Marcelo Javier autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de titulación: "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)" en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi responsabilidad.

Latacunga, 17 de marzo de 2021

Gallo Tapia, Marcelo Javier

C.C.: 050389028-7

Dedicatoria

El presente trabajo lo dedico con mucho amor a mi madre Margoth Tapia por ser la principal responsable de que hoy logre alcanzar esta meta, por todo el apoyo, cariño y comprensión brindado a lo largo de mi vida.

Agradecimiento

A mis abuelos Aquiles y Olga por ser un ejemplo de superación en mi vida, por inculcarme valores y apoyarme cuando más lo necesitaba.

A mi esposa Evelyn por nunca dejarme solo en momentos difíciles de mi vida y demostrarme que con esfuerzo y dedicación todos los objetivos son posibles de conseguir.

A mi hija Aliss por llenarme de valor y alegría con cada sonrisa brindada, por ser el motor que nunca va a dejar que me detenga hasta cumplir mis sueños.

Al PhD. Román Rodríguez por todo el conocimiento y concejos brindados en el transcurso de mi vida universitaria.

Tabla de contenido

Carátula1
Certificación2
Reporte Urkund3
Autoría de responsabilidad4
Autorización5
Dedicatoria6
Agradecimiento7
Tabla de contenidos8
Índice de tablas12
Índice de figuras13
Índice de ecuaciones15
Resumen17
Abstract18
Introducción19
Antecedentes19
Planteamiento del problema21
Justificación e importancia22
Objetivos22
Objetivo general22
Objetivos específicos22
Hipótesis23

Marco te	órico2	4
Oı	rigen del dióxido de carbono2	4
Pr	ropiedades físicas y químicas del CO ₂ 2	4
Pr	roducción de CO₂ en el Ecuador2	4
Ef	fecto invernadero2	5
Ar	minometilpropanol (AMP)2	6
Al	bsorción de CO2 con aminas estéricamente impedidas2	6
Al	bsorción de gases2	7
	Columnas empacadas2	7
	Sistemas de dos componentes2	8
	Sistemas multicomponentes3	0
	Soluciones líquidas ideales3	1
	Balances de materia3	1
	Relacion gas-líquido minima o limitante3	4
	Velocidad de absorción3	5
	Efecto de la presión3	7
	Operación no isotérmica3	8
	Variaciones de la temperatura en columnas empacadas3	8
Al	bsorción con reacción química3	9
	Reacciones reversibles e irreversibles3	9
De	esorción o eliminación3	9

Solubilidad40	
Metodología del desarrollo del proyecto42	
Construcción del modelo matemático42	
Química de la reacción42	
Modelo de columna empaquetada43	
Transferencia de calor y masa44	
Equilibrio termodinámico Liquido-Vapor48	
Cinética de reacción50	
Incremento de la tasa de absorción debido a la reacción51	
Simulación del proceso de absorción52	
Selección de componentes52	
Selección de paquete termodinámico52	
Selección del sistema de unidades53	
Creación de la corriente gaseosa54	
Creación de la corriente liquida55	
Eliminación del vapor de agua contenida en la corriente gaseosa56	
Columna de Absorción57	
Selección del tipo, diámetro y altura del empaque58	
Análisis e interpretación de resultados60	
Composición de la corriente de gas a tratar60	
Modelo matemático60	

Balances de masa y energía60
Flujo mínimo de líquido63
Diámetro y selección de empaque63
Coeficiente de transferencia de calor65
Coeficientes y área interfacial de transferencia de masa65
Equilibrio termodinámico Liquido-Vapor66
Constante de velocidad67
Factor de mejora por la reacción química68
Variación en la concentración de CO ₂ 69
Solubilidad70
Simulación del proceso de absorción71
Análisis de flujos internos de la columna en el simulador71
Composición de CO₂ en la corriente liquida72
Comparación de las solubilidades73
Modelado de la columna de absorción74
Conclusiones y recomendaciones77
Conclusiones77
Recomendaciones78
Bibliografía79
Anexos83

Índice de tablas

Tabla 1. Composición de la corriente de gas seco.	60
Tabla 2. Flujos Molares de operación	63
Tabla 3. Diámetro de la columna y tipo de empaque	64
Tabla 4. Números adimensionales y coeficiente de transferencia de calor	65
Tabla 5. Coeficientes y área interfacial de transferencia de masa	65
Tabla 6. Factor de mejora E _A	69
Tabla 7. Diámetro de la columna y tipo de empaque	75
Tabla 8. Área interfacial y coeficientes de transferencia	75

Índice de figuras

Figura 1. Emisiones de CO ₂ en Millones de toneladas	25
Figura 2. Modelo de columna empacada	28
Figura 3. Solubilidad en agua del SO ₂ , NH ₃ y HCl a diferentes temperaturas	29
Figura 4. Diagrama de flujos de una columna empacada.	31
Figura 5. Relacion Gas-Liquido mínima o limitante.	34
Figura 6. Determinación de las composiciones de equilibrio e interfase	37
Figura 7. Solubilidad del CO ₂ en AMP acuoso	41
Figura 8. Diagrama de una columna de absorción empacada	43
Figura 9. Inundación y caída de presión en torres empacadas.	45
Figura 10. Analogías de Chilton-Colburn	46
Figura 11. Correlaciones de Billet y Schultes	48
Figura 12. Gráfico de Arrhenius para el sistema CO2-AMP.	50
Figura 13. Correlación de Krevelen y Hoftijzer.	51
Figura 14. Selección de componentes	52
Figura 15. Selección del paquete termodinámico	53
Figura 16. Selección de unidades de trabajo.	53
Figura 17. Concentraciones de la corriente gaseosa proveniente de la combustión.	54
Figura 18. Presión, temperatura y flujo de la corriente gaseosa	55
Figura 19. Composiciones de la corriente liquida en fracción mol	55
Figura 20. Condiciones de entrada en la corriente líquida.	56
Figura 21. Corrientes de entrada y salida del separador flash.	56
Figura 22. Esquema de corrientes de entrada y salida del Absorbedor	57
Figura 23. Presión en el absorbedor.	58
Figura 24. Análisis interno de la columna.	59
Figura 25 Diagrama final del proceso de absorcion	59

Figura 26.	Estimación del diámetro de la columna para una solución 2.5 mol/ dm³	.64
Figura 27.	Presión parcial de CO ₂ , Solución 2.5 mol/dm ³	.66
Figura 28.	Calor de absorción del CO ₂ , solución 2,5 mol/dm ³	.67
Figura 29.	Variación de la constante de velocidad	.67
Figura 30.	Valor del factor de mejora (EA) por la reacción química	.68
Figura 31.	Variación de la fracción molar de CO₂ en el Gas, solución 2,5 mol/dm³	.69
Figura 32.	Solubilidad del CO₂ en la solución 2,5 mol/dm³de AMP	.70
Figura 33.	Curvas de inundación de la columna para la concentración 2.5 mol/dm³	.71
Figura 34.	Composición de la corriente amina rica.	.72
Figura 35.	Condiciones de salida de la corriente amina rica	.72
Figura 36.	Solubilidad de CO ₂ en una solución 2.5 mol/dm ³	.73
Figura 37.	Solubilidad de CO ₂ en una solución 3.4 mol/dm ³	.73
Figura 38.	Solubilidad de CO ₂ en una solución 4.9 mol/dm ³	.74
Figura 39.	Variación en la concentración de CO ₂ en el gas	.75

Índice de ecuaciones

Ecuación 1. Balance general de materia	32
Ecuación 2. Balance general de materia para el componente A	33
Ecuación 3. Balance general de materia en un punto de la columna	33
Ecuación 4. Balance para el componente A en un punto de la columna	33
Ecuación 5. Relación mínima líquido-gas	34
Ecuación 6. Velocidad de absorción	36
Ecuación 7. Coeficiente global de transferencia de materia	36
Ecuación 8. Reacción de ionización del agua	42
Ecuación 9. Disolución de CO2 en agua	42
Ecuación 10. Protonación de la amina	42
Ecuación 11. Formación del carbamato	42
Ecuación 12. Reacción de absorción del CO ₂	43
Ecuación 13. Flujo de calor	46
Ecuación 14. Flujo molar de CO ₂	47
Ecuación 15. Flujo molar de H ₂ O	47
Ecuación 16. Presión parcial del CO2 en el equilibrio	48
Ecuación 17. Constante de equilibrio del CO ₂	49
Ecuación 18. Calor de absorción del CO ₂	49
Ecuación 19. Velocidad de reacción	50
Ecuación 20. Coeficiente de transferencia de masa con reacción química	52
Ecuación 21. Relación de las concentraciones con la tasa de CO ₂ absorbido	61
Ecuación 22. Variación del flujo del gas con respecto a la altura de la columna	61
Ecuación 23. Variación de la fracción molar del CO2 en el gas	61
Ecuación 24. Variación de la fracción molar del H₂O en el gas	61
Ecuación 25. Balance general de energía en el gas	62

Ecuación 26.	Variación del flujo del líquido con respecto a la altura de la columna	.62
Ecuación 27.	Variación de la fracción molar del CO₂ en el líquido	.62
Ecuación 28.	Variación de la fracción molar del H₂O en el líquido	.62
Ecuación 29.	Balance general de energía en el líquido	.62

Resumen

Se ha propuesto la creación de un modelo matemático que describa el comportamiento de absorción del CO₂ proveniente de los procesos de producción de energía a base de la combustión de hidrocarburos en una solución de Aminometilpropanol (AMP), el modelo matemático utiliza expresiones para el calor de absorción, solubilidad del CO₂ y el factor de mejora por la reacción química, tres concentraciones de soluciones fueron estudiadas 2.5 mol/dm³, 3.4 mol/dm³ y 4.9 mol/dm³, los resultados obtenidos fueron comparados con datos recopilados de la simulación del proceso y datos obtenidos de experimentación en plantas piloto de la literatura, se varió parámetros como la presión parcial del CO₂ y el flujo de entrada del absorbente para determinar su influencia en la fracción molar de CO₂ a la salida del absorbedor, el proceso de modelado y simulación se realizó a una temperatura de 308 K, los coeficientes individuales de transferencia de masa en la fase liquida y gaseosa fueron determinados con las correlaciones de Billet y Schultes al igual que el área específica de transferencia de masa, el coeficiente de transferencia de calor fue determinado mediante la analogía de Chilton-Colburn, el relleno que se utilizó en el análisis fue anillos Rasching cerámicos de ¾ in y una caída de presión de 800 N*m/m².

Palabras clave:

- COMBUSTIÓN
- REACCIÓN QUÍMICA
- ABSORCIÓN
- SOLUBILIDAD
- ABSORBENTE

Abstract

The creation of a mathematical model has been proposed that describes the absorption behavior of CO2 from energy production processes based on the combustion of hydrocarbons in a solution of Aminomethylpropanol (AMP), the mathematical model uses expressions for the heat of absorption, CO2 solubility and the improvement factor by the chemical reaction, three concentrations of solutions were studied 2.5 mol / dm3, 3.4 mol / dm3 and 4.9 mol / dm3, the results obtained were compared with data collected from the simulation of the process and data obtained from experimentation in pilot plants from the literature, parameters such as the partial pressure of CO2 and the absorber inlet flow were varied to determine their influence on the molar fraction of CO2 at the outlet of the absorber, the modeling and simulation process was carried out. carried out at a temperature of 308 K, the individual mass transfer coefficients in the liquid and gas phase were determined with the Billet and Schultes correlations as well as the specific mass transfer area, the heat transfer coefficient was determined using the Chilton-Colburn analogy, the filling used in the analysis was ceramic Rasching rings of ¾ in and a drop pressure of 800 N * m / m2.

Key words:

- COMBUSTION
- CHEMICAL REACTION
- ABSORPTION
- SOLUBILITY
- ABSORBENT

CAPÍTULO I

1. Introducción

1.1. Antecedentes

El efecto invernadero es un proceso natural, sin él, la vida en el planeta no sería posible. En este proceso, el dióxido de carbono (CO₂) y el vapor de agua son importantes gases de efecto invernadero (GEI) para mantener estable la temperatura atmosférica. Sin embargo, antes de 1950, la concentración de CO₂ en la atmosfera nunca paso de 330 partes por millón (ppm), mientras que a partir de la revolución industrial los incrementos en las emisiones son evidentes. En mayo del 2013, la Administración Nacional de Océanos y Atmosfera de Estados Unidos – NOAA, reporto que la concentración de CO₂ en la atmosfera supero por primera vez las 400 ppm. Este hecho, reclama acciones urgentes y nos compromete a intensificar los esfuerzos para dar respuesta al cambio climático y sus efectos (Oscullo & Haro, 2016).

Los problemas ambientales en los últimos años han provocado que la mayoría de las naciones firmen acuerdos con miras a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) (Dey & Aroonwilas, 2009). El cumplimiento de la reducción de las emisiones de GEI determinaran en gran medida las oportunidades para evitar una crisis climática que pueda frenar o impedir el desarrollo sostenible tanto en sus propios países como en los países en desarrollo vulnerables en el futuro (Warner, 2013). El consumo energético desempeña un papel fundamental en el crecimiento económico de los países desarrollados y en vías de desarrollo, de igual manera de los países que son exportadores o importadores de energía (Kais, Saidi, & Ben, 2017).

Los efectos de este fenómeno se han presentado en las variables climáticas como el aumento de la temperatura y alteraciones del ciclo hidrológico entre las

importantes, así el fenómeno del cambio climático y el sector eléctrico se relaciona; en primer lugar, como sector generador de emisiones de CO₂ producidas por la operación de las centrales que utilizan combustibles fósiles; en segundo lugar, como sector receptor de los efectos del cambio climático por la operación de las centrales hidroeléctricas en los periodos de lluvia y sequia; los patrones de consumo de demanda del país en potencia y la energía dada la temperatura en las estaciones de invierno y verano (Oscullo, 2011). La matriz energética global aún presenta una alta dependencia de los combustibles fósiles, que representan el 81% (Quadrelli & Peterson, 2007).

El sector eléctrico del Ecuador consume 2,2 veces más electricidad que hace 15 años, la demanda de energía pasó de 9652 GWh en el año 1999 a 20882 GWh en el año 2014 con una cobertura del servicio eléctrico que alcanza al 96,5% de la población; el incremento en el consumo de electricidad fue enfrentado por el ingreso de generación térmica, hidráulica, eólicas y solares, más la generación térmica represento en el año 2009 un 47% de la capacidad instalada de generación y continua siendo representativa en el 2014 con un 41% (Narváez & Parra, 2013).

El CO₂ contribuye aproximadamente con el 60% de las emisiones totales de GEI a nivel mundial, debido a esto en 1992 se llevó a cabo la Convención Marco de las Naciones unidas celebrado en Rio de Janeiro que tuvo como fin estabilizar las concentraciones atmosféricas de GEI a niveles que no sea un peligro en el sistema climático. En la actualidad la tecnología más confiable para la captura de CO₂ post combustión es la absorción con aminas primarias debido a su alta velocidad de reacción, sin embargo, tiene varios inconvenientes debido al alto requerimiento energético para la regeneración del solvente. El problema del alto requerimiento de energía se puede reducir usando mezclas basadas en MEA que proporcionan un rendimiento de absorción satisfactorio en comparación con soluciones de MEA, pero

requerirían menos energía de regeneración, lo que resultaría en menores costos operativos y una menor penalización por energía (Dey & Aroonwilas, 2009).

Las alcanolaminas terciarias, como la metildietanolamina (MDEA), pueden alcanzar cargas de 1 mol de CO₂/mol de alcanolamina y el consumo de energía para la regeneración es menor, aunque las bajas tasas de absorción de CO₂ las hacen inviables para la limpieza de los gases de combustión. En la década de los 80 se presentó un grupo de aminas llamadas aminas impedidas estéricamente, estas tienen baja estabilidad de carbamato, lo que hace factibles cargas de hasta 1 mol de CO₂/mol de aminas impedidas estéricamente y las velocidades de reacción son mucho más altas en comparación con la (MDEA). Las aminas estéricamente impedidas pueden ser una opción atractiva para la limpieza de gases de combustión (Sartori & Savage, 1983).

1.2. Planteamiento del problema

En la actualidad la sociedad está siendo obligada a enfrentar dos problemas básicos debido a la demanda energética, uno de ellos es poder cumplir con la creciente demanda energética que va asociada con el crecimiento económico de cada país y el otro es el impacto sobre la naturaleza que esta provoca. Los combustibles fósiles son los principales generadores de CO, HC, NO_x, SO_x, y CO₂, el ultimo debido a su enorme volumen de producción proveniente de la generación eléctrica, contribuye de manera significativa en el efecto invernadero (Oscullo & Haro, 2016). Los principales procesos de absorción se llevan a cabo con aminas primarias por su rápida velocidad de reacción, sin embargo, los costos son altos debido al consumo de energía por los problemas de separación por la formación de carbamatos estables, otro inconveniente que se debe tomar en cuenta es la corrosión. Por todos estos inconvenientes se ha propuesto el uso de aminas estéricamente impedidas para la absorción de CO₂ debido a que tienen una baja estabilidad de carbamato. Sin embargo, se necesitan modelos de

proceso confiables para desarrollar procesos eficientes para la separación del CO₂ de los gases de combustión (Gabrielsen, Michelsen, Stenby, & Kontogeorgis, 2006).

1.3. Justificación e importancia

El desarrollo de distintas alternativas para la separación y captura de gases contaminantes es en la actualidad, una línea de investigación de interés, los estudios sobre la optimización de procesos de absorción de gases contaminantes son cada vez mayores debido a la importancia de reducir los gases de efecto invernadero del medio ambiente, la propuesta de simular una columna eficiente que pueda ser utilizada en la absorción de CO₂ proveniente de las centrales térmicas es en la actualidad un trabajo que se debe desarrollar por su importancia.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo general

 Modelar y simular 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).

1.4.2. Objetivos específicos

- Construir un modelo matemático en estado estable que describa la variación de la concentración de CO₂ con la longitud de la columna.
- Simular el proceso de absorción de CO₂ 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.

1.5. Hipótesis

¿Se puede recuperar el CO2 proveniente de la post combustión en un porcentaje mayor al 90% usando una solución de aminometilpropanol?

1.6. Variables de la investigación

1.6.1. Variable dependiente

Fracción molar de salida del CO₂.

1.6.2. Variable independiente

Concentración del AMP, Presión parcial del CO₂, Flujo de entrada de la solución de AMP, Temperatura.

CAPÍTULO II

2. Marco teórico

2.1. Origen del dióxido de carbono

En el siglo VVII se dio las primeras apariciones del dióxido de carbono cuando el químico Baptist Van Helmont demostró que la cantidad de masa de ceniza resultante de quemar carbón en un recipiente hermético fue menor a la masa del carbón original, por lo cual asumió que parte del carbón fue transformado en una sustancia invisible a la cual la nombro como "gas". El médico escocés Joseph Black descubrió en 1750 que la piedra caliza al calentarse o tratarse con ácidos generaba un gas al que el nombro como aire fijo, fue el mismo que descubrió que el CO₂ se producía por respiración animal y la fermentación microbiana al burbujear en una solución de hidróxido de calcio y observar que precipitaba carbonato de calcio (Núñez, González, & Saura, 2015).

2.2. Propiedades físicas y químicas del CO₂

El dióxido de carbono tiene una estructura lineal representada de la siguiente forma por Lewis O=C=O. Debido a esto a pesar de tener enlaces polares no es polar por su hibridación, no es inflamable y en condiciones normales es estable e inerte, en el medio ambiente el dióxido de carbono se encuentra principalmente en su forma gaseosa y estará en forma solida si la temperatura en inferior a -78 °C, es muy soluble en agua cuando la presión es constate, si la presión disminuye el CO₂ intentara escapar dejando en su lugar burbujas de aire. Es un gas indispensable para la vida en la tierra (Sánchez, 2012).

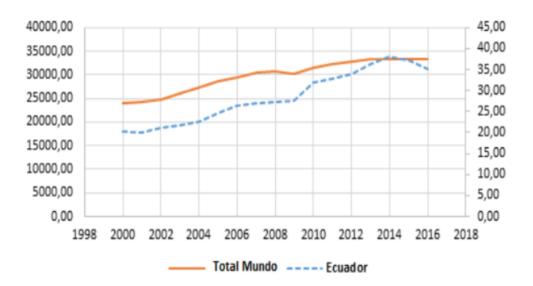
2.3. Producción de CO₂ en el Ecuador

Dentro de las principales fuentes de contaminación del aire se encuentran actividades como, quema de combustible en los hogares, quema de desechos,

combustión en centrales eléctricas, ineficientes sistemas de transporte, y actividades industriales. En el año 2016 las emisiones de CO₂ en el mundo alcanzo las 33432.04 Millones de toneladas (MTon) según el informe presentado por Bp Statistical Review of World Energy, el Ecuador aporto con un porcentaje de las emisiones con una producción de 35.02 Millones de toneladas, siendo este un valor inferior al del año anterior y cambiando así una tendencia que venía en alza desde el 2002 como se puede observar en la figura 1.

Figura 1.

Emisiones de CO₂ en Millones de toneladas.



Nota. Tomado de (Arroyo & Miguel, 2019)

2.4. Efecto invernadero

En la actualidad se está llevando a cabo un crecimiento gradual de la temperatura de la superficie terrestre, uno de los principales ocasionadores de este problema es el Dióxido de carbono CO₂ debido a su incremento en la atmosfera producto de la industrialización, el CO₂ junto con el resto de gases de efecto invernadero atrapan el calor radiado por la tierra y evitan que escape de la atmosfera

terrestre ocasionando un cambio entre 0.6 y 1.0 °C en los últimos 150 años y que podría llegar a 5.8 °C en 2100. Las posibles consecuencias del cambio de temperatura es el aumento del nivel del mar, cambios climáticos severos, destrucción de ecosistemas, sequias, ondas cálidas entre otros cambios que perjudicara a todos los seres vivos del planeta (Berger, 2002).

2.5. Aminometilpropanol (AMP)

El AMP es una alcanolamina primaria estéricamente impedida, el grupo amino se encuentra unido a un átomo de carbono terciario, se produce mediante la hidrogenación del ácido 2-aminoisobutírico o sus esteres, es un líquido incoloro, soluble en agua y su densidad es muy cercana a la misma, se lo utiliza principalmente en la preparación de soluciones tampón, en la producción de drogas y cosmética. También es un precursor de reacciones orgánicas para la producción de oxalinas, esta reacción se lleva a cabo cuando se pone en contacto al AMP con cloruros de acilo.

2.6. Absorción de CO2 con aminas estéricamente impedidas

La captura de Dióxido de carbono está logrando una amplia practica industrial en aplicaciones de limpieza de gases de combustión, el proceso se ha llevado a cabo desde 1930 y consiste en la reacción de una alcanolamina con CO_2 produciendo una sal que es soluble en agua, los inconvenientes en el uso de este proceso es la cantidad de energía necesaria para recuperar el solvente y el tamaño excesivo de la planta.

Las aminas se las puede clasificar en tres grupos: primarias, secundarias y terciarias, siendo las primarias las más adecuadas para el proceso de absorción a baja presión. Sin embargo, la formación de carbamatos estables produce altos costos de recuperación y varios problemas de operación. El AMP fue presentado como una amina estéricamente impedida, gracias a esto la formación del carbamato tiene baja estabilidad y su recuperación puede ser más eficiente, otro punto a favor es la velocidad

de reacción, esta es mucho mayor si se la compara con la metildietanolamina (Gabrielsen et al., 2006).

2.7. Absorción de gases

Es una operación en la que un gas se encuentra en contacto con un líquido en contracorriente, ciertos componentes del gas se van a disolver en el líquido para obtener una solución que contendrá a los componentes absorbidos del gas. Una aplicación primordial de la tecnología de absorción es la eliminación de CO₂ y H₂S a partir del gas natural o del gas de síntesis por absorción en disoluciones de sales de aminas o alcalinas. Otro uso importante es la separación de amoniaco a partir de su mezcla con aire utilizando como absorbente el agua, el amoniaco se recupera por condensación del agua.

Este proceso también se puede realizar de forma inversa cuando el soluto que se encuentra en el líquido es arrastrado por un gas inerte, este proceso recibe el nombre de desorción (Mcabe, Smith, & Harriott, 2007).

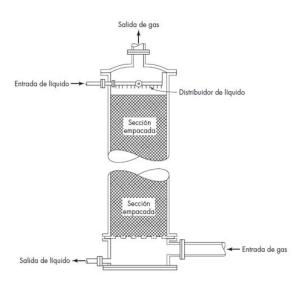
2.7.1. Columnas empacadas

Un equipo ocupado en la absorción de gases con mucha frecuencia es el modelo de columna empacada ilustrada en la figura 2. Está formada por una columna cilíndrica con una entrada de líquido en la parte superior, con el fin de aprovechar la gravedad, y una entrada de gas por la parte inferior, en su interior contiene cuerpos solidos o llamados también empaques que son soportados por lo general por una criba o tamiz que evitan la inundación de la columna, en condiciones ideales el líquido cubre de manera uniforme la superficie del empaque gracias a un distribuidor de líquido, también mostrado en la figura 2. Para torres de gran dimensión (10-30 ft) se utiliza boquillas rociadoras o plato distribuidor con tubos goteadores individuales. El gas portador del soluto asciende a través de los intersticios del empaque dándose una

interacción en contra flujo, la gran área formada por la superficie del empaque favorece el contacto entre las dos fases, el soluto será absorbido a la fase liquida y abandonará la columna por la parte inferior como liquido concentrado o licor concentrado mientras que el gas abandona la columna por la parte superior como gas diluido o agotado (Mcabe et al., 2007).

Figura 2.

Modelo de columna empacada.



Nota. Tomado de (Mcabe et al., 2007).

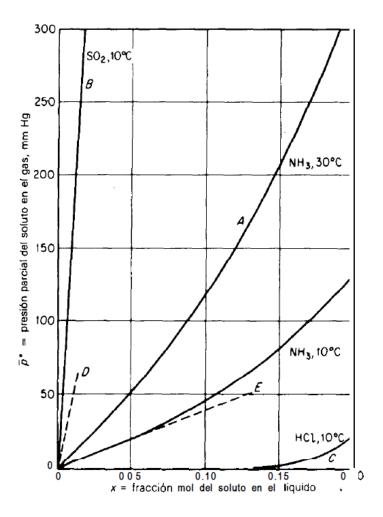
2.7.2. Sistemas de dos componentes.

Si se lleva al equilibrio una cantidad de gas simple con un líquido relativamente no volátil a una presión y temperatura predominantes y se produce una concentración del gas en el líquido esta recibe el nombre de solubilidad, si se logra mantener una temperatura estable la solubilidad incrementara de forma directa con la presión del sistema. Cada sistema es diferente y se tendrá una curva de solubilidad única que

dependerá de los compuestos que se lleven al equilibrio, estas curvas son encontradas de forma experimental.

Figura 3.

Solubilidad en agua del SO₂, NH₃ y HCl a diferentes temperaturas.



Nota. Tomado de (Treybal, 2007).

En la figura 3. Para la curva B de la solubilidad del SO₂ se puede observar que la presión de equilibrio es alta y puede ser considerado como un gas relativamente insoluble, este caso es contrario al del HCL en donde se puede observar una presión de equilibrio baja y se lo puede considerar como un gas muy soluble. Se puede obtener

cualquier concentración del gas en el líquido al aumentar la presión, esto no es favorable desde el punto de vista económico y la forma licuada del gas debe ser soluble en la fase líquida.

Casi siempre la absorción de un gas dará como resultado la generación de calor, este es un parámetro muy importante a considerar ya que la solubilidad de la mayoría de los gases depende de la temperatura, por ello la solubilidad disminuye a medida que la temperatura se incrementa en la columna. En la figura 3 se puede observar un ejemplo de la solubilidad del NH₃ a diferentes temperaturas, en donde la curva a 30°C está arriba de la curva a 10°C teniendo así una mayor presión de equilibrio, si la temperatura del sistema lograra alcanzar la temperatura de ebullición del solvente la solubilidad del gas será cero para presiones inferiores a las del gas (Treybal, 2007).

2.7.3. Sistemas multicomponentes

Si se pone en contacto un mezcla de gases con un líquido, se puede describir el equilibrio en función de sus presiones parciales, considerando así que la solubilidad para cada gas es independiente del resto, si uno de los gases es relativamente insoluble su concentración en el líquido es mínima por lo que no podrá modificar la solubilidad del resto de componentes, un ejemplo de esto es el proceso de absorción de NH₃ en agua cuando el aire es el gas arrastrador, el aire es tan poco soluble en agua que no modificara la solubilidad del NH₃, logrando así una reducción enorme en el trabajo experimental para obtener las curvas de solubilidad. Si se tiene una mezcla de gases en donde varios de ellos se pueden considerar como solubles es posible aplicar los mismos conceptos siempre y cuando los gases absorbidos formen soluciones liquidas ideales, esto dependerá únicamente de la naturaleza de los compuestos tratados, la presencia de solutos no volátiles que no sean ideales también afectara la solubilidad de los gases (Mcabe et al., 2007).

2.7.4. Soluciones líquidas ideales

Una solución liquida es ideal si cumple las siguientes consideraciones:

- Si se mezclan los componentes las fuerzas promedio de atracción y repulsión no cambian.
- 2. Los cambios en la composición varia de forma lineal con la presión y el volumen del sistema.
- No existe generación ni consumo de calor al poner en contacto los componentes, en el caso de la absorción de gases no es considerado el calor de condensación.

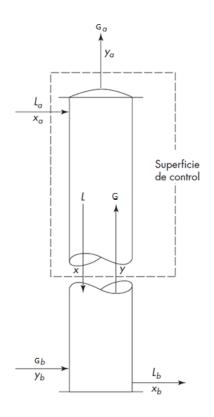
En la vida real no existen soluciones ideales, pero hay varias soluciones reales que tienden a ser ideales como límite, este concepto es utilizado para poder calcular la presión parcial de equilibrio de un gas sin que sea necesario una parte experimental mediante la ecuación de Raoult, en donde establece que se puede determinar la presión parcial de un componente en equilibrio multiplicando su presión de vapor por su fracción molar en la solución a una misma temperatura (Treybal, 2007).

2.7.5. Balances de materia

Parámetros como el diámetro de la columna empacada dependen de las cantidades tratadas de gas y líquido, de sus propiedades y de la interacción entre las dos corrientes, la altura de la torre depende de la concentración requerida de gas en el solvente y de la velocidad de transferencia de masa por unidad de volumen empacado, para ello es necesario contar con balances de masa, balance de entalpia y los coeficientes de transferencia de materia (Mcabe et al., 2007).

Figura 4.

Diagrama de flujos de una columna empacada.



En funcion de la figura 4. Se presenta los balances para una seccion de la columna. Donde G es la velocidad en la fase gaseosa expresada en flujo molar, L es por otro lado la velocidad del flujo molar de la fase liquida para un mismo punto de la columna.

Ecuación 1. Balance general de materia

$$L_a + G = L + G_a$$

Donde:

 L_a = Flujo de entrada del líquido a la columna

G = Flujo de entrada del gas a la columna

L = Flujo de salida del liquido en la superficie de control

 G_a =Flujo de salida del gas en la superficie de control

Ecuación 2. Balance general de materia para el componente A en un punto de la columna.

$$L_a x_a + G_b = L_x + G_a y_a$$

Donde:

 x_a = Fracción molar del componente a en la entrada del liquido

 G_b = Flujo de salida del gas de la columna

 L_x = Flujo de salida del liquido en la superficie de control

 y_a = Fracción molar a la salida de la columna para el componente a en el gas

Si se toma en cuenta las entradas y salidas de los flujos en la columna se puede plantear ecuaciones globales de materia, para un punto dado las concentraciones del gas y el liquido se expresan como y y x respectivamente para un componente A.

Ecuación 3. Balance general de materia para la columna.

$$L_a + G_b = L_b + G_a$$

Donde:

 L_b = Flujo de salida del líquido de la columna

Ecuación 4. Balance para el componente A en un punto de la columna

$$L_a x_a + G_b y_b = L_b x_b + G_a y_a$$

Donde:

 y_b = Fracción molar de a en la entrada del gas a la columna.

 x_b = Fracción molar de a en el liquido a la salida de la columna.

Si reordenamos la Ecuación 4. Se puede obtener una relacion entre x y y (composiciones globales del liquido y el gas en cualquier seccion de la columna) válida para cualquier punto de la columna. La ecuacion se la conoce como linea de operación y debe estar situada mas arriba de la linea de equilibrio para que la absorcion se pueda dar.

Ecuación 5. Relación mínima líquido-gas

$$y = \frac{L}{G}x + \frac{G_a y_a - L_a x_a}{G}$$

Donde:

y= Facción molar de a en el gas

x =Fracción molar de a en el líquido

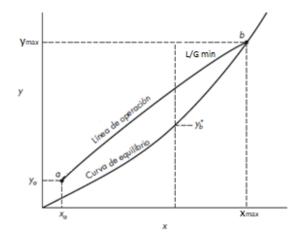
2.7.6. Relacion gas-líquido minima o limitante

La relacion del los flujos molares del liquido y del gas L/G en la Ecuacion 5.

Muestra la pendiente de la linea de operación, mientras mayor sea la disminucion del flujo del liquido mas se hacerca la linea de operacion a la linea de equilibrio consiguiendo asi la maxima concentracion del liquido y el minimo flujo del liquido cuando las dos lineas coinsiden en un punto como se puede observar en la Figura 5., siempre y cuando se mantenga constante el flujo del gas y las concentraciones extremas de las dos fases, cabe recalcar que para que esta condicion de operación se pueda llevar a cabo se requiere un altura infinita de la columna empacada.

Figura 5.

Relacion Gas-Liquido mínima o limitante.



Para el diseño de un proceso con una columna real el flujo molar del liquido siempre debe ser mayor al minimo para conseguir el cambio requerido en la composicion del gas, cuando se trabaja con flujos en contracorriente es impresindible considerar desde lo económico la relación L/G, si se utiliza un flujo alto del liquido la fuerza impulsora de transferencia de masa (y-y*) sera mayor en toda la columna a excepcion de la parte superior por lo que no se requiere de columnas muy altas para la absorción. Sin embargo utilizar columnas con un flujo de liquido demasiado grande es contraproducente en el momento de la desorcion debido al consumo de energia que se requerira para la separacion, en la mayoria de los procesos de absorcion la desorcion es la que manda en cuanto a costos de operación, por lo general la velocidad del liquido optima debe estar comprendida entre 1.1 a 1.5 veces la velocidad minima del Liquido (Mcabe et al., 2007).

2.7.7. Velocidad de absorción

La velocidad de absorción puede ser expresada utilizando coeficientes globales o individuales tanto para la fase liquida como para la fase gaseosa. Con el fin de simplificar la ecuación se omitirá la corrección para la difusión en una única dirección y se considera constante el flujo del gas como el del líquido, estas ecuaciones se las

puede usar solo con concentraciones diluidas, pero se ha obtenido buenos resultados con contenidos de hasta un 10% de soluto (Mcabe et al., 2007).

Ecuación 6. Velocidad de absorción

$$r = K_G a_W (y - y^*)$$

Donde:

r = Velocidad de transferencia de masa

 K_G = Coeficiente global de transferencia de masa en el gas

 a_W = Área interfacial de transferencia de masa

 y^* = Fracción molar en el equilibrio

Se puede remplazar la fuerza impulsora $(y-y_i)$ por $(p-p_i)$ para la fase gaseosa debido a que son proporcionales, los valores para las concentraciones en la interfase pueden ser obtenidos mediante el diagrama mostrado en la figura 6. Se traza una línea recta con pendiente $=-k_La/k_Ga$ que inicia en la línea de operación y se interseca con la línea de equilibrio, el punto de intersección nos dará los resultados de (x_i, y_i) que son las composiciones en la superficie de contacto o interfase. Del mismo diagrama de puede obtener los coeficientes globales de transferencia de materia (Mcabe et al., 2007).

Ecuación 7. Coeficiente global de transferencia de materia

$$\frac{1}{K_G a_w} = \frac{1}{k_G a_w} + \frac{H}{k_L a_w}$$

Donde:

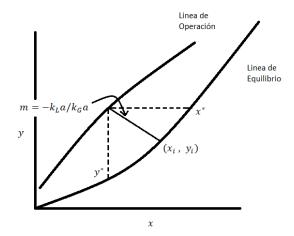
 k_G = Coeficiente individual de transferencia de masa en el gas

 $k_{\it L}$ = Coeficiente individual de transferencia de masa en el líquido

H = Constante de Henry

Figura 6.

Determinación de las composiciones de equilibrio e interfase



Cuando los coeficientes individuales son del mismo orden de magnitud y el coeficiente de la ley de Henry es mucho mayor a la unidad, se puede decir que la absorción estará controlada por la película liquida debido a que un cambio en k_La producirá un efecto proporcional en K_Ga y K_La , mientras que un cambio en k_Ga solo tendrá un pequeño efecto. Esto sucede en la absorción de CO_2 en agua ya que a una atmosfera H=1430, por lo que un incremento en la velocidad del gas aumentaría k_Ga pero no produce cambios significativos en los coeficientes globales, si la velocidad del líquido es mayor podría producir un incremente en el área de superficie de contacto aumentando k_La y K_Ga (Mcabe et al., 2007).

2.7.8. Efecto de la presión

Para incrementar la velocidad de transferencia de masa las columnas se absorción son operadas por lo general bajo presión, un incremento en la presión del sistema producirá una disminución de la fracción molar de equilibrio en el gas por lo que

la fuerza impulsora será mayor, la velocidad mínima del líquido también disminuye con el incremento de la presión por lo que es posible obtener una mayor composición de soluto en el líquido favoreciendo de esta forma a reducir los costos de desorción o eliminación. El coeficiente global $K_G a$ incrementa debido a que la resistencia $\frac{H}{k_L a}$ disminuye (Mcabe et al., 2007).

2.7.9. Operación no isotérmica

Cuando se trabaja con mezclas gaseosas y líquidas diluidas en absorbedores se puede considerar que la operación se lleva a cabo de forma isotérmica, sin embargo, esto no sucede en procesos reales de absorción por lo que los efectos de la temperatura no deben ser despreciados, un incremento en la temperatura del líquido producirá una reducción de la solubilidad en el equilibrio por lo que la capacidad de absorción se verá afectada de forma negativa. Para compensar el incremento de la temperatura se puede incrementar el flujo del líquido o colocar espirales de enfriamiento en ciertos intervalos del proceso (Treybal, 2007).

2.7.10. Variaciones de la temperatura en columnas empacadas.

Si se introduce un gas con una alta composición de soluto se tendrá una variación considerable en la temperatura dentro de la columna, la temperatura de la solución incrementa con el calor de absorción del soluto, caso contrario sucederá con la evaporación del disolvente que producirá una reducción en la temperatura, el efecto global producido en la columna será por lo general un incremento en la temperatura, el cual dependerá de la velocidad de absorción del soluto, el calor de evaporación o condensación del absorbente y del flujo de calor entre la fase líquida y gaseosa (Mcabe et al., 2007).

2.8. Absorción con reacción química.

Con el fin de lograr una separación más completa del soluto a partir de una mezcla gaseosa la absorción es seguida por una reacción química en la fase liquida, este proceso es muy usado para retirar el NH₃ utilizando soluciones acidas diluidas, otro ejemplo es en la limpieza de gases en donde el CO₂ es separado con soluciones básicas. La velocidad de absorción se incrementa debido a la reducción de la presión parcial de equilibrio del soluto sobre la solución debido a la reacción. El coeficiente de transferencia de masa también se verá afectado de forma positiva por la reacción, esto se debe a que se dará un incremento en la zona de contacto efectiva ya que la absorción también se llevará a cabo en lugares estancados. Cuando la resistencia dominante se encuentra en la película líquida se puede reducir con una reacción química rápida en el líquido, logrando un incremento en el coeficiente de transferencia de masa (Mcabe et al., 2007).

2.8.1. Reacciones reversibles e irreversibles

En una reacción irreversible los reactantes disminuyen conforme la reacción se lleva a cabo y termina cuando el reactivo limitante se agota, es decir se transforma completamente en un producto y la reacción se da en una sola dirección. Las reacciones que pueden tener lugar en los dos sentidos se conocen como reacciones reversibles, los productos reaccionan para formar reactantes en este caso se alcanzará un estado de equilibrio en donde la velocidad de reacción es idéntica a cero para todas las especies (Fogler, 2008).

2.9. Desorción o eliminación.

El soluto absorbido a partir de la corriente gaseosa debe ser recuperado para la reutilización del absorbente, un incremento en la temperatura o una reducción en la presión favorece el proceso de desorción, a altas presiones de operación es posible

recuperar el soluto por medio de una evaporación instantánea (flawshing) a presión atmosférica. El vapor de agua y los gases inertes son muy utilizados cuando se requiere una recuperación casi total del soluto, el proceso es inverso a la absorción y es mucho más viable cuando se utiliza vapor de agua debido a que se lo puede separar por condensación, dentro de este proceso el costo del vapor de agua es el más importante a considerar y el diseño debe darse en base a la utilización de la menor cantidad de vapor posible. Al igual que en la absorción es recomendable que parte del soluto se quede en el absorbente y no tratar de recuperarlo por completo (Mcabe et al., 2007).

2.10. Solubilidad.

La solubilidad de un gas se puede determinar como la relación entre la cantidad de moles de gas que se absorben en la fase liquida y las moles del solvente, para este caso de estudio, la solubilidad estará expresada como las moles de CO₂ absorbido sobre las moles de AMP en la fase liquida. La solubilidad debe ser elevada para trabajar con flujos pequeños de disolvente, una reacción química entre el soluto y el disolvente generaran una solubilidad alta, sin embargo, esto solo se puede llevar a cabo si la reacción es reversible (Revert, 1969).

Figura 7.

Solubilidad del CO₂ en AMP acuoso.

T = 298 K		T=308 K		T=318 K		T = 328 K	
$p_{\rm CO_2}/{\rm kPa}$	α_{CO_2}	p _{CO₂} /kPa	α_{CO_2}	$p_{\rm CO_2}/{\rm kPa}$	α_{CO_2}	$p_{\rm CO_2}/{\rm kPa}$	α_{CO_2}
		[A	MP] = 2.5	mol ⋅ dm ⁻³			
0.601	0.461	0.440	0.313	0.502	0.274	0.665	0.232
1.954	0.590	1.373	0.461	2.328	0.457	2.765	0.368
5.437	0.712	3.076	0.555	6.490	0.594	5.343	0.460
7.909	0.780	5.912	0.662	8.430	0.640	15.72	0.575
11.58	0.811	10.22	0.712	12.75	0.663	25.02	0.653
19.05	0.893	14.66	0.766	32.15	0.812	35.74	0.711
31.10	0.912	35.41	0.858	49.22	0.858	79.41	0.797
39.06	0.932	55.20	0.897	82.01	0.892	88.10	0.841
122.9	0.990	87.51	0.935	127.6	0.925	125.3	0.863
444.2	1.026	205.0	0.989	258.8	0.969	272.2	0.933
723.3	1.056	542.2	1.018	462.6	0.991	484.6	0.979
1018	1.079	864.0	1.047	767.5	1.025	743.0	0.993
1402	1.100	1119	1.059	1135	1.053	1049	1.022
		1433	1.073	1429	1.074	1430	1.045
		[A	MP1 = 3.4	mol ⋅ dm ⁻³			
0.685	0.426	0.520	0.301	0.686	0.282	1.890	0.291
1.077	0.495	6.352	0.584	5.396	0.520	4.148	0.383
2.170	0.560	8.798	0.672	8.382	0.548	13.73	0.518
6.604	0.701	14.91	0.708	13.57	0.616	28.65	0.606
8.875	0.734	19.11	0.747	22.62	0.697	44.88	0.674
14.11	0.780	38.12	0.828	61.45	0.817	73.02	0.744
35.56	0.886	62.14	0.868	98.84	0.882	139.4	0.831
49.85	0.930	114.7	0.925	143.2	0.897	219.6	0.874
94.21	0.954	152.8	0.945	212.3	0.938	306.2	0.895
246.8	0.995	667.2	0.998	509.5	0.966	443.2	0.919
353.6	1.005	816.0	1.011	650.4	0.981	666.1	0.953
853.0	1.032	960.7	1.025	1009	1.018	901.0	0.977
1434	1.056	1426	1.040	1427	1.050	1079	0.982
						1449	1.009
		[A	MP1 = 4.9	mol · dm ^{−3}			
0.450	0.337	0.412	0.260	0.533	0.216	0.701	0.191
1.557	0.483	1.580	0.413	3.190	0.394	2.120	0.278
2.238	0.569	3.621	0.501	7.380	0.479	4.815	0.335
3.469	0.601	9.804	0.587	11.79	0.537	10.14	0.424
9.335	0.681	12.14	0.660	19.33	0.606	18.95	0.501
14.47	0.783	21.43	0.728	35.41	0.665	35.53	0.577
22.29	0.818	35.67	0.787	59.75	0.759	90.94	0.657
37.78	0.875	55.89	0.840	81.20	0.777	119.3	0.717
65.59	0.919	98.87	0.901	106.4	0.801	223.6	0.772
92.50	0.930	149.1	0.921	151.7	0.838	343.8	0.837
235.2	0.981	311.1	0.957	345.5	0.923	488.3	0.854
587.0	1.005	520.1	0.987	587.0	0.950	781.1	0.912
981.0	1.020	714.4	0.994	747.6	0.971	1108	0.936
1410	1.032	1026	1.006	1076	0.991	1402	0.962
		1412	1.015	1398	1.001		
		_		-			

Nota. Tomado de (Dash, Samanta, & Bandyopadhyay, 2011)

CAPÍTULO III

3. Metodología del desarrollo del proyecto

3.1. Construcción del modelo matemático

3.1.1. Química de la reacción

La absorción del CO₂ se lleva a cabo por una reacción entre un ácido débil (CO₂) con una base débil (alcanolamina "AMP"), se forma una sal que es soluble en agua. Esta reacción es reversible por lo cual será posible la recuperación del solvente, la AMP es una amina estéricamente impedida por lo que se espera que no forme carbamatos estables, en la absorción de gases ácidos la resistencia de la película liquida es la dominante y la reacción se lleva a cabo únicamente en la fase liquida.

Ecuación 8. Reacción de ionización del agua

$$2H_2O \leftrightharpoons H_3O^+ + OH^-$$

Ecuación 9. Disolución de CO2 en agua

$$CO_2 + 2H_2O \leftrightharpoons H_3O^+ + HCO_3^-$$

$$HCO_3^- + H_2O = H_3O^+ + CO_3^{2-}$$

Ecuación 10. Protonación de la amina

$$RNH_2 + H_3O^+ \leftrightharpoons RNH_3^+ + H_2O$$

Ecuación 11. Formación del carbamato

$$RNH_2 + HCO_3^- \leftrightharpoons RNHCOO^- + H_2O$$

Despreciando los iones OH^- Y CO_3^{2-} por su baja concentración, la absorción física por la rápida velocidad de reacción y la baja estabilidad del carbamato se puede resumir en una única reacción de equilibrio.

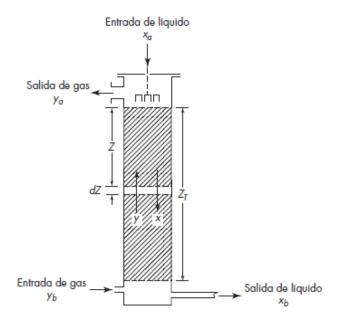
Ecuación 12. Reacción de absorción del CO₂

$$AMPH^+ + HCO_3^- \Leftrightarrow AMP + CO_{2(aa)} + H_2O$$

3.1.2. Modelo de columna empaquetada

Figura 8.

Diagrama de una columna de absorción empacada.



Nota. Tomado de (Mcabe et al., 2007).

El modelo en que se basa el presente estudio es el llamado teoría de doble película, la materia se transporta de una fase a otra en la cual la velocidad global será afectada por la velocidad de difusión en ambas fases. Aunque la resistencia en la fase gaseosa es mucho menor que la resistencia en la fase no se puede despreciar. Debido

a la falta de datos experimentales para el proceso de absorción de CO₂ con

Aminometilpropanol (AMP) se tomará en cuenta algunos supuestos que han dado

buenos resultados en trabajos previos, uno de ellos es el modelo realizado por Pandya

para la absorción adiabática de gases en columnas empaquetadas.

- Por su rápida velocidad de reacción esta se lleva a cabo en la película liquida.
- La resistencia para el solvente volátil en la parte del líquido es insignificante.
- La temperatura en la interfase es la misma que la temperatura de la película
 líquida. Esto se debe a que la resistencia a la transferencia de calor en la fase
 liquida es pequeña en comparación con la resistencia en la fase gaseosa.
- El área tanto para la transferencia de masa y la transferencia de calor es la misma. Se puede lograr con un correcto armado del relleno.
- Existe indicios de que la dispersión axial puede ser un efecto menor, para el caso no se toma en cuenta.
- La columna de absorción trabaja de forma adiabática.
- Ambas fases serán consideradas ideales.

Aunque el ultimo supuesto es algo irreal debido a la presencia de electrolitos débiles este se justifica con la falta de datos experimentales confiables para el diseño de modelos más elaborados con muchos parámetros ajustables, para lo cual un modelo simple basado en la idealidad es apropiado para las condiciones en las que se realiza la limpieza de gases de combustión (Gabrielsen, 2005).

3.1.3. Transferencia de calor y masa.

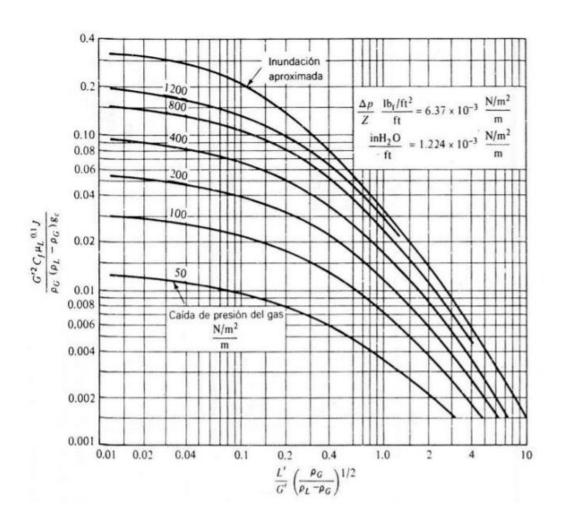
Para la determinación del coeficiente de transferencia de calor se debe establecer parámetros de diseño como flujos de entrada, diámetro de la columna,

tamaño del empaque y condiciones de presión, temperatura y concentración para la corriente liquida y gaseosa.

El flujo de entrada del gas se lo determinara con las tablas de producción de CO₂ para la central térmica de Esmeraldas, publicado en el informe de Emisión de CO₂ del Sistema Nacional Interconectado del Ecuador publicado en 2013 por el Ministerio del Ambiente (Narváez & Parra, 2013).

Figura 9.

Inundación y caída de presión en torres empacadas.



Nota. Tomado de (Treybal, 2007).

46

El flujo de entrada mínimo del líquido se lo determina por la Ecuación (5) que

muestra la relación mínima que existe entre el flujo del líquido y el flujo del gas, para el

diseño se utilizara un factor de 1.2 veces el flujo mínimo. Para la determinación del

diámetro y selección del empaque se utiliza curvas de caída de presión del gas

(coordenadas de Eckert), la caída de presión usada será de 800 $\frac{N/m^2}{m}$. En la Figura 8 se

puede observar cómo se relaciona los flujos del líquido y el gas con el flujo del gas por

unidad de área, de aquí se puede obtener el diámetro de la columna de absorción

requerido.

Se determinará el coeficiente de transferencia de calor (h) en la fase gaseosa

por la analogía de Chilton-Colburn en donde relaciona al factor de transferencia de

masa con el factor de transferencia de energía y utilizando el caso de película liquida en

una torre de paredes mojadas, transferencia entre gal-liquido. El flujo de transferencia

de calor puede ser encontrado con la siguiente ecuación.

Ecuación 13. Flujo de calor

 $q = h(T_G - T_L)$

Donde:

q = Flujo de calor

h =Coeficiente de transferencia de calor en el gas

 T_G = Temperatura del gas

 T_L = Temperatura del líquido

Figura 10.

Analogías de Chilton-Colburn

$$St_{H, pr} Pr^{2/3} = \frac{j_{1 pr}}{C_{\rho} \bar{u}_{x} \rho} Pr^{2/3} = j_{H} = \frac{1}{2} f = \psi(Re)$$

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

Nota. Tomado de (Treybal, 2007).

Los coeficientes individuales de transferencia de masa tanto para el CO₂ como para el H₂O y el área interfacial de transferencia se obtendrán utilizando las correlaciones de Billet y Schultes para columnas empacadas, el coeficiente global en la fase gaseosa K_{G,CO_2} es determinado por la Ecuación 7. Asumiendo que no existe resistencia para transferencia de masa del agua en el líquido se puede establecer que $K_{G,H_2O} = k_{G,H_2O}$. Los flujos para el componente CO₂ y el H₂O pueden ser expresados de la siguiente forma.

Ecuación 14. Flujo molar de CO₂

$$N_{CO_2} = K_{G,CO_2} a_w (p_{CO_2} - p_{CO_2}^*)$$

Donde:

 N_{CO_2} = Flujo molar de CO₂

 K_{G,CO_2} = Coeficiente global de transferencia de masa para el CO₂

 p_{CO_2} = Presión parcial del CO₂

 $p_{CO_2}^*$ = Presión parcial del CO₂ en el equilibrio

Ecuación 15. Flujo molar de H₂O

$$N_{H_2O} = K_{G,H_2O} a_w (p_{H_2O} - p_{H_2O}^*)$$

Donde:

 N_{H_2O} = Flujo molar de H₂O

 K_{G,H_2O} = Coeficiente global de transferencia de masa para el H₂O

 p_{H_2O} = Presión parcial del H₂O

 $p_{H_2O}^*$ = Presión parcial del H₂O en el equilibrio

La tensión superficial de la mezcla liquida será determinada por el método de Tamura, Kurata y Odani para una mezcla de un compuesto orgánico con Agua.

Figura 11.

Correlaciones de Billet y Schultes.

$$\begin{split} k_{\rm L} &= C_{\rm L} \bigg(\frac{\rho_{\rm L} g}{\mu_{\rm L}} \bigg)^{1/6} \bigg(\frac{a_{\rm T} D_{\rm L}}{4 \epsilon} \bigg)^{1/2} \bigg(\frac{U_{\rm L}}{a_{\rm T}} \bigg)^{1/3} \\ k_{\rm G} &= C_{\rm G} \frac{a_{\rm T} D_{\rm G}}{(4 \epsilon^2 - 4 \epsilon h_{\rm T})^{1/2}} \bigg(\frac{\rho_{\rm G} U_{\rm G}}{a_{\rm T} \mu_{\rm G}} \bigg)^{3/4} \bigg(\frac{\mu_{\rm G}}{\rho_{\rm G} D_{\rm G}} \bigg)^{1/3} \\ \frac{a_{\rm w}}{a_{\rm T}} &= 1.5 (4 \epsilon)^{1/2} \bigg(\frac{\rho_{\rm L} U_{\rm L}}{a_{\rm T} \mu_{\rm L}} \bigg)^{-2/10} \bigg(\frac{\rho_{\rm L} U_{\rm L}^2}{a_{\rm T} \sigma_{\rm L}} \bigg)^{3/4} \bigg(\frac{a_{\rm T} U_{\rm L}^2}{g} \bigg)^{-0.45} \end{split}$$

Nota. Tomado de (Piché, Grandjean, & Larachi, 2002).

3.1.4. Equilibrio termodinámico Liquido-Vapor

El determinación de la presión parcial del CO₂ en el gas se encuentra directamente ligada a la concentración del CO₂ absorbido en la solución por la ley de Henry, varios modelos han sido propuestos para la estimación de la presión parcial de CO₂ en soluciones acuosas de aminas, para el presente estudio se utilizará el modelo propuesto por (Gabrielsen, 2005).

Ecuación 16. Presión parcial del CO2 en el equilibrio

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

Donde:

 K_{CO_2} = Constante de equilibrio del CO₂

 x_{CO_2} = Fracción molar de CO₂ en el líquido

 \propto = Moles de CO₂/Moles de amina

Ecuación 17. Constante de equilibrio del CO₂

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

Donde:

T = Temperatura del sistema

Gracias a la baja estabilidad del carbamato formado gran parte del CO₂ absorbido se encontrará en forma de bicarbonato debido a la hidrolisis del carbamato o la formación por iones híbridos (Bougie & Iliuta, 2012). Cuando reacciona el CO₂ con una solución de amina nueva se formará una gran cantidad de carbamato y bicarbonato, el calor liberado en la formación del bicarbonato suele ser menor que el calor liberado por la formación del carbamato (McCann, Maeder, & Hasse, 2011). A medida que la carga de CO₂ incrementa se produce una disminución en la cantidad de amina libre reduciendo la formación del carbamato y el calor de absorción, Gabrielsen derivo la ecuación termodinámica de Gibbs-Helmholtz para el sistema CO₂-AMP en donde muestra que el calor de absorción disminuye cuando incrementa la carga.

Ecuación 18. Calor de absorción del CO2

$$\Delta H_{CO_2} = R(-8161 + 47652 \, \frac{\alpha}{T})$$

Donde:

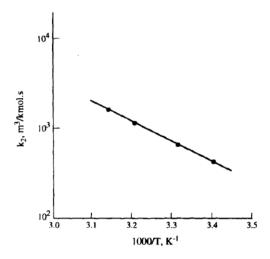
 ΔH_{CO_2} = Calor de absorción del CO₂

R =Constante de los gases

3.1.5. Cinética de reacción

Figura 12.

Gráfico de Arrhenius para el sistema CO2-AMP.



Nota. Tomado de (Saha & Bandyopadhyay, 1995).

Varios estudios se han realizado sobre la cinética de reacción del sistema CO₂-AMP, uno de ellos es el presentado por Saha, en donde presenta valores de la constante de velocidad de segundo orden. La ecuación es válida para rangos de temperatura entre 298-318K y una energía de activación de 43 KJ/mol (Saha & Bandyopadhyay, 1995).

Ecuación 19. Velocidad de reacción

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

Donde:

k = Constante de velocidad de reacción

3.1.6. Incremento de la tasa de absorción debido a la reacción.

Los modelos de transferencia de masa gas-liquido se basan por lo general en términos convectivo, difusión y reacción, debido a la baja concentración de los componentes en la película estancada la convección no es tomada en cuenta para el presente trabajo, por lo que la transferencia de masa en el sistema CO₂-AMP estará dominada por la difusión y la reacción química. La correlación de Krevelen y Hoftijzer ha sido considerado uno de los trabajos pioneros para la aproximación analítica de modelos de absorción con reacción química, la correlación se basa en tres expresiones mostradas en la figura 13.

Figura 13.

Correlación de Krevelen y Hoftijzer.

$$E_{A} = \frac{\phi_{A,2} \sqrt{\frac{E_{A,\infty}^{film} - E_{A}}{E_{A,\infty}^{film} - 1}}}{\tanh\left(\phi_{A,2} \sqrt{\frac{E_{A,\infty}^{film} - E_{A}}{E_{A,\infty}^{film} - 1}}\right)}$$
$$\phi_{A,2} = \frac{\sqrt{D_{A} k_{2} C_{B}}}{k_{L0}}$$
$$E_{A,\infty}^{film} = 1 + \frac{D_{B} C_{B,L}}{v_{B} D_{A} C_{A Li}}$$

Nota. Tomado de (Putta, Tobiesen, Svendsen, & Knuutila, 2017).

El factor de mejora se introducirá en la Ecuación 7. para obtener un coeficiente de transferencia de masa que considera la reacción química.

Ecuación 20. Coeficiente de transferencia de masa con reacción química

$$\frac{1}{K_G a_W} = \frac{1}{k_G a_W} + \frac{H}{E_A k_L a_W}$$

Donde:

 E_A = Factor de mejora por la reacción química

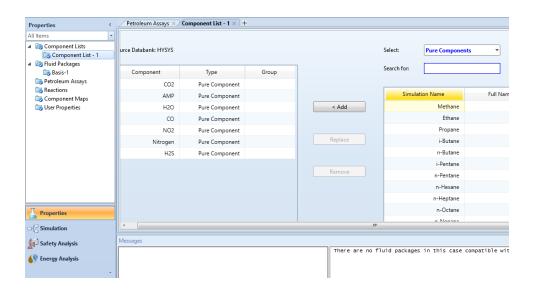
3.2. Simulación del proceso de absorción.

3.2.1. Selección de componentes.

Los componentes son seleccionados tanto para la fase liquida como para la fase gaseosa. La amina presente en este estudio se encuentra con la abreviatura AMP.

Figura 14.

Selección de componentes



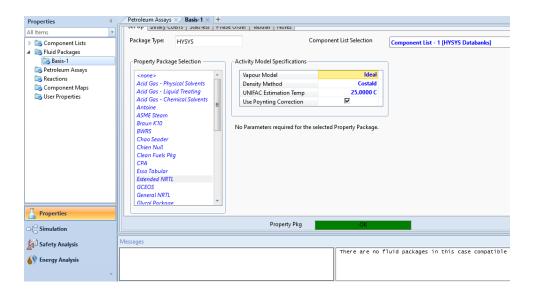
Nota. Opción Component List

3.2.2. Selección de paquete termodinámico.

El paquete usado para el análisis de la absorción de CO₂ con aminas es el Acid Gas-Chemical Solvents, Sin embargo, no existe la amina propuesta para el presente estudio dentro del paquete termodinámico, por ello el paquete seleccionado es el Extended NRTL que ha mostrado buenos resultados al momento de simular con el componente AMP.

Figura 15.

Selección del paquete termodinámico.



Nota. Opción Fluid Packages.

3.2.3. Selección del sistema de unidades.

Las unidades seleccionadas para el desarrollo de la simulación fue el Sistema Internacional de Unidades de Medida (S.I.).

Figura 16.

Selección de unidades de trabajo.

Available Units Se	ts
Unit Set Name	SI
Field	
SI	
EuroSI	
Safety EN	
Safety SI	
NewUser	
NewUser1	

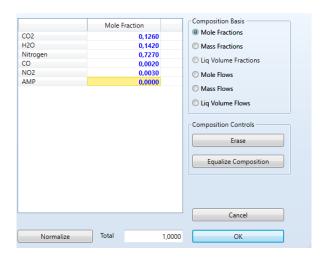
Nota. Opción Units of Measure.

3.2.4. Creación de la corriente gaseosa.

Los componentes y concentraciones usadas en la creación de la corriente son en base a la reacción de combustión del Fuel Oíl 6, Combustible usado en la Central Térmica Esmeraldas.

Figura 17.

Concentraciones de la corriente gaseosa proveniente de la combustión.



Nota. Opción Composition (Mole fractions).

La presión y temperatura de estudio en la primera simulación es de 100 kPa y 308 K, el flujo molar es establecerá en función a la tasa de emisión de CO₂ anual publicado por el ministerio del ambiente en 2013.

Figura 18.

Presión, temperatura y flujo de la corriente gaseosa.

Worksheet	Stream Name	Gas Feed	Vapour Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,9085	0,9085
Properties	Temperature [C]	34,85	34,85
Composition	Pressure [kPa]	100,0	100,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	4,716	4,284
Petroleum Assay K Value	Mass Flow [kg/h]	135,2	127,4
User Variables	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1637	0,1558
Notes	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-8,762e+004	-6,787e+004
Cost Parameters	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	177,4	194,3
Normalized Yields	Heat Flow [kJ/h]	-4,132e+005	-2,908e+005
	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	<empty></empty>	<empty></empty>
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

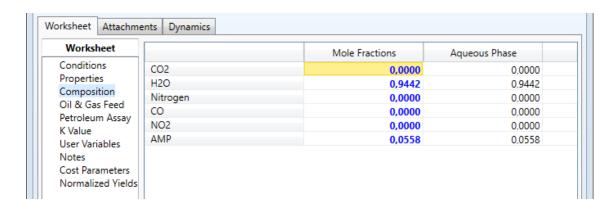
Nota. Opción Conditions.

3.2.5. Creación de la corriente liquida.

El flujo de la corriente liquida seleccionada es 1.2 veces mayor a la corriente mínima de líquido calculada con la Ecuación 5., la concentración de AMP es 2.5 kmol/m³ y las condiciones de entrada de presión y temperatura son 100 kPa y 308 K.

Figura 19.

Composiciones de la corriente liquida en fracción mol.



Nota. Opción Composition

Figura 20.

Condiciones de entrada en la corriente liquida.

Worksheet	Stream Name	Amina Feed	Aqueous Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Properties	Temperature [C]	34,85	34,85
Composition	Pressure [kPa]	100,0	100,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	15,85	15,85
Petroleum Assay K Value	Mass Flow [kg/h]	348,4	348,4
User Variables Notes Cost Parameters	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,3547	0,3547
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,851e+005	-2,851e+005
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	11,29	11,29
Normalized Yields	Heat Flow [kJ/h]	-4,519e+006	-4,519e+006
	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	0,3517	0,3517
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

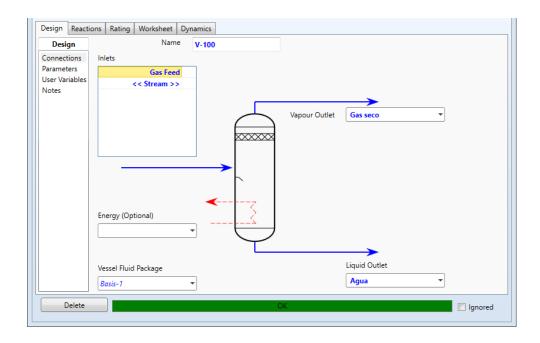
Nota. Opción Conditions

3.2.6. Eliminación del vapor de agua contenida en la corriente gaseosa.

El agua proveniente del proceso de combustión se elimina con el uso de un separador flash, teniendo una entrada de gas seco al absorbedor.

Figura 21.

Corrientes de entrada y salida del separador flash.



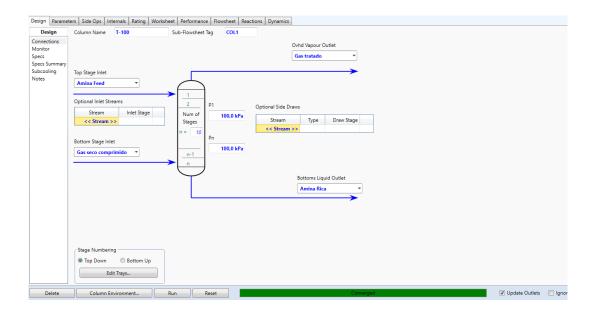
Nota. Opción Desing.

3.2.7. Columna de Absorción.

Las corriente liquida ingresa al absorbedor por la parte superior aprovencando la gravedad, mientras que la corriente gaseosa ingresa por la parte inferior, en la salida de vapor se obtendra una corriente de gas denominada (Gas Tratado) que contentra la corriente gaseosa junto con el CO₂ que no fue absorbido, en la salida liquida se obtendra una corriente denominada (Amina rica) que estara compuesta por la corriente liquida junto con el CO₂ absorbido.

Figura 22.

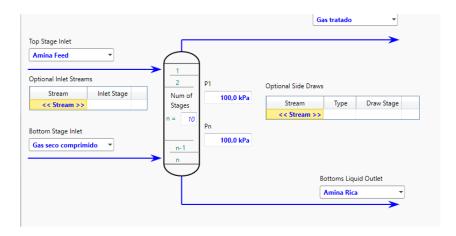
Esquema de corrientes de entrada y salida del Absorbedor.



Nota. Selección de corrientes.

La presión en el absorbedor será la misma que la presión de entrada de las corrientes, 100 kPa.

Figura 23. Presión en el absorbedor.



Nota. La presión de salida será la misma para las dos corrientes.

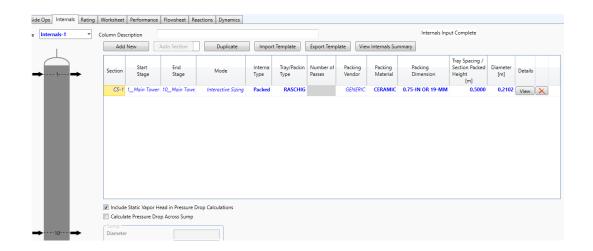
3.2.8. Selección del tipo, diámetro y altura del empaque.

El tipo de empaque y diametro sera seleccionado en base a la caida de presion y las relaciones de diseño basados en las curvas de caida de presion de Eckert, la altura

de cada etapa sera de 0.21 metros con un total de 10 etapas, dando una altura total de 5 metros.

Figura 24.

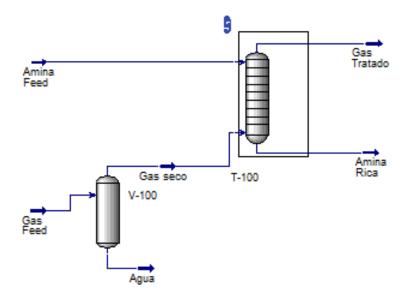
Análisis interno de la columna.



Nota. Opcion Internals, add new.

Figura 25.

Diagrama final del proceso de absorcion.



CAPÍTULO IV

4. Análisis e interpretación de resultados

4.1. Composición de la corriente de gas a tratar.

La corriente proveniente de la combustión contiene una fracción molar de agua de 0.142, esta concentración interviene de forma significativa en el cálculo de las constantes de transferencia de masa por lo que el trabajo se desarrolló con una base seca, esto se logró condensando el agua en un separador flash, el flujo molar de la corriente gaseosa en base seca es de 4.284 Kmol/h.

Tabla 1.

Composición de la corriente de gas seco.

Compuesto	Fracción
Compuesto	molar
CO ₂	0.1387
H_2O	0.0557
N_2	0.8003
CO	0.0022
NO ₂	0.0031

4.2. Modelo matemático.

4.2.1. Balances de masa y energía.

En base a la Ecuación 12, se puede relacionar los cambios en la concentración de los reactivos con la tasa de CO₂ absorbido durante la reacción a lo largo de la columna.

Ecuación 21. Relación de las concentraciones con la tasa de CO₂ absorbido

$$\frac{a \, S \, N_{CO_2}}{1} = \frac{L \, dx_{HCO_3^-}}{dz} = \frac{L \, dx_{H_2O}}{dz} = -\frac{L \, dx_{CO_2}}{dz} = -\frac{L \, dx_{AMPH^+}}{dz}$$

Las ecuaciones de los balances de materia de los componentes y las ecuaciones del balance general de materia y energía se basan en un diferencial de una sección de la columna empaquetada, considerando que la fracción molar del bicarbonato en la mayor parte del líquido es igual a la fracción molar del dióxido de carbono en la mayor parte del líquido por la baja estabilidad del carbamato.

Balance de masa y energía en la Fase Gaseosa:

Ecuación 22. Variación del flujo del gas con respecto a la altura de la columna

$$\frac{dG}{dz} = -S(N_{CO_2} + N_{H_2O})$$

Donde:

S = Sección transversal de la columna

Z = Altura de la columna

Ecuación 23. Variación de la fracción molar del CO2 en el gas

$$\frac{dy_{CO_2}}{dz} = \frac{S(N_{CO_2}(y_{CO_2} - 1) + N_{H_2O} y_{CO_2})}{G}$$

Ecuación 24. Variación de la fracción molar del H2O en el gas

$$\frac{dy_{H_2O}}{dz} = \frac{S(N_{H_2O}(y_{H_2O}-1)+N_{CO_2}y_{H_2O})}{G}$$

Donde:

 y_{H_2O} = Fracción molar del H₂O en el gas

Ecuación 25. Balance general de energía en el gas

$$\frac{dT_G}{dz} = \frac{-Sa_Wq}{Gc_{p,G}}$$

Donde:

 $c_{p,G}$ = Capacidad calorífica del gas

Balance de masa y energía en la Fase Liquida:

Ecuación 26. Variación del flujo del líquido con respecto a la altura de la columna

$$\frac{dL}{dz} = -SN_{H_2O}$$

Ecuación 27. Variación de la fracción molar del CO2 en el líquido

$$\frac{dx_{CO_2}}{dz} = \frac{S(N_{CO_2} - N_{H_2O}x_{CO_2})}{L}$$

Donde:

 x_{CO_2} = Fracción molar del CO₂ en el líquido

Ecuación 28. Variación de la fracción molar del H2O en el líquido

$$\frac{dx_{H_2O}}{dz} = \frac{S(N_{H_2O}(x_{H_2O} - 1) + N_{CO_2})}{L}$$

Donde:

 x_{H_2O} = Fracción molar del H₂O en el líquido

Ecuación 29. Balance general de energía en el líquido

$$\frac{dT_G}{dz} = \frac{S(N_{CO_2}C_{p,CO_2} + N_{H_2O}C_{p,H_2O})(T_L - T_G) - Sq + (N_{CO_2}\Delta H_{CO_2} + N_{H_2O}\Delta H_{H_2O})}{Lc_{p,L}}$$

Donde:

 C_{p,CO_2} = Capacidad calorífica del CO₂

 $c_{p,L}$ = Capacidad calorífica del liquido

 C_{p,H_2O} = Capacidad calorífica del H₂O

 ΔH_{H_2O} = Calor de condensación del H₂O

4.2.2 Flujo mínimo de líquido.

La concentración de amina se estableció en 2.5 mol/dm³,3.4 mol/dm³ 4.9 mol/dm³, el flujo mínimo se determinó con la curva de equilibrio y la curva de operación, el factor usado de relación $\frac{L}{L_{min}}=1.2$.

Tabla 2.Flujos Molares de operación

Flujo min Kmol/h	Flujo Kmol/h
13.2	15.85
11.1	13.32
9.4	11.28
	13.2

4.2.3 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 $800 \, \frac{N/m^2}{m}$.

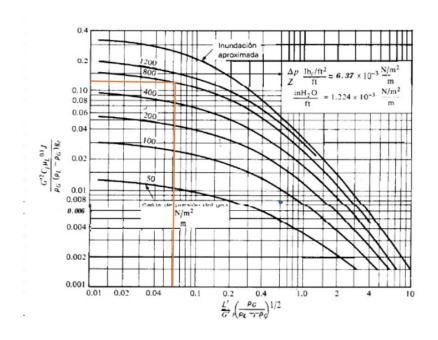
Tabla 3.

Diámetro de la columna y tipo de empaque.

Concentració	Empaqu	D_c	x	37	D_c	Relación D _c
n	е	(in)	λ	y	(cm)	D_a
2.5 mol/dm ³	Rasching	0.75	0.0973	0.11	21.02	11.03
2.5 11101/4111	Ceramico	0.73	0.0973	0.11	21.02	11.03
3.4 mol/dm ³	Rasching	0.75	0.0040	0.40	20.57	40.00
	Ceramico	0.75	0.0818	0.12		10.80
	Rasching					40.50
4.9 mol/dm ³	Ceramico	0.75	0.0693	0.13	20.16	10.58

Figura 26.

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



Nota. Relación $D_c/D_a < 15$

4.2.4 Coeficiente de transferencia de calor.

El factor de transferencia de calor fue encontrado a partir del factor de transferencia de masa, el valor de h se encuentra en unidades de $\frac{W}{m^2 * {}^{\circ}\!C}$.

 Tabla 4.

 Números adimensionales y coeficiente de transferencia de calor.

Concentración	2.5 mol/dm ³	3.4 mol/dm ³	4.9 mol/dm ³
Sc	1366.599206	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

4.2.5 Coeficientes y área interfacial de transferencia de masa.

Tabla 5.

Coeficientes y área interfacial de transferencia de masa.

			4.9
Concentración	2.5 mol/dm ³	3.4 mol/dm ³	mol/dm³
$a_w (\text{m}^2/\text{m}^3)$	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

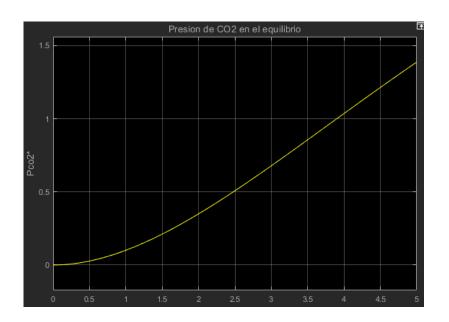
 k_{G,CO_2} (m/s) 0.060251203 0.06228946 0.06422589

Al asumir que no existe resistencia a la transferencia de agua en la fase liquida no fue necesario el cálculo del k_{L,H_2O} , la resistencia total estará en función de la resistencia del k_{G,H_2O} .

4.2.6 Equilibrio termodinámico Liquido-Vapor.

Figura 27.

Presión parcial de CO₂, Solución 2.5 mol/dm³

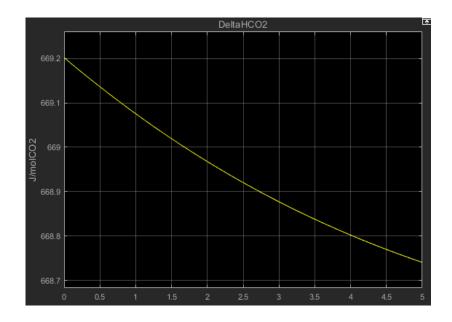


Nota. Eje x (Altura de la columna en metros), Eje y (Presión de CO₂ en kPa).

En la figura 27 se puede observar la variación de la presión parcial de CO₂ en el equilibrio, a medida que los flujos atraviesan la columna la presión de CO₂ incrementa su valor hasta llegar a 1.38 kPa, la altura total de la columna es de 5 metros. Este valor limita la concentración mínima de CO₂ en la corriente tratada, si la presión de CO₂ en la corriente tratada fuera inferior a 1.38 kPa el flujo de CO₂ se volvería negativo.

Figura 28.

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



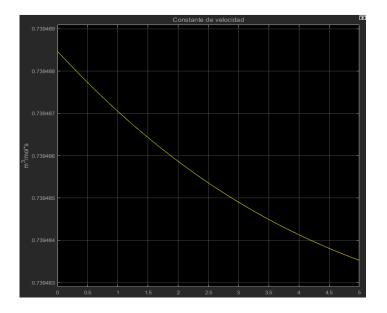
Nota. Eje x (Altura de la columna en metros), Eje y (Calor de absorción del CO₂ en J/mol CO₂).

El calor de absorción disminuye a medida que los flujos atraviesan la columna, la carga de CO₂ aumenta en el líquido y la cantidad de amina libre disminuye, esta reducción de amina producirá una disminución en la formación de carbamatos y permitirá la formación de bicarbonatos con un calor de absorción menor.

4.2.7 Constante de velocidad.

Figura 29.

Variación de la constante de velocidad.



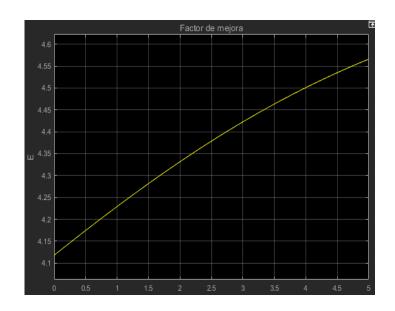
Nota. Eje x (Altura de la columna en metros), Eje y (Constante de velocidad m³/mol*s).

Existe una disminución mínima en la constante de velocidad de segundo orden debido a la reducción de temperatura del sistema.

4.2.8 Factor de mejora por la reacción química.

Figura 30.

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



Nota. Eje x (Altura de la columna en metros), Eje y (Factor de mejora E_A) para una solución 2,5 mol/dm³ de AMP.

El valor obtenido del factor de mejora varía en función de la concentración de AMP, a mayor concentración mayor es el valor del factor de mejora, y por lo tanto el coeficiente global de transferencia de masa para el CO₂ también incrementara su valor.

Tabla 6.Factor de mejora E_A

Concentración	E_A
2.5 mol/dm3	4.12-4.56
3.4 mol/dm3	5.63-6.01
4.9 mol/dm3	7.03-7.42

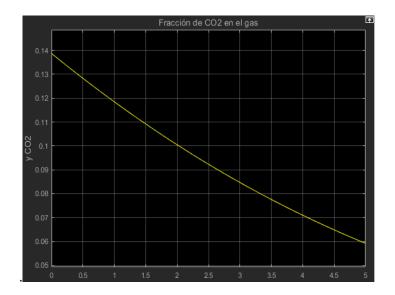
Nota. El factor de mejora crece al aumentar la concentración de AMP.

4.2.9 Variación en la concentración de CO₂.

En la Figura 31. se puede observar la variación de la fracción molar de CO_2 en el gas tratado, a medida que los flujos atraviesan la columna la fracción molar de CO_2 disminuye, alcanzando un valor de $y_{CO_2}=0.059$ para una altura de la columna de 5 metros.

Figura 31.

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



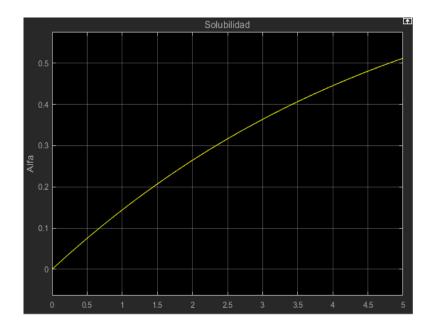
Nota. Eje x (Altura de la columna en metros), Eje y (Fracción molar de CO_2 , y_{CO_2}).

4.2.10 Solubilidad

Como se ha descrito en capítulos anteriores la solubilidad está relacionada directamente con las moles de CO₂ absorbidos y la concentración de la solución de AMP, a medida que se incrementa la longitud de la columna el valor de la solubilidad también lo hace, esto se debe al incremento en las moles absorbidas de CO₂, cuando el sistema se estabilice se obtendrá el valor máximo de solubilidad.

Figura 32.

Solubilidad del CO₂ en la solución 2,5 mol/dm³de AMP.

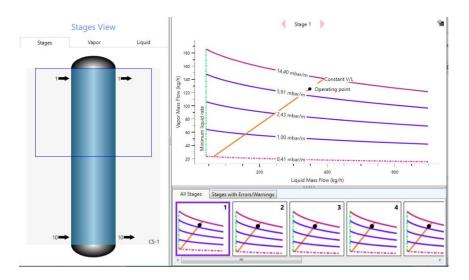


4.3 Simulación del proceso de absorción.

4.3.1 Análisis de flujos internos de la columna en el simulador.

Los flujos y diámetros obtenidos se ingresaron en el simulador para obtener un análisis interno de la columna, la columna operará de forma correcta para cada una de las concentraciones con el diámetro de columna, empaque y flujo requerido.

Figura 33. Curvas de inundación de la columna para la concentración 2.5 mol/dm³.



Nota. El punto de operación es adecuado para cada una de las etapas.

4.3.2 Composición de CO₂ en la corriente liquida.

Figura 34.

Composición de la corriente amina rica.

Worksheet		Mole Fractions	Aqueous Phase
Conditions	CO2	0,0001	0,0001
Properties	H2O	0,9492	0,9492
Composition Oil & Gas Feed Petroleum Assay K Value	Nitrogen	0,0000	0,0000
	CO	0,0000	0,0000
	NO2	8000,0	0,0008
User Variables	AMP	0,0499	0,0499
Notes Cost Parameters Normalized Yields			

Como se puede observar en la figura xx la concentración de CO₂ en la fase liquida es mínima, la solubilidad obtenida es de 0.002 un valor muy inferior a los resultados de solubilidad de proceso experimentales.

Figura 35.

Condiciones de salida de la corriente amina rica.

Norksheet	Attachments	Dynamics		
Worksl	heet	tream Name	Amina Rica	Aqueous Phase
Conditions		apour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Propertie	es T	emperature [C]	35,63	35,63
Composi		ressure [kPa]	100,0	100,0
Oil & Ga		folar Flow [kgmole/h]	15,88	15,88
Petroleum Assay K Value User Variables Notes Cost Parameters	m Assay	fass Flow [kg/h]	342,8	342,8
	iables S	td Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,3483	0,3483
	N	folar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,847e+005	-2,847e+005
	ameters N	folar Entropy [kJ/kgmole-C]	11,51	11,51
Normaliz	zed Yields	leat Flow [kJ/h]	-4,520e+006	-4,520e+006
	L	iq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	0,3450	0,3450
	F	luid Package	Basis-1	
	U	tility Type		

4.4 Comparación de las solubilidades obtenidas del modelo matemático y datos experimentales.

La relación entre moles de CO₂ absorbido/moles de AMP se obtienen en la resolución del modelo matemático, estos valores fueron comparados con datos de solubilidad de estudios experimentales obteniendo un error máximo del 8.2 % en la solución de 4.9 mol/dm³ de AMP.

Figura 36.

Solubilidad de CO₂ en una solución 2.5 mol/dm³.

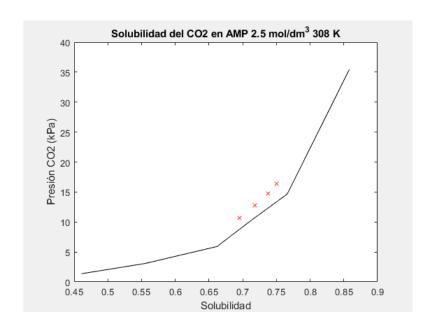


Figura 37.

Solubilidad de CO₂ en una solución 3.4 mol/dm³.

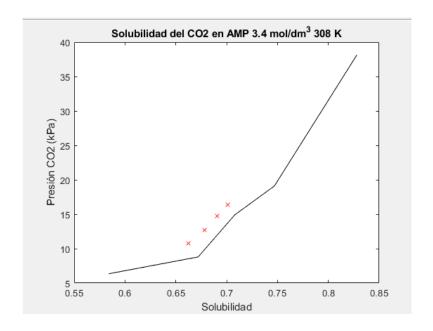
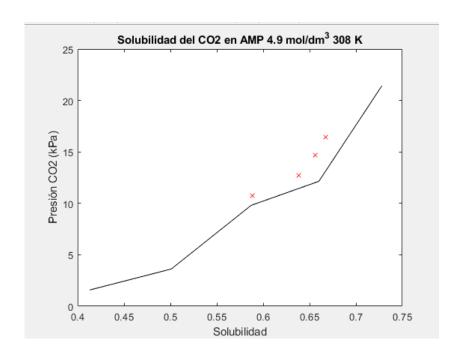


Figura 38.

Solubilidad de CO₂ en una solución 4.9 mol/dm³.



4.5 Modelado de la columna de absorción.

El flujo molar de la solución de AMP se incrementó con el fin de mejorar la relación entre el diámetro de la columna y su altura, el cálculo del empaque, los

coeficientes de transferencia de masa y energía se calcularon con el mismo método, la solución utilizada es de 2.5 mol/dm³ de AMP.

Tabla 7.

Diámetro de la columna y tipo de empaque.

Concentración	Empaque	<i>D_c</i> (in)	х	у	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	0.70	0.10	0.007	21.70	10.000

Nota. Relación de L/L_{min}=2.

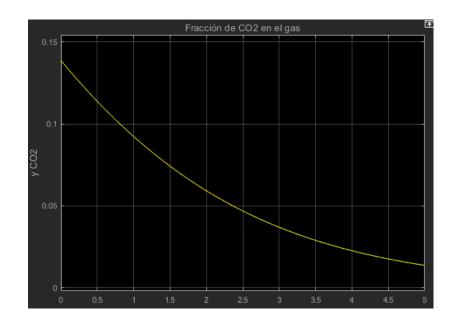
Tabla 8.Área interfacial, coeficientes de transferencia.

2.5 mol/dm ³		
71.02956		
0.000127374		
0.070631085		
0.047483249		
1.721168205		

Nota. relación de L/L_{min}=2.

Figura 39.

Variación en la concentración de CO₂ en el gas.



Nota. Solución 2.5 mol/dm³ de AMP y una relación de L/L_{min}=2.

La fracción molar de CO_2 al final de la columna es de 0.0139, dando una reducción del 93.42% del CO_2 total.

CAPITULO IV

5. Conclusiones y recomendaciones

5.1. Conclusiones

- El modelo se ha resuelto con éxito en la operación de absorción de CO₂ 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 arrojo 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 CO₂ produce cambios significativos en la fracción molar de salida del CO₂, esto se debe a que afectan de forma directa el coeficiente global de transferencia de masa.

5.2. Recomendaciones

- Validar el modelo para nuevas condiciones de temperatura y expresar como es afectada la fracción molar de CO₂ 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.

Bibliografía

- Arroyo, F., & Miguel, L. (2019). Analisis de la variación de las emisiones de co2 posibles escenarios 2030 en ecuador. *Espacios*. Recuperado el 20 de Enero de 2021, de http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/18142
- Berger, A. (2002). The effect of greenhouse gases on climate. *Proceedings of the Future Energy Systems*. Recuperado el 22de Enero de 2021.
- Bougie, F., & Iliuta, M. (2012). Sterically hindered amine-Based absorbents for the removal of CO2 from gas stream. *Datos químicos y de ingeniería*. Recuperado el 10 de Enero de 2021
- Dash, S. K., Samanta, A. N., & Bandyopadhyay, S. (2011). (Vapour+ liquid) equilibria (VLE) of CO2 in aqueous solutions of 2-amino-2-methyl-1-propanol: New data and modelling using eNRTL-equation. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, *43*(8), 1278-1285. Recuperado el 15 de febrero de 2021.
- Dey, A., & Aroonwilas, A. (2009). CO2 absorption into MEA-AMP blend: mass transfer and absorber height index. *Energy Procedia*, 1(1), 211-215. Recuperado el 10 de Enero de 2021.
- Fogler, S. (2008). Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. México:

 Pearson Educación. Recuperado el 22 de Enero de 2021, de

 https://www.researchgate.net/publication/48486629_Elementos_de_Ingenieria_d

 e_las_Reacciones_Quimicas.
- Gabrielsen, J. (2005). Un modelo para estimar la solubilidad de CO2 en alcanolaminas acuosas. *Ind. Eng. Chem.* Recuperado el 01 de Febrero de 2021.
- Gabrielsen, J., Michelsen, M. L., Stenby, E. H., & Kontogeorgis, G. M. (2006). Modeling of CO2 absorber using an AMP solution. *AIChE journal*, 52(10), 3443-3451.Recuperado el 03 de Enero de 2021.

- Kais, Saidi, & Ben, M. (2017). Dynamic relationship between CO2 emissions, energy consumption and economic growth in three North African countries. *International Journal of Sustainable Energy, 36*(9), 840-854. Recuperado el 11 de Febrero de 2021.
- Mcabe, Smith, & Harriott. (2007). *Operaciones unitarias en ingenieria química* (Vol. Séptima Edición). Mexico: McGraw-Hill Interamericana. Recuperado el 28 de Enero de 2021, de https://www.academia.edu/16909707/LIBRO_
 operaciones_unitarias_en_ingenieria_quimica_7ma_ed.
- McCann, N., Maeder, M., & Hasse, H. (2011). Prediction of the overall enthalpy of CO2 absorption in aqueous amine systems from experimentally determined reaction enthalpies. *Energy Procedia*, *4*, 1542-1549. doi:10.1016/j.egypro.2011.02.023. Recuperado el 03 de Marzo de 2021.
- Narváez, & Parra, R. (2013). Factor de emisión de CO2 debido a la generación de electricidad en el Ecuador durante el periodo 2001-2011. *ACI Avances en Ciencias e Ingenierías*, *5*(1). Recuperado el 03 de Enero de 2021.
- Núñez, A., González, M., & Saura, S. (2015). Proceso de recuperacion de CO2. ICIDCA.
 Recuperado el 03 de Marzo de 2021, de https://www.redalyc.org/pdf/2231/
 223143421004.pdf.
- Oscullo, J. (2011). Factor Horario de Emisiones de CO2 Producido por el Parque

 Generador del Sistema Nacional Interconectado del Ecuador: Herramienta

 Metodológica. *Revista Técnica "energía"*, 7(1), 100-105 pp. Recuperado el 23 de

 Enero de 2021.
- Oscullo, J., & Haro, L. (2016). Factor Anual de Emisión de CO2 Producido por el Parque

 Generador del Sistema Nacional Interconectado del Ecuador, mediante la

 Aplicación de la Metodología de la Convención Marco sobre el Cambio Climático

- UNFCCC, para el periodo 2009-2014. *Revista Politécnica*, 37(1), 61-61. Recuperado el 08 de Enero de 2021.
- Pandya, J. D. (2007). Adiabatic Gas Absorption and Stripping with Chemical Reaction in Packed Towers. Chemical Engineering Communications, 19. Recuperado el 14 de Enero de 2021.
- Piché, S., Grandjean, B., & Larachi, F. (2002). Reconciliation Procedure for Gas-Liquid Interfacial Area and Mass-Transfer Coefficient in Randomly Packed Towers.

 Industrial & Engineering Chemistry Research, 41(19), 4911-4920.

 doi:10.1021/ie020094g. Recuperado el 18 de Enero de 2021.
- Putta, K. R., Tobiesen, F. A., Svendsen, H. F., & Knuutila, H. K. (2017). Applicability of enhancement factor models for CO2 absorption into aqueous MEA solutions. *Applied Energy*, 206, 765-783. doi:10.1016/j.apenergy.2017.08.173. Recuperado el 03 de Enero de 2021.
- Quadrelli, R., & Peterson, S. (2007). The energy–climate challenge: Recent trends in CO2 emissions from fuel combustion. *Energy policy*, *35*(11), 5938-5952.
- Revert, J. A. T. (1969). Transferencia de materia en procesos de absorción con reacción química: Universidad Complutense de Madrid. Recuperado el 27 de Enero de 2021.
- Saha, A., & Bandyopadhyay, S. (1995). Kinetics of absorption of CO2 into aqueous solutions of 2-amino-2-methyl-1-propanol. *Chemical Engineering Science*, *50*.

 Recuperado el 16 de Enero de 2021.
- Sánchez, J. (2012). Características fisicoquímicas de los gases y partículas. *latreia*.
- Sartori, G., & Savage, D. (1983). Sterically hindered amines for carbon dioxide removal from gases. *Industrial Engineering Chemistry Fundamentals*, 22(2), 239-249.

 Recuperado el 19 de Enero de 2021.

- Treybal, R. (2007). *Operaciones de transferencia de masa* (Vol. Segunda Edición).

 México: McGraw-Hill. Recuperado el 03 de Enero de 2021 de https://fenomenos detransporte.files.wordpress.com/2008/05/operaciones-de-transferencia-de-masarobert-e-treybal.pdf.
- Warner, K. (2013). Climate change and global warming: The role of the International Community. Recuperado el 06 de Enero de 2021

Anexos