



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA
MAESTRÍA EN INGENIERIA DE PROCESOS

Diseño óptimo de un proceso de captura de CO₂
mediante un sistema de reactores rotatorios.

TESIS
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN INGENIERÍA DE PROCESOS

PRESENTA:

Julio David Aguilar Cardoso

Director de tesis: Dr. Miguel Ángel Gutiérrez Limón

Marzo de 2020

RESUMEN.

La intensificación de procesos ha sido una herramienta empleada en diferentes campos de estudio como el de energía, ingeniería química y de procesos, con la finalidad de reducir costos de diseño y operación. El proceso de captura de CO₂ ha sido estudiado bajo las condiciones de intensificación presentando buenos resultados. El presente trabajo presenta la solución a un problema de minimización de costos de diseño y operación de una planta piloto de captura de bióxido de carbono, la cual usa reactores rotatorios para la captura del gas y la regeneración del absorbente (Monoetanolamina). El diseño óptimo de la planta tiene como objetivo encontrar el tamaño adecuado para los equipos principales del proceso como son los reactores rotatorios y el intercambiador de calor. La solución de este problema se realiza a través de la selección de modelos matemáticos representativos de los equipos utilizados obtenidos de la literatura, así mismo se localizan restricciones importantes para el correcto y verdadero funcionamiento de la planta; además se comparan los resultados obtenidos con los de una planta que utiliza columnas de absorción y desorción. Los resultados revelan una reducción de tamaño significativa, en contraste, los costos de operación incrementan. Sin embargo, el costo total se reduce considerablemente.

ABSTRACT.

Process intensification has been a tool used in different fields of study such as energy, chemical and process engineering, in order to reduce design and operation costs. The CO₂ capture process has been studied under the intensification conditions presenting good results. The present work presents the solution to a problem of minimization of design and operation costs of a pilot carbon dioxide capture plant, which uses rotary reactors for gas capture and regeneration of the absorbent (Monoethanolamine). The optimal design of the plant aims to find the right size for the main equipment of the process such as rotary reactors and heat exchanger. The solution of this problem is made through the selection of representative mathematical models of the equipment used obtained from the literature, as well as important restrictions for the correct and true operation of the plant; In addition, the results obtained are compared with those of a plant that uses absorption and desorption columns. The results reveal a significant reduction in size, in contrast, operating costs increase. However, the total cost is greatly reduced.

Contenido

RESUMEN	I
ABSTRACT	II
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Planteamiento del problema.	2
1.2 Justificación.	3
1.3 Hipótesis.....	4
1.4 Objetivos.	4
1.4.1 Objetivo general.....	4
1.4.2 Objetivos particulares.	4
1.5 Etapas.....	5
1.6 Metodología.	5
2. Estado del arte	7
2.1 Contaminación por bióxido de carbono.....	7
2.1.2 Emisiones de globales y nacionales de CO ₂	8
2.2 Enfoques de captura.	9
2.3 Tecnologías de captura de CO ₂	12
2.3.1 Adsorción físicoquímica.....	12
2.3.2 Separación con membranas.....	13
2.3.3 Separación criogénica.	14
2.3.4 Combustión con transporte de oxígeno.....	16
2.3.5 Secuestro biológico.....	17
2.3.6 Absorción.....	18
2.3.6.1 Columnas de absorción.....	19
2.3.6.2 Procesos de intensificación.....	20
2.3.6.2.1 Reactores rotatorios.	20
3. Modelado y simulación de los reactores rotatorios	28
3.1 Balances de materia y energía.....	29
3.2 Ecuaciones de transferencia de masa.	29
3.3 Equilibrio químico.	31
3.4 Cinética de reacción.....	32
3.5 Factor de intensificación.	32
3.6 Ecuaciones de transferencia de calor.	33

3.7 Propiedades y parámetros.	33
3.8 Modelo del rehervidor.	35
3.9 Simulación del modelo del reactor rotatorio de captura de CO ₂	36
3.10 Simulación del modelo del reactor rotatorio como columna de desorción.	41
4. Formulación del problema de optimización.	46
4.1 Función objetivo.	46
4.2 Restricciones.	48
4.2.1 Restricciones de frontera.	49
5. Simulación del proceso de captura de CO₂ usando torres empacadas.	51
5.1 Descripción de los equipos.	51
5.2 Dimensión de los equipos.	53
6. Resultados.	54
6.1 Dimensiones y condiciones de operación óptimas.	54
6.2 Simulación del proceso óptimo intensificado.	54
6.4 Comparación entre el proceso intensificado y el proceso clásico.	58
7. Conclusiones.	61
Nomenclatura.	63
Bibliografías.	65

Índice de figuras

<i>Figura 2-1 Captura de CO₂ en la Precombustión [26]</i> _____	10
<i>Figura 2-2 Captura de CO₂ en la Postcombustión. [26]</i> _____	10
<i>Figura 2-3 Captura de CO₂ por Combustión Oxyfuel. [26]</i> _____	11
<i>Figura 2-4 Diagrama de Flujo de un Proceso Típico PSA [41]</i> _____	13
<i>Figura 2-5 Principio de Separación de un Gas con Membranas. [26]</i> _____	14
<i>Figura 2-6 Diagrama de Flujo del Proceso de Captura de CO₂ por Separación Criogénica. [43]</i> _	15
<i>Figura 2-7 Configuraciones según el Tipo de Reactor en la Combustión con Transporte de Oxígeno. [39]</i> _____	17
<i>Figura 2-8 Proceso de Fijación Microalgal. [44]</i> _____	17
<i>Figura 2-9 Diagrama de Flujo de un Proceso Clásico de Captura de CO₂.</i> _____	19
<i>Figura 2-10 Diagrama de un Reactor Rotatorio. [3]</i> _____	21
<i>Figura 2-11 Representación de un Reactor Rotatorio de Disco. [13]</i> _____	23
<i>Figura 2-12 Diagrama de un Reactor Rotatorio de Zig-zag. [15]</i> _____	24
<i>Figura 2-13 Diagrama de un Reactor Rotatorio de cuchillas.[12]</i> _____	24
<i>Figura 3-1 Dirección de los Flujos Líquido y Gas Dentro del RPB.</i> _____	28
<i>Figura 5-1 Diagrama del Proceso de Captura de CO₂ en Aspen.</i> _____	52
<i>Figura 6-1 RPB de Captura de CO₂ Óptimo.</i> _____	58

Figura 6-2 RPB de Regeneración Óptimo.	59
Figura 6-3 Diagrama de Proceso de Captura de CO2 Intensificado.	60

Índice de gráficos

Gráfico 2-1 Emisión de Gases de Efecto Invernadero. [2]	7
Gráfico 2-2 Emisiones de Gases de Efecto Invernadero por Sector Económico. [2,21]	8
Gráfico 3-1 Fracción Mol de CO2 Dentro del Reactor Rotatorio al 55% de MEA.	37
Gráfico 3-2 Fracción Mol de CO2 Dentro del Reactor Rotatorio al 75% de MEA	38
Gráfico 3-3 % de Captura experimental vs % de Captura del Modelo al 55% MEA	39
Gráfico 3-4 Perfil de Temperatura del líquido en el RPB. (28°C)	40
Gráfico 3-5 % de Captura Experimental vs % de Captura del Modelo al 75% MEA	40
Gráfico 3-6 Perfil de Temperatura del líquido en el RPB. (50°C)	41
Gráfico 3-7 Flujo de CO2 Líquido dentro del RPB	43
Gráfico 3-8 Perfiles de Temperatura Líquida dentro del RPB	44
Gráfico 3-9 Regeneración del Solvente con respecto a la Temperatura en el Rehervidor	45
Gráfico 3-10 Calor en el Rehervidor de acuerdo a su Temperatura	45
Gráfico 4-1 Comportamiento del Índice CEPCI por año.	46
Gráfico 6-1 Fracción Molar de CO2 Líquido en el RPB de Regeneración.	55
Gráfico 6-2 Fracción Molar de CO2 en la Fase Gas Dentro del RPB de Captura	55
Gráfico 6-3 Perfil de Temperatura del Líquido en el RPB de Captura.	56
Gráfico 6-4 Perfil de Temperatura del líquido en el RPB de Regeneración.	57

Índice de Tablas

Tabla 2-1 Ventajas y Desventajas de los Enfoques de Captura de CO2. [25-30]	11
Tabla 2-2 Comparación de los Diferentes Modelos de Transferencia de Masa	27
Tabla 3-1 Constantes de Equilibrio Químico. [58]	32
Tabla 3-2 Métodos y Correlaciones Para el Cálculo de Propiedades y Otros Parámetros.	33
Tabla 3-3 Características del equipo	37
Tabla 3-4 Condiciones de Operación del RPB	37
Tabla 3-5 % de Captura de CO2 al 55% MEA	38
Tabla 3-6 % de Captura de CO2 al 75% MEA	39
Tabla 3-7 Valores de las Constantes para el Cálculo del Delta de Desorción	42
Tabla 3-8 Condiciones de Operación del Reactor Rotatorio	42
Tabla 3-9 Condiciones de Entrada al Reactor Rotatorio	43
Tabla 3-10 Comparación de Resultados Experimentales y del Modelo	44
Tabla 4-1 Índice CEPCI por año	46
Tabla 5-1 Especificación de Bloques para la Captura de CO2 en Aspen.	51
Tabla 5-2 Dimensión de los Equipos.	53
Tabla 6-1 Dimensiones y Condiciones de Operación Óptimas del Proceso de Captura de CO2 Intensificado.	54
Tabla 6-2 Costos Individuales y Globales del Proceso de Captura de CO2 Intensificado.	57
Tabla 6-3 Comparación 1. Absorción	58
Tabla 6-4 Comparación 2. Regeneración	59
Tabla 6-5 Comparación 3. Intercambiador de Calor.	59
Tabla 6-6 Comparación Económica.	60

1. INTRODUCCIÓN.

Se ha demostrado que una de las causas de los problemas de la contaminación como el calentamiento global y el efecto invernadero es la emisión de dióxido de carbono CO₂ [1], las emisiones a la atmósfera de este gas representan más del 70%; los procesos industriales y la quema de combustibles fósiles aportan el 65% del total de las emisiones de los contaminantes que producen el efecto invernadero, principalmente de CO₂ [2]. Aunque México no es un país que aporte grandes cantidades de CO₂ a nivel mundial es importante tener un control de estas emisiones, por lo cual el desarrollo de tecnologías para su captura y almacenamiento es importante.

Actualmente existen diferentes sistemas para la captura de CO₂ como son la absorción química, absorción físicoquímica, separación con membranas, separación criogénica, combustión con transporte de oxígeno y secuestro biológico. Entre todas estas tecnologías la más aceptada es la absorción química ya que cuenta con ventajas como alta eficiencia y bajo costo, además de ser una tecnología probada en la industria [3].

A finales de los setentas, el término de intensificación de procesos fue introducido con la finalidad de reducir el tamaño de los equipos principales de los procesos químicos y, por lo tanto, minimizar los costos de instalación a través del uso de tecnologías compactas y novedosas [4]. Por otra parte, se busca generar menor cantidad de residuos y ocupar menor cantidad de materia prima, este tipo de tecnologías son altamente aplicables en la industria farmacéutica, petroquímica y de bioprocesos; además ayudará a encontrar procesos menos contaminantes, más seguros y eficientes obteniendo una ganancia más elevada.

En años recientes, una aplicación que implica una condición física novedosa conocida como tecnología basada en la alta gravedad (Higee) y su dispositivo, el reactor rotatorio, han sido propuestos para intensificación de procesos en los campos de energía, ingeniería química y de procesos [5]. Desde su invención en 1981 por Ramshaw y Mallinson este tipo de reactores han sido probados en

procesos de destilación, absorción, agotamiento, precipitación reactiva y oxidación del ozono [6]. Por tal motivo, este tipo de reactor ha sido ocupado para la captura de CO₂ bajo diferentes condiciones de operación y ha demostrado ser eficiente para este proceso, ya que cuenta con ciertas ventajas sobre los equipos industriales actualmente utilizados, tales como un incremento en la transferencia de masa, lo que produce una reducción de tamaño y peso, y a su vez un ahorro de espacio, reducción en el consumo de energía, límites de inundación más amplios y tiempos de residencia más cortos [7]. Este tipo de reactores, al ejercer una fuerza centrífuga entre 200 y 1000 veces mayor a la fuerza de gravedad [8], provoca que el área de contacto entre el gas y el líquido sea mayor y, en consecuencia, la transferencia de masa aumenta.

El estudio de los reactores rotatorios en la captura de CO₂ se ha enfocado principalmente en encontrar mejores sustancias absorbentes [9-11], nuevos modelos de diseño [12-15], y modelos matemáticos representativos del sistema [16-19]; sin embargo, hasta donde sabemos, estudios sobre optimización en el diseño de estos equipos no han sido abordados en la literatura.

En este trabajo se presenta la solución a un problema de optimización para el diseño de la intensificación del proceso de captura de CO₂, a través de la minimización de una función objetivo de tipo económica. Se hace uso de un modelo matemático y propiedades físicas, químicas y físico-químicas obtenidas de la literatura. Además, se hace una comparación con resultados obtenidos a partir de un método convencional.

1.1 Planteamiento del problema.

En las últimas décadas los índices de contaminantes emitidos a la atmósfera han ido creciendo considerablemente año con año siendo el bióxido de carbono el que existe en mayor cantidad produciendo problemas ambientales como el efecto invernadero y el calentamiento global, por lo que es necesario el desarrollo de nuevas tecnologías para su control y reducción.

En la actualidad hay diferentes enfoques para la captura de este contaminante, pero hasta ahora se ha demostrado que el proceso de absorción – desabsorción es el mejor debido a bajos costos y alta eficiencia además de ser una solución al problema en corto plazo. Este tipo de proceso por lo general utiliza columnas extremadamente grandes lo que se traduce en necesidad de espacios amplios y costos de diseño elevados por lo que en los últimos años se propuso intensificar este proceso y la solución ha sido utilizar reactores rotatorios, el cual a su vez ha resultado en la reducción de espacio, costos de diseño y uso de energía. El uso de estos dispositivos en el proceso de captura de CO₂ ha atraído el desarrollo de nuevas investigaciones, principalmente en la experimentación con variedad de solventes, formulación de modelos matemáticos representativos y adecuaciones en el diseño. En consecuencia, la optimización del proceso intensificado es el siguiente paso en el progreso de esta tecnología, con la finalidad de obtener valores de diseño óptimos capaces de reducir los costos totales del proceso, es decir, los costos de diseño y operación.

Para el desarrollo de este trabajo se ha planteado el problema como un problema de minimización, utilizando una función objetivo de tipo económica representada por los costos de diseño y operación de los principales equipos ocupados en el proceso y restricciones basadas en modelos matemáticos obtenidos de la literatura.

1.2 Justificación.

Se ha demostrado que los niveles de CO₂ han ido aumentando en los últimos años de manera exponencial. En México la producción de CO₂ por fuentes fijas reportada en 2016 fue del 25.5%, por lo que su captura es de gran importancia. Este problema se puede atacar a corto, mediano y largo plazo. El uso de reactores rotatorios en el proceso de captura de bióxido de carbono es una solución a corto plazo, ya que este tipo de reactores, al ocupar la alta gravedad proporcionan una gran eficiencia de captura de CO₂ en tiempos cortos, además de reducir los costos de diseño pues suelen ser dispositivos más compactos comparados con torres de absorción – desabsorción. Por otra parte, el CO₂ capturado puede ser almacenado en formaciones geológicas profunda, o en forma de minerales carbonatos, siendo

opciones para controlar la contaminación producida por CO₂ y mitigar los efectos del calentamiento global y el efecto invernadero.

1.3 Hipótesis.

Usando un sistema de reactores rotatorios permitirá minimizar el costo total del proceso de captura de CO₂ de una corriente de gases de combustión mediante la técnica de absorción-desabsorción, además de minimizar las dimensiones de los equipos, y por lo tanto reducir el espacio de construcción haciendo el proceso más seguro, estable y ambientalmente aceptable.

1.4 Objetivos.

1.4.1 Objetivo general.

Obtener las variables de diseño óptimas de los principales equipos involucrados en la intensificación del proceso de captura de bióxido de carbono de tal forma que minimice los costos de diseño y operación, asimismo que garantice una alta eficiencia en la captura y buena calidad en el producto.

1.4.2 Objetivos particulares.

1. Reproducir los resultados obtenidos de las simulaciones de los reactores rotatorios a partir del modelo matemático y ecuaciones para la determinación de propiedades seleccionadas, y compararlos con resultados experimentales obtenidos de la literatura.
2. Formular una función objetivo de tipo económica que involucre los costos de diseño y operación del proceso, especificando las variables de decisión y restricciones para la solución del problema de optimización.
3. Obtener las dimensiones específicas de los principales equipos involucrados en el proceso.
4. Simular el proceso clásico de captura de CO₂ (columnas de absorción-desorción) en el software Aspen.
5. Comparar los resultados obtenidos del proceso intensificado con los resultados de la simulación.

1.5 Etapas

- Revisión bibliográfica de reactores rotatorios.
- Revisión bibliográfica de diseño óptimo de procesos.
- Selección de un modelo matemático y en su caso adecuación.
- Formulación del problema de optimización y su resolución.
- Comparación contra el proceso basado en columnas de absorción – desorción con el uso de software de Aspen.

1.6 Metodología.

El presente trabajo se realizó a partir de la siguiente metodología.

Primeramente, mediante la búsqueda literaria se formuló un modelo representativo de los equipos involucrados en el proceso, para nuestro caso, los modelos de los reactores rotatorios ya sea como absorbedor o como desorbedor, a través de selección de ecuaciones se determinaron las propiedades de las sustancias involucradas y demás parámetros. Con las propiedades y parámetros ya definidos se resolvió el modelo mediante el método de Euler, este método es simple y adecuado para la solución de ecuaciones diferenciales con valores iniciales, este se programó en Matlab, para después comparar los resultados de nuestra simulación con los reales.

La formulación del problema de optimización comienza con la representación de la función objetivo, esta se representó como la suma de los costos independientes de cada equipo. Estos costos se definieron a través del método de Guthrie [78], que es un método de estimación de costos preliminar, el cual se define a partir de los costos base, índice de costos y de factores de módulo, de diseño, de presión y de material. Los costos base están definidos a partir de expresiones de tipo polinomiales. La siguiente parte de la formulación del problema, es la determinación de las restricciones, nuestras principales restricciones son nuestras ecuaciones del balance de energía y materia representadas por los modelos de los dispositivos utilizados, sin embargo, para obtener resultados reales es necesario la determinación de restricciones de frontera, este tipo de restricciones nos ayudan a delimitar el área de operación del problema.

Finalmente, se realizó la optimización mediante el uso de la herramienta computacional llamada optimtool del software Matlab. Esta herramienta nos ayuda a resolver el problema de optimización no lineal a través del método de punto interior, este método descubierto por Kramarkar en 1984, logra la optimización al recorrer por el interior del sólido definido por el problema, en lugar de ir por el alrededor de la superficie como lo hace el método simplex, este método disminuye considerablemente el tiempo de solución de los problemas.

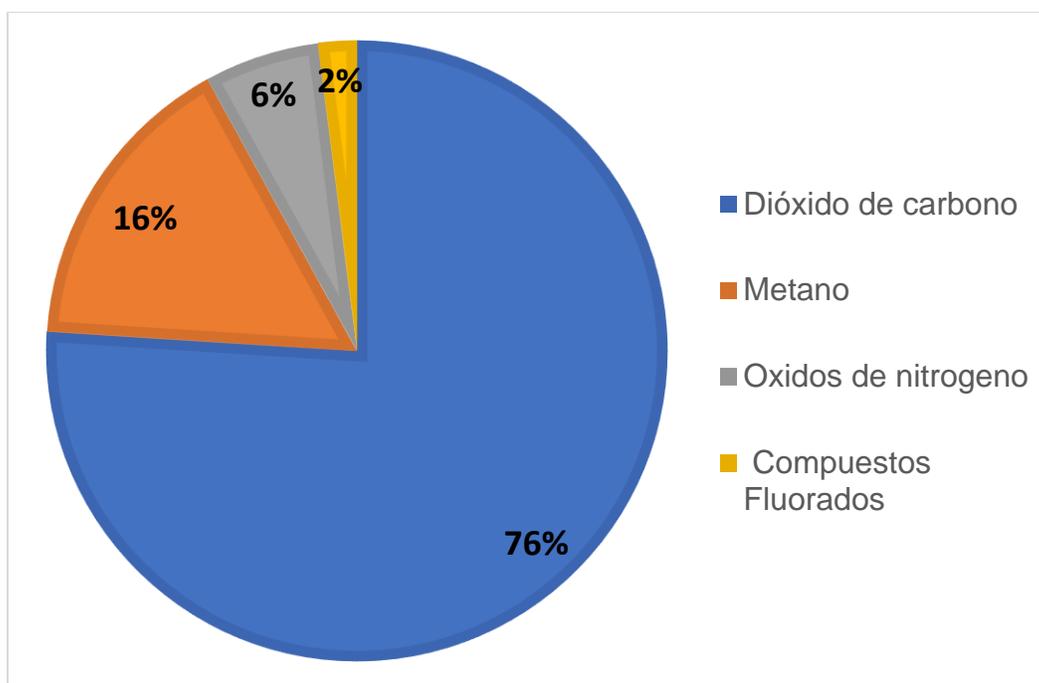
Los resultados obtenidos de la optimización se comparan con los datos obtenidos de una planta piloto la cual utiliza torres convencionales y fue simulada con el uso del software de Aspen.

2. Estado del arte.

2.1 Contaminación por bióxido de carbono.

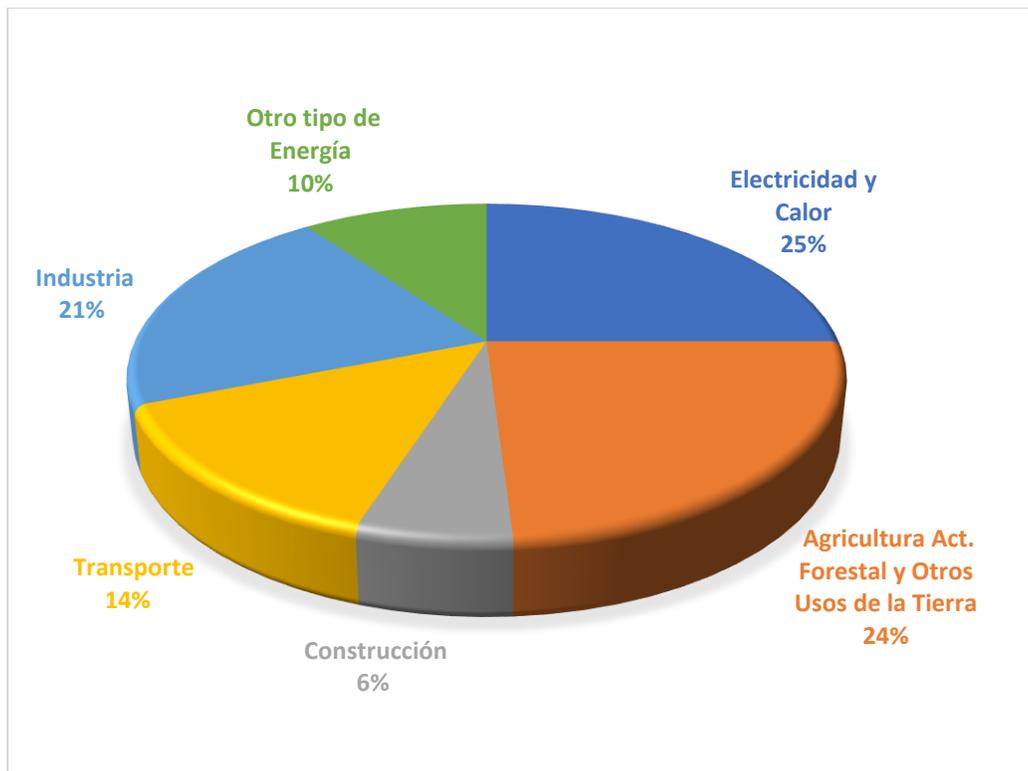
Algunos de los problemas más destacados en la actualidad son el calentamiento global y el efecto invernadero, una de las principales causas de estos problemas es la emisión de dióxido de carbono. Datos obtenidos por el panel intergubernamental del cambio climático IPCC[2] por sus siglas en inglés muestran que el bióxido de carbono representa más del 70 % de los contaminantes causantes del efecto invernadero.

Gráfico 2-1 Emisión de Gases de Efecto Invernadero. [2]



En este mismo sentido, estadísticas han demostrado que las concentraciones de CO₂ han aumentado en un 40% desde tiempos preindustriales [3,20], donde las actividades primordiales generadoras de este contaminante son la producción de electricidad y generación de calor seguidos de la agricultura, actividad forestal y el uso del suelo en conjunto, y en tercer lugar está la actividad industrial [2,21].

Gráfico 2-2 Emisiones de Gases de Efecto Invernadero por Sector Económico. [2,21]

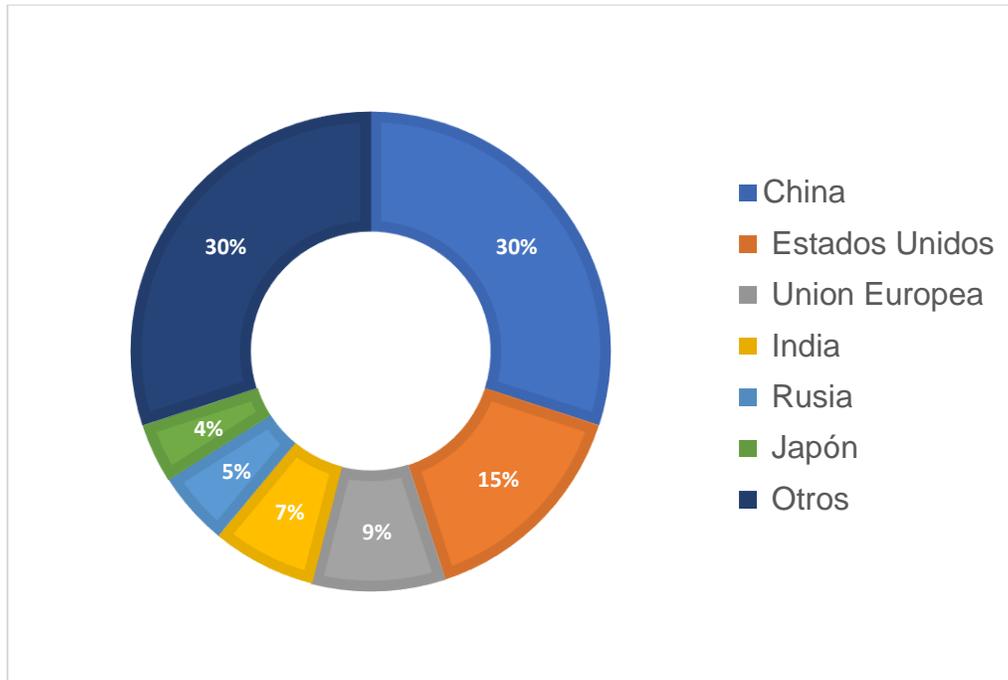


2.1.2 Emisiones de globales y nacionales de CO₂.

La agencia de protección del medio ambiente de Estados Unidos (EPA) [22] reporta que los países con mayor emisión de CO₂ en el 2014 basados en datos proporcionados por Boden et al. [23] son China, Estados Unidos, la Unión Europea, Rusia y Japón. Aunque México no figura entre los países con mayor aporte de emisiones de bióxido de carbono el problema existe, ya que desde el año 1990 al 2015 el crecimiento de emisiones de los gases de efecto invernadero fueron de un 54% aumentando anualmente a una tasa de 1.7%, donde el CO₂ representa el 71% de estos contaminantes. Del total de estas emisiones el 64% corresponden al consumo de combustibles fósiles, 10% se originaron por los sistemas de producción pecuaria, 8% provinieron de los procesos industriales, 7% se emitieron por el manejo de residuos, 6% por las emisiones fugitivas de la extracción de petróleo, gas y minerías, y 5% se generaron por actividades agrícolas [24]. Aunque algunas de estas emisiones fueron absorbidas por la vegetación existente, en el país se emitieron un total de 683 Mton de CO₂ de las cuales fueron absorbidas 148 Mton

dando un balance neto de 535 Mton emitidas a la atmósfera en el año 2015 según datos obtenidos por el Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero (INEGYCEI).

Gráfico 2-3 Emisiones de CO₂ por País. [22,23]



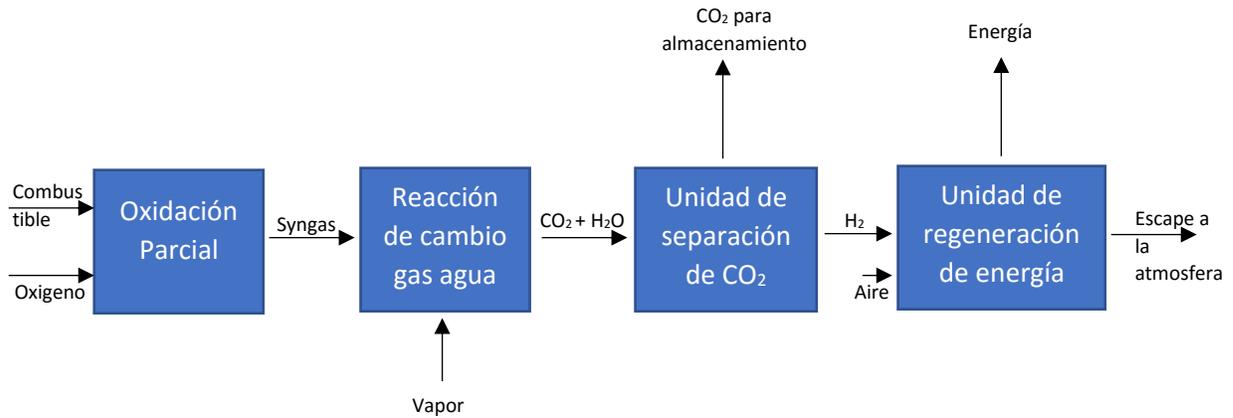
De acuerdo con lo anterior y los problemas que podría ocasionar en un futuro es necesario el desarrollo y uso de nuevas tecnologías para el control y prevención de estos problemas mediante sistemas de captura y almacenamiento.

2.2 Enfoques de captura.

El desarrollo de nuevas tecnologías para la captura de este contaminante ha llevado a tres tipos de enfoques: en la precombustión, en la postcombustión y la combustión oxyfuel.

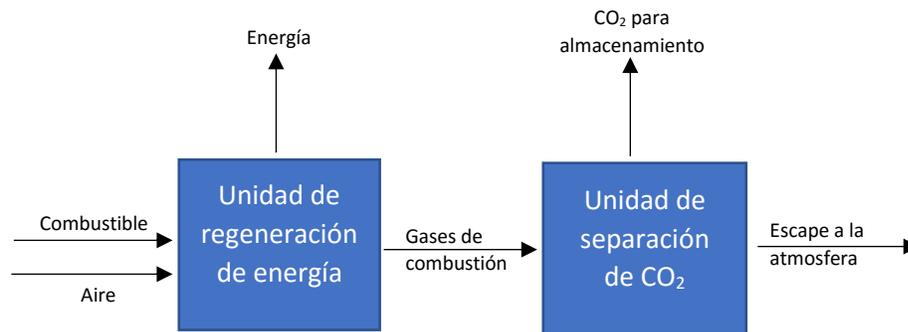
1. Precombustión. En los procesos de precombustión el combustible reacciona con agua y O₂, formando como productos H₂, CO₂ y CO, donde posteriormente el CO formado se transforma en CO₂; el hidrogeno es utilizado en diferentes áreas como en baterías de combustible, en la industria aeroespacial y química [25].

Figura 2-1 Captura de CO2 en la Precombustión [26]



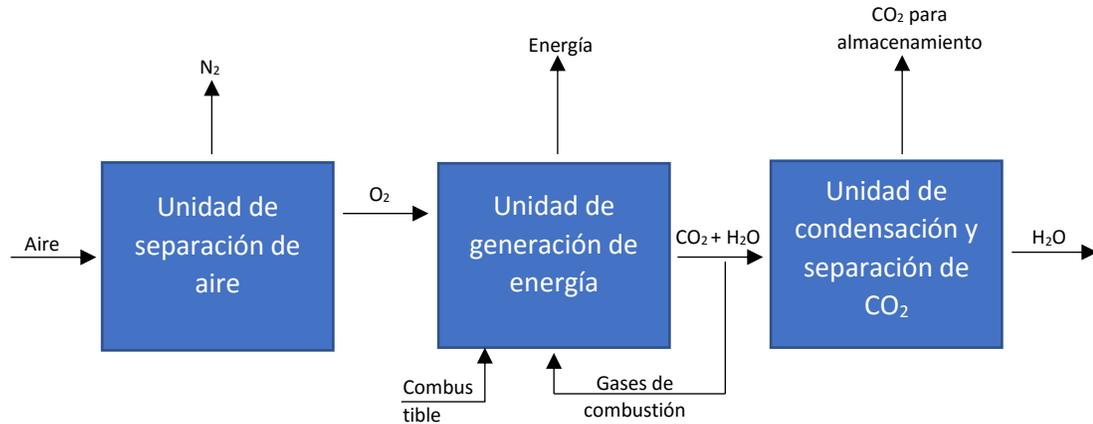
2. Postcombustion. En este enfoque el bióxido de carbono es removido directamente de los gases de combustión, es decir, primeramente, la combustión ocurre para continuar con el procesamiento de los gases de combustión [26] la siguiente figura muestra el proceso.

Figura 2-2 Captura de CO2 en la Postcombustión. [26]



3. Combustión oxyfuel. Este tipo de procesos funcionan de la siguiente manera: el combustible es quemado en presencia de O₂ puro mezclado con los gases de combustión reciclados en el proceso, de esta forma se obtienen concentraciones altas de CO₂. Por otra parte, se produce agua la cual se remueve con facilidad a través de un condensador [27].

Figura 2-3 Captura de CO₂ por Combustión Oxyfuel. [26]



La siguiente tabla presenta ventajas y desventajas de las diferentes estrategias para la captura de CO₂.

Tabla 2-1 Ventajas y Desventajas de los Enfoques de Captura de CO₂. [25-30]

Métodos de captura	Ventajas	Desventajas
Precombustión	<ul style="list-style-type: none"> • Producción de H₂. • Solventes físicos baratos. • Menor uso de energía para la regeneración del solvente en comparación con los procesos de postcombustión. 	<ul style="list-style-type: none"> • Necesita de una turbina. • Necesita purificar el combustible, lo que se traduce en altos costos para la separación del N₂.
Postcombustión	<ul style="list-style-type: none"> • Aplicable a la mayoría de las plantas de energía. • Opción de actualización de tecnologías. • Tecnología madura. 	<ul style="list-style-type: none"> • Difícil diseño. • Equipos grandes. • Gran uso de energía para la regeneración del absorbente.
Combustión Oxyfuel	<ul style="list-style-type: none"> • Altas concentraciones de CO₂. • Opción de actualización de tecnologías. 	<ul style="list-style-type: none"> • Costos altos en la separación del aire. • La recirculación del combustible genera un alto costo de diseño. • Los materiales de construcción necesitan ser resistentes a las altas temperaturas.

Dentro de estos enfoques destacan tecnologías como la absorción química, adsorción físicoquímica, separación con membranas, separación criogénica, combustión con transporte de oxígeno y secuestro biológico.

2.3 Tecnologías de captura de CO₂.

2.3.1 Adsorción físicoquímica.

La adsorción es la separación de un gas o un líquido a través de un sólido poroso; este proceso al igual que la absorción, se basa en el mismo principio. El CO₂ se separa con algún adsorbente sólido, luego el producto es procesado bajo diferentes condiciones de operación para la regeneración del adsorbente y la captura del CO₂ [31].

La adsorción para la captura de dióxido de carbono puede ser física (fisisorción), la cual usa normalmente zeolitas o carbón activado, o química (quimisorción), que es una adsorción más fuerte y principalmente ocupa materiales porosos amino soportados, hidrotalcita, óxido de calcio, silicatos de litio etc. En la fisisorción el adsorbente puede ser utilizado en repetidas ocasiones solamente cambiando las condiciones de temperatura y presión. En contraste, los adsorbentes químicos soportan temperaturas mayores que los adsorbentes físicos, pero son difíciles de regenerar y en ciertas ocasiones se desechan [25,31].

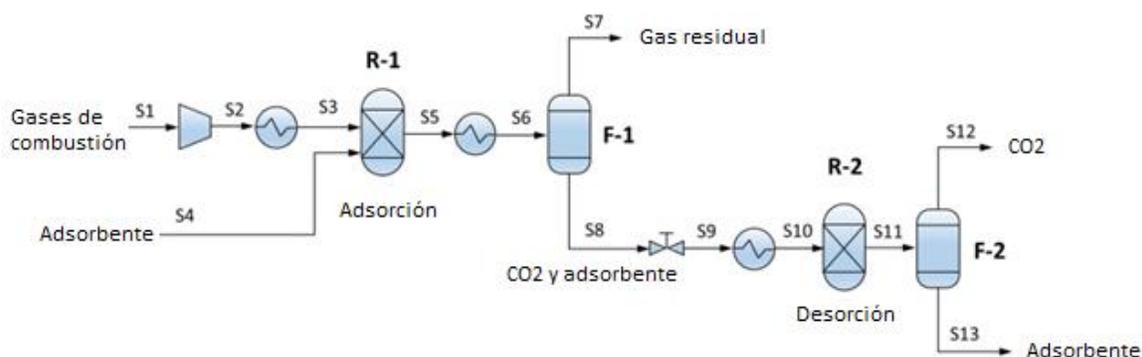
Por lo general este tipo de proceso cuenta con 2 o 3 equipos de adsorción, uno para la adsorción (captura del CO₂), otro para la desorción del CO₂ capturado (regeneración del adsorbente) y el tercero es suplementario, ya que sirve para recibir los gases de alimentación y de esa forma operar continuamente [32].

Existen tres tipos de adsorción de CO₂:

Adsorción por cambio de presión (PSA): En este tipo de adsorción, la mezcla gaseosa fluye a través de la columna empacada a presiones elevadas y temperaturas bajas, hasta que el CO₂ se aproxime a las condiciones de equilibrio, se utiliza generalmente en la fisisorción [26,31].

Adsorción por cambio de temperatura (TSA): Generalmente se usa en los procesos de quimisorción, y su funcionamiento es el siguiente, el gas pasa a través del empaque, donde se hace una adsorción selectiva hasta que el adsorbente alcanza el equilibrio; la adsorción del gas se hace a temperaturas elevadas, por lo que se requiere calor adicional que ocasiona un costo mayor que el (PSA) [26,31].

Figura 2-4 Diagrama de Flujo de un Proceso Típico PSA [41]



Adsorción por cambio eléctrico (ESA): En este método una corriente a bajo voltaje pasa a través del adsorbente [26]. Se cree que este método es capaz de reducir los costos de la captura de dióxido de carbono por el método de adsorción [33].

2.3.2 Separación con membranas.

Es la tecnología más prometedora porque permite reducir los costos de operación y diseño, al usar menor cantidad de energía y minimizar el tamaño de los equipos [31].

Las membranas son barreras semipermeables capaces de separar diferentes sustancias a través de diferentes mecanismos, como solución/difusión o absorción/difusión, estas están disponibles en diferentes tipos de materiales orgánicos (poliméricos) o inorgánicos (carbón, zeolitas, cerámicos o metálicos) [26].

La separación a través de membranas se clasifica en dos tipos:

Membrana de separación gaseosa:

Los principales parámetros de operación y diseño son la selectividad y la permeabilidad. En este proceso el gas con CO₂ es alimentado a presiones elevadas al separador, el cual consiste en una gran cantidad de membranas cilíndricas huecas arregladas en paralelo, el dióxido de carbono selectivamente permeado a través de la membrana es recuperado al reducir la presión sobre la carcasa del separador [34].

Membrana de absorción gaseosa:

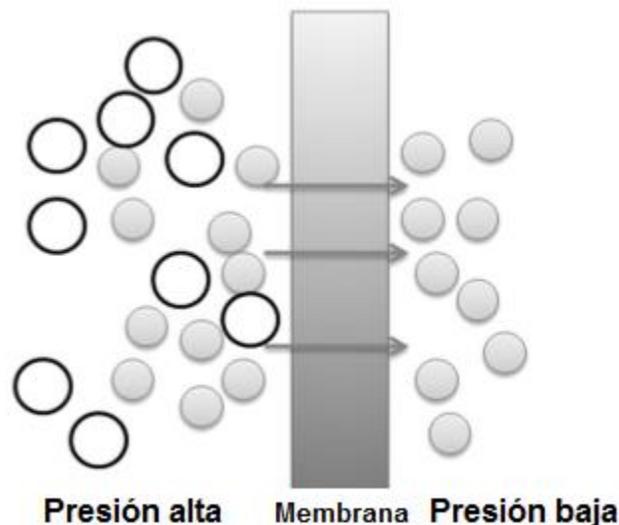
Consiste en una membrana sólida microporosa, que es el contacto entre el gas y el líquido. El CO₂ es separado del gas por difusión a través de la membrana y luego es recuperado por un líquido absorbente mediante absorción [34].

Esta tecnología ha mostrado un nivel de recuperación de CO₂ alto, además de ser un proceso barato, continuo y con mínimo control necesario. Sin embargo, existen limitaciones en el uso a altas concentraciones de CO₂, ya que la remoción de este gas es poca [35]; asimismo, es necesario un pretratamiento del gas, puesto que las membranas son sensibles a los gases corrosivos (NO_x, SO_x, H₂S) y a las altas temperaturas [36].

Las membranas al ser ocupadas en el método de precombustión provoca una reducción significativa de costos [27].

En la postcombustión, más de la mitad del costo de la separación del CO₂ de los gases de combustión se debe a la energización de la bomba de vacío para la evacuación del dióxido de carbono del lado permeable de la membrana; igualmente los costos de la membrana y tubería son altos [31].

Figura 2-5 Principio de Separación de un Gas con Membranas. [26]



2.3.3 Separación criogénica.

La captura de CO₂ con la ayuda de esta tecnología resulta ser poco realista, a causa de los exagerados costos de enfriamiento, teniendo en cuenta que es necesario

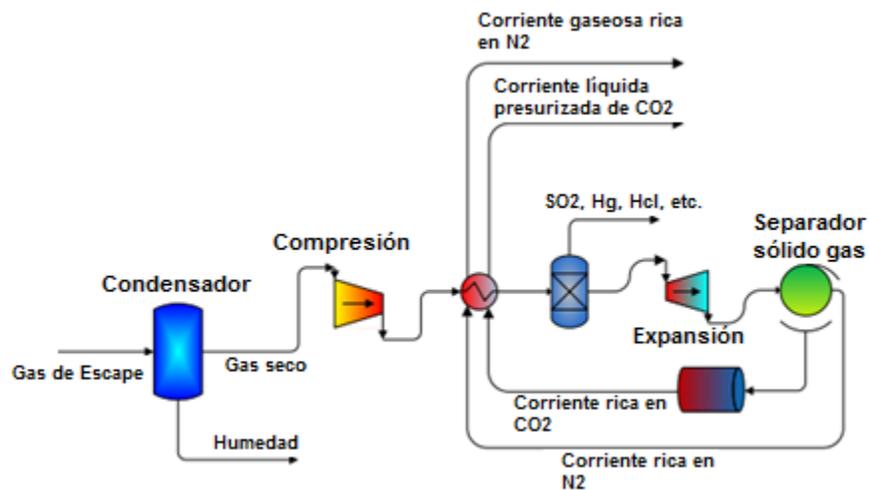
comprimir el gas a presiones por encima del punto triple del CO₂ (5.2 bar y -56.6°C) y este proceso de compresión de los gases de combustión requiere de una gran cantidad de energía [37].

El proceso de captura de CO₂ mediante esta tecnología se basa en la compresión y el enfriamiento del gas en varias etapas para inducir los cambios de fase del bióxido de carbono en los gases de combustión. Dependiendo de las condiciones de operación, el CO₂ saliente del proceso puede ser sólido o líquido [26].

Una gran desventaja de esta técnica es el taponamiento de los equipos y origina incrementos en la caída de presión, por causa del hielo formado por el agua contenida en los gases de combustión, por esta razón, es necesario un pretratamiento [25,26].

La separación criogénica, a su vez tiene ventajas como alto nivel de recuperación y pureza de CO₂, aparte de no necesitar de un absorbente para la captura del CO₂ [34,38].

Figura 2-6 Diagrama de Flujo del Proceso de Captura de CO₂ por Separación Criogénica. [43]

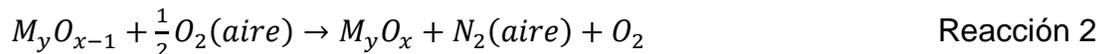
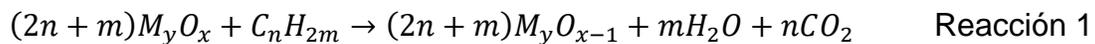


Por otra parte, el desarrollo de esta tecnología ha obtenido nuevas estrategias de separación criogénica avanzada, las cuales son capaces de eliminar o reducir los taponamientos ocasionados por el agua y mejorar la eficiencia térmica, la cual reduce la pérdida exergética y el costo de energía [25].

2.3.4 Combustión con transporte de oxígeno

El proceso se basa en la transferencia de oxígeno del aire al combustible con la ayuda de un portador de oxígeno sólido (óxidos de Fe, Ni, Mn, Cu, etc) [25], eliminando el contacto entre el combustible y el aire [39].

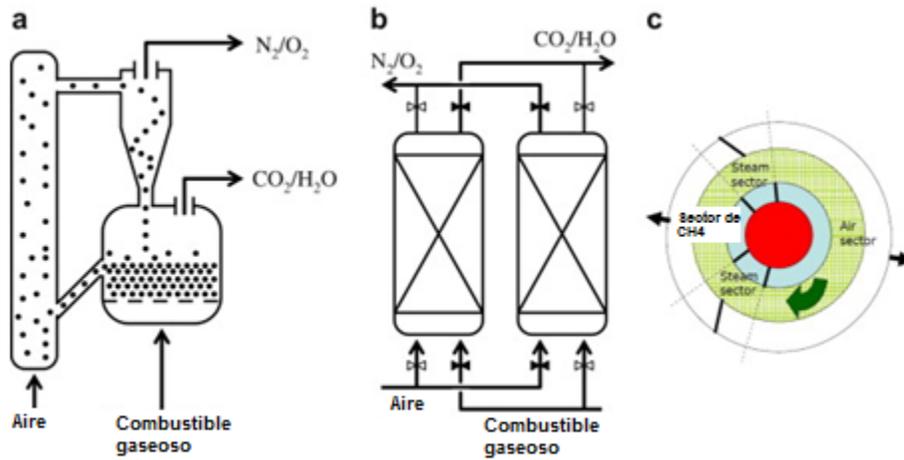
La combustión con transporte de oxígeno o CLC por sus siglas en inglés (Chemical Looping Combustion), consiste en 2 reactores principales, el reactor de aire y el reactor de combustible, donde el portador de oxígeno está en circulación entre estos dos reactores [40]; en el primer paso, el combustible es oxidado a CO₂ y H₂O por algún óxido metálico, que es reducido a metal (Me) o a una forma de óxido reducido (M_xO_{y-1}), reacción 1, esto sucede en el reactor de combustible. Como segundo paso, el metal u óxido de metal reducido es oxidado con aire en el reactor de aire, reacción 2, para ser reutilizado en el reactor de combustible [39,40].



CLC puede ser clasificado en diferentes maneras, a partir del tipo de combustible, diseño del reactor y portadores de oxígeno [40]; la primera clasificación se refiere a si el combustible es sólido, líquido o gas, la segunda al tipo de reactores utilizados para el proceso, hasta el momento se han utilizado las siguientes configuraciones: a) reactores de lecho fluidizado interconectados, b) reactores de lecho fijo alternados y c) reactores rotatorios (ver figura 6); y la última clasificación se fundamenta en el tipo de óxido a usar ya sea de Ni, Cu, Fe, Mn, Co o una mezcla de estos.

Este proceso no genera una ganancia o pérdida entálpica, porque el calor generado es igual al calor de combustión, su principal ventaja reside en la fácil separación de los gases de salida (CO₂ y H₂O), a través de un condensador, lo que reduce el costo de capital; también minimiza la formación de NO_x [25,26,27,39,40].

Figura 2-7 Configuraciones según el Tipo de Reactor en la Combustión con Transporte de Oxígeno. [39]

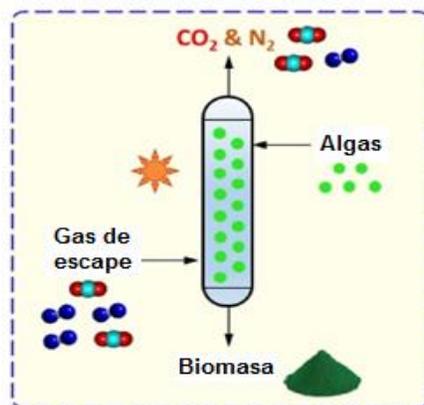


2.3.5 Secuestro biológico.

La fijación de CO₂ microalgal ha sido ampliamente investigada por sus ventajas de biotransformación [44].

Las microalgas pueden consumir el bióxido de carbono y transformarlo en materia orgánica vía fotosíntesis con el uso de luz solar como fuente de energía [45], otra ventaja importante además de ser un método ambientalmente sustentable es que produce ingredientes de la biomasa con alto valor comercial como alimentos para humanos y animales, cosméticos, medicamentos, fertilizantes, biomoléculas para aplicaciones específicas y biocombustibles [25,44]. Por otra parte, cuentan con ciertas desventajas tales como baja fijación y solubilidad de CO₂ [44].

Figura 2-8 Proceso de Fijación Microalgal. [44]



2.3.6 Absorción.

La absorción es un proceso unitario en el que un gas es separado de una mezcla gaseosa utilizando un solvente. La absorción se clasifica en dos formas absorción física y absorción química.

Absorción física: Es un método de disolución física de un gas en un solvente físico. Este fenómeno es comúnmente interpretado por la ley de Henry, ya que la carga gaseosa en el solvente es proporcional a la presión parcial del gas. El solvente absorbe el gas bajo condiciones de presiones parciales altas en la fase gas y desorbe bajo condiciones de presiones parciales bajas [31].

Absorción química: Esta técnica funciona de la siguiente manera, el gas de interés reacciona con un solvente químico y es absorbido como producto de reacción [31]. El absorbente puede recuperarse y capturar el gas deseado cambiando el equilibrio de la reacción mediante calentamiento. Cuando el gas se encuentra a bajas concentraciones, la selectividad es alta, pero la regeneración requiere de gran cantidad de energía [25].

Los métodos de absorción son ampliamente usados en la industria química, petrolera, gas natural y en plantas termoeléctricas [26]. Los absorbentes más utilizados son la etanolamina (MEA), dietanolamina (DEA), N-metildietanolamina (MDEA) y di 2-propanolamina (DIPA) [25,26,31,46]. En esta técnica el absorbedor y el regenerador pueden trabajar de manera continua.

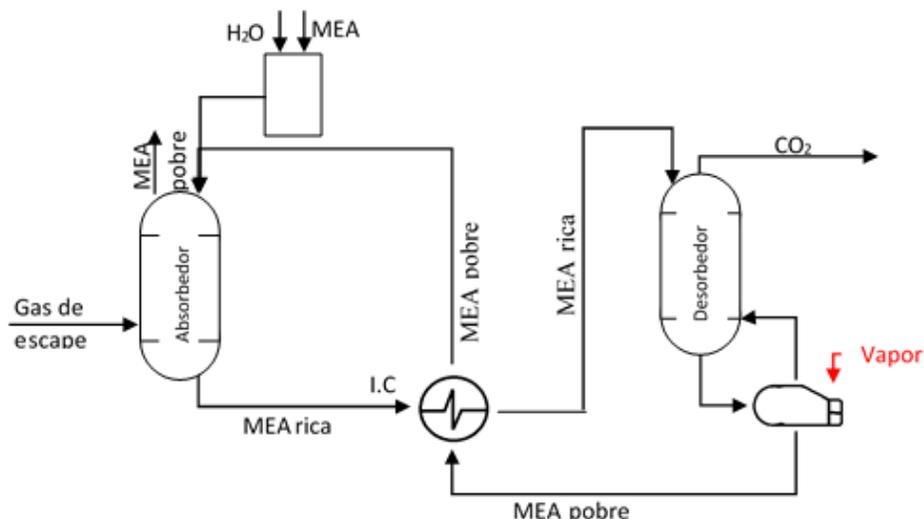
Las ventajas de usar esta tecnología son los altos rendimientos de captura de CO₂, logrando capturar más del 90%, aunque cuenta con muchas deficiencias como la degradación del solvente y la eficiencia de regeneración del solvente [47], además los productos de la degradación del solvente pueden tener un impacto sobre los equipos de operación (a través de la corrosión) o impactos ambientales [47]. La degradación del solvente puede ser térmica u oxidativa; la primera se da por condiciones de altas temperaturas y concentraciones del bióxido de carbono, mientras que la segunda ocurre por la gran cantidad de O₂ que puede contener el gas de escape, por ejemplo, SO_x y NO_x [48]. Además, algunos componentes volátiles emitidos a la atmósfera son ambientalmente peligrosos [25].

2.3.6.1 Columnas de absorción

Este tipo de dispositivos son los más usados en la industria para la captura de CO₂, principalmente ocupan aminas como absorbentes, la más ocupada es la etanolamina debido a su rápida cinética y fuertes reacciones químicas [25]. Sin embargo, también se han usado otros tipos de absorbentes como el NaOH, piperizina (PZ), NH₃ etc.

Este proceso cuenta con 2 columnas una es para la absorción del CO₂ y la otra para la regeneración del solvente. Como primer paso del proceso los gases de combustión son alimentados por el fondo del primer absorbedor, para entrar en contacto directo con la solución (amina-agua) proveniente del domo de la columna, absorbiendo selectivamente el CO₂. El gas libre de CO₂ sale por el domo del absorbedor mientras que la solución rica en bióxido de carbono sale por el fondo, para posteriormente ser precalentada con la solución de amina-agua reciclada. Después la amina rica en CO₂ es enviada a la torre de desorción para la regeneración del solvente. El CO₂ desorbido sale por el domo de la columna de regeneración; la desorción del bióxido de carbono de la amina es un proceso endotérmico, por lo que requiere calor adicional proporcionado por el vapor del rehervidor que se encuentra en el fondo de la columna de desorción [49]. Por otro lado, el solvente regenerado es enfriado para después ser reutilizado en la columna de absorción.

Figura 2-9 Diagrama de Flujo de un Proceso Clásico de Captura de CO₂.



Este proceso, además de contar con las desventajas que se han presentado en el apartado de absorción, tiene la característica de ocupar equipos de gran tamaño que representan un alto costo en la construcción.

2.3.6.2 Procesos de intensificación.

Los procesos de intensificación son aquellos en los que, a través del uso de métodos y técnicas, los equipos principales de cierto proceso químico se han reducido en tamaño, siendo también procesos más limpios, seguros y energéticamente eficientes [50]; además de reducir los costos de diseño de la planta.

En estos procesos es necesario tener en cuenta indicadores económicos, ambientales y sociales [51], de tal forma que, al ser comparados con los procesos convencionales, estos cuenten con grandes ventajas. De igual forma, es necesario la evaluación de seguridad del proceso, la cual requiere la comprensión de la tecnología y el diseño mecánico y del proceso, asimismo el control propio del proceso.

Por otro lado los procesos de intensificación se pueden realizar en dos maneras intensificación local e intensificación global; el primero corresponde al uso de métodos y técnicas para la mejora solamente de algún equipo involucrado en el proceso sin contar con las interacciones de este dispositivo con los demás equipos del proceso; mientras que la intensificación a nivel global pretende como primer paso mejorar todo el proceso y posteriormente utilizar el uso de estas técnicas para mejorar los equipos [51].

2.3.6.2.1 Reactores rotatorios.

Recientemente se ha desarrollado una tecnología basada en la alta gravedad (Higee) , y el dispositivo emergente es el reactor rotatorio, el cual ha revolucionado los campos de la energía, química e ingeniería de procesos [5], este equipo resuelve uno de los problemas más importantes en la absorción química que es la necesidad de grandes equipos de absorción debido a las limitaciones de la transferencia de masa, ya que usa la fuerza centrífuga para reducir esas limitaciones por transferencia de masa.

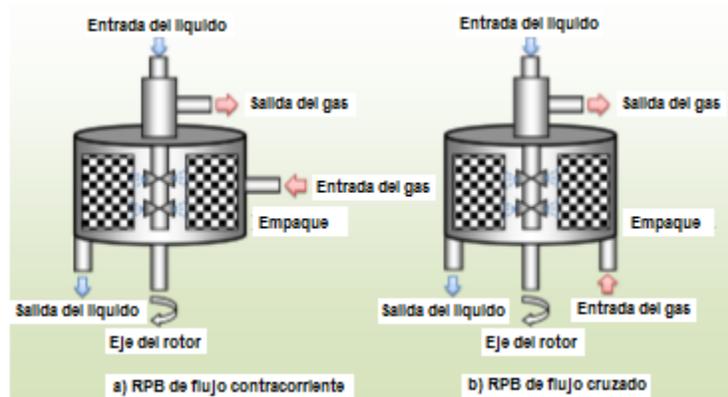
El reactor rotatorio se construye utilizando un rotor en forma de tuerca, que se monta en un eje, y se llena con un empaque de área específica alta. La fase gaseosa entra por la periferia exterior y fluye radialmente hacia adentro y pasa a través del empaque giratorio antes de salir. El líquido entra desde el centro de la máquina a través de una boquilla rociadora, que lo rocía radialmente hacia afuera [4].

La alta gravedad funciona de la siguiente manera: el líquido es esparcido en pequeñas gotas, formando películas delgadas mejorando la interacción líquido-gas, la transferencia de masa y el proceso de reacción debido a la gran área de contacto y la mezcla intensiva entre el líquido y el gas [5].

Particularmente este equipo es usado en absorción gas - líquido, extracción líquido - líquido, transferencia de calor, separación multifase y síntesis de nanomateriales [52]. Los reactores rotatorios son llamados así ya que su parte giratoria crea una fuerza centrífuga entre 200 y 1000 veces la fuerza de gravedad [8].

Algunas de las ventajas al utilizar reactores rotatorios son que los dispositivos son más compactos a comparación del arreglo comúnmente usado (torres de absorción – desorción); alta capacidad, alta transferencia de calor y masa, fuerzas radiales fuertes, tiempos de residencia cortos, altos rendimientos de reacción, alta respuesta a los cambios rápidos de operación y, áreas de contacto grandes entre el líquido y el gas [7].

Figura 2-10 Diagrama de un Reactor Rotatorio. [3]



Existen diversos textos donde se estudia la factibilidad del uso de reactores rotatorios para la captura de dióxido de carbono mediante el uso de diferentes

soluciones de aminas; entre éstas destacan las soluciones de monoetanolamina (MEA) y dietilentriamina (DETA) [9,53,54]. También, al ser estas soluciones combinadas con piperizina [10], aumentan su eficiencia a la captura de CO₂ porque esta sustancia posee una alta velocidad de reacción con el dióxido de carbono, y por lo tanto el tiempo de residencia es corto; sin embargo, no solamente se han hecho estudios con este tipo de soluciones sino también con líquidos iónicos como el bmim-PF₆ [11] los cuales resultan ser eficientes.

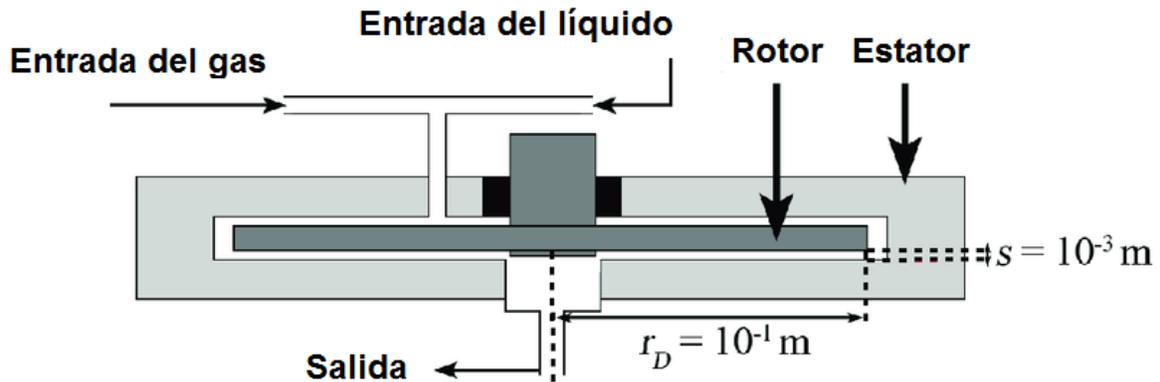
A partir de las investigaciones se ha mostrado que la captura de CO₂ basada en el sistema de alta gravedad depende fuertemente de parámetros de operación tales como: tipo de absorbente líquido, concentración del líquido absorbente y su respectivo flujo, flujo de gas de escape, concentración del dióxido de carbono, y la temperatura de reacción [1,3,6,7]. Es necesario una investigación más a fondo sobre estos parámetros para garantizar las condiciones de operación óptimas que maximicen el rendimiento de la captura de CO₂.

Por otra parte, se han realizado estudios con la finalidad de mejorar su diseño. Gran parte de las mejoras a estos equipos son sobre la configuración de su rotor; como son: reactor rotatorio de disco, reactor rotatorio con empaques helicoidales, reactor rotatorio de rocío multietapa, reactor rotatorio divisor, reactor rotatorio de zigzag y reactor rotatorio con cuchillas. A continuación, se describe brevemente cada configuración.

Reactor rotatorio de disco:

Este tipo de reactor consiste en una cubierta cilíndrica que contiene en el centro un disco giratorio. El líquido entra por la parte superior de la cubierta, cerca del eje del rotor. Este fluye hacia fuera por el borde del reactor y por debajo del disco al centro del reactor. El gas ingresa al reactor a través de un orificio en el estator [13].

Figura 2-11 Representación de un Reactor Rotatorio de Disco. [13]



Reactor rotatorio divisor:

El rotor de este tipo de reactor consiste en un par de discos y tres anillos anulares concéntricos de acero inoxidable de diferente diámetro cada uno, estos se encuentran fijados en los discos. Estos discos pueden girar en la misma dirección o en dirección opuesta; cuando los discos rotan en diferente dirección se logra una velocidad de deslizamiento tangencial entre el gas y el empaque [14].

Reactor rotatorio de zigzag:

Lo que caracteriza a este reactor es que su rotor acopla un disco giratorio con uno estacionario. Dos series de láminas circulares concéntricas se fijan al disco rotatorio y estacionario respectivamente. Una serie sirve como deflectores rotacionales y la otra como deflectores estacionarios. Los deflectores giratorios, cuya parte superior está perforada, están fijados en el disco inferior (rotativo) accionado por un motor a través de un eje vertical. Los deflectores estacionarios se fijan en el disco superior (estacionario). De esta forma, la holgura entre los deflectores giratorios y el disco superior, así como entre los deflectores estacionarios y el disco inferior, ofrece canales de flujo en zigzag para la fase de gas y líquida. La disposición de flujo de gas y líquido del reactor zigzag es la misma que la del reactor rotatorio convencional, es decir, el gas se introduce en la carcasa y fluye hacia adentro impulsado radialmente por la diferencia de presión. El líquido se alimenta en el centro del disco superior que fluye hacia fuera en contracorriente al gas en virtud de la fuerza centrífuga. En el rotor, la fase continua de gas y la fase líquida dispersa entran en

contacto íntimo para permitir procesos de transporte entre fases [15].

Reactor rotatorio con cuchillas:

Este tipo de reactor se caracteriza por ser una carcasa cilíndrica que cuenta con varias láminas que se encuentran dentro del rotor del reactor, dando una imagen de cuchillas; la distancia entre láminas debe ser la misma. El líquido ingresa por el rotor y este a su vez es esparcido debido al movimiento giratorio, por las diferentes cuchillas; mientras que el gas entra por la parte lateral de la carcasa del reactor, al entrar entra en contacto con el líquido y finalmente sale por la parte central del reactor [12].

Figura 2-12 Diagrama de un Reactor Rotatorio de Zig-zag. [15]

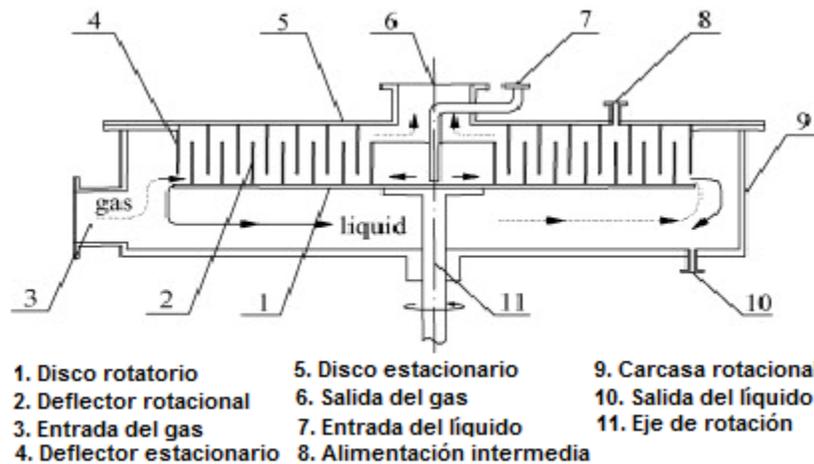
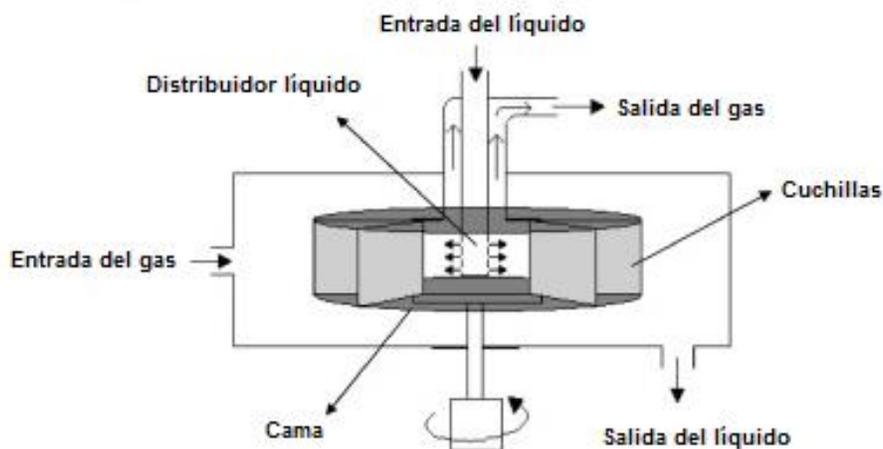


Figura 2-13 Diagrama de un Reactor Rotatorio de cuchillas.[12]



Aunque este último se ha probado recientemente en la captura de CO₂ y ha obtenido resultados favorables a comparación del uso de una columna rotatoria con algún empaque estructurado, no quiere decir que este diseño sea el mejor para la captura de dióxido de carbono.

En los últimos veinte años se han propuesto modelos matemáticos que representan físicamente a los reactores rotatorios, las principales características de estos modelos son el uso de parámetros para cuantificar el rendimiento del proceso, en los que destacan la caída de presión de los equipos y la transferencia de masa para la captura de CO₂.

Por lo general la determinación de la caída de presión se realiza a partir de teorías de mecánica de fluidos donde se desarrollan modelos semiempíricos. Estos métodos consideran que la caída de presión total está dada a partir de la suma de caídas de presiones parciales dentro del reactor rotatorio las cuales pueden calcularse en términos de la estructura del equipo [8], las fuerzas de resistencia o ambas [55]. Mediante el uso de este tipo de modelos se ha demostrado que la caída de presión en un reactor rotatorio con flujos en contracorriente se debe primeramente a las fuerzas de fricción y en segundo término a la fuerza centrífuga [5]. Por otra parte, estudios de simulación y experimentación indican que la caída de presión del gas incrementa la velocidad de rotación y el flujo de gas aumenta. Además, investigaciones relacionadas con la hidrodinámica aseveran que en un reactor rotatorio en contracorriente de un sistema gas – líquido la caída de presión del gas es proporcional al cuadrado de los flujos de líquido y gas e inversamente proporcional al cuadrado de la aceleración centrípeta [56]. Aunque este tipo de modelos puede hacer ciertas predicciones, se ha demostrado que la variación de la caída de presión calculada con la experimental está entre el 10 y el 20 % de error [5]. Debido a esto se han desarrollado nuevos enfoques como el uso de redes neuronales que pueden predecir la caída de presión en los equipos con un porcentaje de error mucho más bajo que con los métodos semiempíricos.

Así mismo la caída de presión está íntimamente relacionada con el consumo de energía, y éste a su vez afecta en la estructura de diseño, capacidad y selección de

empaques [5]. De tal manera que, si se reduce el tamaño del reactor rotatorio, se selecciona un material de empaque que reduzca la fricción debido al movimiento de rotación, los costos del proceso se reducirán. Sin embargo, las investigaciones actuales solamente se han enfocado en la alta eficiencia de la captura de carbono, por lo que los factores anteriormente mencionados se ven afectados y por lo tanto el siguiente paso es implementar un balance entre la captura de CO₂ y el consumo de energía de tal forma que estos se vean beneficiados en el proceso.

Asimismo, la transferencia de masa es otro parámetro que evalúa el rendimiento de este tipo de reactores y es un factor base en el diseño, operación y optimización de los mismos. En diferentes análisis se ha descubierto que el coeficiente de transferencia de masa puede ser calculado a través de la eficiencia en la captura de dióxido de carbono.

Para poder predecir este fenómeno dentro de este tipo de reactores existen variedad de modelos con diferentes enfoques tales como los mecánicos y estadísticos que son representados por modelos teóricos, este tipo de modelos ayudan a entender la naturaleza del fenómeno. Generalmente estos modelos se basan en las teorías clásicas de la transferencia de masa como son la teoría de la doble película, de penetración y de renovación de superficie. Este tipo de modelos usualmente hacen consideraciones con las cuales el modelo se simplifica y esto a su vez hace que se generen ciertas discrepancias entre los valores calculados y los resultados experimentales. Debido a estas ambigüedades con la realidad se hacen correlaciones basadas en análisis estadísticos que componen el modelo y reducen el error; sin embargo, estos modelos tienden a ser particulares y no generalizan el comportamiento de los diferentes tipos de reactores rotatorios.

De igual forma existen modelos basados en simulación numérica, estos proporcionan información confiable y precisa sobre los patrones de flujo y reacciones entre el gas – líquido, además proporciona modelos más detallados sobre la captura de CO₂ en equipos de alta gravedad. Se dividen en dos tipos basados en química y características basadas en dinámica de fluidos computacional (CFD). Este último ha sido direccionado para conocer el efecto de la hipergravedad,

los caudales de líquido y gas, así como condiciones de operación (Temperatura y Presión). Los modelos anteriormente señalados pueden predecir el comportamiento de los equipos de alta gravedad con un porcentaje de error que ronda entre el 3 y el 15% [5].

En años recientes se han desarrollado modelos inteligentes utilizando enfoques como redes neuronales artificiales y regresión vectorial de apoyo. Esta nueva forma de modelado abre las puertas para la solución del problema ya que su capacidad de predicción es muy acertada. Las redes neuronales artificiales han sido empleadas para la predicción del coeficiente y el rendimiento de transferencia de masa en un reactor rotatorio. Este tipo de enfoque no da respuesta completa de los procesos de mezclado, transferencia de masa y reacción. Sin embargo, al ser una tecnología nueva se espera que mejore su capacidad de predicción al admitir muestras de big-data.

En la siguiente tabla se muestran ventajas y desventajas de los diferentes modelos para la transferencia de masa.

Tabla 2-2 Comparación de los Diferentes Modelos de Transferencia de Masa

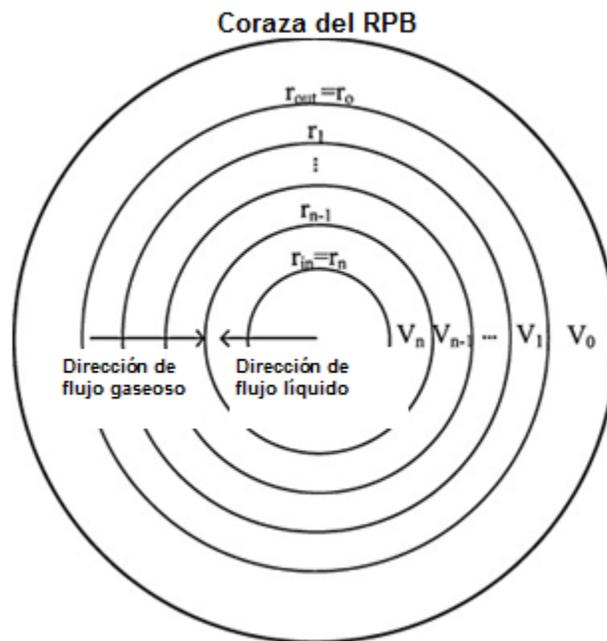
Tipo de modelo	Ventajas	Desventajas	Observaciones
Mecanísticos	Simple y bajo costo computacional	Baja generalización	Sobre simplificado en procesos físico químicos: Aplicación limitada.
Regresión estadística	Simple, directo y bajo costo computacional.	Difícil de determinar ciertos factores correctamente, necesita de datos experimentales, Baja generalización	Dependiente de la selección del modelo de regresión.
Simulación numérica	Un enfoque más teórico, el proceso puede ser revelado, flujo multifásico, preciso.	Complejo, alto costo computacional, comúnmente se simplifica en términos de física, química y geometría.	Comúnmente simplificado en términos físicos químicos y geométricos. A veces no está validado.
Enfoque inteligente	Puede comportarse como el sistema real. Bajo costo computacional, Preciso.	Difícil de determinar ciertos factores correctamente, se necesita soporte de datos experimental.	Necesita de resultados de análisis estadístico, depende de un algoritmo inteligente.

3. Modelado y simulación de los reactores rotatorios.

El modelo matemático de los reactores rotatorios a usar en este proyecto es el desarrollado por Borhani et al. [7] bajo las siguientes consideraciones:

1. En la fase gas consiste solamente N_2 , H_2O y CO_2 .
2. En la fase líquida existen las moléculas de H_2O , CO_2 , MEA y especies iónicas como HCO_3^- , CO_3^{2-} , OH^- , H_3O^+ , $MEA H^+$ y $MEACOO^-$.
3. Solo hay flux de transferencia de masa del H_2O , CO_2 , MEA y N_2 , mientras que el flux de transferencia de masa de las especies iónicas es cero.
4. El gas es ideal.
5. El sistema está en estado estacionario.
6. Flujo en dirección radial.
7. Todas las reacciones ocurren en la fase líquida.
8. El contacto entre las fases en contracorriente. Los gases de combustión fluyen desde la parte externa al centro y el líquido fluye del centro hacia afuera del reactor rotatorio.

Figura 3-1 Dirección de los Flujos Líquido y Gas Dentro del RPB.



3.1 Balances de materia y energía.

Las principales ecuaciones que gobiernan los fenómenos que ocurren en el reactor rotatorio se presentan a continuación con sus respectivas condiciones de frontera.

Balance de materia fase gas.

$$\frac{\partial F_g y_i}{\partial r} = a_{gl} N_i A_c \quad B.C \quad \left\{ \begin{array}{l} r = R_o \rightarrow y_i = y_o \\ r = R_i \rightarrow \frac{\partial F_g y_i}{\partial r} = 0 \end{array} \right.$$

Balance de materia fase líquida.

$$\frac{\partial F_l x_i}{\partial r} = a_{gl} N_i A_c \quad B.C \quad \left\{ \begin{array}{l} r = R_i \rightarrow x_i = x_o \\ r = R_o \rightarrow \frac{\partial F_l x_i}{\partial r} = 0 \end{array} \right.$$

Balance de energía fase gas.

$$\frac{\partial F_g C p_g T_g}{\partial r} = a_{gl} q_g A_c \quad B.C \quad \left\{ \begin{array}{l} r = R_o \rightarrow T_g = T_{g,o} \\ r = R_i \rightarrow \frac{\partial F_g C p_g T_g}{\partial r} = 0 \end{array} \right.$$

Balance de energía fase líquida.

$$\frac{\partial F_l C p_l T_l}{\partial r} = a_{gl} q_l A_c \quad B.C \quad \left\{ \begin{array}{l} r = R_i \rightarrow T_l = T_{l,o} \\ r = R_o \rightarrow \frac{\partial F_l C p_l T_l}{\partial r} = 0 \end{array} \right.$$

3.2 Ecuaciones de transferencia de masa.

El flux de transferencia de masa N_i es calculado a partir de la teoría de la doble película, el cual se obtiene a partir de la multiplicación del coeficiente global de transferencia de masa y la diferencia entre la presión parcial en la fase gas y la presión de equilibrio correspondiente a la concentración en el seno del líquido.

$$N_i = K_{o,i} (P_i - P_i^*)$$

El coeficiente global de transferencia de masa es calculado a través de la siguiente ecuación

$$\frac{1}{K_{o,i}} = \frac{RT_g}{k_{g,i}} + \frac{H e_{l,i}}{E_i k_{l,i}}$$

Donde $k_{g,i}$ y $k_{l,i}$ es el coeficiente de transferencia de masa de la fase gas y líquida respectivamente, $He_{l,i}$ es la constante de Henry y E_i es el factor de intensificación; la primera fracción del lado derecho de la ecuación representa la resistencia a transferencia de masa de la fase gas, mientras que el segundo término es la resistencia a la transferencia de masa líquida. Además, se asume que la resistencia a la transferencia de masa líquida para el agua y la etanolamina es despreciable, por lo tanto, el segundo término, puede ser eliminado. También el N_2 al considerarlo un gas inerte, su transferencia de masa es ignorada. De tal forma, que las ecuaciones de transferencia de masa son las siguientes.

$$N_{MEA} = \frac{k_{g,MEA}}{RT_g} (P_{MEA} - P_{MEA}^*)$$

$$N_{H_2O} = \frac{k_{g,H_2O}}{RT_g} (P_{H_2O} - P_{H_2O}^*)$$

$$N_{CO_2} = \frac{1}{\frac{RT_g}{k_{g,CO_2}} + \frac{He_{l,CO_2}}{E_{CO_2}k_{l,CO_2}}} (P_{CO_2} - P_{CO_2}^*)$$

Las presiones parciales de cada componente se calculan de la siguiente manera

$$P_i = Py_i$$

Donde P es la presión total del gas. La presión de equilibrio es calculada para los componentes altamente solubles y los gases insolubles por las ecuaciones mostradas a continuación.

$$P_i^* = \gamma_i x_i P_i^{sat} \quad i = MEA, H_2O$$

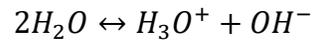
$$P_{CO_2}^* = \gamma_{CO_2} C_{l,CO_2} He_{l,CO_2}$$

Los coeficientes de actividad (gamma) son estimados a partir del modelo de Wilson, y la concentración molar de CO_2 libre es calculada a partir del cálculo de equilibrio de especies que es un cálculo iterativo aplicado en diversas investigaciones.

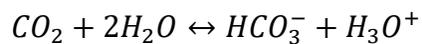
3.3 Equilibrio químico.

El modelo de equilibrio de especies en la fase líquida está basado en las reacciones que ocurren cuando el CO_2 es absorbido por una solución de monoetanolamina acuosa, que se presentan a continuación:

Ionización del agua.



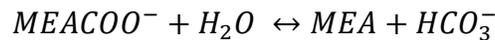
Disociación del CO_2 en ion bicarbonato.



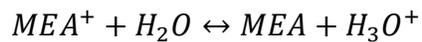
Disociación del ion bicarbonato en ion carbonato.



Hidrólisis del ion carbamato a ion bicarbonato



Disociación de la amina protonada



Las expresiones de las reacciones de equilibrio químico correspondientes son las siguientes:

$$k_1 = [OH^-][H_3O^+]$$

$$k_2 = \frac{[HCO_3^-][H_3O^+]}{CO_2}$$

$$k_3 = \frac{[CO_3^{2-}][H_3O^+]}{HCO_3^-}$$

$$k_4 = \frac{[HCO_3^-][MEA]}{MEACOO^-}$$

$$k_5 = \frac{[MEA][H_3O^+]}{MEA^+}$$

Los valores de las k 's de equilibrio se obtienen a partir de la ecuación ocupada por Matin et al (2012).

$$\ln(k) = A + \frac{B}{T} + C \ln(T) + DT \quad T [=] K \text{ y } k [=] \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$

Cuyos valores A, B, C y D se encuentran en la tabla número 3.

Tabla 3-1 Constantes de Equilibrio Químico. [58]

	A	B	C	D
k_1	132.89888	-13445.9	-22.4473	0
k_2	231.465439	-12092.1	-36.7816	0
k_3	216.050446	-12431.7	-35.4819	0
k_4	-0.52315	-2545.53	0	0
k_5	-3.038325	-7008.357	0	-0.0031348

3.4 Cinética de reacción.

La reacción que ocurre entre el dióxido de carbono y la etanolamina ha sido descrita por dos tipos de mecanismos, tipo zwitterion y termomolecular; en el presente estudio el mecanismo que se ocupó es de tipo termomolecular desarrollado por Aboudheir et al. [59] para la constante de velocidad de reacción.

$$r_{CO_2} = k_{obs} * C_{I,CO_2}$$

$$k_{obs} = k_{MEA}[MEA]^2 + k_{H_2O}[H_2O][MEA]$$

Donde

$$k_{MEA} = 4.61E9 * \exp\left(\frac{-4412}{T_l}\right)$$

$$k_{H_2O} = 4.55E6 * \exp\left(\frac{-3287}{T_l}\right)$$

3.5 Factor de intensificación.

Otro componente importante en el modelo es el factor de intensificación, este representa el efecto que tiene la reacción química sobre la transferencia de masa y se describe por medio de la siguiente ecuación.

$$E_{l,CO_2} = \frac{\sqrt{k_{obs}D_{CO_2}}}{k_{l,CO_2}}$$

3.6 Ecuaciones de transferencia de calor.

Desde otra perspectiva, en los balances de energía es necesario definir las velocidades de transferencia de calor q_g y q_l .

$$q_g = h_{gl}(T_l - T_g)$$

$$q_l = h_{gl}(T_l - T_g) - \Delta H_{CO_2}N_{CO_2} - \Delta H_{H_2O}N_{H_2O}$$

Donde h_{gl} es el coeficiente convectivo de transferencia de calor, ΔH_{CO_2} es el calor de reacción del CO_2 y ΔH_{H_2O} es el calor de vaporización del agua.

3.7 Propiedades y parámetros.

En la tabla de abajo se presentan correlaciones y métodos para el cálculo propiedades físicas y otros parámetros como el coeficiente de transferencia de masa y calor, área interfacial, acumulación líquida, los coeficientes de difusión y la constante de Henry.

Tabla 3-2 Métodos y Correlaciones Para el Cálculo de Propiedades y Otros Parámetros.

PROPIEDAD	ECUACIÓN	REFERENCIA
Viscosidad del gas	μ_g	Aspen (ThermoML polynomial)
Viscosidad del líquido	$\mu_l = \mu_{l,H_2O} \exp\left(\frac{(21.186\phi_{MEA})(\alpha_{CO_2}(0.01015\phi_{MEA} + 0.0093T_l - 2.2589) + 1)\phi_{MEA}}{T_l^2}\right)$	Weiland et al. (1998)
Densidad del gas	ρ_g	Aspen
Densidad del líquido	$\rho_l = \frac{\sum_{i=1}^n x_i MW_i}{x_{MEA} x_{CO_2} V_m^* + \sum_{i=1}^n x_i V_{m,i}}$ $V_{m,i} = \frac{MW_i}{\rho_{l,i}}$ $V_m^* = -1.8218E - 3$ $V_{m,CO_2} = 0.04747E - 3$ $\rho_{l,MEA} = 1.9093 - 4.2999E - 4T_l - 5.66040E - 7T_l^2$ $\rho_{l,H_2O} = 0.863559 - 1.21494E - 3T_l - 2.5708E - 6T_l^2$	Weiland et al. (1998) Hsu y Li (1997)
Capacidad calorífica del gas	$Cp_g = \sum_{i=1}^n y_i Cp_{g,i}$ $Cp_{g,CO_2} = 19795.19 + 73.436472T_g - 0.056019T_g^2 + 1.72E - 5T_g^3$ $Cp_{g,H_2O} = 33738.11 - 7.0175634T_g - 0.0272961T_g^2 + 1.67E - 5T_g^3 + 4.30E - 9T_g^4 - 4.14E - 13T_g^5$	Harun (2012)

	$Cp_{g,N_2} = 31149.792 - 13.565232T_g - 0.02679552T_g^2 + 1.17E - 5T_g^3$ $Cp_{g,MEA} = 13207.4 - 281.577T_g - 0.1513066T_g^2 + 3.13E - 5T_g^3$	
Capacidad calorífica del líquido.	$Cp_l = x_{MEA}Cp_{l,MEA} + x_{H_2O}Cp_{l,H_2O} + x_{MEA}x_{H_2O}f_{rk} + \alpha_{CO_2}^{0.4173}(C_o + C_1x_{MEA})$ $f_{rk} = A_o + A_1(x_{MEA} - x_{H_2O}) + A_2(x_{MEA} - x_{H_2O})^2$ $A_o = -112.4265 + 0.3962T_l$ $A_1 = 199.2343 - 0.5955T_l$ $A_2 = 424.5643 - 1.3143T_l$ $C_o = -1098.8042 + 0.7711T_l - 233.5587\ln(T_l)$ $C_1 = 202.3859 - 0.8662T_l$ $Cp_{l,H_2O} = 96.317 - 0.1241T_l + 1.5981E - 4T_l^2 + 6.9827E - 8T_l^3$ $Cp_{l,MEA} = 78.2498 + 0.293T_l$	Agbonghae et al. (2014)
Constante de transferencia de masa del gas	$k_{g,i} = 2(Re_g)^{0.7}(Sc_{g,i})^{\frac{1}{3}}\left(\frac{D_{g,i}}{ap dp^2}\right)$	Onda et al. (1968)
Constante de transferencia de masa líquida.	$k_{l,i} = 0.92\left(\frac{ap}{a_{gl}}\right)^{\frac{1}{3}} Re_l^{\frac{1}{3}} Sc_{l,i}^{\frac{1}{2}} Gr_l^{\frac{1}{6}}\left(\frac{D_{l,i}}{dp}\right)$	Tung y Mah (1985)
Área interfacial	$\frac{a_{gl}}{ap} = 1 - \exp\left(1.45\left(\frac{\sigma_c}{\sigma}\right)^{0.75} Re_l^{0.1} Fr_l^{-0.05} We_l^{0.2}\right)$	Onda et al. (1968)
Constante de Henry	$He_{l,CO_2} = He_{l,N_2O} \frac{He_{H_2O,CO_2}}{He_{H_2O,N_2O}}$ $He_{l,N_2O} = \exp(\varphi_{MEA} \ln(He_{MEA,N_2O}) + \varphi_{H_2O} \ln(He_{H_2O,N_2O}) + He_{l,N_2O}^E)$ $He_{H_2O,CO_2} = 3.520E6 \exp\left(\frac{-2113}{T_l}\right)$ $He_{H_2O,N_2O} = 8.449E6 \exp\left(\frac{-2283}{T_l}\right)$ $He_{MEA,N_2O} = 2.448E5 \exp\left(\frac{-1348}{T_l}\right)$ $\varphi_{MEA} = \frac{x_{MEA}Vm_{MEA}}{x_{MEA}Vm_{MEA} + x_{H_2O}Vm_{H_2O}}$ $\varphi_{H_2O} = \frac{x_{H_2O}Vm_{H_2O}}{x_{MEA}Vm_{MEA} + x_{H_2O}Vm_{H_2O}}$ $He_{l,N_2O}^E = \varphi_{MEA}\varphi_{H_2O}\alpha_{MEA,H_2O}$	Ying et al. (2012)
Difusividad líquida	$D_{l,CO_2} = D_{l,N_2O} \frac{D_{l,CO_2-H_2O}}{D_{l,N_2O-H_2O}}$ $D_{l,N_2O} = (5.07E - 6 - 3.5443E - 7C_{l,MEA} + 3.4294E - 9C_{l,MEA}^2) \exp\left(\frac{-2371 + 0.3749 C_{l,MEA}}{T_l}\right)$ $D_{l,CO_2-H_2O} = 2.35E - 6 \exp\left(\frac{-2119}{T_l}\right)$ $D_{l,N_2O-H_2O} = 5.07E - 6 \exp\left(\frac{-2371}{T_l}\right)$ $D_{l,MEA-H_2O} = \exp\left(-13.275 - \frac{2198.3}{T_l} - 0.078142C_{l,MEA}\right)$ $D_{l,MEA} = D_{l,MEA-H_2O} \left(\frac{\mu_{l,H_2O}}{\mu_{l,MEA}}\right)^{0.6}$ $D_{l,H_2O} = \frac{7.4E - 8 (1.9 \times MW_{MEA})^{0.5} T_l}{\mu_{l,MEA} V_{m,mea}^{0.6}}$ $D_{l,N_2} = 10E - 7$	Analogía Ying y Eimer (2012) Versteeg y Van Swaaij (1998) Snijder et al. (1973) Versteeg y Van Swaaij (1998)

		Wilke y Chang (1955) Harun et al. (2012)
Difusividad gaseosa	$D_{g,i} = \frac{1 - y_i}{\sum_{i=1}^n D_{g,i-j}}$ $D_{g,i-j} = \frac{1.43E - 7T_g^{1.75} \left(\frac{1}{MW_i} + \frac{1}{MW_j} \right)^{0.5}}{Px10 - 2 [\sum \vartheta_i^{1/3} - \sum \vartheta_j^{1/3}]}$	Fairbanks y Wilke (1950) Fuller et al. (1966)
Conductividad térmica	λ_g	Aspen (ThermoML polynomial)
Acumulación líquida	$\varepsilon_l = 0.039 \left(\frac{g_c}{g_o} \right)^{-0.5} \left(\frac{u_i}{u_{lo}} \right)^{0.6} \left(\frac{v_i}{v_{lo}} \right)^{0.22}$ $g_c = r\omega^2$ $g_o = 100 \frac{m^2}{s} \quad u_{lo} = 0.01 \frac{m}{s} \quad v_{lo} = 10E - 6 \frac{m^2}{s}$	Burns et al. (2000)
Coefficiente de transferencia de calor	$h_{gl} = k_{g,prom} R_g T_g \left(\frac{Cp_g \rho_g}{MW_{prom}} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\lambda_g}{D_{g,prom}} \right)^{2/3}$	Chilton y Colburn (1934)

3.8 Modelo del rehervidor.

En la regeneración del solvente los equipos necesarios son un reactor rotatorio y un rehervidor, éste provee el calor requerido para la desorción del dióxido de carbono, el modelo del RPB ha sido descrito en párrafos anteriores; por lo tanto, el modelo del rehervidor se describe a continuación a través de ecuaciones para el cálculo de un flash.

$$F = L + V$$

$$z_i F = x_i L + y_i V$$

$$\sum x_i = 1 \quad \sum y_i = 1$$

$$k_{eq,i} = \frac{y_i}{x_i}$$

$$FH_F + Q = LH_L + VH_V$$

3.9 Simulación del modelo del reactor rotatorio de captura de CO₂.

El modelo matemático fue resuelto usando el método numérico de Euler, para que el método funcione es necesario tener los valores de entrada de la fase gas y los valores de salida de la fase líquida; estos últimos fueron calculados de la siguiente manera.

Primeramente, se calcula el flujo de CO₂ a la entrada del reactor de las dos fases, el flujo de entrada de CO₂ líquido se obtiene a partir de la multiplicación del flujo molar de la etanolamina por la carga inicial (mol CO₂/mol MEA). Luego, el flujo de entrada de CO₂ es multiplicado por la fracción recuperada experimentalmente, sumando este resultado con los moles iniciales de CO₂ líquido, se obtienen los moles de bióxido de carbono a la salida.

Para obtener el flujo de agua a la salida, se supuso que no existe transferencia de masa de etanolamina, por lo que las moles de etanolamina de entrada son iguales que a la salida; entonces multiplicando las moles de MEA por su peso molecular obtenemos su flujo másico. De los datos se sabe la fracción peso de la solución MEA-H₂O a la salida del reactor, por lo que con la siguiente ecuación podemos encontrar el flujo másico del agua.

$$M_{mea} \times \frac{(1 - Y_{s,MEA})}{Y_{s,MEA}} = M_{H_2O}$$

El flujo másico del agua es dividido entre su masa molar obteniendo el flujo molar del agua a la salida, finalmente se suman los flujos molares de todos los componentes, y se obtienen las fracciones mol a través de la siguiente ecuación.

$$\frac{F_{L,i}}{F_t}$$

El modelo del reactor rotatorio como absorbedor fue probado a concentraciones de 55% y 75% masa de etanolamina en la solución, bajo las siguientes condiciones y características del dispositivo.

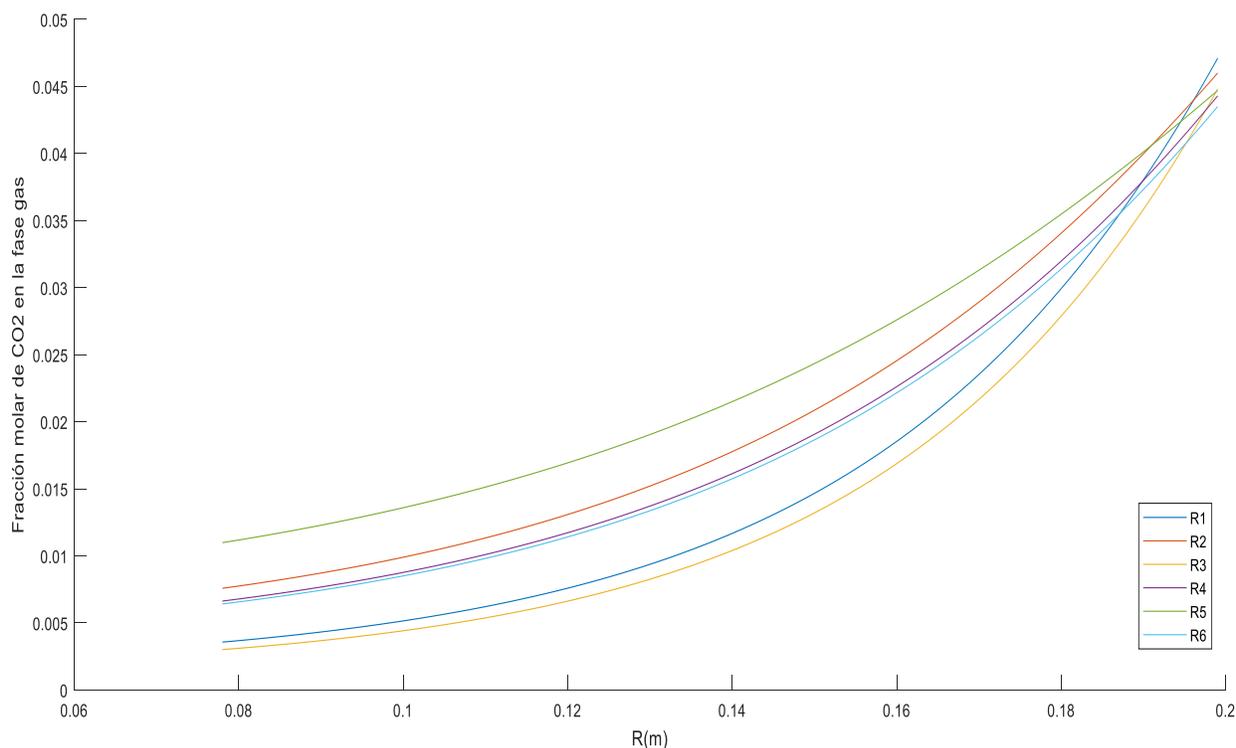
Tabla 3-3 Características del equipo

Parámetros	Valores
Diámetro(m)	0.398(D.e), 0.156(D.i)
Porosidad del empaque (m ³ /m ³)	0.76
Tipo de empaque	Malla de acero inoxidable
Altura(m)	0.025
Área total(m ² /m ³)	2132

Tabla 3-4 Condiciones de Operación del RPB

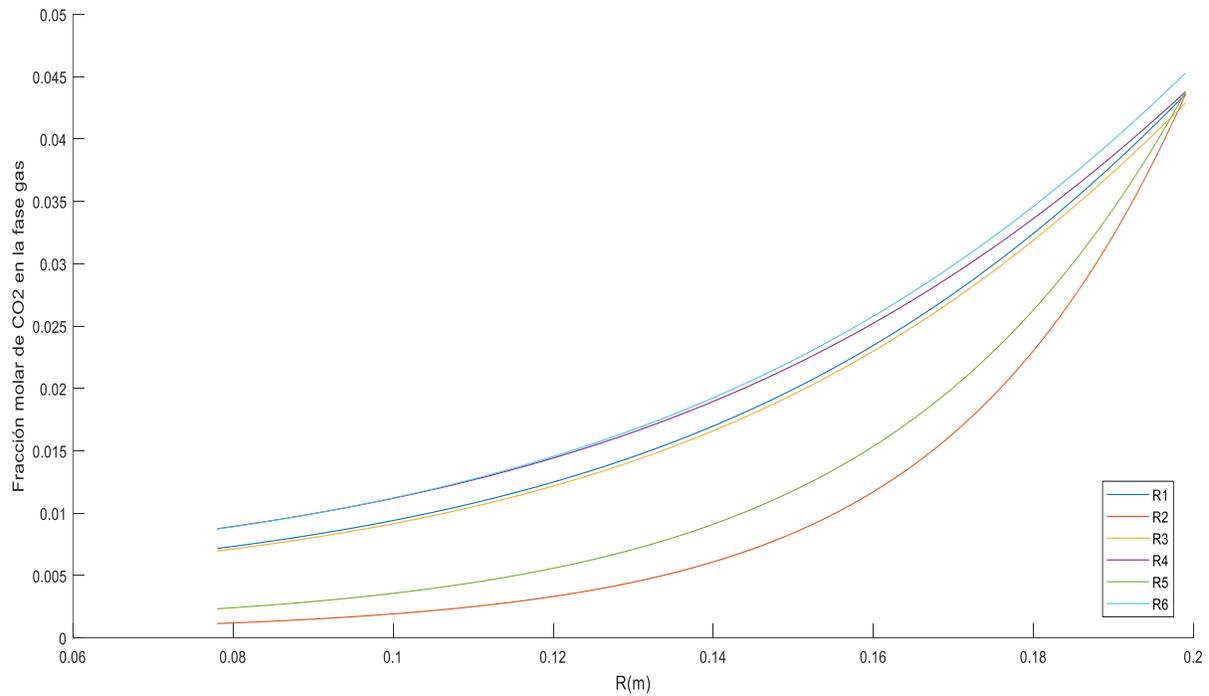
Corrida	P (atm)	Velocidad (RPM)	Flujo (Kmol/s) en Ro		Temperatura (°C) en Ro		Fracción molar en Ro					
			Líquido	Gas	Líquido	Gas	Líquido			Gas		
							CO2	H2O	MEA	CO2	H2O	N2
1	1	600	0.0224	7.972e-4	43.8	47	0.022	0.719	0.258	0.047	0.168	0.785
2	1	600	0.0229		28.7		0.024	0.725	0.273	0.046	0.169	
3	1	1000	0.0218		44.1		0.022	0.711	0.265	0.045	0.170	
4	1	600	0.0119		38.4		0.029	0.705	0.267	0.044	0.170	
5	1	600	0.0118		25.9		0.029	0.698	0.251	0.045	0.170	
6	1	1000	0.0123		36.9		0.028	0.714	0.259	0.043	0.171	

Gráfico 3-1 Fracción Mol de CO2 Dentro del Reactor Rotatorio al 55% de MEA.



Los resultados obtenidos del modelo se pueden observar en los gráficos 3-1 y 3-2 donde se ilustran los perfiles de las fracciones molares del CO₂ para los diferentes casos y sus respectivas corridas. En ambos casos, en R₀ donde entra el gas se encuentra la mayor cantidad de bióxido de carbono la cual va disminuyendo conforme se acerca a R_i.

Gráfico 3-2 Fracción Mol de CO₂ Dentro del Reactor Rotatorio al 75% de MEA



En las tablas 3-5 y 3-6 apoyado por los gráficos 3-3 y 3-4 muestra los porcentajes de captura de CO₂ para cada corrida comparándolos con los resultados obtenidos por Jassim [4].

Tabla 3-5 % de Captura de CO₂ al 55% MEA

Corrida	% CO ₂ capturado. Experimental	%CO ₂ capturado. Modelo
R1	94.9	92.43
R2	83	83.53
R3	95.4	93.28
R4	87	85.04
R5	84.1	75.43
R6	89.9	85.26

Tabla 3-6 % de Captura de CO₂ al 75% MEA

Corrida	% CO ₂ capturado. Experimental	%CO ₂ capturado. Modelo
R1	84.2	83.56
R2	97.5	97.37
R3	91.2	83.78
R4	84.3	80.03
R5	98.1	94.68
R6	91	80.75

Gráfico 3-3 % de Captura experimental vs % de Captura del Modelo al 55% MEA

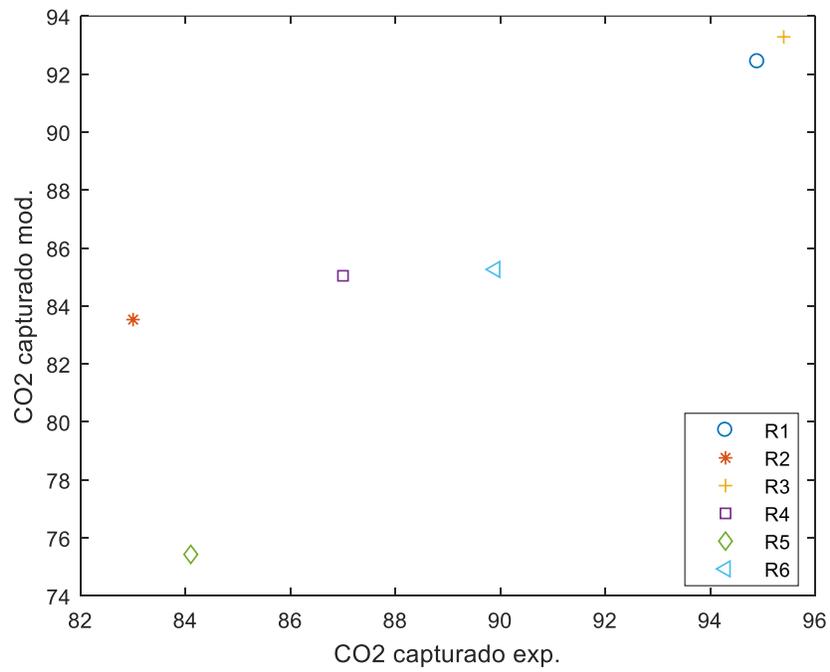


Gráfico 3-5 % de Captura Experimental vs % de Captura del Modelo al 75% MEA

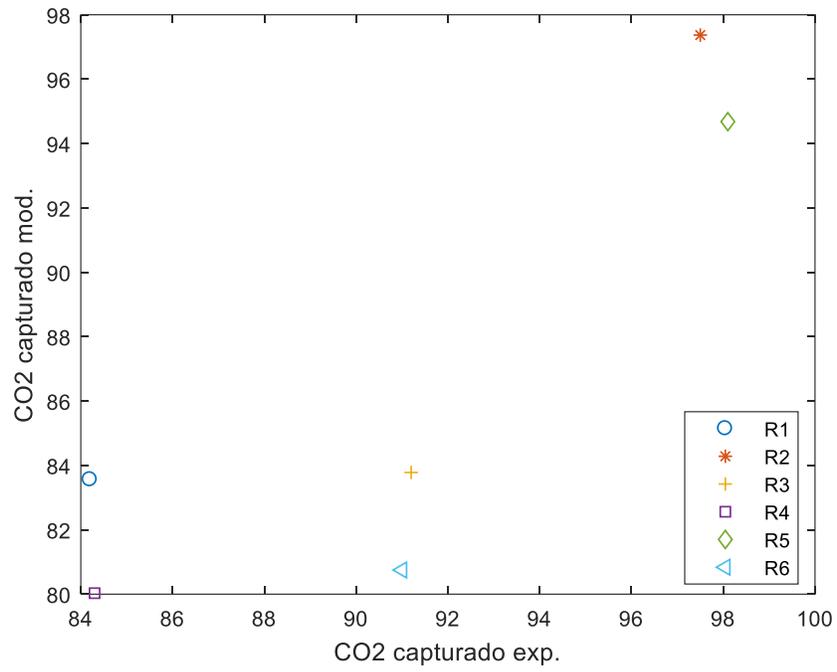
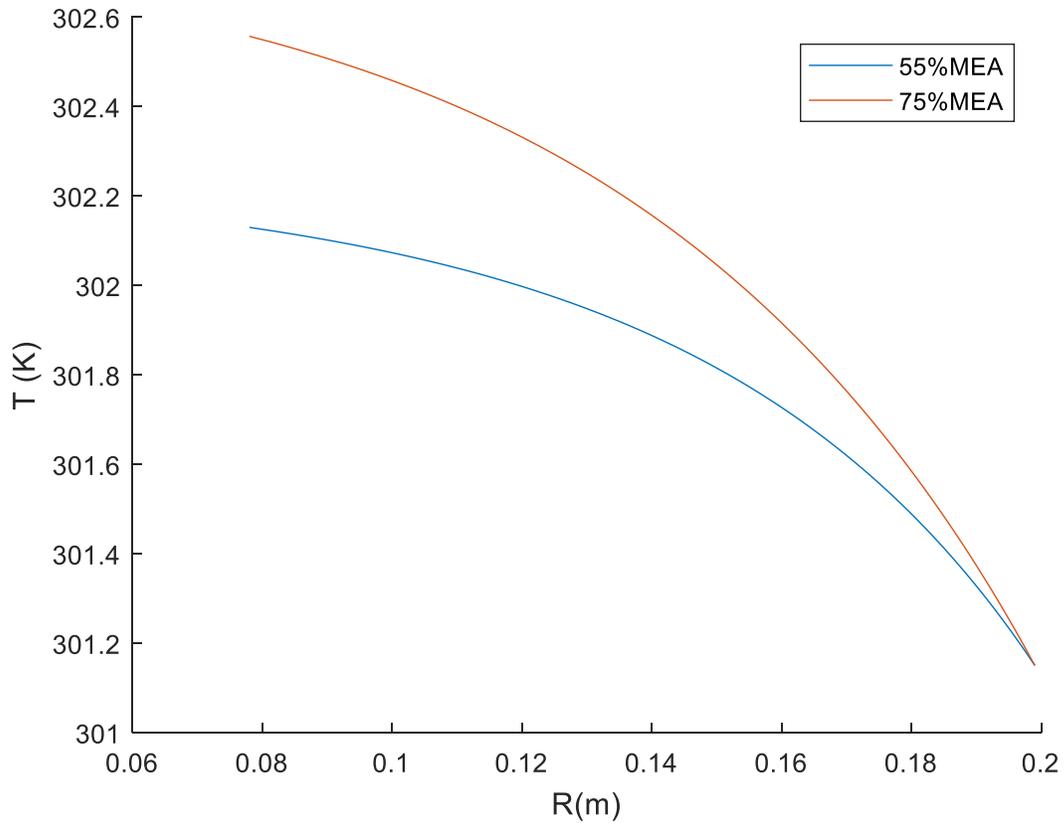
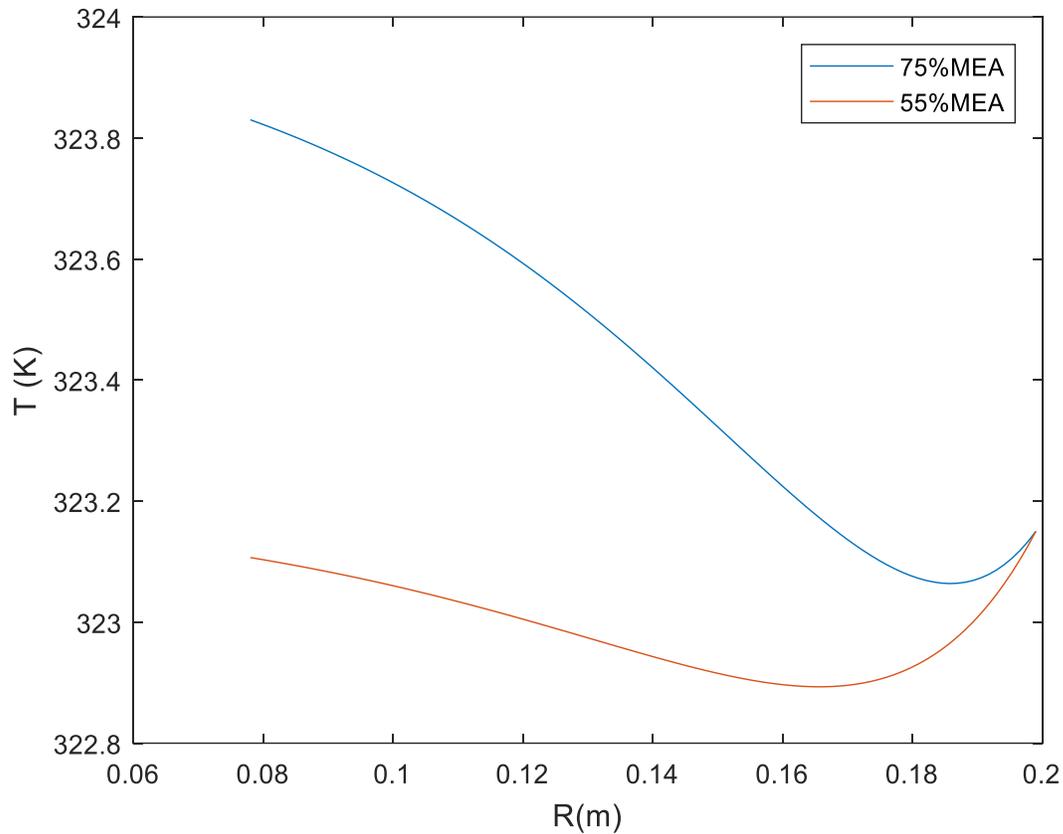


Gráfico 3-4 Perfil de Temperatura del líquido en el RPB. (28°C)



Finalmente, se presenta el comportamiento de la temperatura en el reactor rotatorio, a temperaturas de salida de 28°C y 50 °C; a las concentraciones antes ocupadas.

Gráfico 3-6 Perfil de Temperatura del líquido en el RPB. (50°C)



3.10 Simulación del modelo del reactor rotatorio como columna de desorción.

A diferencia del absorbedor, el flux de calor para el equipo de desorción se estima a partir de la siguiente ecuación.

$$q_l = h_{gl}(T_l - T_g) + \Delta H_{Des}N_{CO2} + \Delta H_{H2O}N_{H2O}$$

Donde ΔH_{Des} es el calor de desorción y se calcula a partir de la siguiente regresión, basada en la ecuación de Gibbs-Helmholtz y usada por Borhani et al. [75]. Cuyas constantes se observan en la tabla 3-7.

$$\frac{\Delta H_{Des}}{R} = A_1 \frac{\ln(\alpha_{CO_2})}{T^2} - A_2 - 2A_3 \frac{\alpha_{CO_2}^2}{T} - 2A_4 \frac{\alpha_{CO_2}}{T} - A_5 \alpha_{CO_2}$$

Tabla 3-7 Valores de las Constantes para el Cálculo del Delta de Desorción

%peso de la solución MEA-AGUA	Temperatura (°C)	A1	A2	A3	A4	A5
30%	40<T<80	0.006047	-12552	3712041	6363042	-42340
	80<T<120	-0.00693	-16103	-380551	3704515	0
45%	40<T<80	0.006919	-9806	4046219	-7661695	36214
	80<T<120	0.00873	-17790	3544895	1841414	0
60%	40<T<80	0.00728	-13546	4080073	-5113524	29182
	80<T<120	0.0618	-31177	12455987	510661	0

Las características del reactor rotatorio para la regeneración del solvente son las mismas que las del equipo de captura.

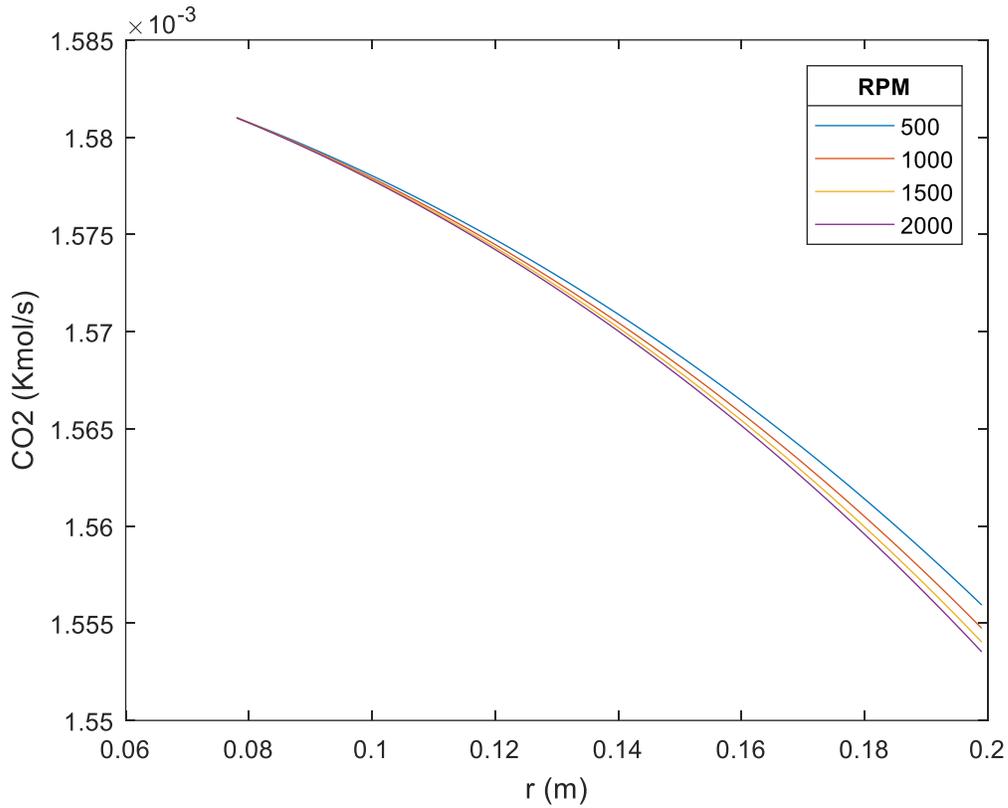
A continuación, se presentan los valores de entrada al RPB para la simulación a velocidades entre un rango de 500 a 2000 rpm.

Tabla 3-8 Condiciones de Operación del Reactor Rotatorio

Flujo		Presión	Carga de CO2	% Peso de la solución rica en CO2		
Líquido	Vapor			H2O	CO2	MEA
36.8 (l/min)	11.1 (kmol/h)	1 (atm)	0.4052	54.117	10.383	35.5

El siguiente gráfico muestra el comportamiento del flujo de CO₂ dentro del reactor rotatorio.

Gráfico 3-7 Flujo de CO₂ Líquido dentro del RPB



En la tabla 3-10 se hace una comparación de los resultados obtenidos en el modelo contra los resultados experimentales presentados por Jassim [4] y ocupados por Borhani et al. [75].

Tabla 3-9 Condiciones de Entrada al Reactor Rotatorio

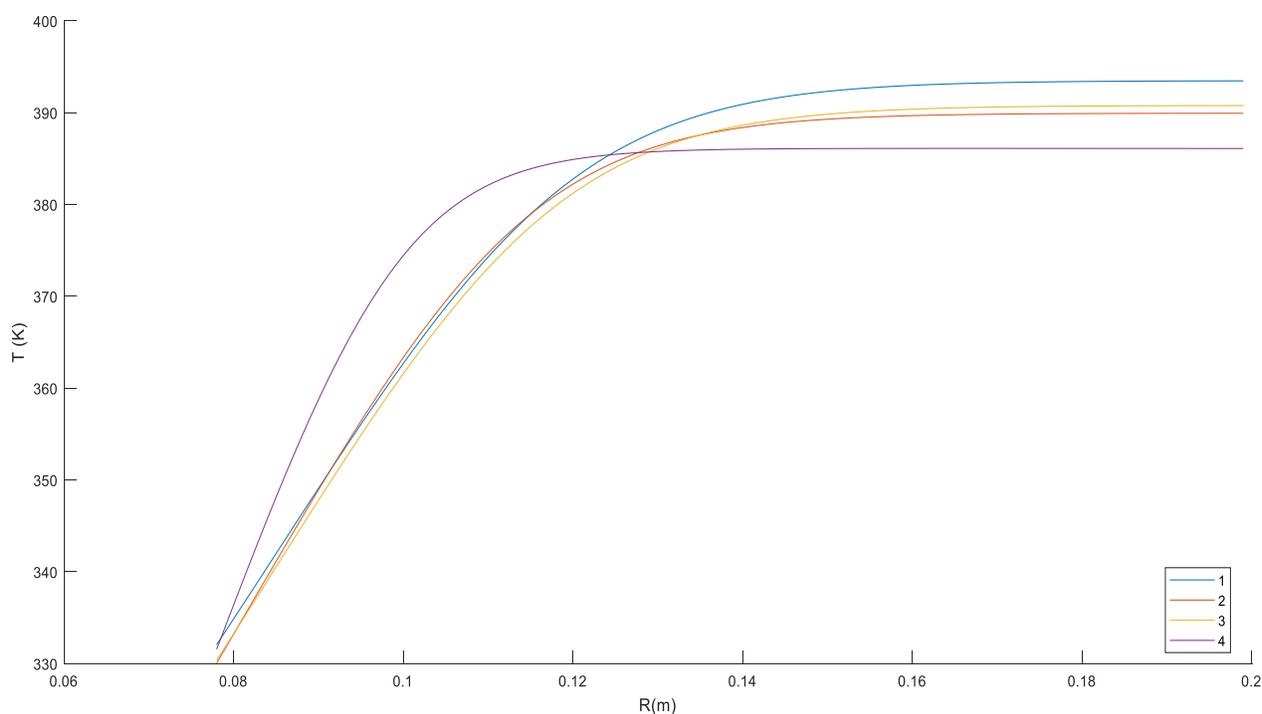
Corrida	Velocidad (RPM)	Flujo		Temperatura (°C)	Carga de CO ₂	Presión (atm)	%Peso fase líquida		
		Líquido (l/min)	Vapor (Kmol/s)				CO ₂	MEA	H ₂ O
1	800	36.8	11.1	68	0.4052	1	10.383	35.5	54.117
2	800	21.3	14.4	70	0.3456	1	7.664	30.8	61.536
3	600	30.2	13.9	58.9	0.4372	1	18.793	59.6	21.607
4	600	21.1	13.9	56.9	0.4305	1	17.409	56.1	26.491
5	1000	21.1	13.9	57.2	0.4218	1	17.458	57.4	25.142
6	1000	10.2	14.4	58.4	0.4028	1	15.105	52	32.895

Tabla 3-10 Comparación de Resultados Experimentales y del Modelo

Corrida	Carga de CO ₂ final experimental	Carga de CO ₂ final modelo.
1	0.3983	0.4047
2	0.3285	0.3445
3	0.4237	0.4291
4	0.4082	0.4238
5	0.4027	0.4163
6	0.3336	0.3984

Con los datos de la tabla anterior se graficó la temperatura de la fase líquida con respecto a la posición radial, en todos podemos observar una tendencia similar, un aumento de temperatura conforme avanza el líquido.

Gráfico 3-8 Perfiles de Temperatura Líquida dentro del RPB



Por otra parte, se presentan resultados de la parte más importante del proceso de regeneración del solvente, es decir el rehervidor, como se muestra en los gráficos siguientes se puede observar que a mayor temperatura en el rehervidor la calidad del solvente es mejor, de igual forma se puede observar que a mayor temperatura requerida la cantidad de calor que se suministra al rehervidor será mayor.

Gráfico 3-9 Regeneración del Solvente con respecto a la Temperatura en el Rehervidor

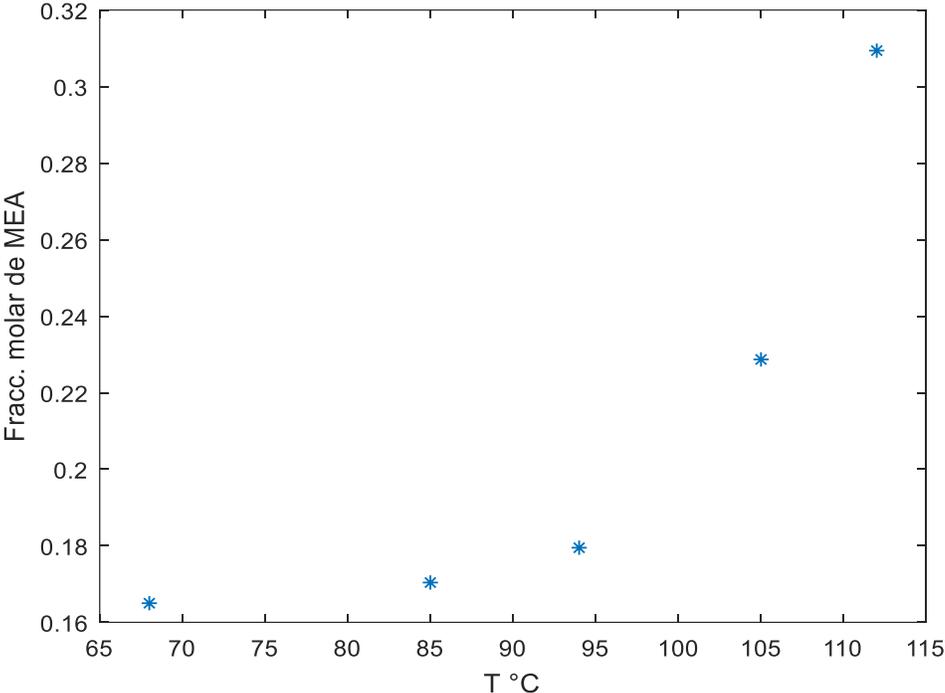
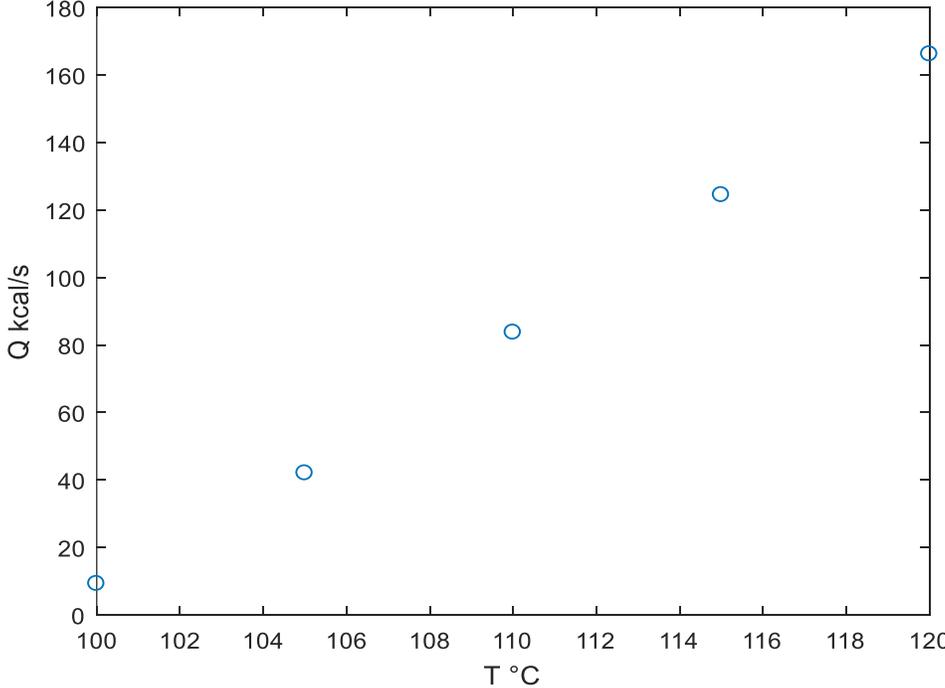


Gráfico 3-10 Calor en el Rehervidor de acuerdo a su Temperatura



4. Formulación del problema de optimización.

4.1 Función objetivo.

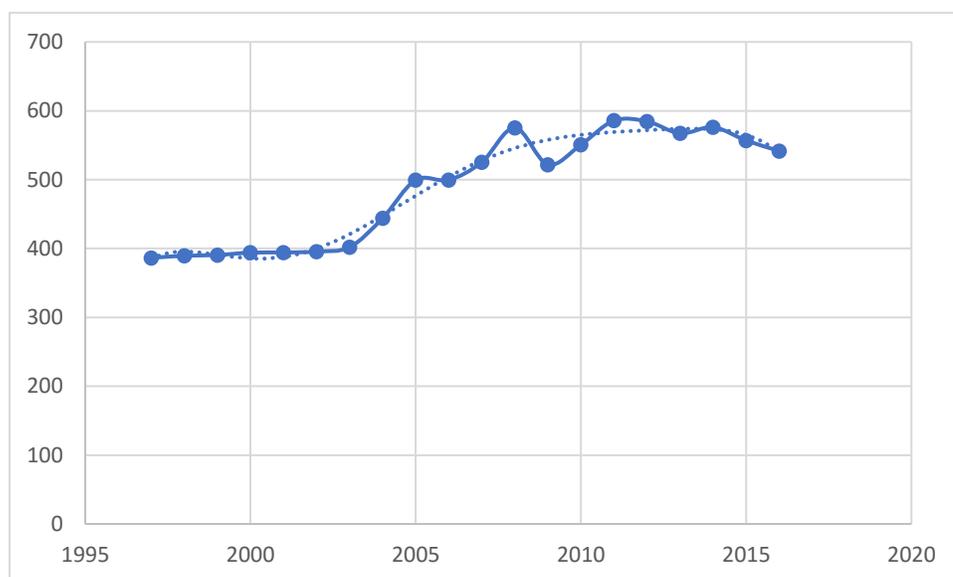
La función objetivo está en términos económicos de los principales equipos del proceso; donde el costo total de cada equipo está representado por el costo de diseño y operación. En cada equipo se utiliza el índice CEPCI (Chemical Engineering Plant Cost Index), el cual va cambiando con el tiempo.

Datos del índice CEPCI

Tabla 4-1 Índice CEPCI por año

Año	Índice
1997	386.5
1998	389.5
1999	390.6
2000	394.1
2001	394.3
2002	395.6
2003	402
2004	444.2
2005	499.6
2006	499.6
2007	525.4
2008	575.4
2009	521.9
2010	550.8
2011	585.7
2012	584.6
2013	567.3
2014	576.1
2015	556.8
2016	541.7

Gráfico 4-1 Comportamiento del Índice CEPCI por año.



Se realizó una regresión polinomial para poder predecir este índice en el año 2019, cuyo valor generado es de 572.85.

La función objetivo es la sumatoria de los costos de los reactores rotatorios y el intercambiador de calor; se representa con la siguiente ecuación:

$$C_T = C_{RPB,abs} + C_{I.C} + C_{RPB.str}$$

Donde $C_{RPB,abs}$ y $C_{RPB.str}$ son los costos de los reactores rotatorios como absorbedor y desorbedor; y $C_{I.C}$ es el costo del intercambiador de calor.

El costo de los reactores rotatorios está basado en la ecuación de costo desarrollada por Gudena et al. [77]; ésta separa el costo del rotor, el costo del empaque y el costo del motor a través de las siguientes ecuaciones presentes en la literatura.

$$C_{Rotor} = 320S_r^{0.84}$$

Donde $S_r = zD_r^{1.5}$ y D_r es el diámetro del rotor. La ecuación de abajo representa el costo del empaque.

$$C_{empaque} = 7057.5 \times \pi(R_o - R_i)z$$

El costo del motor esta dado por

$$C_{motor} = \exp(5.4866 + 0.1314(\ln(P_{motor})) + 0.053255(\ln(P_{motor}))^2 + 0.028628(\ln(P_{motor}))^3 - 0.0035549(\ln(P_{motor}))^4)$$

El consumo de energía debido al motor que usa el reactor rotatorio es estimado mediante la correlación presentada por Singh et al. (1992).

$$P_{motor} = 1.2 + 0.1833E - 7\rho_l R_o^2 \omega^2 Q_l$$

Finalmente, el costo final del RPB es el siguiente

$$C_{RPB} = (2.03C_{Rotor} + C_{empaque} + 1.45C_{motor}) \frac{572.85}{541.7} + 613.2 \times P_{motor}$$

En el caso del reactor rotatorio para la regeneración del solvente, es necesario añadir el costo del vapor que provee el calor necesario en el rehervidor, el cual es descrito con la siguiente ecuación.

$$C_{RPB.str} = C_{RPB} + 1.3515383.52E7 \left(\frac{Q}{\Delta H_{vap}} \right) C_{vap}$$

Donde el costo de vapor es de $C_{vap} = \$0.003/kg$, y el calor de vaporización del agua es de $\Delta H_{vap} = 2257 \frac{kJ}{kg}$.

El costo asociado al intercambiador de calor esta dado por la siguiente ecuación.

$$C_{I.C} = \left(1.75 + \left(\frac{A_{I.C}}{100} \right)^{0.13} \right) (\exp(11.967 - 0.8709(\ln A_{I.C}) + 0.09005(\ln A_{I.C})^2)) \frac{572.85}{541.7}$$

4.2 Restricciones.

Otra parte importante de la formulación del problema de optimización esta dado por las restricciones, el modelo anteriormente presentado describe algunas de estas restricciones; sin embargo, existen otras restricciones que se refieren a variables de diseño, estas se describen a continuación.

$$R_i > R_{i,min}$$

$$R_o > R_i$$

$$z - z_{in} > 0$$

$$\frac{z}{R_o} < 3$$

Donde $R_{i,min}$ es el radio interno mínimo, este se obtiene de la ecuación siguiente.

$$R_{i,min} = \left(\frac{Q_G}{\pi v_{jet}(1 - f_d)} \right)^{1/2} \left(\frac{\rho_g p}{\rho_l} \right)^{1/4}$$

Donde p es la razón del chorro líquido y la energía cinética del gas en la salida ($p \approx 4$), v_{jet} es la velocidad líquida de chorro ($v_{jet} = 4m/s$), y f_d es la fracción volumen del distribuidor líquido ocupado en el radio interno del RPB ($f_d = 1/3$).

La altura mínima requerida por el reactor rotatorio para prevenir su inundación es calculada de la siguiente forma.

$$z_{in} = \frac{Q_G}{2\pi R_i u_G}$$

4.2.1 Restricciones de frontera.

De igual forma existen restricciones llamadas restricciones de frontera que delimitan los valores de ciertas variables de decisión, muchas de ellas están basadas en la práctica industrial.

En este proceso, para la regeneración del solvente en el rehervidor, la degradación de la monoetanolamina ocurre a temperaturas altas. De tal forma, que la temperatura en el rehervidor debe de estar entre 383 y 393 K.

$$383 K \leq T_{Re} \leq 393 K$$

La temperatura de la amina pobre que entra al RPB como absorbedor tiene efecto directo con la cantidad de CO₂ capturado, por lo tanto, la temperatura de entrada se mantiene aproximadamente a 314 K +-1 K.

$$313 K \leq T_{pobre} \leq 315 K$$

En general, el diseño de un reactor rotatorio está bajo las siguientes restricciones.

$$0.01m \leq R_i \leq 0.3m$$

$$0.1m \leq R_o \leq 1m$$

$$0.1m \leq z \leq 1m$$

$$16 \leq \frac{F_L}{F_G} \leq 25$$

$$100rpm \leq \omega \leq 1500rpm$$

De igual forma, se generaron restricciones para obtener el porcentaje deseado de dióxido de carbono, el cual se define de la siguiente manera.

$$\varphi = 1 - \frac{\text{moles de } CO_2 \text{ gas en la salida del absorbedor}}{\text{moles de } CO_2 \text{ en el gas de escape}}$$

Y la restricción para lograr el 95% mínimo de captura es

$$0.95 - \varphi \leq 0$$

Por otro lado, el CO_2 a la salida del RPB que actúa como desorbedor es deseado a concentraciones altas, con un mínimo de 95% de pureza en el producto, cuya restricción se define de la siguiente manera.

$$0.95 - \theta \leq 0$$

5. Simulación del proceso de captura de CO₂ usando torres empacadas.

La simulación de este proceso se realizó en Aspen con las mismas variables de temperatura en el rehervidor, temperatura de la amina pobre y el mismo flujo de entrada al absorbedor de gases de escape.

Para la simulación en Aspen se ha usado el modelo termodinámico ELECNRTL, debido a la formación de iones y moléculas polares durante la absorción del dióxido de carbono, este método es utilizado cuando hay una variedad de interacciones entre iones y moléculas.

Los componentes con los cuales se hizo la simulación son CO₂, agua, MEA, N₂ y especies iónicas como OH⁻, H₃O⁺, HCO₃⁻, CO₃⁻² y MEA⁺.

5.1 Descripción de los equipos.

Los equipos a utilizar se muestran a continuación.

Tabla 5-1 Especificación de Bloques para la Captura de CO₂ en Aspen.

Equipo	Modelo de unidad de operación.
Absorbedor	Radfrac
Bomba	Pump
Intercambiador de calor	HeatX
Mezclador	Mixer
Desorbedor	Radfrac

El absorbedor es simulado por una columna Radfrac en Aspen Plus, esta no cuenta con rehervidor ni condensador, la amina es alimentada por el domo de la columna y los gases de escape por el fondo, opera a una atmósfera de presión y a un rango de temperatura de 314 a 329 K.

La bomba se usa para incrementar la presión de la amina rica, ya que esta tiene que alcanzar la parte alta de la columna de desorción, y como también existe una caída de presión en el intercambiador de calor, es necesario este incremento de presión.

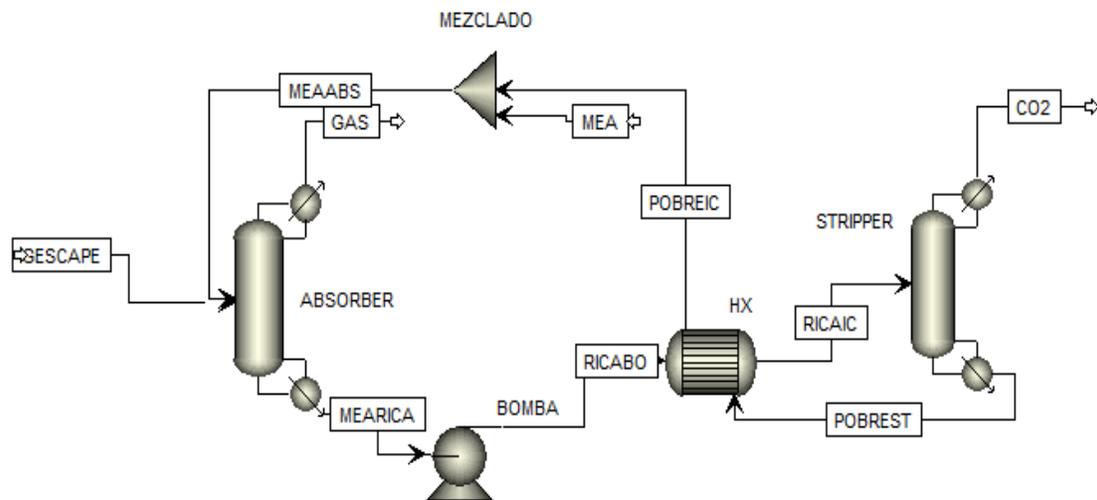
La actividad principal del intercambiador de calor es el calentamiento de la amina rica, con la solución regenerada que sale de la columna de desorción, esta a su vez será enfriada para ser recirculada en el proceso.

La columna empacada para la regeneración del solvente cuenta con rehervidor y condensador, esta ópera a 160 KPa y un rango de temperaturas entre 350 y 380 K, por su parte el rehervidor opera a la misma presión y entre temperaturas de 383 a 393 K, mientras que el condensador opera a 159 KPa de presión y temperaturas de 312 a 315 K.

Otro componente importante para la simulación es el mezclador, éste representa la cantidad de solución de MEA-H₂O necesaria para que el proceso sea continuo, ya que cierta cantidad de amina y agua se pierde en el proceso.

Es necesario, la adición de las reacciones que ocurren en el absorbedor para obtener una buena simulación; estas reacciones han sido escritas anteriormente en este trabajo, los valores de las constantes de equilibrio se obtuvieron del propio Aspen Plus.

Figura 5-1 Diagrama del Proceso de Captura de CO₂ en Aspen.



5.2 Dimensión de los equipos.

Para la simulación, al ser este un proceso ya probado, se conocen los diámetros y alturas de las columnas por lo que no tuvieron que ser calculados por la simulación. Las dimensiones de los equipos y el calor necesario se muestran en la tabla de abajo.

Tabla 5-2 Dimensión de los Equipos.

Absorbedor	
Diámetro (m)	Altura (m)
0.43	6.1
Columna de regeneración	
Diámetro (m)	Altura (m)
0.43	6.1
Intercambiador de calor	
Área (m ²)	22.47
Rehervidor	
Calor (KW)	153.6

Bajo estas condiciones se ha demostrado una captura de dióxido de carbono del 95%.

6. Resultados.

6.1 Dimensiones y condiciones de operación óptimas.

Las dimensiones óptimas de los principales equipos del proceso de captura de dióxido de carbono, así como la velocidad centrifuga de operación de cada reactor rotatorio, el calor necesario en el rehervidor y la relación molar entre el líquido y gas necesaria para la remoción del CO₂ de los gases de combustión, se presentan en la tabla 6-1.

Tabla 6-1 Dimensiones y Condiciones de Operación Óptimas del Proceso de Captura de CO₂ Intensificado.

Reactor rotatorio (absorción)	
Radio interno (m)	0.28
Radio externo (m)	0.365
Altura (m)	0.122
Velocidad (rpm)	1500
Reactor rotatorio (regeneración)	
Radio interno (m)	0.064
Radio externo (m)	0.224
Altura (m)	0.0748
Velocidad (rpm)	631
Intercambiador de calor	
Área (m ²)	9.08
Resultados operacionales	
Calor Q (KW)	605.12
Relación molar ($\frac{F_L}{F_G}$)	18.55
% de captura de CO ₂	96

6.2 Simulación del proceso óptimo intensificado.

En la gráfica siguiente se muestra el desarrollo de la captura del CO₂ dentro del reactor rotatorio, de acuerdo a las dimensiones y datos operacionales, antes presentados.

Gráfico 6-2 Fracción Molar de CO₂ en la Fase Gas Dentro del RPB de Captura

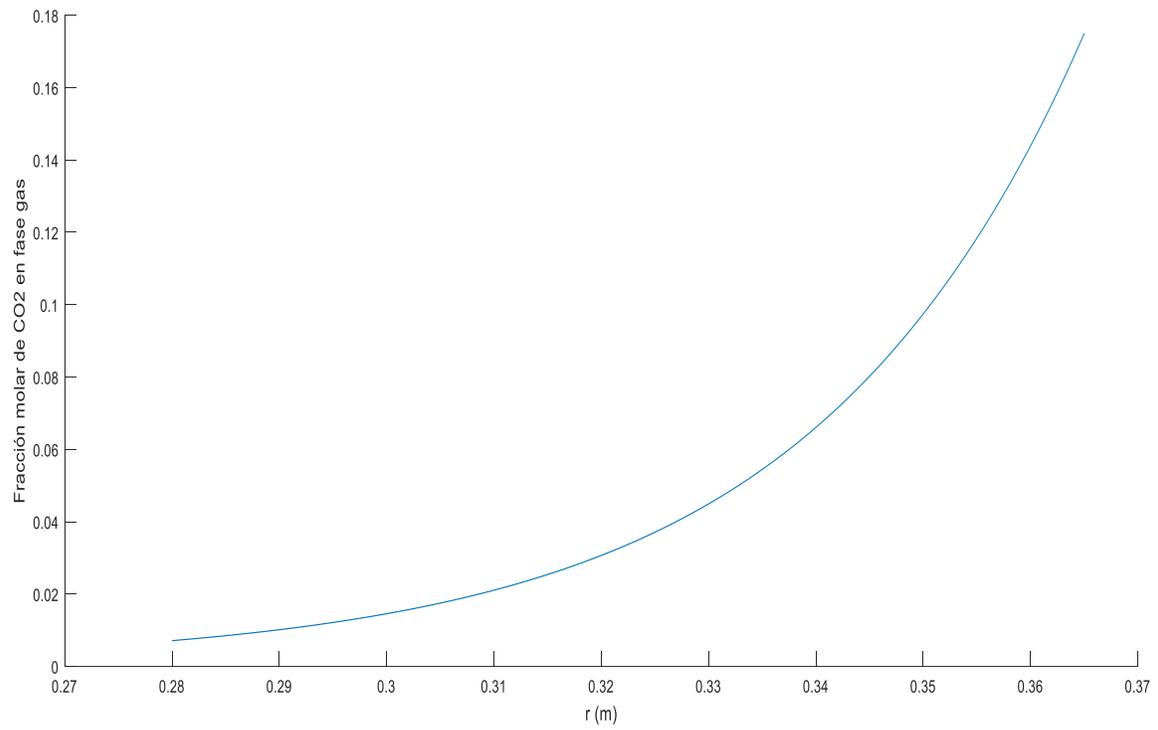
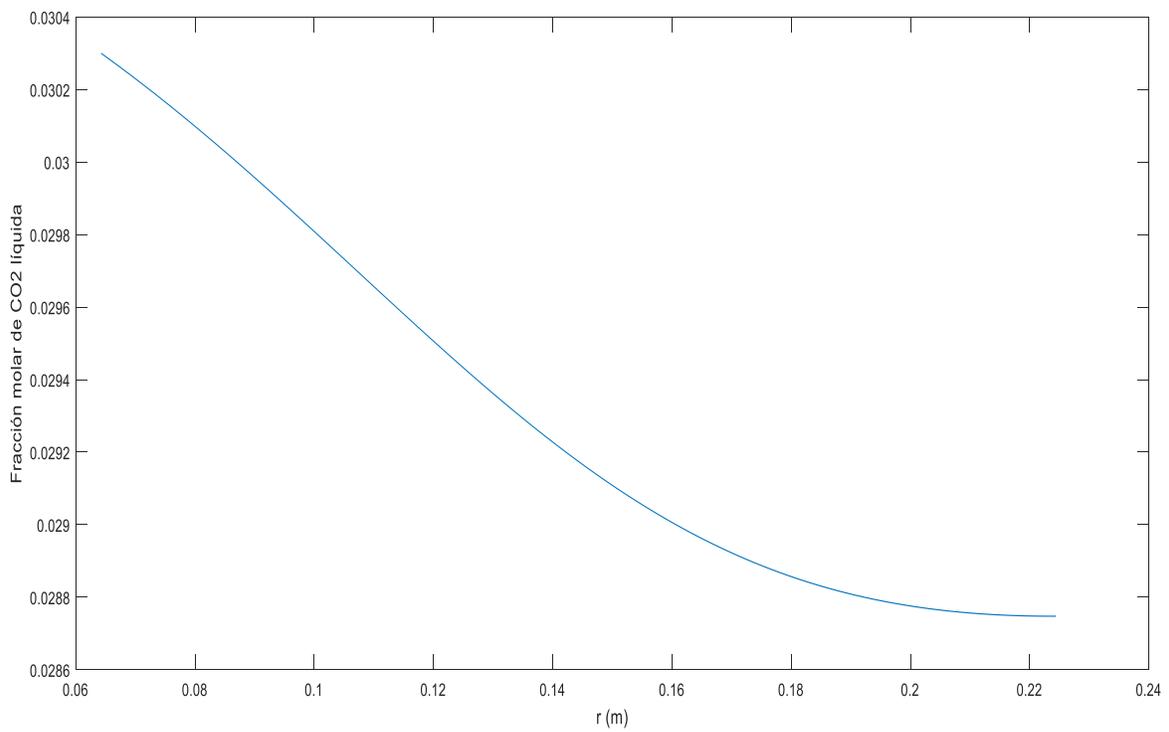
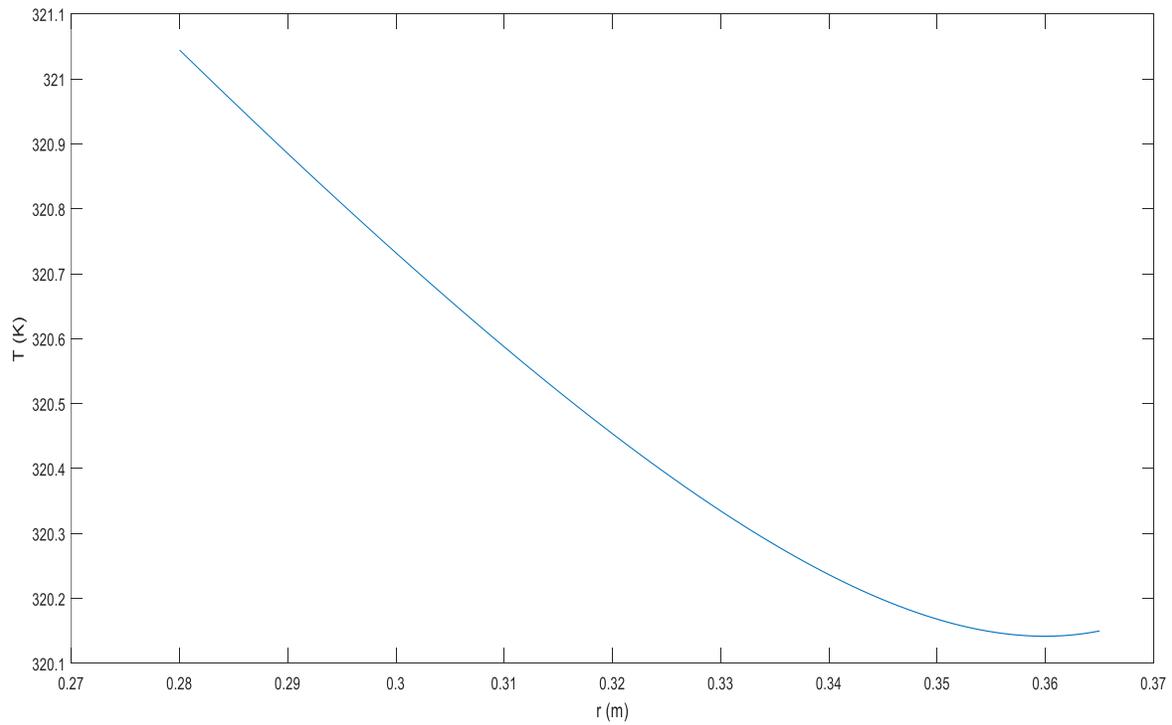


Gráfico 6-1 Fracción Molar de CO₂ Líquido en el RPB de Regeneración.



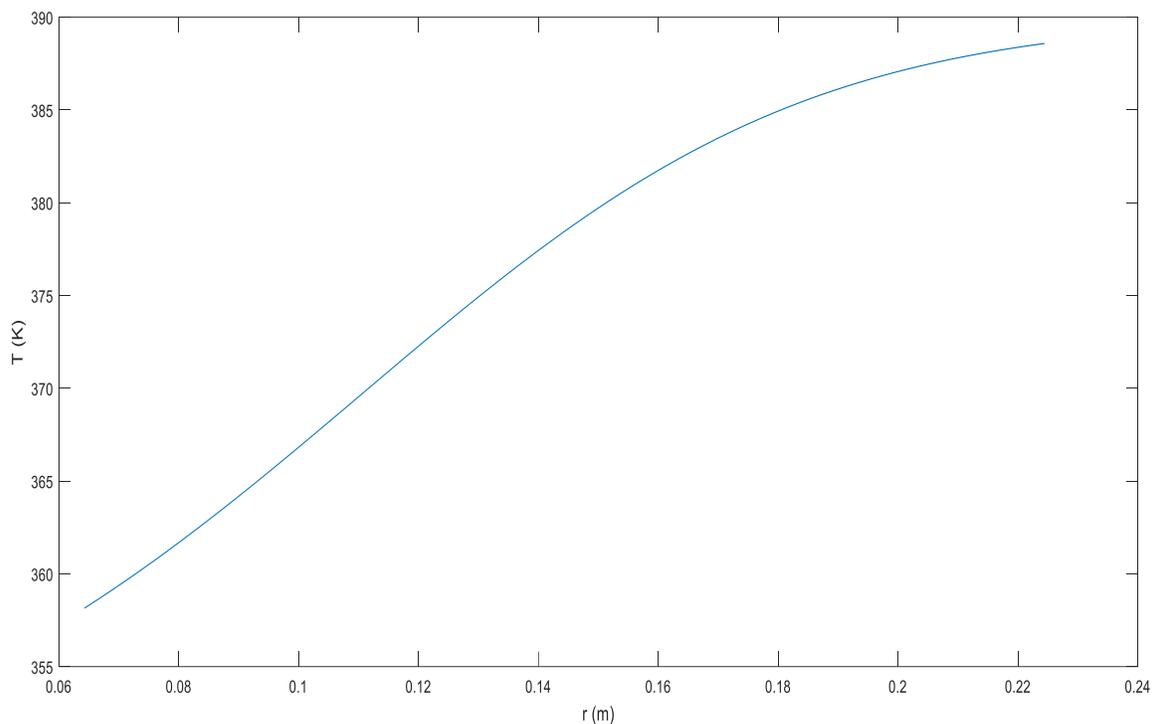
Por otra parte, esta segunda grafica muestra la fracción molar de dióxido de carbono en la fase liquida en el reactor rotatorio que se utiliza para la regeneración del solvente.

Gráfico 6-3 Perfil de Temperatura del Líquido en el RPB de Captura.



Para el diseño del intercambiador de calor, es importante conocer los valores de temperatura de salida en cada reactor, las gráficas 6-3 y 6-4 muestran el perfil de temperaturas del líquido dentro de cada RPB.

Gráfico 6-4 Perfil de Temperatura del líquido en el RPB de Regeneración.



6.3 Costos de diseño, operación y totales.

De acuerdo con nuestras variables de decisión cuyos valores óptimos fueron presentados en la tabla 6-2, se presentan los costos individuales de cada equipo; de igual manera se presentan los costos de operación y de construcción totales, además del costo total del proceso.

Tabla 6-2 Costos Individuales y Globales del Proceso de Captura de CO₂ Intensificado.

Dispositivo	Costo total (\$)	Costo de construcción (\$)	Costo de operación (\$)
RPB (absorción)	1418.79	680.7	738.09
RPB (regeneración)	12273.48	666.69	11606.79
Intercambiador de calor	9380.2	9380.2	-
	23072.47	10727.59	12344.88

6.4 Comparación entre el proceso intensificado y el proceso clásico.

Las tablas siguientes hacen una comparación entre los equipos utilizados en la intensificación del proceso de captura de dióxido de carbono y los comúnmente usados.

Tabla 6-3 Comparación1. Absorción

	RPB	Columna convencional
Diámetro (m)	$r.e=0.365$, $r.i= 0.28$	0.43
Altura (m)	0.122	6.1
Volumen (m ³)	0.0511	0.8858
Relación de flujos molares	18.55	7.98
Costo de operación (\$)	738.09	-
Costo de sección empacada (\$)	229.92	58156.6
Costo total (\$)	1418.79	58156.6

Figura 6-1 RPB de Captura de CO₂ Óptimo.

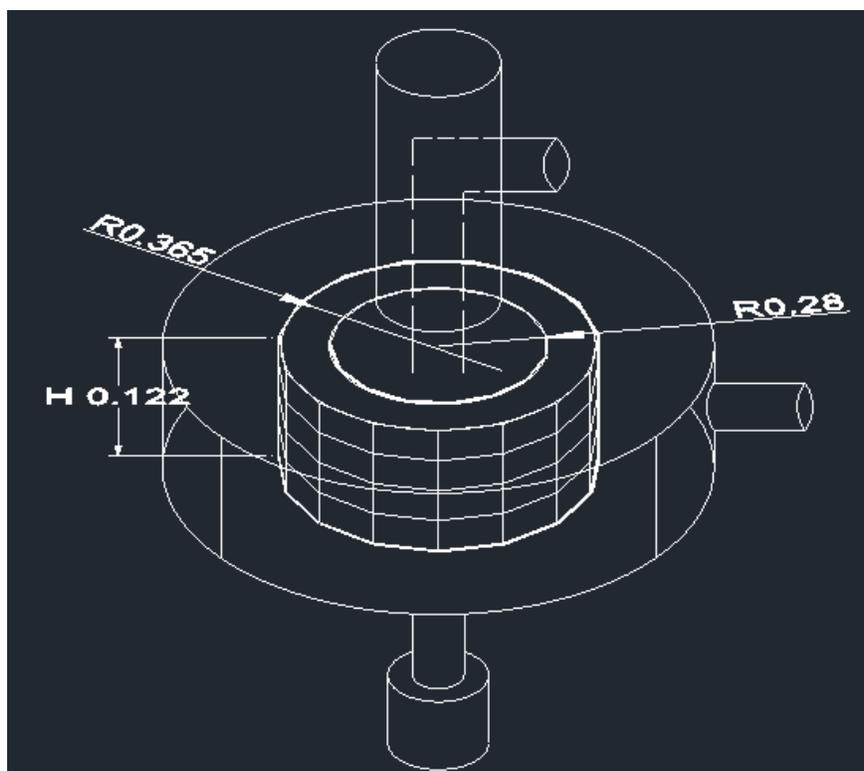


Tabla 6-4 Comparación 2. Regeneración

	RPB	Columna convencional
Diámetro (m)	$r.e=0.224, r.i=0.064$	0.43
Altura (m)	0.075	6.1
Volumen (m ³)	0.0118	0.8858
Calor en el rehervidor (KW)	605.12	153.6
Costo de operación (\$)	12344.9	2759.37
Costo de sección empacada (\$)	265.62	58156.6
Costo total (\$)	12273.48	60915.97

*El costo total de las columnas clásicas del proceso solo toma en cuenta sus costos de empaque y el costo del rehervidor.

Figura 6-2 RPB de Regeneración Óptimo.

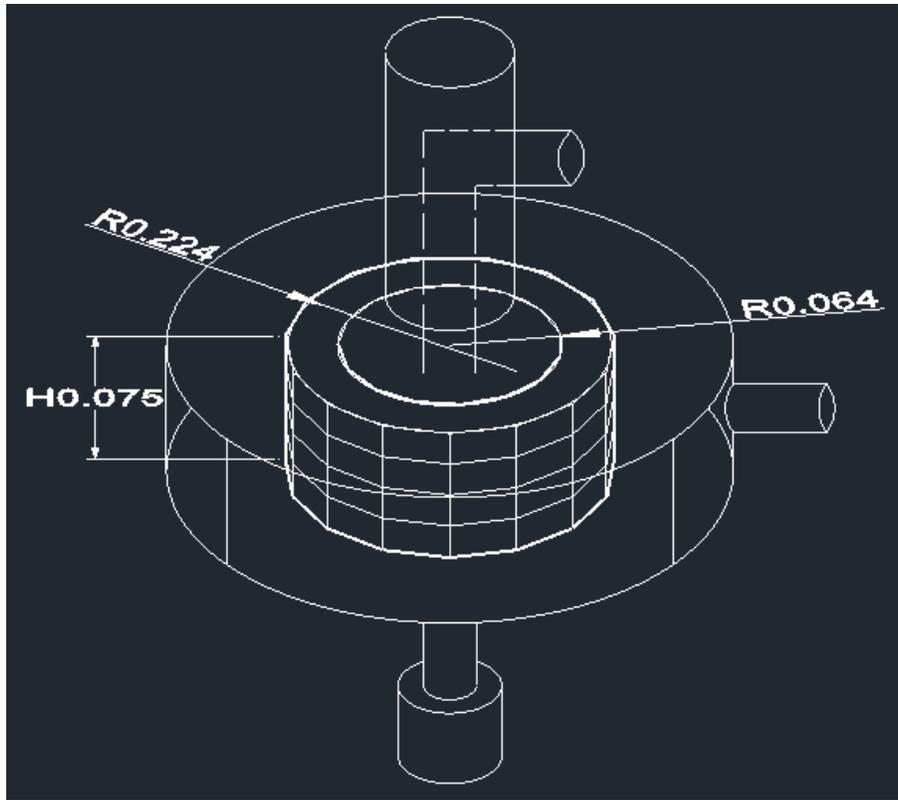


Tabla 6-5 Comparación 3. Intercambiador de Calor.

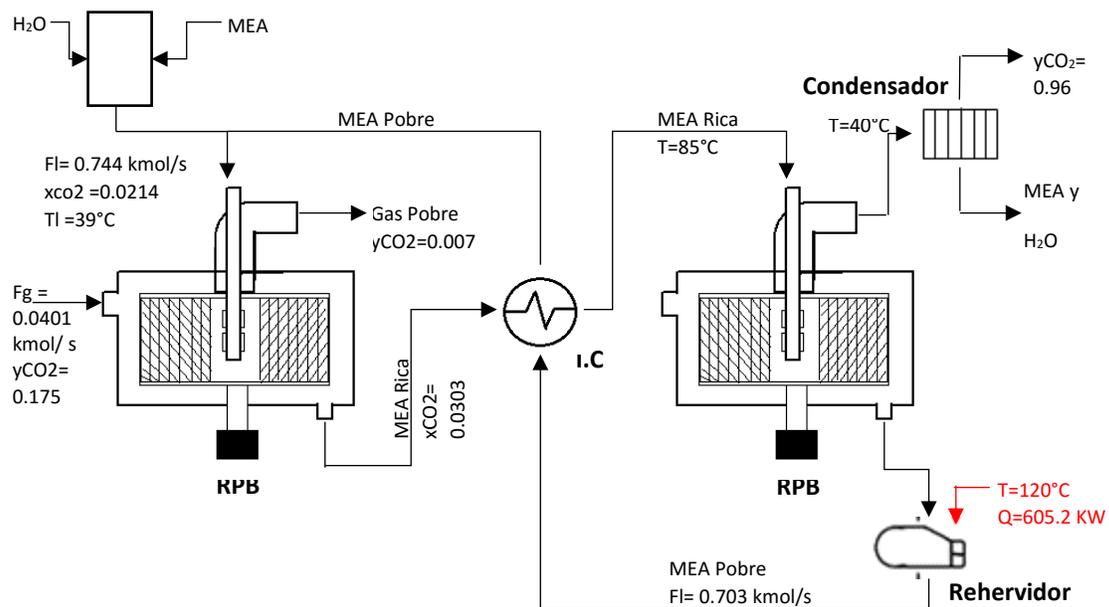
	Intensificación del proceso	Proceso clásico
Área	9.08	22.47
Costo total	9380.2	68186.8

Las diferencias económicas entre el proceso estudiado y el proceso convencional pueden ser observadas en la tabla de a continuación.

Tabla 6-6 Comparación Económica.

	Proceso intensificado	Proceso clásico
Costo de operación (\$)	12344.88	2759.37
Costo de construcción (\$)	10727.59	116313.2
Costo total (\$)	23072.57	119072.57

Figura 6-3 Diagrama de Proceso de Captura de CO₂ Intensificado.



7. Conclusiones.

En resumen, el presente trabajo da a conocer las dimensiones y condiciones de operación óptimas de un sistema de absorción desorción con reactores rotatorios para la remoción de CO₂ de un flujo de gases de combustión a través de la solución de un problema de minimización, teniendo una función objetivo de tipo económica.

Para la solución de este problema es importante primero ilustrar los fenómenos de transferencia de masa y energía que ocurren dentro de los dispositivos involucrados en el proceso. Para su simulación es necesario la correcta selección de ecuaciones para la determinación de parámetros y propiedades físicas, ya que estas juegan un papel relevante en la aproximación con los resultados reales. De acuerdo al análisis de resultados del reactor rotatorio para la absorción de este gas se puede afirmar que las variables de velocidad centrífuga, concentración del solvente en la fase líquida y temperatura tienen gran importancia en la captura del dióxido de carbono, pues a mayor velocidad o concentración o temperatura la absorción se ve favorecida; es importante notar que el perfil de temperaturas dentro del reactor rotatorio dependiendo de las condiciones de entrada, existe lo que se conoce como temperatura de bulto, ilustrada en la curva de temperatura como la temperatura mínima dentro del equipo, este fenómeno ocurre porque el calor de reacción y el calor de vaporización del agua son iguales. Por otra parte, el análisis de los resultados de la simulación del reactor rotatorio que regenera el solvente muestra que a velocidades angulares más altas, mayor será la desorción del dióxido de carbono. A partir de estos resultados también se deduce que la parte más importante de la regeneración del solvente es el rehervidor y que, cuanto mayor temperatura de operación exista en este, mayor será el porcentaje de regeneración; pero de igual forma el flujo energético se incrementará. Sin embargo, el comportamiento de la temperatura dentro del RPB resulta ser similar sin importar los cambios en las variables de entrada.

En relación a los resultados, se puede concluir que el uso de estos dispositivos son una solución al problema de control industrial de contaminación por dióxido de carbono.

A partir de los modelos de cada equipo, se realizó la optimización del proceso usando éstos como principales restricciones del problema. Asimismo, en base a literatura se formularon restricciones de tipo frontera, las cuales se pueden ver en el capítulo 4, y de esta forma obtener las soluciones reales; los resultados se obtuvieron a través de la aplicación optimtool de Matlab. El análisis de estos resultados muestra que las principales contribuciones económicas se deben a los costos de operación, debido al gasto energético por el uso del motor y el calor en el rehervidor; sin embargo, los costos de diseño son bastante pequeños.

Los costos por equipo se analizaron, encontrando que en los dos reactores rotatorios los costos de operación son mayores que los de construcción; en el RPB encargado de la captura de CO₂ el costo mayor se debe a la energía que consume el motor, mientras que en el RPB regenerador del solvente su mayor contribución económica se debe al uso del vapor de agua para la desorción del dióxido de carbono. Por otro lado, la comparación de estos equipos de hipergravedad contra las torres clásicas usadas para este proceso se puede ver una disminución significativa de dimensiones, siendo para los RPB de captura y regeneración de 17.33 y 75.07 veces menores en volumen respectivamente a comparación de las columnas convencionales, esto a su vez se traduce en un menor costo de construcción ahorrando más de \$55,000; no obstante los costos de operación de los reactores rotatorios son más elevados que los de las torres comunes, debido a primeramente al uso del motor y segundo el calor necesario para la regeneración del solvente es mayor y por lo tanto, el flujo de vapor será mayor. Este incremento de calor se ve afectado principalmente a que el flujo de líquido para la remoción de CO₂ en estos equipos es mucho mayor que el flujo en las torres clásicas, en nuestro caso de estudio el calor es casi 4 veces mayor que el del proceso tradicional. El uso de estos dispositivos de hipergravedad tienen efecto también en el tamaño de nuestro intercambiador de calor, puesto que su área es menor casi 2.5 veces.

Este trabajo demuestra que los costos totales de un proceso de captura de dióxido de carbono con un sistema de reactores rotatorios con dimensiones y variables de operación óptimas son reducidos significativamente, siendo este proceso una opción más viable para el tratamiento del problema de contaminación por CO₂.

Nomenclatura

A_c	Área lateral del RPB $2\pi r z$ (m ²)		
$A_{I,C}$	Área del Intercambiador de calor (m ²)		
a_{gl}	Área interfacial gas-líquido (m ² /m ³)		
a_p	Área superficial total del empaque (m ² /m ³)		
a_w	Área superficial húmeda del empaque (m ² /m ³)		
C_{l,CO_2}	Concentración líquida del CO ₂ (kmol/m ³)		
$Cp_{g,i}$	Capacidad calorífica del componente i fase gas (J/kmol K)		
Cp_g	Capacidad calorífica del Gas (J/kmol K)		
$Cp_{l,i}$	Capacidad calorífica del componente i fase líquida (J/kmol K)		
Cp_l	Capacidad calorífica del líquido (J/kmol K)		
$C_{Empaque}$	Costo del empaque (\$)		
$C_{I,C}$	Costo del intercambiador de calor (\$)		
C_{Motor}	Costo del motor (\$)		
C_{Rotor}	Costo del rotor (\$)		
$C_{RPB,abs}$	Costo del RPB absorbedor (\$)		
$C_{RPB,str}$	Costo del RPB desorbedor (\$)		
C_T	Costo total (\$)		
C_{vap}	Costo del vapor (\$)		
dp	Diámetro efectivo del empaque (m)		
$D_{g,prom}$	Difusividad gas promedio (m ² /s)		
$D_{g,i}$	Difusividad del componente i en fase gas (m ² /s)		
$D_{g,i-j}$	Difusividad gas del componente i en el componente j (m ² /s)		
$D_{l,i}$	Difusividad del componente i en fase líquida (m ² /s)		
$D_{l,i-j}$	Difusividad líquida del componente i en el componente j (m ² /s)		
D_R	Diámetro del rotor (m)		
E_i	Factor de intensificación		
F	Flujo molar del líquido a la entrada del		
			rehervidor (kmol/s)
F_g	Flujo molar gaseoso dentro del RPB (kmol/s)		
F_l	Flujo molar líquido dentro del RPB (kmol/s)		
f_d	Fracción volumen del distribuidor líquido.		
g_c	Aceleración centrífuga $r\omega^2$ (m/s ²)		
g_o	Aceleración característica (m/s ²)		
h_{gl}	Coefficiente de transferencia de calor (W/m ² K)		
$He_{l,i}$	Constante de Henry del componente i (kPa m ³ /kmol)		
H_F	Entalpía líquida entrante al rehervidor (KJ/Kmol)		
H_L	Entalpía líquida saliente al rehervidor (KJ/Kmol)		
H_v	Entalpía vapor entrante al rehervidor (KJ/Kmol)		
$K_{eq,i}$	Constante de equilibrio líquido vapor		
$k_{g,prom}$	Coefficiente de transferencia de masa promedio gaseoso (m/s)		
$k_{g,i}$	Coefficiente de transferencia de masa gas del componente i (m/s)		
$K_{o,i}$	Coefficiente global de transferencia de masa gaseoso (kmol/m ² kPa s)		
$k_{l,i}$	Coefficiente de transferencia de masa líquido del componente i (m/s)		
k_{H_2O}	Constante de velocidad de reacción del agua (m ⁶ /kmol ² s)		
k_{MEA}	Constante de velocidad de reacción del MEA (m ⁶ /kmol ² s)		
k_{obs}	Constante de velocidad de reacción aparente (1/s)		
k_n	Constantes de equilibrio químico		
L	Flujo molar líquido saliente del rehervidor (kmol/s)		
M_i	Flujo másico del componente i (Kg/s)		
MW_i	Peso molecular del componente i (kg/kmol)		
MW_{prom}	Peso molecular promedio (kg/kmol)		

N_i	Flux molar del componente i (kmol/m ² s)
p	Razón de chorro líquido y energía cinética del gas
P	Presión (kPa)
P_i	Presión del componente i (kPa)
P_i^*	Presión parcial de equilibrio del componente i (kPa)
P_i^{sat}	Presión de saturación del componente i (kPa)
P_{motor}	Potencia del motor (kW)
Q	Calor (kW)
Q_g	Caudal de la fase gas (m ³ /s)
Q_l	Caudal de la fase líquida (m ³ /s)
q_g	Flux de calor fase gas (W/m ²)
q_l	Flux de calor fase gas (W/m ²)
r_{CO_2}	Velocidad de reacción del CO ₂ (kmol/m ³ s)
r	Radio (m)
R_i	Radio interno (m)
$R_{i,min}$	Radio mínimo interno (m)
R_o	Radio externo (m)
T_g	Temperatura fase gas (K)
$T_{g,o}$	Temperatura inicial fase gas (K)
T_l	Temperatura fase líquida (K)
$T_{l,o}$	Temperatura inicial fase líquida (K)
T_{pobre}	Temperatura de amina pobre (K)
T_{Reb}	Temperatura del rehervidor (K)
u_g	Velocidad superficial fase gas (m/s)
u_l	Velocidad superficial líquida (m/s)
$u_{l,o}$	Velocidad superficial característica (m/s)
V	Flujo molar del vapor saliente del rehervidor (kmol/s)
$V_{m,i}$	Volumen molar del componente i (m ³ /kmol)
V_m^*	Volumen molar asociado con la interacción entre el H ₂ O y MEA
x_i	Fracción molar líquida del componente i
$x_{o,i}$	Fracción molar líquida inicial del componente i
y_i	Fracción molar gaseosa del componente i
$y_{o,i}$	Fracción molar gaseosa inicial del componente i
Z_i	Fracción molar del componente i a la

	entrada del rehervidor
Z	Altura del RPB (m)
Z_{in}	Altura de inundación del RPB (m)
Símbolos griegos	
α_{CO_2}	Carga de CO ₂ (mol CO ₂ /mol MEA)
α_{i-j}	Parámetro de interacción binaria entre los componentes i y j
γ_i	Coefficiente de actividad del componente i
ε	Porosidad del empaque (m ² /m ³)
ε_l	Estancamiento del líquido
σ_c	Tensión superficial crítica (N/m)
σ	Tensión superficial (N/m)
ϑ_i	Difusión volumétrica del componente i
ρ_g	Densidad del gas (kg/m ³)
$\rho_{g,i}$	Densidad del componente i fase gas (kg/m ³)
ρ_l	Densidad del líquido (kg/m ³)
$\rho_{l,i}$	Densidad líquida del componente i (kg/m ³)
λ_g	Conductividad térmica gaseosa (W/m K)
μ_g	Viscosidad gaseosa (Pa s)
$\mu_{g,i}$	Viscosidad del componente i fase gas (Pa s)
μ_l	Viscosidad líquida (Pa s)
$\mu_{l,i}$	Viscosidad líquida del componente i (Pa s)
ν_g	Viscosidad cinemática gaseosa (m ² /s)
ν_l	Viscosidad cinemática líquida (m ² /s)
$\nu_{l,o}$	Viscosidad cinemática líquida característica (m ² /s)
ν_{jet}	Velocidad líquida de chorro (m/s)
φ_i	Fracción volumen del componente i en la fase líquida
φ	Fracción de CO ₂ capturada
θ	Fracción de CO ₂ en el producto
ω	Velocidad angular (rad/s)
ΔH_{CO_2}	Calor de absorción del CO ₂ (J/kmol)
ΔH_{H_2O}	Calor de vaporización del agua (J/kmol)
ΔH_{Des}	Calor de desorción del CO ₂ (J/kmol)

Números adimensionales

Fr_l	Número de Freud líquido $(u_l^2 a_p / g_c)$
Gr_l	Número de Grashof líquido $\left(\frac{d_p^3 g_c}{\nu_g}\right)$
Re_g	Número de Reynolds gas $\left(\frac{u_g \rho_g}{a_p \mu_g}\right)$
Re_l	Número de Reynolds líquido $\left(\frac{u_l \rho_l}{a_p \mu_l}\right)$
$Sc_{g,i}$	Número de Schmidt del componente i fase gas $\left(\frac{\mu_{g,i}}{\rho_{g,i} D_{g,i}}\right)$
$Sc_{l,i}$	Número de Schmidt del componente i fase líquida $\left(\frac{\mu_{l,i}}{\rho_{l,i} D_{l,i}}\right)$
We_l	Número de Webber $\left(\frac{u_l^2 \rho_l}{a_p \sigma}\right)$

Bibliografías.

1. Zhang, Y., Chen, H., Chen, C., Plaza, J., Dugas, R., Rochelle, G, "Rate-Based Process Modeling Study of CO₂ Capture with Aqueous Monoethanolamine", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol.48, No.20, p.9233-9246, 2009.
2. Pachauri, R., Meyer, L, Contribution of Working Groups I, II and III to the fifth Assesment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, *IPCC*, p.151, 2014.
3. Zhao, B., Su, Y., Tao, W, "Mass transfer performance of CO₂ capture in rotating packed bed: Dimensionless modeling and intelligent prediction", *Applied Energy Research*, Vol.136, p.132-142, 2014.
4. Jassim, M., "Process Intensification: Absorption and Desorption of Carbon Dioxide from Monoethanolamine Solutions Using Higee Technology", *Ph. D. Thesis. University of Newcastle upon Tyne*, 2002.
5. Zhao, B., Tao, W., Zhong, M., Su, Y., & Cui, G, "Process, performance and modeling of CO₂ capture by chemical absorption using high gravity: A review", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol.65, p.44-56, 2016.
6. Lin, C., Chen, B, "Carbon dioxide absorption in a cross-flow rotating packed bed". *Chemical Engineering Research and Design*, Vol.89, No.9, p.1722-1729, 2011.
7. Borhani, Tohid N., Eni Oko, and Meihong Wang. "Process Modelling and Analysis of Intensified CO₂ Capture using Monoethanolamine (MEA) in Rotating Packed Bed Absorber." *Journal of Cleaner Production*, Vol. 204, p. 1124-1142, 2018.
8. Kumar, M. P., and D. P. Rao, "Studies on a High-Gravity Gas-Liquid Contactor." *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol.29, No.5, p.917-920, 1990.
9. Cheng, H., Tan, C, "Carbon dioxide capture by blended alkanolamines in rotating packed bed", *Energy Procedia*, Vol.1, No.1, p.925-932, 2009.

10. Yu, C., Cheng, H., Tan, C, “CO₂ capture by alkanolamine solutions containing diethylenetriamine and piperazine in a rotating packed bed”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.9, p.136-147, 2012.
11. Zhang, L., Wang. J., Xiang. Y., Zeng, X., Chen, J, “Absorption of Carbon Dioxide with Ionic Liquid in a Rotating Packed Bed Contactor: Mass Transfer Study”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol.50, No.11, p.6957-6964, 2011.
12. Lin, C., & Kuo, Y, “Mass transfer performance of rotating packed beds with blade packings in absorption of CO₂ into MEA solution”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.97, p.712-718, 2016.
13. Meeuwse, M., van der Schaaf, J., Kuster, B. F. M., & Schouten, J. C, “Gas–liquid mass transfer in a rotor–stator spinning disc reactor”, *Chemical Engineering Science*, Vol.65, No.1, p.466-471, 2010.
14. Youzhi Liu Deyin Gu Chengcheng Xu Guisheng Qi Weizhou Jiao, “Mass transfer characteristics in a rotating packed bed with split packing”.*Chinese Journal of Chemical Engineering*, Vol.23, No.5, p.868-872, 2015.
15. Wang, G. Q., Xu, Z. C., Yu, Y. L., & Ji, J. B, “Performance of a rotating zigzag bed—A new HIGEE”, *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, Vol.47, No.12, p.2131-2139, 2008.
16. Joel, A. S., Wang, M., Ramshaw, C., & Oko, E, “Process analysis of intensified absorber for post-combustion CO₂ capture through modelling and simulation”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.21, p.91-100, 2014.
17. Thiels, M., Wong, D., Yu, C., Kang, J., Jang, S., Tan, C, “Modelling and design of carbon dioxide absorption in rotating packed bed and packed column”, *IFAC-PapersOnLine*, Vol.49, No.7, p.895-900, 2016.
18. Kang, J., Sun, K., Wong, D., Jang, S., Tan, C, “Modeling studies on absorption of CO₂ by monoethanolamine in rotating packed bed”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.25, p.141-150, 2014.
19. Yi, Fei, et al. "Modeling and Experimental Studies on Absorption of CO₂ by Benfield Solution in Rotating Packed Bed." *Chemical Engineering Journal*, vol. 145, no. 3, 2009, pp. 377-384.
20. IEA, “CO₂ Emissions from fuel combustion 2015”, OECD, Paris, 2015. <http://dx.doi.org/10.1787/CO2-fuel-2015-en> .
21. EPA, “Global Greenhouse Emissions Data: Global Emissions by Economic Sector”, *United States Environmental Protection Agency*, 2019. <http://epa.gov> .
22. EPA, “Global Greenhouse Emissions Data: Global Emissions by Country”, *United States Environmental Protection Agency*, 2019. <http://epa.gov> .
23. Boden, T.A., Marland, G., Andres, R.L., “National CO₂ Emissions From Fossil Fuel Burning, Cement Manufacture and Gas Flaring”, *Carbon Dioxide Information Analysis Center Oak Ridge National Laboratory, U.S. Department of Energy*, p. 1751-2014, 2017.
24. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC), “Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero (INEGYCEI)”, *INECC*, 2018.

25. Song, C., Liu, Q., Deng, S., Li, H., Kitamura, Y, "Cryogenic-based CO₂ capture technologies: State-of-the-art developments and current challenges". *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol.101, p.265-278, 2019.
26. Mondal, Monoj, K., Hemant, K., Balsora, Prachi, V, "Progress and Trends in CO₂ capture/separation Technologies: A Review." *Energy*, vol. 46, no. 1, p. 431-441, 2012.
27. Fout, T., Plasynski, S., Srivastava, R., Figueroa, J., McIlvried, H, "Advances in CO₂ Capture Technology - the U.S. Department of Energy's Carbon Sequestration Program", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 2, No. 1, p. 9-20. 2008.
28. Gibbins, J., Hannah, C, "Carbon Capture and Storage." *Energy Policy*, vol. 36, no. 12, p. 4317-4322, 2008.
29. Blomen, E., Hendriks, C., Neele, F, "Capture technologies: improvements and promising developments", *Energy procedia*, Vol. 1, No 1, p. 1505-1512, 2009.
30. Stanger, Rohan., Wall, T., Spörl, R., et.al, "Oxyfuel combustion for CO₂ capture in power plants", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 40, p. 55-125, 2015.
31. Nakao, S., Yogo, K., Goto, K., Kai, T., Yamada, H, "Advanced CO₂ Capture Technologies Absorption, Adsorption and Membrane Separation", Suiza: Springer, 2019, (ISBN 978-3-030-18857-3).
32. Thiruvengkatachari, R., Su, S., An, H., Yu, X. X, "Post combustion CO₂ capture by carbon fibre monolithic adsorbents", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol.35, No.5, p.438-455, 2009.
33. Meisen, A., & Shuai, X, "Research and development issues in CO₂ capture", *Energy Conversion and Management*, Vol.38, p.S37-S42. 1997.
34. Brunetti, A., Scura, F., Barbieri, G., Drioli, E, "Membrane technologies for CO₂ separation", *Journal of Membrane Science*, Vol.359, No.1-2, p.115-125. 2010.
35. Wong, S., & Bioletti, R, "Carbon dioxide separation technologies", *Alberta Research Council*. 2002.
36. Wang, M., Wang, Z., Zhao, S., Wang, J., Wang, S, "Recent advances on mixed matrix membranes for CO₂ separation", *Chinese journal of chemical engineering*, Vol. 25, No.11, p.1581-1597. 2017.
37. Tuinier, M. J., Hamers, H. P., van Sint Annaland, M, "Techno-economic evaluation of cryogenic CO₂ capture—A comparison with absorption and membrane technology", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.5, No.6, p.1559-1565. 2011.
38. Gupta, M., Coyle, I., Thambimuthu, K. "Strawman document for CO₂ capture and storage technology roadmap". 2003.
39. Adanez, J., Abad, A., Garcia-Labiano, F., Gayan, P., Luis, F, "Progress in chemical-looping combustion and reforming technologies", *Progress in energy and combustion science*, Vol.38, No.2, p.215-282, 2012.
40. Nandy, A., Loha, C., Gu, S., Sarkar, P., Karmakar, M. K., Chatterjee, P. K, "Present status and overview of Chemical Looping Combustion technology", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol.59, p.597-619. 2016.
41. Song, C., Kansha, Y., Ishizuka, M., Fu, Q., Tsutsumi, A, "Conceptual design of a novel pressure swing CO₂ adsorption process based on self-heat recuperation technology", *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, Vol.94, p.20-28, 2015.

42. Ramasubramanian, K., Zhao, Y., Winston Ho, W. S., "CO₂ capture and H₂ purification: Prospects for CO₂-selective membrane processes", *AIChE Journal*, Vol.59, No.4, p.1033-1045, 2013.
43. Baxter, L., Baxter, A., Burt, S., "Cryogenic CO₂ capture as a cost-effective CO₂ capture process", In *International Pittsburgh Coal Conference*. 2009.
44. Song, C., Liu, Q., Qi, Y., Chen, G., Song, Y., Kansha, Y., Kitamura, Y., "Absorption-microalgae hybrid CO₂ capture and biotransformation strategy—A review" *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.88, p.109-117, 2019.
45. Razzak, S. A., Ali, S. A. M., Hossain, M. M., deLasa, H. "Biological CO₂ fixation with production of microalgae in wastewater—a review", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol.76, p.379-390 2017.
46. Dutcher, B., Fan, M., Russell, A. G., "Amine-based CO₂ capture technology development from the beginning of 2013. A Review.", *ACS applied materials & interfaces*, Vol.7, No.4, p.2137-2148 2015.
47. White, C. M., Strazisar, B. R., Granite, E. J., Hoffman, J. S., Pennline, H. W., "Separation and capture of CO₂ from large stationary sources and sequestration in geological formations—coalbeds and deep saline aquifers", *Journal of the Air & Waste Management Association*, Vol.53, No.6, p.645-715. 2003.
48. Rao, A. B., Rubin, E. S., "A technical, economic, and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plant greenhouse gas control", *Environmental science & technology*, Vol.36, No.20, p.4467-4475. 2002.
49. Bahakim, S. S., Ricardez-Sandoval, L. A., "Optimal design of a postcombustion CO₂ capture pilot-scale plant under process uncertainty: a ranking-based approach", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol.54, No.15, p.3879-3892, 2015.
50. Baldea, M., "From process integration to process intensification", *Computers & Chemical Engineering*, Vol.81, p.104-114, 2015.
51. Keil, F. J., "Process intensification", *Reviews in Chemical Engineering*, Vol.34, No.2, p.135-200. 2018.
52. Zhao, H., Shao, L., Chen, J. F., "High-gravity process intensification technology and application", *Chemical Engineering Journal*, Vol.156, No.3, p.588-593. 2010.
53. Jassim, M. S., Rochelle, G., Eimer, D., Ramshaw, C., "Carbon dioxide absorption and desorption in aqueous monoethanolamine solutions in a rotating packed bed", *Industrial & engineering chemistry research*, Vol.46, No.9, p.2823-2833, 2007.
54. Kang, J. L., Wong, D. S. H., Jang, S. S., Tan, C. S. "A comparison between packed beds and rotating packed beds for CO₂ capture using monoethanolamine and dilute aqueous ammonia solutions", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.46, p.228-239, 2016.
55. Qifei, C. H. D. X. J., "AN EXPERIMENTAL RESEARCH ON GAS PHASE PRESSURE DROP DYNAMICS FOR ROTATING BED USING WAVE DISK PLATE", *JOURNAL OF SOUTH CHINA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY (NATURAL SCIENCE)*, Vol.3. 1999.
56. Guo, F., Zheng, C., Guo, K., Feng, Y., Gardner, N. C., "Hydrodynamics and mass transfer in cross-flow rotating packed bed". *Chemical Engineering Science*, Vol.52, p.3853-3860, 1997.

57. Llano-Restrepo, M., Araujo-Lopez, E, “Modeling and simulation of packed-bed absorbers for post-combustion capture of carbon dioxide by reactive absorption in aqueous monoethanolamine solutions”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.42, p.258-287, 2015.
58. Matin, N. S., Remias, J. E., Neathery, J. K., & Liu, K, “Facile method for determination of amine speciation in CO₂ capture solutions”, *Industrial & engineering chemistry research*, Vol.51, No.19, p.6613-6618, 2012.
59. Aboudheir, A., Tontiwachwuthikul, P., Chakma, A., Idem, R, “Kinetics of the reactive absorption of carbon dioxide in high CO₂-loaded, concentrated aqueous monoethanolamine solutions”, *Chemical Engineering Science*, Vol.58, No.23-24, p.5195-5210, 2003.
60. Weiland, R. H., Dingman, J. C., Cronin, D. B., Browning, G. J, “Density and viscosity of some partially carbonated aqueous alkanolamine solutions and their blends”, *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol.43, No.3, p.378-382, 1998.
61. Hsu, C.H., Li, M.H, “Densities of aqueous blended amines”, *J. Chemical. Engineering Data*, Vol.42, No.3, p.502-507, 1997.
62. Harun, N., Nittaya, T., Douglas, P. L., Croiset, E., Ricardez-Sandoval, L. A, “Dynamic simulation of MEA absorption process for CO₂ capture from power plants”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.10, p.295-309, 2012.
63. Agbonghae, E. O., Hughes, K. J., Ingham, D. B., Ma, L., Pourkashanian, M, “A semi-empirical model for estimating the heat capacity of aqueous solutions of alkanolamines for CO₂ capture”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol.53, No.19, p.8291-8301, 2014.
64. Onda, K., Takeuchi, H., Okumoto, Y, “Mass transfer coefficients between gas and liquid phases in packed columns”. *Journal of chemical engineering of Japan*, Vol.1, No.1, p.56-62, 1968.
65. TUNG, H. H., MAH, R. S, “Modeling liquid mass transfer in HIGEE separation process”, *Chemical Engineering Communications*, Vol.39, No.1-6, p.147-153, 1985.
66. Jiru, Y., Eimer, D. A., Wenjuan, Y, “Measurements and correlation of physical solubility of carbon dioxide in (monoethanolamine+ water) by a modified technique”, *Industrial & engineering chemistry research*, Vol.51, No.19, p.6958-6966, 2012.
67. Ying, J., Eimer, D. A, “Measurements and correlations of diffusivities of nitrous oxide and carbon dioxide in monoethanolamine+ water by laminar liquid jet”, *Industrial & engineering chemistry research*, Vol.51, No.50, p.16517-16524, 2012.
68. Versteeg, G. F., Van Swaaij, W. P, “Solubility and diffusivity of acid gases (carbon dioxide, nitrous oxide) in aqueous alkanolamine solutions”, *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol.33, No.1, p.29-34, 1988.
69. van Swaaij, W. P. M., Versteeg, G. F, “Mass transfer accompanied with complex reversible chemical reactions in gas—liquid systems: an overview”, *Chemical Engineering Science*, Vol.47, No.13-14, p.3181-3195, 1992.
70. Wilke, C. R., Chang, P, “Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions”, *AIChE Journal*, Vol.1, No.2, p.264-270, 1955.
71. Fairbanks, D. F., Wilke, C. R, “Diffusion coefficients in multicomponent gas mixtures”, *Industrial & Engineering Chemistry*, Vol.42, No.3, p.471-475, 1950.

72. Fuller, E. N., Schettler, P. D., Giddings, J. C., "New method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients", *Industrial & Engineering Chemistry*, Vol.58, No.5, 18-27, 1966.
73. Burns, J. R., Jamil, J. N., Ramshaw, C., "Process intensification: operating characteristics of rotating packed beds—determination of liquid hold-up for a high-voidage structured packing", *Chemical engineering science*, Vol.55, No.13, p.2401-2415, 2000.
74. Chilton, T. H., Colburn, A. P., "Mass transfer (absorption) coefficients prediction from data on heat transfer and fluid friction", *Industrial & engineering chemistry*, Vol.26, No.11, p.1183-1187, 1934.
75. Borhani, T. N., Oko, E., Wang, M., "Process modelling, validation and analysis of rotating packed bed stripper in the context of intensified CO₂ capture with MEA", *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, Vol.75, p.285-295, 2019.
76. Chemical engineering plant cost index (CEPCI), *Chemical Engineering*, 2016.
77. Gudena, K., Rangaiah, G. P., Lakshminarayanan, S., "Optimal design of a rotating packed bed for VOC stripping from contaminated groundwater", *Industrial & engineering chemistry research*, Vol.51, No.2, p.835-847, 2012.
78. Seider, W. D., Seader, J. D., Lewin, D. R., "*PRODUCT & PROCESS DESIGN PRINCIPLES: SYNTHESIS, ANALYSIS AND EVALUATION*", John Wiley & Sons, 2009.
79. Singh, S. P., Wilson, J. H., Counce, R. M., Lucero, A. J., Reed, G. D., Ashworth, R. A., Elliott, M. G. "Removal of volatile organic compounds from groundwater using a rotary air stripper", *Industrial & engineering chemistry research*, Vol.31, No.2, p.574-580, 1992.
80. Agarwal, L., Pavani, V., Rao, D. P., Kaistha, N., "Process intensification in HiGee absorption and distillation: design procedure and applications", *Industrial & engineering chemistry research*, Vol.49, No.20, p.10046-10058, 2010.