

**DIMENSIONAMIENTO Y SIMULACIÓN DE UNA TORRE DE ABSORCIÓN
EMPACADA EN CONTRACORRIENTE PARA SEPARACIÓN DE CO₂ DERIVADO
DE EFLUENTES GASEOSOS INDUSTRIALES**



BRENIN EDUARDO ARAMENDIZ JOIRO

**UNIVERSIDAD DE PAMPLONA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUÍMICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS Y ARQUITECTURA
PAMPLONA
2018**

**DIMENSIONAMIENTO Y SIMULACIÓN DE UNA TORRE DE ABSORCIÓN
EMPACADA EN CONTRACORRIENTE PARA SEPARACIÓN DE CO₂ DERIVADO
DE EFLUENTES GASEOSOS INDUSTRIALES**

BRENIN EDUARDO ARAMENDIZ JOIRO

Director

ELISEO AMADO GONZALEZ

Químico, Ph.D. Termodinámica Química

Codirector

ALVARO E. VILLAMIZAR VILLAMIZAR

Ingeniero Químico, McS. en Ingeniería Ambiental

Trabajo presentado como requisito para optar al título de Ingeniero Químico

**UNIVERSIDAD DE PAMPLONA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS Y ARQUITECTURA
PAMPLONA, NORTE DE SANTANDER
COLOMBIA**

2018

Dedicatoria

*A mi madre por su esfuerzo, dedicación, tierno amor y apoyo incondicional para levantarme
cada día en medio de las situaciones difíciles
“Siempre serás mi heroína”*

Agradecimientos

Expreso mi más efusivo agradecimiento a mis directores Eliseo Amado y Álvaro Villamizar por su entrega total en la realización de este proyecto y por todo el conocimiento que me han transmitido y que ha trascendido más allá de las fronteras de lo académico.

También le expreso mi más sincero agradecimiento a todos los docentes y compañeros del programa de Ingeniería Química y Química que me brindaron su apoyo e hicieron que cada día me superara con esmero para alcanzar la excelencia.

INFINITAS GRACIAS

Resumen

Actualmente el diseño de procesos y productos se centra no solamente en consideraciones de tipo económica sino también ambiental, originando una constelación de investigaciones que estudian con detalle los métodos de separación en la industria química que terminen por generar el mínimo impacto negativo posible al medio ambiente. Unos de estos temas centrales es la mitigación del dióxido de carbono (CO_2) de los efluentes gaseosos industriales, como resultado de los procesos de combustión continua de combustibles fósiles, tales como el carbón, el petróleo y los gases naturales, que han causado el deterioro de la capa de ozono. Es por ello, que he focalizado todo mi tesón en investigar y sublevar la operación unitaria de absorción como proceso para la captura de CO_2 mediante sistemas de lavado a base de líquidos iónicos y de esta manera proporcionar uno de los primeros materiales intelectuales sobre el dimensionamiento, diseño hidráulico y simulación de torres contactoras empacadas, que sean selectivas para la absorción de este gas de efecto invernadero.

Dada la poca existencia de estudios sobre las aplicaciones potenciales de líquidos iónicos para la captura de CO_2 , la información generada en este trabajo permitirá comprender los mecanismos difusionales de transferencia de masa, el estudio hidrodinámico de columnas absorbedoras, la selección de empaques y el efecto de los flujos de las fases involucradas sobre la caída de presión en la eficiencia global de la absorción de CO_2 con solventes basados en líquidos iónicos, a tal punto, que en el futuro, se contribuya de manera significativa a la búsqueda de alternativas medioambientales que minimicen los niveles de concentración de CO_2 emitidos a la atmósfera derivada de las actividades humanas en el desarrollo de diversos procesos industriales.

Contenido

	Págs.
Resumen.....	5
Capítulo I	13
1. Descripción General.....	13
1.2 Planteamiento del problema y Justificación	13
1.2 Delimitación.....	14
1.2.1 Objetivo General.....	14
1.2.2 Objetivos Específicos.....	14
Capitulo II.....	16
2. Marco referencial	16
2.1.1 Aplicaciones y usos de los procesos de absorción.....	18
2.1.2 Determinación de los coeficientes de transporte de materia.....	19
2.1.3 Empaque.	22
2.1.4 Tecnologías de captura de CO ₂ en post-combustión.	25
2.1.5 Elección del líquido absorbente.	26
Capitulo III.....	36
3. Metodología	36
3.1 Correlaciones empíricas de diseño de Billet y Schultes.	36
3.1.1 Balance general de materia.	36
3.1.2 Coeficiente de resistencia.	37
3.1.3 Velocidad del vapor y del líquido en el punto de carga, cálculo del área de la sección transversal.	38
3.1.4 Hold-up teórico del líquido.....	39
3.1.5 Estimación del diámetro efectivo del empaque y del factor de pared.	39

3.1.6 Determinación del régimen de flujo para las fases presentes.	39
3.1.7 Factor de humectación para el empaque y factor de resistencia en flujo gaseoso.	40
3.1.8 Caída de presión por unidad de altura en el flujo de gas.	40
3.1.9 Diámetro hidráulico y área de contacto de fase	41
3.1.10 Altura de una unidad de transferencia en la fase líquida y gaseosa.	41
3.1.11 Diferencias en las cargas de gas.....	41
3.1.12 Número global de unidades de transferencia de masa en el lado del gas.	42
3.1.13 Factor de separación y altura total de una unidad de transferencia.	42
3.1.14 Altura del lecho empacado y altura equivalente a un plato teórico.	42
3.1.15 Determinación de los coeficientes de transferencia de masa.....	43
Capitulo IV.....	45
4. Resultados.....	45
4.1 Dimensionamiento de una torre de absorción empacada en contracorriente para el proceso de captura de CO ₂	45
4.2 Simulación del proceso de captura de CO ₂ por líquido iónico	57
Conclusiones	73
Referencias Bibliograficas	74
Apéndices.....	78

Listado de tablas

	Págs.
Tabla 1. Mediciones del área de transferencia de masa usando métodos químicos (Henriques de Brito et al., 1994)	18
Tabla 2. Parámetros fisicoquímicos mínimos de la fase líquida necesarios para el diseño de la torre contactora empacada (tomado de Babamohammadi et al., 2015; Zhang et al., 2011)	35
Tabla 3. Resultados de la validación del protocolo de Billet. Balance General de materia (Fuente: autor)	45
Tabla 4. Resultados de la validación del protocolo de Billet.....	45
Tabla 5. Resultados de la validación del protocolo de Billet. Segunda serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)	46
Tabla 6. Resultados de la validación del protocolo de Billet. Tercera serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)	46
Tabla 7. Resultados de la validación del protocolo de Billet. Cuarta serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)	47
Tabla 8. Especificaciones iniciales para la aplicación del algoritmo (Fuente: autor).....	47
Tabla 9. Parámetros hidráulicos y de transferencia de masa del tipo de empaque utilizado (Fuente: autor)	48
Tabla 10. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO ₂ con LI. Balance general de materia. (Fuente: autor)	50
Tabla 11. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO ₂ con LI. Primera serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)	50
Tabla 12. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO ₂ con LI. Segunda serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)	50
Tabla 13. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO ₂ con LI. Tercera serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)	50

Tabla 14. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbedora para el proceso de captura de CO ₂ con LI. Cuarta serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)	50
Tabla 15. Tamaño del empaque para distintos diámetros de columna. (Tomado de KLM Technology Group).....	51
Tabla 16. Coeficientes de transferencia de masa local y global determinados (Fuente: autor)....	51
Tabla 17. Propiedades físicas y críticas del LI [bmim][BF ₄] obtenidas por (Ma et al., 2017)	59
Tabla 18. Coeficientes en ecuaciones de propiedades dependientes de la temperatura (Ma et al., 2017)	59
Tabla 19. Parámetros de regresión para el cálculo de los coeficientes de Henry. Tomado de (Ma et al., 2017)	61
Tabla 20. Parámetros de regresión en la ecuación NRTL. Tomado de (Ma et al., 2017).....	61

Listado de figuras

	Págs.
Figura 1. Representación esquemática de una torre rellena (Seader, 2011)	16
Figura 2. Gradiente de concentración cerca de la superficie de contacto gas-liquido necesaria para la difusión interfacial (Tomado de McCabe, Smith & Harriot, 2007).....	20
Figura 3. Empaques aleatorios comunes de primera y segunda generación. (a) Anillo Raschig (metal, plástico, cerámica). (b) silla de Berl (cerámica). (c) Anillo Pall (metal). (D) Anillo Pall (plástico). (e) Silla Intalox (cerámica). (f) Sillín Super Intalox (plástico). Tomado de (Perry, 2008)	23
Figura 4. Empaques al azar de tercera generación. (a) Embalaje de torre metálica Intalox. (b) cascada mini-anillo (plástico). (c) Anillo de Nutter (metal). (d) Super-Anillo Raschig (metal) (Perry, 2008).	24
Figura 5. Representación esquemática de la torre utilizada para la absorción de CO ₂ con MEA (Aboudheir & Tontiwachwuthikul, 2006).	24
Figura 6. Opciones tecnológicas para la captura de CO ₂ (Abu-Zahra et al., 2013).....	26
Figura 7. Estructuras moleculares de las alcanolaminas usadas con mayor frecuencia para la absorción de CO ₂ (Kohl & Nielsen, 1997).	28
Figura 8. Análisis de sensibilidad del diámetro de la torre absorbadora en función del caudal del gas de entrada. (Fuente: autor).....	52
Figura 9. Análisis de sensibilidad de la caída de presión por unidad de altura del lecho empacado en función de la velocidad volumétrica de flujo del gas de entrada. (Fuente: autor)	52
Figura 10. Análisis de sensibilidad de la altura del lecho empacado en función del caudal del gas de entrada. (Fuente: autor)	53
Figura 11. Vista frontal y lateral de la torre absorbadora empacada diseñada. (Fuente: autor) ...	54
Figura 12. Plano isométrico del distribuidor del líquido de represa de tina. (Fuente: autor)	55
Figura 13. Plano isométrico del redistribuidor de líquido. (Fuente: autor)	56
Figura 14. Plano isométrico del distribuidor de gas. (Fuente: autor).....	56
Figura 15. Selección y creación de los componentes químicos del proceso de absorción. (Fuente: autor).....	57
Figura 16. Propiedades físicas del líquido iónico agregadas al simulador. (Fuente: autor)	58

Figura 17. Parámetros de regresión de Henry y NRTL. (Fuente: autor)	60
Figura 18. Capacidad calorífica calculada para el [bmim][BF ₄]. (Fuente: autor)	62
Figura 19. Densidad calculada para el [bmim][BF ₄]. (Fuente: autor)	62
Figura 20. Volumen molar calculado para el [bmim][BF ₄]. (Fuente: autor)	63
Figura 21. Presión de vapor calculada para el [bmim][BF ₄]. (Fuente: autor).....	63
Figura 22. Viscosidad calculada para el [bmim][BF ₄]. (Fuente: autor).....	64
Figura 23. Tensión superficial calculada para el [bmim][BF ₄]. (Fuente: autor).....	64
Figura 24. Curva de solubilidad estimada del CO ₂ en [bmim][BF ₄] a 1 atm de presión. (Fuente: autor).....	65
Figura 25. Curva de solubilidad estimada del N ₂ en [bmim][BF ₄] a 1 atm de presión. (Fuente: autor).....	66
Figura 26. Curva de solubilidad estimada del O ₂ en [bmim][BF ₄] a 1 atm de presión. (Fuente: autor).....	66
Figura 27. Curva de solubilidad estimada del CO ₂ en [bmim][BF ₄] a diferentes presiones y temperaturas. (Fuente: autor).....	67
Figura 28. Definición de la columna absorbadora y las corrientes de flujo. (Fuente: autor).....	67
Figura 29. Perfil térmico de la torre absorbadora a lo largo de sus cuatro etapas de equilibrio. (Fuente: autor).....	68
Figura 30. Especificaciones hidráulicas de la torre absorbadora empacada. (Fuente: autor).....	69
Figura 31. Simulación del proceso de absorción de CO ₂ con LI en las zonas estables de operación. (Fuente: autor).....	69
Figura 32. Perfil hidráulico de la primera etapa de equilibrio. (Fuente: autor)	70
Figura 33. Perfil hidráulico de la segunda etapa de equilibrio. (Fuente: autor).....	70
Figura 34. Perfil hidráulico de la tercera etapa de equilibrio. (Fuente: autor).....	71
Figura 35. Perfil hidráulico de la cuarta etapa de equilibrio. (Fuente: autor).....	71
Figura 36. Perfil de composición del CO ₂ para la fase líquida y gaseosa. (Fuente: autor).....	72

Listado de Apéndices

	Págs.
Apéndice A. Detalles de la torre absorbadora	79
Apéndice B. Planos de las vistas de la torre absorbadora.....	80
Apéndice C. Planos de las vistas del distribuidor de líquido.....	81
Apéndice D. Planos de las vistas del redistribuidor de líquido.....	82
Apéndice E. Planos de las vistas del distribuidor de gas	83
Apéndice F. Tabla de resultados de balance obtenidas mediante simulación en Aspen Plus V9.0	84

Capítulo I

1. Descripción General

1.2 Planteamiento del problema y Justificación

Numerosos estudios científicos en el área ambiental han concluido que desde hace décadas, el dióxido de carbono (CO_2) ha venido ejerciendo el papel protagónico como el mayor contribuyente al problema del calentamiento global en nuestro planeta y con la creciente modernización y ampliación de nuevas tecnologías industriales de producción, las emisiones de dióxido de carbono han aumentado significativamente a tal punto, que hoy por hoy, la calidad de vida de las personas y de los ecosistemas se encuentren amenazados por el calentamiento global. Muchos han sido los instrumentos internacionales creados en defensa del medio ambiente como el protocolo de Kyoto (1997) y el acuerdo de París (2015) que han establecidos estrictas normativas para reducir la concentración de gases de efecto invernadero emitidos a la atmósfera para garantizar la supervivencia de la especie humana en el futuro promisorio (Bohringer, 2003; Jayaraman, 2015).

En vista a esta problemática, en la actualidad se ha venido desarrollando una serie de investigaciones con el principal objetivo de eliminar el CO_2 de las corrientes gaseosas industriales, para así controlar las emisiones de gases de efecto invernadero y mantener los niveles actuales, sin que se experimente mayores incrementos y que ocasionen daños más drásticos. Entre la gama de métodos industriales utilizados para limpiar o purificar corrientes gaseosas, el más reconocido sin lugar a dudas, es el de absorción (Aroonwilas & Tontiwachwuthikul, 1998). De manera que esta investigación se ha centrado en estudiar la separación de CO_2 de efluentes gaseosos generados principalmente en el proceso de combustión usando líquidos iónicos como disolvente líquido apropiado por medio del contacto íntimo entre los dos fluidos, para así llevar a cabo la difusión molecular interfacial del dióxido de carbono dentro de una columna de absorción y liberar el CO_2 absorbido desde el disolvente en una unidad de regeneración (Babamohammadi, Shamiri, & Aroua, 2015).

De ahí que otro punto esencial de esta investigación ha sido abordar alternativas innovadoras de solución en la remoción de gases de efecto invernadero a partir de la aplicación directa de líquidos iónicos como solventes verdes, apostando por una tecnología respetuosa por el medio ambiente en los diferentes procesos de la industria química.

Además, una revisión de la literatura ha revelado que no existe una investigación formal que proporcione información técnica sobre el diseño de los equipos de procesos de separación por absorción usando líquidos iónicos (LI); aunque se han reportado numerosos datos de equilibrio de solubilidad de CO₂ en LI de manera experimental y por simulación molecular (Maginn, 2005), concluyendo conjuntamente que tienen mayor potencial para la remoción de CO₂ que con los solventes convencionales, el conocimiento generado será de gran utilidad porque se convertirá en uno de los principales trabajos pioneros a nivel mundial. Una de las mayores razones por las cuales no se ha indagado en este tema se debe a la escasa viabilidad económica para la construcción de estas torres contactoras en planta (Ziobrowski, Krupiczka, & Rotkegel, 2016), sin lugar a dudas, en el futuro el impacto de la aplicación de estos solventes puede ser más apreciada, y es por ello, que se pretende complementariamente desarrollar un estudio de simulación en Aspen-Hysis v.8.8 para conocer la viabilidad técnica del diseño y así, ejemplificar y resaltar mediante su estudio los aspectos técnicos mínimos que requiere el diseño de equipos de procesos, para que sirva de modelo investigativo para todos los integrantes de la escuela de ingeniería química que deseen acoplar los conceptos vistos en las asignaturas de operaciones de separación por etapas de equilibrio con habilidades ingenieriles en el uso de herramientas computacionales de simulación para los cálculos básicos de balance de materia para el sistema particular aire – dióxido de carbono – líquido iónico.

1.2 Delimitación

1.2.1 Objetivo General

Dimensionar y simular una torre de absorción empacada en contracorriente para separación de CO₂ derivado de efluentes gaseosos industriales.

1.2.2 Objetivos Específicos

Determinar las propiedades físicas del sistema Aire – CO₂ – Líquido Iónico para el diseño de una torre absorbedora empacada con flujo a contracorriente.

Dimensionar la columna empacada para la absorción de CO₂ usando líquidos iónicos.

Validar los parámetros de diseño del sistema propuesto mediante una simulación de proceso en ASPEN PLUS V9.

Capítulo II

2. Marco referencial

2.1 Marco teórico y estado del arte

Las columnas cilíndricas empacadas conocidas universalmente como torres de relleno, son equipos de contacto continuo diferencial entre dos corrientes fluidas: una gaseosa y la otra líquida, que operan en estado estacionario y se utilizan principalmente en operaciones de destilación, absorción de gases y extracción líquido-líquido. Debido a la evolución que han tenido las aplicaciones de estos dispositivos en la industria de procesos químicos, se ha heredado y desarrollado diferentes modelos y correlaciones que describen la operatividad y el diseño hidráulico de torres de relleno a fin de maximizar u optimizar los resultados de producción en una planta química. Una unidad básica del equipo consta de una cubierta o coraza, una o más secciones de empaques, soportes y refrenadores del relleno, redistribuidor de líquido, eliminadores de arrastre y disposiciones relativas para la entrada y la salida tanto de la corriente gaseosa como de la líquida, que fluyen en contracorriente a lo largo de toda la torre, Figura 1 (Seader, 2011).

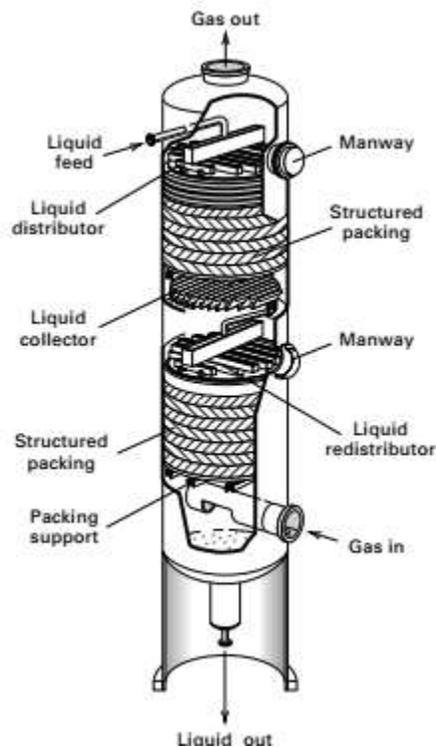


Figura 1. Representación esquemática de una torre rellena (Seader, 2011)

Desde el punto de vista del diseño hidráulico de una torre empacada, el objetivo de la misma es proporcionar una superficie interfacial grande entre el líquido y el gas, a fin de mejorar el contacto continuo y, por consiguiente, la absorción por mecanismos difusionales, que, si bien se ha investigado, resulta muy ventajoso favorecer el transporte turbulento lógicamente hasta ciertos valores límites de flujo dentro de las torres empacadas. Generalmente, estos equipos operan en modo contracorriente, de tal forma que una vez que haya ingresado el líquido agotado por la cúspide de la torre distribuyéndose uniformemente sobre la parte superior del relleno, entre en contacto con oposición al flujo de ascenso de una mezcla gaseosa portadora del soluto de interés, a través de los intersticios del relleno (McCabe, Smith, & Harriott, 2007).

En la actualidad, las torres de absorción con empaques estructurados han sido ampliamente utilizadas en la separación de solutos gaseosos ya que ofrecen una excelente eficiencia de transferencia de masa, al tiempo que ofrecen una menor caída de presión en comparación con las torres de platos. Estos hechos reducen los costos fijos y operativos en cualquier proceso industrial (Henriques de Brito, Stockar, Menendez Bartenger, Bomio, & Laso, 1994). Así mismo, es de vital importancia comprender con mayor rigurosidad el diseño de equipos de absorción empacados para su posterior aplicación y optimización en la separación industrial de CO₂ de efluentes gaseosos. En la Tabla 1, se enumeran una lista de varios sistemas químicos utilizados para determinar el área de transferencia de masa en columnas empacadas, aplicados a la separación de CO₂. Aunque en todos estos sistemas ocurre reacción química, es notorio observar que los avances investigativos no se han enfocado con profundidad a aquellos sistemas en los cuales no hay reacción y líquidos iónicos como solvente absorbente permitiendo resaltar el valor de esta investigación. Entre las principales ventajas y desventajas del uso de torres empacadas en los procesos de separación gas-líquido, se resaltan las siguientes (Treybal, 1988):

- Generalmente, las torres empacadas requerirán una menor caída de presión.
- Cuando se tienen problemas complicados de corrosión, las torres empacadas son probablemente las menos costosas.
- Es más difícil la limpieza frecuente en este tipo de configuraciones.
- En el caso de ser necesario la eliminación de corrientes laterales es más complicado hacerlo en las torres rellenas.
- Las columnas empacadas no son adecuadas para pequeñas velocidades de flujo de líquido, exigiendo valores altos en las relaciones líquido-gas.

- Las torres empacadas operan con menor burbujeo del gas a través del líquido.

Tabla 1. Mediciones del área de transferencia de masa usando métodos químicos (Henriques de Brito et al., 1994)

Referencia	Sistema químico utilizado
Benett and Goodridge (1970)	Absorción en cantidades radioactivas de $C^{14}O_2$ en soluciones de NaOH
Bornhutter and Mersmann (1991)	Absorción de CO_2 en una solución de NaOH
Danckwerts and Guillham (1966)	Absorción de CO_2 puro en diferentes soluciones (Na_2SO_4 ; solución buffer de K_2CO_3 con $KHCO_3$ y $KClO$; soluciones de NaOH con Na_2SO_4)
Dharwadkar and Sawant (1985)	Absorción de CO_2 en el aire en soluciones de NaOH con Na_2CO_3
Gianetto and Sicardi (1972)	Absorción de CO_2 en el aire en soluciones de NaOH
Joosten and Danckwerts (1973)	Absorción de CO_2 puro en soluciones tampón de carbonato
Kolev (1973)	Absorción de CO_2 en el aire en soluciones de NaOH
Lee and Kim (1982)	Absorción de CO_2 en el aire en soluciones tampón (K_2CO_3 , $KHCO_3$, KCl y $NaOCl$)
Linek et al. (1984)	Absorción de CO_2 en el aire en soluciones de NaOH
Merchuk (1980)	Absorción de CO_2 en el aire en soluciones de NaOH
Mohunta et al. (1969)	Absorción de CO_2 en el aire en soluciones de NaOH
Richards et al. (1964)	Absorción de CO_2 puro en soluciones tampón de carbonato con iones de óxido de Arsenio
Rizzuti and Brucato (1989)	Absorción de CO_2 puro en una solución tampón de K_2CO_3 y $KHCO_3$ con iones de óxido de Arsenio
Sahay and Sharma (1973)	Absorción de O_2 del aire en soluciones de ditionito y absorción pobre de CO_2 en soluciones de NaOH y dietanolamina
Vidwans and Sharma (1967)	Absorción de CO_2 puro en soluciones acuosas de NaOH y MEA
Yoshida and Miura (1963)	Absorción de CO_2 en aire en soluciones de NaOH y KOH

2.1.1 Aplicaciones y usos de los procesos de absorción.

Entre la variedad de aplicaciones de importancia industrial que tienen los procesos de absorción, Chattopadhyay (2007) citó principalmente la deshidratación de gas (como el secado de cloro, y la deshidratación del gas natural), la absorción selectiva de H_2S de gas crudo usando soluciones acuosas de carbonato y soluciones acuosas de amonio, el lavado de gases de combustión con recuperación de azufre, y el tratamiento del gas natural y gas sintético para la eliminación de

gases ácidos (H_2S , CO_2) y otras impurezas como sulfuro de carbonilo (COS) y mercaptanos. Mas no se trata tan solo de aplicaciones a procesos de absorción física, sino que también, su uso se extiende a la transferencia de masa por absorción asociado con reacción química, por ejemplo, la absorción de H_2S o CO_2 en soluciones acuosas de etanolaminas (monoetanolamina (MEA) o dietanolamina (DEA)) o la absorción de NH_3 en ácidos diluidos y la absorción de CO_2 en hidróxidos alcalinos.

Con relación al uso de estructuras empacadas, las Sillas de Cerámica Intalox® se han utilizado para la eliminación de CO_2 y H_2S por medio de soluciones calientes de carbonato de potasio, el enfriamiento y secado del cloro o la absorción de ClO_2 , SO_2 y SO_3 ; mientras que las sillas de plástico Super Intalox® se han usado eminentemente para la absorción de CO_2 , absorción de ClO_2 , absorción de Cl_2 en agua o soluciones de sosa caustica, eliminación de H_2S y mercaptanos, secado de Cl_2 , desaireación y lavado de humos (Chattopadhyay, 2007). Análogamente, este mismo autor ha referenciado el uso de los anillos Pall de plasticos en múltiples sistemas de absorción, entre los más comunes están la absorción de H_2S , y la eliminación de CO_2 que es el principal foco de interés de la presente investigación. Tales son algunos de los ejemplos representativos de empaques aleatorios mayormente usados en diversos procesos a gran escala, y de esta manera se podría seguir especificando otras aplicaciones de estructuras de rellenos, que, sin lugar a duda, demuestra la importancia que tiene su elección para su posterior aplicación, siendo clave el estudio de características tales como resistencia química, costo, y geometría que proporcione buen contacto entre las fases fluidas y aumenten las tasas de transferencia de masa (Billet, 1995).

2.1.2 Determinación de los coeficientes de transporte de materia.

Para que se realice la absorción de un gas en un líquido se requiere que haya transferencia de masa desde el seno de la fase gaseosa al seno de la fase líquida en virtud de un gradiente de concentración a lo largo de la dirección del flujo másico. El transporte de materia puede dilucidarse con claridad estudiando la teoría de la doble resistencia (Figura 2), la cual supone que en la interfase no existe resistencia a la transferencia de masa y como resultado allí se establecen las correspondientes concentraciones de equilibrio.

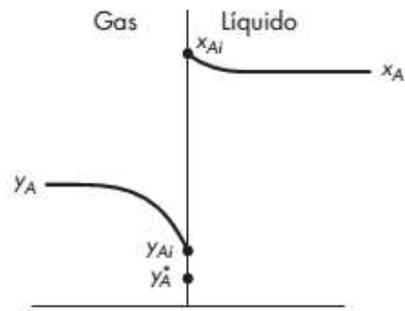


Figura 2. Gradiente de concentración cerca de la superficie de contacto gas-líquido necesaria para la difusión interfacial (Tomado de McCabe, Smith & Harriot, 2007).

La situación representada en la anterior figura muestra esquemáticamente la relación de composiciones que se establece en la zona interfacial para el caso en que exista únicamente transferencia del componente A.

En las determinaciones experimentales de la rapidez de la transferencia de masa, generalmente es posible determinar, por muestreo y análisis, las concentraciones de soluto en la masa total de las fases gas y líquido. Sin embargo, el muestreo adecuado de los fluidos en la interfase es generalmente imposible, puesto que la mayor parte de las diferencias de concentración, como $y_{A,G} - y_{A,i}$, tienen lugar en distancias extremadamente pequeñas (Treybal, 1988)

$$N_A = k_G P (y_{A,G} - y_{A,i}) \quad (1)$$

Donde:

N_A es el flux o flujo másico, $y_{A,G}$ y $y_{A,i}$ representa la fracción molar del componente A en el seno del gas y en la zona interfacial respectivamente, P es la presión total del sistema y k_G el coeficiente local de transferencia de masa en la fase gaseosa.

En razón a la dificultad de medir físicamente las composiciones interfaciales de muchos sistemas, entonces, el efecto completo del transporte de materia de las dos fases puede medirse en función de un coeficiente global de transferencia de masa K_G y la fracción molar del componente A en el equilibrio y_A^* :

$$N_A = K_G P (y_{A,G} - y_A^*) \quad (2)$$

A partir de la teoría de la doble resistencia puede hallarse una relación matemática entre los coeficientes globales e individuales de masa en cada fase como aparece a continuación:

$$y_{A,G} - y_A^* = (y_{A,G} - y_{A,i}) + (y_{A,i} - y_A^*)$$

$$m' = \frac{y_{A,i} - y_A^*}{x_{A,i} - x_{A,L}} \rightarrow m'(x_{A,i} - x_{A,L}) = y_{A,i} - y_A^*$$

$$m' \left(\frac{N_A}{k_L} \right) = y_{A,i} - y_A^*$$

Análogamente, $x_{A,L}$ y $x_{A,i}$ representan las fracciones molares del componente A en el seno del líquido y en la interfase respectivamente, k_L es el coeficiente local de transferencia de masa en la fase líquida y m' es la pendiente de la curva de equilibrio que para el caso particular de soluciones diluidas es igual a la constante de la ley de Henry.

Sumando las ecuaciones, resulta

$$y_{A,G} - y_{A,i} = \frac{N_A}{k_G}$$

$$-y_A^* + y_{A,i} = m' \left(\frac{N_A}{k_L} \right)$$

$$y_{A,G} - y_A^* = \frac{N_A}{k_G} + m' \left(\frac{N_A}{k_L} \right) = \frac{N_A}{K_G}$$

$\frac{1}{K_G} = \frac{m'}{k_L} + \frac{1}{k_G}$
--

(3)

Las torres empacadas se usan para el contacto continuo a contracorriente entre los dos fluidos durante toda su trayectoria, induciendo un cambio en las composiciones del líquido y del gas en función de la altura del empaque. Un método simplificado de diseño de torres empacadas para la absorción de mezclas gaseosas es mediante el cálculo de las unidades de transferencia y del uso de los coeficientes globales para determinar el diámetro de la torre y la altura necesaria del relleno. El número de unidades globales de transferencia de del gas (N_{TOG}) se calculan con las siguientes relaciones:

$$N_{tOG} = \int_{y_2}^{y_1} \frac{(1-y)_{*M}}{(1-y)(y-y^*)} dy \quad y \quad (1-y)_{*M} = \frac{(1-y^*) - (1-y)}{\ln\left(\frac{1-y^*}{1-y}\right)} \quad (4)$$

En donde y^* es la concentración del soluto gaseoso en el equilibrio y $(1-y)_{*M}$ el promedio logarítmico tanto de $1-y$ como de $1-y^*$.

La altura de una unidad global de transferencia del gas (H_{tOG}) se define por:

$$H_{tOG} = \frac{G}{K_G a P_T (1-y)_{*M}} \quad (5)$$

Siendo P_T la presión total y a la superficie interfacial.

Por lo tanto, se puede determinar la altura del relleno de la siguiente manera,

$$Z = H_{tOG} \cdot N_{tOG} \quad (6)$$

2.1.3 Empaque.

Los empaques aleatorios son aquellos que simplemente se arrojan en la torre durante su instalación y que se dejan caer en forma aleatoria. Históricamente, ha existido tres generaciones de empaque aleatorios, la primera generación (1907 a 1950) produjo dos formas básicas simples: el anillo de Raschig y la silla de Berl (Figura 3. a-b) que se convirtieron en los antepasados de los modernos empaques aleatorios. La segunda generación (finales de los años cincuenta a principios de los setenta) produjo dos geometrías populares, el anillo de Pall, que evolucionó del anillo de Raschig y la silla Intalox a partir de la silla de Berl (Figura 3. c-f). Por último, la tercera generación (mediados de los años setenta hasta la actualidad) ha producido una multitud de geometrías populares, la mayoría de los cuales evolucionaron a partir del anillo Pall y la silla Intalox (Figura 4), como las modificaciones entre los empaques de segunda y tercera generación no son muy drásticas, en la actualidad los empaques de segunda generación siguen teniendo completa aceptación (Perry, 2008).

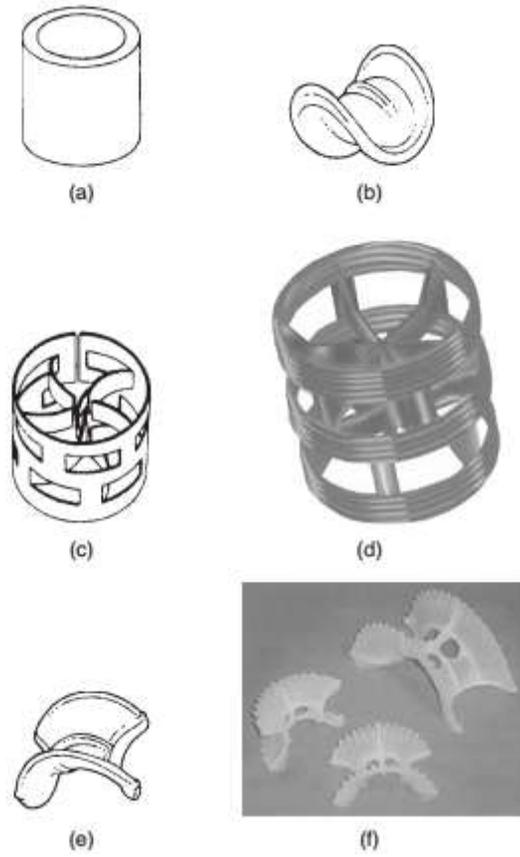


Figura 3. Empaques aleatorios comunes de primera y segunda generación. (a) Anillo Raschig (metal, plástico, cerámica). (b) silla de Berl (cerámica). (c) Anillo Pall (metal). (D) Anillo Pall (plástico). (e) Silla Intalox (cerámica). (f) Sillín Super Intalox (plástico). Tomado de (Perry, 2008)

Requiere toda la atención seleccionar correctamente el material de empaque para alcanzar la más alta eficiencia en la transferencia de masa de la columna a diseñar, en vista de que otros investigadores han desarrollado sus propios diseños traigo a colación el diseño propuesto por deMontigny en 2006, en el cual obtuvo resultados razonables en la absorción de dióxido de carbono (CO_2) utilizando soluciones acuosas de monoetanolamina (MEA) en una columna empaquetada con Sulzer DX. La Figura 5, representa el esquema del aparato experimental trabajado para la absorción de dióxido de carbono (deMontigny, Aboudheir, Tontiwachwuthikul, & Chakma, 2006).

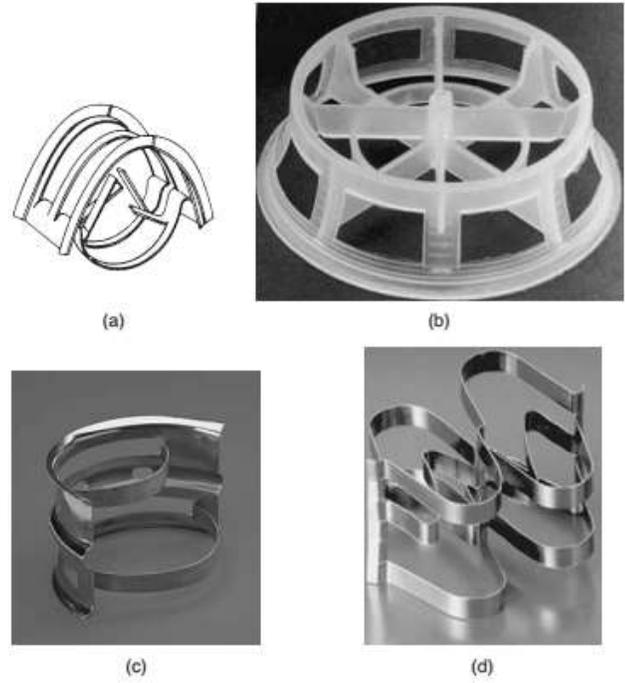


Figura 4. Empaques al azar de tercera generación. (a) Embalaje de torre metálica Intalox. (b) cascada mini-anillo (plástico). (c) Anillo de Nutter (metal). (d) Super-Anillo Raschig (metal) (Perry, 2008).

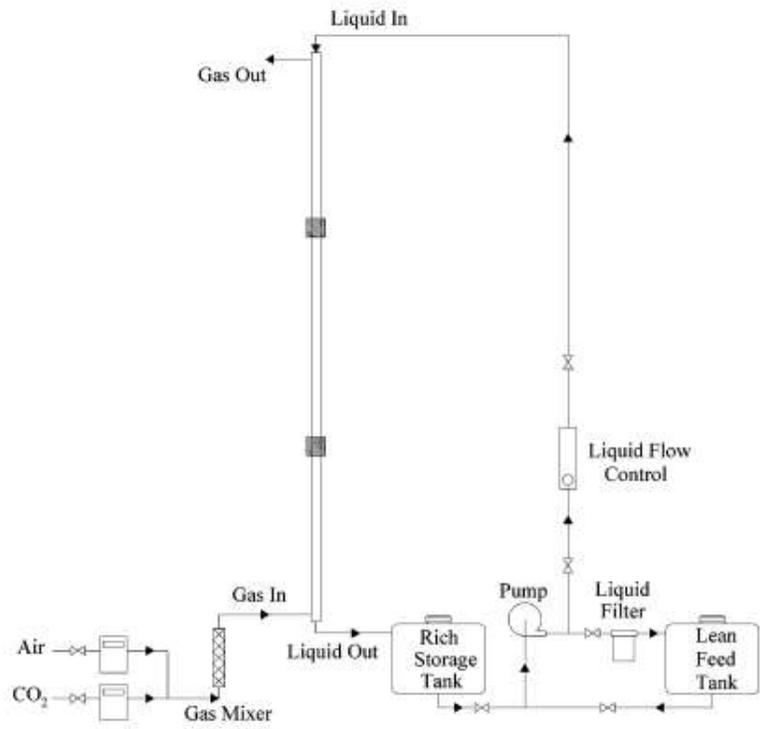


Figura 5. Representación esquemática de la torre utilizada para la absorción de CO₂ con MEA (Aboudheir & Tontiwachwuthikul, 2006).

2.1.4 Tecnologías de captura de CO₂ en post-combustión.

Una de las alternativas más viables y con enfoques sugestivos para abordar la problemática de las altas tasas de emisión de dióxido de carbono en las centrales eléctricas de combustibles fósiles, es el proceso de captura de carbono, aunque existen 3 rutas tecnológicas diferentes (Figura 6): pre-combustión, oxi-combustión y post-combustión, la más viable a corto y mediano plazo de todas estas, es la tecnología de post-combustión por su facilidad en la implementación y flexibilidad operativa (Abu-Zahra, Abbas, Singh, & Feron, 2013).

La captura de CO₂ posterior a la combustión se basa en el lavado con disolventes amínicos principalmente de monoetanolamina (MEA) o un disolvente a base de aminas estéricamente impedidas como el 2-amino-2-metil-1-propanol (AMP). Normalmente, las soluciones de MEA para la absorción de gases ácidos contienen aproximadamente 30% en peso de MEA. El método de absorción química tiene muchas ventajas evidentes, por ejemplo, alta eficiencia, es una tecnología madura y de bajo costo. La elección de MEA como absorbente se debe a que en el proceso de absorción química de CO₂ se produce una velocidad de reacción más rápida, permitiendo el uso de columnas más pequeñas. No obstante, unos de los principales inconvenientes o desventajas que se presentan durante el proceso de captura, son la degradación del disolvente, baja capacidad de captura de dióxido de carbono (g CO₂ / g absorbente); alta tasas de corrosión del equipo debido a la presencia de impurezas en el gas (O₂, SO₂, NO_x, hollín y cenizas); y alto consumo de energía para la regeneración del disolvente induciendo en conjunto un efecto de sobrecostos en la economía global de la planta (Blomen, Hendriks, & Neele, 2009), (Wu, Yu, Qin, & Zhang, 2014).

En la actualidad muchas investigaciones se ha orientado hacia la búsqueda de disolventes que tengan características superiores a los disolventes popularizados, y se han realizado estudios de mejora de la eficiencia del proceso aumentando la relación de gas-líquido, área de contacto, y la dilución de la fracción acuosa con líquidos orgánicos, por esta razón, este proyecto se encuentra estructurado de tal manera, que el líquido absorbente sea agua pura con el fin de regenerarlo con mayor facilidad, maximizar las tasas de absorción, evitar absorción con reacción química pues el modelo cinético de transferencia de masa aumenta en complejidad y sobre todo, evitando la corrosión en las unidades estructurales de los equipos.

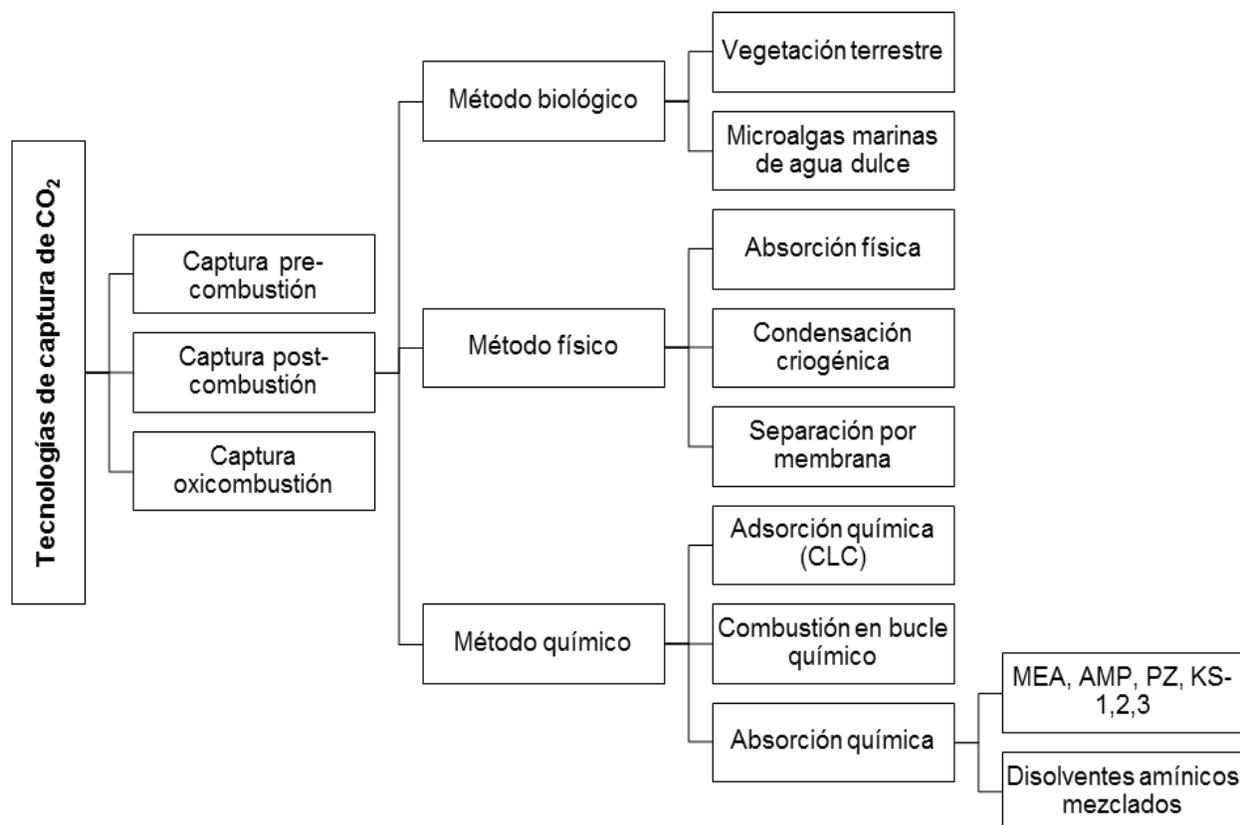


Figura 6. Opciones tecnológicas para la captura de CO_2 (Abu-Zahra et al., 2013).

2.1.5 Elección del líquido absorbente.

Para garantizar el éxito del proceso de absorción física se deben tener en cuenta varios parámetros característicos y uno de los más concluyentes es la selección óptima del disolvente con el fin de mejorar las tasas de absorción, eficiencia y otros factores técnicos y operacionales que conllevan esta operación unitaria.

De acuerdo con diversos autores, las especificaciones que todo líquido absorbente deben tener en forma muy general para su correcta selección son, una pequeña tensión de vapor para evitar pérdidas del mismo con la corriente de gas de salida, estabilidad química enfocada en la inercia reactiva con los otros componentes químicos y estructurales de la columna, y a menos que se especifique que la absorción se llevara a cabo favoreciendo reacciones químicas reversibles, la corrosión y la formación de reacciones secundarias se debe evitar en el mayor grado posible; buena afinidad por el soluto expresado en términos de alta solubilidad del gas, propiedad que es discriminada atendiendo al valor de la constante de solubilidad de la Ley de Henry, estabilidad

térmica, baja toxicidad e inflamabilidad y por supuesto baja viscosidad, que de acuerdo con las sugerencias de Treybal (1988), la evaluación de este parámetro proporciona rápidas tasas de absorción, mejores características en la inundación de la columna, bajas caídas de presión y buenas características de transporte de calor. Por último, el costo de compra del solvente es otro parámetro a considerar que no va aislado del costo global del proceso, más, sin embargo, para el objetivo de esta investigación, el costo no es un factor imperante, pues solo nos concentraremos en dimensionar, diseñar hidráulicamente y validar el diseño mediante simulación de proceso de forma netamente conceptual, sin prestar especial atención al análisis económico multivariante de la misma por diversas razones, una de ellas es la escasa disponibilidad de información y relaciones sobre la viabilidad económica de la construcción de torres contactoras empacadas empleando líquidos iónicos y lo segundo, es que lo consideramos como caso de estudio de otro futuro proyecto (Chattopadhyay, 2007).

Los disolventes de absorción más comúnmente usados son las alcanolaminas, las cuales fueron descubiertas por Robert R. Bottoms en 1930 y a quien se le concedió una patente por su notable investigación (Kohl & Nielsen, 1997). Las aminas que han demostrado ser de interés comercial principal para la purificación de gases (Figura 7) son la monoetanolamina (MEA), dietanolamina (DEA) y metildietanolamina (MDEA).

La gama de solventes que se han estudiado para la absorción del CO_2 a partir de corrientes de aire en estructuras empacadas ha sido bastante amplia a lo largo del tiempo, algunos han optado por el uso único o individual de líquidos absorbentes y otros por el uso de solventes mixtos, todo con el fin de investigar la manera o el modo de obtener una mejor eficiencia en el transporte de materia mediante el mecanismo de absorción por la vía física o química. Por reportar algunas de las investigaciones canónicas en este campo del conocimiento, resalto el uso de líquidos absorbentes basados en soluciones acuosas de hidróxido de sodio (NaOH) o de amoníaco (NH_3), de 2-amino-2-metil-1-propanol (AMP) y de mezclas acuosas y no acuosas de alcanolaminas primarias y secundarias como MEA o DEA y de las combinaciones resultantes de estas con los mencionados anteriormente, como sistemas de disolventes mixtos, cuya aplicación hasta el momento ha generado admirables resultados experimentales a nivel piloto de laboratorio.

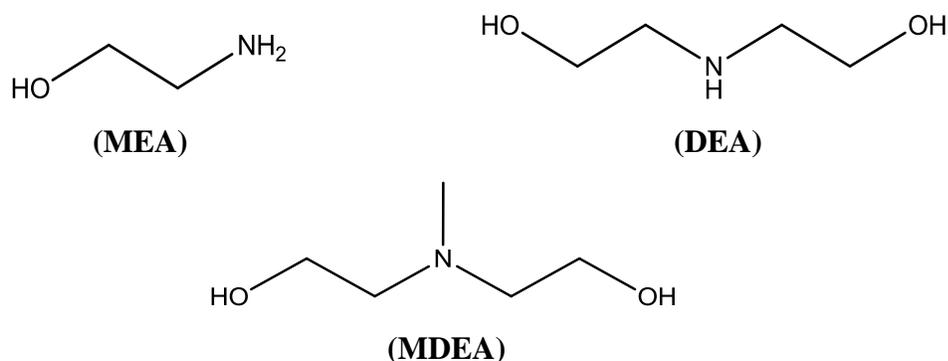


Figura 7. Estructuras moleculares de las alcanolaminas usadas con mayor frecuencia para la absorción de CO₂ (Kohl & Nielsen, 1997).

El trabajo realizado por (Yang, Yu, Mi, Wang, & Chen, 2015) se enfocó en el estudio sobre el rendimiento de empaques metálicos con corrugaciones de diferentes parámetros geométricos, midiendo el área efectiva de transferencia de masa y el coeficiente global de transferencia de masa en fase gaseosa para la absorción química de CO₂ empleando soluciones acuosas de NaOH como sistema absorbente en una columna de 20 cm y 1,2 m de diámetro interno y de altura respectivamente, y 0,8 m de altura de sección empacada.

Los resultados experimentales manifestaron que el proceso de absorción de CO₂ es dominado principalmente por la fase líquida como lo corroboran otros autores y que el área efectiva de transferencia de masa se encuentra íntimamente relacionada con las características geométricas del empaque, la tasa de flujo del líquido y el factor F del gas., encontrándose excelentes resultados en la eficiencia de transferencia de masa cuando los ángulos de deformación α y β del empaque son de 30° y 75° respectivamente. Los autores además propusieron una modificación de la correlación del área efectiva de transferencia de masa por Henriques de Brito et al., (1994) mediante regresiones lineales múltiples que tuviese en consideración los diferentes parámetros geométricos del empaque dispuestos en una rotación de 90° y las tasas de flujo de gas que no fueron contempladas en la investigación mencionada anteriormente. Los resultados del experimento consideraron que esta nueva correlación mostró un mejor acuerdo entre los datos obtenidos, para tal efecto, concluyeron que el nuevo modelo matemático es eficaz para la determinación del área efectiva en los procesos de absorción de este sistema particular.

Similarmente, Lin & Chu (2015) investigaron la eficiencia en la separación de CO₂ al 1% en volumen, mediante una solución 1 M en soda caustica (NaOH), pero con la notable diferencia de emplear lechos empacados rotatorios (RPB), y no lechos fijos como convencionalmente se encuentran y operan las torres de absorción. Los autores fueron los primeros en aplicar esta

tecnología usando agua, principalmente como líquido absorbente para la separación de compuestos orgánicos volátiles (COV), dado que en los estudios reportados se han empleado principalmente solventes basados en alcoholes y cetonas. La separación de CO₂ se logró utilizando tres configuraciones de RPB con diferentes especificaciones de empaques de cuchilla y dimensiones de la cámara de absorción.

Las condiciones de proceso se llevaron a cabo a presión atmosférica y 25°C de temperatura, los caudales de la fase gaseosa variaron entre 9 y 66 L/min, mientras que los de la corriente líquida fluctuaron entre 0,2 y 0,5 L/min y con una velocidad de rotación de 600 y 1800 rpm. Los estudios previos han demostrado que el incremento en la velocidad centrifuga afecta positivamente las tasas de transferencia y el área interfacial efectiva de contacto entre fases. Como se esperaba, la velocidad de rotación favoreció los coeficientes de transporte de materia en fase gaseosa (K_{Ga}). De la misma manera el coeficiente de transferencia aumentó a medida que se estudió el efecto de incrementar los caudales de las corrientes fluidas líquida y gaseosa. Además, este coeficiente mostró una tendencia de crecimiento a medida que el radio interior del lecho aumentaba y su radio exterior disminuía. Finalmente, los resultados obtenidos y comparados con RPB empacados convencionalmente, demostraron que los RPB con empaque de cuchillas tiene una fuerte aplicabilidad futura para eliminar el CO₂ de corrientes gaseosas con grandes caudales.

Otro de los solventes absorbentes que ha sido objeto de estudio para la absorción de CO₂ en columnas empacadas, ha sido el amoníaco en agua. Por ejemplo, la investigación desarrollada por (Li, Zhao, Liu, & Tang, 2014) es un caso típico y destacado de esta aplicación. La finalidad de su trabajo consistió en estimar el efecto de las principales variables operacionales del proceso de absorción sobre el coeficiente global de transferencia de masa volumétrica en fase gaseosa (K_{Ga_e}).

El proceso de absorción de CO₂ con soluciones acuosas amoniacaes es netamente químico, por lo tanto, se involucraron algunos conceptos sobre cinética y términos como el factor de mejora (E) y el número de Hatta (Ha). Trabajos previos realizados sobre equilibrio químico, cinética y mecanismo de reacción entre el amoníaco y el CO₂, sirvieron de base para el desarrollo de su trabajo. En términos generales los resultados indicaron que el efecto de la velocidad de flujo del líquido, la presión parcial del CO₂ y la concentración de amoníaco afectaron significativamente al coeficiente global de transferencia de masa, mientras que la velocidad de flujo de gas tuvo poca influencia, como consecuencia, los autores concluyeron que la resistencia a la transferencia de masa se encontraba dominada principalmente por la fase líquida y no tanto por la fase gaseosa,

como ya lo han referenciando múltiples investigaciones para la absorción de CO₂. El experimento se desarrolló a presión atmosférica y 27°C de temperatura, en una columna cilíndrica de 2,4 m de altura y 0,15 m de diámetro interno, y una altura total de empaque de 2,0 m. El diseño novedoso del empaque con ventanas de derivación fue proporcionado por Polytron Technologies y los rangos de las principales variables operativas fueron de 1400 a 2300 m³/m²h para el caudal del gas, de 20 a 39 m³/m²h para el caudal del líquido, de 0,27 a 0,72 Kgmol/m³ para la concentración de amoníaco y de 2,8 a 8,0 Kpa para la presión parcial del CO₂ en la corriente de alimentación.

Como el K_{Ga_e} se encontraba relacionado con el factor de mejora, se aplicó una aproximación de pseudo-primer orden de reacción para el sistema de absorción que suponía que el factor de mejora era igual al número de Hatta y este a su vez proporcional a la concentración de amoníaco a la potencia de 0,50. Encontrándose una dependencia lineal entre las principales variables operacionales y el coeficiente global de transferencia de masa, lo que derivó el desarrollo de una correlación empírica satisfactoria para el cálculo de K_{Ga_e} . La fiabilidad de esta correlación se comprobó mediante simulación usando dinámica de fluidos computacional (DFC) y transferencia de masa computacional (CMT). La algoritmia se basó en el uso del método de volumen finito para los cálculos numéricos, y los resultados generales de simulación tuvieron consonancia con las mediciones experimentales para la absorción de CO₂ usando soluciones acuosas de amoníaco en torres contactoras empacadas.

Otra alternativa viable para reducir las emisiones de dióxido de carbono a la atmósfera es a partir del uso de soluciones acuosas de alcanolaminas, siendo la MEA el solvente más usado. El proceso de absorción química del CO₂ usando soluciones acuosas de MEA ha sido extensamente investigado y numerosas correlaciones se han propuesto para este sistema de absorción con el fin de determinar de forma precisa de coeficientes de transferencia y el área efectiva de transferencia de masa principalmente. El modelo de (Aboudheir, Tontiwachwuthikul, & Idem, 2007) fue modificado y aplicado por (deMontigny et al., 2006) con el objetivo de modelar el rendimiento en la transferencia de masa de la absorción de CO₂ con soluciones acuosas de MEA en una pequeña columna con empaques regulares de Sulzer DX. El absorbedor tenía un diámetro interno de 0,028 m, una altura total de empaque de 2,16 m y las condiciones experimentales de operación fueron de 5,4 a 12,6 m³/m²h para el caudal del líquido, un caudal del gas inerte de 30,7 a 30,9 Kgmol/m²h, un rango de concentración de MEA de 1 a 3 Kgmol/m³ y una concentración de CO₂ en la corriente de alimentación de 13,9 a 14,5%. Los principales parámetros del modelo fueron el área efectiva

de transferencia de masa (a_e) y los coeficientes locales de transferencia de masa para la fase líquida y gaseosa, k_L y k_G respectivamente. En vista que no encontraron publicación alguna, que brindara correlaciones específicas de los parámetros anteriormente mencionados para el empaque Sulzer DX ordenados regularmente.

Los investigadores emplearon por simplicidad y adaptación a las condiciones experimentales, el modelo propuesto por (Henriques de Brito et al., 1994) para el cálculo de k_G , y el de (Onda et al., 1968) para la determinación de k_L . También presentaron una modificación de la correlación del área efectiva de transferencia de masa propuesta por Henriques, tal que se tuviese en cuenta algunas consideraciones del diseño del empaque como, por ejemplo, el ángulo de inclinación. La modificación se hizo mediante regresión no lineal y los resultados del modelamiento fueron acertados con la experimentación, llegando a la conclusión sobre la flexibilidad de modelo de Aboudheir, que puede ser aplicado para un conjunto variado de empaques organizados tanto al azar como regularmente en las aplicaciones futuras de la ingeniería.

Según, (Aroonwilas, Tontiwachwuthikul, & Chakma, 2001) afirmaron que no solamente los parámetros operativos como la velocidad de flujo del líquido, la carga de CO_2 en el líquido y la temperatura de la fase líquida afectan drásticamente el valor de K_{Ga_e} , sino también los parámetros de diseño de la columna como la disposición del empaque y la distribución inicial del líquido, para el proceso de absorción de CO_2 usando soluciones acuosas de NaOH y MEA. Su estudio consistió en comparar el rendimiento de cuatro empaques industriales de acero inoxidable, Genpak 4A, Mellapak 500Y, Mellapak 500X y Optiflow dentro de un tren de absorción con 3 columnas de 0,1 m de diámetro y una altura total de sección empacada de 0,98 y 2,21 m dependiendo del objetivo de eliminación de CO_2 para cada ciclo de absorción, a escala piloto de laboratorio.

Los resultados manifestaron que el aumento en la velocidad de flujo del líquido aumentó el coeficiente global de transferencia de masa en fase gaseosa para estos empaques, evidentemente, se sabe que esta variación es diferente para cada tipo de empaque, encontrándose que para el empaque Mellapak 500Y, el valor de K_{Ga_e} aumentó en un factor de 2 cuando la carga del líquido se incrementó de 3,8 a 22,9 $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Asimismo, se encontró que un aumento en la temperatura del líquido con MEA mejoró el proceso de transferencia de masa dado que el aumento de la temperatura entre 25 y 36°C incrementó la constante de velocidad de reacción de segundo orden. No obstante, por encima de este rango, se reduce la eficiencia del proceso. El efecto que tuvo el incremento de la carga de CO_2 en la fase líquida fue una disminución del coeficiente global de

transferencia de materia, y por ende, de la eficiencia del proceso, encontrándose que un aumento de la concentración de CO_2 de 0,25 a 0,35 y 0,50 mol/mol reduce el valor de K_{Ga_e} en 40 y 90% respectivamente. Finalmente, el efecto que tuvo la disposición del empaque Mellapak 500Y sobre la eficiencia de absorción de CO_2 en MEA, fue que la rotación de sus elementos a 0° disminuyó en más de un 70% la eficiencia, mientras que para las rotaciones convención de 45° y 90° , los resultados obtenidos fueron razonables. La distribución inicial del líquido fue el parámetro que presentó el menor efecto sobre el rendimiento de absorción usando estos empaques regulares.

La absorción química de CO_2 en soluciones acuosas de AMP fueron también investigadas por (Aroonwilas & Tontiwachwuthikul, 1998), con la finalidad de evaluar la eficiencia en la transferencia de masa medida a partir del coeficiente global en una columna de absorción con empaques tipo Sulzer EX ordenados regularmente. La columna tenía 1,77 m de altura, un diámetro interno de 0,019 m y una altura total de la sección empacada de 1,10 m. Los empaques se dispusieron regularmente en capas giradas a 90° con relación a la anterior para obtener mejores resultados. Los autores afirmaron de acuerdo a su propia revisión bibliográfica que el AMP además de tener la misma forma impedida que el MEA, la relación teórica estequiométrica de reacción con CO_2 era mucho mayor, sin embargo, presenta una tasa relativamente más baja de absorción de CO_2 frente al MEA.

El coeficiente global de transferencia de masa para el sistema ensayado mostró una dependencia directamente proporcional con la velocidad de flujo del líquido y un aumento con la disminución de la presión parcial de CO_2 disminuye de 10 a 3 Kpa. Además, el flujo molar de la corriente gaseosa no afectó significativamente el coeficiente global de transferencia de masa, debido a que la resistencia a la transferencia estaba dominada principalmente por la fase líquida, lo que explica el aumento del coeficiente global con el incremento del flujo del líquido de 6,1 a $14,6 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$. Conviene subrayar de los resultados obtenidos, que el valor de K_{Ga_e} disminuyó en más de un 80% a medida que la carga de CO_2 en la fase líquida aumento de 0,15 a más de 0,50 mol CO_2 /mol amina; por el contrario, una aumento en la concentración de AMP incremento el valor de K_{Ga_e} por el simple hecho de acrecentarse el factor de mejora. Conocida todas estas relaciones funcionales de las variables operativas con la eficiencia del proceso de absorción de CO_2 en soluciones acuosas de AMP, le permitió a Aroonwilas proponer una correlación empírica que determinara con efectividad y fuera congruente con los valores experimentales de K_{Ga_e} para este sistema particular. En último lugar, los investigadores evaluaron el rendimiento del proceso

de absorción tanto para empaques estructurados u ordenados como para aquellos compilados al azar, de modo que se obtuvo un coeficiente de transferencia de masa nueve veces superior y una eficiencia casi cuádruple con el empaque estructurado.

Recientemente, el número de publicaciones sobre equilibrios de absorción de líquidos iónicos con CO₂, se ha incrementado exponencialmente, con el fin de investigar su potencialidad para futuras separaciones de gases ácidos a escala industrial que permitan minimizar la contaminación y controlar el cambio climático. Desde el punto de vista teórico, los líquidos iónicos, son una buena alternativa para diversos procesos de absorción y extracción de una gran gama de contaminantes, debido a sus singulares características, tales como, como presión de vapor despreciable, baja inflamabilidad, alta capacidad calorífica, elevada conductividad eléctrica, propiedades de solubilidad y miscibilidad atractivas, bajo punto de fusión y estabilidad térmica y electroquímica, entre otras (Endres & Zein El Abedin, 2006). Sin embargo, hasta la fecha, no se ha reportado un trabajo detallado sobre el dimensionamiento o simulación en Aspen-Hysis de columnas empacadas convencionales que ejemplifique realmente la viabilidad de las operaciones unitarias como la absorción física a escala piloto o industrial. Los escasos trabajos encontrados hacen referencia al uso de cámaras de absorción de lecho rotativo (RPB) y los estudios de simulación desarrollados en las investigaciones reportadas, se han hecho por simulación molecular del equilibrio químico y por dinámica de fluidos computacional (DFC) para equipos contactores.

Los líquidos iónicos presentan una desventaja significativa, y es su pobre fluidez dada su alta viscosidad, lo que dificulta su aplicación directa y continua, aun así, (Zhang, Wang, Xiang, Zeng, & Chen, 2011) y (Ziobrowski et al., 2016) han logrado su aplicación a escala de laboratorio y piloto. Respectivamente el primer estudio reportó por primera vez la absorción de CO₂ con el líquido iónico hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazolio ([bmim][PF₆]) en un contactor gas-líquido de lecho empacado rotativo (RPB) de diámetro interno y externo respectivamente de 20 y 60 mm, 11 capas de embalaje fueron dispuestas y para una comparación experimental, se hizo un estudio de absorción en una columna convencional de 2,5 cm de diámetro interno y 20 cm de altura empacada, con anillos de malla de 3x3 mm; este se convirtió en el único trabajo encontrado sobre absorción en torres convencionales, sus dimensiones son muy pequeñas y no se especifica ningún protocolo de diseño del mismo. Los resultados obtenidos, revelan que el RPB presenta mejores ventajas que su análogo, y que el coeficiente volumétrico de transferencia de masa del lado del líquido mejoró notablemente al aumentar la velocidad de rotación. En un solo ciclo de contacto

gas-líquido en el RPB se logró que la relación de saturación de CO₂ en el líquido iónico fuera del 60% y la desviación de los resultados del coeficiente de transferencia de masa fuera del 15% con relación a la columna convencional, esto demuestra que este tipo de configuraciones representa uno de los mejores modelos contactores y que requerirá especial interés para su perfección futura.

La segunda investigación citada, ejemplifica un caso de absorción química en líquidos iónicos de acetato de 1-etil-3-metilimidazolio, acetato de 1-butil-3-metilimidazolio y 15% en peso de solución de MEA por separado, en una columna empacada con dimensiones de 0,05 m de diámetro y 0,35 m de longitud, rellena de anillos Raschig, para esta columna de laboratorio, los flujos operacionales para los cuales la columna no se encontraba inundada fueron 1,3 a 2,3 L/min para el gas y 0,05 – 0,51 L/min para el líquido. La absorción se realizó a una temperatura de 40°C y baja presión para simular las condiciones a las cuales salen los gases del proceso de postcombustión. Los autores concluyeron de los resultados de absorción que LIs pueden ser unos buenos candidatos para la eliminación de CO₂, dado que la eficiencia en la separación es mucho mayor que para la solución de MEA al 15% para tiempos más largos de operación. No obstante, la viscosidad y el costo de operar equipos con LIs sigue siendo una limitación para su aplicación a mayores escalas, por tanto, hay mucho camino que recorrer en términos investigativos.

Muchos estudios realizados han demostrado la buena solubilidad del CO₂ en hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazolio [bmim][PF₆] y como es bien conocido, por muchos investigadores, como (Cadena et al., 2004), la solubilidad del dióxido de carbono en los solventes orgánicos convencionales, es mucho mejor que la observada en los líquidos iónicos. A pesar de esto, Cadena reportó que las interacciones más fuertes se encuentran para el anión [PF₆] y atribuyó que la buena solubilidad que tiene el CO₂ en los líquidos iónicos se debe a la intensidad de estas fuertes interacciones intermoleculares entre el CO₂ y las redes catiónicas y aniónicas de la sal que llena los intersticios en el fluido (Babamohammadi et al., 2015; Cadena et al., 2004).

En consecuencia a lo mencionado, y a la disponibilidad de datos termodinámicos para el [bmim][PF₆] reportados por (Valderrama, Sanga, & Lazzús, 2008) decidimos elegir al hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazolio como líquido absorbente puro para el proceso de absorción física de CO₂ y estudiar la viabilidad de esta operación ya sea a escala piloto o industrial.

Tabla 2. Parámetros fisicoquímicos mínimos de la fase líquida necesarios para el diseño de la torre contactora empacada (tomado de Babamohammadi et al., 2015; Zhang et al., 2011)

Abreviación	T, K	P, Kg/m ³	μ , Pa.s	σ , N/m	D, 10 ⁻¹¹ m ² s	H, bar
[bmim][PF ₆]	293	1371,7	0,3682	0,04957	4,575	43,927
	298	1367,4	0,2609	0,04851	5,310	50,293
	305	1361,5	0,1686	0,04703	6,726	59,207
	315	1353,4	0,1021	0,04490	9,438	71,940
	326	1344,3	0,0710	0,04257	12,64	85,946
	336	1336,1	0,0591	0,04044	14,95	98,679

La Tabla 2 muestra las propiedades físicas de la fase líquida en función de la temperatura tomados del trabajo investigativo de Zhang y colaboradores, en 2011 que de hecho es la única investigación que reporta el uso del líquido iónico [bmim][PF₆] sobre columnas empacadas, adicionalmente se tomaron las constantes de la ley de Henry en unidades de bar, reportadas por Babamohammadi en 2015, las cuales se adaptaron a las temperaturas de operación reportadas por la investigación precedente mencionada, usando el siguiente modelo lineal con un coeficiente de correlación del 0,999.

$$H(\text{bar}) = 1,2733 \times T(\text{K}) - 329,15 \quad (7)$$

Capítulo III

3. Metodología

3.1 Correlaciones empíricas de diseño de Billet y Schultes.

Para el dimensionamiento y el diseño hidráulico de la torre de absorción empacada en contracorriente para separación de CO₂ de efluentes gaseosos, se siguió el protocolo establecido por (Reinhard Billet & Schultes, 1991, 1993). El modelo teórico desarrollado por estos investigadores, permite describir la transferencia de masa en términos de los parámetros hidráulicos y de transporte de los empaques, así como también, de las propiedades fisicoquímicas que influyen tanto en la fase gaseosa, como líquida, tales como, densidad, viscosidad dinámica, tensión superficial y difusividad. Cabe resaltar como lo menciona Billet en 1993, que las relaciones derivadas del modelo son aplicables a todas la columnas con operación en contracorriente sin importar si los empaques se han arrojado en la torre de manera aleatoria o regular.

3.1.1 Balance general de materia.

El flujo másico de la corriente gaseosa se calcula con la ecuación (8), conociendo previamente el caudal o flujo volumétrico de la fase gaseosa.

$$G_1 = Q_1 \rho_{G1} \quad (8)$$

La masa molecular promedio de la mezcla gaseosa se calculó empleando la siguiente relación:

$$M_G = y_{CO_2} M_{CO_2} + y_{aire} M_{aire} \quad (9)$$

Y su densidad fue determinada mediante la ecuación de los gases ideales por la relación (10)

$$\rho_G = \frac{PM_G}{RT} \quad (10)$$

El flujo molar de la corriente gaseosa de entrada se obtiene como el producto del caudal por su densidad y dividido entre la masa molecular promedio calculada anteriormente, a las mismas condiciones de presión y temperatura de operación.

$$G_1 = \frac{Q_1 \rho_{G1}}{M_G} \quad (11)$$

Una vez determinado el flujo molar de gas, es posible determinar la cantidad de aire que entra como componente inerte de la corriente, a partir de

$$G' = G_1(1 - y_1) \quad (12)$$

Como el algoritmo de Billet emplea en la mayoría de los cálculos relaciones molares y no fracciones molares para el componente absorbido. Se hace estrictamente necesario hacer las conversiones mediante las siguientes ecuaciones de concentración de CO₂ tanto para la entrada como para la salida de la columna

$$Y_1 = \frac{y_1}{1 - y_1} \quad \wedge \quad Y_2 = Y_1 \left(1 - \frac{\%R}{100} \right) \quad (13)$$

El cálculo de Y₂ se basó teniendo en cuenta la recuperación porcentual especificada para el proceso de absorción, la cual fue del 80%.

Para determinar la máxima concentración del líquido a la salida de la columna expresada en relación molar, se tiene en cuenta las condiciones del equilibrio de Henry, pues esta corresponde al empleo de la mínima cantidad de líquido que se encontrara en equilibrio con el gas de entrada.

$$Y = m_{YX} X \rightarrow X_{1,m\acute{a}x} = \frac{Y_1}{m_{YX}} \quad (14)$$

El flujo del líquido iónico se calculó empleando una cantidad 30% superior a la mínima a partir del siguiente balance de materia

$$\left(\frac{L'}{G'} \right)_{\min} = \frac{Y_1 - Y_2}{X_{1,m\acute{a}x} - X_2} \rightarrow L'_{\min} = G' \left(\frac{Y_1 - Y_2}{X_{1,m\acute{a}x} - X_2} \right) \quad (15)$$

$$L = 1,3 \cdot L'_{\min} = L_2 \quad (16)$$

Finalmente, se recalcula la concentración del líquido a la salida mediante un balance elemental de materia en términos de los componentes inertes

$$G'(Y_1 - Y_2) = L'(X_1 - X_2) \quad (17)$$

3.1.2 Coeficiente de resistencia.

El parámetro de resistencia ξ_s , es un factor dependiente de la carga del líquido y del gas, y de la geometría del empaque, el cual permite el estudio de la transición del flujo laminar de la fase líquida y nos indica la forma de canales de flujo dentro del equipo absorberlos, a tal punto de distinguir las fases continuas y dispersas presentes (Reinhard Billet & Schultes, 1991, 1993).

Como se puede apreciar en la ecuación (18), el factor de resistencia se expresa en términos de la tasa de flujo L/G, la relación de densidades y de viscosidad de las fases implicadas en el mecanismo

de absorción. En esta ecuación la constante de punto de carga denominada C_s es específica del empaque y el valor de η_s es una valor empírico que se determina en función de la relaciones (19) y (20) para cierto rango de valores establecidos.

$$\zeta_s = \frac{g}{C_s^2 \left[\frac{L}{G} \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} \left(\frac{\eta_L}{\eta_G} \right)^{0.4} \right]^{2\eta_s}} \quad (18)$$

$$\frac{\dot{L}}{\dot{G}} \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} \leq 0,4 \rightarrow \eta_s = -0,326 \quad (19)$$

$$\frac{\dot{L}}{\dot{G}} \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} > 0,4 \rightarrow \eta_s = -0,723 \quad (20)$$

3.1.3 Velocidad del vapor y del líquido en el punto de carga, cálculo del área de la sección transversal.

Una vez determinado el factor de resistencia, es posible determinar la velocidad superficial en el punto de carga para el flujo del líquido iónico y el efluente gaseoso.

$$u_{G,s} = \left(\frac{g}{\zeta} \right)^{1/2} \left[\frac{\varepsilon}{a^{1/6}} - a^{1/2} \left(\frac{12 \eta_L}{g \rho_L} u_L \right)^{1/3} \right] \left(\frac{12 \eta_L}{g \rho_L} u_L \right)^{1/6} \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_G}} \quad (21)$$

$$u_L = \frac{\dot{L}}{\dot{G}} F_G \frac{\sqrt{\rho_G}}{\rho_L} = \frac{\dot{L}}{\dot{G}} u_G \frac{\rho_G}{\rho_L} \quad (22)$$

Este sistema de ecuaciones simultaneas no lineales, se resuelve por iteración numérica usando herramientas computacionales como el *Solver* de Excel o de Wolfram Mathematica, pues es un sistema cuya solución a mano, empleando lápiz y calculadora, es muy tedioso de resolver. Posteriormente, el área de la sección transversal de la columna es fácilmente calculable una vez conocido el flujo de gas a la salida, la densidad de la mezcla y la velocidad del gas anteriormente calculada.

$$A_s = \frac{G_2 / 3600}{\rho_G \cdot u_G} \quad (23)$$

Ya conocido el área de la sección transversal, se calcula por (24) el diámetro de la columna y se aproxima en decimales para hacer un recalcu de las velocidades superficiales del líquido y del gas.

$$d_s = \sqrt{\frac{4A_s}{\pi}} \quad (24)$$

3.1.4 Hold-up teórico del líquido.

El hold-up del líquido se calcula considerando el parámetro hidráulico del empaque y algunas propiedades del líquido, relacionada con su hidrodinámica. Otra alternativa es determinarlo a partir del número de Reynolds y del número de Froude, como se muestra a continuación

$$h_L = \sqrt[3]{\frac{12}{g} a^2 \cdot \frac{\eta_L}{\rho_L} u_L} = 12^{1/3} \left(\frac{u_L \rho_L}{a \eta_L} \right)^{-1/3} \left(\frac{u_L^2 a}{g} \right)^{1/3} = 12^{1/3} \cdot R_{eL}^{-1/3} \cdot F_{rL}^{1/3} \quad (25)$$

3.1.5 Estimación del diámetro efectivo del empaque y del factor de pared.

Para hacer el cálculo a posteriori de la caída de presión es necesario conocer previamente el número de Reynolds para la fase gaseosa y a su vez el valor del diámetro efectivo del empaque y del factor de pared. Aunque la mayoría de las correlaciones que se conocen en la actualidad son un modelo empírico o semiempírico, Billet buscó la manera de hacer relaciones teóricas que sirviera para un amplio espectro de empaques diseñados. Las relaciones son

$$d_p = 6 \left(\frac{1 - \varepsilon}{a} \right) \quad (26)$$

El diámetro efectivo del empaque se determina conociendo dos de los cinco parámetros hidráulicos del empaque, uno relacionado con su tamaño y otro con la fracción de volumen vacío.

$$\frac{1}{f_s} = 1 + \frac{4}{a d_s} \quad (27)$$

El factor Wall o factor de pared (f_s), es una medida del cambio en la resistencia causada por humedecer la superficie del empaque y se encuentra íntimamente relacionado con el área humedecida y el área de la superficie del líquido en los canales de flujo.

3.1.6 Determinación del régimen de flujo para las fases presentes.

El régimen de flujo para la fase gaseosa y líquida, se calcula como se muestra enseguida

$$R_{eG} = \frac{u_G d_p \rho_G}{(1 - \varepsilon) \eta_G} f_s \quad (28)$$

$$R_{eL} = \frac{u_L \rho_L}{a \eta_L} \quad (29)$$

Conocer el número de Reynolds es de vital importancia porque además de ser un parámetro clave para el cálculo de la caída de presión, indica si se trata de un flujo de tipo laminar o turbulento.

3.1.7 Factor de humectación para el empaque y factor de resistencia en flujo gaseoso.

El factor de humectación para el empaque se calcula mediante la correlación (30); el segundo término para efectos prácticos se convierte en la unidad en el rango debajo del punto de carga.

$$W = \left[\exp\left(\frac{R_{eL}}{200}\right) \right] \left(\frac{h_L}{h_{L,s}} \right)^{0.3} \quad (30)$$

El factor de resistencia es una modificación del factor de fricción y nos indica una medida del tipo de retención estática que se produce al entrar en contacto la carga gaseosa con el lecho empacado seco. Ya está dado por Billet mediante la siguiente expresión empírica, la cual fue obtenida mediante el modelamiento de los resultados experimentales de la absorción de 24 sistemas de equilibrio bajo estudio con más de 50 tipos de empaques distintos. Los resultados arrojaron un valor numérico para el exponente x de 1,5.

$$\zeta_L = C_P W \left(\frac{64}{R_{eG}} + \frac{1.8}{R_{eG}^{0.08}} \right) \left(\frac{\varepsilon - h_L}{\varepsilon} \right)^{(3-x)} \quad (31)$$

3.1.8 Caída de presión por unidad de altura en el flujo de gas.

El cálculo de caída de presión por unidad de altura del lecho empacado se calcula por la expresión (32), teniendo en cuenta muchos de los parámetros hidráulicos determinados anteriormente como el factor de humectación del empaque, el factor de pared, el hold-up teórico del líquido y el diámetro de la columna, como sigue

$$\frac{\Delta P}{H} = \zeta_L \frac{a}{(\varepsilon - h_L)^3} \cdot \frac{u_v^2}{2} \rho_G \cdot \frac{1}{f_s} = \zeta_L \left(\frac{a}{2} + \frac{2}{d_s} \right) \frac{1}{(\varepsilon - h_L)^3} \cdot u_G^2 \rho_G \quad (32)$$

3.1.9 Diámetro hidráulico y área de contacto de fase

El diámetro hidráulico se determina fácilmente por la siguiente expresión y se encuentra relacionado intrínsecamente con la longitud de la trayectoria de flujo en el espacio libre entre los elementos del empaque

$$d_h = 4 \frac{\varepsilon}{a} \quad (33)$$

La relación específica de áreas denominado área de contacto de fase mostrado en la expresión (34), se calcula al dividir el área interfacial efectiva y el área total superficial por unidad de volumen de empaque.

$$\frac{a_{ph}}{a} = 3\varepsilon^{0.5} \left(\frac{u_L \rho_L}{a \eta_L} \right)^{-0.2} \left(\frac{u_L^2 \rho_L}{\sigma_L a} \right)^{0.75} \left(\frac{u_L^2 a}{g} \right)^{-0.45} \quad (34)$$

3.1.10 Altura de una unidad de transferencia en la fase líquida y gaseosa.

La altura de la unidad de transferencia en la fase líquida se calcula con la expresión (35) y tiene en cuenta algunas propiedades físicas del solvente como es la viscosidad dinámica, la densidad y la difusividad; adicionalmente contempla el parámetro hidráulico (C_L) del empaque que relaciona la forma y el tamaño del mismo.

$$NTU_{OG} = \frac{1}{C_L} g^{-1/6} \left(\frac{\eta_L}{\rho_L} \right)^{1/6} \left(\frac{d_h}{D_L} \right)^{1/6} \left(\frac{u_L}{a} \right)^{2/5} \frac{1}{a_{ph}/a} \lambda \quad (35)$$

De manera similar, se determina la unidad de transferencia de la fase gaseosa considerando las propiedades físicas de la mezcla gaseosa. El parámetro C_v del empaque se encuentra reportado en tablas y es característico de la geometría del empaque seleccionado. Los valores de m y n para la ecuación (36), se determinaron mediante modelamiento de datos experimentales, encontrando los autores de esta metodología de diseño unos valores de exponentes de 3/4 y 1/3 respectivamente.

$$HTU_G = \frac{1}{C_v} \cdot \frac{d_h^{1/2}}{a^{3/2}} (\varepsilon - h_L)^{1/2} \frac{u_G}{D_G} \left(\frac{a \eta_G}{u_G \rho_G} \right)^m \left(\frac{D_G \rho_G}{\eta_G} \right)^n \frac{1}{a_{ph}/a} \quad (36)$$

3.1.11 Diferencias en las cargas de gas.

Las diferencias en la composición de gas se determinaron teniendo en consideración la concentración del componente difusivo tanto para la base, como la cúspide de la columna absorbadora como se muestra enseguida

$$\Delta Y_1 = Y_1 - m_{YX} X_1 \quad (37)$$

$$\Delta Y_2 = Y_2 - m_{YX} X_2 \quad (38)$$

3.1.12 Número global de unidades de transferencia de masa en el lado del gas.

Conocida las diferencias en las cargas de gas, se calcula con relativa facilidad el número global de unidades de transferencia a partir de una media logarítmica de las composiciones y diferencias conocidas.

$$NTU_{OG} = \frac{Y_1 - Y_2}{\Delta Y_1 - \Delta Y_2} \cdot \ln \left(\frac{\Delta Y_1}{\Delta Y_2} \right) \quad (39)$$

3.1.13 Factor de separación y altura total de una unidad de transferencia.

El factor de separación se determina como sigue, conociendo el valor de la constante de equilibrio de Henry

$$\lambda = m_{YX} \cdot \left(\frac{1}{L/G} \right) \quad (40)$$

La altura total de la unidad de transferencia y del lecho empacado se calcula mediante el modelo HTU-NTU para el proceso de absorción, como se muestra en (41) y (42)

$$HTU_{OG} = HTU_G + \lambda HTU_L \quad (41)$$

3.1.14 Altura del lecho empacado y altura equivalente a un plato teórico.

$$H = HTU_{OG} \cdot NTU_{OG} \quad (42)$$

El rendimiento del transporte de materia para una torre absorbidora de lecho empacado, a menudo se expresa por la altura equivalente a un plato teórico (HETP). De acuerdo con (Wang, Yuan, & Yu, 2005) los factores que generalmente afecta al valor de HETP son el tipo y tamaño de empaque, propiedades del sistema de absorción, dimensión de la torre y condiciones de operación. Su valor se determina a partir de (43), cuya deducción proviene del formalismo matemático y conceptual de la teoría de la doble película e involucra las alturas de una unidad de transferencia de fase líquida y gaseosa.

$$HETP = \frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} (HTU_G \cdot HTU_L) \quad (43)$$

3.1.15 Determinación de los coeficientes de transferencia de masa

Para el cálculo de los coeficientes de transferencia de masa tanto para la fase líquida como para la gaseosa, se necesita primero conocer el valor de la constante de difusividad para la mezcla aire-CO₂. Esto se logra aplicando la ecuación semiteórica propuesta por Chapman y Enskog (1918).

$$D_G = \frac{(1,8583 \times 10^{-3})(T)^{3/2}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{AB}} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}} \quad (44)$$

El parámetro de la función de potencial de Lennard – Jones, denominado diámetro de colisión se calcula por (45)

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \quad (45)$$

La integral de colisión presentada en (46) es una función que tiene en cuenta las interacciones intermoleculares, basadas en los potenciales de Lennard-Jones, la energía de interacción intermolecular presentada en (47) y los valores de ϵ_A y ϵ_B , son sacados de tablas ya bien conocidas, y se calcula la relación (48) para buscar mediante interpolación o por la relación empírica (49) en los casos que lo amerite, el valor asociado a la integral de choque Ω_{AB} , para reemplazarse en la ecuación (44)

$$\Omega_{AB} = f(kT / \epsilon_{AB}) \quad (46)$$

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B} \Rightarrow \frac{\epsilon_{AB}}{k} = \sqrt{\left(\frac{\epsilon_A}{k}\right) \left(\frac{\epsilon_B}{k}\right)} \quad (47)$$

$$\frac{kT}{\epsilon_{AB}} \quad (48)$$

$$\Omega_{AB} = 1,075 \left(\frac{kT}{\epsilon_{AB}}\right)^{-0,1615} + 2 \left(\frac{10kT}{\epsilon_{AB}}\right)^{-0,74 \text{ Log}(10kT/\epsilon_{AB})} \quad (49)$$

Las correlaciones para los coeficientes de transferencia de masa fueron propuestas por Billet y colaboradores, los cuales midieron 31 sistemas distintos de binarios y ternarios usando 67 diferentes tipos y tamaños de empaques en columnas de diámetro variable, entre 0,06 y 1,4 m (Benítez, 2009).

La correlación presentada para el coeficiente del lado del gas es:

$$k_y = 0,1304 C_v \left(\frac{D_G P}{RT} \right) \left[\frac{a}{\varepsilon (\varepsilon - h_L)^{0,5}} \right] \left(\frac{Re_G}{K_W} \right)^{3/4} S_{C_G}^{2/3} \quad (50)$$

Donde el número de Schmidt se calcula por la ecuación (51) y la velocidad del líquido (u_L) se determinó previamente.

$$S_{C_G} = \frac{\mu_G}{\rho_G D_G} \quad (51)$$

Como resultado del estudio de Billet, la correlación publicada para el coeficiente de transferencia del lado del líquido es

$$k_L = 0,757 C_L \left[\frac{D_L a u_L}{\varepsilon h_L} \right]^{0,5} \quad (52)$$

Luego, el cálculo del coeficiente global de transferencia de masa del lado del gas se determina usando (55), para esto, se calcula antes que nada la concentración del solvente, y se reemplaza en la ecuación (54) para interconvertir los coeficientes locales de transferencia de masa del lado del líquido. Una vez culminado el cálculo, se reemplaza el valor obtenido en las ecuaciones (50) y (54) en (55).

$$C_L = \frac{\rho_L}{M_L} \quad (53)$$

$$k_x a_{ph} = k_L a_{ph} C_L \quad (54)$$

$$K_y a_{ph} = \frac{1}{\frac{1}{k_y a_{ph}} + \frac{\varphi}{k_x a_{ph}}} \quad (55)$$

El coeficiente de distribución se calcula dividiendo el valor de la constante de Henry entre la presión de operación.

$$\varphi = \kappa_H / P \quad (56)$$

El número de etapas de equilibrio, se determinó empleando la ecuación de Kremser – Brown - Souder

$$N = \frac{\text{Log} \left[\frac{Y_1 - m_{YX} X_2 \left(1 - \frac{1}{A} \right) + \frac{1}{A}}{Y_2 - m_{YX} X_2 \left(1 - \frac{1}{A} \right) + \frac{1}{A}} \right]}{\text{Log} A} \quad (57)$$

Capítulo IV

4. Resultados

4.1 Dimensionamiento de una torre de absorción empacada en contracorriente para el proceso de captura de CO₂

Considerando el diseño metodológico mencionado en la sección 3 del presente documento y teniendo en cuenta algunas especificaciones iniciales como propiedades de las fases, presión y temperatura de operación, pendiente de la ecuación de Henry, velocidad volumétrica de flujo del gas y composición de CO₂ en el gas de entrada y de salida, se logró dimensionar la columna absorbidora empacada con ciertas limitaciones, pero, primeramente, se validó el protocolo con uno reportado por (Billet, 1995) para el diseño de un absorbedor que elimina acetona del aire de proceso. Los resultados de la validación del algoritmo implementado en Excel y los reportados en la literatura se presentan en las tablas 3 - 7.

Tabla 3. Resultados de la validación del protocolo de Billet. Balance General de materia (Fuente: autor)

BALANCE GENERAL DE MATERIA							
	G ₁	Y ₁	Y ₂	G'	L' _{min}	L ₂	G ₂
	/(Kgmol/h)			/(Kgmol/h)		/(Kgmol/h)	
Calc.	81,24	0,01	4,040x10 ⁻⁵	80,43	185,38	259,53	81,26
Lit.	80,25	0,01	4,291x10 ⁻⁵	79,45	183,04	256,26	79,45
% dif.	1,23	0	5,84	1,23	1,28	1,28	2,28

Tabla 4. Resultados de la validación del protocolo de Billet.

Primera serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)

COEFICIENTE DE RESISTENCIA, VELOCIDADES EN EL PUNTO DE CARGA, ÁREA DE LA SECCIÓN TRANSVERSAL Y DIÁMETRO DE LA TORRE					
	ζ_s	u_G /(m/s)	u_L /(m/s)	A_s /m ²	d_s /m
Calc.	0,625	1,988	4,65x10 ⁻³	0,2827	0,60
Lit.	0,629	1,988	4,65x10 ⁻³	0,2827	0,60
% dif.	0,64	0	0	0	0

Como se puede apreciar en los resultados, el algoritmo ejecutado tiene un excelente nivel de correspondencia con el cálculo de los parámetros hidráulicos de la columna reportados en los trabajos de Billet. El porcentaje de diferencia entre las estimaciones realizadas y las reportadas, no

fue superior del 6% y estas pequeñas fluctuaciones en los valores son ocasionados por que se buscaron en la literatura científica las propiedades físicas de la fase líquida y gaseosa con las cuales se experimentó. El objetivo de hacer una propia búsqueda y no utilizar de inmediato los datos de propiedades que reportaba Billet en su estudio, fue para aproximarnos más a la realidad del trabajo investigativo, pues entre autores las mediciones experimentales presentan ciertas variaciones o márgenes de error. Cabe resaltar que al emplear los datos de propiedades que se reportaban en el especializado texto *-Packed Towers in processing and environmental technology, Reinhard Billet-* los márgenes de error en los cálculos fueron del 0%.

Tabla 5. Resultados de la validación del protocolo de Billet. Segunda serie de parámetros hidráulicos obtenidos
(Fuente: autor)

HOLDUP DEL LÍQUIDO, DIÁMETRO DEL EMPAQUE, FACTOR DE PARED Y NÚMERO DE REYNOLDS					
	$h_L /(\text{m}^3/\text{m}^3)$	d_p /m	f_s	R_{eG}	R_{eL}
Calc.	0,0388	$2,620 \times 10^{-3}$	0,9429	6624,57	48,74
Lit.	0,0387	$2,618 \times 10^{-3}$	0,9429	6411	48,12
% dif.	0,26	0,08	0	3,33	1,29

Tabla 6. Resultados de la validación del protocolo de Billet. Tercera serie de parámetros hidráulicos obtenidos
(Fuente: autor)

FACTOR DE HUMECTACIÓN, FACTOR DE RESISTENCIA, CAÍDA DE PRESIÓN, DIÁMETRO HIDRÁULICO Y ÁREA DE CONTACTO DE FASE					
	W	ζ_L	$\Delta P/H$	d_h	a_{ph}/a
Calc.	1,276	0,823	289,37	0,0346	0,675
Lit.	1,272	0,823	277,20	0,0346	0,672
% dif.	0,31	0	4,39	0	0,45

Tabla 7. Resultados de la validación del protocolo de Billet. Cuarta serie de parámetros hidráulicos obtenidos

(Fuente: autor)

ALTURA DE UNA UNIDAD DE TRANSFERENCIA, N° GLOBAL DE UNA UNIDAD DE TRANSFERENCIA, FACTOR DE SEPARACIÓN, ALTURA DE UNA UNIDAD DE TRANSFERENCIA Y ALTURA DEL LECHO EMPACADO						
	HTU_L	HTU_G	NTU_{OG}	λ	HTU_{OG}	H
Calc.	0,541	0,451	15,092	0,7243	0,843	12,70
Lit.	0,539	0,456	14,826	0,7174	0,843	12,49
% dif.	0,37	1,09	1,79	0,96	0	1,68

Para el cálculo de la velocidad del gas, la caída de presión, el régimen de flujo gaseoso y líquido, y los coeficientes de transferencia de materia para determinar la altura de la sección empacada, se necesitaron las propiedades físicas de la fase gaseosa y la del solvente puro a las condiciones de entrada y de operación de la columna, a presión de 1 atm y temperatura de 303,15 K. Las propiedades físicas del líquido iónico y del efluente gaseoso industrial se muestran a continuación, en la tabla 8.

Tabla 8. Especificaciones iniciales para la aplicación del algoritmo (Fuente: autor)

PROPIEDADES FÍSICAS DE LA FASE LÍQUIDA		PROPIEDADES FÍSICAS DE LA FASE GASEOSA		VALORES DE ENTRADA	
M_L /(Kg/Kgmol)	226,03	M_G /(Kg/Kgmol)	30,77	P /KPa	101,325
ρ_L /(Kg/m ³)	1197,2	ρ_G /(Kg/m ³)	1,237	T /K	303,15
η_L /(Pa·s)	8,46x10 ⁻²	η_G /(Pa·s)	1,80x10 ⁻⁵	m_{YX}	57,8
D_L /(m ² /s)	4,42x10 ⁻²	D_G /(m ² /s)	1,54x10 ⁻⁵	Q_{G1} / (m ³ /h)	130
σ_L /(Kg/s ²)	8,26			R	0,8
				y_1	0,12

Las propiedades físicas de la fase gaseosa fueron estimadas usando los datos de equilibrio para la mezcla aire-CO₂ reportados en el libro de Billet, mientras que las propiedades del líquido iónico, las cuales son más críticas por ser un solvente no convencional, fueron tomadas de diferentes fuentes bibliográficas, entre las cuales, por citar, aparecen (Freire et al., 2007) para tensión superficial, (Shiflett & Yokozeki, 2005) para difusividad, (Harris, Kanakubo, & Woolf, 2007) para viscosidad y densidad y (Babamohammadi et al., 2015) para constante de Henry.

Tabla 9. Parámetros hidráulicos y de transferencia de masa del tipo de empaque utilizado (Fuente: autor)

PARÁMETROS HIDRÁULICOS		PARÁMETROS DE TRANSFERENCIA DE MASA	
d	110	C_L	1,192
ε	0,952	C_v	0,41
C_s	2,725		
C_h	0,784		
C_p	0,763		

Los parámetros hidráulicos y de transferencia de materia especificados en (Seader, 2011) para el empaque metálico de anillo Pall de 50 mm se muestra en la Tabla 9. Los resultados obtenidos del dimensionamiento se especificaron para este tipo de empaque y se contempló para futuros trabajos realizar una evaluación de empaques y determinar su efecto sobre ciertas características del proceso de transferencia de materia.

Es importante recalcar que existe una gran complejidad a la hora de diseñar equipos de operaciones unitarias y fueron varios los ensayos de diseño con distintos protocolos estandarizados que se probaron en esta investigación, no obstante, no todos daban resultados satisfactorios, debido a que la alta viscosidad de los líquidos iónicos y el alto valor de la constante de Henry dificultaba muchas veces los cálculos.

Una de las metodologías convencionales con las que se practicó, fue usando la gráfica de Lobo para la determinación de la velocidad de inundación o el método de Leva por sus siglas GDPC denominado correlación generalizada de caída de presión para la determinación de la caída de presión en el lecho empacado. Sin embargo, los resultados no eran muy razonables con las dimensiones de la columna obtenida, de esta manera, al realizar una investigación exhaustiva, se descubrió en (Heymes, Manno Demoustier, Charbit, Louis Fanlo, & Moulin, 2006) que esta metodología es solamente precisa para el caso de soluciones acuosas o lo más parecidas a ellas, fuera de estos sistemas los errores pueden ser cercanos o superiores al 60% en la predicción de la caída de presión a lo largo del lecho empacado. A la luz de la actual consulta de literatura, el primer obstáculo presentado es que no existió ningún reporte sistemático sobre el diseño hidráulico de torres contactoras empacadas empleando líquido iónico como solvente de absorción, si bien, es cierto, que existe algunas investigaciones sobre el proceso de absorción utilizando estos solventes, la mayoría son de tipo computacional y los experimentales se ha realizado sobre columnas a nivel

piloto de laboratorio que fueron prediseñadas para sistemas químicos comunes y se emularon solo en su funcionamiento u operatividad para sistemas con LI.

El único reporte encontrado sobre el proceso de absorción usando líquidos viscosos pero no con LI fue el anteriormente mencionado (Heymes et al., 2006). En esta investigación, se empleó un absorbente 10 veces más viscoso que el agua a temperatura ambiente llamado DEHA o di(2-etilhexil)adipato y se evaluó la hidrodinámica de una columna ya existente en el laboratorio, es decir, no fue diseñada para este propósito, cuyas dimensiones eran de 0,1 m de diámetro interno, una altura total y una altura del lecho empacado de 2,5 m y 1 m respectivamente, con empaques de anillos Hiflow, entre otras características. La evaluación de la hidrodinámica específicamente en términos de caída de presión, retención de líquido y punto de inundación se realizó con los modelos robustos de Miyahara y Takahashi (1992), Billet y Schultes (1993) y Mackowiak (1991); de los cuales el modelo de Billet se ajustó de la mejor manera al modelamiento de los datos obtenidos del proceso de absorción con este solvente viscoso.

A causa de esto, se decidió implementar este protocolo de diseño con el fin de obtener el mejor dimensionamiento posible. Aun así, a pesar de que el método se aplica para un amplio rango de viscosidades comprendidas entre 0,26 a 185 mPa·s, el cual es útil para nuestro LI, todavía no se considera un modelo perfecto para el dimensionamiento de torres absorbedoras con líquidos iónicos ya que su construcción no fue para este objetivo. La tarea principal será diseñar a futuro nuevas correlaciones empíricas o modelos semiempíricos específicos para el cálculo de la retención de líquido y caída de presión con absorbentes altamente viscosos. Por tanto, el primer diseño conceptual para la captura de CO₂ usando líquido iónico, se reporta en el presente trabajo y sus resultados se presentan en la tabla 10 – 14, cuya programación de fórmulas y cálculos fueron validadas previamente.

Tabla 10. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO₂ con LI. Balance general de materia. (Fuente: autor)

BALANCE GENERAL DE MATERIA						
G ₁	Y ₁	Y ₂	G'	L' _{min}	L ₂	G ₂
/(Kgmol/h)			/(Kgmol/h)	/(Kgmol/h)	/(Kgmol/h)	/(Kgmol/h)
5,226	0,1364	0,0273	4,599	212,66	276,46	5,224

Tabla 11. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO₂ con LI. Primera serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)

COEFICIENTE DE RESISTENCIA, VELOCIDADES EN EL PUNTO DE CARGA, ÁREA DE LA SECCIÓN TRANSVERSAL Y DIÁMETRO DE LA TORRE				
ζ_s	u_G /(m/s)	u_L /(m/s)	A_S /m ²	d_S /m
6770	0,0398	0,017	0,905	1,07

Tabla 12. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO₂ con LI. Segunda serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)

HOLDUP DEL LÍQUIDO, DIÁMETRO DEL EMPAQUE, FACTOR DE PARED Y NÚMERO DE REYNOLDS				
h_L /(m ³ /m ³)	d_p /m	f_s	R_{eG}	R_{eL}
0,2518	0,00262	0,968	138,04	1,963

Tabla 13. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO₂ con LI. Tercera serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)

FACTOR DE HUMECTACIÓN, FACTOR DE RESISTENCIA, CAÍDA DE PRESIÓN, DIÁMETRO HIDRÁULICO Y ÁREA DE CONTACTO DE FASE				
W	ζ_L	$\Delta P/H$	d_h	a_{ph}/a
1,009	0,815	0,2409	0,0346	4,356

Tabla 14. Resultados del método de cálculo de Billet aplicados al dimensionamiento de una torre absorbidora para el proceso de captura de CO₂ con LI. Cuarta serie de parámetros hidráulicos obtenidos (Fuente: autor)

ALTURA DE UNA UNIDAD DE TRANSFERENCIA, N° GLOBAL DE UNA UNIDAD DE TRANSFERENCIA, FACTOR DE SEPARACIÓN, ALTURA DE UNA UNIDAD DE TRANSFERENCIA Y ALTURA DEL LECHO EMPACADO					
HTU_L	HTU_G	NTU_{OG}	λ	HTU_{OG}	H
1,468	0,0176	3,721	1,093	1,622	6,03

Las dimensiones obtenidas de la torre absorbedora fueron de 6 m de alto y de 1 m de diámetro aproximadamente, los resultados manifestaron el cumplimiento con un gran número de heurísticas de diseño reportadas por Treybal, 1988 y por el ingeniero Aprilia Jaya de la empresa KLM Technology Group para la hidráulica empacada. Entre ellas estuvieron:

El diámetro del empaque fue menor de 1/8 del diámetro de la columna, para evitar problemas en la distribución de líquidos.

La relación altura del lecho y diámetro de la columna estuvo comprendido entre 5 y 8.

El diseño del tamaño del empaque recomendado fue de 50 mm para anillos Pall, de acuerdo con la tabla 15.

Tabla 15. Tamaño del empaque para distintos diámetros de columna. (Tomado de KLM Technology Group)

DÍAMETRO DE LA COLUMNA (m)	TAMAÑO DEL EMPAQUE (mm)
< 0,3	< 25
0,3 a 0,9	25 a 38
> 0,9	50 a 75

La columna empacada se diseñó para una operación del 80% de inundación como lo estableció Billet.

La altura equivalente a la etapa teórica (HETP) para el contacto vapor-líquido no fue igual, pero si cercana al límite superior recomendado de 0,76-0,90 m para anillos pall de 50 mm. El valor obtenido fue del 1,55 m y representa la altura del empaque que dará la misma separación que una etapa de equilibrio.

Tabla 16. Coeficientes de transferencia de masa local y global determinados (Fuente: autor)

$k_y / (\text{Kgmol/m}^2 \cdot \text{s})$	$k_L / (\text{m/s})$	$k_x a_{ph} / (\text{Kgmol/m}^3 \cdot \text{s})$	$K_y a_{ph} (\text{Kgmol/m}^3 \cdot \text{s})$
$1,985 \times 10^{-4}$	$2,166 \times 10^{-5}$	0,055	$9,514 \times 10^{-4}$

En la tabla 16, se reportan los coeficientes de transferencia de masa local y global determinados para el lado del gas, usando las correlaciones de Billet reportadas en (Benítez, 2009). Como ya se ha venido mencionando, no son valores absolutos ya que deben ser comprobados de forma experimental, dado que no se han presentado correlaciones específicas para sistemas con

LI. Sin embargo, los valores obtenidos presenta cierta congruencia con los observados en la literatura para diferentes sistemas convencionales.

Adicionalmente, al dimensionamiento realizado, se desarrolló un análisis de sensibilidad para observar el comportamiento del diámetro de la columna, la caída de presión y la altura del lecho empacado en función del caudal del gas y los resultados gráficos se representan en las figuras 8 a 10.

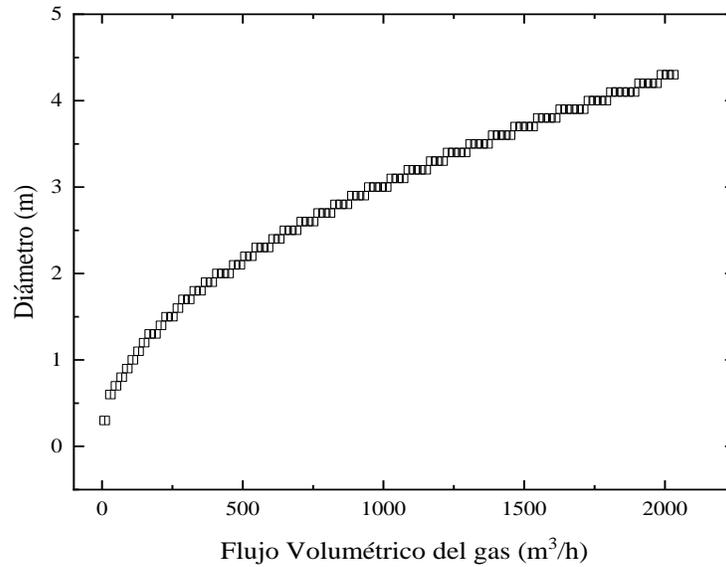


Figura 8. Análisis de sensibilidad del diámetro de la torre absorbidora en función del caudal del gas de entrada.

(Fuente: autor)

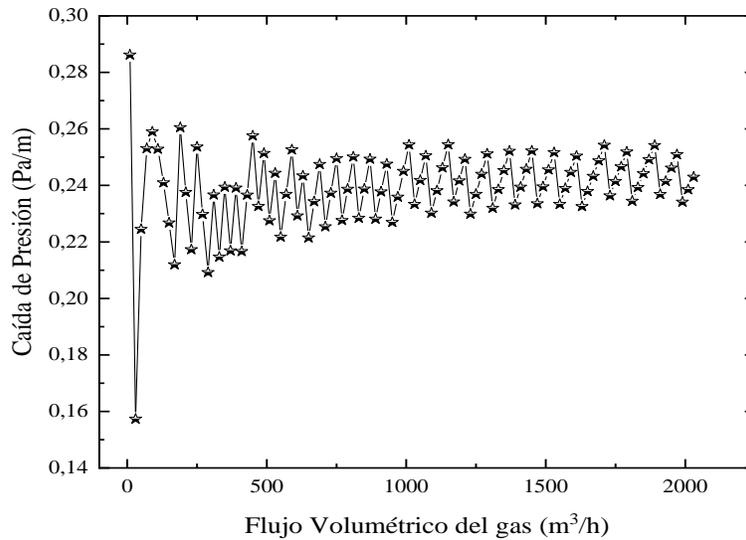


Figura 9. Análisis de sensibilidad de la caída de presión por unidad de altura del lecho empacado en función de la velocidad volumétrica de flujo del gas de entrada. (Fuente: autor)

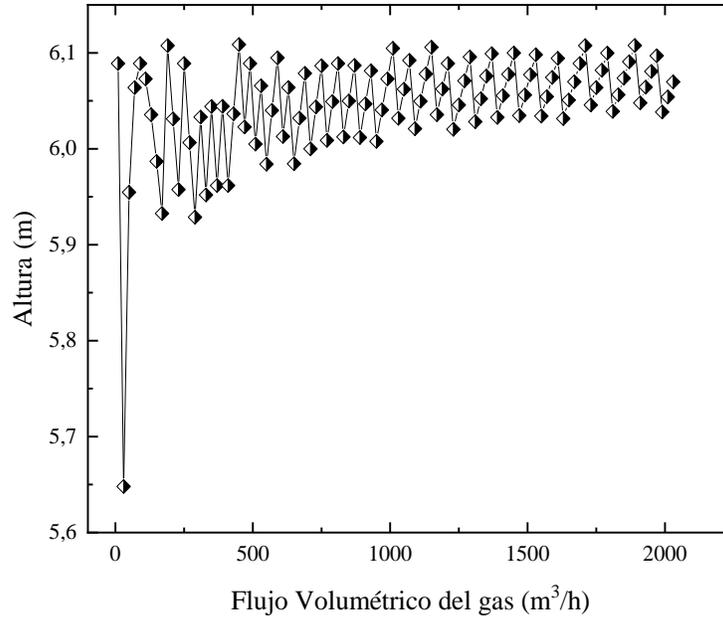


Figura 10. Análisis de sensibilidad de la altura del lecho empacado en función del caudal del gas de entrada.

(Fuente: autor)

Como se puede apreciar en los resultados del análisis de sensibilidad, el diámetro se ve íntimamente afectado por el caudal del gas de entrada y se determinó un flujo específico que satisficiera las heurísticas de diseño anteriormente mencionadas. Mientras que la caída de presión y la altura variaron muy poco con el incremento del flujo volumétrico del efluente gaseoso. Pero si se observó que la altura presenta cierta variación notable con relación a la pureza o concentración del CO_2 en el efluente. No obstante, la concentración del CO_2 a la entrada se dejó fija por propósitos industriales, pues se ha comprobado, que generalmente, la concentración de CO_2 en los efluentes industriales posteriores a la combustión está en el rango de 12 a 15% en volumen (Ziobrowski et al., 2016). Por tanto, se definió una altura promedio de lecho empacado de 6 m, un diámetro teórico de 1 m y una caída de presión de 0,24 Pa/m.

Como resultado inmediato del dimensionamiento y del diseño hidráulico de la torre absorbadora, se realizaron los correspondientes planos mecánicos del equipo y los accesorios principales que posee.

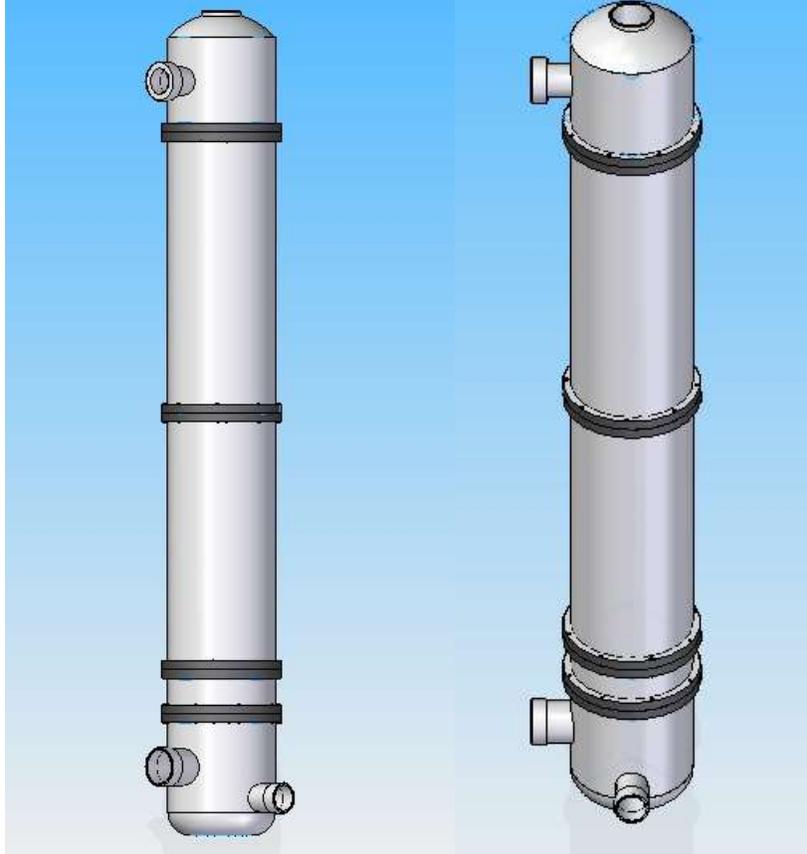


Figura 11. Vista frontal y lateral de la torre absorbidora empacada diseñada. (Fuente: autor)

La figura 11 representa la torre absorbidora diseñada aplicando el protocolo riguroso de Billet, esta torre tiene un diámetro de 0,967 m que fue recalculado con cálculos de simulación en Aspen Plus V9.0; la altura total del lecho empacado es de 6 m y presenta una serie de distribuidores de la siguiente manera: en la parte superior aparece el distribuidor del líquido, en la sección media del lecho empacado nos encontramos con un redistribuidor y en la parte inferior con un distribuidor de gas. La torre está compuesta por una coraza metálica de acero inoxidable 304, y para efectos de controlar la corrosión en las distintas unidades estructurales de la misma, todos sus accesorios se hicieron del mismo material.

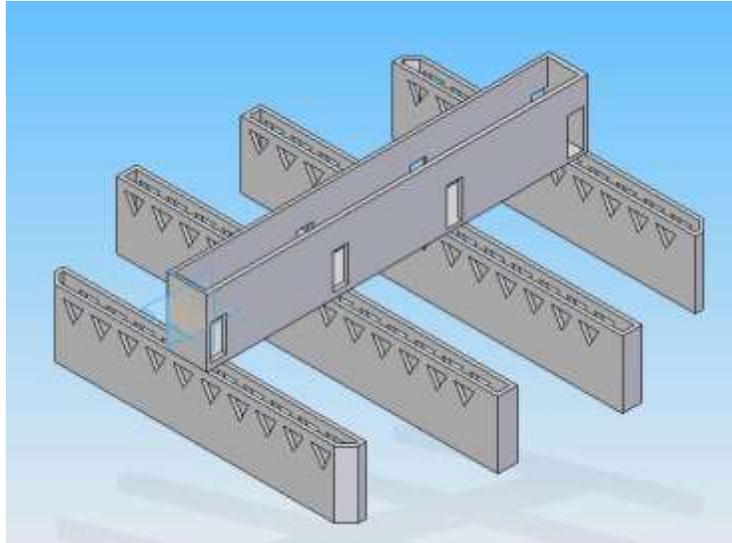


Figura 12. Plano isométrico del distribuidor del líquido de represa de tina. (Fuente: autor)

La figura 12 representa el distribuidor de líquido de canaletas modelo 302 de KOCH Engineering Co. Se ubica en la parte superior del empaque y se fabrica en secciones para su instalación través de vías de acceso y se puede apoyar en vigas en el caso que lo requiera. Este distribuidor es aplicable para diámetros relativamente grandes y el número de cajas de separación depende de varios factores como el diámetro de la columna, tasas de líquidos, entre otros, que ya se encuentran tabulados en la literatura y a partir de estos se diseñó el número de cajas ideales de separación (Chattopadhyay, 2007).

La figura 13, por su parte, representa un redistribuidor del líquido que se colocó a un intervalo aproximado de tres veces el diámetro de la torre, es decir, en la zona media del lecho empacado. Con el objetivo de evitar que el líquido tendiera a segregarse hacia las paredes se agregó este redistribuidor y se procuró como ya se había mencionado en una ocasión, mantener el diámetro de cada pieza del empaque menor a $1/8$ del diámetro de la columna absorbadora. La información detallada de los accesorios para una torre absorbadora es bastante limitada, por lo tanto, el diseño del redistribuidor se realizó apoyándose en las proporciones del dispositivo representado en una tesis de maestría que fueron elaborados por expertos de la industria de Sasol y de Koch-Glitsch (Lamprecht, 2010).

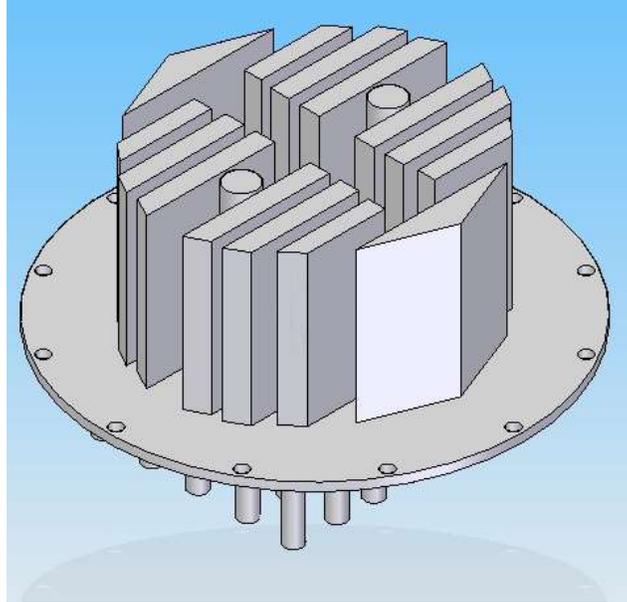


Figura 13. Plano isométrico del redistribuidor de líquido. (Fuente: autor)

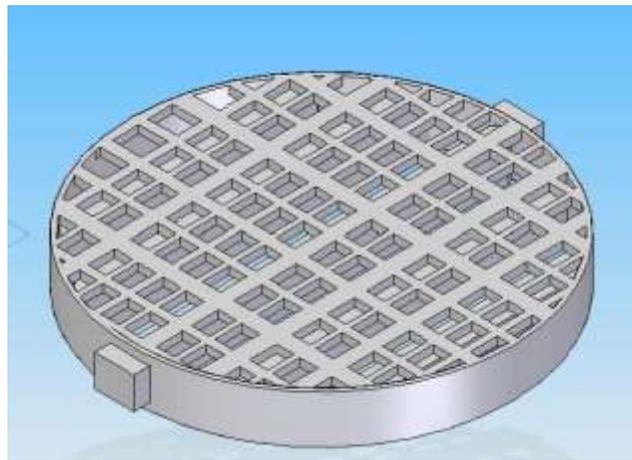


Figura 14. Plano isométrico del distribuidor de gas. (Fuente: autor)

La figura 14, es una placa de soporte de malla plana que sirve a la vez como un distribuidor metálico de gas modelo Norton, el cual es aplicable para una variedad de diámetros y las vigas perforadas permiten una mejor distribución del efluente gaseoso, dando lugar a caminos preferenciales ligeramente más cortos para disminuir la caída de presión (Chattopadhyay, 2007).

En la sección de anexos, se puede observar con más detalle los planos mecánicos de la torre absorbadora empacada y de cada una de las piezas aquí descritas con las dimensiones especificadas.

4.2 Simulación del proceso de captura de CO₂ por líquido iónico

Con el objetivo de evaluar los parámetros hidráulicos obtenidos del dimensionamiento y de comprender el comportamiento del equipo unitario de absorción, se realizó una simulación en Aspen Plus v9.0, permitiendo encontrar de forma gráfica y consistente el flujo operativo estable dentro de la columna, al igual que la eficiencia en el proceso de remoción del CO₂ de un efluente determinado.

Antes de hacer la corrida en la torre de absorción empacada, fue indispensable adicionar, primeramente, el líquido iónico en la librería del simulador y mucho más hacer, una validación termodinámica del mismo, hasta donde la información disponible lo permitiera para corroborar y asegurar que la termodinámica del sistema fuese lo más real posible.

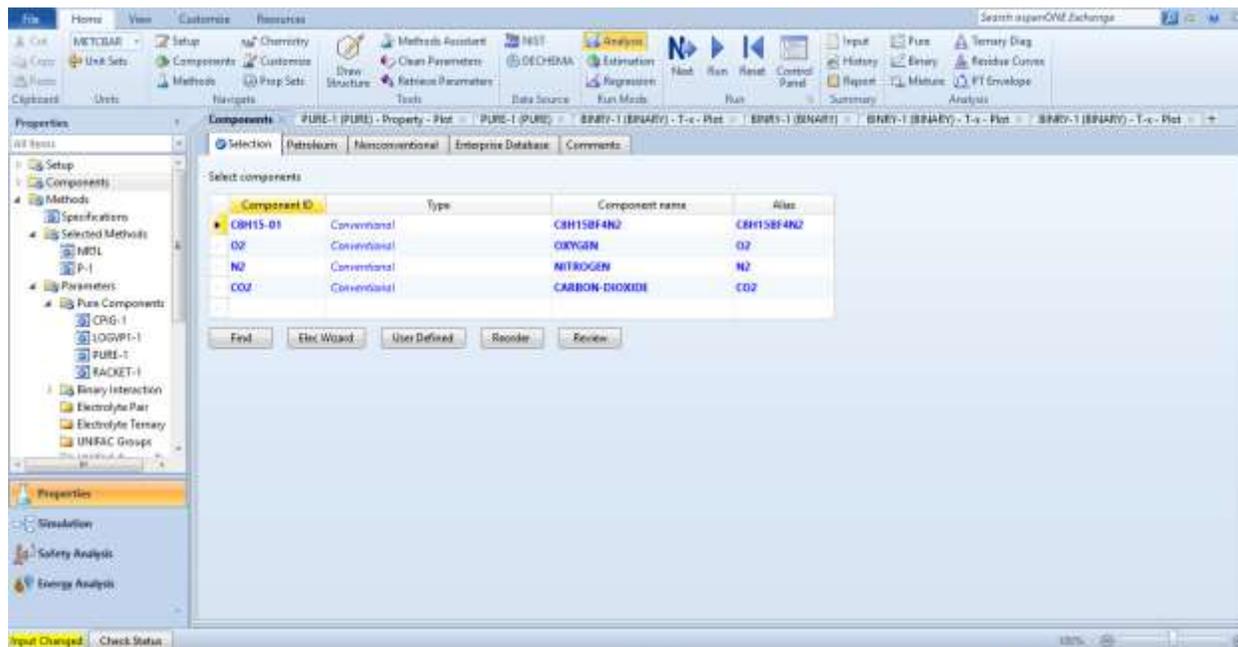


Figura 15. Selección y creación de los componentes químicos del proceso de absorción. (Fuente: autor)

Una vez se especificaron los componentes de interés, se agregaron todas las propiedades termodinámicas de interés del líquido iónico y sus valores se encuentran tabulados en las investigaciones que realizó (Valderrama et al., 2008) y las correlaciones por contribución de grupos que empleó para estimar las propiedades de 200 líquidos iónicos, son las siguientes enlistadas:

$$T_b = 198,2 + \sum n\Delta T_{bM} \quad (58)$$

$$T_c = \frac{T_b}{\left[0,5703 + 1,0121 \sum n\Delta T_M - \left(\sum n\Delta T_M\right)^2\right]} \quad (59)$$

$$P_c = \frac{M}{\left(0,2573 + \sum n\Delta P_M\right)^2} \quad (60)$$

$$V_c = 6,75 + \left(\sum n\Delta V_M\right) \quad (61)$$

$$\omega = \frac{(T_b - 43)(T_c - 43)}{(T_c - T_b)(0,7T_c - 43)} \log\left(\frac{P_c}{P_b}\right) - \left(\frac{T_c - 43}{T_c - T_b}\right) \log\left(\frac{P_c}{P_b}\right) + \log\left(\frac{P_c}{P_b}\right) - 1 \quad (62)$$

De las cuales se tomó lectura de la temperatura de ebullición normal (T_b), la temperatura crítica (T_c), la presión crítica (P_c), el volumen crítico (V_c) y el factor de acéntrico (ω), como también se reporta en (Ma et al., 2017), el cual fue el material estandarte para el desarrollo de la presente simulación (ver tabla 17).

The screenshot shows the Aspen Plus software interface. The 'Pure-component scalar parameters' table is visible, listing various physical properties for the 'PURE-1' component. The table has columns for Parameters, Units, Data set, Component, and Component. The data is as follows:

Parameters	Units	Data set	Component	Component
FB	K	1	495,22	
TC	K	1	672,04	
OMEGA		1	0,5725	
PC	bar	1	20,38	
VC	cc/mol	1	855	
ZC		1	0,2109	
MW		1	226,83	
DHVB	kJ/mol	1	131	
SG		1	1,29922	
VLSTD	cc/mol	1	0,187111	

Figura 16. Propiedades físicas del líquido iónico agregadas al simulador. (Fuente: autor)

Tabla 17. Propiedades físicas y críticas del LI [bmim][BF₄] obtenidas por (Ma et al., 2017)

ESTIMACIONES POR CONTRIBUCIÓN DE GRUPOS							
LI	M/(g/mol)	T _c /K	P _c /bar	V _c /(cm ³ /mol)	ω	Z _c	T _b /K
[bmim][BF ₄]	226,03	672,04	20,38	655,0	0,5725	0,2389	495,22

Por otra parte, se guardaron los coeficientes en el simulador de las ecuaciones de las propiedades de presión de vapor, densidad y capacidad calorífica, que aparecen en la tabla 18 y se calculan con las relaciones (63) a (65). Aspen Plus ya tiene grabada las correlaciones bajo las siglas de PLXANT, RACKET y CPIG respectivamente.

$$\ln p_i^s = C_{1i}' + \frac{C_{2i}'}{T + C_{3i}'} \quad (63)$$

$$C_p = C_{1i} + C_{2i}T + C_{3i}T^2 \quad (64)$$

$$\rho_i^{*l} = \frac{P_{ci}}{RT_{ci} \left(Z_i^{*,RA} \left[1 + (1 - T_r)^{2/7} \right] \right)} \quad (65)$$

Tabla 18. Coeficientes en ecuaciones de propiedades dependientes de la temperatura (Ma et al., 2017)

PROPIEDAD	CAPACIDAD CALORÍFICA			PRESIÓN DE VAPOR		DENSIDAD	
LI	C _{1i}	C _{2i}	C _{3i}	C _{1i} '	C _{2i} '	C _{3i} '	Z _i ^{*,RA}
[bmim][BF ₄]	228,65	0,4685	-2,5x10 ⁻⁵	15,30	6850	0	0,2172

Adicionalmente se agregaron otras propiedades, pero esta vez no se ingresaron las constantes de los modelos, sino que se agregó los datos experimentales al simulador, para propiedades como tensión superficial (SIGMA) y viscosidad (MU), que se detalla más adelante.

Posteriormente, se procedió a agregar el paquete termodinámico NRTL con el modelo de regresión de Henry y se usó Redlinch-Kwong para modelar el equilibrio líquido-vapor en términos del cálculo de la fugacidad del gas, Figura 17.

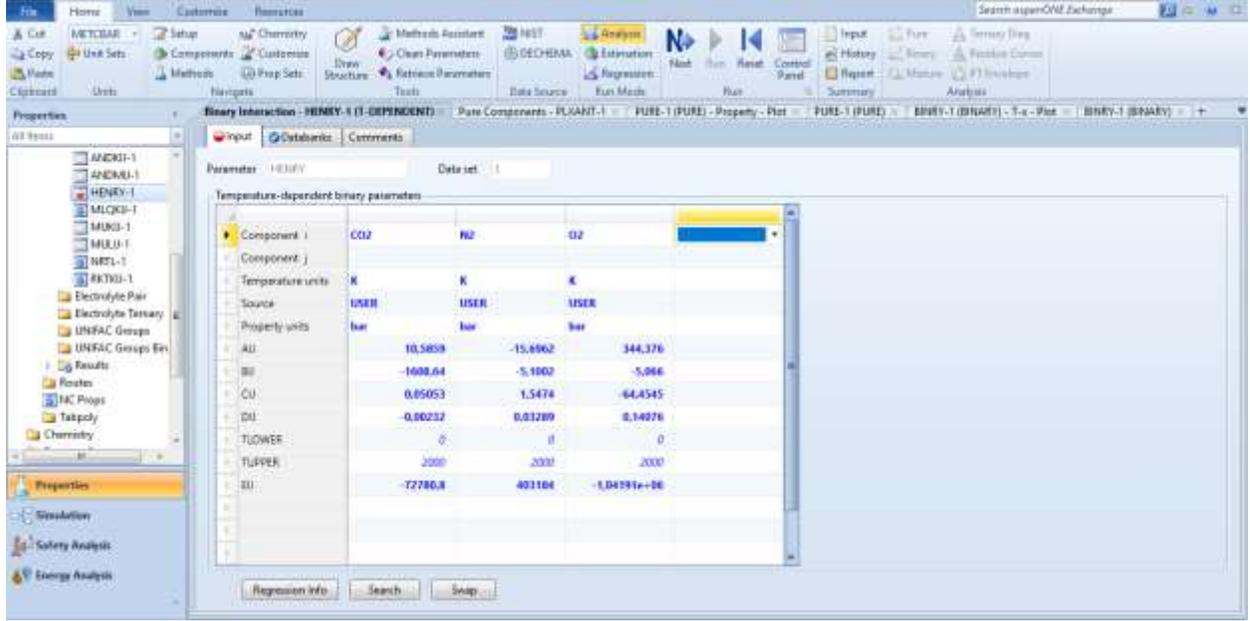


Figura 17. Parámetros de regresión de Henry y NRTL. (Fuente: autor)

La correlación para el modelo de Henry se describe con la ecuación (66). La ecuación de Redlich-Kwong y el factor de compresibilidad se muestra en las relaciones (67) a (69) y el coeficiente de fugacidad en la fase gaseosa se determina con (70).

$$\ln H_{iA} = a_{iA} + b_{iA}/T + c_{iA} \ln T + d_{iA}T + e_{iA}/T^2 \quad (66)$$

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{T^{0.5}V(V+b)} \quad (67)$$

$$a = 0,42748 \frac{R^2 T_c^{2.5}}{P_c}; \quad b = 0,08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (68)$$

$$Z = pV/RT \quad (69)$$

$$\ln \phi = Z - 1 - \ln \left(Z - \frac{bp}{RT} \right) - \frac{a}{bRT^{1.5}} + \ln \left(1 + \frac{bp}{ZRT} \right) \quad (70)$$

Por último, las ecuaciones del modelo NRTL aparecen en (71) y (72) y los valores del modelo se reportan en la tabla 20.

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j x_j \tau_{ij} G_{ji}}{\sum_k x_k G_{ki}} + \sum_j \frac{x_j G_{ij}}{\sum_k x_k G_{kj}} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_m x_m \tau_{mj} G_{mj}}{\sum_k x_k G_{kj}} \right) \quad (71)$$

$$G_{ij} = \exp(-a_{ij} \tau_{ij}); \quad \tau_{ij} = a_{ij} + b_{ij}/T; \quad a_i = c_{ij} (i \neq j) \quad (72)$$

Tabla 19. Parámetros de regresión para el cálculo de los coeficientes de Henry. Tomado de (Ma et al., 2017)

COMPONENTE		PARÁMETROS				
<i>i</i>	<i>A</i>	a_{iA}	b_{iA}	c_{iA}	d_{iA}	e_{iA}
CO ₂	[bmim][BF ₄]	10,5859	-1608,64	0,05053	-0,00232	-72780,8
N ₂		-15,6962	5,1002	1,5474	0,03289	403183,5
O ₂		344,3755	-5,0660	-64,4545	0,14076	-1041906

Tabla 20. Parámetros de regresión en la ecuación NRTL. Tomado de (Ma et al., 2017)

COMPONENTE		PARÁMETROS				
<i>i</i>	<i>j</i>	a_{ij}	a_{ji}	b_{ij}	b_{ji}	c_{ij}
CO ₂	[bmim][BF ₄]	-1,1806	-2,1196	1908,213	418,061	0,3828

La validación de los modelos termodinámicos para las propiedades físicas del líquido iónico, se obtuvieron al reproducir los perfiles de ajuste en el simulador de Aspen Plus v9.0 para la capacidad calorífica, la densidad, el volumen molar, la presión de vapor, la viscosidad y la tensión superficial del [bmim][BF₄] en función de la temperatura. Todas las gráficas fueron reproducidas a condiciones de 1 atm de presión, por el hecho de que esta fue la condición de diseño y de operación de la columna. Los perfiles obtenidos en las figuras 18 a 21, revelan una gran coincidencia con los valores reportados en la literatura (Ma et al., 2017); mientras que la figura 22, que representa el modelo de viscosidad y la figura 23 al de tensión superficial, presentaron porcentajes de diferencia del 5,93 % y del 1,87%, respectivamente, en comparación con los teóricos a las mismas condiciones de presión y temperatura (Freire et al., 2007; Harris et al., 2007). Es particularmente importante reiterar que estas propiedades fueron adicionadas al simulador mediante una serie de datos experimentales de los artículos anteriormente mencionados, ya que su carencia, hacía que los valores estimados por el simulador estuvieran tan desfasados que producía errores cercanos al 50% y como bien ya sabemos, la viscosidad es una variable muy importante a la hora de trabajar con líquidos iónicos, debido a que esta afecta de manera significativa a la retención de líquido y por tanto disminuye la eficiencia en el proceso de separación.

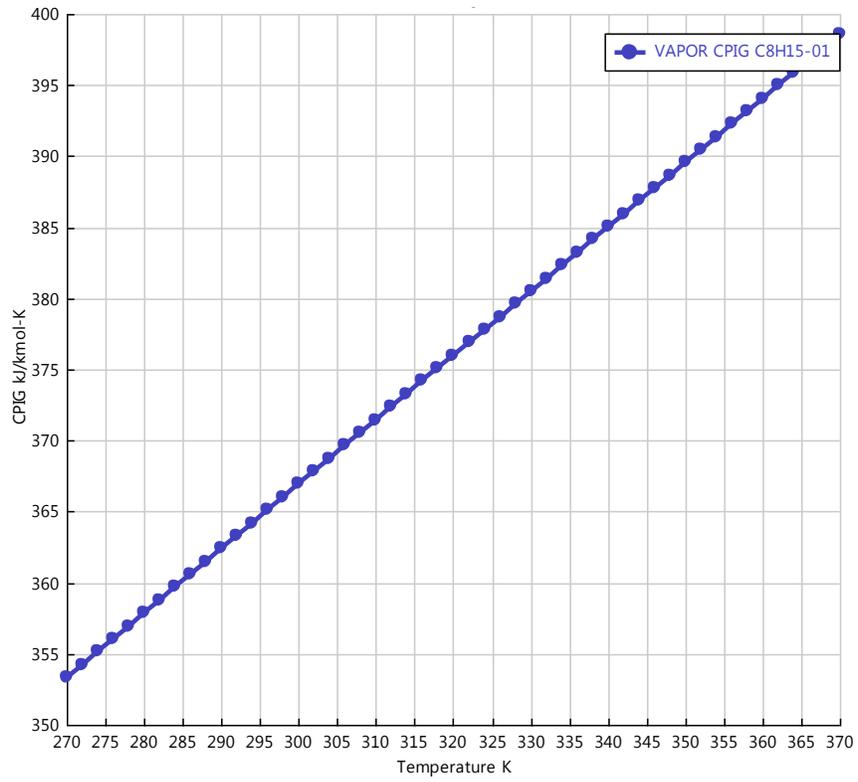


Figura 18. Capacidad calorífica calculada para el [bmim][BF₄]. (Fuente: autor)

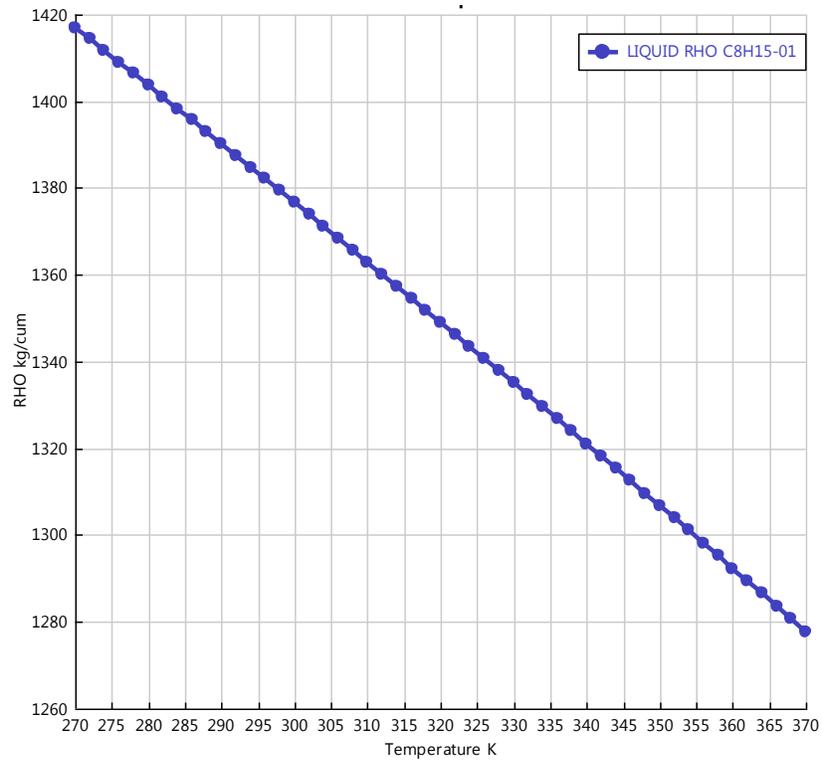


Figura 19. Densidad calculada para el [bmim][BF₄]. (Fuente: autor)

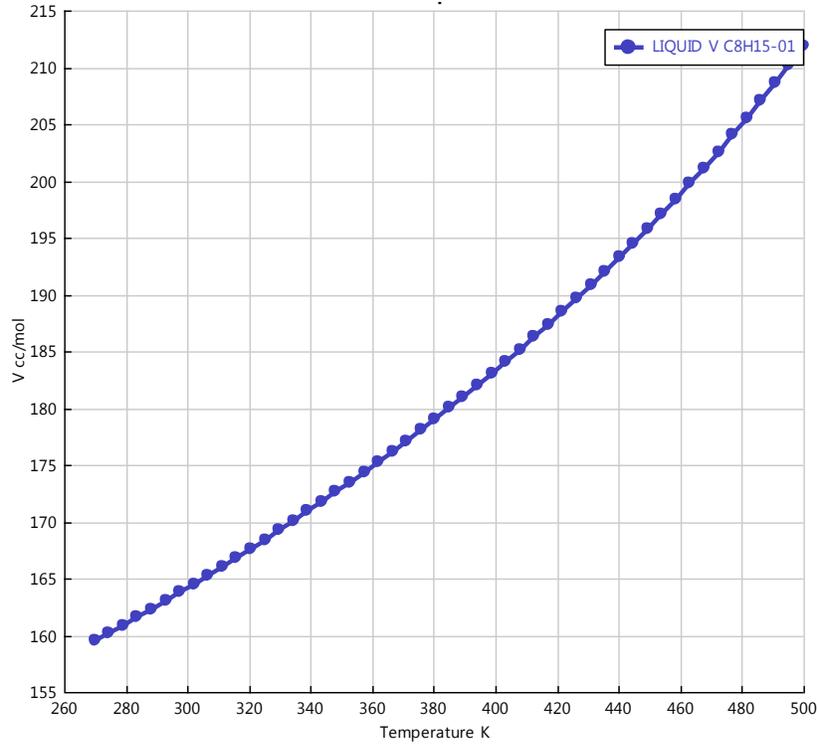


Figura 20. Volumen molar calculado para el [bmim][BF₄]. (Fuente: autor)

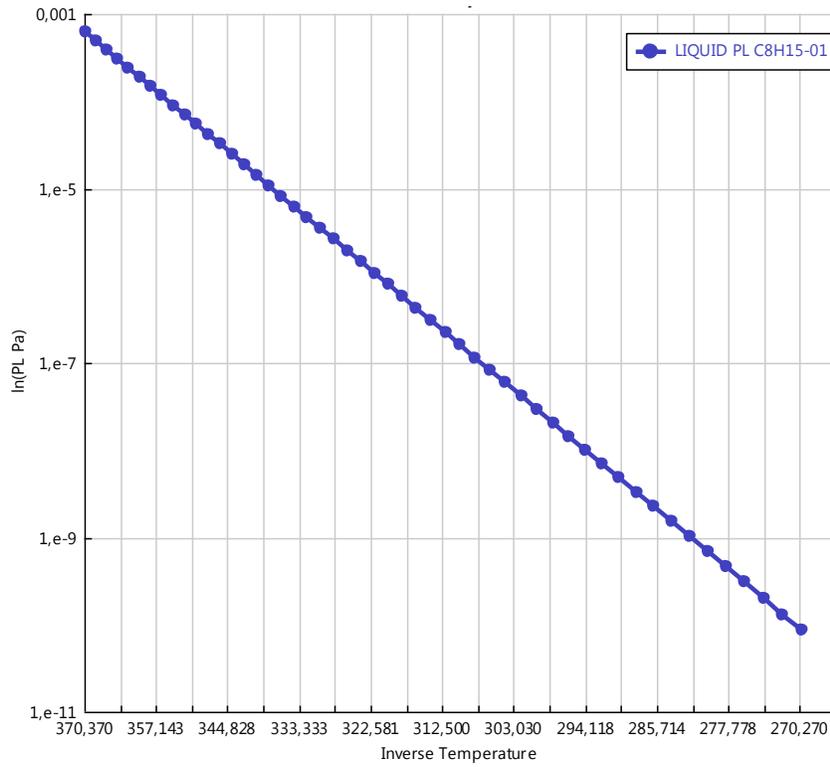


Figura 21. Presión de vapor calculada para el [bmim][BF₄]. (Fuente: autor)

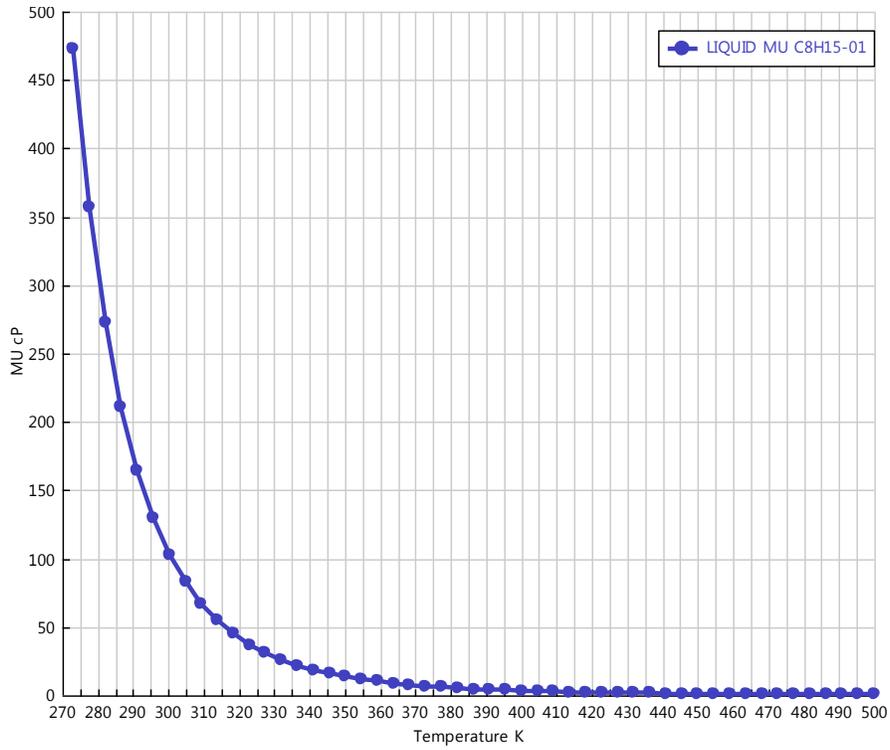


Figura 22. Viscosidad calculada para el [bmim][BF₄]. (Fuente: autor)

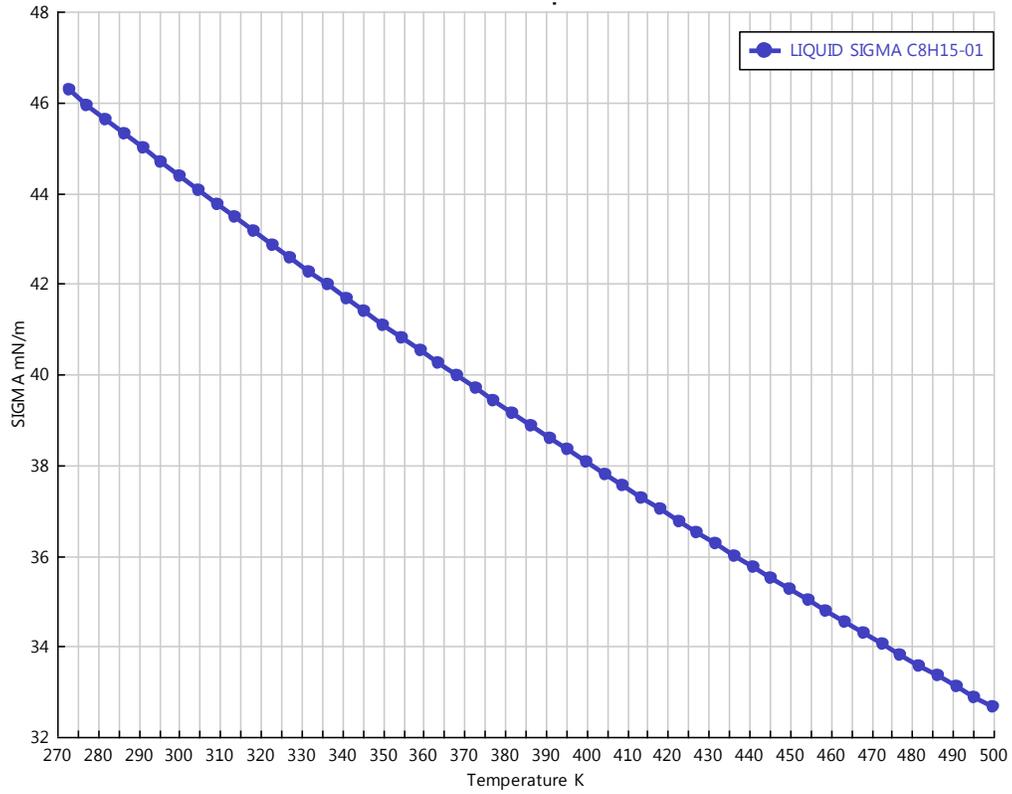


Figura 23. Tensión superficial calculada para el [bmim][BF₄]. (Fuente: autor)

Finalmente, se concluye para esta etapa, que el simulador tiene la suficiente información apropiada para poder modelar la termodinámica del sistema y brindar resultados razonables.

Los parámetros de regresión para el cálculo de los coeficientes de Henry y de la ecuación NRTL agregados a la memoria del simulador, permitieron reproducir perfiles de solubilidad o de fases del CO_2 , N_2 y O_2 , en LI, muy consistentes con los informados en la literatura, ya que las tendencias de las curvas y sus valores son muy similares o cercanos con las publicadas por (Ma et al., 2017).

Como se puede apreciar en las curvas de solubilidad del CO_2 en LI, figura 24, entre más cercana sea la temperatura de operación al ambiente, es más eficiente el proceso de absorción del componente en $[\text{bmim}][\text{BF}_4]$. De manera análoga, la figura 27 representa los datos de solubilidad calculados por el simulador con datos isotérmicos desde 283,15 a 348,15 K. El equilibrio de solubilidad no informa que, a temperaturas bajas y presiones altas, la eficiencia del proceso de captura se ve positivamente favorecido.

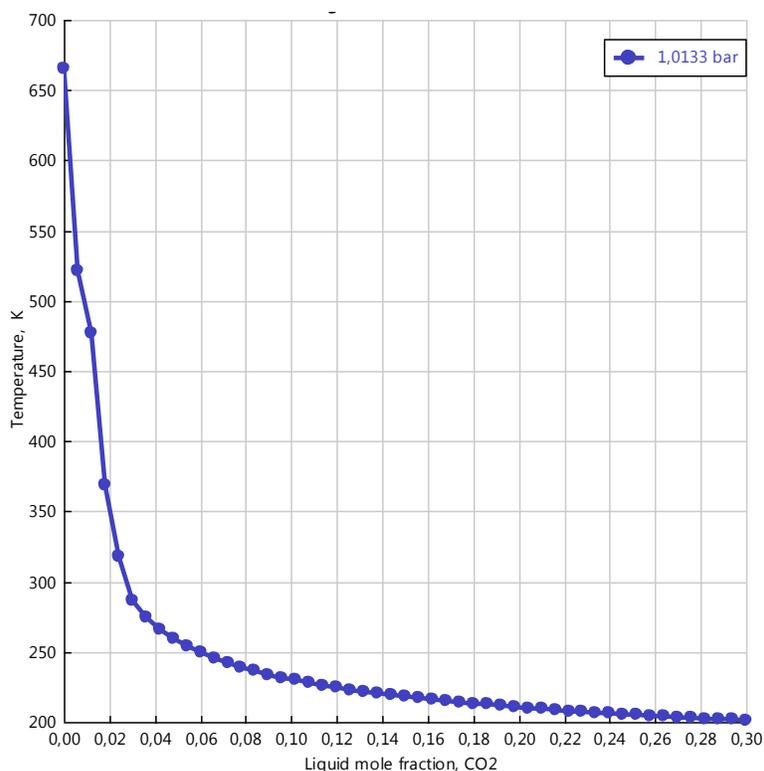


Figura 24. Curva de solubilidad estimada del CO_2 en $[\text{bmim}][\text{BF}_4]$ a 1 atm de presión. (Fuente: autor)

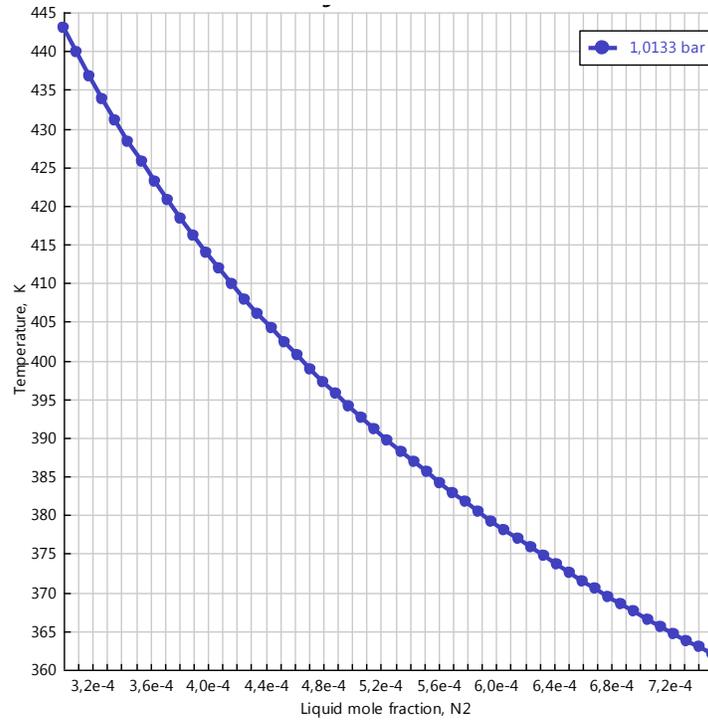


Figura 25. Curva de solubilidad estimada del N₂ en [bmim][BF₄] a 1 atm de presión. (Fuente: autor)

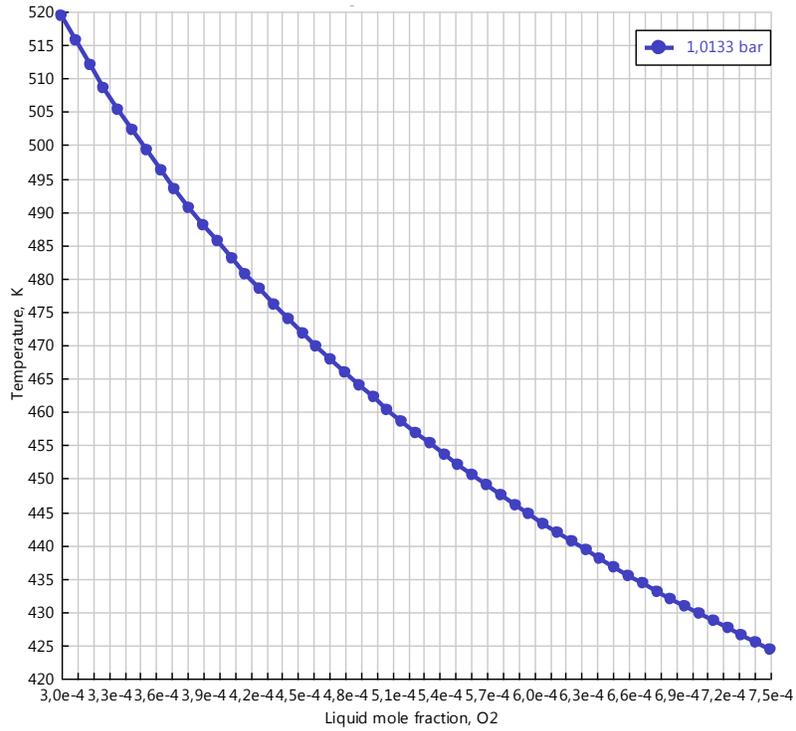


Figura 26. Curva de solubilidad estimada del O₂ en [bmim][BF₄] a 1 atm de presión. (Fuente: autor)

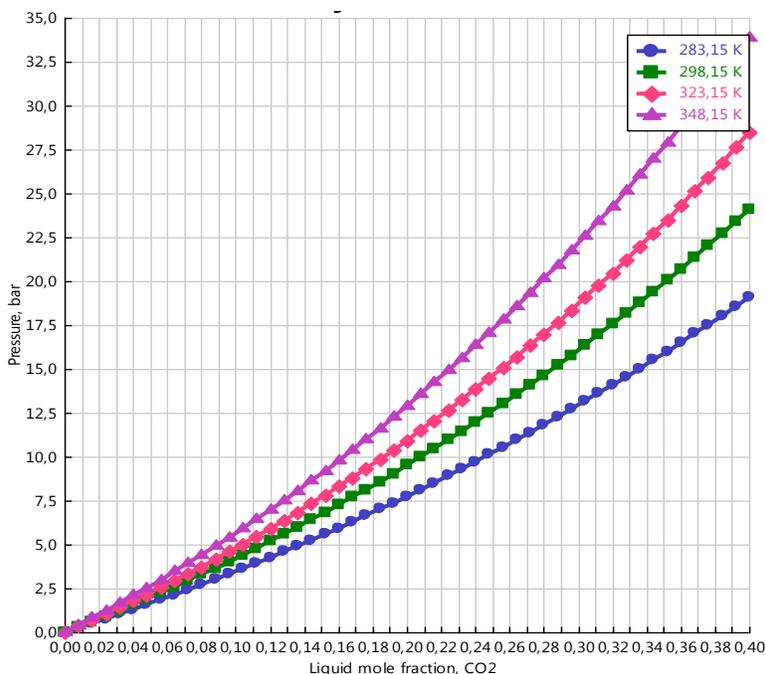


Figura 27. Curva de solubilidad estimada del CO₂ en [bmim][BF₄] a diferentes presiones y temperaturas. (Fuente: autor)

La última etapa de este estudio de simulación consistió en analizar la eficiencia de separación del CO₂ de una corriente de gas en contacto con LI, dentro de una torre absorbidora con las dimensiones preestablecidas con los cálculos de Billet. En la figura 28, se puede visibilizar el módulo RadFrac tipo absorbedor y la definición de flujos a operar con su nomenclatura de la siguiente manera: en la cúspide de la torre se introduce la corriente pura de LI (LIQ-IN) y se observa la salida del gas empobrecido de CO₂ (GAS-OUT), así mismo, en el fondo se introduce el efluente gaseoso enriquecido (GAS-IN) y se representa la salida del líquido iónico enriquecido (LIQ-OUT), cabe notar que el contacto entre las fases se da en forma contracorriente.

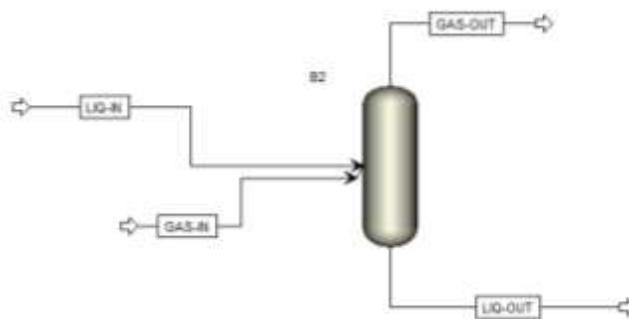


Figura 28. Definición de la columna absorbidora y las corrientes de flujo. (Fuente: autor)

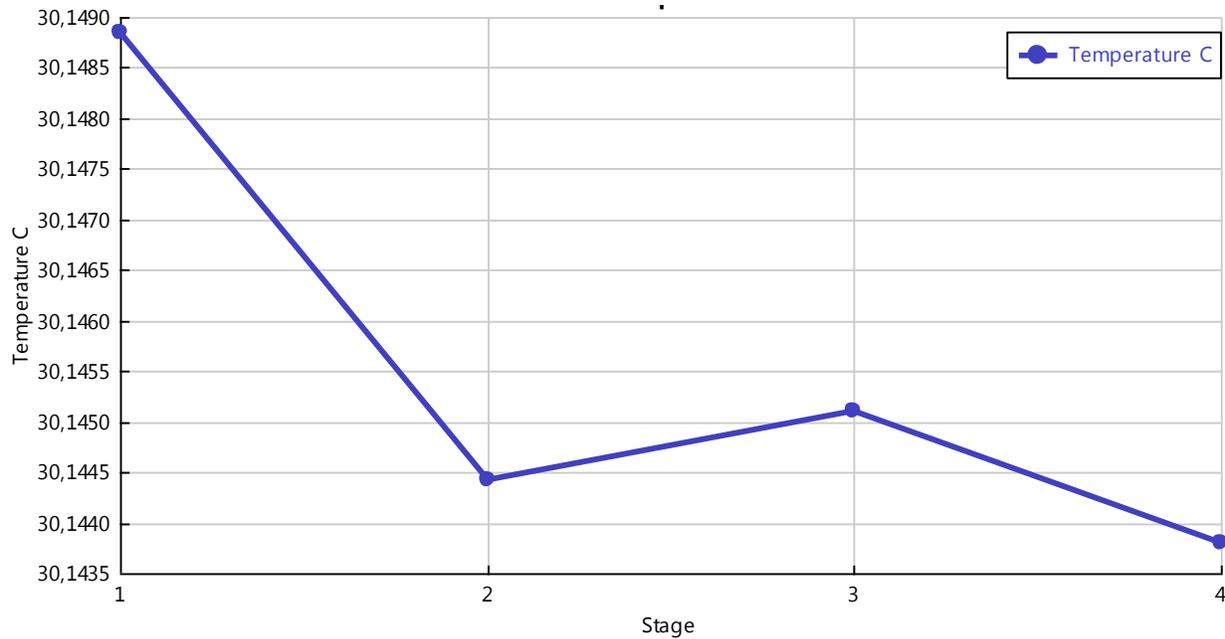


Figura 29. Perfil térmico de la torre absorbidora a lo largo de sus cuatro etapas de equilibrio. (Fuente: autor)

Una vez ingresada las especificaciones de composición y caudales iniciales de las corrientes del absorbedor dentro del entorno de simulación. Lo siguiente fue especificar los detalles más relevantes de la columna como el número de etapas equilibrio, altura y diámetro de la misma. Se realizó un perfil térmico de la torre para analizar su operación isotérmica y los resultados se representan en la figura 29, de la cual observamos que las fluctuaciones fueron muy pequeñas y en términos aproximados se pudo decir que los efectos de calor no afectaron pronunciadamente la operación o la eficiencia de la misma.

Seguidamente, se realizó el cambio del modo Raiting a Tray Sizing, para especificar la hidráulica empacada, como fue el tipo y geometría del empaque, la altura del lecho empacado, el porcentaje de inundación o máxima capacidad (L/G) que fue del 80%; y el diámetro fue estimado por el simulador en función de las especificaciones, el cual fue de 0,967 m y se tomó como una corrección del calculado en el dimensionamiento (Figura 30). Luego, se evaluó de manera gráfica (Figura 31), un pequeño rango de operatividad de flujo para las dimensiones establecidas de la torre y la composición del CO₂ fijada en el efluente gaseoso de entrada que se mantuviera dentro de la zona estable y no cruzara las fronteras hacia las zonas de inundación, o a la zona donde aparece la tasa mínima de líquido. Estas curvas obtenidas para cada etapa de equilibrio (Figura 32

a 35) fueron una excelente aproximación y guía de decisión para encontrar un punto de operación equilibrado.



Figura 30. Especificaciones hidráulicas de la torre absorbidora empacada. (Fuente: autor)

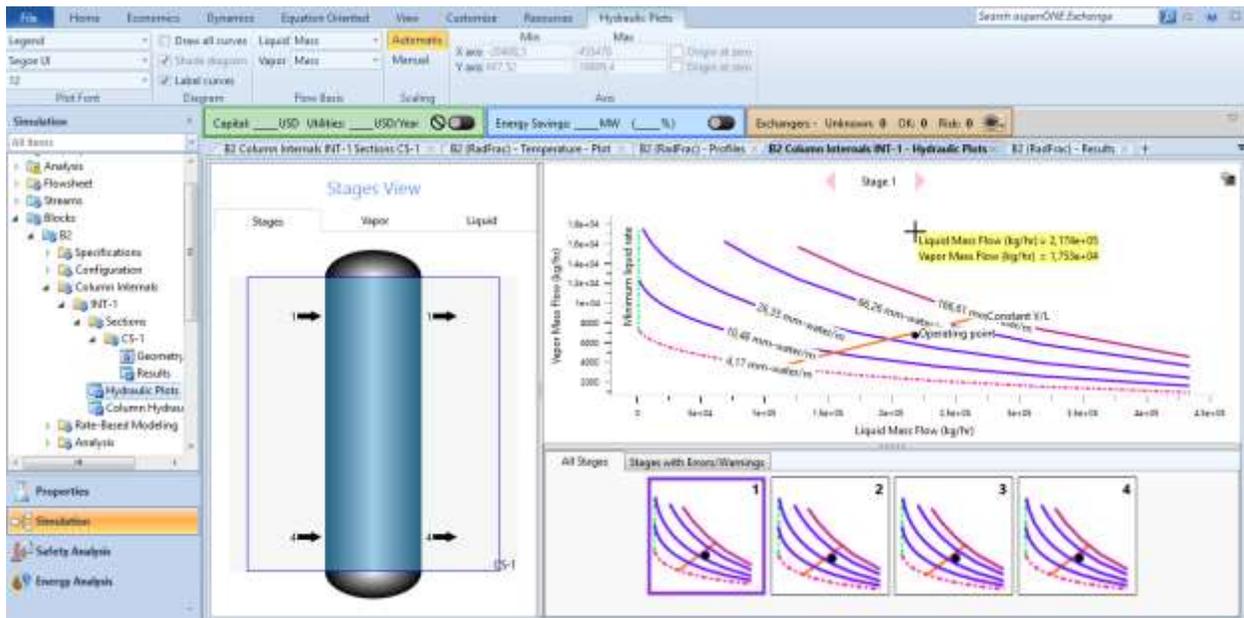


Figura 31. Simulación del proceso de absorción de CO₂ con LI en las zonas estables de operación. (Fuente: autor)

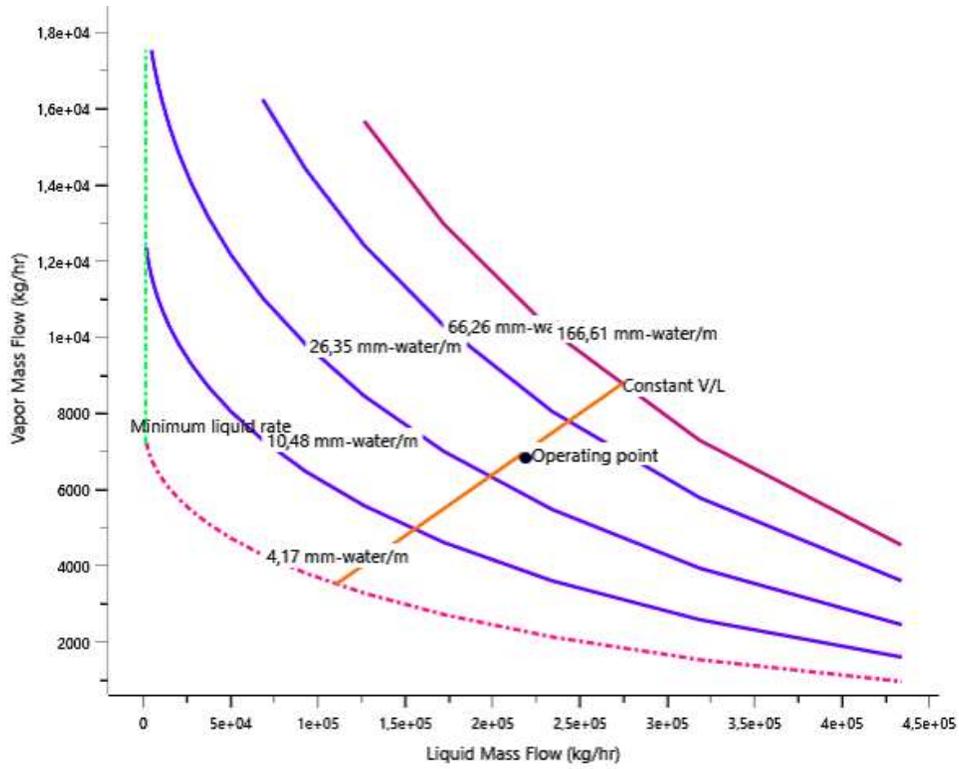


Figura 32. Perfil hidráulico de la primera etapa de equilibrio. (Fuente: autor)

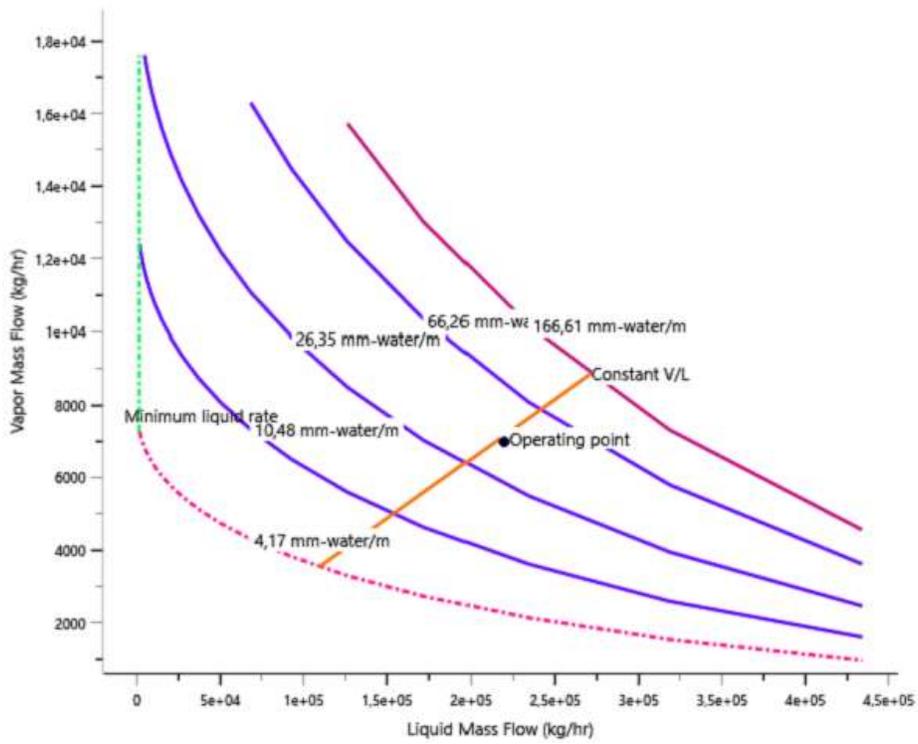


Figura 33. Perfil hidráulico de la segunda etapa de equilibrio. (Fuente: autor)

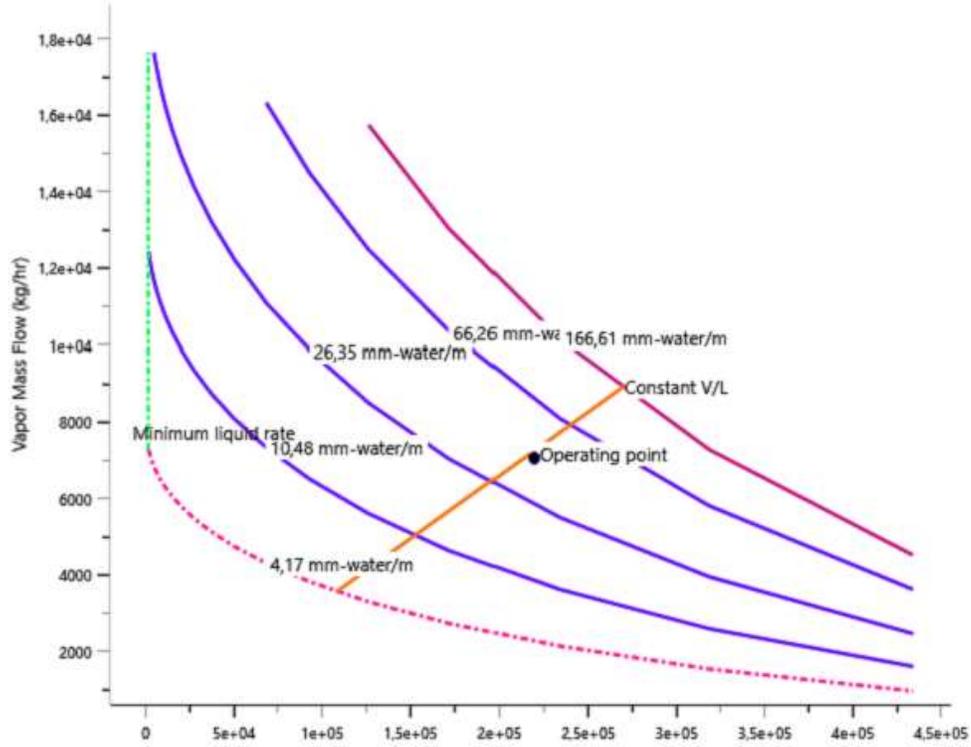


Figura 34. Perfil hidráulico de la tercera etapa de equilibrio. (Fuente: autor)

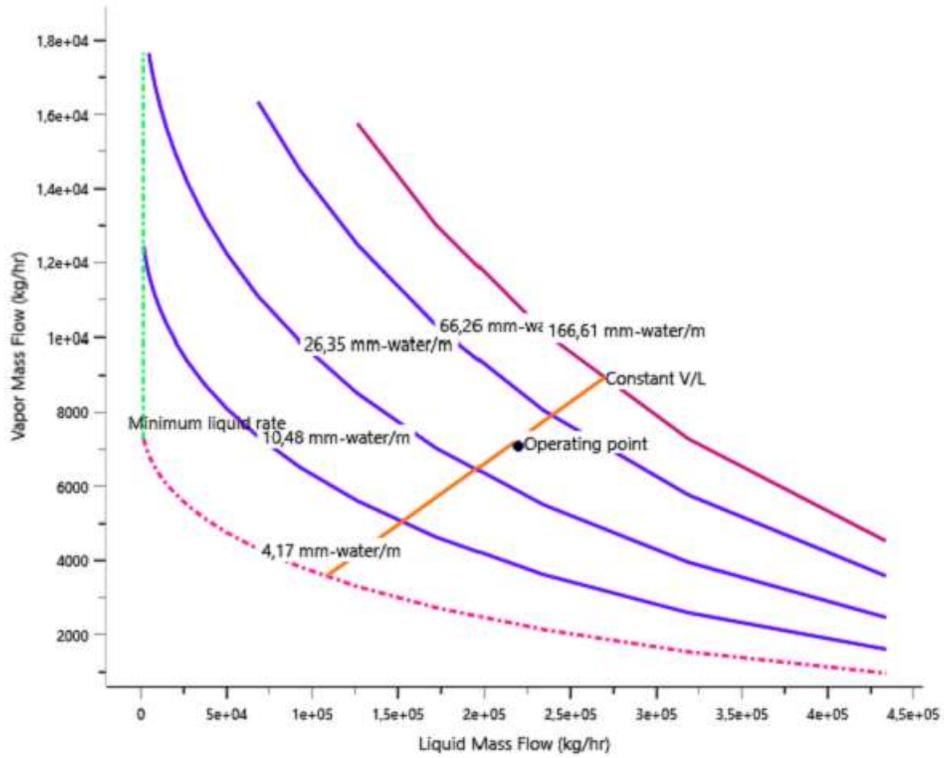


Figura 35. Perfil hidráulico de la carta etapa de equilibrio. (Fuente: autor)

Los resultados obtenidos en esta simulación de proceso evidenciaron que la HETP obtenida fue de 1,5. Mientras que el calculado con el algoritmo de Billet fue de 1,55; eso quiere decir la diferencia porcentual fue del 3,3% la cual es aceptable para esta investigación. El flujo másico medio para la fase líquida y vapor en la zona estable de operación de la columna fue de 216795,75 Kg/h y 7101,395 Kg/h respectivamente, este hecho acentúa la necesidad de trabajar mayores flujos operativos a los que se emplearon en el protocolo de diseño, en definitiva, la simulación es una técnica computacional que permite mejorar las características de diseño de cualquier equipo de operación unitaria. Empero, como era de esperarse, existió una gran discrepancia en el valor de la caída de presión, el método implementado para esta determinación en la simulación fue Wallis, mientras que el ensayado en el diseño fue el de Billet, cada uno presenta sus propias ventajas y desventajas, sin embargo, uno de los principales retos que ha quedado es poder desarrollar correlaciones específicas para el cálculo de la caída de presión en torres empacadas cuando el absorbente es altamente viscoso como un LI. El valor obtenido por simulación fue de 460,06 Pa/m, el cual es un valor más coherente con la realidad.

Pues como lo menciona (Benítez, 2009), la mayoría de los absorbedores de lecho empacado están diseñados para operar con seguridad en las condiciones de inundación, con un límite de caída de presión de gas de 200 - 400 Pa / m de lecho empacado. La eficiencia en el proceso de separación de CO₂ fue del 47,5% un poco más de la mitad que la estipulada en el diseño, pero sigue siendo un resultado esperanzador pues esta eficiencia tiende a mejorar a medida que aumenta la presión, no obstante, en este trabajo investigativo no se pudo incrementar a presión dado que muchas de las propiedades físicas del solvente no se han reportado para altas presiones, por lo tanto, se mantuvo la igualdad de la variables de diseño y operación a lo largo de todo el trabajo.

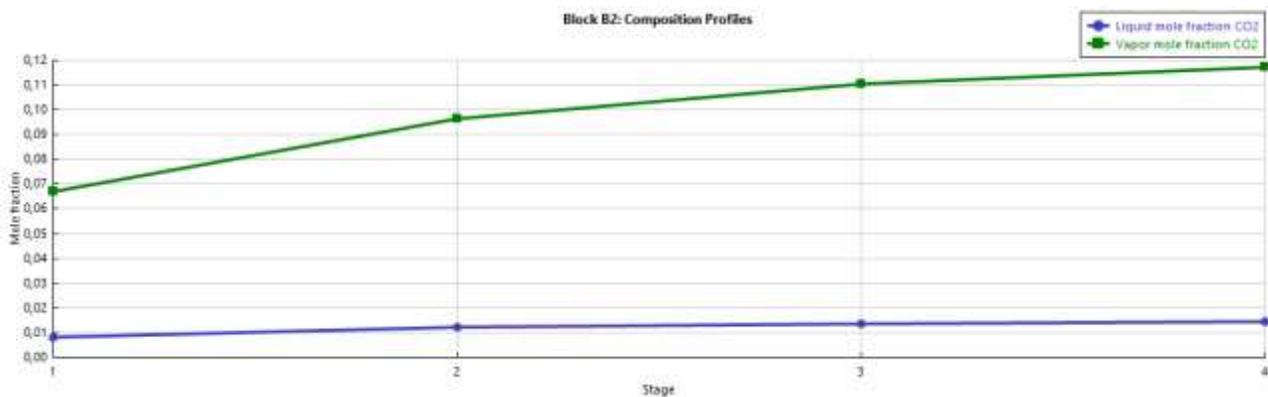


Figura 36. Perfil de composición del CO₂ para la fase líquida y gaseosa. (Fuente: autor)

Conclusiones

Hasta la fecha, existen escaso reporte científico en el cual se aplique directamente el uso de líquidos iónicos como disolventes absorbentes de CO₂ en torres contactoras. Se han estudiado los equilibrios y la absorción a nivel de laboratorio con resultados prometedores (Maginn, 2005)., es por ello que surgió el deseo de investigar y proporcionar un diseño conceptual preliminar ya sea a escala piloto o industrial de una torre contactora empacada. Los resultados pusieron de manifiesto que es posible definir muchos parámetros técnico-mecánicos de las columnas (internos), aunque con ciertas limitaciones para el cálculo de la caída de presión, pues no existe correlaciones específicas para modelar estos sistemas químicos tan complejos.

Adicionalmente se desarrolló una simulación en Aspen Plus v9.0 cuyos resultados optimizaron los caudales de gas y líquido a la entrada, la caída de presión y el diámetro de la columna. Aunque la tarea de simular LIs requiere especificar muchos datos termodinámicos de equilibrio, este fue el punto neurálgico para que el equipo unitario funcionara a la perfección.

Referencias Bibliograficas

- Aboudheir, A., Tontiwachwuthikul, P., & Idem, R. (2007). Applications of new absorption kinetics and vapor/liquid Equilibrium models to simulation of a pilot plant for carbon dioxide absorption into high CO₂-loaded, concentrated monoethanolamine solutions. *Proceedings of the 7th International Conference and Exhibition on Chemistry in Industry (CHEMINDIX 2007), 26-28 March 2007, Bahrain*, 1–5.
- Abu-Zahra, M. R. M., Abbas, Z., Singh, P., & Feron, P. (2013). Carbon Dioxide Post-Combustion Capture : Solvent Technologies Overview, Status and Future Directions. *Materials and Processes for Energy: Communicating Current Research and Technological Developments*, 923–934.
- Aprilia J. (2011). Packed Hydraulic (Engineering Design Guideline) – KLM Technology Group (pp. 1-57).
<https://www.klmtechgroup.com>
- Aroonwilas, A., & Tontiwachwuthikul, P. (1998). Mass Transfer Coefficients and Correlation for CO₂ Absorption into 2-Amino-2-methyl-1-propanol (AMP) Using Structured Packing. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 37(2), 569–575. <https://doi.org/10.1021/ie970482w>
- Aroonwilas, A., Tontiwachwuthikul, P., & Chakma, A. (2001). Effects of operating and design parameters on CO₂ absorption in columns with structured packings. *Separation and Purification Technology*, 24(3), 403–411. [https://doi.org/10.1016/S1383-5866\(01\)00140-X](https://doi.org/10.1016/S1383-5866(01)00140-X)
- Babamohammadi, S., Shamiri, A., & Aroua, M. K. (2015). A review of CO₂ capture by absorption in ionic liquid-based solvents. *Reviews in Chemical Engineering*, 31(4), 383–412. <https://doi.org/10.1515/revce-2014-0032>
- Benítez, J. (2009). Principles and Modern Applications of Mass Transfer Operations (pp. 219-236). USA: John Wiley & Sons.
- Billet, R., & Schultes, M. (1991). Modelling of pressure drop in packed columns. *Chemical Engineering & Technology*, 14(2), 89–95. <https://doi.org/10.1002/ceat.270140203>
- Billet, R., & Schultes, M. (1993). Predicting mass transfer in packed columns. *Chemical Engineering & Technology*, 16(1), 1–9. <https://doi.org/10.1002/ceat.270160102>
- Billet, R. (1995). Packed Towers in Processing and Environmental Technology (pp. 1- 359). USA: Wiley-VCH.
- Billet, R., & Schultes, M. (1999). PREDICTION OF MASS TRANSFER COLUMNS WITH Updated Summary of the Calculation Method of, 77(September).
- Blomen, E., Hendriks, C., & Neele, F. (2009). Capture technologies: Improvements and promising

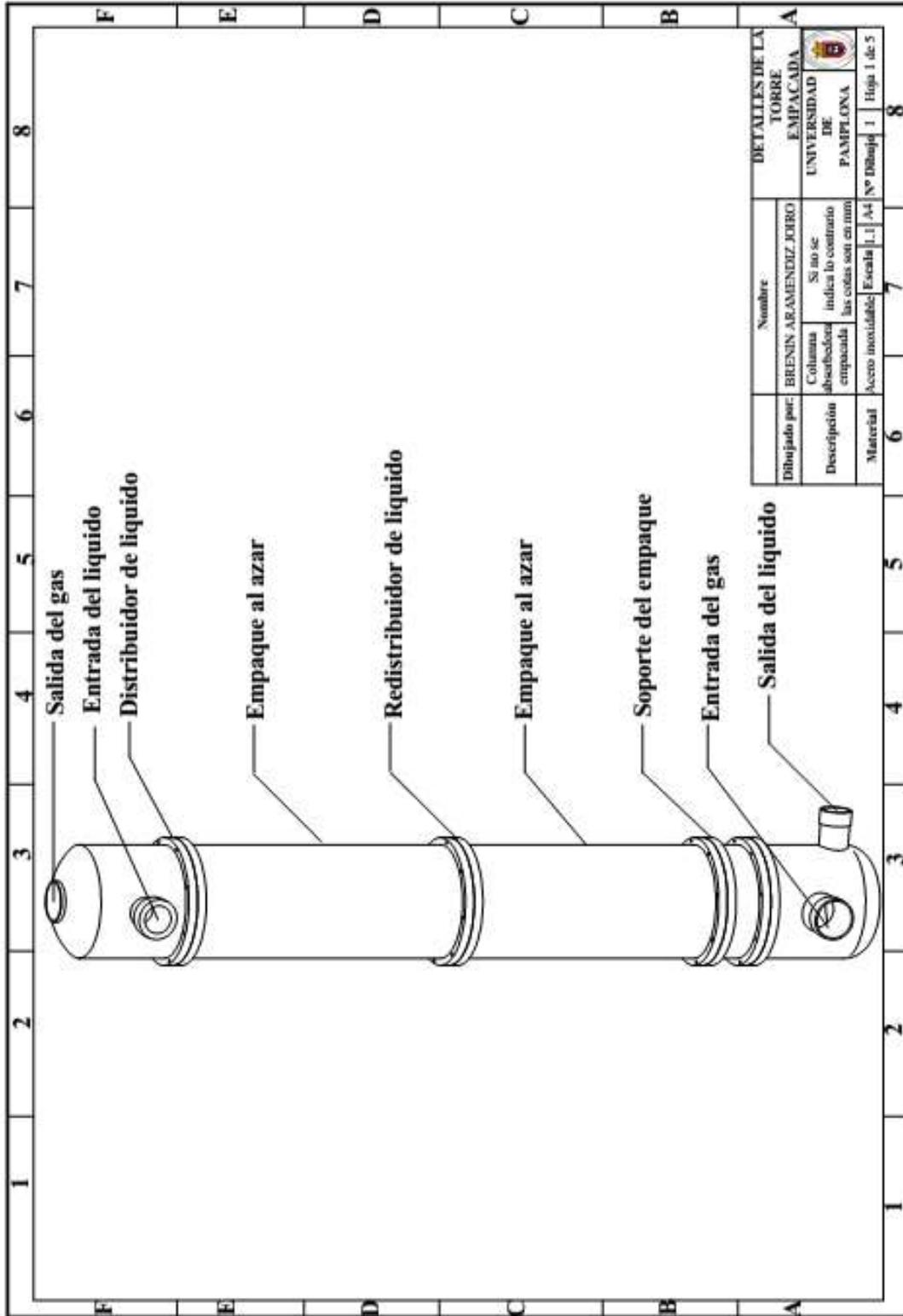
- developments. In *Energy Procedia* (Vol. 1, pp. 1505–1512). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.197>
- Bohringer, C. (2003). The Kyoto Protocol: A Review and Perspectives. *Oxford Review of Economic Policy*, 19(3), 451–466. <https://doi.org/10.1093/oxrep/19.3.451>
- Cadena, C., Anthony, J. L., Shah, J. K., Morrow, T. I., Brennecke, J. F., & Maginn, E. J. (2004). Why is CO₂ so Soluble in Imidazolium-Based Ionic Liquids? *Journal of the American Chemical Society*, 126(16), 5300–5308. <https://doi.org/10.1021/ja039615x>
- Chattopadhyay, P. (2007). *Absorption*, New Delhi: Asian Books Pvt. Ltd.
- deMontigny, D., Aboudheir, A., Tontiwachwuthikul, P., & Chakma, A. (2006). Modelling the Performance of a CO₂ Absorber Containing Structured Packing. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(8), 2594–2600. <https://doi.org/10.1021/ie050567u>
- Endres, F., & Zein El Abedin, S. (2006). Air and water stable ionic liquids in physical chemistry. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 8(18), 2101. <https://doi.org/10.1039/b600519p>
- Freire, M. G., Carvalho, P. J., Fernandes, A. M., Marrucho, I. M., Queimada, A. J., & Coutinho, J. A. P. (2007). Surface tensions of imidazolium based ionic liquids: Anion, cation, temperature and water effect. *Journal of Colloid and Interface Science*, 314(2), 621–630. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2007.06.003>
- Green, D. W; Perry, R. H. (2008) *Equipment for Distillation, Gas Absorption, Phase Dispersion, and Phase Separation*; PERRY'S Chemical Engineers Handbook (pp. 1551-1679). EUA: McGraw-Hill.
- Harris, K. R., Kanakubo, M., & Woolf, L. A. (2007). Temperature and pressure dependence of the viscosity of the ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate: Viscosity and density relationships in ionic liquids. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 52(6), 2425–2430. <https://doi.org/10.1021/je700370z>
- Henriques de Brito, M., Stockar, U. Von, Menendez Bartenger, A., Bomio, P., & Laso, M. (1994). Effective mass-transfer area in a pilot plant column equipped with structured packings and with ceramic rings. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 33(1987), 647–656. <https://doi.org/10.1021/ie00027a023>
- Heymes, F., Manno Demoustier, P., Charbit, F., Louis Fanlo, J., & Moulin, P. (2006). Hydrodynamics and mass transfer in a packed column: Case of toluene absorption with a viscous absorbent. *Chemical Engineering Science*, 61(15), 5094–5106. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.03.037>
- Jayaraman, T. (2015). The Paris Agreement on Climate Change : Background , Analysis and Implications. *Review of Agrarian Studies*, 5(2), 42–59. <http://ras.org.in/the-paris-agreement-on-climate-change>.
- Kohl, A., & Nielsen, R. (1997). *Gas Purification* (pp. 1-186). USA: Gulf Publishing Company.

- Lamprecht, S. M. (2010). Establishing a Facility to Measure Packed Column Hydrodynamics. (Master of Science in Engineering). Stellenbosch University, Stellenbosch, Sudáfrica.
- Li, W., Zhao, X., Liu, B., & Tang, Z. (2014). Mass Transfer Coefficients for CO₂ Absorption into Aqueous Ammonia Using Structured Packing.
- Lin, C., & Chu, C. (2015). Mass transfer performance of rotating packed beds with blade packings in carbon dioxide absorption into sodium hydroxide solution. *SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY*, 150, 196–203. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2015.06.025>
- Ma, T., Wang, J., Du, Z., Abdeltawab, A. A., Al-Enizi, A. M., Chen, X., & Yu, G. (2017). A process simulation study of CO₂ capture by ionic liquids. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 58, 223–231. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2017.01.017>
- McCabe, W.; Smith, J., & Harriot, P. (2007). Operaciones Unitarias en Ingeniería Química (pp. 553-640). México: Mc Graw-Hill.
- Maginn, E. J. (2005). Design and Evaluation of Ionic Liquids as Novel CO₂ Absorbents. *Report University of Notre Dame*, 1–15.
- Maxwell, J. A. (2013). Qualitative Research Design: An Interactive Approach (Applied Social Research Methods), 4453–4464. <https://doi.org/10.1021/ie058003d>
- Onda, K., Takeuchi, H., & Okumoto, Y. (1968). Mass transfer coefficients between gas and liquid phases in packed columns. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 1(1), 56–62. <https://doi.org/10.1252/jcej.1.56>
- Seader, J. D. (2011). *Absorption and Stripping of Dilute Mixtures.*, Separations Process Principles: Chemical and Biochemical Operations (pp. 206-252). EUA: John Wiley & Sons Ltd.
- Shiflett, M. B., & Yokozeki, A. (2005). Solubilities and Diffusivities of Carbon Dioxide in Ionic Liquids: [bmim][PF₆] and [bmim][BF₄]. *Ind. Eng. Chem*, 44(12), 4453–4464. <https://doi.org/10.1021/ie058003d>
- Towler, G; Sinnott, R. K. (2008). *Separation Columns (Distillation, Absorption, and Extraction).*, Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design (pp. 642-789). USA: Elsevier.
- Treybal, R. E. (1988). *Equipo para las Operaciones Gas-Líquido.*, Operaciones de Transferencia de Masa (pp. 210-243). México: Mc Graw-Hill.
- Valderrama, J. O., Sanga, W. W., & Lazzús, J. A. (2008). Critical properties, normal boiling temperatures and acentric factors of another 200 ionic liquids. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 47, 1318–1330.

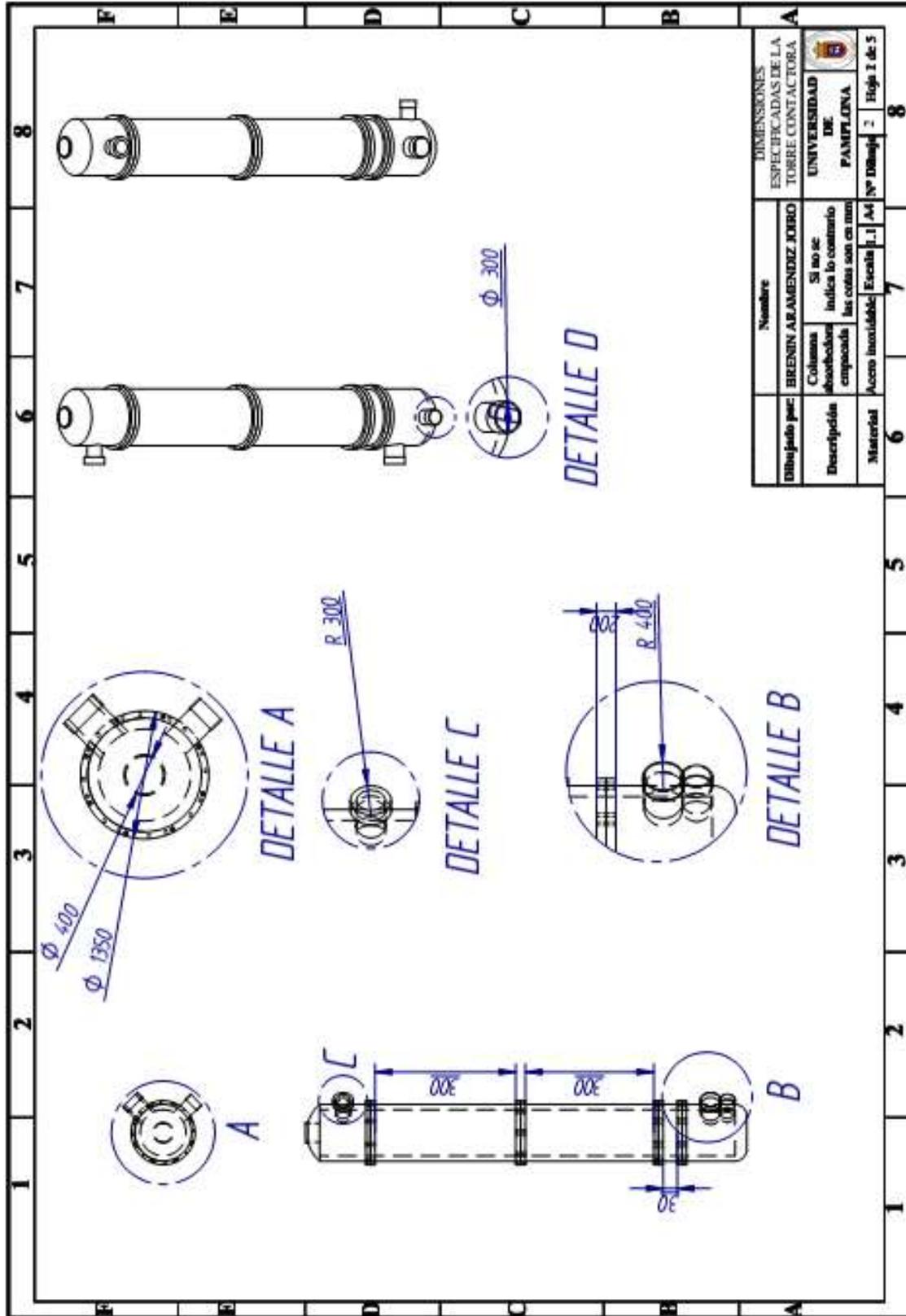
- Wang, G. Q., Yuan, X. G., & Yu, K. T. (2005). Review of mass-transfer correlations for packed columns. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 44(23), 8715–8729. <https://doi.org/10.1021/ie050017w>
- Wu, X., Yu, Y., Qin, Z., & Zhang, Z. (2014). The advances of post-combustion CO₂ capture with chemical solvents: Review and guidelines. In *Energy Procedia* (Vol. 63, pp. 1339–1346). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.11.143>
- Yang, W., Yu, X., Mi, J., Wang, W., & Chen, J. (2015). Mass transfer performance of structured packings in a CO₂ absorption tower. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 23(1), 42–49. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2014.10.003>
- Zhang, L.-L., Wang, J.-X., Xiang, Y., Zeng, X.-F., & Chen, J.-F. (2011). Absorption of Carbon Dioxide with Ionic Liquid in a Rotating Packed Bed Contactor: Mass Transfer Study. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50(11), 6957–6964. <https://doi.org/10.1021/ie1025979>
- Ziobrowski, Z., Krupiczka, R., & Rotkegel, A. (2016). Carbon dioxide absorption in a packed column using imidazolium based ionic liquids and MEA solution. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 47, 8–16. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2016.01.018>

Apéndices

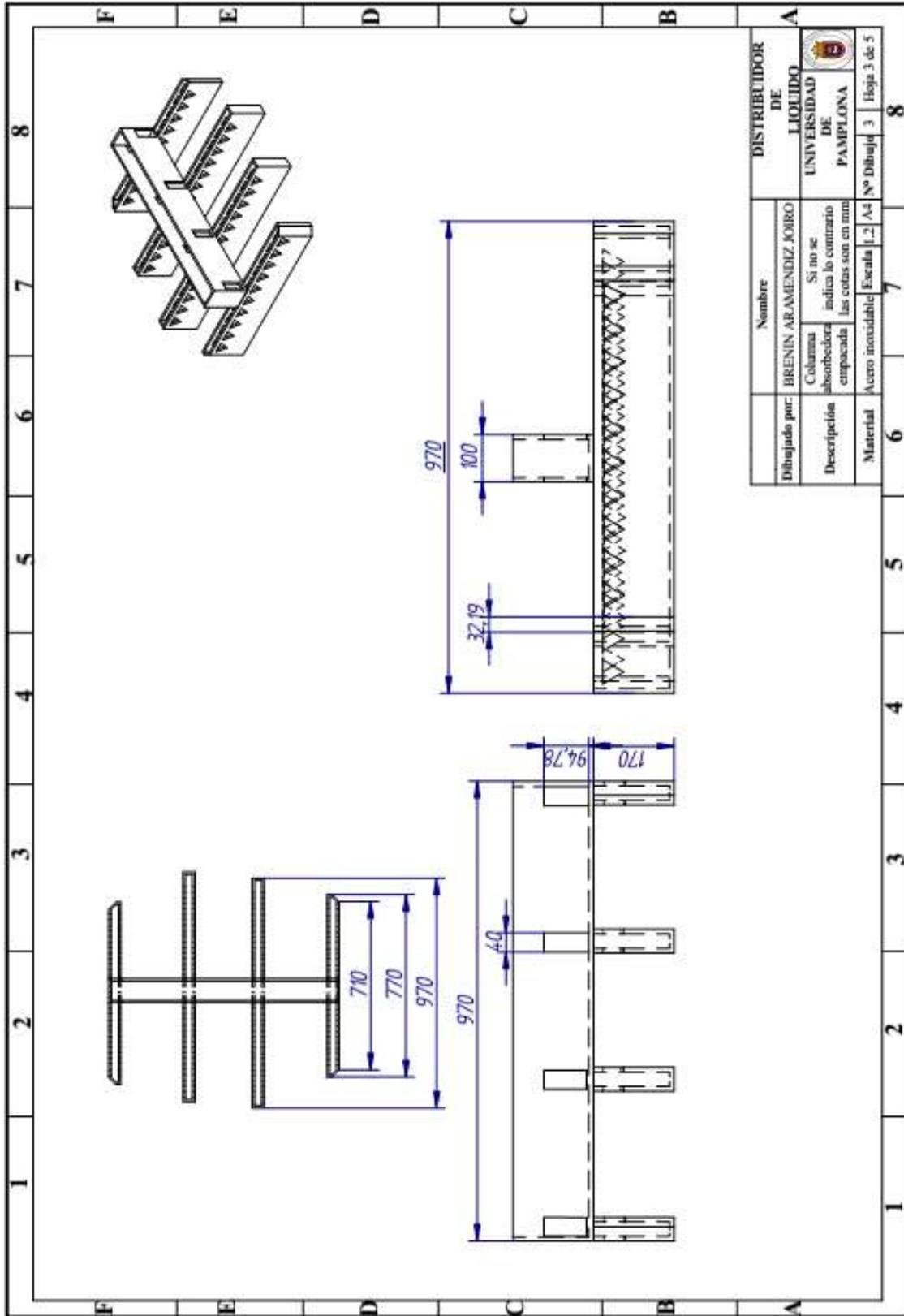
Apéndice A. Detalles de la torre absorbidora



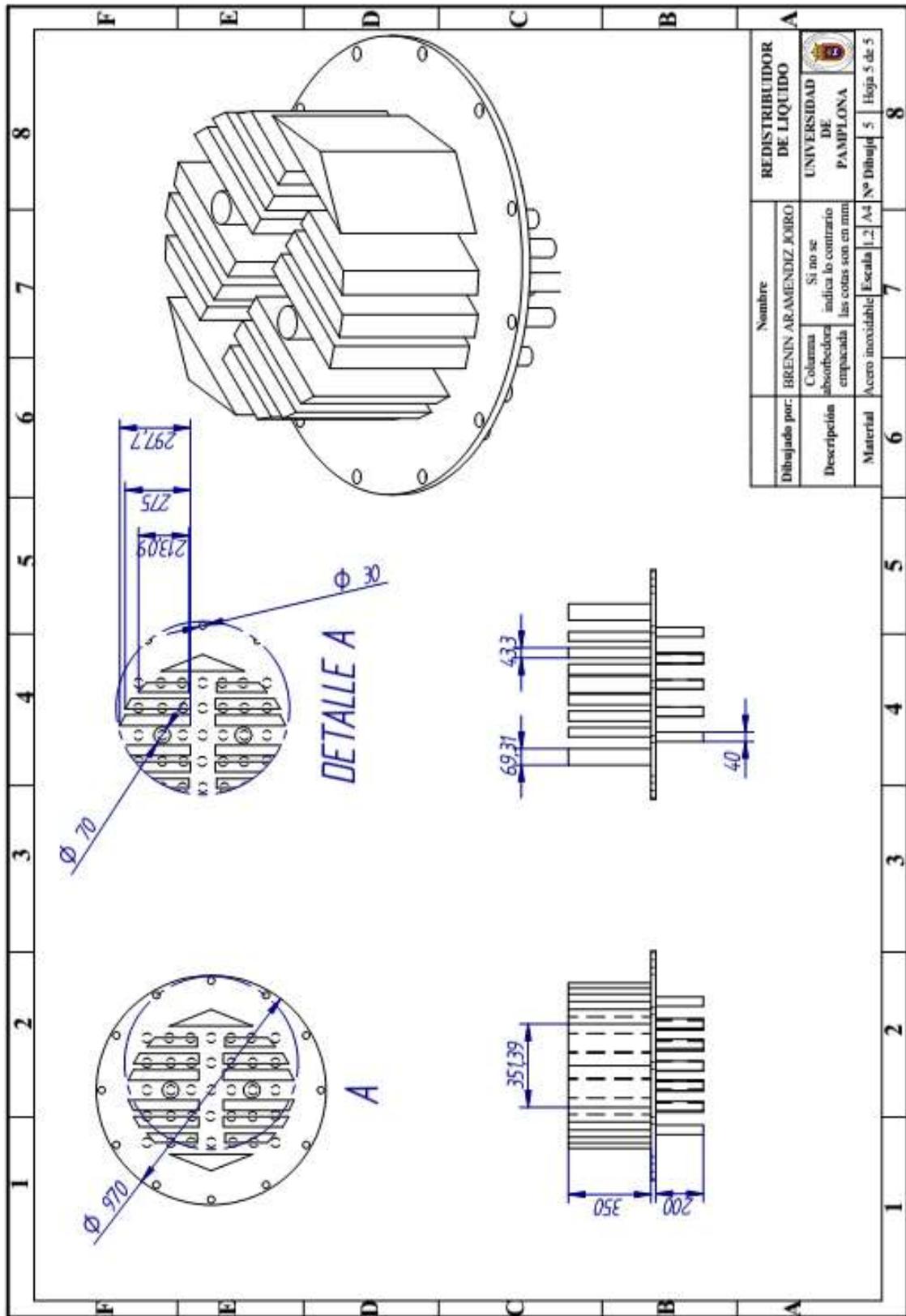
Apéndice B. Planos de las vistas de la torre absorbidora



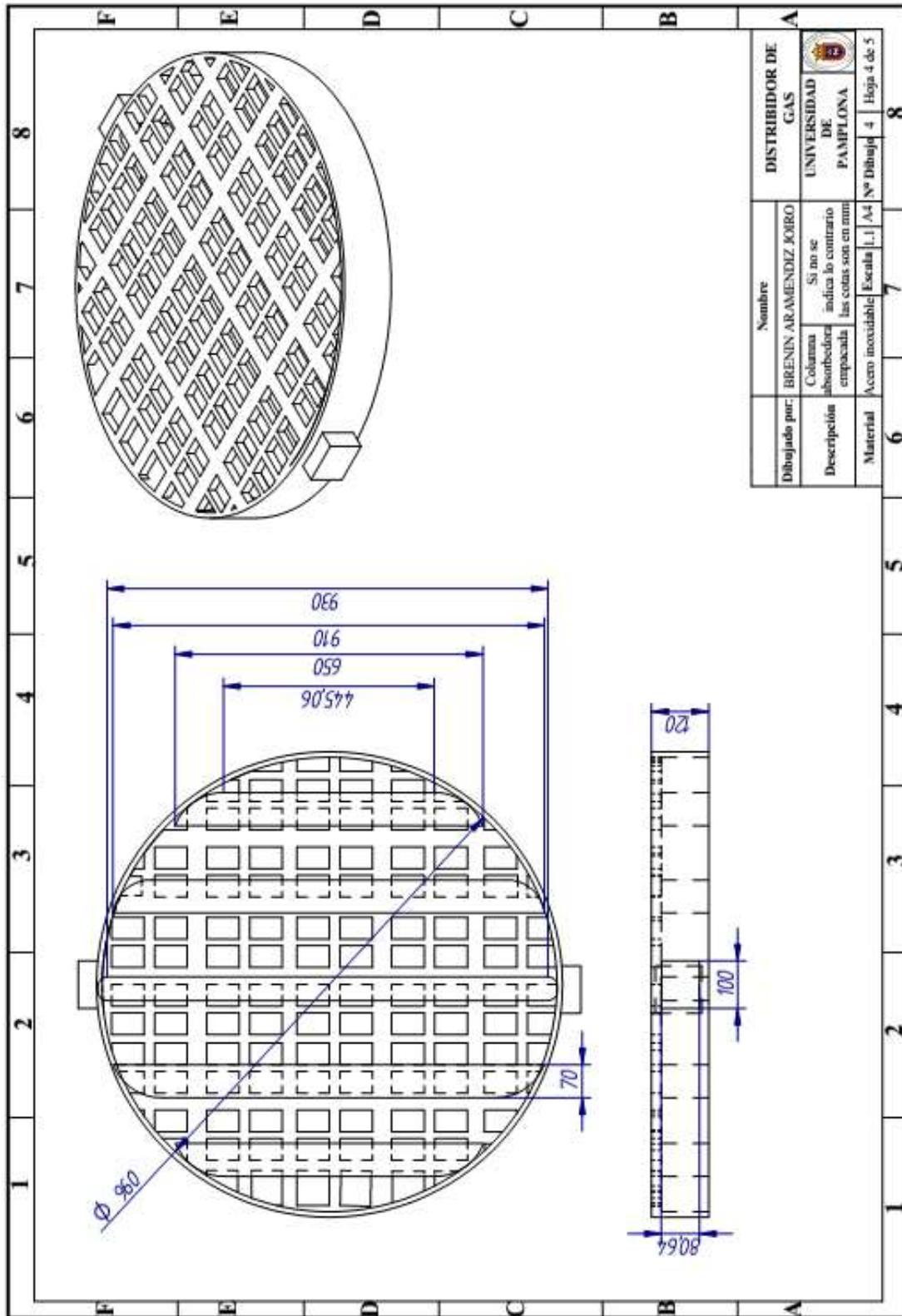
Apéndice C. Planos de las vistas del distribuidor de líquido



Apéndice D. Planos de las vistas del redistribuidor de líquido



Apéndice E. Planos de las vistas del distribuidor de gas



Apéndice F. Tabla de resultados de balance obtenidas mediante simulación en Aspen Plus V9.0

Material					
Stream Name	Units	GAS-IN	LIQ-IN	GAS-OUT	LIQ-OUT
Description					
From				B2	B2
To		B2	B2		
Stream Class		CONVEN	CONVEN	CONVEN	CONVEN
Maximum Relative Error					
Cost Flow	\$/hr				
MIXED Substream					
Phase		Vapor	Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	C	30	30	301.488	301.438
Pressure	bar	5	5	5	5
Molar Vapor Fraction		1	0	1	0
Molar Liquid Fraction		0	1	0	1
Molar Solid Fraction		0	0	0	0
Mass Vapor Fraction		1	0	1	0
Mass Liquid Fraction		0	1	0	1
Mass Solid Fraction		0	0	0	0
Molar Enthalpy	cal/mol	-11252,9	-40923,6	-6252,61	-41305,5
Mass Enthalpy	cal/gm	-372.414	-181.054	-212.932	-186.474
	cal/mol-				
Molar Entropy	K	-17.755	-787.968	-204.187	-768.258
Mass Entropy	cal/gm-K	-0,0587603	-0,348612	-0,0695357	-0,346832
Molar Density	mol/cc	0,000199088	0,0060717	0,000198824	0,0061181
Mass Density	gm/cc	0,00601563	137.239	0,00583833	13.552
			-		
Enthalpy Flow	cal/sec	-744828	1,09E+12	-372960	-1,12E+12
Average MW		30.216	226,03	293.643	221.507
Mole Flows	kmol/hr	238.284	955.625	214.735	979.175
C8H15-01	kmol/hr	0	955.625	2,50E-06	955.625
O2	kmol/hr	169.182	0	151.935	172.472
N2	kmol/hr	192.772	0	185.193	757.885

CO2	kmol/hr	285.941	0	143.483	142.458
Mole Fractions					
C8H15-01		0	1	1,17E-08	0,97595
O2		0,071	0	0,0707545	0,0017614
N2		0,809	0	0,862427	0,00774004
CO2		0,12	0	0,0668186	0,0145488
Mass Flows	kg/hr	7200	216000	6305,54	216894
C8H15-01	kg/hr	0	216000	5,65E-04	216000
O2	kg/hr	541.362	0	486.173	551.888
N2	kg/hr	5400,22	0	5187,91	212,31
CO2	kg/hr	1258,42	0	631.466	626.956
Mass Fractions					
C8H15-01		0	1	8,97E-08	0,995876
O2		0,0751891	0	0,0771025	0,00025445
N2		0,75003	0	0,822753	0,000978863
CO2		0,174781	0	0,100144	0,00289061
Volume Flow	l/min	19948	2623,17	18000,4	2667,43
Vapor Phase					
Molar Enthalpy	cal/mol	-11252,9		-6252,61	
Mass Enthalpy	cal/gm	-372.414		-212.932	
	cal/mol-				
Molar Entropy	K	-17.755		-204.187	
Mass Entropy	cal/gm-K	-0,0587603		-0,0695357	
Molar Density	mol/cc	0,000199088		0,000198824	
Mass Density	gm/cc	0,00601563		0,00583833	
Enthalpy Flow	cal/sec	-744828		-372960	
Average MW		30.216		293.643	
Mole Flows	kmol/hr	238.284		214.735	
C8H15-01	kmol/hr	0		2,50E-06	
O2	kmol/hr	169.182		151.935	
N2	kmol/hr	192.772		185.193	
CO2	kmol/hr	285.941		143.483	
Mole Fractions					
C8H15-01		0		1,17E-08	

O2		0,071	0,0707545
N2		0,809	0,862427
CO2		0,12	0,0668186
Mass Flows	kg/hr	7200	6305,54
C8H15-01	kg/hr	0	5,65E-04
O2	kg/hr	541.362	486.173
N2	kg/hr	5400,22	5187,91
CO2	kg/hr	1258,42	631.466
Mass Fractions			
C8H15-01		0	8,97E-08
O2		0,0751891	0,0771025
N2		0,75003	0,822753
CO2		0,174781	0,100144
Liquid Phase			
Molar Enthalpy	cal/mol	-40923,6	-41305,5
Mass Enthalpy	cal/gm	-181.054	-186.474
	cal/mol-		
Molar Entropy	K	-787.968	-768.258
Mass Entropy	cal/gm-K	-0,348612	-0,346832
Molar Density	mol/cc	0,0060717	0,0061181
Mass Density	gm/cc	137.239	13.552
		-	
Enthalpy Flow	cal/sec	1,09E+12	-1,12E+12
Average MW		226,03	221.507
Mole Flows	kmol/hr	955.625	979.175
C8H15-01	kmol/hr	955.625	955.625
O2	kmol/hr	0	172.472
N2	kmol/hr	0	757.885
CO2	kmol/hr	0	142.458
Mole Fractions			
C8H15-01		1	0,97595
O2		0	0,0017614
N2		0	0,00774004
CO2		0	0,0145488

Mass Flows	kg/hr	216000	216894
C8H15-01	kg/hr	216000	216000
O2	kg/hr	0	551.888
N2	kg/hr	0	212,31
CO2	kg/hr	0	626.956
Mass Fractions			
C8H15-01		1	0,995876
O2		0	0,00025445
N2		0	0,000978863
CO2		0	0,00289061