

RESUMEN

El presente Proyecto abarca el estudio del proceso de absorción de dióxido de carbono con monoetanolamina (MEA), integrado en una planta de síntesis de etanol vía catalítica. Tras el estudio preliminar, se realiza la simulación de dicho proceso empleando una herramienta de simulación de procesos, concretamente el programa Aspen Plus, con el fin de realizar la ingeniería básica de los equipos principales.

El Proyecto se completa con una evaluación económica de la planta de absorción empleando el programa de evaluación de procesos Aspen Icarus Process Evaluator.





1. SUMARIO

RESUMEN.....	1
1. SUMARIO	3
2. PREFACIO.....	5
2.1 Origen del Proyecto.....	5
2.2 Antecedentes.....	6
3. INTRODUCCIÓN	9
3.1 Objetivos del Proyecto	9
3.2 Alcance del Proyecto.....	10
3.3 Combustibles líquidos a partir de biomasa.....	11
3.4 Producción de etanol.....	14
4. PROCESOS DE ABSORCIÓN DE CO₂.....	25
4.1 Consideraciones generales	25
4.2 Absorción de CO ₂	30
4.3 Selección del proceso de absorción de CO ₂	39
5. ABSORCIÓN DE CO₂ CON AMINAS	45
5.1 Fundamentos químicos del proceso.....	45
5.2 Tipos de aminas	49
5.3 Diagrama de flujo básico.....	53
5.4 Datos de diseño	57
5.5 Corrosión en las plantas de tratamiento con aminas. Degradación del absorbente	65
5.6 Tecnología ECONAMINE FLUE GAS (FG)	77
6. SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS EN ASPEN PLUS.....	91
6.1 Consideraciones generales	91
6.2 Creación de un entorno de simulación	92
6.3 Elección del modelo de propiedades	96
6.4 Introducción de datos y componentes	107
6.5 Diagrama de flujo preliminar	108



6.6 Diseño de equipos principales. Modelos Aspen.....	111
6.7 Equipos auxiliares.....	117
6.8 Análisis de sensibilidad. Especificaciones de diseño.	118
6.8 Modelos de convergencia de sistemas	121
7. SIMULACIÓN DE UN PROCESO DE ABSORCIÓN DE CO₂ CON ASPEN PLUS.	
INGENIERÍA BÁSICA DE UN SISTEMA MEA-CO₂.	139
7.1 Datos de diseño.....	139
7.2 Absorbedor	139
7.3 Stripper	167
7.4 Intercambiador y válvula	178
7.5 Equipos auxiliares.....	178
7.6 Simulación de la planta completa.....	181
7.7 Ingeniería básica. Resultados finales	211
7.8 Control de la planta de absorción.....	246
8. EVALUACIÓN ECONÓMICA CON ASPEN ICARUS	259
8.1 Inversión en equipos	262
8.2 Costes de operación	282
8.3 Otros costes	285
8.4 Comparación con los datos bibliográficos	293
9. AGRADECIMIENTOS	299
10. BIBLIOGRAFÍA.....	301



2. PREFACIO

2.1. ORIGEN DEL PROYECTO

El presente Proyecto de Fin de Carrera se enmarca en el Proyecto **RENEW**, uno de los dos Proyectos Integrados (IP) en el Marco Europeo dentro del campo de la utilización de biomasa. Un consorcio integrado por diversas industrias y universidades comenzó en Enero de 2004 a investigar diversas rutas de producción de combustibles de automoción a partir de biomasa. El objetivo del Proyecto RENEW, es el desarrollo de un proceso de producción de biocombustibles líquidos a partir de biomasa.

En varios subproyectos se investigarán diversas vías de producción de biocombustibles líquidos (etanol, mezcla de alcoholes, biodiesel) que finalmente se compararán para seleccionar la más adecuada desde un punto de vista económico y medioambiental.

Dentro del Proyecto Renew, el subproyecto número 4, trata específicamente de la producción de etanol a partir de la conversión termoquímica (gasificación) de biomasa. En este proyecto participa el Departamento de Ingeniería Química y Ambiental de la Universidad de Sevilla, cuya actividad se centra en dos áreas, por una parte en el desarrollo de un catalizador eficiente para la síntesis de alcoholes y por otra, en la síntesis del proceso global que abarca desde la unidad de gasificación de biomasa hasta las unidades de tratamiento del efluente del reactor de síntesis.

El Proyecto RENEW está financiado por la Unión Europea, con un presupuesto de 10 M€ durante 4 años, con el propósito de contribuir al incremento en la utilización de biocombustibles procedentes de biomasa y consecuentemente contribuir a la reducción de las emisiones de CO₂.



2.2. ANTECEDENTES

La producción de etanol, metanol e hidrógeno a partir de biomasa se presenta como una alternativa prometedora dentro de la fabricación de combustibles a partir de biomasa. Los dos últimos presentan características bien adaptadas a su utilización en Células de Combustible, tecnología aplicable a la automoción (*Fuel Cell Vehicles FCVs*), donde se espera alcanzar altas eficiencias, del orden de entre 2-3 veces mejores que las alcanzadas en los actuales vehículos basados en Motores de Combustión Interna (referencia bibliográfica [12]). Además estos combustibles son menos reactivos desde el punto de vista medioambiental y mas limpios, sin los inconvenientes de las emisiones de contaminantes como SO_x , NO_x , VOS y partículas.

Cuando estos productos pueden obtenerse sosteniblemente a partir de la biomasa madura, el ciclo energético global puede ser neutro desde el punto de vista de los gases de efecto invernadero. Esta característica podría proveer de una alternativa al sector del transporte mundial.

En lo referente a la fabricación de etanol , metanol e hidrógeno, estos pueden obtenerse a partir de biomasa vía gasificación. Para ello son posibles diversas rutas que engloban tecnologías convencionales, comerciales o avanzadas, las cuales están en desarrollo. Los procesos basados en dichas tecnologías (referencia bibliográfica [6]) constan de una serie de etapas básicas: pre-tratamiento, gasificación, limpieza del gas, reformado de hidrocarburos pesados, ajuste de la relación H_2/CO , síntesis, separación, y purificación.

Desde este punto de vista, son posibles diversas configuraciones del proceso. La gasificación puede ser atmosférica o a presión, directa o indirecta, lo que conlleva distintas composiciones del gas resultante. Los gases producto de estos procesos generalmente precisan tratamientos de acondicionamiento antes de introducirlos en los procesos de síntesis.

Nuestro proyecto de integra dentro del Proyecto de Fin de Carrera " Síntesis de etanol por vía termoquímica a partir de gas de gasificación" [29], realizado por José Caraballo Bello, en el cuál se evalúa la producción de etanol a por vía catalítica. El gas procedente del gasificador precisa un tratamiento previo para eliminar el agua y el CO_2 , ya que



estos productos interfieren en el proceso catalítico. Así mismo, también son posibles distintas alternativas para la sección de separación de CO₂, procesado y purificación.

Bajo este punto de vista global, este proyecto queda englobado en la valoración de las distintas alternativas para la sección de lavado de gases, concretamente la eliminación de CO₂, dentro del proyecto citado anteriormente.

Concretamente, en este proyecto se desarrolla la ingeniería básica y la evaluación económica mediante Aspen Plus, de la alternativa de separación de dióxido de carbono empleando aminas.





3. INTRODUCCIÓN

3.1. OBJETIVOS DEL PROYECTO

El objetivo general del proyecto es el estudio del proceso de absorción de dióxido de carbono con aminas, previa al reactor de síntesis de etanol en una planta de producción de etanol a partir de biomasa.

Dentro de este planteamiento general, el objetivo principal es la ingeniería básica y la evaluación económica del proceso de absorción de CO₂ con monoetanolamina, para lo cual utilizaremos el programa de simulación de procesos ASPEN PLUS.

El objetivo principal engloba los puntos que indicaremos a continuación:

- Estudio de los procesos existentes de absorción de CO₂ con aminas.
- Selección del proceso de absorción adecuado, teniendo en cuenta las características del gas procedente de la gasificación.
- Evaluación y selección de los equipos necesarios y planteamiento de un diagrama de flujo del proceso, teniendo en cuenta las características de la ruta propuesta.
- Simulación del proceso completo de separación de CO₂, con el programa de simulación de procesos químicos ASPEN PLUS.
- Ingeniería básica y control de la planta, partiendo de los resultados obtenidos en la simulación.
- Evaluación económica del proceso propuesto, con el programa de evaluación de procesos ASPEN ICARUS y comparación con otros datos obtenidos en la bibliografía.



3.2. ALCANCE DEL PROYECTO

Este proyecto se limita a la ingeniería básica y a la evaluación económica de un proceso de separación de CO_2 con aminas. El dimensionamiento de los equipos y la evaluación de los costes de inversión y operación se realiza como indicamos anteriormente, con el simulador Aspen Plus.

Los límites de batería del proceso de separación de dióxido de carbono que se integraría en su caso en el proceso global de síntesis de etanol son:

- Partimos de un gas procedente de gasificación, con una determinada composición, humedad temperatura y presión, que ya ha pasado por los procesos de purificación y lavado.
- Teniendo en consideración el punto anterior, el gas pasa por una zona de preparación del gas de síntesis, en la que se lleva a cabo la transformación de los hidrocarburos contenidos en la corriente gaseosa procedente del gasificador y en la cual la corriente se adapta a unas condiciones adecuadas para la síntesis de etanol. Tras un proceso de reformado y ajuste de la relación hidrógeno-monóxido es necesario eliminar el agua y otros compuestos cuya presencia no es deseable, como el dióxido de carbono. Nuestra unidad se situaría a continuación de las secciones de reformado y ajuste de la relación CO/H_2 .
- El proceso de simulación termina con las corrientes de productos, ya que no se contempla ningún tratamiento posterior del CO_2 eliminado, tan sólo se pretende realizar una eliminación del dióxido de carbono de la corriente de proceso y alcanzar un grado de eliminación razonable, de acuerdo con las características y exigencias del proceso en el que se integra.



3.3. COMBUSTIBLES LÍQUIDOS A PARTIR DE BIOMASA

Los biocombustibles son principalmente alcoholes, éteres, ésteres y otros productos químicos elaborados a partir de biomasa celulósicas tales como plantas herbáceas y leñosas, residuos agrícolas y forestales y una gran parte de los residuos municipales e industriales. El término biocombustible puede referirse tanto a combustibles destinados a la producción de energía eléctrica como a los combustibles utilizados en el sector transporte (automoción).

La producción de estos combustibles (referencia bibliográfica [20]) está ganando cada vez más interés internacional debido a su capacidad de reducir las emisiones de gases invernadero. Los biocombustibles ofrecen una serie de ventajas: son buenos para el medio ambiente porque reducen las emisiones a la atmósfera en comparación con los combustibles fósiles y utilizan para su fabricación desechos que comúnmente no tienen uso. A diferencia del petróleo, que es un recurso natural no renovable, los biocombustibles son renovables y representan una fuente inagotable de combustible.

3.3.1 BIOETANOL Y BIODIESEL

El etanol es el biocombustible más ampliamente utilizado hoy en día en países como los Estados Unidos. Más de 1.500 millones de galones (5.670 millones de litros aprox.) se adicionan anualmente a la gasolina para mejorar el rendimiento de los vehículos y reducir la contaminación atmosférica. El etanol es un alcohol y en su mayor parte se fabrica siguiendo un procedimiento similar al de la cerveza, en el que los almidones son convertidos en azúcares, los azúcares se convierten por fermentación en etanol, el que luego es destilado hasta conseguir el producto final. Cuando para su fabricación se utilizan materiales con biomasa celulósica en lugar de los forrajes tradicionales (cultivos ricos en almidones) es llamado bioetanol.

El etanol se utiliza para aumentar el octanaje de la gasolina y mejorar la calidad de sus emisiones. En la actualidad, el etanol se mezcla con gasolina para formar una mezcla E10 (10% de etanol y 90% de gasolina) pero puede ser usado en concentraciones mayores tal como la mezcla E85 o en su forma pura. Todos los fabricantes de automóviles que comercializan en países como Estados Unidos, donde, como hemos indicado



anteriormente, su utilización está muy extendida, aprueban el uso de ciertas mezclas de etanol y gasolina. Dichas mezclas de etanol como carburante se utilizan con éxito en todos los tipos de vehículos y máquinas que requieren gasolina.

A diferencia del etanol, que es un alcohol, el biodiesel es un éster, que puede producirse a partir de diferentes tipos de aceites tales como los de soja, colza y grasas vegetales o animales. A través de un proceso denominado transesterificación, los aceites orgánicos derivados son combinados con alcohol (etanol o metanol) y alterados químicamente para formar ésteres grasos tales como el éster etílico o el éster metílico. Los ésteres metílico o etílico derivados de biomasa pueden ser mezclados con combustible diesel convencional o usados como combustible puro (100% biodiesel).

El biodiesel es utilizado típicamente como un aditivo del combustible en una mezcla común del 20% (B20) con diesel de petróleo en motores de ignición y compresión (diesel); pero pueden utilizarse otros niveles de mezcla, dependiendo de factores económicos fundamentalmente del costo del combustible y de los beneficios deseados. Por esta razón, tanto el etanol como el biodiesel pueden contribuir a ampliar los suministros de combustibles gasolina y diesel.

Si tomamos como referencia Estados Unidos, se produjeron en el 2000 unos 5 millones de galones (unos 19 millones de litros) de biodiesel, aunque la capacidad de producción es de casi 50 millones de galones (unos 190 millones de litros) al año y se encuentra en crecimiento. Los productores estadounidenses emplean aceites de cocina reciclados y aceite de soja.

En cuanto a su empleo, el biodiesel es utilizado en algunas flotas de vehículos federales, estatales y de transporte y otros equipos. Tanto puro como mezclado, se utiliza en embarcaciones, naves turísticas y lanchas a motor. Además de estos empleos, existe interés creciente en utilizar biodiesel en aquellos lugares en donde los trabajadores son expuestos a gases de escape de diesel, en aeronaves, para controlar la polución en el área de los aeropuertos y en el sector ferroviario, donde las locomotoras que utilizan este combustible se enfrentan a restricciones en su utilización a menos que puedan reducirse sus emisiones.

En cuanto a las propiedades físicas específicas del biodiesel, que permiten que su utilización sea más segura que el diesel de petróleo, destaca la referente a su punto de



inflamación que, en su estado puro, es de más de 300 grados Fahrenheit (unos 147° Celsius) frente a los 125 grados Fahrenheit (51° Celsius aprox.) del diesel común. alguna de las consecuencias de esta característica es la reducción del riesgo de inflamación, y como ejemplo, aunque los incendios en las minas no son muy frecuentes, pueden ser devastadores y los equipos diesel están involucrados a menudo en ellos. Con el biodiesel este riesgo se reduce.

En la práctica, el biodiesel, en forma pura o en mezcla, puede almacenarse de manera similar a como se almacena el diesel de petróleo. A pesar de ello, en niveles de mayor concentración, el biodiesel puede deteriorar elementos de caucho natural o de espuma de poliuretano, lo que es un factor a tener en cuenta en el empleo de los materiales de fabricación de los motores.

Otras características a tener en cuenta son fundamentalmente que el empleo del biodiesel en un motor diesel convencional tiene como consecuencia una reducción sustancial de los hidrocarburos no quemados, del monóxido de carbono y de la materia sólida. Las emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x), por otra parte, los estudios revelan que pueden reducirse ligeramente o bien aumentar según el ciclo de actividad y los métodos de prueba. Sin embargo, contribuye a disminuir la fracción de carbono sólido de la materia sólida (partículas), ya que el oxígeno en permite combustión mas completa a CO₂, elimina la fracción de sulfato, debido a que no existe presencia de sulfuros en el combustible, mientras que la fracción soluble, o hidrocarbono, permanece igual o aumenta.

Por ello, el biodiesel presenta características apropiadas para su utilización con las nuevas tecnologías tales como catalizadores (que reducen la fracción soluble de las partículas diesel pero no la fracción de carbono sólido), filtros de partículas y la recirculación de gases de escape (con una vida potencial más prolongada del motor debido a una menor presencia de carbono).

En cuanto a la utilización de biodiesel y de las mezclas de este en espacios cerrados, tales como aparcamientos públicos o garajes, conllevan un notable beneficio, ya que los gases de escape presentan un olor menos molesto. Los usuarios también han declarado que no les produce irritación ocular. La razón podemos encontrarla en presentar una composición oxigenada, por lo que, como hemos indicado anteriormente, los motores diesel presentan una combustión más completa que en el caso del diesel de petróleo.



Para complementar la información relativa a la biomasa de este informe, podemos dirigirnos al Anexo A.

3.4 PRODUCCIÓN DE ETANOL

3.4.1 CONSIDERACIONES GENERALES

Realizaremos una breve revisión histórica sobre la utilización del etanol como combustible. Cuando Henry Ford realizó el primer diseño de su automóvil modelo *T*, en 1908, esperaba que el combustible de mayor uso fuera el etanol, fabricado a partir de fuentes renovables. De 1920 a 1924, la Standard Oil Company comercializó una la gasolina vendida en el área de Baltimore con un 25% de etanol, pero los altos precios del maíz, combinados con dificultades en el almacenamiento y transporte, hicieron concluir el proyecto. A finales de la década de los 20 y durante los años 30, se hicieron evidentes los esfuerzos para reavivar un programa de combustible con etanol, basado en una legislación federal y estatal, particularmente en el Cinturón Maicero de los Estados Unidos, pero sin éxito.

Es en este marco donde Henry Ford y varios expertos colaboradores, unieron fuerzas para promover el uso del etanol; se construyó una planta de fermentación en Atchison, Kansas, con una capacidad de producción de 38.000 litros diarios de etanol destinado específicamente para combustible de motores. Durante los 30, más de 2.000 estaciones de servicio localizadas en el Medio Oeste estadounidense vendieron este etanol fabricado a partir de maíz y que denominaron "gasohol". Los bajos precios del petróleo llevaron al cierre de la planta de producción de etanol en la década de los 40, llevándose consigo el negocio de los granjeros americanos. Paradójicamente, el gasohol fue reemplazado por el petróleo.

El interés del etanol como combustible surge en los años setenta tras la crisis del sector energético, y la consecuente subida desmesurada de los precios del petróleo. Es en este marco cuando se comienzan a buscar nuevas vías de producción de combustibles para automoción prescindiendo del petróleo. Entre las posibles opciones surge la posibilidad de utilizar los alcoholes, entre ellos el etanol y el metanol, así como el empleo de hidrocarburos oxigenados como aditivos a las gasolinas con la intención de incrementar el



número de octanos. Cabe la posibilidad de emplear éteres como ETBE y MTBE (respectivamente etil-tercbutil éter y metil-tercbutil éter) con unas expectativas de utilización incluso mayores que las de los alcoholes. La volatilidad del MTBE es la menor de todos los aditivos, menor incluso que la del petróleo, por lo que es considerado el aditivo más apropiado. Además fueron precisamente las consideraciones ambientales, las que propiciaron la opción de utilizarlos como aditivos de las gasolinas para aumentar el número de octano, tras las limitaciones en el plomo y los aromáticos.

El MTBE se obtiene directamente a partir del petróleo, y se puede añadir hasta en una proporción del 10%. El ETBE, por el contrario, se puede obtener a partir del bioetanol, a través de síntesis química a partir de etanol e isobutilenos procedentes del FCC (cracking catalítico en lecho fluido).

Teniendo en cuenta lo comentado anteriormente, la opción que se consideró en un principio fue la utilización de alcoholes como aditivos. Los países pioneros en la utilización de alcoholes como aditivos fueron Estados Unidos y Brasil. En Estados Unidos se decidió que una proporción aceptable sería una mezcla del 10% en alcoholes. En Suramérica se ha llegado a mezclar alcoholes con gasolinas hasta proporciones del 20%.

El etanol se puede utilizar puro o mezclado. A las mezclas de alcoholes y gasolinas se las denomina también *blends*, según la pureza. Si la pureza es de más del 99.5% en alcohol, se puede usar como aditivo sin apenas modificaciones en el motor. Para ser utilizado sin mezclar con gasolina no se precisa tanta pureza, si bien sí es preciso realizar ciertas modificaciones en los motores de combustión interna.

Entre las ventajas que se consiguen por la utilización de un combustible constituido parcial o totalmente por alcoholes destacan unas mejores prestaciones globales tales como un incremento del par motor, una combustión más completa y menos residuos en general (referencia bibliográfica [12]).

Entre las desventajas podemos citar un mayor consumo de combustible debido al menor poder calorífico, emisiones de aldehídos y posibles contenidos en ácido sulfúrico y problemas de almacenamiento, sobre todo en el caso del metanol.



El empleo de etanol como combustible sin mezclar precisa, como hemos comentado anteriormente de una serie de modificaciones que se deben efectuar en los motores de combustión interna. Las más importantes se resumen en el Cuadro 3.1.

Un dato interesante que refleja el empleo del etanol como combustible de automoción, es la fabricación a cargo de la Ford Motor Company de un modelo un prototipo capaz de trabajar con alcohol puro o mezclas en distintas proporciones, de manera que se van modificando las características del motor en función de la proporción de alcohol en la mezcla. El modelo se denomina Escort FFV en referencia a las características del motor (flexible fuel vehicle).

Cuadro 3.1. Modificaciones de los motores para la utilización de etanol como combustible.

RELACIÓN DE MODIFICACIONES

Colectores de admisión.

Válvulas y asientos (mayores relaciones de compresión volumétricas, mayor NO).

Grado térmico en las bujías.

Adelanto de encendido.

Juntas más resistentes.

Tuberías de nylon.

Materiales de fabricación del diafragma de la bomba de combustible.

Tratamiento con plomo o estaño el depósito de combustible.



3.4.2 PLANTA DE SÍNTESIS DE ETANOL POR VÍA TERMOQUÍMICA A PARTIR DE GAS DE GASIFICACIÓN

La planta de absorción de CO₂ en aminas se encuentra integrada, como mencionamos anteriormente, en un proyecto síntesis de etanol a partir del gas producido por gasificación de biomasa. Por lo tanto, haremos una breve descripción del proceso para ver en que parte del proceso se encuentra ubicada la unidad de eliminación de CO₂, lo que será necesario para analizar las características de la corriente que vamos a tratar ([28] y referencias bibliográficas [2], [20] y [11]).

El proceso de síntesis de etanol parte de la gasificación de biomasa, proceso mediante el que se obtiene gas de síntesis, esencialmente H₂ y CO. En un proceso de gasificación, como indicamos anteriormente, la biomasa se transforma fundamentalmente en CO, CO₂, H₂O y H₂, y de forma minoritaria, en hidrocarburos ligeros y alquitranes. Las proporciones respectivas de cada uno de ellos dependerán del tipo de gasificador, de las condiciones de temperatura y presión de trabajo, del tipo de biomasa y del método utilizado de gasificación: con vapor, inertes u oxígeno puro.

Los tipos de gasificadores empleados comúnmente son el gasificador IGT y el BCL. El gasificador IGT (Institute of Gas Technology) que se caracteriza en primer lugar porque el aporte energético se realiza de forma directa; es decir, se alimenta oxígeno junto con la biomasa para que se produzca la combustión de una parte de la biomasa, simultáneamente a la reacción de gasificación. Se genera así el calor que consumen las reacciones de gasificación, endotérmicas. Esta técnica de calentamiento directo también se utiliza por los gasificadores de carbón que trabajan a presión. La gasificación tiene lugar en lecho fluido.

El gasificador BCL (Batelle Columbus Laboratory) es el empleado en este proceso, y se caracteriza porque el calor se aporta de forma indirecta, es decir, la combustión se realiza en un reactor separado del reactor de gasificación, y el calor se transmite de uno a otro mediante un medio de transferencia. El agente gasificador es vapor de agua, que será alimentado al reactor de gasificación junto con la biomasa.

En el reactor de combustión, el combustible es una parte de la propia biomasa, que se quema en parte, y el resto se introduce al gasificador. Éste reactor de combustión está



relleno de arena o algún inerte inorgánico. La arena calentada se transporta al lecho de gasificación, de forma que ésta aporta el calor necesario para gasificar la biomasa. De esta manera se puede utilizar aire en la combustión, sin que el nitrógeno aparezca en la corriente de gases producidos. La ventaja es que no es necesario producir el oxígeno puro, así que esta alternativa tendrá un proceso menos.

Una desventaja es una pérdida de productividad de gas, ya que el proceso combustión con transferencia indirecta de calor es menos eficiente, y se empleará más biomasa en la combustión que en el caso IGT, por lo que para la misma biomasa alimentada se producirá menos gas de síntesis. El gas producido tiene un contenido bajo en CO₂ y alto en hidrocarburos.

Las características típicas de la corriente procedente del gasificador BCL, pueden verse en la Tabla 3.1.

Desde el punto de vista de la composición, una de las características más importantes que podemos apreciar es la ausencia de azufre, y, por otra parte, el contenido en humedad. La planta de producción de etanol está dividida en una serie de secciones que indicamos a continuación.

- Gasificación, limpieza previa del gas y compresión a la entrada del Reforming.
- Reformado: Steam Reforming o Reforming Auto térmico.
- Adaptación de la relación H₂/CO. Shift Reactor.
- Eliminación de agua: flash.
- Eliminación de CO₂.
- Sección de compresión a la entrada del loop del reactor.
- Reactor de síntesis de etanol.
- Tren de separación, flashes y torres de destilación.



Tabla 3.1 Corriente de alimentación al proceso. Efluente del gasificador BCL.

Temperatura, °C	40
Presión, bar	1,2
Fracción Vapor	0,853
Flujo Molar, kMol/h	3151,04
Flujo Másico, kg/h	68095,51
Flujo Volumétrico, m ³ /h	58317,97
Entalpía MMkcal/h	-103,64

Fracción Molar

Hidrógeno	0,180
Monóxido de Carbono	0,370
Dióxido de carbono	0,090
Metano	0,130
Etileno	0,040
Etano	0,006
Agua	0,200
Nitrógeno	0
Oxígeno	0
Metanol	0
Formaldehído	0
Etanol	0



Los procesos anteriores se agrupan fundamentalmente en tres zonas de operación que pasaremos a describir brevemente.

- A. Zona de **preparación del gas de síntesis**, en la que se lleva a cabo la transformación de los hidrocarburos contenidos en la corriente gaseosa procedente del gasificador y en la cual la corriente se adapta a unas condiciones adecuadas para la síntesis de etanol. En primer lugar se transforman el metano, etileno y etano en hidrógeno y dióxido de carbono. Para ello, se lleva a cabo un proceso de reformado, que puede ser un Steam Reforming (SMR) o Reforming Auto térmico (ATR). Posteriormente se debe ajustar la relación hidrógeno-monóxido de carbono (H_2/CO) al valor que precisa el catalizador utilizado en el reactor de síntesis de etanol. Esto se lleva a cabo en un reactor de gas de agua, basado en la reacción conocida como Shift Reaction (SGHW) Por último se eliminan el agua (flash) y otros compuestos cuya presencia no es deseable como el dióxido de carbono.

El gas procedente de gasificación viene a una determinada presión y temperatura y es sometido un proceso de reformado, por lo que debe ser comprimido y calentado hasta que alcance la presión y temperatura requeridas en el proceso de reformado. Por ello, se incluirán en esta sección compresores para comprimir la corriente y un horno de proceso o intercambiadores entre corrientes para calentar la corriente de gases.

- B. Zona de **síntesis de etanol** propiamente dicha. En esta zona el equipo principal es el reactor de síntesis catalítica de etanol. Como el reactor trabaja a unas condiciones determinadas de presión y temperatura, también es necesario una sección previa al reactor de compresión y de calentamiento, ya sea por intercambio con otros fluidos del proceso, consumiendo fuel gas o mediante vapor. El efluente del reactor tiene que ser enfriado antes de proceder a una separación de los productos generados en el reactor. La fracción de los reactivos que no ha reaccionado debe ser introducida de nuevo a la entrada del reactor o proceso, separando los elementos que no han reaccionado para reintroducir cada componente en la sección del proceso requerida. Por ello, en esta sección también aparecen equipos de separación del CO e H_2 . Además contamos con un compresor para reponer las pérdidas de carga de la corriente que se recircula a la entrada del reactor. En el caso de corrientes que pasan de una sección de alta



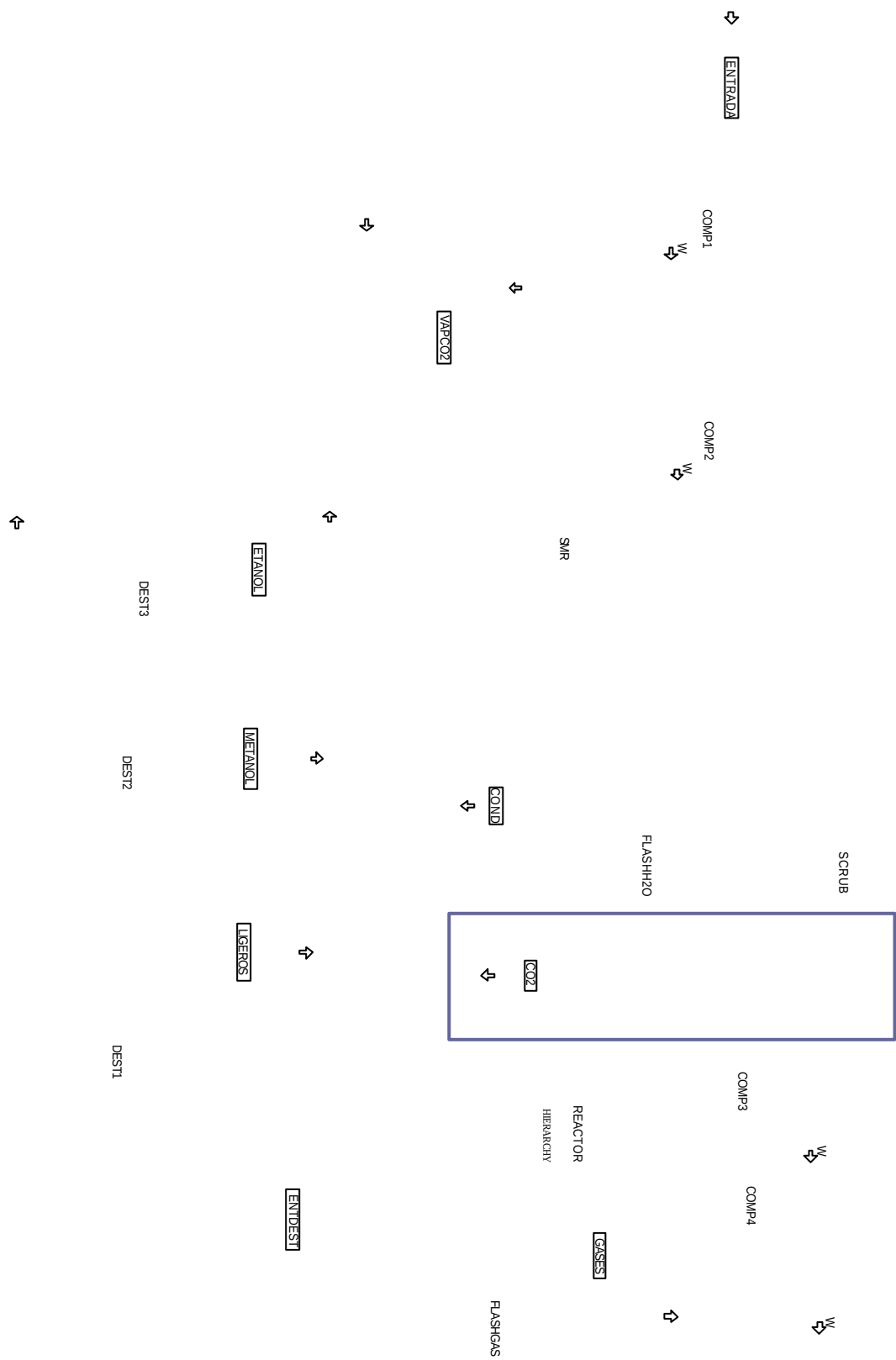
presión a una de baja presión, se dispone de una turbina, para aprovechar ésta energía en forma de trabajo.

- C. Por último la zona de separación de productos, donde encontramos básicamente flashes y torres de destilación, con los que se separan los productos (etanol), subproductos, posibles corrientes de reactivos para recircular y fuel gas.

Un esquema simplificado del proceso es el que se muestra en la Figura 3.1.



Figura 3.1







4. PROCESOS DE ABSORCIÓN DE CO₂

4.1. CONSIDERACIONES GENERALES

Los procesos de separación de gases implican la eliminación de impurezas de la fase vapor de las corrientes gaseosas. Estos procesos pueden ser muy variados e implican desde operaciones simples de lavado en una sola etapa, hasta sistemas complejos multietapa con recirculaciones. En cuanto a su clasificación, estos procesos, por lo menos en las primeras fases de la operación, entran dentro de una de las cinco categorías siguientes (referencias bibliográficas [1], [4], [6] y [13]):

- Absorción en líquidos.
- Adsorción en sólidos.
- Permeación a través de membranas.
- Conversión química a otro compuesto.
- Condensación.

Describiremos estos procesos brevemente.

Absorción. La absorción se refiere a la transferencia de un componente desde la fase gaseosa en donde se encuentra, a una fase líquida en la cual es soluble. La desorción o *stripping* es exactamente la operación contraria: la transferencia del componente disuelto en la fase líquida a la fase gas. La absorción es considerada la más importante de las operaciones dentro de los procesos de purificación de corrientes gaseosas. La absorción puede ser física, en la que el absorbente es generalmente un compuesto orgánico polar, o química, en la que tiene lugar una reacción química reversible entre el componente y el disolvente. Analizaremos este proceso con mayor profundidad en apartados posteriores.

Adsorción. Aplicada a purificación de gases, consiste en la concentración selectiva de uno a más componentes de un gas, en los microporos de la superficie de un sólido. La



mezcla de los componentes adsorbidos se denomina adsorbato, mientras que el sólido dónde quedan retenidos se denomina absorbente. Entre ellos destacan las zeolitas, el carbón activado, o las arcillas. Las fuerzas de atracción que mantienen el adsorbato adherido al absorbente son más débiles que los enlaces químicos, lo que permite que el adsorbato pueda ser liberado o desorbido aumentando la temperatura o reduciendo la presión parcial del componente en la fase gas de forma análoga a la absorción (stripping). Cuando el componente absorbido reacciona químicamente con el sólido, la operación se denomina quimisorción y la desorción generalmente no es posible.

Permeación a través de membranas. Se trata de una tecnología relativamente nueva dentro de los procesos de purificación de gases. En este proceso, membranas de material polimérico separan impurezas mediante permeación selectiva de uno o más componentes gaseosos situados en una cara de la membrana a través de la obstaculización. Los componentes se disuelven en el polímero en una de las superficies (caras), y son transportados a través de la membrana como resultado del gradiente de concentración. Este gradiente se produce gracias a una elevada presión parcial en la fase gas de los componentes llave a un lado de la membrana, frente a la baja presión parcial del mismo en el lado opuesto, originado por la permeación.

Conversión química. La conversión química abarca un amplio rango de procesos, incluyendo reacciones catalíticas y no catalíticas en fase gaseosa, así como las reacciones de componentes en fase gas con sólidos. Por otra parte, las reacciones entre especies gaseosas con líquidos y con partículas sólidas suspendidas en líquidos se consideran como un caso especial de absorción. Las reacciones se llevan a cabo en reactores, cuyo diseño tiene en cuenta parámetros como la velocidad espacial, tiempo de reacción o la temperatura. Además de las reacciones comentadas, también destacan la metanación, la oxidación química o la hidrólisis.

Condensación. Cuando se refiere a su aplicación dentro de la purificación de corrientes gaseosas, presenta un especial interés por la eliminación de componentes orgánicos volátiles (VOCs) de gases de escape. El proceso consiste en un simple enfriamiento de la corriente de gas a una temperatura a la cual los componentes orgánicos presenten una baja presión parcial adecuada para ser recogidos como condensado. También se conoce bajo la denominación de separación criogénica.



De todos ellos, tanto la absorción, como la separación criogénica o la adsorción, suelen emplearse para la separación de grandes cantidades de contaminante, mientras que los restantes suelen emplearse cuando los volúmenes a tratar son inferiores o bien se trata de trazas.

La elección del proceso óptimo depende sobre todo del tipo de impurezas presentes en la corriente a purificar, pero también dependerá de las condiciones del gas a tratar lo que hará más apropiado un sistema u otro.

Dentro de las impurezas de la fase gas más comunes, nos interesa fundamentalmente el dióxido de carbono. El sulfuro de hidrógeno es una impureza muy común, y generalmente acompaña al CO₂, por lo que la mayor parte de los procesos de eliminación de dióxido de carbono consideran la presencia de ambos compuestos así como su captura simultánea.

Los procesos de eliminación de CO₂ (y SH₂) se pueden agrupar en siete categorías (Tabla 4.1). Tanto la absorción en soluciones alcalinas (etanolaminas, amoníaco,...), como la absorción física (polietilenglicol dimetiléter,...) son procesos apropiados para el tratamiento de grandes volúmenes de gas conteniendo estos compuestos. Por otra parte, la absorción física no puede considerarse competitiva desde el punto de vista económico, cuando la presión parcial del gas ácido es baja, debido a que la capacidad de absorción de los solventes físicos depende fuertemente de la presión parcial del componente.

La absorción física por lo tanto, requiere presiones parciales por encima de los 200 psia, mientras que la absorción en soluciones alcalinas es apropiada a bajas presiones parciales.

La permeación a través de membranas es particularmente aplicable para la eliminación de CO₂ de gases a altas presiones. El proceso se basa en la utilización de módulos de operación relativamente pequeños, y un incremento en la capacidad de la planta es llevada a cabo con el empleo proporcional de más módulos. Como consecuencia, el proceso no responde a economías de escala y se hace menos competitivo que la absorción conforme va aumentando el tamaño de las plantas.

Tabla 4.1. Áreas de aplicación de los procesos de eliminación de CO₂



DIRECTRICES PARA LA ELECCIÓN DEL PROCESO DE ELIMINACIÓN DE CO ₂			
PROCESO	Aplicación	Presión parcial	Tamaño de la planta
Absorción en soluciones alcalinas	A	L	H
Absorción física	A	H	H
Absorción/Oxidación	-	L	H
Sorción seca/Reacción	-	L	L
Permeación (membranas)	A	H	L
Adsorción	A	L	L
Metanación	A	L	L
A= Aplicable, H= alto, L= bajo			

Cuando el dióxido de carbono y el sulfuro de hidrógeno son absorbidos en soluciones alcalinas o absorbentes físicos, normalmente evolucionan a través del proceso llegando a la regeneración sin modificarse químicamente. Esta circunstancia beneficia a aquellas plantas que tratan el componente eliminado con el fin de darle una utilidad posterior, como puede ser el caso del CO₂. Para otro tipo de sustancias como el SH₂, pueden ser útiles unidades de transformación como el proceso Claus, cuando la cantidad eliminada supera unos límites (en torno a 10 t/día). Sin embargo, cuando las cantidades a eliminar son bajas, incluso trazas, o bien se procesan pequeñas cantidades de gas, otros procesos como la oxidación, pueden ser más apropiados. En este, los compuestos eliminados sufren una transformación química.

Tras esta visión general, el caso concreto que nos ocupa es la eliminación de CO₂. Entre las categorías de procesos citados anteriormente, los más comúnmente utilizados en el caso del dióxido de carbono figuran en la Tabla 4.2. Tenemos que tener en cuenta que para el caso del CO₂ y de otras impurezas mayoritarias, las capacidades y las condiciones del proceso determinan la naturaleza del proceso adecuado aplicable en cada caso. Para el tratamiento de gas de síntesis, gas natural o gases de combustión, cuyos procesos implican grandes volúmenes a tratar a determinadas condiciones de



presión y temperatura, los tratamientos más adecuados son los que se indican en dicha tabla.

Tabla 4.2. Procesos disponibles para el tratamiento de gases

PROCESOS			
Absorción química	Absorción física	Lecho fijo	Otros
Aminas: monetanolamina, dietanolamina, trietanolamina, diglicolamina, diisopropilamina	Fluor solvent, Purisol, Rectisol, Selexol, Sulfinol, agua	Carbón activado, Óxido de hierro, tamices moleculares, óxidos de zinc	Destilación
Carbonato de potasio activado: Benfield, Catacarb, Lurgi, Vetrocoke			
Otros: Alkazid, amoníaco, cobre líquido, Scott, Stratford, fosfato tripotásico, Ferrox, Konox, Manchester, Seaboard, Sulfox, Thylox, fenolatos de sodio			

Las consideraciones generales de la absorción de gases se comentan brevemente en el Anexo B.



4.2 ABSORCIÓN DE CO₂

Lo expuesto en este capítulo se a extraído de las referencias bibliográficas [1], [8] y [13].

4.2.1 ABSORCIÓN FÍSICA

Cuando las impurezas de las corrientes gaseosas suponen una apreciable fracción de la corriente total, los métodos de absorción física se consideran mucho más apropiados que el empleo de disolventes químicos, ya que el coste de recuperar los componentes a partir de dichos disolventes químicos mediante regeneración térmica, está fuera de proporción respecto al valor de la corriente a tratar. Estos materiales suelen absorber el componente físicamente sin que se vean involucradas reacciones químicas, por lo que a la hora de la desorción no es necesaria la aplicación de calor, sino una simple reducción de la presión.

En la Tabla 4.3 se indican los principales procesos de absorción física, el disolvente empleado así como las empresas que lo comercializan.

Tabla 4.3. Procesos que emplean absorción física [8].

Process Name	Solvent	Process Licensor
Simple Physical Solvents		
Fluor Solvent SELEXOL	Propylene carbonate (PC)	Fluor Daniel
Sepasolv MPE	Dimethyl ether of polyethylene glycol (DMPEG)	Union Carbide
Purisol	Methyl isopropyl ether of polyethylene glycol (MPE)	Badische (BASF)
Rectisol	N-Methyl-2-pyrrolidone (NMP)	Lurgi
Ifpexol	Methanol	Lurgi and Linde AG
Estasolván	Methanol	Institut Français du Pétrole (IFP)
Methylcyanoacetate	Tributyl phosphate	IFP/Uhde
	Methylcyanoacetate	Unocal
Mixed Physical/Chemical Solvents		
Sulfinol	Sulfolane and DIPA or MDEA	Shell Oil/SIPM
Amisol	Methanol and secondary alkylamine	Lurgi
Selefining	Undisclosed physical solvent and tertiary amine	Snamprogetti



En general son más apropiados para la eliminación de dióxido de carbono que para otros gases ácidos, aunque soportan bien la eliminación de dicho componente en presencia de otros interferentes o bien absorción simultánea, principalmente con dióxido de azufre.

Como se puede comprobar en la tabla anterior, generalmente se trata de sustancias orgánicas las cuales desde el punto de vista práctico, deben de presentar una serie de características. Entre ellas, deben presentar un equilibrio de solubilidad para gases líquidos, varias veces superior al del agua, además deben presentar una baja viscosidad y una considerablemente baja higroscopía. No deben ser corrosivos con los materiales que se emplean generalmente en la fabricación de los equipos, y tampoco deben reaccionar con el resto de componentes de la fase gas, y, preferiblemente presentar una baja presión de vapor a temperatura ambiente.

Originariamente el agua se empleaba como absorbente para la eliminación de gases ácidos, pero su empleo se ha desechado a lo largo del tiempo debido a las altas tasas de circulación necesarias.

En cuanto a la regeneración, los esquemas más simples de procesos de absorción física involucran el empleo de separaciones flash a presión atmosférica o a vacío, y bien mediante la utilización de un gas inerte. En ocasiones es necesario el empleo de regeneraciones térmicas, pero el requerimiento energético de estos procesos es inferior al de los disolventes reactivos. Las velocidades de circulación y caudales que se manejan son también inferiores, particularmente en los casos en los que la presión parcial del gas ácido es alta.

A continuación describiremos brevemente los principales procesos de absorción física empleados.

4.2.1.1 PROCESO SELEXOL

Este proceso fue desarrollado originariamente por Allied Chemical Corporation, y desde el año 1993 los derechos pertenecen a la compañía UOP.

El proceso Selexol se emplea en un amplio rango de aplicaciones, y además de emplearse para el CO₂, también se utiliza para la eliminación de SH₂. Se emplea en plantas de síntesis de amoníaco, para la eliminación de gases ácidos en corrientes de gas



natural, desulfuración y absorción de CO_2 en plantas de oxidación parcial de residuos de petróleo o gasificación de carbón.

La solución absorbente utilizada es una mezcla de isómeros de dimetiléter o polietilenglicol. Dichas sustancias han demostrado ser materiales no tóxicos, químicamente estables y biodegradables, además de presentar una baja presión de vapor, y tienen capacidad para captar diversos tipos de impurezas, como SH_2 , CO_2 , COS , mercaptanos y otros.

Los datos de solubilidad reflejan que este tipo de absorbentes presentan una tendencia mayor a absorber los sulfuros y los hidrocarburos pesados, que a absorber CO_2 . En cualquier caso, suele emplearse en procesos donde no son requeridos elevados rendimientos de eliminación.

El esquema del diagrama de flujo básico del proceso es muy simple: se requieren sólo dos etapas, una primera fase de absorción y otra de regeneración del absorbente. La regeneración se lleva a cabo mediante flash, por etapas, disminuyendo sucesivamente el nivel de presión de cada flash. En algunos casos puede ser necesaria una regeneración más intensiva, en tal caso, se pueden llevar a cabo las últimas etapas de separación a vacío, o bien un stripping o arrastre con vapor, gas inerte o aplicando calor.

4.2.1.2 PROCESO PURISOL

El proceso Purisol ha sido desarrollado y comercializado por la compañía Lurgi GmbH (1996).

El solvente utilizado en este proceso es N-Metil-2-Pirrodina (NMP). Ésta sustancia líquida presenta alto punto de ebullición, y una extraordinaria solubilidad en el SH_2 , del orden de 9 veces la del CO_2 . Se le considera por tanto más apropiado para la absorción selectiva de SH_2 en presencia de dióxido de carbono. También suele emplearse para la recuperación de acetileno en corrientes procedentes de pirólisis, la recuperación de butadieno de las fracciones de C_4 , y es el agente extractivo para aromáticos en refinerías.

Además este proceso es especialmente apropiado para las corrientes de gas de síntesis para turbinas de gas en procesos de gasificación integrada en ciclo combinado (IGCC), a alta presión y con alto contenido de CO_2 .



El esquema de proceso es similar al caso anterior, y en cuanto a la desorción, el método óptimo de regeneración dependerá del grado de pureza requerida del gas tratado. En orden creciente de severidad, los métodos empleados son: flash atmosférico, flash a vacío, stripping con gas inerte y regeneración por aportación de calor.

4.2.1.3 PROCESO RECTISOL

El proceso Rectisol fue desarrollado en Alemania por la compañía Lurgi GmbH, emplea metanol como solvente y fue el proceso pionero en la aplicación de solventes orgánicos para este tipo de operaciones. Presenta un gran número de aplicaciones, entre ellas suele emplearse para eliminar una gran cantidad de impurezas, como las que se producen la gasificación de carbón y cortes pesados de petróleo, cianuro de hidrógeno, hidrocarburos aromáticos, compuestos orgánicos del azufre, e hidrocarburos polimerizables. El empleo de metanol facilita la deshidratación y la prevención de la formación de hidratos a las bajas temperaturas utilizadas en el proceso.

Otra de las características del proceso es que se lleva a cabo la absorción a temperaturas muy bajas, entre -60, -74 °C, considerablemente más bajas que el resto de los absorbentes físicos. A estas temperaturas, el metanol es un líquido con una viscosidad sumamente baja, que hace que las resistencias asociadas a las transferencias de calor y materia no alteren la absorción propiamente dicha. Esto provoca por tanto, que la capacidad del solvente para captar el CO₂ y SH₂ a esas temperaturas sea elevada, de manera que las concentraciones de ambos componentes, tras someter la corriente al proceso de absorción, sean del orden de ppms.

En cuanto a las aplicaciones, estas y otras características hacen que pueda tratar corrientes de gases con altos contenidos en SH₂, lo que lo hace apropiado para el tratamiento de corrientes de alimentación del proceso Claus.

La operación a muy bajas temperaturas y la gran eficiencia de eliminación tiene como consecuencia que el diagrama de flujo de este proceso sea muy complejo, y, combinado con la necesidad de refrigeraciones a bajas temperaturas, desemboca en plantas de elevado coste.

El proceso Rectisol puede ser de dos tipos, el proceso estándar (no selectivo) y el proceso selectivo. En proceso el estándar se separan conjuntamente CO₂ y SH₂ mientras



que en el selectivo, por el contrario, se separa el CO_2 en una primera fase y el SH_2 en una segunda fase.

En cuanto a la desorción, consiste en una serie de separaciones flash sucesivas a presiones decrecientes, y posteriormente una regeneración en caliente, donde se produce un arrastre con vapor de agua.

4.2.1.4 PROCESO SULFINOL

En contraste con los procesos descritos anteriormente, el proceso Sulfinol emplea una mezcla de de disolventes físicos y químicos. En estos procesos el disolvente físico elimina el grueso del gas ácido, mientras que el químico, alcanolaminas en este caso, purifica la corriente restante, todo ello en una etapa. Las compañías que comercializan el proceso son la Shell Oil Company y Shell Internacional Petroleum Maatschappij (SIPM).

El diagrama de proceso recuerda al de una planta convencional de tratamiento con aminas, la presencia del disolvente físico mejora la capacidad de la solución, especialmente cuando el gas a tratar presenta una alta concentración de gases ácidos además de una alta presión. Además ha demostrado su eficacia en la eliminación de otras sustancias contaminantes como COS, mercaptanos y otros compuestos orgánicos sulfurados. El absorbente físico empleado es el dióxido de tetrahidrotiofeno, mientras que el químico es una solución de amina, usualmente diisopropanolamina (DIPA) o metildietanolamina (MDEA), y agua.

El proceso Sulfinol ha encontrado un amplio campo de aplicación en el tratamiento del gas natural, gases de refinería y gas de síntesis.

El esquema de proceso es muy parecido al esquema de una planta de tratamiento con aminas (absorbedor, stripping e intercambio de calor entre las corrientes efluentes de ambas torres), a excepción de un tanque de separación flash que se emplea para separar arrastres de hidrocarburos solubles en el disolvente de la corriente de salida del absorbedor, debido a la alta solubilidad de estos en el disolvente.

4.2.1.5 PROCESO AMISOL

El proceso Amisol también combina el empleo de un disolvente físico y de otro químico para el tratamiento de gases ácidos. Fue desarrollado por la compañía Lurgi GmbH y



emplea metanol para la absorción física. En cuanto al disolvente orgánico, en un principio se trataba de alcanolaminas (monoetanolamina, dietanolamina), pero actualmente se emplean alquilaminas alifáticas (diisopropilamina DIPAM, dietilamina DETA). Este tipo de procesos tienen su principal aplicación en la absorción selectiva de SH₂, donde este tipo de solvente químico es más apropiado.

Además de las desulfuraciones selectivas, se emplea para la eliminación, del orden de ppms, de compuestos como el CO₂, COS y otros orgánicos sulfurados, de corrientes de gas de síntesis derivadas del carbón, así como de corrientes de hidrocarburos pesados y fuel.

4.2.2 ABSORCIÓN QUÍMICA

A continuación describiremos brevemente los absorbentes más comúnmente empleados en la absorción química de gases ácidos.

4.2.2.1 AMONÍACO

El empleo de amoníaco para la eliminación de gases ácidos de corrientes gaseosas ha declinado en los últimos años, a pesar de ello, aún se emplea en la desulfuración de gases en hornos de coque en un gran número de instalaciones.

En cuanto a su aplicación en la eliminación de CO₂, también se han desarrollado procesos que emplean soluciones de amoníaco para tratar gas de síntesis. La utilización y los datos económicos de los procesos basados en la absorción con amoníaco es ampliamente conocida desde los años 50. El amoníaco presenta la ventaja de no verse prácticamente afectado en la operación por sustancias como CS₂, CNH, o SH₂.

Por otra parte, el proceso es más complejo que en el caso de aquellos basados en absorbentes alcalinos no volátiles, y no presenta además altas eficiencias de eliminación. Los procesos basados en la absorción con amoníaco más conocidos son el Still Otto, el Krupp Wilputte y el proceso DIAMOX (Mitsubishi Kaoki Kaisha, Mitsubishi Chemical Industries).



4.2.2.2 SALES ALCALINAS

Este tipo de procesos, que emplean álcalis fuertes, ofrecen una gran variedad de posibilidades. Generalmente el proceso emplea una solución acuosa de una sal conteniendo sodio o potasio como catión y un anión selectivo, de manera que se produce la formación de sales debidas a la interacción con ácidos débiles, de forma que la solución resultante se encuentra amortiguada a un pH que oscila entre 9 y 11. Dicha solución de naturaleza alcalina absorberá CO_2 o SH_2 (junto con otros gases ácidos), de forma que gracias a la acción reguladora del ácido débil presente en la solución original, el pH no cambiará rápidamente conforme se produce la absorción.

Las sales propuestas para los procesos de este tipo incluyen carbonatos de sodio y potasio, fosfatos, boratos, arseniatos, fenolatos, así como otras sales de ácidos orgánicos débiles. Las mayores aplicaciones de estos procesos tienen lugar en la absorción mayoritariamente de CO_2 o SH_2 además de mercaptanos.

Las principales tecnologías empleadas se describen brevemente a continuación.

PROCESOS BASADOS EN LA ABSORCIÓN A ALTA TEMPERATURA

Los procesos englobados en esta categoría, emplean generalmente soluciones de carbonato de potasio a temperaturas elevadas junto con otras sustancias como promotores, para mejorar la velocidad de absorción. Este tipo de tecnologías suelen aplicarse para la eliminación de dióxido de carbono de corrientes de gases a altas presiones. A pesar de ser bastante conocidos, este tipo de procesos no se han empleado extensamente hasta la década de los 80, debido a las bajas velocidades de absorción, las elevadas tasas de circulación y el gran tamaño de los equipos (sobre todo de la columna de absorción).

Las aplicaciones de estos procesos que emplean carbonato de potasio activado a altas temperaturas, son fundamentalmente la absorción de CO_2 en plantas de producción de amoníaco, hidrógeno y gas ciudad. La principal ventaja que ofrecen es la capacidad de operar a altas temperaturas, ya que generalmente los gases a tratar se encuentran disponibles a dichas temperaturas, e incluso deben ser calentados después del proceso de absorción. Esta circunstancia supone un ahorro energético ya que los gases no precisan enfriamiento a la entrada del proceso.



En cuanto a la regeneración, el requerimiento energético no suele ser elevado, ya que la temperatura de trabajo necesaria para esta operación es baja, y no precisa generalmente aporte de calor.

Dentro de estos procesos, los más utilizados son:

Proceso Benfield. Fue desarrollado durante los años 70. Además de la solución de carbonato de potasio, presenta un activador constituido por una amina (dietanolamina). Recientemente se han introducido otros tipos de activadores con el objetivo de mejorar los costes de operación y la capacidad de la solución. Como resultado de las altas temperaturas de absorción con las que trabajamos, no es necesario el empleo de vapor, mientras que en otros procesos regenerativos es necesario calentar la solución a la temperatura a la cual se produce la desorción. Además esta elevada temperatura de operación incrementa la solubilidad del bicarbonato potásico lo que permite una operación a altas concentraciones de reactivo.

Proceso Catacarb. Emplea una solución catalizada de carbonato potásico a alta temperatura. Las soluciones contienen además aditivos que catalizan la absorción y desorción de los gases ácidos, particularmente el dióxido de carbono. Dichos aditivos, que contienen además inhibidores de la corrosión, se han desarrollado para que no tengan efecto sobre la catálisis del reformado o la metanación, lo cual es una ventaja necesaria en muchos casos debido al destino posterior del gas tratado. El diagrama de flujo es similar al proceso anterior.

Proceso Flexorb HP. La diferencia principal con los dos procesos anteriores radica en el empleo de aminas con impedimento estérico como activador. El efecto de esta sustancia en la absorción de CO₂ en la solución del carbonato potásico, es el aumento de la velocidad de absorción, ya que mantiene una alta concentración de amina en la interfase. Además la rápida formación del carbamato unido a la alta alcalinidad de las aminas provoca un aumento considerable de la capacidad de absorción. El principal problema que presenta el proceso es la corrosión típica de las plantas de tratamiento con aminas.

PROCESOS BASADOS EN LA ABSORCIÓN A TEMPERATURA AMBIENTE

Generalmente se trata de soluciones de carbonato de potasio o sodio, con regeneración a vacío, empleadas principalmente en la absorción de dióxido de azufre, o bien se trata de



soluciones conteniendo cáusticos y que suelen emplearse en la eliminación de mercaptanos, trazas de CO_2 y SH_2 . Dentro de este tipo de procesos destacan:

Absorción de dióxido de carbono en soluciones de carbonatos alcalinos. En la absorción de dióxido de carbono, el carbonato alcalino se disocia parcialmente a bicarbonato en el absorbedor, y pasa de nuevo a carbonato en la torre de desorción, donde es calentado con vapor. Las columnas suelen ser de relleno, además las eficiencias de absorción no son muy elevadas, de manera que suelen emplearse sistemas adicionales para la depuración de las corrientes gaseosas.

Otros procesos de absorción a temperatura ambiente son los procesos Seaboard, Vacuum Carbonate, Vacasulf, Tripotassium Phosphate, Alkacid, pero se emplean fundamentalmente para la eliminación de dióxido de azufre.

4.2.2.3 ALCANOLAMINAS

Este tipo de procesos emplea etanolaminas para la absorción de gases ácidos. De entre las etanolaminas más empleadas destaca la monoetanolamina (MEA), que es ampliamente utilizada para la absorción de CO_2 , fundamentalmente sin la presencia del SH_2 . Suelen emplearse soluciones de MEA entre el 15-20% en peso ya que trae consigo importantes problemas de corrosión. A pesar de ello, se han desarrollado recientemente procesos que emplean aditivos inhibidores de la corrosión, por lo que suelen emplearse soluciones de hasta el 30% en peso, lo que incrementa significativamente la capacidad de absorción de la solución.

En cuanto a la eficiencia de absorción, las soluciones de MEA pueden conseguir reducir la concentración de contaminante, CO_2 e incluso SH_2 , a niveles de ppms. En contrapartida, la regeneración precisa un alto requerimiento energético. Otra de las desventajas que presenta este absorbente es la posibilidad de reaccionar irreversiblemente con alguno de los contaminantes típicos de las corrientes gaseosas a tratar. En presencia de COS por ejemplo, la monoetanolamina reaccionará dando como resultado un producto que lleva a la degradación irreversible del absorbente.

También suelen emplearse otros tipos de etanolaminas, como es el caso de la dietanolamina (DEA), que es similar a la anterior pero puede utilizarse en presencia de contaminantes como el COS. Existen numerosos procesos que emplean DEA para el



tratamiento de gas natural, incluso con altas cargas de contaminante. A pesar de que su alto peso molecular es una desventaja, su empleo es comercial debido a que puede arrastrar cargas de contaminantes dos o tres veces superiores a las de la MEA. En general podemos decir que presenta ciertas ventajas aunque la monoetanolamina sigue siendo el absorbente más apropiado en la mayoría de los casos.

Además de los absorbentes descritos, existen un gran número de aminas comercializadas como absorbentes. De los procesos citados anteriormente, las aminas representan los más empleados. Por esa razón dedicaremos una parte de este informe a la descripción del proceso en el capítulo posterior.

4.3 SELECCIÓN DEL PROCESO DE ABSORCIÓN DE CO₂

La selección del proceso de eliminación de contaminantes en las plantas químicas dentro de las opciones disponibles es un factor importante que determina el coste global de la unidad de proceso (referencias bibliográficas [5], [6], y [15]). En el caso de la absorción, el tamaño del equipo de separación depende del proceso elegido. Como hemos descrito a lo largo de este capítulo, se han desarrollado multitud de procesos cuyas eficiencias de depuración dependen de los disolventes empleados en cada caso.

Por lo tanto, la elección del disolvente es un parámetro importante, y dicha elección debe basarse en la composición, temperatura y presión del gas de entrada, así como las especificaciones de salida de la corriente producto. Estos parámetros determinarán la idoneidad del disolvente y del proceso empleado.

Los disolventes empleados en la absorción química se caracterizan por el relativamente alto calor de reacción (disolución) y su capacidad de absorción de los gases ácidos sin una sensibilidad excesiva a la presión. Generalmente se trata de soluciones acuosas del agente absorbente por lo que el parámetro de la concentración es importante. Si una determinada unidad trabaja con una determinada concentración en peso de disolvente, por ejemplo del 30%, requerirá una tasa de circulación de al menos el doble que la necesaria si trabajásemos con una solución al 60% en peso, lo que supone un considerable aumento de los costes de operación.



Por otra parte, tenemos que considerar la cantidad de calor que es necesario aportar al proceso. Los requerimientos energéticos de la unidad son los siguientes:

- (1) Calentamiento de la solución para llevar a cabo la absorción de los gases ácidos en la torre de absorción, en el caso de absorción a alta temperatura.
- (2) El aumento de la temperatura de la solución para llevar a cabo la regeneración de la solución rica (cargada de contaminante), en la columna de desorción.
- (3) El requerimiento energético del reboiler para generar el vapor necesario para el stripping.

Los absorbentes físicos presentan bajos calores de disolución y pueden absorber gases ácidos en proporción a sus presiones parciales. A bajas o moderadas presiones (en torno a la atmosférica), la capacidad de absorción es baja incluso cuando la concentración de contaminante en el gas de entrada sea alta. Sin embargo, conforme crece la presión parcial del gas ácido, aumenta la capacidad de absorción de los absorbentes físicos.

Por otra parte, la capacidad de estos absorbentes comerciales a bajas presiones de trabajo, por ejemplo 75 psig (5,17 bar), supera la de los solventes químicos, además los ratios de circulación son también inferiores. También cuando disponemos altas presiones parciales de contaminante, la absorción física puede ser efectiva a presiones moderadas, trabajando a temperaturas en torno a los -70F°.

En cuanto a la regeneración ,como hemos visto anteriormente, puede realizarse simplemente reduciendo la presión. En algunos casos puede ser necesario un aporte de calor, pero este es, generalmente, considerablemente inferior al necesario en el caso de los absorbentes químicos.

La presión de trabajo por tanto es un factor de gran importancia, en el caso de la absorción física, pueden lograrse altas eficiencias de eliminación a presiones altas, de manera que el rendimiento de la operación aumenta conforme lo hace la presión.

Volviendo de nuevo a las presiones parciales de los gases ácidos en la corriente a tratar, la economía general del proceso viene influenciada por dicho factor, además de los requerimientos de pureza de la corriente tratada. Si dichas presiones parciales de contaminante son bajas en la corriente de entrada, o bien la eficiencia requerida sea alta



debemos desechar la opción de trabajar con absorbentes físicos, aún operando a elevadas presiones. Pero debemos considerar en muchos casos otros factores que no hemos tratado hasta ahora, como por ejemplo las reacciones secundarias entre el absorbente y el contaminante en el caso de absorción con reacción química.

Si tenemos en cuenta la eliminación de CO₂ exclusivamente, las concentraciones de dicho componente en la mayoría de los casos, oscilan entre 3-4% y el 65%, lo que supone que las presiones parciales a la entrada varíen entre 1-650 psi (0,06894 y 44,8 bar) o superiores, mientras que las especificaciones de salida varían entre 0,1% a 3-10% dependiendo de cada caso. El rango de operación como puede verse es muy amplio.

Para el tratamiento de gases con bajas presiones parciales de CO₂, entre 10-15 psi (0,69-1,06 bar), el proceso recomendado es la absorción con aminas. Para presiones parciales superiores, hasta aproximadamente 75-100 psi (5-7 bar), es preferible emplear absorción con carbonato potásico activado a alta temperatura. Por encima de este rango, se recomienda la utilización de absorbentes físicos.

Hemos supuesto anteriormente que se cumplen las especificaciones de salida del gas tratado. En el caso de las aminas, podemos alcanzar niveles de depuración en torno a las ppm (15 ppm a 20 bar de presión total), mientras que para el carbonato potásico, encontramos niveles de reducción de CO₂ a la salida del orden de 0,014 bar (presión parcial). En el caso de los absorbentes físicos, es algo superior, en torno a 0,2 bar.

Debido a que, como hemos comentado en apartados anteriores, los absorbentes físicos no llegan a alcanzar altas exigencias de eliminación, para el caso de tratamiento de gases con altas presiones parciales de CO₂ a la entrada y elevadas exigencias de depuración, se recomienda el uso de más de un proceso, en este caso, se realizaría en primer lugar una absorción física, y, para depurar finalmente la corriente hasta alcanzar las especificaciones, emplearíamos modelos de proceso con eficiencias mayores, como es el caso de las aminas.

En el caso de que no sea posible o aconsejable el empleo de absorbentes físicos aunque las características de las corrientes a tratar lo aconsejen, emplearemos como primera opción absorbentes como los carbonatos. Tenemos que tener en cuenta que los absorbentes físicos presentan una tendencia a absorber hidrocarburos pesados (C₈+), por lo que puede haber casos en los que su empleo puede ser perjudicial.



Para los casos en los que tiene lugar la absorción de CO_2 en presencia de SH_2 , o bien en el caso de absorción simultánea de ambos compuestos, cualquiera de los sistemas mencionados anteriormente es perfectamente válido. Incluso, la absorción simultánea puede realizarse en un mismo equipo y obtener altas eficiencias. En algunos casos es necesario modificar algún parámetro sobre todo cuando las concentraciones de dióxido de azufre son elevadas.

Teniendo en cuenta la presión parcial del contaminante a la entrada, la selección del proceso puede seguir las líneas generales del caso de absorción de dióxido de carbono únicamente, pero debemos considerar el ratio entre ambas sustancias como un factor importante. Para ratios CO_2/SH_2 altos, los procesos más apropiados son el Sulfinol y los basados en carbonato potásico activado en este orden, además de la absorción con aminas (DEA, Econamine).

Cuando están presentes otras impurezas tales como HCN, COS, CS_2 , SO_2 , SO_3 , tenemos que considerar además, para el caso de las aminas, el tipo de absorbente empleado. Por ejemplo, como veremos más adelante, la monoetanolamina reacciona irreversiblemente con algunos de estos contaminantes de manera que tiene lugar una degradación de la solución, o bien se hace necesaria una reposición o regeneración del esta, con las consiguientes pérdidas económicas que conlleva. Sin embargo este problema no se da para el caso de otras aminas, como por ejemplo la dietanolamina, por lo que puede considerarse una buena elección.

En conclusión, considerando lo expuesto anteriormente y las características de la corriente que va a tratarse, la absorción química es la opción más convencional y la que presenta una eficacia ampliamente probada comercialmente.

La absorción química con aminas, es especialmente apropiada cuando las presiones parciales de CO_2 son bajas, en torno a 0,1 bar. Esta tecnología emplea el equilibrio químico entre los componentes de la reacción en función de la temperatura, por lo que hay que considerar el coste de la regeneración ya que implica aporte de calor.

De entre las opciones que nos ofrece la absorción química, las alcanolaminas, son los absorbentes más utilizados. La mayor parte de los datos experimentales y de operación se centran en las aminas primarias, de entre ellas la monoetanolamina, que se considera



la más efectiva en la eliminación del CO₂, ya sea empleada directamente en solución o bien añadiendo aditivos que modifican alguna de sus características.

Considerando factores económicos, la economía del proceso se centra en el requerimiento energético de la regeneración. En algunos casos, las concentraciones de contaminante a la entrada son tan elevadas, que el coste de la regeneración de los disolventes reactivos (químicos) es tan grande que se desecha la opción a favor de la absorción física.

Como hemos comentado anteriormente, en la absorción física la regeneración se lleva a cabo reduciendo la presión parcial del gas ácido sin necesidad de aporte de calor, generalmente realizando separaciones flash a baja presión o vacío. Esta última opción reduce los ratios de circulación y por lo tanto, los requerimientos energéticos de los equipos de impulsión, pero aumenta la energía de compresión del gas. Por lo tanto, en los sistemas físicos el coste de la recuperación del absorbente es menor, pero los rendimientos de eliminación son menores que en el caso de los absorbentes químicos.

Además de las especificaciones en cuanto a contenido en impurezas de la corriente depurada, que determina en primer lugar el proceso más adecuado en cada caso, otro de los parámetros importantes a la hora de elegir el proceso de eliminación de CO₂ es la integración del proceso, es decir, el uso final que se le da al dióxido de carbono recuperado. En muchos casos puede ser interesante el refinado de la corriente final para alcanzar las especificaciones exigidas para la comercialización del dióxido de carbono.

Considerando este factor, la cantidad de CO₂ recuperada dependerá también de los usos finales de esta corriente, y puede ser interesante desde el punto de vista económico aumentar la eficacia de eliminación con la finalidad de darle otro uso al componente depurado.

El CO₂ eliminado de la corriente principal, puede emplearse dentro del mismo proceso en corrientes secundarias, destinarlo a la venta, o ventearse a la atmósfera.

La idea de separar el CO₂ capturado no proviene únicamente de las restricciones debidas al efecto invernadero, sino de sus posibles aplicaciones comerciales. Actualmente el dióxido de carbono una vez purificado, se emplea en la manufactura de la urea, en la industria alimenticia para las bebidas carbonatadas, en la tecnología EOR (Enhance Oil



Recovery) especialmente, donde el CO₂ es inyectado en los depósitos de petróleo para mejorar la movilidad de este y obtener un mayor rendimiento en la explotación de las reservas, entre otras aplicaciones.

La purificación de la corriente de dióxido de carbono conlleva un coste adicional, ya que las especificaciones son muy exigentes en cuanto a pureza y contenido en agua, así que será necesario evaluar económicamente los costes de eliminación de CO₂ de la corriente de entrada con una tecnología adecuada a los rendimientos requeridos y el coste de refino del dióxido de carbono recuperado, frente al precio de comercialización de este en el mercado.

En la Tabla 4.4 podemos ver las principales plantas de eliminación de CO₂ y el uso comercial de este¹.

Tabla 4.4

Operator	Location	Capacity (tons/day CO ₂)	Fuel Source	CO ₂ Use	Technology	Status
Carbon Dioxide Technology	Lubbock, TX	1200	gas boiler	EOR	Dow MEA	Shut
North American Chemical Co.	Trona, CA	800	coal boiler	Carbonation of brine (soda ash)	Kerr-McGee MEA	Operational since 1978
Mitchell Energy	Bridgeport, TX	493	gas heaters, engines, turbine	EOR	Inhibited MEA	Shut
Northeast Energy Associates	Bellingham, MA	320	gas turbines	PURPA (food-grade)	Fluor Daniel	Operational since 1991
Soda Ash Botswana	Sua Pan,	300	coal boiler	Carbonation of brine (soda ash)	Kerr-McGee MEA	Operational since 1991
Applied Energy Systems	Poteau, OK	200	coil boiler (fluidized bed)	PURPA (food-grade)	Kerr-McGee MEA	Operational since 1991
Sumitomo Chemicals	Chiba, Japan	165	gas boilers plus oil/coal boiler	food-grade	Fluor Daniel	Operational since 1994
Luzhou Natural Gas	China	160	NH ₃ plant reformer exhaust	Urea	Dow MEA	No Information
Indo Gulf Fertilizer Co.	India	150	NH ₃ plant reformer exhaust	Urea	Dow MEA	Operational since ~1988
N-ReN Southwest	Carlsbad, NM	104	gas boiler plus NH ₃ reformer exhaust	EOR	Retrofit to Dow MEA	Shut
Prosint	Rio de Janeiro, Brazil	90	gas boiler	food-grade	Fluor Daniel	Operational since 1997
Liquid Air Australia	Australia	2 x 60	gas boiler	food-grade	Dow MEA	Operational since ~1985

¹ Fuente: referencia bibliográfica [7], pág 5.



5. ABSORCIÓN DE CO₂ CON AMINAS

Las aminas, y más concretamente las alcanolaminas, se consideran como uno de los métodos más efectivos para la eliminación de gases ácidos en las corrientes de proceso o bien en los efluentes de estos, basándose en una absorción química como indicamos anteriormente (referencia bibliográfica [8]).

Las aminas pueden ser primarias, secundarias o terciarias. Dentro de ellas, las que han demostrado tener interés comercial en la purificación de gases son la monoetanolamina (MEA), dietanolamina (DEA), y trietanolamina (TEA). Otros disolventes de interés comercial son los constituidos por una mezcla de aminas, y se suelen emplear la metildietanolamina (MDEA), mezcla de mono y dietanolaminas, la diisopropanolamina (DIPA), junto con otros tipos de aminas como la 2-(2-aminoetoxi)etanol o diglicolamina (DGA), que combina la reactividad y estabilidad de la monoetanolamina con la baja presión de vapor e higroscopicidad del dietilenglicol, características deseables en este tipo de compuestos, como veremos más adelante.

Además de los tipos de aminas citadas en el párrafo anterior, se ha desarrollado recientemente un tipo de alcanolaminas, estructuralmente como las monoetanolaminas, conocidas genéricamente como aminas con impedimento estérico. La clave de su comportamiento se encuentra en su estructura molecular.

De todas ellas, las aminas terciarias presentan un alto peso equivalente lo que provoca una baja capacidad de absorción, baja reactividad (ya que se trata de una amina terciaria) y poca estabilidad, de ahí que actualmente se estén sustituyendo por otras sustancias que presentan propiedades más adecuadas a su uso como absorbente.

En el otro extremo se encuentran las aminas primarias, que presentan una alta reactividad química, alta capacidad de absorción y una estabilidad aceptable de forma que han sido utilizadas profusamente en muchos procesos, aunque, como contrapartida, presentan una serie de problemas, como su alta capacidad de corrosión, volatilidad e incluso su degradación en presencia de ciertos contaminantes característicos de las corrientes gaseosas a tratar. Las aminas secundarias por su parte, presentan propiedades intermedias entre las anteriores.



Los disolventes químicos que emplean este tipo de sustancias, suelen estar constituidos por soluciones acuosas de estas, aunque generalmente suelen contener además una serie de aditivos para mejorar su comportamiento, tales como inhibidores de la corrosión, soluciones reguladoras del pH o agentes para evitar la degradación del reactivo ante la presencia de determinadas sustancias. El desarrollo y la mejora de estas sustancias ha permitido la ampliación de sus aplicaciones adecuándose en cada caso a las exigencias de los procesos en los que se encuentran integradas.

De las características y principales aplicaciones de los distintos tipos de alcanolaminas nos ocuparemos más adelante. Ahora daremos un repaso general a la química básica del proceso.

5.1 FUNDAMENTOS QUÍMICOS DEL PROCESO

Las moléculas de las alcanolaminas presentan una estructura química que se muestra en la Figura 5.1. Como puede observarse, la molécula presenta, al menos, un grupo hidroxilo y un grupo amino. El grupo hidroxilo actúa reduciendo la presión de vapor e incrementando la solubilidad en agua, mientras que el grupo amino proporciona la alcalinidad necesaria para promover la absorción de sustancias ácidas en la solución acuosa.

Como indicamos anteriormente, las aminas que presentan dos átomos de hidrógeno unidos mediante un enlace simple a un átomo de nitrógeno se denominan aminas primarias. Debido a esta circunstancia son las que presentan una mayor alcalinidad. Ejemplos de este tipo de sustancias, de las nombradas al comienzo de este capítulo, son la MEA y la DGA.

Cuando el átomo de nitrógeno va unido a un único átomo de hidrógeno, se trata de aminas secundarias, las cuales, debido a esta circunstancia, presentan una alcalinidad menor que las primarias. Ejemplos de estas aminas secundarias son la DEA y la DIPA.

Finalmente, cuando el átomo de nitrógeno no se encuentra unido a ningún átomo de hidrógeno, se trata de aminas terciarias, como la TEA o la MDEA.



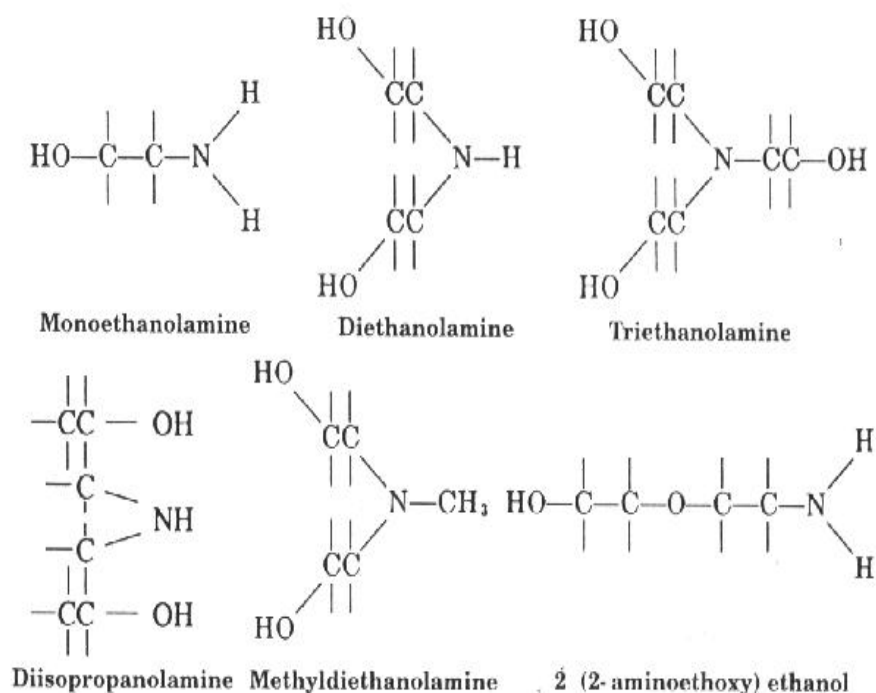
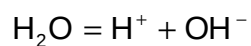


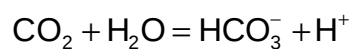
Figura 5.1. Estructura química de las alcanolaminas empleadas en el tratamiento de gases.

En el caso de las aminas primarias, las principales reacciones en solución acuosa que tienen lugar son las siguientes:

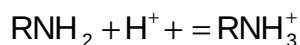
1. Disociación del agua:



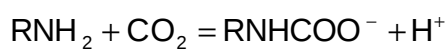
2. Hidrólisis e ionización del CO₂:



3. Protonación de la alcanolamina:



4. Formación del carbamato:



Además de las reacciones indicadas anteriormente, se producen otras reacciones secundarias como la disociación del bicarbonato en carbonatos, o bien la reacción del CO_2 con aminas para producir compuestos no regenerables, pero no se consideran de gran importancia en el proceso de absorción, aunque si en las consideraciones de diseño del proceso, como veremos posteriormente.

La concentración de equilibrio del CO_2 (y de otros gases ácidos como el SH_2) en solución, es proporcional a su presión parcial en la fase gas, por lo que las reacciones de equilibrio (2) y (4) se desplazan a la derecha incrementando la presión parcial del gas ácido. Las reacciones de equilibrio son también sensibles a la temperatura, provocando que las presiones de vapor de los gases absorbidos aumenten rápidamente conforme aumenta la temperatura. La principal consecuencia de lo expuesto anteriormente es que podemos recuperar los gases absorbidos de la solución con la aplicación de calor (stripping).

Si la reacción (4) es predominante, lo que ocurre en el caso de aminas primarias como la monoetanolamina, el ión carbamato se une al producto de la reacción (3) y la capacidad de absorción de CO_2 por parte de la solución está limitada a aproximadamente 0.5 moles de CO_2 por mol de amina, incluso para casos en los que la presión parcial de este en el gas que va a tratarse sea relativamente alta. La causa de esta limitación es la alta estabilidad del carbamato y su bajo porcentaje de hidrólisis a bicarbonato.

Este fenómeno no tiene lugar en el caso de aminas terciarias, las cuales no reaccionan directamente con el dióxido de carbono, por lo que no tiene lugar la reacción de formación de carbamatos. En estos casos podrían alcanzarse ratios similares, pero al tratarse de aminas terciarias y considerando que la reacción (2) es relativamente lenta, generalmente no se emplean sino es mezcladas con otras sustancias que aumentan el porcentaje de hidrólisis del dióxido de carbono.

Actualmente se utiliza en este caso una mezcla de aminas y un activador (que suele ser otra amina), para aumentar dicho porcentaje (CO_2 disuelto). Este es el caso de la MDEA.

La efectividad de absorción de la amina depende en primer lugar de su alcalinidad (capacidad de aumentar el pH). A mayor valor de esta, mayor capacidad de absorción a una temperatura dada. Otro de los factores importantes, como puede deducirse de la



característica de equilibrio químico, es la temperatura. Por lo tanto, serán los dos factores principales a tener en cuenta en el proceso de regeneración de la solución.

5.2 TIPOS DE AMINAS

La selección de la solución absorbente se determina en función de las condiciones de presión y temperatura disponibles en el gas que vamos a tratar, de la composición de este, de las concentraciones de componentes contaminantes presentes (mayoritario y minoritario) y los requerimientos en cuanto a pureza del gas tratado.

Por otra parte, también viene determinada por la presencia de otras sustancias que pueden interferir en la absorción, o bien se precisa también su eliminación (absorción es simultánea), como es el caso del SH₂. En nuestro caso, debido a que el gas que vamos a tratar no contiene este compuesto, no tendremos en cuenta este factor. En la Tabla 5.1 se muestran todos los tipos de aminas que se emplean comercialmente para el tratamiento de gases ácidos.

Tabla 5.1. Tipos de aminas comercializadas para eliminación de gases ácidos.

DENOMINACIÓN	COMPOSICIÓN	PROCESO INDUSTRIAL
MEA	Monoetanolamina	Depuración de gas natural y de síntesis.
MEA-DEG	Monoetanolamina y dietilenglicol ó trietilenglicol	Purificación y deshidratación simultánea del gas natural.
DEA	Dietanolamina	Proceso S.N.P.A.-DEA: tratamiento del gas natural en presencia de altas concentraciones de COS y CS ₂ .
DGA	Diglicolamina	Econamine FG: tratamiento de gas de síntesis y gases de combustión.
DIPA	Diisopropanolamina y disolvente orgánico	ADIP, Sulfinol: tratamiento de gases de refinería y líquidos.
MDEA	Metildietanolamina	Disolventes UCARSOL HS, GAS/SPEC CS-3: unidad de lavado del gas de cola en plantas Claus (absorción de SH ₂ en presencia de CO ₂).
MDEA-MEA	Mezcla de aminas	Proceso BASF Activated MDEA: absorción de CO ₂ de gases a alta presión.
STERICALLY HINDERED	Aminas modificadas (con impedimento estérico)	Flexsorb Solvents (HP, PS, SE, SE+): absorción selectiva de SH ₂ en presencia de CO ₂ .



A continuación describiremos brevemente los tipos de aminas mas comúnmente empleadas como disolventes.

5.2.1 MONOETANOLAMINA

Las soluciones acuosas de monoetanolamina se han utilizado profusamente durante muchos años para la eliminación de CO_2 del gas natural y gas de síntesis. En los últimos años bs equipos tradicionales se han ido reemplazando por sistemas más eficientes tales como los que vamos a describir posteriormente. Sin embargo, las soluciones de MEA siguen siendo las elegidas para corrientes gaseosas con un contenido relativamente bajo de dióxido de carbono (bajas presiones parciales), en los casos en los que el gas a tratar este disponible a bajas presiones y la eficiencia de eliminación requerida sea alta, incluso en presencia de contaminantes no minoritarios como COS y CS_2 .

Resumimos las principales características que presentan este tipo de sustancias y que proporcionan una serie de ventajas en su empleo como disolventes son las citadas a continuación:

- El bajo peso molecular de la monoetanolamina lo que permite una alta solubilidad a concentraciones en peso moderadas.
- Alta alcalinidad, necesaria para el tratamiento de contaminantes ácidos.
- Relativa facilidad de regeneración de la solución contaminada (cargada de gas ácido).

Por otra parte, también presenta una serie de desventajas:

- Formación de productos con sustancias presentes como COS y CS_2 , en reacciones irreversibles, lo que trae como consecuencia pérdidas excesivas de absorbente si el gas contiene cantidades significativas de dichos compuestos.
- Corrosividad. Las soluciones de MEA son apreciablemente más corrosivas que las soluciones de otras aminas, particularmente si la concentración excede del 20% en peso y está cargada de gas ácido. Esta circunstancia limita la capacidad de tratamiento de la solución. En muchos casos, a pesar de tener una presión parcial



de contaminante elevada a la entrada, la carga de gas ácido se ve limitada por los problemas de corrosión.

- Calor de reacción alto en comparación con otras aminas. Esto conduce a elevados requerimientos energéticos en los procesos de recuperación (stripping).
- Pérdidas de absorbente por vaporización, debidas a la elevada presión de vapor de la monoetanolamina, particularmente a operaciones a baja presión. Generalmente este inconveniente se soluciona con una unidad de tratamiento del gas purificado, consistente en un lavado con agua.
- Para solucionar los problemas característicos de este tipo de sistemas, generalmente se suelen emplear aditivos orientados a mejorar el comportamiento de los disolventes en presencia de determinadas sustancias o bien evitar los problemas de corrosión comunes de este tipo de soluciones. De sus características y comportamiento hablaremos en apartados posteriores.

5.2.2 MEZCLAS DE MONOETANOLAMINAS Y GLICOLES

Las mezclas de MEA y di o triglicoles, conocidos comúnmente como procesos de glicolaminas, se han empleado tradicionalmente para la adsorción simultánea de CO₂ y SH₂, y para la deshidratación de gas natural.

A pesar de ello, presentan una serie de problemas que limitan su utilización y que han provocado que este tipo de procesos dejen de ser competitivos a nivel industrial:

- El contenido en agua de la solución debe mantenerse inferior al 5% con el fin de asegurar la capacidad deshidratante de la mezcla. Esta circunstancia conlleva altas temperaturas en el reboiler (regeneración) y problemas severos de corrosión en los equipos.
- Altas pérdidas de disolvente por vaporización de la amina.
- Baja presión de vapor de la mezcla, lo que dificulta la regeneración, que generalmente no se puede realizar en un único paso.



- Las características de los glicoles provocan que determinadas sustancias tales como hidrocarburos aromáticos, sean solubles en la solución.

5.2.3 DIETANOLAMINA

Las soluciones acuosas de dietanolamina se emplean fundamentalmente para el tratamiento de gases de refinería, que generalmente contienen cantidades apreciables de contaminantes que limitan el uso de otras sustancias como la monoetanolamina. Estas sustancias contaminantes son principalmente COS y CS₂.

Como comentamos en la introducción de este capítulo, las aminas secundarias son en general mucho menos reactivas, por lo que no se ven tan influenciadas por la presencia de estos contaminantes y los productos de la reacción son menos contaminantes que en los casos anteriores. Se consideran la mejor opción para el tratamiento de gases que presenten cantidades considerables de COS y CS₂.

Otra ventaja importante es que presentan una baja presión de vapor que limita las pérdidas de absorbente. Se pueden emplear en concentraciones de entre el 25-30% en peso sin acarrear problemas de corrosión y la capacidad de absorción de la solución oscila los 0,7 mol de gas ácido por mol de DEA.

En cuanto a las desventajas de estos sistemas destacan:

- La regeneración de la solución requiere destilación a vacío además del stripping, debido a su baja presión de vapor.
- En presencia de elevadas concentraciones de CO₂, la DEA reacciona con éste dando lugar a productos de reacción corrosivos, que provocan la degradación de la solución. Por esta razón la DEA no se considera apropiada para el tratamiento de gases con altas concentraciones de dióxido de carbono a la entrada.



5.2.4 DIGLICOLAMINA

El disolvente empleado en los procesos que utilizan esta sustancia está constituido principalmente por una solución acuosa de Diglicolamina (DGA), cuya fórmula química es 2-(2-aminoetoxi)etanol. Básicamente se trata de una monoetanolamina, aunque su reducida presión de vapor permite su utilización a mayores concentraciones, típicamente entre el 40 y el 60%. Como consecuencia, la capacidad de absorción es mayor para un mismo caudal de disolvente, lo que nos permite reducir este y también el consumo de vapor en la regeneración en comparación con una solución de MEA típica.

El proceso que emplea este tipo de disolvente es conocido por Fluor Econamine Process, y sus aplicaciones son prácticamente las mismas que en el caso de la monoetanolamina, pero incluyendo una serie de ventajas:

- Puede operar a temperaturas cercanas a la temperatura ambiente.
- Puede operar a bajas presiones.
- Puede emplearse en presencia de COS.

5.2.5 DIISOPROPANOLAMINA

Este disolvente, constituido por una solución acuosa de diisopropanolamina, se emplea en procesos tales como el Proceso Sulfinol, conjuntamente con un absorbente físico, como hemos visto anteriormente.

En cuanto a sus aplicaciones destacan el tratamiento de gases de refinería para la absorción de CO₂ y SH₂ en presencia de COS. Las principales ventajas de este tipo de soluciones son los bajos requerimientos energéticos de la regeneración junto con el hecho de no presentar problemas de corrosión en equipos.



5.2.6 METILDIETANOLAMINA

La metildietanolamina es una amina terciaria, y como disolvente se emplea en disolución acuosa o bien constituyendo otro tipo de absorbentes basados en esta sustancia, empleados en procesos industriales tales como el UCARSOL HS. Entre sus aplicaciones destacan la absorción selectiva de dióxido de azufre en presencia de dióxido de carbono, en casos en los que el ratio CO_2/SH_2 es elevado, en tiempos de contacto relativamente cortos. La MDEA se considera el disolvente más selectivo en estos casos.

La baja presión parcial de este tipo de absorbentes, permite su utilización a altas concentraciones (superiores al 60% en peso), sin que haya pérdidas significativas por vaporización. Otras ventajas destacables que permiten un amplio rango de aplicaciones son:

- No se consideran corrosivas.
- Altamente resistentes a la degradación térmica y química.
- Bajos calores de reacción (aminas terciarias).
- Baja miscibilidad en hidrocarburos.

La principal desventaja que presenta estos sistemas es el bajo porcentaje de reacción debido a la baja reactividad de las aminas terciarias.

Para aprovechar las principales ventajas de los sistemas que emplean aminas terciarias, salvando la baja reactividad que presentan dichas sustancias, actualmente se añaden a la solución mezclas de aminas primarias y secundarias, lo que provoca una mejora del comportamiento general del disolvente.



5.2.7 AMINAS CON IMPEDIMENTO ESTÉRICO

Las aminas con impedimento estérico no son necesariamente alcanolaminas, pero su comportamiento en el tratamiento de gases es similar al de estas. Se comercializan distintos tipos de aminas modificadas y entre ellos destacan los Flexsorb Solvents.

Los sistemas citados anteriormente, emplean distintos tipos de aminas con impedimento estérico, siendo la principal ventaja que la composición molecular se diseña específicamente para adecuarse a las características de cada caso.

En la Tabla 5.2² se indican las principales propiedades físicas las distintas alcanolaminas existentes.

Property	MEA*	DEA*	TEA*	MDEA*	DIPA*	DGA**
Mol. weight	61.09	105.14	149.19	119.17	133.19	105.14
Specific gravity, 20/20°C	1.0179	1.0919 (30/20°C)	1.1258	1.0418	0.9890 (45/20°C)	1.0550
Boiling point, °C						
760 mmHg	171	decomp.	360	247.2	248.7	221
50 mmHg	100	187	244	164	167	—
10 mmHg	69	150	208	128	133	—
Vapor pressure, mmHg at 20°C	0.36	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
Freezing point, °C	10.5	28.0	21.2	-21.0	42	-9.5
Solubility in water, % by weight at 20°C	Complete	96.4	Complete	Complete	87	Complete
Absolute viscosity, cps at 20°C	24.1	380(30°C)	1,013	101	198(45°C)	26(24°C)
Heat of vaporization, Btu/lb at 1 atm	355	288(23 mm) (168.5°C)	230	223	184.5	219.1
Approximate cost, \$/lb***	0.59	0.60	0.61	1.40	—	0.93

² Fuente : referencia bibliográfica [8].



Tabla 5.2

5.2.8 SELECCIÓN DEL TIPO DE DISOLVENTE

La elección del tipo de amina a emplear en cada caso depende de las características y necesidades del proceso. En nuestro caso, el proceso más adecuado por las características de entrada del gas a tratar (presión, temperatura), y la composición (ausencia de azufre, COS o CS₂) hacen que el disolvente más apropiado sea la monoetanolamina.

En nuestro caso, nos guiamos por los datos bibliográficos disponibles, que consideran la monoetanolamina como el disolvente más apropiado teniendo en cuenta las características del proceso. Además se considera el proceso *Fluor Daniel Econamine FG process* (también conocido como *Dow Chemical Gas/Spec FT-1 Process*) que combina la acción de la MEA con inhibidores que reducen la degradación y la corrosión que tiene lugar en estos procesos, como el más apropiado para la eliminación del CO₂ actualmente, ya que se trata como veremos más adelante, de un proceso optimizado. Completa el informe proporcionando datos de rendimiento en eliminación, consumo energético, capacidades, condiciones de operación y costes.

Con estos datos, llevamos a cabo la elección del proceso que vamos a utilizar, considerando el referenciado en el artículo como el más apropiado teniendo en cuenta las características del proceso global en el que está integrado la unidad de recuperación de CO₂.

En cuanto a la elección de la concentración de la solución dependerá fundamentalmente de los resultados obtenidos en el proceso de simulación, tomando como referencia los bibliográficos de los que dispongamos. Para el caso de la monoetanolamina, las concentraciones típicas con las que se suelen trabajar oscilan entre 12 y 32% en peso. A pesar de ello se recomienda que no se superen concentraciones del 20% en peso debido a los problemas de corrosión. En algunos casos en los que se emplean concentraciones superiores a las recomendadas, es necesario la adición a la solución de inhibidores de la corrosión.



Para los casos de aminas secundarias como la DEA, en el tratamiento de gases de refinería se suele trabajar con unas concentraciones de la solución en torno al 20-25% en peso, y superiores, de hasta el 30% para el caso de la purificación de gas natural. Las soluciones de DGA, puesto que añaden a la solución inhibidores de la corrosión y diversos aditivos, pueden trabajar con concentraciones cercanas al 60% en peso. Las soluciones de MDEA operan en un rango de concentración en torno al 35-55%.

La concentración de la solución es un factor importante a tener en cuenta ya que en general, un aumento de la concentración de la solución reduce los ratios de circulación y por tanto el coste de la planta.

5.3 DIAGRAMA DE FLUJO BÁSICO

El esquema básico del proceso de absorción de CO₂ con aminas en la se muestra en la Figura 5.1. El gas a tratar pasa a través de la columna de absorción en sentido ascendente en contracorriente con el flujo de absorbente. La solución enriquecida en componente (CO₂) o corriente rica, procedente del fondo del absorbedor, se calienta mediante intercambio de calor con la corriente de salida del fondo de la columna de stripping (solución agotada), donde tiene lugar la regeneración térmica del disolvente y es de nuevo conducida a la columna de absorción, donde se alimenta en un punto cercano a la cabeza de la torre.

En unidades que tratan corrientes con hidrocarburos conteniendo gases ácidos a altas presiones, se suele instalar un equipo de separación previo (flash) que trata la solución rica antes de la desorción, donde se opera a presiones intermedias para separar hidrocarburos disueltos. La corriente vapor procedente de esta unidad suele emplearse localmente como combustible en el propio proceso. Además, puede ser necesario en algunos casos, dependiendo del proceso en el que esté integrada la unidad, lavar esta corriente previamente para eliminar sulfuros que puedan haber pasado a la fase vapor.

La solución regenerada procedente del stripper después del enfriamiento parcial en el intercambiador con la corriente rica, continúa su enfriamiento con intercambio de calor



utilizando como fluido refrigerante agua o aire, y se alimenta posteriormente la parte alta de la columna de absorción para completar el ciclo.

El gas ácido que se separa de la solución en la columna de desorción es enfriado para condensar la mayor parte del vapor de agua utilizado en esta columna. El condensado se devuelve al sistema para evitar la concentración progresiva de la solución. Generalmente todo este agua o la mayor parte de ella, se alimenta a la parte superior de la columna de stripping en un punto por encima de la alimentación de la solución rica y sirve a su vez para absorber y condensar vapores de amina que puedan ser arrastrados por la corriente de gas ácido.

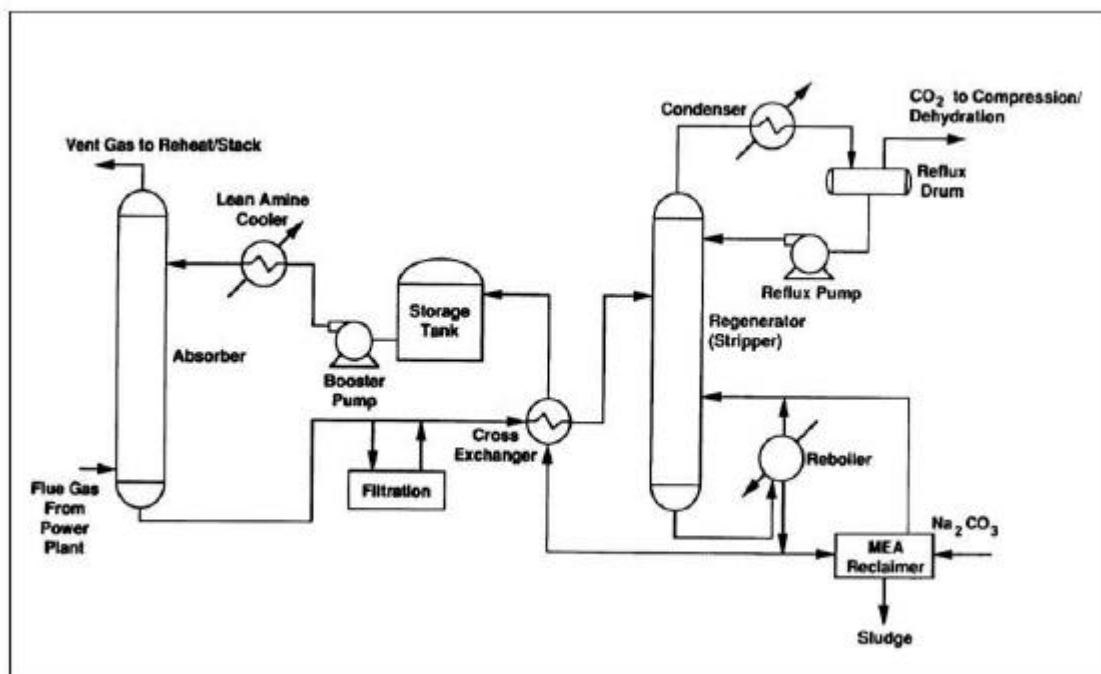


Figura 5.2. Diagrama de flujo básico de una planta de tratamiento con aminas.

Partiendo de este esquema básico de operación, han surgido una serie de modificaciones orientadas a reducir el consumo energético y los costes del equipamiento. En concreto, se utilizan turbinas en plantas de alta presión para recuperar parte de la energía disponible cuando se reduce la presión de la corriente de solución rica.

Otra de las modificaciones al esquema básico orientadas a reducir el coste de las columnas de absorción consiste en alimentar la solución regenerada en varios puntos a lo



largo de la torre, de manera que la mayor parte de la solución se alimenta en un punto cercano al punto medio del absorbedor, para eliminar el grueso del gas ácido en la parte más baja de la columna, cerca de su punto de alimentación, donde la fuerza impulsora es máxima. Así, únicamente una pequeña porción de la corriente agotada se necesita para el lavado final del gas en la parte alta de la columna donde la fuerza impulsora es menor. Todo esto se traduce en un diámetro de columna inferior.

Para reducir el consumo de solución, de manera que se incremente la carga de gas ácido en la solución rica, muchos sistemas emplean un refrigerador intermedio (intercooler) cerca del fondo de la columna, de forma que se reduzca la temperatura interna del absorbedor y por tanto la temperatura de trabajo.

Describiremos a continuación las variantes más comunes de este esquema básico.

5.3.1 UNIDAD DE LAVADO CON AGUA

Una de las modificaciones más simples del esquema general en muchos equipos de absorción, suele ser la instalación de una unidad de lavado con agua en la parte alta de la columna de absorción para reducir las pérdidas de aminas que puedan ser arrastradas por el gas purificado.

Esta unidad de recuperación se utiliza en sistemas que operan con monoetanolaminas, especialmente en absorbedores que operan a bajas presiones, ya que debido a la alta presión de vapor de esta sustancia, se producen apreciables pérdidas de absorbente por vaporización. Esto no suele ocurrir en el caso de otras aminas ya que su presión de vapor es suficientemente baja para que las pérdidas de absorbente sean despreciables, a excepción de que el gas purificado vaya posteriormente a ser utilizado en un proceso catalítico, y el catalizador sea sensible a trazas de vapores de aminas.

Esta agua de lavado generalmente se reincorpora a la torre, o bien se emplea como aporte al sistema general, para compensar las pérdidas y compensar el balance de agua global. También es común realizar purgas en la corriente regenerada para evitar las acumulaciones en el sistema de sustancias estables con la temperatura que no pueden eliminarse en el proceso de regeneración.



Esta unidad generalmente está constituida por una serie de platos, cuyo número puede variar dependiendo de las condiciones de operación de la columna de absorción, aunque generalmente este número está comprendido entre dos y cinco platos, con una eficiencia de plato que varía entre el 40 y el 50% y una eficiencia global en torno al 80%.

5.3.2 SISTEMAS DE OPERACIÓN A FLUJO PARTIDO

Con el fin de reducir los requerimientos de vapor en la regeneración, se puede realizar una modificación el diagrama de flujo general, en el cual sólo una parte de la solución rica se lleva a la torre de stripping.

La solución rica procedente de la columna de absorción se divide en dos corrientes, de las cuales una de ellas se alimenta a la columna de desorción por la parte superior, y la otra en un punto cercano a la parte media de la columna.

La corriente que se alimenta por la parte superior desciende en contracorriente con el flujo de vapor procedente del reboiler, y se extrae, parcialmente desorbida, antes del punto medio de la columna donde se alimenta la segunda porción de corriente. Dicha corriente extraída se alimenta en la parte inferior de la columna de adsorción con el fin de absorber los gases ácidos que ya estarán prácticamente agotados, por lo que no se necesita una fuerza impulsora mayor.

La corriente alimentada en un punto intermedio de la torre, fluye en sentido descendente y llega al reboiler, con lo que se consigue la desorción completa de la corriente, que luego es alimentada a la parte alta de la torre de absorción donde se precisa una fuerza impulsora mayor.

Con esta modificación se reduce la cantidad de vapor necesaria para la desorción ya que esta se realiza sólo a una porción de la solución cargada de gas ácido. Sin embargo se precisan mayores costes de inversión debido a que la columna de stripping necesaria presenta una altura superior y una mayor complejidad, ya que manejamos corrientes intermedias, además de los equipos auxiliares necesarios.

En los casos en los que la corriente a tratar contenga un alto porcentaje de contaminante, lo que precisaría un elevado caudal de solución absorbente, con el fin de reducir el diámetro de columna necesario también se propone dividir la corriente líquida de



alimentación al absorbedor, en dos flujos desiguales. La porción con mayor caudal se alimentaría en la zona media del absorbedor, donde la corriente gaseosa está ya parcialmente agotada, mientras que la corriente de menor caudal se alimentaría por la parte alta de la torre, permitiendo así que el diámetro sea menor en la parte superior de la columna.

Un esquema simplificado de esta modalidad de flujo se muestra en la Figura 5.3.

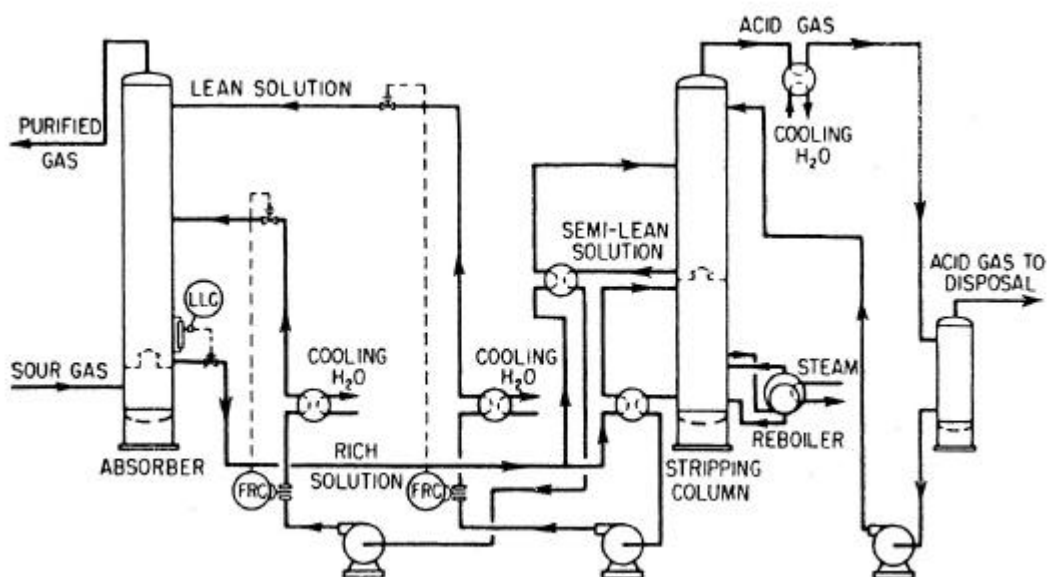


Figura 5.3. Diagrama de flujo partido.

5.3.3 ABSORCIÓN EN ISOCORRIENTE

En los casos en los que el gas a tratar presenta una elevada concentración de gases ácidos, y las especificaciones en cuanto a pureza sean exigentes, los ratios de caudales que se precisan son elevados. En muchos casos también ocurre que los calores de reacción, sobre todo para las aminas mas reactivas, pueden llegar a ser tan elevados que la temperatura que se alcanza en el interior de la columna dificulta el proceso global de absorción.

Estas circunstancias han provocado que se planteen esquemas de funcionamiento que emplean etapas previas de contacto en isocorriente con el fin de reducir la temperatura en



el interior de la columna o bien absorber parte del gas ácido antes de entrar en la columna de absorción.

5.3.4 TIPOS DE COLUMNAS

En cuanto a las columnas empleadas en el proceso, tanto la unidad de absorción como la de stripping, pueden ser de relleno o de platos, siendo estas últimas las más utilizadas. La elección de uno u otro tipo de columna, depende de las características de las corrientes a tratar, en el caso de columnas de platos, son especialmente aplicables en procesos que trabajan a altas presiones, donde las pérdidas de carga no son importantes en comparación con la eficiencia que puede obtenerse. El número de platos por columna oscila en torno a 20, que es el usual.

Por otra parte, las columnas de relleno se prefieren en sistemas donde la pérdida de carga y la posible formación de espumas en los platos se consideran importantes.

Como hemos indicado anteriormente, las columnas de platos son las que se emplean más comúnmente. Para el caso del CO_2 , los absorbedores con 20 platos suelen ser suficientes para cumplir con las especificaciones requeridas, y sólo se utilizan de más platos si el gas que vamos a tratar está cerca del equilibrio con la solución agotada, o bien en el caso de tratamiento del gas de síntesis donde debemos reducir el contenido en CO_2 a muy bajos niveles.

En estas columnas, la mayor parte del gas ácido se absorbe cerca del fondo de la columna, mientras que las últimas etapas se lleva a cabo la eliminación de trazas del gas ácido para cumplir especificaciones. Lógicamente, la concentración final de CO_2 en el gas de salida viene limitado por el equilibrio a una determinada temperatura. Por otra parte, en el caso en el que trabajemos con monoetanolaminas y sea necesario un lavado con agua para reducir las pérdidas de absorbente, se recomienda colocar dos o tres platos adicionales en la parte alta de la sección de absorción para reducir la cantidad de solución arrastrada en el proceso.



Las columnas de stripping suelen contener entre 12 y 20 platos por debajo del punto en donde se alimenta la solución rica, y entre 2 y 6 por encima, para capturar las aminas vaporizadas.

5.4 DATOS DE DISEÑO

CONSIDERACIONES DE EQUILIBRIO

La relación entre la concentración del gas ácido en la solución de absorbente y su presión parcial en la fase gas en equilibrio es quizás el dato más importante a tener en cuenta para el diseño de una planta de tratamiento.

Esta cantidad puede variar dependiendo de diversos factores como son la presión parcial del componente (más concretamente su fugacidad), la temperatura, el tipo de amina, concentración de esta en la solución, y la naturaleza y concentración de otras especies presentes en el sistema.

Para las fases preliminares del diseño de estos equipos, podemos considerar los datos de equilibrio líquido-vapor o bien datos de solubilidad experimentales que se han obtenido en muchos de los estudios realizados sobre estos procesos, posteriormente adaptaremos estos a una serie de condiciones específicas. Finalmente, precisaremos de otras herramientas tales como programas de simulación y optimización de procesos para nuestro diseño final.

La influencia de los factores mencionados anteriormente en el diseño, puede obtenerse a través de numerosas correlaciones referenciadas en la bibliografía para cada uno de los tipos de absorbentes mostrados en la Tabla 5.1. Generalmente, la concentración del gas ácido o componente en la fase líquida crece conforme decrece la temperatura y aumenta la presión parcial de este.

La presencia de otras sustancias en el sistema suele influir de forma negativa ya que retira absorbente del proceso o bien forma compuestos con este de manera que favorece



su degradación. En cuanto a la concentración de la amina, la cantidad de gas ácido absorbido aumenta conforme aumenta la concentración de absorbente en la solución, como cabía esperar.

PRESIONES DE VAPOR DE LAS SOLUCIONES

Para el diseño de los equipos que forman parte del proceso tales como las columnas de stripping y los reboilers, necesitamos datos de presión de vapor total de la solución como función de la temperatura y de la concentración de la amina en la solución, así determinaremos las condiciones de trabajo en las distintas unidades del sistema.

CALORES DE REACCIÓN

Los datos de calores de reacción entre el absorbente y el gas ácido son necesarios para los balances de energía de cada etapa y en general en los distintos componentes del sistema. Entre ellos, la cantidad de vapor necesaria en el reboiler o los requerimientos energéticos de los equipos de intercambio de calor del proceso.

En general, los calores de reacción no son constantes para cada tipo de amina ni para cada componente, aunque generalmente disminuyen conforme aumenta la concentración del gas ácido. Las monetanolaminas presentan en general un calor de reacción más elevado que el resto de aminas.

PROPIEDADES FÍSICAS

Es necesario conocer las propiedades físicas de las sustancias con las que vamos a trabajar ya que estas van a ejercer influencia sobre el proceso de diseño de los equipos. Dentro de estas, destaca la densidad de la solución, y particularmente nos interesa esta en función de la concentración de la amina en agua. Su importancia se debe a que determinará los requerimientos de potencia de los equipos necesarios para vehicular las corrientes. Por otra parte, estará relacionada con la temperatura.

Otra propiedad física importante es el punto de congelación, ya que es preciso conocerlo sobre todo cuando trabajamos en las unidades a baja temperatura y manejamos soluciones con una concentración de absorbente relativamente alta, como es el caso de la diglicolamina.



5.5 CORROSIÓN EN LAS PLANTAS DE TRETAMIENTO CON AMINAS. DEGRADACIÓN DEL ABSORBENTE

Uno de los problemas de operación que se presentan en las plantas de purificación de gases con alcanolaminas es la corrosión. Los sistemas que operan con aminas están sujetos a corrosión debida a gases ácidos (CO₂, SH₂) en la fase vapor, también en la solución, en el reflujo del regenerador y a los productos resultantes de la degradación de las aminas en la solución absorbente. Las unidades de operación se diseñan específicamente para soportar este problema. En la Figura 5.4 podemos ver el esquema básico de una planta de tratamiento con aminas y las principales zonas donde se presentan problemas de corrosión así como los materiales que se suelen emplear en ellas.

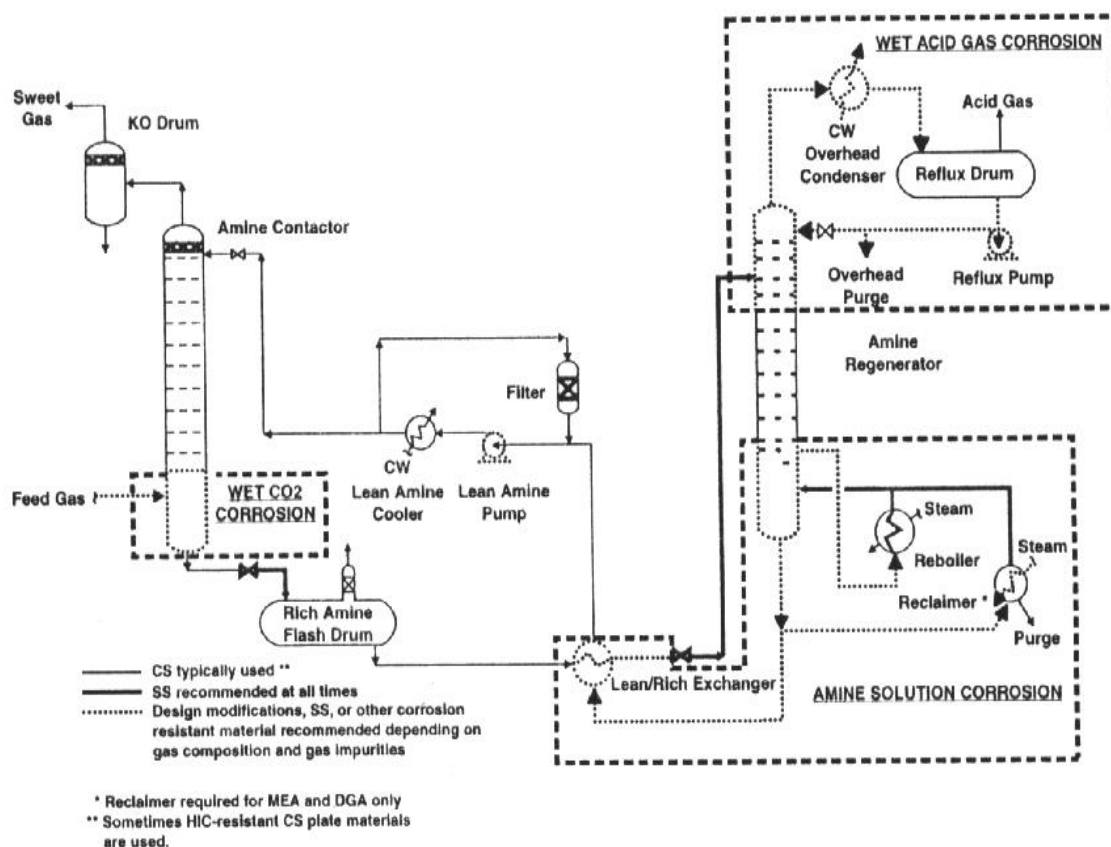


Figura 5.4. Principales áreas de corrosión en una planta de tratamiento con MEA.



La figura anterior muestra la relación que existe entre las condiciones de operación del proceso y los problemas de corrosión.

Para comprender mejor el fenómeno de corrosión, tenemos que tener en cuenta el esquema básico de una planta de tratamiento descrito en el apartado anterior, en el que la solución cargada de contaminante se acumula en el fondo de la columna de stripping. Por otra parte, los componentes ácidos recuperados salen por la parte alta de la columna. Estas zonas, debido a las condiciones de operación, estarían sujetas a problemas de corrosión.

Como vemos en la figura, la mayor parte del equipamiento y los conductos utilizados en la planta están fabricados en acero al carbono. En muchos casos sería posible construir en este material prácticamente toda la planta, si mantuviésemos el regenerador de la solución operando a bajas temperaturas, o bien minimizando la concentración de la solución absorbente es decir, reduciendo la carga de gas ácido en moles de gas por mol de amina. En resumen, variando algunas de las condiciones de operación del sistema.

Pero la práctica general es construir ciertas secciones de la planta en acero inoxidable u otras aleaciones. La utilización selectiva de aleaciones resistentes a la corrosión permite condiciones de operación más severas, a altas concentraciones de amina en la solución y a altos contenidos (cargas) de gases ácidos en la solución rica. Además facilita la desorción de la solución agotada, ya que podemos trabajar a una mayor temperatura, además de reducir la corrosión en las áreas susceptibles, mejorando la economía del proceso.

Las zonas marcadas con una línea discontinua gruesa muestran las regiones donde el acero al carbono se reemplaza por acero inoxidable. Las regiones en línea discontinua fina, muestran zonas donde se requieren materiales resistentes a la corrosión, o bien modificaciones en el diseño mecánico del equipamiento, dependiendo fundamentalmente de la composición del gas que va a ser tratado. Para el caso de gas natural o gas de síntesis, los fenómenos de corrosión son menos dramáticos que para el caso de gases de refinería.

A continuación describiremos brevemente como tiene lugar el fenómeno de corrosión del acero al carbón en presencia de soluciones de aminas.



En ausencia de inhibidores, el acero al carbono se corroe en solución acuosa por un mecanismo electroquímico. La reacción anódica es la de oxidación, donde el hierro metálico se oxida a iones ferrosos, mientras que la reacción catódica es de reducción, en la cual los iones hidrógeno disminuyen su estado de oxidación pasando a su estado elemental combinándose en muchos casos para dar hidrógeno molecular que se desprende en forma de gas (H₂).

Este proceso se ve afectado por la temperatura y la concentración de las especies que intervienen y en el medio, ya que en general tienen que ver con la conductividad de este. La concentración de reactivos, en especial la de iones H⁺ (pH) favorece la reacción al igual que un incremento de la temperatura y en la conductividad. En las plantas de tratamiento con aminas, los fenómenos de corrosión se dividen en dos categorías:

- Corrosión húmeda debida a gases ácidos (*Wet Acid Gas Corrosion*).
- Corrosión debida a las aminas en solución (*Amine solution corrosion*).

Describiremos brevemente cada uno de estos mecanismos.

5.5.1 CORROSIÓN HÚMEDA DEBIDA A GASES ÁCIDOS

Es la corrosión del acero al carbono en presencia de gases ácidos como el CO₂ en ambientes húmedos, en presencia o no de aminas. Suele tener lugar en la parte alta del regenerador, por donde salen la corriente de dióxido de carbono recuperada, y en el fondo de las columnas de contacto si el gas alimentado está saturado en agua y tienen lugar condensaciones. En general, donde las superficies de los equipos deben estar en contacto con soluciones ácidas acuosas. El grado de corrosión dependerá del contenido en dióxido de carbono del gas, es decir de la presión parcial de este en la fase gas.

En este caso el contenido en aminas no es determinante. El CO₂ se disuelve en agua y se ioniza parcialmente formando un ácido débil (bicarbonato). Los iones ferrosos producidos en la reacción de corrosión descrita anteriormente, reaccionaran con el bicarbonato formando carbonato ferroso, que es insoluble y precipita en forma de escamas. Además este compuesto es poroso, por lo que no ejerce una función de capa



protectora como podría pensarse considerando lo que ocurre en otros fenómenos de corrosión, por ejemplo, en el caso de la pasivación.

En cuanto a la dependencia de este mecanismo con la temperatura, podemos decir que la corrosión aumenta conforme aumenta la temperatura, aunque hasta un valor máximo de la misma. Este fenómeno se explica por el hecho de que a altas temperaturas los productos de reacción forman películas más resistentes que los carbonatos u óxidos de los casos anteriores. También puede ocurrir un fenómeno de corrosión similar debido al SH_2 , pero nuestro gas a tratar no presenta este compuesto y no nos vamos a detener en su descripción.

En cuanto a los mecanismos de prevención de este tipo de corrosión, se centran fundamentalmente en intentar disminuir localmente la concentración del gas ácido en las zonas sensibles a la corrosión. Para el caso del absorbedor, se suelen colocar una serie de distribuidores del flujo sumergidos en la solución rica, a la entrada de la alimentación del gas, de manera que el gas cargado de ácido no entre en contacto directo con las paredes del equipo. Además de las modificaciones locales que puedan realizarse a los distintos equipos, como hemos indicado anteriormente, los materiales que se emplean en su fabricación suelen estar constituidos por aceros inoxidables, aleaciones o suelen llevar tratamientos especiales orientados a mejorar su comportamiento.

5.5.2 CORROSIÓN DEBIDA A LAS AMINAS EN SOLUCIÓN

Es la corrosión del acero al carbono debida a soluciones acuosas de aminas. Este tipo de corrosión se ve influenciada por una serie de factores: altas temperaturas de operación, elevados contenidos de gas ácido en las corrientes, contaminantes de la solución incluyendo los productos resultantes de la degradación de las aminas y sales estables con la temperatura y la concentración y el tipo de amina en la solución.

La corrosión debida a las aminas es significativa en el fondo del regenerador (sección a mayor temperatura). También se presenta en equipos como el intercambiador de calor entre la solución rica y la agotada (en el lado de la solución rica), tanques que contengan la solución cargada de contaminante (flash, fondo del absorbedor), y en las tuberías que vehiculan la solución.



En cuanto al mecanismo de corrosión, podemos decir que las aminas puras o las mezclas de estas, no son corrosivas debido a su baja conductividad y alto pH. Sin embargo, las soluciones acuosas (rica y regenerada) de aminas si pueden ser corrosivas debido a que presentan las características opuestas: bajo pH y alta conductividad.

En el caso de aminas primarias (MEA, DGA), los efectos de la corrosión son mayores que para el resto de las aminas, debido a la alta concentración de sales producto de las reacciones presentes en las áreas a mayor temperatura del proceso. Las reacciones envueltas en el proceso de corrosión son muy numerosas, interviniendo el CO₂ en los mecanismos, y, como consecuencia, en el equilibrio. Si recordamos, para el caso de las monoetanolaminas, se producía una reacción adicional de formación del carbamato, que no tenía lugar en el caso de otras aminas y en muchos casos, la corrosión se debe a la presencia y comportamiento de este tipo de sustancias. En general, tras el stripping, una cantidad considerable permanece en la solución. Este compuesto actúa como una sal estable con la temperatura respecto al fenómeno de corrosión, por lo que es un agente adicional que interviene en el proceso.

La Figura 5.5 muestra alguno de los compuestos (sales estables con la temperatura), que se forman y su influencia en el grado de corrosión dependiendo del pH.

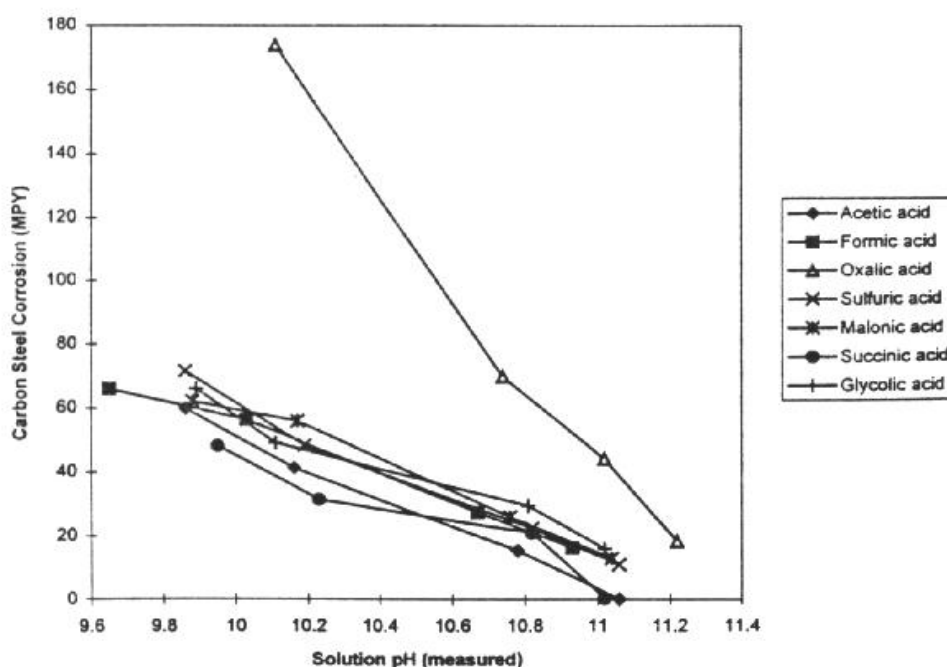


Figura 5.5. Efecto del pH en las distintas sales estables en la corrosión del acero al carbono.



En el proceso de absorción, se forman una serie de productos tales como $R_2NH_2^+$ y R_3NH^+ , se denominan alcanolamonios, que son iones que se comportan como ácidos y pueden aportar los protones necesarios para la reacción de corrosión. La concentración de estos compuestos influye notablemente en la corrosión. Las soluciones ricas por tanto son más corrosivas que las agotadas, y en general, tanto los productos resultantes de la degradación de las aminas, como los carbamatos y los iones indicados anteriormente, intervienen en la corrosión por diversos factores, aunque algunos de ellos no aparezcan en las reacciones de corrosión.

Tanto el CO_2 como el SH_2 son ácidos lo suficientemente débiles como para que las reacciones entre ellos y las aminas sean irreversibles térmicamente. Pero existen ácidos lo suficientemente fuertes como para que sus reacciones con este tipo de sustancias no sean irreversibles con la temperatura, y por lo tanto las sales producto de dichas reacciones son estables con la temperatura. Estas se producen generalmente por reacción con el oxígeno o bien debido a la propia degradación térmica del disolvente. Puesto que son estables térmicamente, se van acumulando en el proceso.

En cuanto a los efectos de estas sales estables, además de intervenir directamente en el proceso de absorción reduciendo la capacidad de absorción de las aminas al asociarse con estas, son causantes de corrosión ya que al ser difíciles de eliminar, permanecen en la solución contribuyendo a bajar el pH, aumentar la conductividad del medio y eliminar las capas de protección natural que pueden depositarse en las superficies de los equipos resultantes de la formación de compuestos en el proceso.

De entre los factores que más afectan a estos mecanismos destacan la temperatura y la concentración del disolvente, de manera que los efectos de la corrosión se incrementan con la temperatura y conforme aumentamos la concentración de la solución. La corrosión debida a este mecanismo puede minimizarse seleccionando materiales de construcción adecuados y, como en el caso anterior, realizando modificaciones locales en el proceso.



5.5.3 OTROS MECANISMOS DE CORROSIÓN

CORROSIÓN-EROSIÓN

El fenómeno de corrosión-erosión está causado por las altas velocidades de la solución, turbulencias y la actividad de los gases ácidos y aminas en las superficies metálicas. Este proceso elimina las capas internas protectoras contra la corrosión de conductos y equipamientos. Este fenómeno se agrava cuando la solución presenta suciedad o sólidos en suspensión.

Las áreas en las que se presenta este fenómeno suelen ser la tubería por la que circula la solución rica, la válvula de alivio de presión, la bomba que impulsa la solución regenerada, o el intercambiador de calor o la zona de entrada del gas a tratar.

Como en los casos anteriores, este mecanismo puede reducirse empleando los materiales de fabricación adecuados y modificando ciertos detalles mecánicos de diseño para evitar turbulencias o introduciendo filtros para eliminar sólidos en suspensión.

Para reducir los efectos de la corrosión-erosión en las tuberías y conductos, se recomiendan velocidades de circulación inferiores a 1,8 m/s. En cuanto a los reboilers, es recomendable el empleo de múltiples entradas y salidas de flujo, tanto para los tipos kettle y termosifón. Para los intercambiadores, podría reducirse si se emplean deflectores perforados internos. En el caso de las bombas de impulsión, se recomiendan unas longitudes mínimas de los tramos rectos antes de la zona de aspiración de 8 a 9 veces el diámetro de las tuberías, con el fin de reducir las turbulencias.

5.5.4 INHIBIDORES DE LA CORROSIÓN

Anteriormente hemos hecho referencia a la utilización de inhibidores de la corrosión como aditivos del disolvente en procesos que emplean aminas para absorber gases ácidos, sobre todo en el caso de las monoetanolaminas. Este tipo de sustancias se clasifican en:



- *Inhibidores catódicos*, que inhiben la reacción de reducción o catódica.
- *Inhibidores anódicos*, cuya misión es inhibir la reacción de oxidación o anódica.
- *Pasivadores por oxidación*. Estos compuestos se consideran agentes oxidantes más fuertes que el ión hidrógeno, y actúan elevando el potencial de oxidación de acero, de manera que no tengan lugar las reacciones envueltas en los fenómenos de corrosión descritos anteriormente.

Estas sustancias potencian la formación de compuestos protectores que se adhieren a la superficie del equipo, tales como el óxido férrico, esta película se denomina capa pasiva. Es interesante señalar que dichos inhibidores trabajan muy bien en unidades que eliminan CO_2 y únicamente son efectivos con monoetanolaminas, en ausencia de sulfuro de hidrógeno que destruye la capa pasiva formada.

De los anteriores, los dos primeros tipos no han tenido un éxito comercial importante en unidades de tratamiento que operan con aminas.

5.5.5 DEGRADACIÓN DE LAS SOLUCIONES DE AMINAS

Uno de los problemas comunes que presentan las plantas de tratamiento con aminas es la degradación en el proceso, de la solución en presencia de algunas sustancias. La solución absorbente suele reaccionar irreversiblemente con ciertos tipos de compuestos provocando su degradación.

Estas sustancias son principalmente el O_2 , CO_2 , COS , CS_2 . Otras impurezas que pueden reaccionar son HCl , HCN , NH_3 , pero considerando las especificaciones de la corriente que trataremos en nuestro proceso, nos ocuparemos únicamente de los dos primeros tipos de reacciones.



5.5.5.1 REACCIÓN CON OXÍGENO

Las alcanolaminas están sujetas a degradación provocada por el contacto con oxígeno libre. Las reacciones principales involucran la oxidación directa de la amina a ácidos orgánicos. La monoetanolamina parece ser la más vulnerable a esta oxidación, si la comparamos con otros tipos de aminas. Esta degradación implica la formación de ácido fórmico, amoníaco, amidas sustituidas y polímeros de alto peso molecular.

Se han realizado numerosos estudios que revelan que las condiciones en las que tienen lugar las reacciones involucradas en el proceso varían de unos casos a otros, pero para las soluciones acuosas de MEA, se producen en torno a los 90°C de temperatura.

La degradación de las aminas puede minimizarse monitorizando las corrientes que contengan oxígeno o puedan ser contaminadas por este durante el proceso.

5.5.5.2 REACCIÓN CON EL CO₂

La mayor parte de las soluciones de aminas que se comercializan actualmente reaccionan con el dióxido de carbono para formar productos de degradación. Concretamente las monoetanolaminas reaccionan reversiblemente con el CO₂ para formar sustancias que degradan la solución.

Las reacciones involucradas en estos procesos son diversas, y para el caso de la MEA, destacan las que dan lugar a un compuesto que tras su hidrólisis, forman diaminas y liberan de nuevo el CO₂. En el caso de la DGA, algunas reacciones conducen a la formación de urea. A diferencia de los compuestos resultantes de la corrosión, estos pueden eliminarse de la solución mediante calentamiento. En general no dificultan directamente el proceso de absorción, mientras que la concentración de la amina se mantenga en un valor constante, sino que intervienen indirectamente, aumentando la viscosidad de la solución y en consecuencia, bajando la eficiencia global del proceso. También en algunos casos, como vimos en el apartado anterior, pueden participar en los procesos de corrosión.

Las reacciones de degradación suelen ser lentas, ya que se trata de reacciones secundarias, y tienen lugar principalmente en la zona de regeneración, y generalmente



pueden limitarse evitando alcanzar elevadas temperaturas. Las áreas más sensibles son el reboiler y el regenerador de la solución o reclaimer.

Las reacciones involucradas son reacciones de equilibrio que pueden desplazarse a la izquierda elevando la temperatura. A pesar de ello no todas las sustancias que se producen son regenerables, y una pequeña porción permanece en la solución. A diferencia de los anteriores, estos productos no contribuyen significativamente a la corrosión.

5.5.5.3 OTRAS REACCIONES DE DEGRADACIÓN

Las principales sustancias que dan lugar a productos de degradación resultantes de reacciones irreversibles con las soluciones de aminas son el COS y CS₂. El primero de ellos reacciona principalmente con la monoetanolamina de forma análoga al CO₂, y las reacciones generalmente son rápidas a temperatura ambiente, con lo que se observa un descenso rápido de la alcalinidad. Por otra parte, el COS presenta también una reacción de hidrólisis secundaria.

Si se añaden a la solución álcalis fuertes tales como carbonato sódico o hidróxido sódico, se reduce la porción de COS que reacciona irreversiblemente con MEA, favoreciendo la reacción de hidrólisis, con lo que conseguimos disminuir las pérdidas de disolvente. Este proceso generalmente tiene lugar en el reclaimer como puede verse en la Figura 5.2 que muestra un esquema global del proceso.

En el caso del CS₂, la proporción de solución que reacciona con este compuesto es inferior que en el caso anterior, y las reacciones generalmente suelen ser lentas.

En cuanto a sustancias ácidas como HCl, HCN, etc., que forman sales con las alcanolaminas. Si se trata de ácidos más fuertes que el dióxido de carbono, las sales formadas son más difíciles de descomponer con la temperatura, y pasan a formar parte de las ya mencionadas sales estables con la temperatura, acumulándose en el sistema. Además de disminuir la capacidad de absorción de la solución, estas sales provocan dificultades de operación tales como corrosión y formación de espumas.

Para reducir este problema, suelen añadirse a la solución sustancias como la sosa cáustica, que reaccionan con estos ácidos formando sales de sodio y evitan así las que



reaccionen con las aminas. El principal inconveniente es que dichas sales de sodio también son indeseables.

En el caso del SO₂, al ser un ácido relativamente fuerte reacciona con las aminas para formar sulfitos, que son muy reactivos y generalmente no se comportan como sales estables con la temperatura. Sin embargo, en presencia de oxígeno, pueden oxidarse y formar sulfatos que den lugar a este tipo de sales.

La presencia de amoníaco, debido a su alta solubilidad en agua y a pesar de no reaccionar químicamente con la solución, es perjudicial ya que trae consigo importantes problemas de corrosión, sobre todo en zonas a altas temperaturas (stripper).

5.5.6 EQUIPOS AUXILIARES

5.5.6.1 RECLAIMER

El reclaimer es una unidad auxiliar que hace posible mantener una concentración constante de amina activa en la solución regenerada y previene de la acumulación de sales estables con la temperatura y otros productos corrosivos. En cuanto a las tecnologías comerciales empleadas para este tipo de equipos comprenden desde la destilación a vacío, atmosférica o a alta presión, dependiendo de la composición de la solución, intercambio iónico o electrodialisis.

La destilación es el proceso empleado en el caso de plantas de MEA y DGA. Generalmente se trata de pequeñas porciones de la corriente principal, en torno al 0,5-2% del flujo total. La corriente regenerada procedente del reboiler de la columna de stripping se fracciona, pasando una parte de ella por el reclaimer antes de mezclarse con la corriente principal. Esta unidad generalmente opera a través de regeneración térmica a la presión de la corriente principal.

Los vapores generados se emplean directamente en la torre de desorción de manera que en la mayoría de las plantas comerciales suministran un caudal de vapor adicional al caudal proporcionado por el reboiler. Debido a la temperatura, suelen acumularse numerosos compuestos orgánicos y sales de elevado punto de ebullición, que junto con la



solución provocan una degradación irreversible del disolvente, contribuyendo a las pérdidas totales de este.

La temperatura dentro del reclaimer debe ser tal que no se produzcan productos de degradación volátiles que contaminen los vapores de disolvente. Para evitar este problema suelen emplearse una serie de técnicas, entre ellas:

- Realizar la operación a vacío con el fin de reducir el punto de ebullición de la solución.
- Emplear vapor para realizar un stripper dentro del reclaimer para reducir la presión parcial de MEA en la mezcla.
- Adición de álcalis para neutralizar los ácidos fuertes y favorecer el proceso de liberación de la amina combinada, además de prevenir la corrosión. Generalmente se trata de carbonato sódico o hidróxido sódico.

5.5.6.2 FILTROS

La filtración mecánica se emplea en muchas unidades de purificación para separar de la solución sólidos en suspensión, fundamentalmente sales resultantes de la degradación. Generalmente se trata de equipos auxiliares consistentes en filtración continua a través de filtros mecánicos y de carbón activo.

Como en el caso anterior, se suele filtrar una parte de la solución circulante, en torno al 10-15% del flujo total. Suelen estar localizados aguas abajo de la bomba de la solución regenerada, después de su enfriamiento. Los tipos de filtros mecánicos que se emplean comúnmente suelen estar constituidos por diversos materiales: algodón, celulosa, tejidos prensados, papel, etc.

Cuando se producen problemas de espumas debidas a ciertos contaminantes con una elevada actividad superficial, o bien a compuestos orgánicos de elevado peso molecular disueltos o en emulsión, estos agentes deben ser eliminados haciendo pasar la solución a través de un lecho de carbón activo. En general, considerando la composición de la corriente que vamos a procesar y teniendo en cuenta que este tipo de sistemas se emplean fundamentalmente para el caso de aminas secundarias, no hemos incluido filtración en nuestra planta.



5.6 TECNOLOGÍA ECONAMINE FLUE GAS (FG)

5.6.1 INTRODUCCIÓN

En el apartado 5.2.8 de este capítulo, indicamos que la tecnología ECONAMINE FG se consideraba la más apropiada para la eliminación de dióxido de carbono en estos procesos. Por esta razón y considerando su extendida implantación a nivel industrial, vamos a dedicar un apartado a la descripción global de esta tecnología y a los aspectos mas relevantes de este (referencias bibliográficas [3], [4], [5],[10], [14], [17], [19] y [21]).

Dow Chemical y Union Carbide desarrollaron a principios de los años 80, un proceso para eliminar el CO₂ de gases de combustión a presión atmosférica, que empleaba una solución de MEA al 30% junto con una serie de aditivos, principalmente inhibidores de la corrosión. El proceso ECONAMINE FG para eliminar CO₂, fue adquirido por la compañía Fluor Daniel Inc. en 1986. La compañía Dow Chemical fue la primera licenciataria de esta tecnología, que originariamente se denominaba GAS/SPEC FT-1, la cual se desarrolló tras una serie de experiencias realizadas durante 18 meses en plantas piloto, con el objetivo de mejorar las condiciones de operación de las plantas que trabajaban con MEA, y que hemos ido describiendo a lo largo de este capítulo.

Como veremos más adelante, esta tecnología es adecuada para tratar gases a cualquier presión y temperatura, ya el proceso incluye una sección de compresión y enfriamiento del gas a la entrada con el fin de adaptar las condiciones de este a las óptimas en los proceso de absorción descritos.

La eliminación CO₂ a gran escala, requiere procesos que sean eficientes y de bajo coste. La combinación de MEA, aditivos (principalmente inhibidores de la corrosión, sujetos a patente), y unas técnicas especiales de mantenimiento de la solución, permiten la utilización soluciones concentradas en MEA y altas cargas de gas ácido sin tener que emplear materiales de alto coste, tales como aleaciones resistentes a la corrosión.

Esta característica, cuando se compara con una solución estándar de MEA, muy corrosivas en concentraciones superiores al 20%, o degradables en presencia de oxígeno, permite trabajar con una solución que es estable en presencia de este y cuya concentración elevada en la sustancia activa, mejora considerablemente la eficacia del



proceso de absorción, reduciendo el consumo energético y el tamaño de la planta. Se consiguen rendimientos de eliminación de entre el 85 y el 95% (incluso superiores) del CO_2 presente en gases de combustión a presión atmosférica, dependiendo del contenido inicial de este componente en la corriente de alimentación al proceso, de las características de diseño de la columna de absorción.

Esta tecnología, como hemos indicado anteriormente, está específicamente pensada para el tratamiento de corrientes que contienen oxígeno, como es el caso de los gases de combustión. Por otra parte, el inhibidor de la corrosión en la solución puede desactivarse rápidamente en presencia de gases reductores como el CO , SH_2 o en presencia de una concentración adecuada de oxígeno (no excesiva).

También puede verse afectada negativamente con la presencia de altos niveles de SO_2 , ya que este reacciona irreversiblemente con la monoetanolamina, creando una sal potencialmente corrosiva que debe ser eliminada, como hemos visto en el apartado anterior. Generalmente se tolera un máximo de 10 ppmv de dicho compuesto. En nuestro caso, considerando las especificaciones de la corriente que va a tratarse, no tendremos que considerar este inconveniente.

5.6.2 LAS SOLUCIONES DE MEA EMPLEADAS EN EL PROCESO

Hemos dedicado apartados anteriores a las etanolaminas y a las características que presentan en su utilización como disolvente. Recordaremos brevemente los principales inconvenientes que presenta el empleo de soluciones de MEA para el tratamiento de gases:

- Altos porcentajes de corrosión.
- Reacciones secundarias con sustancias como el COS.
- Degradación en presencia de oxígeno.
- Sección de lavado del gas tratado en la torre de absorción para prevenir las pérdidas por vaporización debido a la alta presión de vapor de la amina primaria.

El disolvente que se emplea en el proceso ECONAMINE FG es superior a las soluciones estándar de etanolaminas, ya que presentan una serie de ventajas:



- Buena inhibición de la corrosión.
- Estabilidad en presencia de oxígeno.
- Puede trabajarse con soluciones a altas concentraciones.

Como indicamos en la introducción de esta sección, con este tipo de soluciones puede trabajarse con unas concentraciones en peso superiores al 30% de ingredientes activos. Esto permite en algunos casos, incluso duplicar la capacidad de carga de CO₂ de la solución reduciendo el tamaño total de la planta. Los excelentes inhibidores de la corrosión permiten la utilización de una mayor proporción de acero al carbono como material de construcción de los equipos, que de otros materiales como acero inoxidable, es decir, permite la construcción de plantas más pequeñas y económicas. Por otra parte, las pérdidas de MEA no se consideran excesivas.

5.6.3 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

En las Figuras 5.6 y 5.7, se muestra el diagrama de flujo del proceso ECONAMINE FG. Dicho proceso utiliza un equipamiento similar al de cualquier unidad de tratamiento de gases con aminas, con una serie de modificaciones derivadas de las condiciones del gas que va a tratarse, en este caso, se suministra a baja presión. Esta suele ser cercana a la atmosférica y la temperatura, para el caso de gas de combustión, en torno a los 100 °C.

Teniendo en cuenta estas especificaciones, antes de la entrada al absorbedor, es necesario enfriar y comprimir el gas. Por lo tanto, el gas a tratar pasa por una unidad de enfriamiento (quench tower, direct contact cooler DCC) donde se suele utilizar una corriente de agua como fluido refrigerante, y posteriormente se comprime hasta alcanzar una presión suficiente como para superar la pérdida de carga del proceso.

En estas condiciones, el gas entra en el absorbedor por la parte inferior y fluye en contracorriente con el disolvente, separando así el CO₂. Este gas tratado, que ha elevado su temperatura debido a los calores de reacción de las reacciones involucradas en el proceso de absorción, pasa a sección de lavado constituida por un lecho relleno, en la parte superior de la columna de absorción, donde se eliminan los vapores de disolvente (MEA), y el agua que haya podido arrastrarse en el proceso. El fluido empleado es una corriente de agua, que se incorpora de nuevo al proceso junto con la solución. El gas



lavado procedente del stripper contiene fundamentalmente CO_2 , ya que se elimina prácticamente toda el agua.

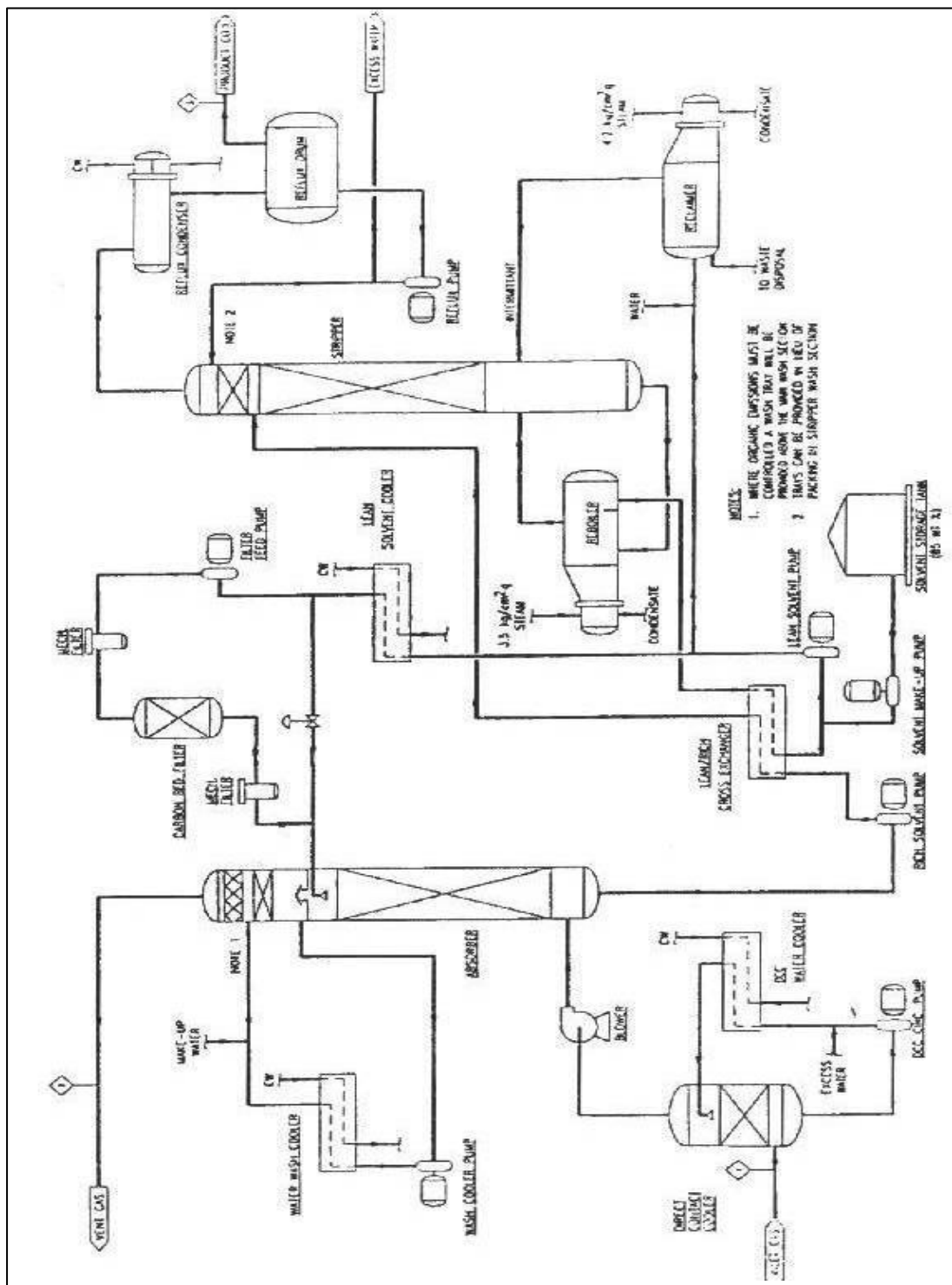


Figura 5.6. Diagrama de flujo detallado del proceso.



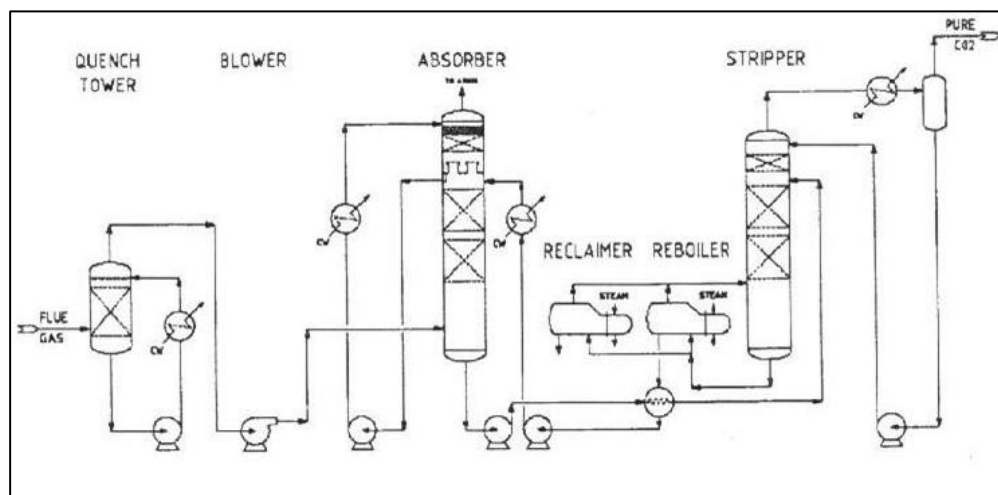


Figura 5.7. Diagrama de flujo simplificado.

La solución rica abandona la columna y es bombeada desde el fondo del absorbedor al intercambiador de calor, donde la solución proveniente del stripper cede parte de su energía térmica a la solución rica (lean/rich cross exchanger), por lo que conseguimos enfriar la solución agotada y precalentar la rica a una temperatura cercana a la temperatura de la corriente de salida del absorbedor, con una diferencia de entre 10 y 15 °C.

En el stripper, el dióxido de carbono se elimina de la solución rica por regeneración térmica. Esta última flashea conforme entra por la cabeza de la columna descendiendo en contracorriente con el vapor generado en el reboiler. La solución es calentada en el reboiler utilizando vapor a baja presión.

El vapor de agua y los vapores de MEA, abandonan el reboiler y entran en la sección de desorción del stripper, donde se libera el CO₂, mientras calienta la solución descendente conforme asciende y condensándose parcialmente. Los vapores de MEA junto con el vapor de agua y el dióxido de carbono entran en la sección de lavado del stripper, donde los vapores residuales de MEA condensan (reflux condenser). Dicho condensado se incorpora al sistema, parte como reflujo al stripper, y parte como líquido de lavado en la parte alta del absorbedor. El balance de agua del proceso debe asegurar que la solución se mantenga en una concentración aceptable.



Tras la condensación, la mezcla bifásica constituida por el condensado y el vapor junto con el CO_2 , entra en el tanque de reflujo (reflux drum), donde se separa el CO_2 del condensado. Dicho CO_2 , procedente del depósito de reflujo y saturado de vapor de agua, a una temperatura superior a la ambiente y a una presión entre 30 y 40 kPa, se suele secar y comprimir para su transporte. El secado previene la formación de condensados ácidos que pueden ser muy corrosivos bajo las condiciones de los conductos por donde se transporta. La pureza de esta corriente suele ser superior al 99.5%.

La solución agotada, a una temperatura aproximada de 120 °C tras pasar por el reboiler, entra en el intercambiador (lean/rich cross exchanger) donde se enfría parcialmente. Posteriormente se bombea a una unidad de enfriamiento (lean solvent cooler) donde termina su enfriamiento, empleando para ello agua o aire. Una parte de esta corriente pasa a través de un lecho de carbón activo para eliminar parte de los contaminantes de la solución.

Suele colocarse además un filtro mecánico en la cabeza del lecho de carbono para prevenir el posible mal funcionamiento del lecho por taponamientos, también para evitar que partículas puedan entrar en el circuito. A pesar de todo, algunos contaminantes como las sales estables con la temperatura, no son eliminadas en este sistema y pasan al reclaimer de donde deben ser eliminadas para evitar su acumulación. Cuando la solución agotada tratada retorna a la parte alta del absorbedor, se encuentra a una temperatura comprendida entre los 40-45 °C.

El reclaimer es necesario para mantener la calidad de la solución. Se diseña para reducir la concentración de dichas sales, contaminantes de alto punto de ebullición y otros productos resultantes de la degradación. Opera únicamente durante ciertos periodos y se diseña con un exceso de capacidad para afrontar sobrecargas del sistema. Cuando en la operación, el calor suministrado por el reclaimer reemplaza al calor suministrado por el reboiler, el flujo total de vapor en el sistema permanece constante, ya que este no funciona en continuo.

Es usual el aporte de agua a este equipo con el fin de diluir la corriente de disolvente a una concentración que suele ser la mitad de la normal, con lo que se consigue reducir la temperatura requerida en la recuperación del disolvente. Esto reduce las pérdidas en el reclaimer y mejora su operación.



Por último, las secciones de lavado en las torres de absorción y stripping minimizan las pérdidas de disolvente y de agua en el proceso. Cuando necesitamos reducir las pérdidas de MEA al máximo, podemos disponer de una sección adicional de lavado después de la salida del gas de la torre de absorción.

5.6.4 APLICABILIDAD DEL PROCESO

En su origen, el proceso ECONAMINE FG y otros similares, surgieron no solo por la necesidad de depurar corrientes de gases ácidos, sino también por la posibilidad de disponer de fuentes de CO₂ de gran pureza para su utilización a nivel industrial. De las numerosas aplicaciones industriales del dióxido de carbono, incluyendo la industria alimenticia, ya hemos comentado algo en capítulos anteriores.

La composición del gas que va a tratarse determina la naturaleza del pretratamiento que debe realizarse, esencial para la correcta ejecución del proceso. En cuanto a su aplicación, puede considerarse más adecuado para la corriente resultante de la combustión del gas natural, por su facilidad de limpieza y por su contenido en contaminantes (trazas). La presencia de contaminantes determina la necesidad de tratamientos adicionales antes de su entrada en el absorbedor. En la Tabla 5.3, podemos ver las condiciones generales de aplicabilidad del proceso. Por lo tanto, el proceso es aplicable para el tratamiento de gases a cualquier presión y temperatura, y con presiones parciales de CO₂ bajas, en torno a 0.1 bar.



Tabla 5.3. Condiciones de aplicabilidad del proceso.

CARACTERÍSTICA	APLICABILIDAD
TAMAÑO DE LA PLANTA	5-6000 t/d de gas a tratar
PROCEDENCIA DEL GAS (%CO₂)	
Calderas	8-12%
Turbinas	2-4%
Motores	4-8%
CONTAMINANTES	
SO ₂	< 10 ppmv
NO _x	< 400 ppmv, NO ₂ < 20 ppmv
O ₂	2-14% vol.
Partículas	No admisible
CONDICIONES DE OPERACIÓN	
Temperatura	La que este disponible, enfriamiento incluido en el proceso.
Presión	La que este disponible, en proceso incluye el sistema de bombeo (soplante).

5.6.5 CONSIDERACIONES DE DISEÑO

Como indicamos anteriormente, la mayor ventaja que presenta el disolvente empleado en el proceso es que permite la utilización de acero al carbono en algunas de las áreas típicamente sensibles a la corrosión. Las tuberías y conductos que transportan el gas ácido deben ser de acero inoxidable, sin embargo las que están destinadas al disolvente, pueden construirse de acero al carbono y operar de forma satisfactoria.

Los depósitos e intercambiadores de calor pueden construirse en acero al carbono. Los recubrimientos internos y cámaras se fabrican normalmente en acero inoxidable, aunque las continuas mejoras a las que se somete el proceso permitirán su fabricación en materiales más económicos.



El disolvente está formulado para pasivar el acero al carbono, y el diseño de la planta debe asegurar que todos los componentes contruidos en acero al carbono permanezcan en el mismo estado en contacto con el disolvente durante la operación. El espesor de la capa de corrosión se controla constantemente (monitorización), y las plantas que funcionan actualmente demuestran que el disolvente empleado en el proceso inhibe la corrosión eficazmente, incluso en presencia del gas ácido.

Una consideración de importancia a tener en cuenta en la fase de diseño es la localización de la soplante ya que esta decisión influirá en la elección del equipo y el la longitud de los conductos. Las tres posiciones adecuadas dentro del sistema para la soplante serían: corriente arriba de la sección de enfriamiento del gas de combustión, corriente abajo de este (antes de la torre de absorción) o bien aguas abajo del absorbedor.

Tendríamos que evaluar los costes de los conductos (equipamiento), frente a los costes (de operación y capital) de la soplante para determinar la mejor elección. La tercera de las opciones como ejemplo, requiere conductos de mayor tamaño, así como un absorbedor también mayor, además de un mayor consumo energético. Sin embargo, si la soplante estuviese localizada corriente arriba de la torre de contacto, estaría expuesta a altas temperaturas, sería vulnerable a la posible inundación de la columna, aunque el consumo energético sería menor, y también lo sería el tamaño del equipo y de los conductos). En cualquier caso, en nuestro proceso el gas está disponible a una presión elevada, por lo que no sería necesario considerar las secciones de compresión y enfriamiento del gas.

El coste de la planta está directamente relacionado con la cantidad de energía consumida. El reboiler y la soplante parecen ser los mayores consumidores de energía del proceso, a pesar de que se ha conseguido ahorrar energía en el calor que es necesario aportar en el reboiler al aumentar la concentración de la solución. De esta forma también disminuyen los caudales que se manejan en el proceso. El consumo de disolvente es también un factor a tener en cuenta. El proceso ECONAMINE FG está diseñado para minimizar las pérdidas de disolvente. Las principales vías o factores por los que se producen dichas pérdidas son:

- Alta temperatura de operación del absorbedor.
- Mal funcionamiento de la sección de lavado del gas de salida.



- Fugas.

Por otra parte, si las condiciones de operación están bien controladas, el disolvente operará dentro de las especificaciones. Para ello se analizan en continuo los siguientes parámetros:

- Composición del gas de entrada, fundamentalmente contaminantes y partículas.
- Composición de la solución: niveles del inhibidor, sales estables, carga de CO₂.
- Funcionamiento del lavador, reboiler, recuperador y lecho de carbón activo.

Con el control de los parámetros anteriores podemos garantizar el funcionamiento del disolvente sin problemas. La siguiente tabla (Tabla 5.4), nos proporciona algunos datos de de referencia relacionados con la operación del proceso.

Tabla 5.4. Datos de operación del proceso Econamine FG.

DESCRIPCIÓN	DATO
CAUDAL DE GAS DE ENTRADA (m ³ /h)	18000
% CO ₂ GAS DE ENTRADA	8.5
% O ₂ GAS DE ENTRADA	3.5
PRESIÓN DEL ABSORBEDOR (KPa)	10-50
CONCENTRACIÓN COMPONENTE ACTIVO (%)	30
VAPOR REBOILER (Kg/h)	4500
VAPOR (Kg)/ Kg DE CO ₂	1.9-2.1
CO ₂ PRODUCIDO BASE SECA	2200-2500
ELIMINACIÓN CO ₂ (%)	85-90
CONSUMO DE DISOLVENTE (Kg/tn CO ₂ PROD.)	1.5



5.6.6 ANÁLISIS DE COSTES

Los costes de operación dependen fundamentalmente de dos factores: tamaño de la planta y contenido en CO₂ del gas de entrada. De los anteriores, el último es el más importante ya que la mayor parte del equipamiento de la planta de diseño depende de este factor. Para una capacidad, de planta dada, a mayor concentración de CO₂ a la entrada los costes de operación serán menores pero procesaremos una mayor cantidad de dióxido de carbono, el tamaño del equipo por lo tanto será mayor y los costes relativos al tamaño de los equipos serán superiores.

El coste de factores como: agua de refrigeración, consumo eléctrico, materiales, mano de obra (mantenimiento), dependen directamente del contenido de CO₂ a la entrada. En cuanto a factores como el vapor y el consumo de absorbente, dependen directamente de la cantidad de dióxido de carbono tratado. El más importante de ellos es el consumo de vapor, directamente relacionado con la utilización de MEA como absorbente. El disolvente que utiliza el proceso, puede contribuir en un 20% de ahorro en el consumo energético respecto a si utilizásemos únicamente monoetanolamina el sistema.

Un factor al que no hemos hecho referencia hasta ahora es el coste de del tratamiento del residuo resultante del recuperador. Con la legislación medioambiental actual, en grandes plantas de tratamiento este hecho puede tener un notable impacto en el coste del CO₂, de ahí la importancia de reducir las pérdidas de disolvente y su adecuado manejo.

En la Tabla 5.5 se muestran algunos de los requerimientos de los factores referidos en el desarrollo de este apartado.



Tabla 5.5. Requerimientos de plantas de tratamiento de CO₂.

UTILIDAD	DATO
VAPOR	
Consumo	3900-4200 KJ/Kg CO ₂
Presión	>310 KPa
AGUA DE REFRIGERACIÓN	6.75 m ³ /d tn CO ₂ (8% a la entrada)
CONSUMO DE AMINA	1.6 Kg/tn dependiendo O ₂ a la entrada)
CONSUMO DE ADITIVOS	20% coste de absorbente
CONSUMO DE CARBÓN ACTIVO	0.075 Kg/ tn CO ₂
ENERGÍA ELÉCTRICA	75 KWh/ tn CO ₂ (8% a la entrada)
AGUA	Depende del balance total del sistema, contando con la humedad de los gases de entrada.
RESIDUOS	Sólidos en el recuperador, productos de la degradación del disolvente, arrastres de carbón activo.







6. SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS EN ASPEN PLUS

6.1 CONSIDERACIONES GENERALES

Para la simulación y el diseño una planta con un programa de simulación, en nuestro caso, Aspen Plus, se llevan a cabo una serie de pasos:

- Creación del entorno de simulación.
- Selección del modelo de propiedades. Modelos termodinámicos.
- Introducción de datos.
- Diseño inicial del diagrama de flujo. Prediseño de equipos.
- Convergencia. Método, parámetros iniciales y corrientes de corte.
- Análisis de resultados y corrección de errores.
- Diseño final del diagrama de flujo.
- Análisis de costes.

El proceso de simulación comprende la convergencia del proceso global, estudio de optimización de la planta, modelado básico de equipos y diseño básico de los equipos de intercambio de calor empleando Aspen Hetrán.

Para comenzar con la simulación debemos considerar:

- Un diseño preliminar del diagrama de flujo. Se procede al diseño esencial del diagrama de flujo de la forma más completa posible.
- Selección de modelos sencillos de cálculo de propiedades termodinámicas y equipos. Esto nos permitirá obtener las primeras estimaciones de las corrientes, equipos que constituyen la planta y convergencia de la simulación para utilizarlas



como condiciones iniciales de modelos de equipos más rigurosos que nos permitan afinar el cálculo.

Nuestro proyecto consiste en simular una planta de absorción de dióxido de carbono con monoetanolamina. Para ello, empleamos la metodología citada anteriormente que iremos describiendo a continuación.

6.2 CREACIÓN DE UN ENTORNO DE SIMULACIÓN

Entendemos por entorno de simulación aquellas condiciones necesarias para desarrollar el proceso de simulación. Antes de comenzar el diseño del diagrama de flujo de una planta, se definen las condiciones iniciales de trabajo, que se mantendrán en el desarrollo del proyecto:

- Sistema de unidades.
- Diagrama de flujo.
- Propiedades.
- Condiciones generales de la simulación.

Accedemos al programa a través de la ventana de inicio, que se abre al pulsar el icono de acceso directo, en la que aparecen tres opciones:

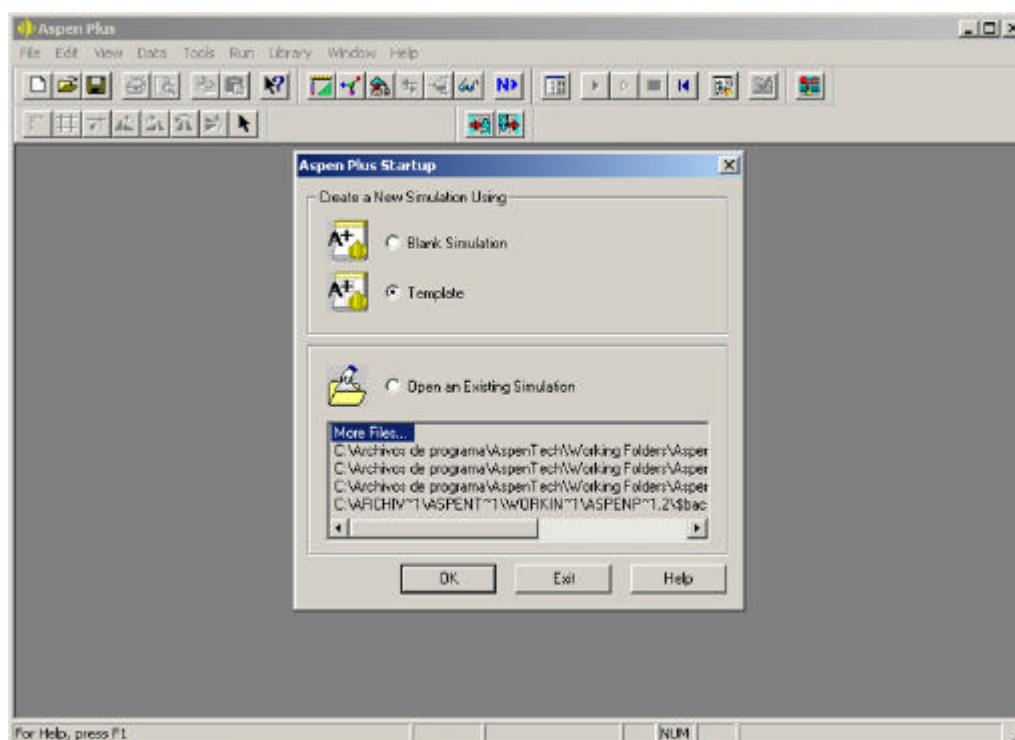
- Simulación en blanco (*Blank Simulation*).
- Plantilla (*Template*)
- Abrir una simulación existente (*Open an Existing Simulation*).

En nuestro caso seleccionamos la opción de trabajo con plantilla, para emplear las bases de datos de Aspen Plus y la creación de un entorno personalizado de trabajo, tal como se muestra en la Figura 6.1.

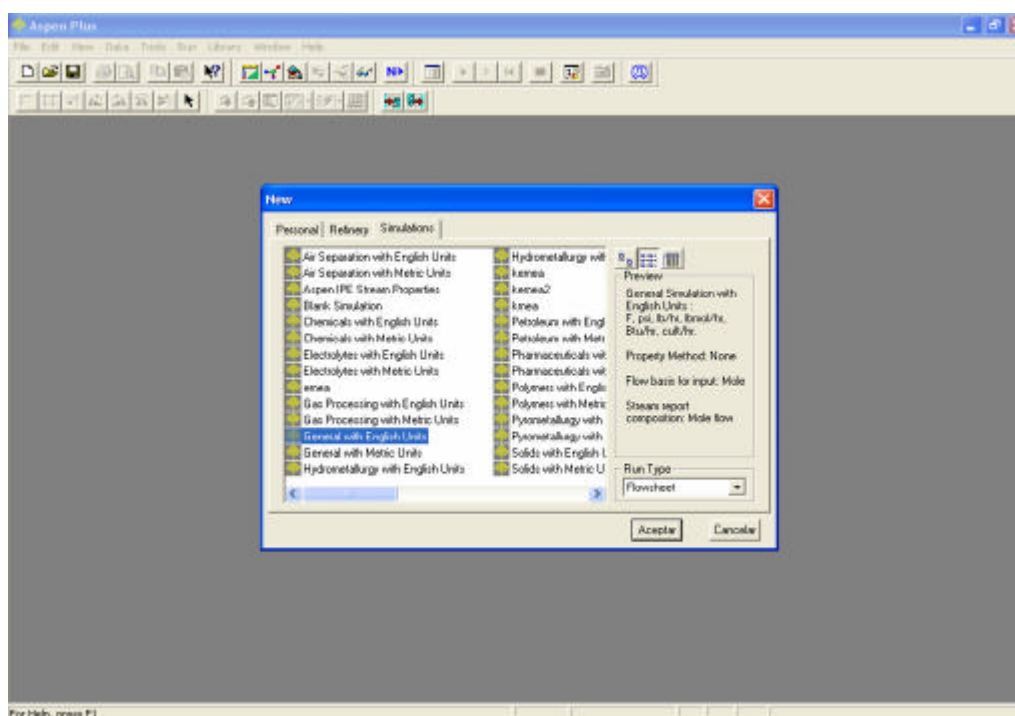
Seleccionamos a continuación el sistema de unidades de trabajo, en nuestro caso, trabajamos con distintas opciones, sistema general con unidades métricas (como se indica en la en la Figura 6.2), electrolitos con unidades métricas, y plantillas *emea* y



kemea, extraídas de las bases de datos de Aspen para trabajar con MEA. En esta ventana además, en la zona inferior derecha aparece un menú desplegable que nos muestra las distintas opciones de ejecución, seleccionamos diagrama de flujo. Tras estos pasos previos se abre la ventana de trabajo.



Figuras 6.1 y 6.2. Selección del modo de trabajo.



A continuación, pasamos a introducir los datos y especificaciones de nuestra simulación. Una vez dentro de la ventana de trabajo, podemos acceder al árbol de directorios pulsando el botón del navegador de datos  (**Data Browser**) situado en la barra de herramientas, desde el cual podemos movernos libremente y acceder a cualquier dato de la simulación, tanto los que introduce el usuario, como los resultados o especificaciones de la plantilla. Otra opción es utilizar el botón **Next**  que nos irá situando ordenadamente en el siguiente paso que debemos realizar.

La primera carpeta o archivo que debemos abrir es la que aparece en el directorio como **Setup**, accediendo a la pestaña **Setup/Specification/Global**, como mostramos en la Figura 6.3, en el cual se introduce:

- Nombre del proyecto.
- Sistema de unidades, METCBAR (sistema métrico con temperatura en °C y presión en bar)
- Resto de condiciones de partida que se mantienen durante el desarrollo del proyecto: diagrama de flujo, régimen permanente, presión ambiente, 14,69595 psi.

La siguiente especificación es introducir datos acerca del usuario, nombre del proyecto y su identificación. Nos movemos a la pestaña **Setup/Specifications/Accounting**, e introducimos los datos necesarios. Esta especificación es muy importante puesto que dará error al intentar comenzar la simulación si no hemos completado la información.

A continuación, se establece el nivel de diagnóstico que se desea visualizar en el panel de control de ejecución. Este es el panel que nos muestra el desarrollo de la simulación al tiempo que se realiza, tanto equipo a equipo como iteración a iteración, presentándonos el estado de convergencia con sus correspondientes errores y advertencias.

Se accede al nivel de diagnóstico entrando por el camino **Setup/Specifications/Diagnostics**. Elegimos el nivel 4, que es el que está especificado por defecto en el programa y proporciona suficiente información sobre los errores producidos en la simulación y no ralentiza demasiado el proceso. Para más información basta con acudir a **View/Report**.



Otras opciones que se deseen obtener en la presentación de resultados y que no aparecen por defecto, pueden elegirse en **Setup/Report Options/Stream**. En la figura 6.4, se muestra la elección de la fracción molar de los compuestos en cada corriente, tanto la fracción másica como molar, datos que nos serán de gran utilidad para ir comprobando si se cumplen las especificaciones de diseño requeridas en equipos y corrientes.

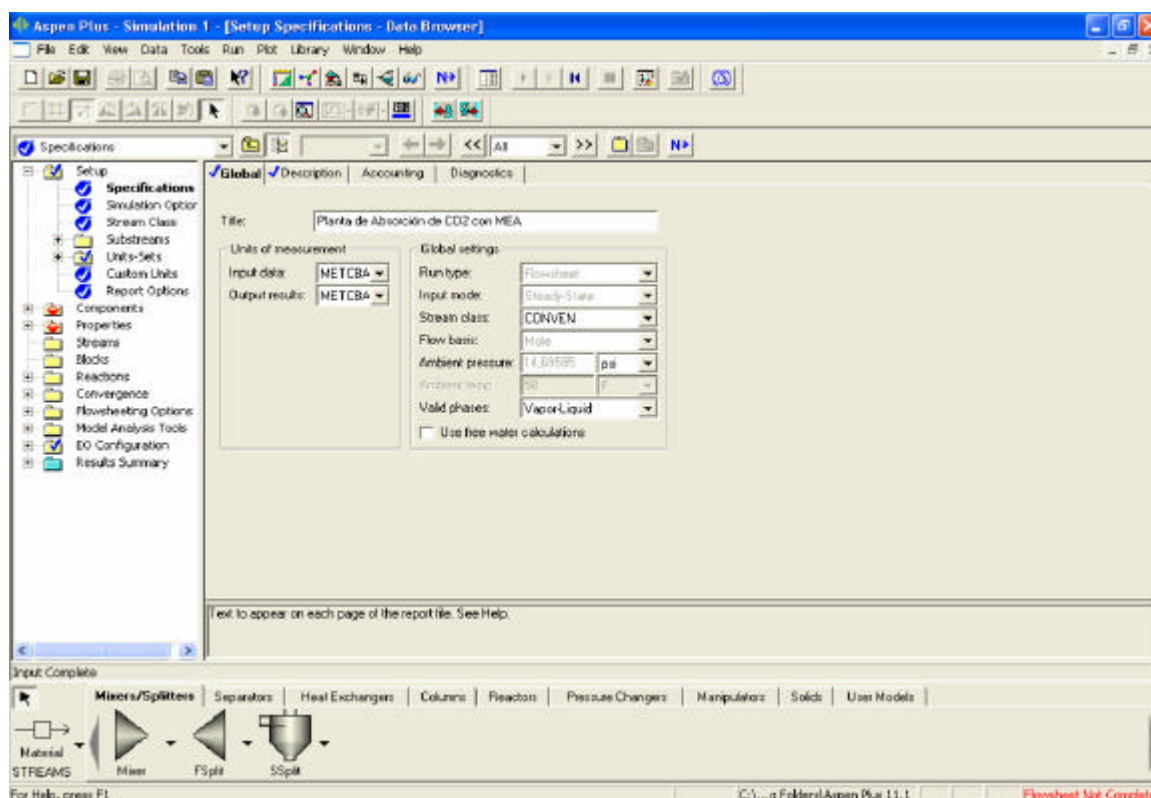


Figura 6.3. Introducción de datos en el archivo Setup.



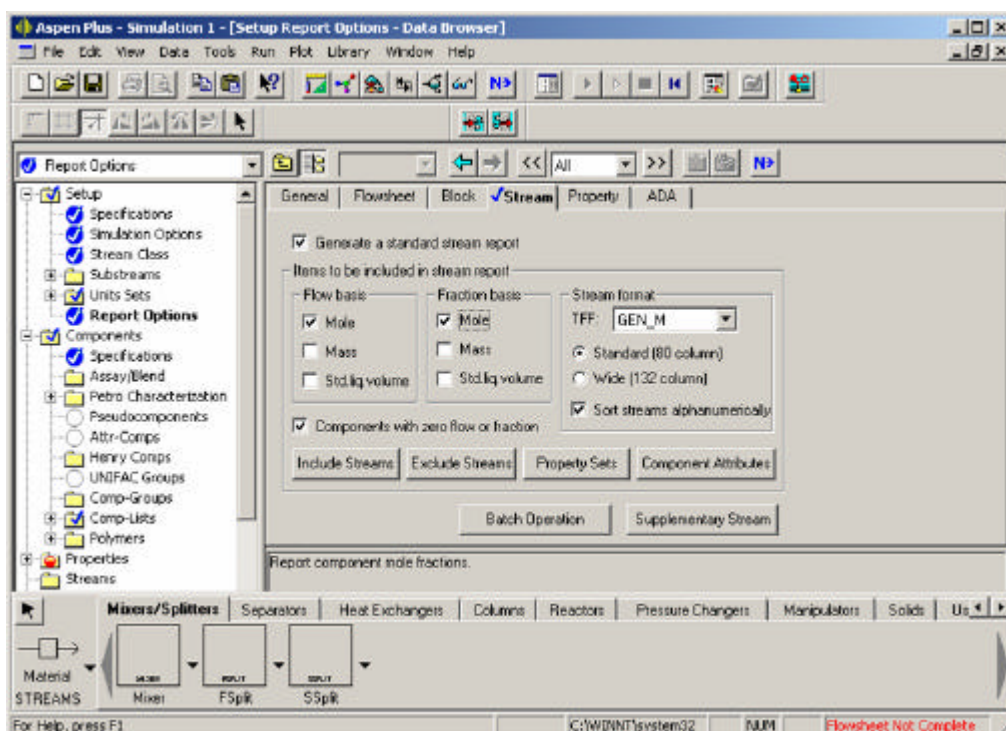


Figura 6.4. Especificaciones de salida de las corrientes del proceso.

6.3 ELECCIÓN DEL MODELO DE PROPIEDADES

La elección del método de cálculo de propiedades es muy importante para el correcto funcionamiento de la simulación así como para la obtención de resultados fiables y lo más próximos a la realidad que sea posible.

En este proyecto hemos empleado distintos modelos. En un principio, para la simulación de aminas, Aspen proporciona una serie de plantillas que contienen las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas experimentales de este tipo de sustancias. En las bases de datos encontramos las plantillas correspondientes a los distintos modelos de trabajo. Para el caso de la MEA disponemos de:

- Plantilla *emea*, que contiene datos experimentales del modelo *Equilibrium MEA*, es decir trabajamos con datos de equilibrio de las reacciones involucradas en el proceso de absorción y que indicamos en el capítulo anterior.
- Plantilla *kmea*, que contiene datos experimentales del modelo *Kinetic MEA*, es decir trabajamos con modelos cinéticos de las reacciones involucradas en el proceso.



- Plantilla *kemea*, que combina los modelos anteriores (*Kinetic and Equilibrium MEA*), de manera que aporta datos tanto de equilibrio como cinéticos, lo que permite trabajar de forma paralela. Este modelo es de gran utilidad si se dispone de datos rigurosos de parámetros como tiempos de residencia, holdups o conversiones, ya que el proceso no suele comportarse de manera ideal, por lo que alguna de las reacciones no alcanza el equilibrio o bien es el paso controlante y es preferible modelar su comportamiento con datos cinéticos.
- Plantilla *Electrolytes*, que trabaja con un modelo de especies (electrolitos) en disolución.

Para los casos anteriores el programa trabaja con una serie de componentes que rigen su comportamiento por la Ley de Henry, en nuestro caso el CO₂, y como modelo de propiedades en el proceso de simulación, se acude a uno más riguroso. En el caso de las aminas, se trata del modelo de propiedades ELECNRTL.

Para introducir un modelo se selecciona **Properties/Specifications/Global** y en esta pantalla, en el menú desplegable, seleccionamos el método termodinámico. En el caso de las plantillas, el modelo viene seleccionado por defecto.

6.3.1 MODELO ELECNRTL

El modelo "*electrolyte nonrandom-two liquid*" (ELECNRTL) propuesto por Austgen D. y colaboradores (referencia bibliográfica [22]), trata termodinámicamente el equilibrio líquido-vapor (VLE) de los sistemas constituidos por soluciones acuosas de monoetanolaminas y CO₂, con consideraciones de equilibrio rigurosas. Se trata por tanto de representar de manera fiable el comportamiento real de este tipo de sistemas ya que los procesos de simulación a través de programas informáticos constituyen una manera efectiva de optimizar el diseño y la operación de este tipo de plantas.

Las características principales de este modelo es que proporciona un modelo de propiedades termodinámicas capaz de representar de manera exacta el equilibrio líquido-vapor de los sistemas MEA-CO₂, teniendo en cuenta la influencia de las constantes de



equilibrio químico, de las constantes de Henry, los datos experimentales y de los datos de ajuste (regresión) en la representación de los sistemas vapor-líquido.

El modelo se basa en tres contribuciones importantes a la energía libre de Gibbs:

(1) La contribución debida a las fuerzas electrostáticas entre iones en la energía libre de Gibbs, considerando fracción molar unidad para el disolvente y cero para iones, representada por la expresión de Pitzer-Debye-Hückel, que tiene en cuenta:

$$\frac{g^{\text{ex*},\text{PDH}}}{RT} = -\left(\sum_k x_k\right) \left(\frac{1000}{M_s}\right)^{1/2} \left(\frac{4A_\Phi I_x}{\rho}\right) \ln(1 + \rho I_x^{1/2}) \quad (\text{Ecuación 6.1})$$

6.1)

donde:

$$A_\Phi = \left(\frac{1}{3}\right) \left(\frac{2\pi N_0 d}{1000}\right)^{1/2} \left(\frac{e^2}{DkT}\right)^{2/3}$$

$$I_x = \frac{1}{2} \sum_i Z_i^2 x_i \quad (\text{Ecuación 6.2})$$

(2) La contribución de la transferencia del estado de referencia para los iones. En muchos modelos el estado de referencia para las especies iónicas es siempre el de disociación completa en agua, incluso en presencia de disolventes en la solución. La expresión de Born que mostraremos a continuación, tiene en cuenta el cambio de energía libre de Gibbs asociada al movimiento de especies iónicas desde el estado de referencia al estado de disociación completa en una mezcla de agua y disolvente:

$$\frac{g^{\text{ex*},\text{Born}}}{RT} = \frac{e^2}{2kT} \left(\frac{1}{D} - \frac{1}{D_w}\right)^{1/2} \left(\sum_i \frac{x_i Z_i^2}{r_i}\right) \times 10^{-2} \quad (\text{Ecuación 6.3})$$

6.3)

(3) La contribución de la "composición local del electrolito", que tiene en cuenta las fuerzas de interacción de corto alcance entre las especies iónicas, es decir las fuerzas de



repulsión y la neutralidad de cargas resultante de la combinación de estos. Esta contribución a la energía de Gibbs viene definida de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{g^{\text{ex,lc}}}{RT} = & \sum_m X_m \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} + \\ & \sum_c X_c \sum_{a'} \left(\frac{X_{a'}}{\sum_{a''} X_{a''}} \right) \frac{\sum_j X_j G_{jc,a'c} \tau_{jc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} + \\ & \sum_a X_a \sum_{c'} \left(\frac{X_{c'}}{\sum_{c''} X_{c''}} \right) \frac{\sum_j X_j G_{ja,c'a} \tau_{ja,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \end{aligned} \quad (\text{Ecuación 6.4})$$

Donde:

$$\begin{aligned} G_{jm} &= \exp(-\alpha_{jm} \tau_{jm}) \\ G_{jc,ac} &= \exp(-\alpha_{jc,ac} \tau_{jc,ac}) \\ G_{ja,ca} &= \exp(-\alpha_{ja,ca} \tau_{ja,ca}) \\ G_{cm} &= \frac{\sum_a X_a G_{ca,m}}{\sum_{a'} X_{a'}} \\ G_{am} &= \frac{\sum_c X_c G_{ca,m}}{\sum_{c'} X_{c'}} \\ \alpha_{cm} &= \frac{\sum_a X_a \alpha_{ca,m}}{\sum_{a'} X_{a'}} \\ \alpha_{am} &= \frac{\sum_c X_c \alpha_{ca,m}}{\sum_{c'} X_{c'}} \\ \tau_{mc,ac} &= \tau_{cm} - \tau_{ca,m} + \tau_{m,ca} \\ \tau_{ma,ca} &= \tau_{am} - \tau_{ca,m} + \tau_{m,ca} \end{aligned}$$



Antes de continuar, daremos un repaso a la nomenclatura general empleada en este modelo:

A, B = constants in eq 11
 C = temperature coefficient
 D = dielectric constant
 F = objective function
 H = Henry's constant
 K = equilibrium constant
 M = molarity
 M_s = solvent molecular weight
 N_0 = Avogadro's number
 P = pressure
 P_m^0 = saturation pressure of the solvent mixture

P_s^0 = saturation pressure of solvent s
 R = gas constant
 T = temperature, K
 X = effective mole fraction
 Z = absolute value of the ionic charge
 Z^{cal} = calculated value in eq 12
 Z^{exp} = experimental value in eq 12
 Z^{pred} = predicted value in simulation
 Z^{plant} = plant data
 e = electron charge
 d = solvent density
 g = Gibbs energy
 k = Boltzmann constant
 n_t = total mole number for all species in the system
 n_i = mole number of species i
 r = Born radius
 v = molar volume
 $\bar{v}$ = partial molar volume
 w_s = weight fraction
 x = true liquid-phase mole fraction based on all species: molecular and ionic
 y = vapor-phase mole fraction

Greek Letters

α = NRTL nonrandomness factor
 γ = activity coefficient
 ρ = closest approach parameter of the Pitzer–Debye–Hückel equation
 σ = measured standard deviation in eq 12 or root-mean-squares relative deviation in Table 4



τ = NRTL interaction parameter
 ϕ^0 = pure solvent vapor-phase fugacity coefficient at saturation pressure
 ϕ^v = vapor-phase fugacity coefficient

Superscripts

* = unsymmetrical convention
 ∞ = infinite dilution
Born = Born contribution
ex = excess property
H = Henry's constant
k = equilibrium constant
lc = local-composition NRTL equation
 n_D = number of data points
 n_V = number of measured variables
0 = saturation
PDH = Pitzer–Debye–Hückel equation
w = water

Subscripts

a, a', a'' = anion
c, c', c'' = cation
i, j, k = any species
i-m = solute i in solvent mixture
i-s = solute i in solvent s
l = lth data point
I = Ith measured variable
m, m' = molecular species
P = pressure
s = solvent
w = water
x = true mole fraction

De esta forma, el exceso de energía libre es la suma de las tres contribuciones:

$$g^{\text{ex}*} = g^{\text{ex},\text{PDH}} + g^{\text{ex},\text{Born}} + g^{\text{ex},\text{lc}} \quad (\text{Ecuación 6.5})$$

Por lo tanto, el coeficiente de actividad de cada especie i , iónica, molecular, disolvente o soluto se obtiene de la derivación parcial de la expresión anterior (exceso de energía libre), respecto al número de moles de especie j . La expresión de este coeficiente se muestra a continuación, siendo n el número total de moles del sistema.

$$\ln \gamma_i = \frac{1}{RT} \left[\frac{\partial (n g^{\text{ex}*})}{\partial n_i} \right]_{T,P,n_{j \neq i}} \quad (\text{Ecuación 6.6})$$



Cuando se emplea el modelo ELECNRTL para simular los sistemas de absorción/desorción MEA-CO₂, los resultados para el caso del absorbedor suelen ser satisfactorios, pero no para la columna de desorción, especialmente los datos referentes al excesivo consumo de energía del reboiler. En las condiciones del stripper, el equilibrio líquido vapor para las especies disueltas del sistema MEA-CO₂-H₂O viene dado por la expresión:

$$y_s \phi_s^v P = x_s \gamma_s \phi_s^0 P_s^0 \exp\left(\frac{v_s(P - P_s^0)}{RT}\right) \quad (\text{Ecuación 6.7})$$

Mientras que el equilibrio líquido-vapor para los componentes supercríticos, viene dado por:

$$y_i \phi_i^v P = x_i \gamma_i \left(\frac{H_i^m}{\gamma_i^\infty}\right) \exp\left(\frac{\bar{v}_{i-m}^\infty(P - P_m^0)}{RT}\right) \quad (\text{Ecuación 6.8})$$

$$\ln\left(\frac{H_i^m}{\gamma_i^\infty}\right) = \sum_s w_s \ln\left(\frac{H_{i-s}}{\gamma_{i-s}^\infty}\right)$$

Donde las expresiones marcadas con "s" hacen referencia a las variables en disolución completa, la expresión *i-s* se refiere al soluto *i* en el disolvente *s*, o en la mezcla *m*.

Teniendo en cuenta lo comentado anteriormente, además de las expresiones previas, para mejorar los resultados en el stripper, se consideran además:

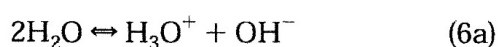
- Las constantes de equilibrio en la fase líquida de las reacciones que tienen lugar entre el componente a eliminar y el disolvente.
- La constante de Henry del CO₂ en la mezcla de disolventes MEA- H₂O.
- Evaluación de los datos experimentales.
- Constantes de equilibrio y parámetros de interacción de especies de los ajustes por regresión.



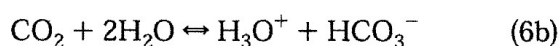
Las constantes de equilibrio en la fase líquida de las reacciones que tienen lugar entre el componente y el soluto. En este caso se tienen en cuenta la dependencia con la temperatura de las constantes de equilibrio de las reacciones que tienen lugar en el sistema, que mostramos a continuación junto con las constantes de cada reacción:

Reacciones:

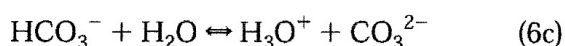
Ionization of water



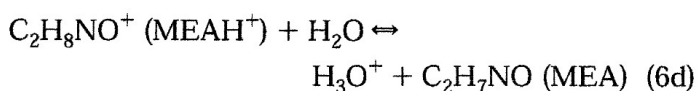
Hydrolysis and ionization of dissolved CO₂



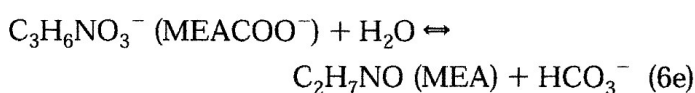
Dissociation of bicarbonate



Dissociation of MEAH⁺ (protonated MEA)



MEACOO⁻ (carbamate) reversion to bicarbonate



Constantes:

$$\ln K = C_1^k + C_2^k/T + C_3^k \ln T + C_4^k T$$

reaction	C_1^k	C_2^k	C_3^k	C_4^k	ref
6a	132.899	-13445.9	-22.4773	0.0	^a
6b	231.465	-12092.1	-36.7816	0.0	^a
6c	216.049	-12431.7	-35.4819	0.0	^a
6d	0.79960	-8094.81	0.0	-0.007484	^b
6e	1.282562	-3456.179	0.0	0.0	^c

^a Austgen et al.¹ ^b Austgen et al.,¹ with MEA infinitely dilute activity coefficient correction. ^c Fitted on the VLE data.

Tabla 6.1.



La constante de Henry del CO₂ en la mezcla de disolventes MEA- H₂O. Dicha constante tiene una influencia directa en el equilibrio líquido vapor del sistema, de ahí que haya que considerarla en los modelos termodinámicos de propiedades. Como consecuencia de las reacciones químicas, la constante de Henry del dióxido de carbono en la mezcla de disolventes no es la misma que en agua y si no se considera esta situación se introducen errores importantes en el sistema. Estos errores se incrementan conforme aumenta la carga de gas ácido, o bien aumenta la concentración de MEA. Además, en el stripper, la presión parcial de vapor de agua es considerable, lo que también afecta a los cálculos.

En la siguiente tabla se muestra la dependencia de la constante de Henry del CO₂ con la temperatura (Tabla 6.2).

$$\ln H_{j-s} = C_1^H + C_2^H/T + C_3^H \ln T + C_4^H T$$

	C_1^H	C_2^H	C_3^H	C_4^H	ref
CO ₂ -H ₂ O	170.7126	-8477.711	-21.95743	0.005 780 748	<i>a</i>
CO ₂ -MEA	89.452	-2934.6	-11.592	0.016 44	<i>b</i>

^a Austgen et al.¹ ^b Equation 10 using data from Austgen et al.,¹ Wilhelm et al.,¹⁷ and Wang et al.¹⁶

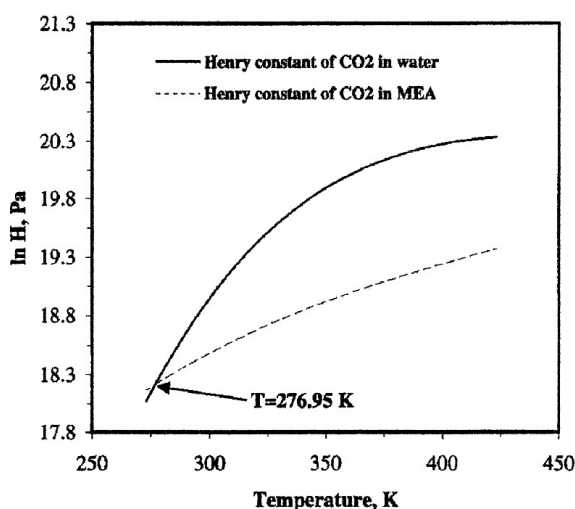


Tabla 6.2.

Evaluación de los datos experimentales. Debido a que el sistema MEA-CO₂-H₂O a sido ampliamente empleado comercialmente durante muchos años, se dispone de una gran



cantidad de datos experimentales del equilibrio líquido-vapor y de datos de operación. Se ha comprobado que existen ciertas diferencias, dependiendo de la bibliografía, entre los valores predichos teóricamente y los experimentales, referidos por ejemplo a la carga de CO₂ (mol CO₂/mol de MEA) dependiendo de la presión parcial. Estas diferencias pueden dar lugar a errores que se incrementan con la temperatura. Podemos ver este efecto claramente en la Figura 6.5.

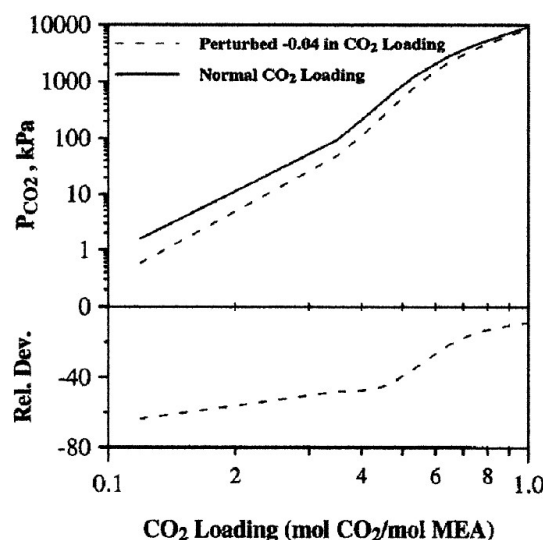


Figura 6.5

Constantes de equilibrio y parámetros de interacción de especies de los ajustes por regresión. Algunos datos que maneja el modelo, como la constante de equilibrio de la reacción de disociación del carbamato en la columna de desorción, o bien algunos de los parámetros de interacción entre electrolitos, son obtenidos ajustando los datos experimentales disponibles mediante regresión. En este modelo se consideran únicamente los parámetros de interacción de mayor relevancia de las especies iónicas más importantes, asignando el valor de cero a las demás. En la Tabla 6.3 se muestran algunos de estos parámetros y sus valores asignados.



a. MEA-CO ₂ -H ₂ O System			
molecule-molecule parameter	$A_{mm'}$	$B_{mm'}$	ref
MEA-H ₂ O	-1.609 693	-265.1962	<i>b</i>
H ₂ O-MEA	1.648 945	125.0832	<i>b</i>
molecule-ion pair (ion pair-molecule) parameter	$\tau_{m,ca}(\tau_{ca,m})$		
H ₂ O-(MEA ⁺ , HCO ₃ ⁻)	0.129 079 6		<i>c</i>
(MEA ⁺ , HCO ₃ ⁻)-H ₂ O	-0.424 708 7		<i>c</i>
H ₂ O-(MEA ⁺ , MEACOO ⁻)	4.352 250		<i>c</i>
(MEA ⁺ , MEACOO ⁻)-H ₂ O	-3.340 842		<i>c</i>
b. CO ₂ -H ₂ O System ^d			
molecule-molecule parameter	$A_{mm'}$	$B_{mm'}$	$\alpha_{mm'}$
CO ₂ -H ₂ O	10.064	-3268.135	0.20
H ₂ O-CO ₂	10.064	-3268.135	0.20
molecule-ion pair (ion pair-molecule) parameter	$\tau_{m,ca}(\tau_{ca,m})$	$\alpha_{m,ca}(\alpha_{ca,m})$	
H ₂ O-(H ₃ O ⁺ , HCO ₃ ⁻)	8.0	0.2	
(H ₃ O ⁺ , HCO ₃ ⁻)-H ₂ O	-4.0	0.2	
H ₂ O-(H ₃ O ⁺ , OH ⁻)	8.0	0.2	
(H ₃ O ⁺ , OH ⁻)-H ₂ O	-4.0	0.2	
H ₂ O-(H ₃ O ⁺ , CO ₃ ²⁻)	8.0	0.2	
(H ₃ O ⁺ , CO ₃ ²⁻)-H ₂ O	-4.0	0.2	
CO ₂ -(H ₃ O ⁺ , HCO ₃ ⁻)	15.0	0.1	
(H ₃ O ⁺ , HCO ₃ ⁻)-CO ₂	-8.0	0.1	
CO ₂ -(H ₃ O ⁺ , OH ⁻)	15.0	0.1	
(H ₃ O ⁺ , OH ⁻)-CO ₂	-8.0	0.1	
CO ₂ -(H ₃ O ⁺ , CO ₃ ²⁻)	15.0	0.1	
(H ₃ O ⁺ , CO ₃ ²⁻)-CO ₂	-8.0	0.1	

Tabla 6.3.



6.4 INTRODUCCIÓN DE DATOS Y COMPONENTES

El siguiente paso es la introducción de las distintas especies con las que vamos a trabajar en el proceso. Los compuestos principales son el dióxido de carbono, la monoetanolamina monóxido de carbono, hidrógeno, metano y agua. Además de estas especies principales, tenemos que considerar las especies en disolución.

Se accede a la ventana de introducción de especies pulsando el botón **Next** o directamente abriendo el archivo **Components/Specifications** del directorio principal.

Para seleccionar los compuestos, una vez dentro de la dirección descrita, pulsamos la pestaña **Selection** y dentro de la ventana que aparece, pulsamos el botón **Find** que nos muestra la ventana de búsqueda de compuestos. Se puede introducir tanto la fórmula del compuesto como el nombre o las primeras letras de este. Aparecerá en la parte inferior de la pantalla una lista con el compuesto y sus derivados.

En la tercera columna de la lista aparece el nombre de la base de datos de la cual extraemos el compuesto, en nuestro caso PURE10. En caso de que no encontráramos el compuesto, lo más probable sería que su base de datos no estuviera seleccionada. Para seleccionarla pulsamos el botón **Databank** de esta misma ventana, se nos mostrarán todas las bases de datos, pudiendo elegir la deseada.

Además de introducir las especies principales citadas anteriormente, empleamos la opción **Electrolyte Wizard** que nos permite considerar las reacciones que tienen lugar en la fase acuosa para introducir las especies que se generan en disolución. La Figura 6.6 ilustra el procedimiento.



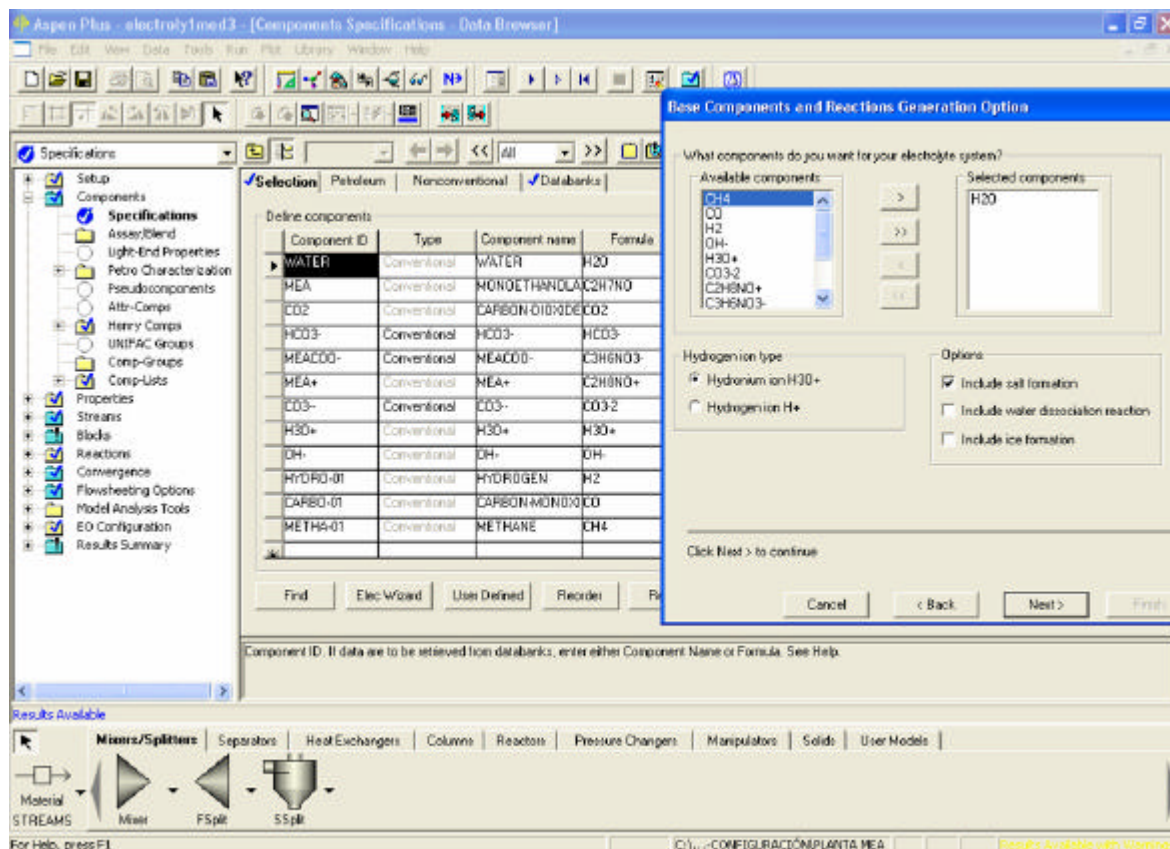


Figura 6.6. Introducción de especies.

6.5 DIAGRAMA DE FLUJO PRELIMINAR

El diseño preliminar tiene el objeto de trabajar con el diagrama de flujo básico, es decir, que contenga sólo la información esencial para la simulación. Para esto se utilizan modelos sencillos de equipos, a los que se les van introduciendo mejoras hasta el diseño final.

El esquema de trabajo general que se ha seguido en el proceso de simulación consiste en plantear la configuración básica de los equipos en cuanto a especificaciones y modelos, proceder a la simulación preliminar, chequear los resultados y examinar la convergencia. Tenemos que tener en cuenta que pueden obtenerse resultados factibles sin que se haya llegado a una convergencia final, por lo que tendremos que ajustar los parámetros y examinar los posibles errores producidos. Posteriormente, una vez que la convergencia se haya logrado con éxito, se desarrolla el diseño de las dimensiones del equipo. De la



convergencia, sus modelos y parámetros hablaremos más adelante en apartados posteriores.

En cuanto a los equipos principales, se utiliza un modelo de columna *RadFrac* tanto para el absorbedor como para la columna de desorción. Con este modelo se introducen las reacciones más importantes que tienen lugar en el proceso de absorción química y stripping, además de considerar una convergencia general del modelo, que viene por defecto en el programa. Tras la simulación se examinan los resultados con objeto de conocer los flujos de cada componente.

Se pretende en ambos casos obtener la configuración óptima de la torre, minimizando el número de platos necesarios y el coste.

En un principio, para el intercambiador entre las corrientes de salida de las torres, empleamos un modelo simplificado (*shortcut*) de la opción *HeatX*. Esta opción realiza un simple balance de masa y energía para calcular el calor intercambiado con el que obtener los valores de temperatura de las distintas corrientes de entrada y salida de este equipo. Se utiliza el método de la DTLM. La circulación de los fluidos se realiza en contracorriente pura por lo que la DTLM no hace falta que se corrija.

El diseño completo del intercambiador, se realiza primero individualmente y después de obtener la convergencia con éxito, se integra en el sistema utilizando un modelo más riguroso con el programa Aspen Hetrán.

Para el resto de los equipos empleamos modelos sencillos que describiremos posteriormente en cada caso.

Como comentamos anteriormente, el diseño preliminar de la planta se realizó tratando cada equipo por separado, estudiando sus resultados y convergencia, e integrándolo con el resto de equipos, hasta obtener un diseño final de la planta. Para ejecutar la simulación se pulsa el botón , o también se pulsa el botón Next , siendo la ejecución el siguiente paso. En este último paso es más recomendable la segunda opción, ya que si se nos ha olvidado completar un paso este nos muestra directamente lo que queda por completar.

Para el diseño del diagrama de flujo preliminar procedemos según los siguientes pasos:



1. Introducir los equipos a los cuales van conectadas las corrientes del sistema.

Para introducir cada equipo basta con dirigirse a la barra de equipos que aparece en la zona inferior de la ventana, seleccionar el equipo deseado, y arrastrarlo hasta la posición que le corresponda en el esquema de la planta.

2. Conectar las corrientes de alimentación y de producto en cada equipo.



Para conectarle corrientes a un equipo pulsamos el icono  , que está en la zona inferior izquierda de la pantalla y se selecciona **Material streams**. Observamos aparecen flechas de color rojo y azul que entran y salen de los equipos. Las de color rojo son las de flujo y es necesario introducirlas obligatoriamente para que el diagrama quede perfectamente conectado, mientras que las azules son opcionales y contemplan las distintas posibilidades que ofrece el equipo (más de una corriente de entrada o salida, corrientes de refrigeración de los equipos, condensaciones, etc.).

3. Conectar los equipos mediante las distintas corrientes de entrada y salida.

La unión se realiza pinchando en la corriente de salida (corriente de color rojo) de un equipo y arrastrándola hasta la de entrada (corriente de color rojo) del siguiente. De igual forma se procede con las corrientes de salida.

En relación a esta forma de proceder tenemos que decir que cualquier operación necesita que su equipo correspondiente esté conectado a una corriente de entrada, es decir, para proceder a la simulación el diagrama de flujo debe estar correctamente conectado.

4. Es conveniente asignar un nombre a cada equipo y corriente.

Es también de interés saber, que si por algún motivo necesitamos modificar las corrientes o el nombre del equipo, podemos realizarlo marcándolo a través del menú del botón derecho. Después introducimos el nuevo equipo y reconectamos las corrientes que quedaron sueltas. Para esto pulsamos el botón derecho sobre la corriente a reconectar y elegimos reconectar fuente o destino según sea el caso.



Una vez configurado el diagrama de flujo preliminar y asignados los nombres a los equipos y corrientes, pasamos a introducir los datos correspondientes a cada flujo. Debemos dejar constancia de que la simulación se realizó diseñando los equipos por separado y luego incorporándolo a la planta, ajustando los parámetros necesarios para la convergencia global.

6.6 DISEÑO DE EQUIPOS PRINCIPALES. MODELOS ASPEN

Para la configuración de cada equipo, la introducción de datos de corrientes o especificaciones, podemos acceder a cada equipo en la página inicial de configuración a través del navegador de datos que nos da acceso al directorio principal, o utilizando la opción *Next* antes descrita, directamente haciendo doble clic sobre el equipo, a bien a través del menú del botón derecho al pulsar sobre el equipo seleccionado.

En cada pantalla de configuración de equipos que aparecen en el proyecto, quedará identificado el equipo que se esté utilizando en cada momento a través del icono del equipo seleccionado y de la pestaña que aparece en negrita.

En principio se introducen las especificaciones de los equipos, y en el apartado dedicado a la convergencia trataremos los parámetros de convergencia de cada equipo y del sistema. Estas especificaciones son básicas, temperatura y presión de trabajo de las unidades y configuración de las corrientes de entrada y salida.

Trataremos a continuación los modelos empleados en el prediseño de los equipos principales: absorbedor, columna de stripping e intercambiador.

6.6.1 MÉTODOS DE DISEÑO

El diseño de las plantas de aminas se centra fundamentalmente en el diseño del absorbedor, que es donde tiene lugar el proceso de absorción en sí, y de la torre de desorción que es la que proporciona al anterior, el disolvente regenerado. Una vez



seleccionado el tipo de contacto y caudal a tratar, debemos calcular la altura y el diámetro de los contactos y los requerimientos energéticos de la operación.

Para realizar estos cálculos, se emplean distintas aproximaciones de diseño, que se emplean para predecir el caudal necesario de disolvente y establecer los parámetros de diseño básicos. Estos métodos se clasifican en los siguientes:

1. *Método de diseño aproximado.* Este método es apropiado y produce buenos resultados cuando tenemos que diseñar aplicaciones similares a sistemas ya existentes y de los cuales tenemos datos fiables. El proceso consiste en recopilar los datos experimentales y de operación de plantas ya existentes y asumirlos comparativamente adaptándolos a nuestras condiciones. En el caso de las sistemas MEA-CO₂, estos datos suelen ser los relativos a las cargas de gas ácido y la concentración de la solución, que nos permiten estimar el caudal de disolvente necesario. Otro de los datos que se suelen estimar de esta forma, es el número inicial de platos de las columnas.
2. *Método de Aproximación al Equilibrio.* Este método se emplea fundamentalmente para absorción no selectiva. Se basa en considerar que la máxima carga teórica de la solución rica se calcula asumiendo equilibrio entre esta solución y el gas de entrada bajo las condiciones de operación del fondo de la columna. Como se tiene en cuenta que la condición de equilibrio no se alcanza en la mayoría de los casos, se asume una aproximación de entre el 75 -80%. Esta aproximación se puede asumir como carga de gas ácido en la solución rica como el 75-80% de la carga en equilibrio de esta solución con el gas ácido, o bien como una presión parcial de gas ácido en la solución rica de entre 75-80% de la presión parcial de este en la alimentación. Este método suele emplearse en combinación con el anterior.
3. *Método de Eficiencia de Plato Basado en el Equilibrio.* Este método se emplea generalmente en el diseño de columnas de desorción para sistemas no reactivos. En el se consideran platos teóricos, de manera que el líquido y el gas alcanzan el equilibrio. El diseño de este plato teórico se corrige considerando una eficiencia de plato. En los sistemas no reactivos, esta eficiencia se estima considerando las propiedades del gas y el líquido. Para el caso de los sistemas reactivos, en los que



las reacciones tienen lugar en la fase líquida, deben considerarse además las relaciones de equilibrio químico y su influencia en el ratio de absorción.

4. *Método Rate-Based Approach.* Este método se basa en analizar los fenómenos de transferencia de masa y energía que tienen lugar, considerando platos reales (no teóricos). Dicho método considera cada plato o contacto por separado, y se basa en el cálculo por separado de balances de materia y energía para cada fase, que se resuelven simultáneamente junto con las ecuaciones de velocidad de transferencia de materia y energía en cada sección. Debido a su complejidad, ya que tiene que tener en cuenta la influencia de las reacciones químicas en las velocidades de transferencia de materia en el caso de los sistemas reactivos, generalmente suele emplearse en programas de cálculo únicamente. Es apropiado tanto para el cálculo de columnas de absorción como de stripping.

6.6.2 MODELO RADFRAC

El modelo RadFrac es un modelo para la simulación rigurosa de cualquier tipo de fraccionamiento líquido-vapor multietapa, y entre ellas, operaciones de absorción y stripping en sistemas reactivos. La configuración de las distintas corrientes y parámetros del modelo se muestra a continuación (Figura 6.7).

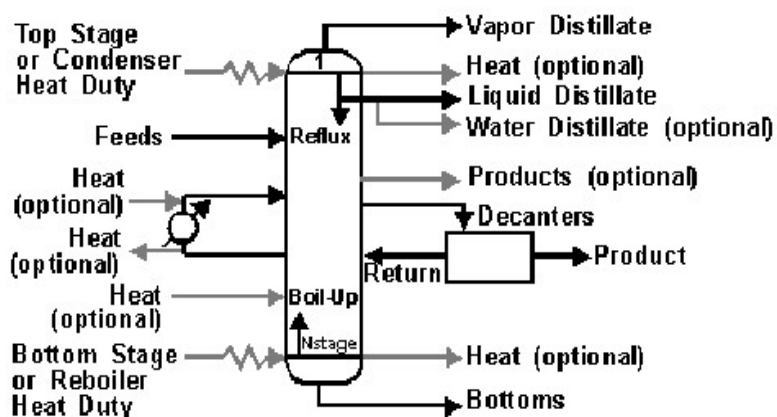


Figura 6.7. Especificaciones de las corrientes en el modelo RadFrac.



En el caso de la absorción con reacción química, el modelo considera que pueden producirse tanto en la fase líquida como en la gaseosa. Los detalles de las reacciones que vayan a tener lugar pueden introducirse genéricamente en un fichero **Reactions/Global/Chemistry ID**, o bien podemos introducir las reacciones empleando las opciones **Reac-Dist** o **User** dentro del propio bloque. Además considera los siguientes tipos de reacciones:

- Controladas por equilibrio.
- Rate-based.
- Electrolitos.
- Conversión.

En nuestro caso, debido a las características de las reacciones que tienen lugar consideramos la opción de emplear electrolitos como aproximación. Para ello necesitamos datos de las reacciones que tienen lugar y las secciones de la columna donde se producen.

Este modelo genérico trabaja con la opción de plato o etapa teórica, considerando eficiencias que podemos suministrar ya sea de vaporización o de eficiencia de Murphree. Este modelo nos da la opción de calcular tanto el número de platos necesario como su diámetro y configuración. Son posibles dos criterios a la hora de introducir las corrientes en las columnas:

- *Above-stage*, en el que la disposición de los flujos es la mostrada a continuación (Figura 6.8). Puede ocurrir que de errores cuando se elige esta configuración de flujo en el primer y último plato de la torre.

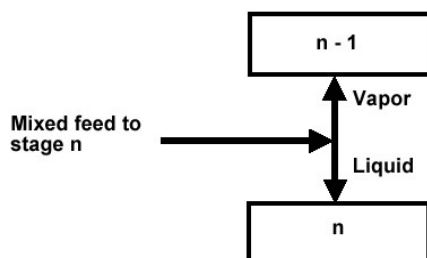


Figura 6.8



- *On-stage*, en el que la disposición de los flujos en la mostrada a continuación (Figura 6.9).

■

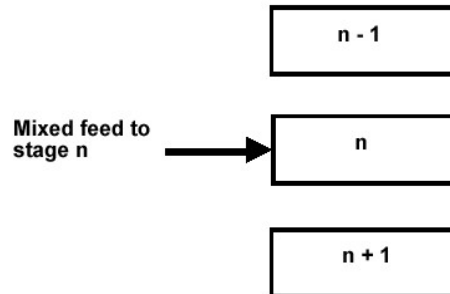


Figura 6.9

En general este modelo es apropiado para el diseño de absorbedores y strippers pero puede dar lugar a problemas si se dan las siguientes situaciones:

- Elección incorrecta de las especificaciones de diseño.
- Elección o ajuste incorrecto del algoritmo de convergencia.
- Elección del modelo de propiedades termodinámico inapropiado.
- Utilización de bajos valores de flujo másicos y energéticos.

La forma correcta de proceder cuando se introducen especificaciones de diseño es:

- Ejecutar la simulación inicial de la torre sin especificaciones, es decir, simulando con las opciones que vienen por defecto.
- Introducir valores de las especificaciones de diseño que sean factibles.
- Proporcionar límites y paso de iteración razonables para las variables a manipular.



6.6.3 DISEÑO DE INTERCAMBIADORES

Los equipos de intercambio de calor de la planta se diseñan con el modelo Shortcut de la opción HeatX, modelo que proporciona el área de intercambio por el método DTLM, como ya comentamos anteriormente.

Para estimar la superficie de intercambio S, se necesitan los siguientes datos:

- La carga térmica en el intercambiador Q (Heat Duty).
- Las temperaturas de los fluidos.

DETERMINACIÓN DE LA DTLM CORREGIDA

Consideremos el esquema propuesto a continuación (Figura 6.10):

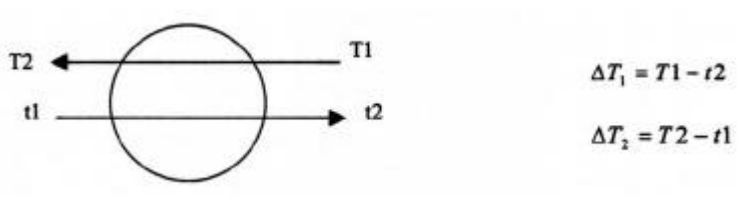


Figura 6.10

La media logarítmica de ΔT_1 ΔT_2 (DTLM) para circulación en contracorriente es dada por la relación:

$$DTLM = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} \quad \left| \quad \text{(Ecuación} \right.$$

La DTLM se corrige por un factor F, función de los siguientes parámetros (Ecuaciones 6.10 y 6.11):



$$R = \frac{T_1 - T_2}{t_2 - t_1} \quad \text{y} \quad E = \frac{t_2 - t_1}{T_1 - t_1}$$

Este factor puede obtenerse mediante correlaciones. La diferencia de temperatura logarítmica media corregida se obtiene de la expresión:

$$DTLM_{\text{corregida}} = F \cdot DTLM_{\text{contracorriente}} \quad (\text{Ecuación 6.12})$$

Con la DTLM en °C.

DETERMINACIÓN DE LA SUPERFICIE DE INTERCAMBIO

Se obtiene a partir de la expresión:

$$S = \frac{Q}{U \cdot DTLM_{\text{corregida}}} \quad \text{con } Q \text{ (kcal/h), } U \text{ (kcal/h} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{°C)}, DTLM \text{ (°C)} \quad (\text{Ecuación})$$

Donde U es el coeficiente global de intercambio térmico, estimado en función de la naturaleza de los fluidos. En un principio se utilizan los valores estimados por Aspen, aunque en un principio no son muy fiables.

Una vez realizado este cálculo aproximado, empleamos el programa Aspen Hetrán para realizar un cálculo riguroso que describiremos más adelante.

6.7 EQUIPOS AUXILIARES

Los equipos que forman parte del sistema y que completan el diagrama de flujo son principalmente el condensador a la salida del stripper, el refrigerador de la corriente agotada, la bomba de impulsión de esta corriente para alcanzar la presión de trabajo del absorbedor, el mezclador y la purga, donde se lleva la solución a su composición óptima, y la válvula de descompresión de la solución rica.

Como ya comentamos anteriormente en el capítulo 5, el reclaimers es una unidad auxiliar que hace posible mantener una concentración constante de amina activa en la solución



regenerada y previene de la acumulación de sales estables con la temperatura y otros productos corrosivos

En el caso de nuestra planta, para simular este equipo auxiliar hemos empleado dos unidades, una primera para llevar la solución a la concentración de trabajo (mezclador) y la segunda para separar las especies en disolución interferentes (separador).

Otras unidades auxiliares son los filtros, pero en general, considerando la composición de la corriente que vamos a procesar y teniendo en cuenta que este tipo de sistemas se emplean fundamentalmente para el caso de aminas secundarias, no hemos incluido filtración en nuestra planta.

6.8 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD. ESPECIFICACIONES DE DISEÑO

Entre las herramientas que posee ASPEN PLUS para la simulación de procesos, destacamos dos de ellas por su importancia en el diseño de equipos y la posibilidad realización de análisis rigurosos. Estas son:

- Análisis de sensibilidad (*Sensitivity*).
- Especificaciones de diseño (*Design Spec*).

El *Análisis de Sensibilidad* es una herramienta con la cual introducir variaciones de parámetros de diseño y ver como evolucionan las restricciones con estos. Es muy útil para conocer que variables afectan y en que medida, a los principales parámetros de diseño de los equipos. El modo de operación consiste en fijar una serie de variables del sistema, y variar el resto de manera que podamos analizar la influencia de esta variable en la operación.

La herramienta *Especificaciones de Diseño*, nos permite imponer como restricciones las especificaciones requeridas en el diseño, ajustando parámetros de diseño durante la simulación de manera que aseguremos el cumplimiento de estas. En este caso, seleccionamos las variables de diseño principales (especificaciones) de nuestro equipo y modificamos una serie de variables de manera que se cumpla la especificación impuesta.



Para poder realizar un análisis de sensibilidad, una vez seleccionada la variable a manipular, se realizan los siguientes pasos:

- Entramos en **Model Analysis Tools/Sensitivity** del directorio principal.
- Dentro de la pantalla que se nos presenta definimos un nuevo bloque de sensibilidad, pulsando el botón **New**, y asignándole una denominación, por defecto el programa lo nombra S-1, S-2, etc.).
- Una vez dentro del bloque se definen las variables de sensibilidad, aquellas que queremos estudiar.
- Al editar la variable se presenta la ventana de definición. Seleccionamos una categoría:
 - *General*
 - *Bloques*
 - *Corrientes*
 - *Modelo*
 - *Parámetros de propiedades físicas*
 - *Reacciones*

Completamos la referencia:

- *Tipo*
- *Corriente o bloque*
- *Variable*

A continuación se introducen las variables a manipular. Para esto se siguen los pasos siguientes:



- Seleccionamos la pestaña **Vary** que nos presenta la página de definición de variables.
- En la casilla superior aparece el número de la variable que estamos introduciendo o modificando. Desde aquí se introducen o modifican el resto de variables seleccionando **New**, o el número correspondiente respectivamente.
- Fijamos las características de las variables:
 - *Tipo*
 - *Bloque*
 - *Variable*
 - *Listado de valores o un rango de variación.*

En el caso de las especificaciones de diseño tenemos opciones distintas, para el caso de las especificaciones relacionadas con los bloques, procede de forma similar al caso anterior mediante el siguiente procedimiento:

- Desplegamos el menú del equipo correspondiente y se selecciona **Design Specs**.
- Dentro de la ventana que aparece seleccionamos **New**, que abre una nueva ventana en la que se introduce la especificación. Previamente hay que enumerar o nombrar la especificación.
 - Se selecciona el tipo de especificación en el menú desplegable **Type**.
 - Se introduce el valor de la especificación en **Specification**.
 - Se selecciona el tipo de corriente, número de plato, etc. Según a que haga referencia la especificación.
- Pulsamos la pestaña **Components** para elegir el componente sujeto a la especificación.



- Por último pulsamos la pestaña **Feed/Product Stream** para seleccionar la corriente a la cual se hace referencia.

Para obtener las especificaciones requeridas se eligen las variables a manipular, pudiendo ser alguna de las fijadas en la página de configuración inicial. Además el rango de variación de estas debe incluir el valor de las variables elegidas en la configuración inicial, ya que este es tomado como valor inicial para las sucesivas iteraciones.

Para definir las variables:

- Desplegamos el menú del equipo y se selecciona **Vary**.
- Dentro de la ventana que aparece se selecciona **New**, que abre una nueva ventana en la cual introducir las variables.
- Seleccionamos el menú desplegable **Type**, en el cual introducimos la variable.
- Establecemos los límites inferior y superior.
- Indicamos el paso de iteración. Se tiene como valor por defecto $0.1 \cdot (\text{límite superior} - \text{límite inferior})$.

También tenemos la opción de emplear especificaciones de diseño fuera de los equipos, de manera que afecten al proceso global, o bien porque hay bloques que no contemplan esa opción. Para ello, nos dirigimos a la carpeta **Flowsheeting Options/Design Spec** y procedemos de la misma forma que en el caso anterior.

6.9 MODELOS DE CONVERGENCIA DE SISTEMAS

ASPEN PLUS resuelve los diagramas de flujo con recirculación y las especificaciones de diseño de forma iterativa. Para ello se requiere establecer:

- Corrientes de corte.
- Los bloques de convergencia.



- Secuencia de iteración.
- Método de convergencia.

Las **corrientes de corte** son aquellas corrientes con las que se llevan a cabo las iteraciones. Se trata por tanto de corrientes de recirculación tanto de la planta como de las especificaciones de diseño impuestas. Las iteraciones se llevan a cabo con variables de las corrientes de corte, estas son, fundamentalmente los flujos (molares o másicos) de los compuestos, la presión y la entalpía.

Para con el proceso iterativo el programa necesita valores iniciales de las variables de las corrientes de corte. Estos valores iniciales de las variables pueden introducirse directamente, o por defecto el programa les asigna un valor inicial cero. Una opción recomendable es realizar una simulación inicial con los valores por defecto y posteriormente tomar los resultados obtenidos como referencia, introduciéndolos posteriormente en las corrientes de corte como entrada, o bien seleccionando la corriente y con el botón derecho emplear la opción **Reconcile**.

El parámetro que establece la precisión de la convergencia es la tolerancia, definida como:

$$\frac{1}{2}(X_{old}-X_{new})/X_{old}^{1/2}$$

En cada iteración el programa nos devuelve el valor mayor del *Error/Tolerancia (Err/Tol)* de las variables de las corrientes de corte, de tal manera que si el error es menor que la tolerancia, el sistema converge.

En caso de que se supere el máximo número de evaluaciones establecidas, se nos muestra como error en el panel de control, que el sistema no converge en un determinado número de pasos prefijados.

El **bloque de convergencia** es un bloque insertado en la corriente de corte para proporcionar las nuevas estimaciones de las propiedades de esta al final de cada iteración. Para conseguir estas nuevas estimaciones el bloque emplea distintos métodos de convergencia. Al igual que se tienen dos tipos de corriente de corte, se tienen dos tipos de bloques, uno para las recirculaciones y otro para las especificaciones de diseño. Cada uno puede utilizar un método de convergencia diferente.



La **secuencia de iteración** establece el orden computacional para todos los bloques, unidades de operación y convergencia, fijando el anidamiento de estos en el bucle.

Cada bloque de operación tiene sus propios parámetros de convergencia, es decir los **parámetros de convergencia de equipos**. Estos parámetros son:

- El número de iteraciones máximas permisibles para cerrar el balance de masa y energía.
- La tolerancia, que establece la precisión.

Estos parámetros pueden modificarse desde el menú de configuración de los equipos, ya que a ellos se accede individualmente en cada caso. Es común respetar los asignados por defecto en la primera simulación, y, posteriormente se analizan los resultados.

La estrategia de ASPEN PLUS en los cálculos relativos a la simulación de los diagramas de flujo se basa en el siguiente procedimiento:

- Ejecutar los cálculos de cada bloque o unidad de operación de manera secuencial.
- Emplear los resultados de la ejecución de cada equipo como entrada para el siguiente.

En el caso en el que el sistema presente corrientes de reciclo, especificaciones de diseño o problemas de optimización se realiza un cálculo iterativo que requiere:

- Elegir las corrientes de corte, es decir una corriente de reciclo (bucle cerrado), cuya presión, entalpía y flujo son calculados iterativamente. Puede ser cualquiera de un bucle.
- Definir los bloques de convergencia para las corrientes de corte, especificaciones de diseño y optimización. Estos bloques determinan cuántas variables de las corrientes de corte, o bien de diseño son actualizadas para cada iteración. Generalmente las que no hayan convergido correctamente.
- Especificar una secuencia de cálculo que contenga tanto las unidades de operación como los bloques de convergencia.



El programa toma cada uno de los requisitos anteriores por defecto, y permite que el usuario adapte la convergencia a nuestras necesidades creando bloques, eligiendo las corrientes de corte y tolerancia. En los siguientes apartados se explica cómo definir las opciones que tenemos relativas a la convergencia.

6.9.1 OPCIONES DE CONVERGENCIA

Accediendo a las opciones de convergencia **ConvOptions** a través del menú **Data-Convergence-ConvOptions**, podemos especificar, para cada bloque de convergencia:

- Tolerancia para la corriente de corte.
- Método matemático de convergencia.
- Parámetros que afectan a la secuencia.
- Parámetros que afectan a cada método de convergencia.

Describiremos a continuación las posibilidades de estas opciones.

6.9.1.1 PARÁMETROS DE LAS CORRIENTES DE CORTE

En la ventana **Tear Convergence** se especifican distintos parámetros de convergencia, como la tolerancia. Por defecto se le asigna un valor de 0.001. Se asume que una corriente de corte converge cuando para todas sus variables se cumple que:

$$-tol \leq \frac{X_{calc} - X_{asum}}{X_{asum}} \leq tol$$

A través del menú **Data-Convergence-Tear**, podemos escoger la corriente si no nos interesa la opción que el programa selecciona por defecto.



6.9.1.2 MÉTODOS DE CONVERGENCIA

El programa ofrece la opción de seleccionar el método de convergencia para nuestro sistema. Seleccionamos los distintos métodos disponibles en la ventana **Defaults Methods**. En esta ventana se permite además asignar un método distinto a las corrientes de corte, a las especificaciones de diseño y la optimización.

Además para cada método se pueden especificar distintos parámetros. Para ello tenemos que ir a la opción **Methods** donde nos aparecen los métodos disponibles y los parámetros que podemos modificar.

6.9.1.3 PARÁMETROS DE LA SECUENCIA

Se trata de los parámetros que se consideran en la secuencia de ejecución. Para acceder a estos parámetros se selecciona la ventana **Sequencing**, donde se encuentran los siguientes campos:

- *Design Spec Nesting*: indica si las especificaciones de diseño se calculan dentro del bucle de las corrientes de corte, fuera de éste o bien simultáneamente con las corrientes de corte.
- *User Nesting*: nos proporciona la opción de elegir una secuencia de ejecución, o bien seleccionar el anidamiento de los bucles. Permite además elegir si los bloques de convergencia especificados en *Conv Order* deberían ser calculados dentro o fuera de otros bloques de convergencia.
- *Variable Weight*, que nos permite elegir el peso de una determinada variables en la secuencia.
- *Loop Weight*. Esta opción nos permite asignar un peso a una determinada secuencia. Es una opción interesante porque no todos los bucles pueden tener el mismo peso dentro de un bucle.



Para ver la secuencia se selecciona el menú **View-Control Panel** una vez ejecutada. En la parte izquierda aparecen los bloques de convergencia y las unidades de operación en el orden en que se calculan. Si está vacío se selecciona el menú **Run-Step**.

6.9.1.4 LÍMITES DE CÁLCULO

Los límites de cálculo son aquellos valores que el programa considera que no deben superarse en los cálculos. Se establecen límites de cálculo para las variables de temperatura y presión, siendo los límites por defecto:

- Límite superior e inferior de temperatura, respectivamente: 17540,33 y - 441,17 °F.
- Límite superior e inferior de presión, respectivamente: 0 y 1450380 psi.

Del mismo modo se establecen, de manera general, para los balances de masa y energía de cada equipo.

- Número máximo de iteraciones, el problema toma por defecto 30 para los bloques de convergencia creados por este.
- Tolerancia, 0.0001 (por defecto).

Para establecer estos límites se entra en **Simulation Options/Flash Convergente**. Estos parámetros se pueden establecer de manera individual en cada equipo, primando el valor del parámetro individual sobre el general.

6.9.2 MÉTODOS DE CONVERGENCIA

Los métodos de convergencia son los modelos matemáticos empleados en los bloques de convergencia, que asignan al valor de entrada del bloque un nuevo valor de salida.



La iteración comienza con un valor inicial de x^* (vector de estimación: composición, flujo, presión y temperatura) de salida del bloque, asignado por el usuario o por defecto cero. Este valor entra en planta, y esta devuelve el valor $f(x^*)$ al bloque de convergencia, como se ilustra en la Figura 6.11. El valor $f(x^*)$ es la nueva entrada al bloque de convergencia, a partir de la cual el modelo matemático construye el nuevo valor de comienzo de iteración x^* . Cuando el lugar geométrico de las iteraciones $f(x)$ corta a la línea de 45°, $f(x^*) = x^*$, según se representa en la Figura 6.12, se alcanza la convergencia (con la precisión establecida por la tolerancia).



Figura 6.11

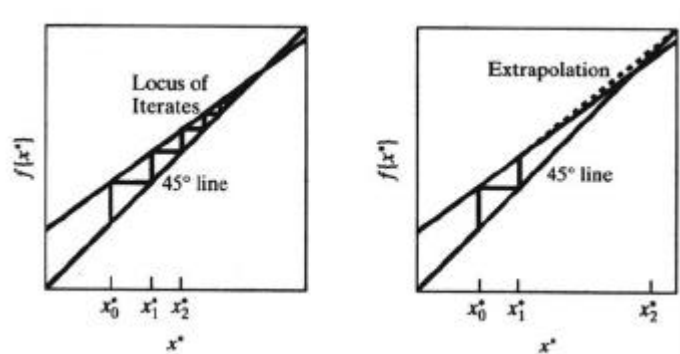


Figura 6.12

Los métodos de convergencia disponibles son:

- *WEGSTEIN*
- *DIRECT*
- *SECANT*



- *BROYDEN*
- *NEWTON*
- *COMPLEX*
- *SQP*

Explicaremos detalladamente a continuación los métodos de Wegstein y Broyden, que son los utilizados para la simulación.

6.9.2.1 MÉTODO WEGSTEIN

El método de Wegstein suele ser el recomendado en muchos casos ya que acelera la convergencia. Para esto toma los dos primeros valores de iteración de $(f(x), x)$ y extrapola linealmente hasta cortar con la línea de 45 °, hallando el nuevo valor de x , como se muestra en la Figura 6.12 (primero de los diagramas).

Este método es usualmente el más rápido y sencillo para las corrientes de corte. Ignora las interacciones entre variables y por eso no puede usarse si éstas están fuertemente interrelacionadas. A pesar de ello, sólo puede usarse para corrientes de corte y los parámetros que podemos controlar son los siguientes:

- *Maximun Flowsheet Evaluations*: número máximo de iteraciones realizadas.
- *Wait*: número de iteraciones de sustitución directa antes de las iteraciones de aceleración.
- *Consecutive Direct Substitution Steps*: número de iteraciones de sustitución directa entre iteraciones de aceleración.
- *Consecutive Aceleration Steps*: Número de iteraciones de aceleración consecutivas.



- *Lower Bound*: mínimo valor para el parámetro de aceleración (q) del método de Wegstein.
- *Upper Bound*: máximo valor para q .

PARÁMETRO DE ACELERACIÓN

El parámetro q se calcula para cada corriente de corte como sigue:

$$q = \frac{s}{s-1} \quad (\text{ Ecuación 6.14) } \quad s = \frac{G(X_k) - G(X_{k-1})}{X_k - X_{k-1}}$$

Donde:

X , es la estimación de las variables de la corriente de corte.

$G(X)$, es el valor calculado de la variable.

K , es el número de la iteración.

Así la nueva estimación para la variable será

$$X_{k+1} = qX_k + (1-q)G(X_k) \quad (\text{ Ecuación 6.15) } \quad = X_k + (1-q)(G(X_k) - X_k)$$

Para la mayoría de los casos unos valores de q entre -5 y 0 permiten obtener buenos resultados. Si la convergencia se alcanza muy lentamente podemos probar a dar valores



más bajos del límite inferior. Sin embargo si se produce una oscilación tal vez unos valores de q entre 0 y 1 puedan ayudar.

6.9.2.2 MÉTODO BROYDEN

El método de Broyden es similar al de Newton pero emplea una linealización aproximada. Esto lo hace más rápido pero en ocasiones no es factible, como ocurre con el de Newton.

En el método de Newton definimos:

$$\underline{\underline{J}}\{\underline{x}^*\}\underline{\Delta x} = -\underline{y}\{\underline{x}^*\} \quad (\text{Ecuación 6.16})$$

Donde $\Delta x = x - x^*$. Sustituyendo y reordenando, el nuevo valor de la variable de recirculación es:

$$\underline{x} = \underline{x}^* - \underline{\underline{J}}^{-1}\{\underline{x}^*\}\underline{y}\{\underline{x}^*\} \quad (\text{Ecuación 6.17})$$

Donde J es el jacobiano:

$$\underline{\underline{J}}\{\underline{x}^*\} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial x_1} & \frac{\partial y_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial y_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \underline{x}^* \quad (\text{Ecuación 6.18})$$

En este método la longitud del vector error $\|y\|$ es el cuadrado de su longitud después de la iteración previa, lo cual reduce el error haciendo que la iteración sea más rápida, aunque se requieren n^2 derivadas parciales. Cada derivada parcial es evaluada en un paso de



simulación, lo que requiere $n + 1$ pasos para evaluar el jacobiano. Las derivadas parciales se evalúan según la diferencia.

$$\frac{\partial y_j}{\partial x_i} \cong \frac{y_j^p - y_j}{\delta x_i} \quad j = 1, \dots, n \quad \text{(Ecuación 6.19)}$$

El método de Broyden acelera este proceso haciendo una linealización aproximada del jacobiano.

Este método puede usarse para corrientes de corte, dos o más especificaciones de diseño o para ambas cosas de manera simultánea. También es válido para variables interrelacionadas entre sí.

Los campos disponibles son los siguientes:

- *Maximun Flowsheet Evaluation*. Similar al número de iteraciones del proceso.
- *X Tolerante*: tolerancia de las variables manipuladas.
- *Wait*: igual que en el método anterior.
- *Tear Tolerance*: tolerancia de la corriente de corte.
- *Tear Tolerance ratio*: margen para dicha tolerancia.
- *Maximun Iterations*: máximo número de iteraciones para la corriente de corte antes de incluir las especificaciones de diseño.
- *Lower/ Upper Bound*: igual que para el método anterior.

6.9.3 PROBLEMAS CON LA CONVERGENCIA

Teniendo en cuenta los parámetros que hemos descrito en el apartado anterior, en el proceso de simulación pueden darse una serie de problemas que tienen como consecuencia que no se produzca la convergencia del sistema.



El programa por defecto selecciona las corrientes de corte cuando va a ejecutarse la simulación de nuestro proceso. Cada bucle de convergencia lleva asociado un bloque de convergencia. Los nombres de dichos bloques que el programa genera por defecto comienzan por el carácter "\$". Puede ocurrir que obtengamos resultados sin que hayamos alcanzado la convergencia de algún bloque. En este caso, cuando accedemos al directorio principal y seleccionamos **Results Summary**, el icono relativo a la convergencia aparece con un aspa roja  (en el caso de haber conseguido la convergencia con éxito, aparece un tick azul ).

Cuando elegimos una corriente de corte, los problemas de convergencia pueden ser debidos a muchos factores que trataremos de describir a continuación.

6.9.3.1 CORRIENTES DE CORTE

Uno de los parámetros más importantes de la convergencia es la adecuada elección de las corrientes de corte del sistema. Podemos saber qué está ocurriendo cuando la convergencia en las corrientes de corte falla, mediante la representación del error máximo dividido por la tolerancia, **Max Err/Tol**, frente al número de iteraciones. Para ello accedemos al navegador de datos, **Data Browser**, y se seleccionamos **Convergence**. Una vez dentro se pincha la opción **Tear**, apareciendo en la ventana una serie de datos. En **Tear History** se muestra la columna con **Err/Tol**.

Si representamos esta columna frente a la del número de iteraciones, podemos hacernos una idea de cómo evoluciona la convergencia y dependiendo de cómo evolucionen los datos en la gráfica, podemos ver que tipo de problemas se pueden presentar. A continuación describiremos brevemente los más comunes.

- *La convergencia es muy lenta.* En este caso se pueden modificar los parámetros de aceleración del método de convergencia, para esto se selecciona como valor para el límite inferior del parámetro de aceleración de *Wegstein* -20 . Si no es suficiente, se puede seguir disminuyendo, hasta más o menos un valor de -50 .

En la Figura 6.13 se observa un ejemplo de lo expuesto anteriormente, se trata de un caso en que nos aproximamos a la convergencia pero sin llegar a alcanzarla en el último paso.



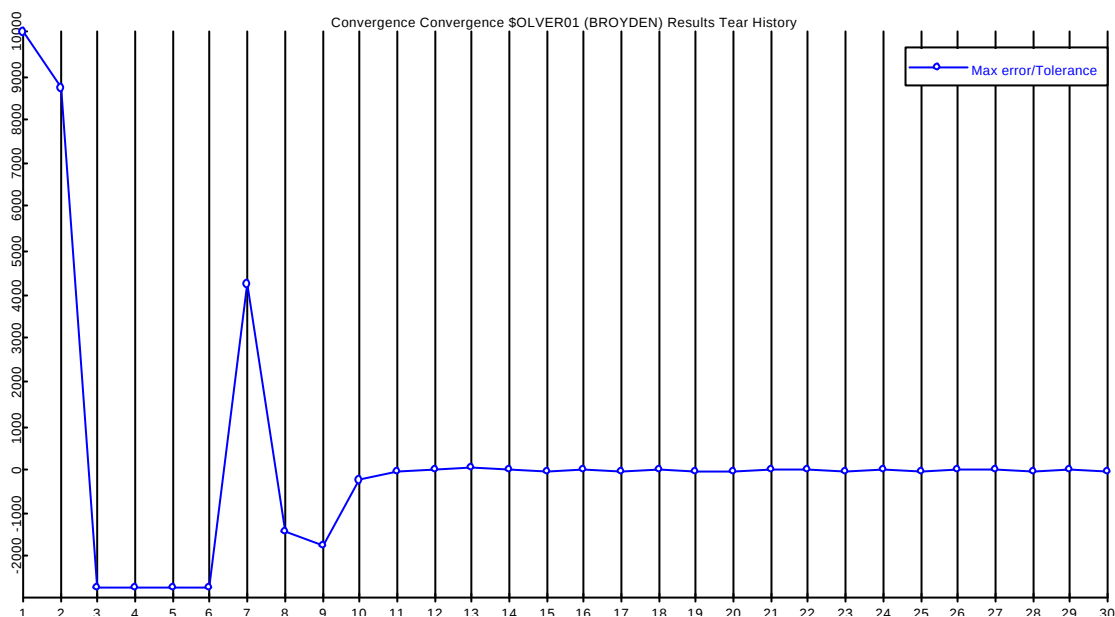


Figura 6.13

- *La convergencia es oscilante.* En este caso se selecciona para el límite superior del parámetro de aceleración de *Wegstein* un valor de 0.5. En la Figura 6.14, se muestra un ejemplo de convergencia oscilante.

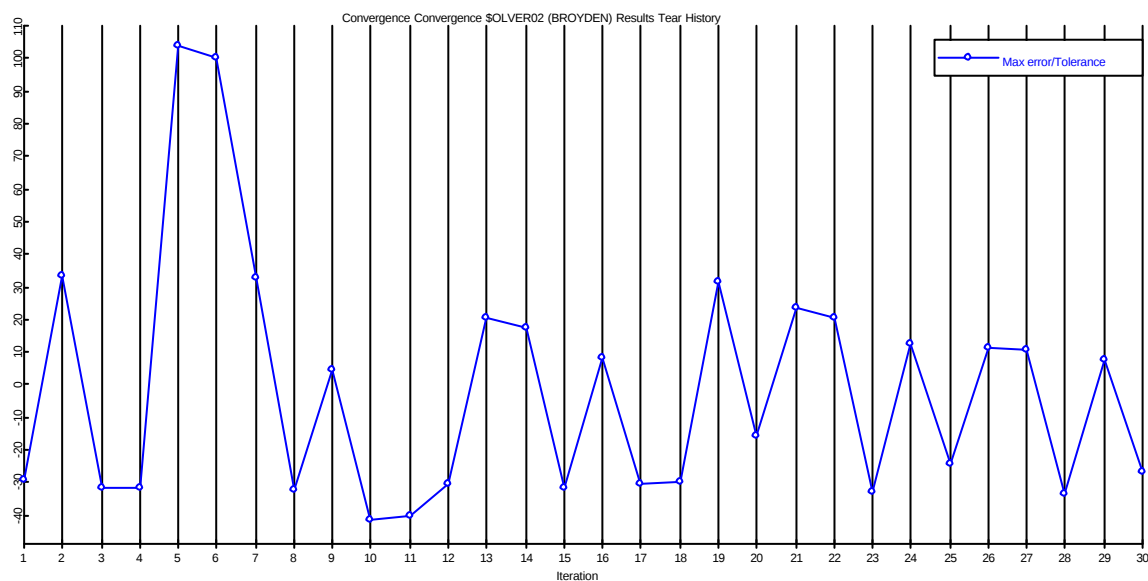


Figura 6.14

- *Err/Tol permanece por debajo de un valor pero no muy lejano a la convergencia.* En este caso, prácticamente se ha logrado la convergencia, para llegar finalmente a ella se adoptan alguna de las siguientes soluciones:
 - Seleccionar una tolerancia más restrictiva para el bucle interno.
 - Relajar la tolerancia para el bucle externo.
 - Cambiar la secuencia de cálculo para converger ambos bucles simultáneamente usando la ventana **ConvOptions-Defaults-Sequencing**.
- *Broyden o Newton tienen problemas para converger.* En el caso de haber seleccionado esta opción de convergencia, podemos incrementar el valor de *Wait* a 4.

Para evitar los problemas anteriores, se recomienda seguir unas pautas y así mejorar la convergencia:

- Seleccionar una corriente de corte que no varíe demasiado.
- Proporcionar valores iniciales aproximados a las variables de las corrientes de corte.
- Desconectar las corrientes de reciclo para obtener valores iniciales de la simulación.
- Emplear el método de *Broyden* en vez de *Wegstein* que tiene por defecto.
- Procurar que la secuencia de cálculo sea lo más simple posible.

6.9.3.2 ESPECIFICACIONES DE DISEÑO

Las especificaciones de diseño son una herramienta muy importante en el diseño de equipos. Estas nos permiten variar una serie de parámetros para ajustar las variables de diseño a nuestras necesidades. A pesar de esta condición, el bloque de convergencia



asociado a una especificación de diseño se puede presentar una serie de problemas, algunos de los más comunes se describen a continuación.

- *Err/Tol se mantiene constante.* En este caso es probable que la función especificada no se vea afectada por los cambios en la variable manipulada, es decir, puede que hayamos elegido mal las variables que afecten a nuestra especificación de diseño. Para evitar que esto ocurra es aconsejable realizar antes un análisis de sensibilidad con distintas variables y así asegurarse de cuál de ellas es la más importante.
- *Las variables manipuladas se salen de los límites especificados.* En ese caso habrá que dar unos límites razonables para dichas variables y para ello es aconsejable de nuevo hacer un análisis de sensibilidad.
- *Las variables manipuladas se salen de los límites especificados y el valor de la variable especificada tiende a alejarse del requerido.* En este caso puede ocurrir que el paso de iteración por defecto establecido como $0.1 \cdot (\text{límite superior} - \text{límite inferior})$, sea demasiado elevado, de tal forma que en el proceso nos pasamos de la solución. Para evitar que esto ocurra se disminuye el paso, en la ventana de definición de la variable. Un valor recomendado es 0.01.
- *Las columnas alcanzan la convergencia sin cumplir las especificaciones.* En este caso, obtenemos resultados pero el bloque de convergencia asociado a la especificación no nos proporciona datos coherentes. Se suele sustituir el método de convergencia *Inside-Out*, que resuelve las especificaciones en el bucle intermedio por el *Strong-non-ideal*, que las incluye en el bucle externo.

Como en el caso anterior, se puede seguir una estrategia general para resolver problemas ocasionados por la convergencia en estos casos. Es aconsejable seguir los siguientes pasos:

- Comenzar la simulación con las opciones por defecto del programa.
- Comprobar si hay algún error de los especificados anteriormente. En ese caso, intentar resolverlos con algunas de las indicaciones dadas.



- Comprobar si la tolerancia necesita ser ajustada. Si *Err/Tol* cae rápidamente por debajo de 10 pero luego se mantiene oscilando puede que se necesite un ajuste en la tolerancia. También podría mejorar si se cambia el método por *Broyden* o *Newton*.
- Si la convergencia es lenta, podemos manipular los parámetros del método *Wegstein* tal como se aconseja en apartados anteriores.
- Si la convergencia oscila, nos debemos asegurar de que todos los componentes que entran en el diagrama de flujo tienen una salida (balance).
- En la carpeta **Results Summary** del directorio principal, podemos comprobar si las especificaciones de diseño presentan problemas de convergencia. En este caso, intentamos aplicar alguno de los consejos mencionados anteriormente.
- Intentar cambiar la secuencia de cálculo para ver si se consigue mejores resultados (opción **Sequencing**).

6.9.4 CONVERGENCIA DEL MODELO RADFRAC

La convergencia del modelo Radfrac consta de dos partes:

- Método de inicialización.
- Algoritmo de convergencia.

La inicialización es el proceso por el cual se obtiene una primera estimación para todos los parámetros. Para ello el modelo emplea:

- Resultados previos, si están disponibles.
- Estimaciones que pueda introducir el usuario.

En el caso de no disponer de estos datos, el modelo utiliza una estrategia de inicialización que podemos seleccionar. Esta estrategia realiza fundamentalmente:



- Cálculo inicial simple (equilibrio) para estimar la composición del líquido y el gas.
- Asume un perfil constante de composición.
- Estima la temperatura del perfil.

El modelo Radfrac permite los siguientes métodos de inicialización:

- *Standard*: de uso general.
- *Crude*: para sistemas de amplio punto de ebullición.
- *Chemical*: para sistemas de estrecho punto de ebullición.
- *Azeotropic*: para destilación azeotrópica.
- *Cryogenic*: para aplicaciones criogénicas.
- *Custom*: para modelos definidos por el usuario.

Se procede comenzando por la utilización del Standard y en caso de que no funcione correctamente se utiliza la inicialización específica para cada caso particular. En nuestro caso la opción Standard proporciona valores estimativos iniciales correctos.

El modelo presenta 4 algoritmos diferentes para el modelado de columnas:

- *Inside-out (Standard)*: es el método de Boston y Brit. Se recomienda para resolver la mayoría de los problemas de destilación y absorción, tanto simple como reactiva.
- *Sum-Rates (Petroleum)*: es una variante del método Inside-out. Se recomienda en el caso de sistemas de amplio punto de ebullición con muchos componentes o especificaciones de diseño (destilación).
- *Non Ideal*: es una variante del método Inside-out. Se recomienda para sistema altamente no ideales.



- *Newton*: Se recomienda para sistema altamente no ideales, como destilación aceotrópica.

La fuentes de problemas relativos a la convergencia del modelo RadFrac, más frecuentes son las siguientes:

- Incorrecta elección de las especificaciones de diseño.
- Incorrecta elección o ajuste del algoritmo.
- Incorrecta elección del modelo de propiedades termodinámico.
- Utilización de bajos valores de flujo másicos y energéticos o reflujos.



7. SIMULACIÓN DE UNA PLANTA DE ABSORCIÓN DE CO₂ EN ASPEN PLUS. INGENIERÍA BÁSICA DE UN SISTEMA MEA-CO₂

En este capítulo trataremos la configuración de los equipos que componen la planta. En un principio realizaremos un prediseño para determinar el comportamiento de los distintos modelos y seleccionar los datos de diseño necesarios. Posteriormente integraremos los equipos en la planta y realizaremos la simulación del sistema completo.

En la simulación preliminar, se introducen las especificaciones de los equipos que hemos obtenido de la bibliografía, y en el apartado dedicado a la convergencia trataremos los parámetros de convergencia de la planta.

Construido el diseño del diagrama de flujo de la planta y establecida la convergencia, se ejecuta la simulación.

7.1 DATOS PARA EL DISEÑO

A continuación mostraremos los datos de partida de nuestra simulación, los modelos y bloques que configuran nuestra planta y las especificaciones globales que se deben cumplir.

7.1.1 CARACTERÍSTICAS DEL GAS A TRATAR

Nuestro proceso de separación del CO₂ se encuentra dentro de la zona de preparación del gas de síntesis, descrita en el capítulo 3 de este documento. La corriente que va a tratarse, procedente del gasificador, pasa por una eliminación de la humedad presente en un separador de fases (flash). La corriente gaseosa resultante se comprime antes de entrar en la sección de reformado y ajuste de la relación H₂/CO.



Posteriormente, llevamos de nuevo nuestra corriente a un equipo de separación de agua, que consiste en un tanque flash que opera a una temperatura de 40 °C y a una caída de presión de 0 bar. Tras este acondicionamiento, las características de la corriente de entrada a nuestro proceso son las mostradas en la Tabla 7.1, con una temperatura de 40°C y una presión de 15 bar.

Esta será la composición de la corriente que vamos a tratar, resultante de procesar aproximadamente 8030 kmol/h de gas de síntesis producto de la gasificación de aproximadamente 68,8 tn/h de biomasa seca.

Tabla 7.1. Corriente gaseosa efluente del flash.

<i>Flujos Molares, kMol/h</i>	<i>Gas</i>	<i>% Molar</i>
H ₂	3002	36,97
CO	2984	36,75
CO ₂	2031,484	25,02
Metano	64	0,788
H ₂ O	37,42	0,46
Etano	0	0

7.1.2 TECNOLOGÍA SELECCIONADA. DIAGRAMA DE FLUJO

A continuación plantearemos el diagrama de flujo de la planta. La tecnología seleccionada es, como ya hemos comentado en capítulos anteriores, una planta de absorción que emplea MEA como absorbente, simulando el esquema básico expuesto en el capítulo 5 con algunas modificaciones.

Estas modificaciones están orientadas a adaptar este esquema básico a las características del gas que vamos a tratar, como son:

- *Presión y temperatura.* La corriente de partida de nuestro proceso presenta una condiciones de operación adecuadas para su tratamiento directo, por lo que no son



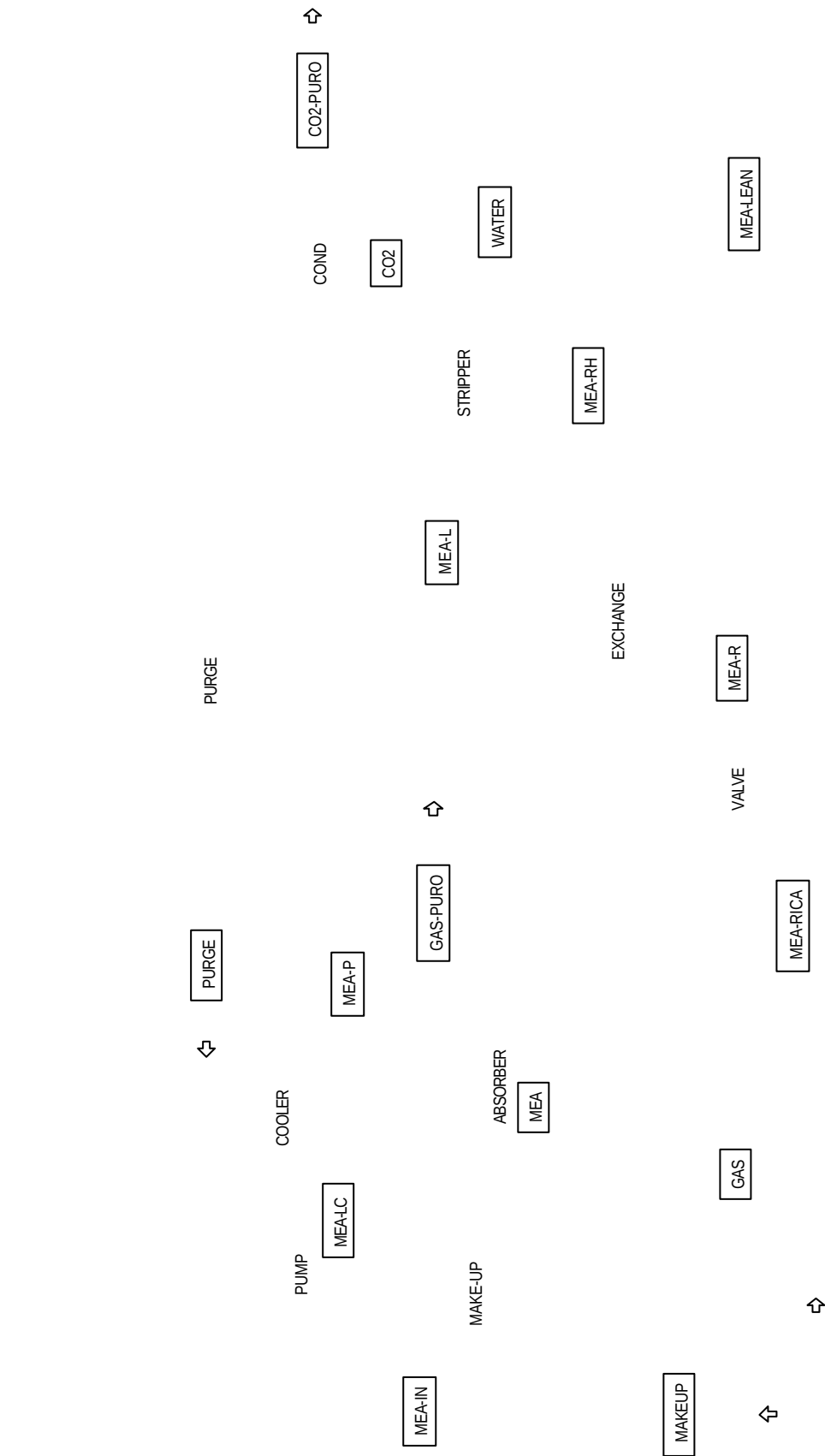
necesarias las secciones de enfriamiento y compresión presentes en este tipo de unidades de tratamiento.

- *Contaminantes.* La ausencia de azufre y oxígeno a la entrada, hace innecesaria la utilización de equipos auxiliares tales como filtros mecánicos, antiespumantes o lechos de carbón activo. En cuanto a unidades como el reclaimer, cuya principal misión es mantener la solución en las características óptimas de operación, en nuestro caso queda reducido a una purga de la corriente de salida del stripper tras el intercambiador y a una reposición de MEA y agua. Con la purga evitamos que se acumulen en el sistema productos de la degradación irreversible del absorbente.
- *Aditivos.* Igual que en el caso anterior, la ausencia de ciertas sustancias descritas anteriormente, hace innecesario la utilización de aditivos específicos en estos casos, así como los equipos auxiliares asociados a ellos.
- *Unidades de lavado.* Tanto en la torre de absorción como de stripping, no es necesario la utilización de estos sistemas ya que las pérdidas de disolvente que se producen en nuestra planta son mínimas. Estas pérdidas se localizan fundamentalmente en el absorbedor, y la razón de esta baja tasa de emisiones es fundamentalmente la elevada presión de trabajo de la columna.

A continuación presentaremos un esquema del diagrama de flujo de la planta (Figura 7.1).



Figura 7.1. Diagrama de flujo de la planta de absorción con MEA.



Teniendo en cuenta la figura anterior, en la Tabla 7.2 se muestran todos los equipos y corrientes que aparecen en la planta, así como las etiquetas con las que son nombrados en el diagrama de flujo.

Tabla 7.2. Componentes del diagrama de flujo de la planta.

RELACIÓN DE EQUIPOS Y CORRIENTES DE LA PLANTA		
EQUIPOS	CORRIENTES DE ENTRADA	CORRIENTES DE SALIDA
ABSORBER: Absorbedor	GAS: alimentación gas a depurar MEA: alimentación de disolvente	GAS-PURO: salida gas depurado MEA-RICA: disolvente cargado
VALVE: Válvula	MEA-RICA: entrada a descompresión	MEA-R: salida válvula
EXCHANGE: Intercambiador	MEA-RICA: entrada fría MEA-LEAN: entrada caliente	MEA-RH: salida caliente MEA-L: salida fría
STRIPPER: Desorbedor	MEA-RH: entrada a regenerar WATER: agua condensada	MEA-LEAN: salida agotada CO2: salida CO ₂ desorbido
COND: Condensador	CO2: salida gas CO ₂ y agua	CO2-PURO: salida CO ₂ puro WATER: agua eliminada
COOLER: Refrigerador	MEA-P: entrada disolvente caliente	MEA-LC: salida disolvente frío
PUMP: Bomba	MEA-LC: entrada disolvente	MEA-IN: salida disolvente comprimido
MAKE-UP: Mezclador	MEA-IN: entrada disolvente MAKEUP: entrada recuperador	MEA: salida disolvente recuperado
PURGE: Purga	MEA-L: corriente de entrada	PURGE: salida purga MEA-P: entrada al refrigerador



En cuanto a las especificaciones que debe de cumplir el gas a la salida (corriente GAS-PURO) no son excesivamente restrictivas con respecto al CO_2 , por lo que consideramos además otro parámetro, la cantidad de CO de dicha corriente, ya que dicho componente se ve involucrado también en el proceso de absorción. Por lo tanto, nuestros parámetros son:

- La concentración de dióxido de carbono a la salida puede ser de hasta un 10% molar.
- Debemos de procurar un rendimiento aceptable de absorción de CO_2 compatible con una absorción mínima de CO.

Con estos datos pasamos a realizar la simulación. Los datos que aparecen a lo largo de este capítulo se han extraído de las referencias bibliográficas [5], [8], [17], [18],[19] y [21].

7.2 ABSORBEDOR

7.2.1. DATOS DE PARTIDA. PREDISEÑO

En la simulación de la torre de absorción de CO_2 tuvimos en cuenta todas las opciones posibles. En un principio optamos por la elección de una plantilla, si recordamos las indicadas en el capítulo anterior, emea, kemea y electrolytes. Como modelo de propiedades seleccionamos el modelo ELECNRTL.

En un principio, a la hora de realizar el prediseño, partimos de datos bibliográficos recopilados. Una vez obtenidos los resultados, empleamos las distintas herramientas descritas en el apartado anterior para mejorar el diseño.

Los datos de operación disponibles para el absorbedor como resultado de las características de la corriente que vamos a tratar, son los que mostramos en la siguiente tabla (Tabla 7.3):



Tabla 7.3. Datos de operación del absorbedor

CARACTERÍSTICAS DEL GAS A TRATAR	
Presión (bar)	15
Temperatura (°C)	40
Caudal (Kmol/h)	8118,908
% CO ₂ (molar)	25
% Humedad (molar)	0,46

Para el cálculo del caudal inicial de disolvente, empleamos los datos bibliográficos para realizar una estimación inicial y el prediseño. Estos datos se muestran en la Tabla 7.4.

Tabla 7.4. Datos bibliográficos disponibles.

CORRIENTE DE ABSORBENTE	
T (°C)	40-50
Kg CO ₂ /kg MEA	0,36-0,53
% peso de MEA	15-30
Tipo de contacto	Platos
Nº de platos	20
Plato alimentación	1-3
Eficiencia de etapa	15-70 %

En el menú de equipos de la parte inferior de la ventana de trabajo seleccionamos la opción **Columns**, y como modelo de columna empleamos *RadFrac*, como hemos indicado anteriormente. A continuación insertamos los datos requeridos por el bloque,



relativos al número de etapas de contacto y los platos de la alimentación tanto de gas a depurar como de disolvente.

Partiendo de estos datos bibliográficos y de las características del gas de partida, estimamos el caudal necesario de disolvente para el prediseño y seleccionamos unas condiciones iniciales de trabajo (Tabla 7.5). Para ello realizamos un cálculo del caudal de disolvente, suponiendo una carga de 0,36 kg CO₂/kg MEA (la más desfavorable) y considerando la cantidad de CO₂ (89385,3 kg) y calculamos el caudal másico de MEA necesario. A continuación calculamos el caudal másico total suponiendo la concentración de trabajo recomendada del 17% en peso y el resultado es 71418,24 kmol/h. Como se trata de una estimación inicial y hemos supuesto las condiciones más desfavorables, redondeamos el resultado al mostrado en la tabla. Posteriormente ajustaremos más los datos empleando las herramientas del sistema.

Tabla 7.5. Datos de partida para el prediseño de la columna.

Temperatura (°C)	40
Presión (bar)	15
Caudal absorbente (kmol/h)	70000
% peso MEA	17
Nºetapas	20

En un principio realizamos una simulación considerando una aproximación al equilibrio de 7,7 ° C, según datos bibliográficos, ya que el modelo considera etapas ideales y si no se le indica una aproximación al equilibrio o bien una eficiencia de etapa, el modelo considera que se alcanza el equilibrio en cada etapa. Las reacciones que tienen lugar en el absorbedor son las mostradas a continuación, con un grado de aproximación al equilibrio de 7,7°C, como hemos indicado anteriormente:



<u>Reaction Type</u>	<u>Stoichiometry</u>	
1 Equilibrium (Ecuación 7.1)	$2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$	
2 Equilibrium (7.2)	$\text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HCO}_3^-$	(Ecuación
3 Equilibrium (7.3)	$\text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CO}_3^{--}$	(Ecuación
4 Equilibrium (7.4)	$\text{MEA}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{MEA} + \text{H}_3\text{O}^+$	(Ecuación
5 Equilibrium (7.5)	$\text{MEACOO}^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{MEA} + \text{HCO}_3^-$	(Ecuación

Estas reacciones se corresponden con el modelo de propiedades seleccionado, de manera que definimos el número de especies en disolución y los componentes que intervienen en el equilibrio.

7.2.2 SIMULACIÓN CON PLANTILLAS

7.2.2.1 PLANTILLAS EMEA Y KMEA

En el capítulo anterior comentamos las características de las plantillas *emea* y *kmea*. En la simulación inicial de la torre de absorción probamos la configuración del equipo con cada una ellas. A continuación mostraremos los resultados obtenidos.

MODELO EMEA

Las condiciones de validez del método, mostradas en la carpeta **Setup/Specifications/Description** son las siguientes:

H₂O-MEA-H₂S-CO₂

Property method: ELECNRTL

Temperature: up to 120 °C

MEA Concentration: up to 50 wt. %



Units: SI

Teniendo en cuenta las reacciones generales mostradas, las consideraciones de equilibrio que presenta el modelo para la Ecuación 7.6 son las siguientes (Cuadro 7.1):

$$\ln(k_{\text{equ}}) = A + \frac{B}{T} + C * \ln(T) + D * T \quad (\text{Ecuación 7.6})$$

Cuadro 7.1. Términos de la constante de equilibrio.

REACCIÓN	1	2	3	4	5
A	132,8988	231,4654	216,0500	-3,0383	-0,5213
B	-13445,90	-12092,10	-12431,70	-7008.357	-2545,53
C	-22,4773	-36,7816	-35,4819	0	0
D	0	0	0	-0,0031	0



El modelo trabaja con componentes reales y los resultados obtenidos en la simulación son los mostrados a continuación (Tabla 7.6):

Tabla 7.6. Resultados de la simulación.

	GAS	GAS-PURO	MEA	MEA-RICA
Mole Flow kmol/hr				
WATER	37,42	112,52	66012,40	65650,40
MEA	0,0	0,013	3987,60	510,64
SH ₂	0,0	0,0	0,0	0,0
CO ₂	2031,48	85,12	0,0	71,07
HCO ₃ ⁻	0,0	0,0	0,0	273,68
MEACOO ⁻	0,0	0,0	0,0	1588,44
MEA ⁺	0,0	0,0	0,0	1888,5
CO ₃ ²⁻	0,0	0,0	0,0	13,17
HS ⁻	0,0	0,0	0,0	0,0
S ²⁻	0,0	0,0	0,0	0,0
H ₃ O ⁺	0,0	0,0	0,0	2,42E-5
OH ⁻	0,0	0,0	0,0	0,04
HYDRO-01	3002	3001,998	0,0	2,24E-3
CARBO-01	2984	2792,74	0,0	191,25
METHA-01	64	20,42	0,0	43,58
Mole Frac				
WATER	4,65E-3	0,0188	0,9430	0,935
MEA	0,0	2,12E-6	0,057	7,27E-3
SH ₂	0,0	0,0	0,0	0,0
CO ₂	0,25	0,014	0,0	1,01E-3
HCO ₃ ⁻	0,0	0,0	0,0	3,9E-3
MEACOO ⁻	0,0	0,0	0,0	0,02
MEA ⁺	0,0	0,0	0,0	0,027
CO ₃ ²⁻	0,0	0,0	0,0	1,87E-4
HS ⁻	0,0	0,0	0,0	0,0
S ²⁻	0,0	0,0	0,0	0,0
H ₃ O ⁺	0,0	0,0	0,0	0,0
OH ⁻	0,0	0,0	0,0	0,0



HYDRO-01	0,37	0,5	0,0	0,0
CARBO-01	0,37	0,46	0,0	2,7E-3
METHA-01	7,9E-3	3,4E-3	0,0	6,2E-4
Total Flow kmol/hr	8118,91	6012,82	70000	70230,80
Total Flow kg/hr	1,8E+5	90379,30	1,433E+6	1,52E+6
Total Flow l/min	2,24E+5	1,878E+5	23993,85	26761,62
Temperature K	305,22	341,23	313	338,54
Pressure bar	15	15	15	15
Vapor Frac	1	1	0,0	0,0
Liquid Frac	1,16E-3	0,0	1	1

Los datos de operación del absorbedor se muestran a continuación (Tabla 7.7):

Tabla 7.7. Datos de operación del absorbedor.

PLATO SUPERIOR	
T (K)	341,23
Distillate rate (kmol/h)	6012,82
Reflux rate (kmol/h)	70301,1
Reflux ratio	11, 7
FONDO	
T (K)	338,54
Bottoms rate (kmol/h)	70230,8
Boilup rate (kmol/h)	8210,74
Boilup ratio	0,117

En el diseño de columnas, el modelo Radfrac establece dos parámetros básicos, por una parte el *Reflux Rate*, que determina la cantidad de líquido o reflujo que desciende desde el plato superior o del condensador, y el *Boilup Rate*, que determina la cantidad de vapor que asciende desde el fondo de la columna o del reboiler. Estos parámetros no son los



únicos pero el resto se relacionan con los anteriores directamente (*Reflux Ratio*, *Boilup Ratio*, etc.).

Cuando las columnas no contienen ni condensador ni reboiler, como es el caso del absorbedor, estos parámetros determinan directamente la cantidad de líquido que desciende por la columna y la cantidad de gas que circula hacia la parte superior de la torre. Estos parámetros no se corresponden exactamente con los parámetros L y V ó G que se emplean tradicionalmente en el diseño de equipos de contacto, ya que el líquido que desciende por la columna arrastra parte del gas disuelto y lo mismo ocurre en el caso del gas, parte del disolvente es arrastrado por este y condensa en la parte superior. Tampoco se mantienen constantes a lo largo de la columna como veremos más adelante con el dimensionamiento de equipos.

Realizamos una serie de análisis de sensibilidad para calcular el caudal óptimo de disolvente y el número de etapas necesarias. En el primer caso, nuestra variable (VARY 1) es el caudal de disolvente MEA en (kmol/h), y las variables afectadas el CO₂ a la salida (corriente CO₂-PURO) en la tercera columna, u en la cuarta el CO de la misma corriente. El objeto de este estudio es ver el rendimiento global del proceso de absorción para ambos compuestos. El caso del CO es una variable a tener en cuenta y que nos interesa que se absorba el mínimo posible compatible con una eficiencia de eliminación de CO₂ razonable.

Para hacer el análisis de sensibilidad se siguen los siguientes pasos.

- Entramos en Model Analysis Tools/Sensitivity.
- Definimos un nuevo bloque de sensibilidad, pulsando el botón New, nombrándolo, MEA.
- Se define como variable de sensibilidad, el contenido en CO₂ de la corriente de salida depurada (GAS-PURO), nombrándola CO₂, y la cantidad de CO de esta misma corriente nombrándola CO.
- Seleccionamos:
 - Categoría, *stream*.



- Tipo de corriente, *Stream*-va.
- Corriente GAS-PURO (corriente depurada).
- Variable MOLFLOWS MEA (flujo molar de la corriente de disolvente).

Los resultados del análisis de sensibilidad se muestran a continuación (Tabla 7.8).



Tabla 7.8. Resultados del análisis de sensibilidad del caudal de absorbente.

Statu s	VARY 1 MEA (kmol/hr)	CO ₂ (kmol/h)	CO (kmol/h)	1- CO ₂ /ENTRAD	CO/CO E
0	58000	278,429	2834,908	0,863	0,950
0	59000	257,506	2831,819	0,873	0,949
0	60000	237,329	2828,672	0,883	0,948
0	61000	217,938	2825,458	0,893	0,947
0	62000	199,376	2822,173	0,902	0,946
0	63000	181,687	2818,812	0,911	0,945
0	64000	164,912	2815,369	0,919	0,943
0	65000	149,089	2811,839	0,927	0,942
0	66000	134,250	2808,217	0,934	0,941
0	67000	120,422	2804,499	0,941	0,940
0	68000	107,622	2800,681	0,947	0,939
0	69000	95,856	2796,758	0,953	0,937
0	70000	85,121	2792,739	0,958	0,936
0	71000	75,390	2788,604	0,963	0,935
0	72000	66,632	2784,362	0,967	0,933
0	73000	58,804	2780,012	0,971	0,932
0	74000	51,848	2775,559	0,974	0,930
0	75000	45,705	2771,015	0,978	0,929
0	76000	40,298	2766,363	0,980	0,927
0	77000	35,560	2761,620	0,982	0,925
0	78000	31,419	2756,788	0,985	0,924
0	79000	27,808	2751,874	0,986	0,922
0	80000	24,662	2746,883	0,988	0,921
0	81000	21,922	2741,819	0,989	0,919
0	82000	19,536	2736,687	0,990	0,917
0	83000	17,456	2731,490	0,991	0,915
0	84000	15,640	2726,234	0,992	0,914
0	85000	14,052	2720,920	0,993	0,912

En la tabla anterior, la primera columna nos indica el estado de la simulación del análisis, de manera que cuando no se producen errores el *status* indica un valor 0. A la vista de los



resultados obtenidos, teniendo en cuenta las exigencias del proceso en cuanto a eliminación de CO₂, el caudal de absorbente necesario ronda los 62000 (kmol/h), con una eficiencia en torno al 90% molar.

A continuación realizamos un análisis de sensibilidad para calcular el número de etapas mínimo necesario en la torre para alcanzar la eficacia deseada. Para llevar a cabo el análisis de sensibilidad, el algoritmo del programa impone la condición de que el número de platos utilizado en el análisis sea menor que el introducido en la página inicial de configuración. Por tanto se toma una columna de 20 platos, entrando la alimentación en el primero, para así hacer el análisis de sensibilidad para $2 \leq \text{NSTAGE} \leq 19$.

Para hacer el análisis de sensibilidad se siguen los siguientes pasos.

- Entramos en Model Analysis Tools/Sensitivity.
- Definimos un nuevo bloque de sensibilidad, pulsando el botón New, nombrándolo, ALTURA.
- Se define como variable de sensibilidad, el contenido en CO₂ de la corriente de salida depurada (GAS-PURO), nombrándola CO₂, y la cantidad de CO de esta misma corriente nombrándola CO.
- Seleccionamos:
 - Categoría, *stream*.
 - Tipo de corriente, *Stream-va*.
 - Corriente GAS-PURO (corriente depurada).
 - Variable NSTAGE (número de etapas).

En la Tabla 7.9 se muestran los resultados del análisis de sensibilidad respecto al número de etapas. Los resultados se muestran a continuación:



Tabla 7.9. Resultados del análisis de sensibilidad para el número de etapas.

Statu s	VARY 1 NSTAGE	CO (kmol/h)	CO ₂ (kmol/h)	1- CO ₂ /ENTRAD
0	2	2789,295	85,016	0,93815
0	3	2792,443	85,115	0,94820
0	4	2792,653	85,157	0,95808
0	5	2792,684	85,146	0,95809
0	6	2792,710	85,140	0,95809
0	7	2792,736	85,144	0,95809
0	8	2792,730	85,130	0,95809
0	9	2792,730	85,122	0,95810
0	10	2792,728	85,119	0,95810
0	11	2792,745	85,124	0,95810
0	12	2792,745	85,124	0,95810
0	13	2792,745	85,124	0,95810
0	14	2792,746	85,127	0,95810
0	15	2792,747	85,124	0,95810
0	16	2792,751	85,122	0,95810
0	17	2792,743	85,123	0,95810
0	18	2792,739	85,119	0,95810
0	19	2792,749	85,125	0,95810
0	20	2792,756	85,138	0,95809

Los resultados anteriores muestran como depende el rendimiento de absorción del número de etapas, es decir como podemos comprobar en la última columna, los rendimientos de absorción verían del orden del cuarto decimal a partir de la cuarta etapa, es decir, como se trata de rendimiento (multiplicamos por 100), a partir de la cuarta etapa teórica el rendimiento se mantiene prácticamente constante (95,81%). Pasamos por tanto del 93,815% con dos etapas (recordemos que nuestra fuerza impulsora es muy grande ya que trabajamos a muy alta presión), al 95,8% en la tercera etapa, y como hemos indicado anteriormente, deja de variar significativamente a partir del cuarto contacto teórico. Para que pueda apreciarse mejor hemos dejado la última columna incluyendo más decimales.



Concluimos que con la suposición de aproximación al equilibrio, serían necesarias 3 etapas teóricas para alcanzar nuestros objetivos. Con estos resultados probamos con otros modelos.

MODELO KMEA

Las condiciones de validez del método, mostradas en la carpeta **Setup/Specifications/Description** son las siguientes:

H₂O-MEA-H₂S-CO₂

Property method: SYSOP15M with kinetic consideration.

Teniendo en cuenta las reacciones generales mostradas, las consideraciones de equilibrio que presenta el modelo para la Ecuación 7.6, son las siguientes (Cuadro 7.2):

Cuadro 7.2. Términos de la constante de equilibrio.

REACCIÓN	1	2	3	4	5
A	132,9	98,57	216,05	-3,04	-0,52
B	-13445,9	1353,8	-12431,7	-70083570	-2545,53
C	-22,48	-14,3	-35,48	0	0
D	0	0	0	0	0

En este modelo se tienen en cuenta consideraciones cinéticas para las reacciones (2) y (3) que involucran el compuesto que tenemos que eliminar. Los datos referentes al modelo cinético (Ecuación 7.7), se muestran a continuación (Cuadro 7.3).

$$r = k \left(\frac{T}{T_0} \right)^n e^{\left(\frac{E_R}{R} \right) \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)}$$

(Ecuación 7.7)



Cuadro 7.3. Datos cinéticos.

REACCIÓN	1	2
k	4,31E13	3,45E14
n	0	0
E (cal/mol)	13249	25271,56

Los resultados obtenidos en la simulación son los mostrados a continuación (Tabla 7.10).

Como podemos ver en la tabla anterior, los resultados no varían mucho con respecto al anterior modelo. También aparece el sulfuro de hidrógeno en el modelo, ya que contempla la absorción simultánea de ambos compuestos.



	GAS	GAS-PURO	MEA	MEA-RICA
Mole Flow kmol/hr				
H2O	37,42	123,67	65996,28	65640,21
MEA	0,00	0,02	3971,48	528,38
SH2	0,00	0,00	0,00	0,00
CO2	2031,48	92,90	0,00	72,24
HCO3-	0,00	0,00	0,00	273,53
MEACOO-	0,00	0,00	0,00	1580,44
MEA+	0,00	0,00	16,12	1878,77
CO3-2	0,00	0,00	0,00	12,38
H3O+	0,00	0,00	0,00	0,00
OH-	0,00	0,00	16,12	0,04
H2	3002,00	3002,00	0,00	0,00
CO	2984,00	2520,10	0,00	463,90
METHA-01	64,00	2,83	0,00	61,17
Mole Frac				
H2O	4,6E-03	0,022	0,943	0,931
MEA	0	2,7E-06	0,057	7,5E-03
SH2	0	0	0	0
CO2	0,250	0,016	0	1,0E-03
HCO3-	4,67E-09	0	0	3,9E-03
MEACOO-	0	0	0	0,022
MEA+	0	0	2,30E-04	0,027
CO3-2	0E+00	0	0	1,8E-04
H3O+	4,7E-09	0	7,4E-14	9E-10
OH-	2,7E-15	0	2,3E-04	6E-07
H2	0,370	0,523	0	5,4E-08
CO	0,368	0,439	0	6,6E-03
METHA-01	0,008	0,000	0	8,7E-04
Total Flow kmol/hr	8118,91	5741,51	70000	70511,05
Total Flow kg/hr	180741,00	83003,67	1432810	1530490,00
Total Flow l/min	225671	180460	22656	26847,46
Temperature K	305,22	344,74	313,00	341,90
Pressure bar	15,00	15,00	15,00	15,00



Vapor Frac	1,00	1,00	0,00	0,00
------------	------	------	------	------

Tabla 7.10. Resultados del absorbedor. Modelo *kmea*.

Los datos de operación del absorbedor se muestran a continuación (Tabla 7.11):

Tabla 7.11. Resultados del absorbedor.

PLATO SUPERIOR	
T (K)	344,74
Distillate rate (kmol/h)	5741,51
Reflux rate (kmol/h)	70606,88
Reflux ratio	12,30
FONDO	
T (K)	341,90
Bottoms rate (kmol/h)	70511,05
Boilup rate (kmol/h)	8212,10
Boilup ratio	0,12

En este modelo repetimos como en el caso anterior los análisis de sensibilidad respecto al caudal de disolvente dio como resultado que el caudal necesario para cumplir las especificaciones a la salida se situaba en torno a los 63.000 (kmol/h). Los datos se muestran en la Tabla 7.12.



Status	VARY 1 MEA (kmol/hr)	T (K)	CO (kmol/hr)	CO ₂ (kmol/hr)	1-CO ₂ /ENTRAD
0	53000	348,00	2644,05	405,42	0,800
0	54000	347,87	2637,42	381,30	0,812
0	55000	347,73	2630,72	357,72	0,824
0	56000	347,59	2623,96	334,71	0,835
0	57000	347,44	2617,13	312,29	0,846
0	58000	347,28	2610,24	290,50	0,857
0	59000	347,12	2603,27	269,40	0,867
0	60000	346,95	2596,21	249,00	0,877
0	61000	346,77	2589,07	229,37	0,887
0	62000	346,58	2581,84	210,53	0,896
0	63000	346,38	2574,51	192,53	0,905
0	64000	346,17	2567,08	175,41	0,914
0	65000	345,96	2559,55	159,21	0,922
0	66000	345,73	2551,89	143,96	0,929
0	67000	345,50	2544,13	129,69	0,936
0	68000	345,25	2536,24	116,42	0,943
0	69000	345,00	2528,22	104,16	0,949
0	70000	344,74	2520,08	92,90	0,954
0	71000	344,46	2511,81	82,64	0,959
0	72000	344,18	2503,42	73,35	0,964
0	73000	343,90	2494,90	64,99	0,968
0	74000	343,60	2486,26	57,51	0,972
0	75000	343,30	2477,51	50,86	0,975
0	76000	343,00	2468,64	44,97	0,978
0	77000	342,69	2459,76	39,79	0,980
0	78000	342,38	2450,64	35,22	0,983
0	79000	342,07	2441,50	31,22	0,985
0	80000	341,76	2432,27	27,72	0,986
0	81000	341,45	2422,97	24,66	0,988
0	82000	341,15	2413,59	21,98	0,989
0	83000	340,84	2404,15	19,64	0,990
0	84000	340,54	2394,65	17,59	0,991
0	85000	340,24	2385,09	15,79	0,992



Tabla 7.12. Resultados del análisis de sensibilidad para el caudal de disolvente.

En este caso, en la segunda columna aparece el perfil de temperatura dependiendo del caudal de disolvente (corriente MEA). Los resultados son similares al caso *emea*, aunque observamos que los rendimientos son inferiores para el mismo caudal de absorbente si se comparan con el modelo anterior y sitúa el caudal de absorbente necesario en torno a los 63.000 kmol/h, como indicamos anteriormente.

Como en el caso anterior, el análisis de sensibilidad del rendimiento de eliminación con respecto al número de etapas produce los mismos resultados, de manera que bastaría con incluir entre tres y cuatro etapas teóricas para alcanzar los objetivos propuestos.

7.2.2.2 PLANTILLA ELECTROLYTES

Realizamos pruebas de diseño con esta plantilla ya que es la recomendada para el caso de diseño de la columna de stripping, además nos ofrece la posibilidad de trabajar con componentes aparentes, lo cual permite simplificar los cálculos y reducir el número de variables a converger.

Las condiciones de validez del modelo son las siguientes:

Electrolytes Simulation with Metric Units : °C, bar, kg/hr, kmol/hr, MMkcal/hr, cum/hr.

Property Method: ELECNRTL.

Flow basis for input: Mass.

Stream report composition: Mass flow.

La simulación se realizó como en los casos anteriores con una aproximación al equilibrio de 7,7°. Los resultados obtenidos son los mostrados en la Tabla 7.13.



Tabla 7.13. Resultados del modelo *Electrolytes*.

	GAS	GAS-PURO	MEA	MEA-RICA
Temperature C	32,2	40	40	71,5
Pressure bar	15	15	15	15
Vapor Frac	0,999	1	0	0
Mole Flow kmol/hr	8118,91	5819,70	65000,00	65285,38
Mass Flow kg/hr	180740,86	84691,47	1330470	1426520
Volume Flow cum/hr	13629,95	10146,38	1329,99	1513,11
Mole Flow kmol/hr				
H2O	37,424	28,496	61282,088	60765,515
CO2	2031,484	0,000	0,000	17,656
CO	2984,000	2789,134	0,000	194,866
H2	3002,000	3001,997	0,000	0,003
METHA-01	64,000	0,058	0,000	63,942
MEA	0,000	0,012	3687,636	202,36
MEA+	0,000	0,000	15,138	2027,19
H3O+	0,000	0,000	0,000	0,000
MEACOO-	0,000	0,000	0,000	1473,20
HCO3-	0,000	0,000	0,000	527,27
OH-	0,000	0,000	15,138	0,015
CO3--	0,000	0,000	0,000	13,353
Mole Frac				
H2O	0,005	0,005	0,943	0,931
CO2	0,250	0,000	0,000	0,000
CO	0,368	0,479	0,000	0,003
H2	0,370	0,516	0,000	0,000
METHA-01	0,008	0,000	0,000	0,001
MEA	0,000	0,000	0,057	0,003
MEA+	0,000	0,000	0,000	0,031
H3O+	0,000	0,000	0,000	0,000
MEACOO-	0,000	0,000	0,000	0,023
HCO3-	0,000	0,000	0,000	0,008
OH-	0,000	0,000	0,000	0,000
CO3--	0,000	0,000	0,000	0,000



Si nos fijamos en la fila resaltada con un fondo más oscuro, vemos que el rendimiento de eliminación del CO₂ es del 100% en la corriente GAS-PURO, lo cual no parece muy realista. Por ello optamos por emplear eficiencia de plato teórico en vez de aproximación al equilibrio como en los modelos anteriores. En las referencias bibliográficas consultadas, se habla de una eficiencia de plato teórica de entre el 15-70%. En los casos en los que se opera a bajas presiones, en torno a 1,5 bar o inferiores, las eficiencias se sitúan en torno a 18-20%. En los casos en los que trabajemos con presiones superiores, las eficiencias de plato pueden considerarse superiores. En el caso que nos ocupa, la presión de operación en el absorbedor es muy elevada, y podemos considerar una eficiencia en torno 60-70% (Eficiencia de Murphree).

Con lo expuesto anteriormente, consideramos por tanto 10 etapas teóricas iniciales y una eficiencia de etapa del 62%. En la Tabla 7.14 aparecen los resultados de la simulación del absorbedor con este modelo. Ajustamos el caudal de absorbente a 62.000 kmol/h teniendo en cuenta los resultados obtenidos con las plantillas anteriores y los análisis de sensibilidad realizados.

A continuación realizamos un análisis de sensibilidad para ver como varía el rendimiento de absorción tanto de CO₂ como de CO, respecto al número de etapas teóricas. Los resultados se muestran a continuación (Tabla 7.15). En las dos primeras columnas se indica el flujo molar de ambos componentes en la corriente de salida del absorbedor (GAS-PURO). la última columna indica la fracción molar de CO₂ en dicha corriente.



Tabla 7.14. Resultados de la simulación.

	GAS	GAS-PURO	MEA	MEA-RICA
MoleFlow kmol/hr				
WATER	37,42	38,41	58453,63	57858,12
MEA	0,0	0,02	3517,39	165,75
CO2	2031,48	20,07	0,00	29,59
HCO3-	0,0	0,00	0,00	597,55
MEACOO-	0,0	0,00	0,00	1372,82
MEA+	0,0	0,00	14,49	1993,29
CO3-2	0,0	0,00	0,00	11,45
H3O+	0,0	0,00	0,00	0,00
OH-	0,0	0,00	14,49	0,01
HYDRO-01	3002	3002,00	0,00	0,00
CARBO-01	2984	2818,14	0,00	165,86
METHA-01	64	15,09	0,00	48,91
Mole Frac				
WATER	4,61E-3	6,52E-03	0,94	0,93
MEA	0,0	2,68E-06	0,06	0,00
CO2	0,250	3,41E-03	0,00	0,00
HCO3-	4,18E-9	0,0	0,00	0,01
MEACOO-	0,0	0,0	0,00	0,02
MEA+	0,0	0,0	0,00	0,03
CO3-2	0,0	0,0	0,00	0,00
H3O+	4,18E-9	0,0	0,00	0,00
HYDRO-01	0,37	0,509	0,00	0,00
CARBO-01	0,37	0,478	0,00	0,00
METHA-01	7,88E-3	2,6E-03	0,00	0,00
Total Flow kmol/hr	8118,91	5893,73	62000,00	62243,36
Total Flow kg/hr	1,80741E+5	86807,37	1269060	1362980
Total Flow l/min	2,24063E+5	1,7E+05	21277,52	24097,03
Temperature K	305,22	315,80	315,00	347,40
Pressure bar	15	15	15	15



Tabla 7.15. Análisis de sensibilidad respecto al número de etapas en el absorbedor.

Status	VARY 1 NSTAGE	CO (kmol/h)	CO ₂ (kmol/h)	CO ₂ GAS-PURO (MOLE FRAC)
0	2	2649,411	1160,573	0,168
0	3	2678,272	922,961	0,138
0	4	2707,859	739,747	0,113
0	5	2730,717	545,893	0,093
0	6	2747,715	482,125	0,076
0	7	2760,557	391,744	0,063
0	8	2770,620	319,616	0,052
0	9	2770,792	261,710	0,043
0	10	2785,613	214,9	0,035

A la vista de los resultados, en la tabla anterior hemos resaltado con un fondo más oscuro el mínimo número de etapas teóricas necesarias para obtener un rendimiento de eliminación de CO₂ acorde con las especificaciones. En cuanto al CO, el % molar a la salida se sitúa en torno al 90-92 %, lo que significa que se absorbe entre un 8-10% molar del monóxido de carbono a la entrada, lo que supone una pérdida por absorción aceptable. Este resultado está de acuerdo con el valor expuesto en la referencia bibliográfica [8], que sitúa el número de etapas teóricas necesarias, dependiendo de la eficiencia de etapa, en torno a 4,6.

Teniendo en cuenta las reacciones generales mostradas, las consideraciones de equilibrio que presenta el modelo para la Ecuación 7.6 son las mismas que en el modelo emea (Cuadro 7.1).

En la Tabla 7.16 aparecen los datos de operación del prediseño de absorbedor, para 4 etapas teóricas.



Tabla 7.16. Datos de diseño del absorbedor.

PLATO SUPERIOR	
T (°C)	42,80
Distillate rate (kmol/h)	5895,72
Reflux rate (kmol/h)	62546,28
Reflux ratio	10,612
FONDO	
T (°C)	74,40
Bottoms rate (kmol/h)	62243,35
Boilup rate (kmol/h)	7520,30
Boilup ratio	0,121

Adoptamos este modelo a partir de ahora en vista de los resultados y considerando la ventaja de que podemos trabajar con componentes reales o aparentes, según nos convenga.



7.3 STRIPPER

La torre de desorción se modeló como el caso anterior empleando *RadFrac*. Para el prediseño tomamos los datos de salida de la corriente MEA-RICA y adaptamos la temperatura a las condiciones de trabajo del equipo. Los datos de diseño iniciales se introdujeron en base a los que se recuperaron de la bibliografía. Los más representativos se presentan a continuación (Tabla 7.17).

Tabla 7.17. Datos de diseño bibliográficos del stripper.

DATOS DE DISEÑO	
Nº etapas	13
Reboiler	kettle
Kg vapor/kg CO ₂	1,9-2,1
Consumo energía (MJ/kg CO ₂)	3,8-5,2
T (°C)	100-120
P (bar)	0,8-2,3
Eficiencia de etapa	70-75%
Regeneración %	80-98

Las características de la corriente de entrada (MEA-RH) son las mostradas en la Tabla 7.18.



Tabla 7.18. Datos de la corriente de entrada al equipo.

COMPONENTE	Kmol/h
WATER	58030,08
MEA	333,67
CO ₂	63,59
HCO ₃ ⁻	338,86
MEACOO ⁻	1418,78
MEA ⁺	1779,42
CO ₃ ²⁻	10,88
OH ⁻	0,02
HYDRO-01	0,00
CARBO-01	161,82
METHA-01	36,81
TOTAL	62173,92
T (°C)	105
P (bar)	1,3

Para realizar la simulación es necesario estimar una serie de parámetros de diseño. Para el caso del diseño del stripper, empleamos la herramienta de diseño *Design Specification* para calcular la relación de reflujo (entre 0 y 50) y el caudal de vapor necesario (entre 1000 y 100000 kmol/h), para un contenido de CO₂ a la salida de un 0,01 en peso (*mass purity*) en la corriente de salida del stripper (MEA-LEAN), que se corresponde con una regeneración de dicha corriente en torno al 98%. En la Tabla 7.19 se muestran estos datos de diseño introducidos en el equipo y el resultado de la especificación de diseño introducida para estimar el valor de estos parámetros (Reflux ratio y Boil-up rate):



Tabla 7.19. Datos de entrada al stripper.

ESPECIFICACIONES DE ENTRADA	
Nº etapas teóricas	13
Condensador	Parcial-vapor
Reboiler	kettle
Eficiencia de etapa	70 %
Convergencia	Strongly-non-ideal
Reflux ratio (mol)	8,59
Boil-up rate (kmol/h)	34960,49
P (bar)	1,3
Plato de alimentación	3

Introducimos los resultados anteriores y los resultados son los mostrados en las siguientes tablas (Tablas 7.20, 7.21 y 7.22):

Tabla 7.20. Resultados de diseño del stripper

PLATO SUPERIOR	
T (K)	363
Distillate rate (kmol/h)	4069,81
Reflux rate (kmol/h)	34950,92
Reflux ratio	8,59
FONDO	
T (K)	382,58
Bottoms rate (kmol/h)	59746,61
Boilup rate (kmol/h)	34960,48
Boilup ratio	0,59
Heat Duty (MMkcal/h)	339,84



Tabla 7.21. Perfiles en las etapas de stripping

Stage	Temperature	Pressure	Heat duty	Liquid flow	Vapor flow
	K	bar	cal/sec	kmol/hr	kmol/hr
1	363	1,3	-97059769	34950,9	4069,8
2	379,22	1,3	0	35929,3	39021,1
3	381,00	1,3	0	93597,6	33389,3
4	381,43	1,3	0	94021,5	34336,6
5	381,58	1,3	0	94219,4	34599,3
6	381,65	1,3	0	94336,5	34717,5
7	381,69	1,3	0	94417,2	34786,2
8	381,72	1,3	0	94479,8	34833,0
9	381,74	1,3	0	94533,5	34869,1
10	381,76	1,3	0	94584,3	34899,9
11	381,78	1,3	0	94637,2	34928,9
12	381,81	1,3	0	94665,5	34958,7
13	382,58	1,3	94398677,6	59746,6	34960,5



Tabla 7.22. Resultados de las corrientes del stripping.

Substream: MIXED	CO2	MEA -LEAN	MEA -RH
Mole Flow kmol/hr			
WATER	2165,11	56206,08	58294,47
MEA	0,00	3285,30	1503,33
CO2	1706,07	0,02	777,04
HCO3-	0,00	6,65	81,73
MEACOO-	0,00	118,56	969,84
MEA+	0,00	128,01	1058,70
CO3-2	0,00	0,80	3,50
H3O+	0,00	0,00	0,00
OH-	0,00	1,19	0,14
HYDRO-01	0,00	0,00	0,00
CARBO-01	161,82	0,00	161,82
METHA-01	36,81	0,00	36,81
Mole Frac			
WATER	0,532	0,941	0,927
MEA	0,000	0,055	0,024
CO2	0,419	0,000	0,012
HCO3-	0,000	0,000	0,001
MEACOO-	0,000	0,002	0,015
MEA+	0,000	0,002	0,017
CO3-2	0,000	0,000	0,000
H3O+	0,000	0,000	0,000
OH-	0,000	0,000	0,000
HYDRO-01	0,000	0,000	0,000
CARBO-01	0,040	0,000	0,003
METHA-01	0,009	0,000	0,001
Total Flow kmol/hr	4069,81	59746,61	62887,37
Total Flow kg/hr	119212	1234010	1353210
Total Flow l/min	1544150	21812,05	2635980
Temperature K	363	382,58	378
Pressure bar	1,30	1,30	1,30
Vapor Frac	1,00	0,00	0,11



En la siguiente tabla (Tabla 7.23) se muestran los resultados de las especificaciones de diseño introducidas.

Tabla 7.23. Resultados de las especificaciones de diseño.

ESPECIFICACIONES DE DISEÑO		
Tipo	Mass purity	Temperatura (K)
Especificación	0,005	365
Valor calculado	0,005	363,001
Error	-1,413e-06	-1,151e-03
Component	MEACOO-	Plato 1
VARIABLE		
Tipo	Boiluprate(Kmol/hr)	Reflux ratio
Límite Inferior	1000	1
Límite Superior	100000	50
Valor final	68436,145	14,4

Si tenemos en cuenta los resultados obtenidos respecto al caudal de vapor:

$$68436,1448 \times 18 = 1231850,6 \text{ kg/h de vapor}$$

$$\text{kg vapor/kg CO}_2 = 1231850,6 / 89405,2235 = 13,778$$

Considerando los datos aportados en la Tabla 7.15, este resultado es muy superior a los valores indicados (1,9-2,1). Hay que tener en cuenta que se trata de una aproximación ya que este dato se refiere a los kg de vapor aportados al reboiler, que no son muy diferentes al caudal de vapor que sale del reboiler, por ello hemos realizado este cálculo aproximado. En los resultados disponemos del valor del boil-up rate y no de los kg de vapor consumidos. En vista de los resultados, necesitamos mejorar el diseño posteriormente.



Para manejar datos más concretos, si nos dirigimos de nuevo a la Tabla 7.15, se sitúa el consumo de energía del reboiler entre 3,8 y 5,2, MJ/ kg CO₂, típicamente 4,9. Este valor si es aportado directamente en la tabla de resultados, en nuestro caso:

$$1436325 \text{ MJ/h} / 89405,2235 \text{ kg/h CO}_2 = 16,06 \text{ MJ/ kg CO}_2$$

Comprobamos por tanto de una manera más exacta que debemos modificar el diseño y no ser tan exigentes en la regeneración del absorbente. Si relajamos las exigencias en cuanto a cantidad de MEA regenerada, permitiendo así que la corriente resultante de la desorción contenga más CO₂, el consumo de vapor y por tanto los requerimientos energéticos serán menores.

Con estos datos iniciales de los equipos principales realizamos el prediseño del resto de los equipos que componen la planta. En un principio seleccionamos la opción del modelo *emea* a pesar de considerar el sistema de absorción con la presencia del SH₂, ya que presenta los mismos datos de equilibrio del el modelo *electrolytes*. Posteriormente en la simulación de la planta completa optaremos por este último modelo ya que nos permitirá simplificar el procedimiento de convergencia.

7.3.1 CONDENSADOR

El condensador está situado a la salida de la torre de desorción y su función es principalmente la de condensar la mayor parte del vapor de agua arrastrado por la corriente depurada de contaminante (corriente CO₂). La corriente de agua condensada (WATER) se introduce de nuevo en la torre en un plato superior al de la alimentación líquida.

Para el condensador de la torre de stripping empleamos el modelo de separador *Flash 2*. Se trata de un separador de 2 salidas, por arriba saldrá la fase gas y por abajo la líquida. Este tipo de separador impone sus propias condiciones no viéndose afectado por las condiciones de su corriente de entrada. Las condiciones de operación impuestas en el prediseño fueron una temperatura de 45 °C y una caída de presión de 0 bar.



Para encontrar la temperatura óptima de condensación de la corriente realizamos un análisis de sensibilidad para calcular la temperatura a la cual se producía la condensación de prácticamente el contenido en agua de la corriente gaseosa. Además realizamos también análisis de sensibilidad para ver como influía la variación del plato de alimentación de esta corriente a la operación global y las condiciones de operación del stripper, y los resultados obtenidos mostraban que el caudal de condensado era pequeño en comparación con los caudales de trabajo del equipo y no ejercía una influencia representativa. En la bibliografía se recomendaba alimentar la corriente en el plato superior y seguimos las recomendaciones.

Los parámetros del análisis de sensibilidad se muestran a continuación.

- Definimos un nuevo bloque de sensibilidad , nombrándolo, COND.
- Se definen como variables de sensibilidad, el contenido en agua, fracción másica de la corriente de salida depurada (CO2-PURO), nombrándola WM y el flujo molar (W) de la corriente WATER.
- Seleccionamos:
 - Categoría, *block-var*.
 - Bloque COND.
 - Variable TEMP (temperatura de condensación).

Los resultados se muestran a continuación (Tabla 7.24)



Tabla 7.24. Análisis de sensibilidad respecto a la temperatura del condensador.

Statu s	VARY 1	W	WM
	COND TEMPERATURE K	Kmol/h	
0	313	2342,20	0,0250
0	314	2334,74	0,0264
0	315	2326,86	0,0278
0	316	2318,56	0,0294
0	317	2309,82	0,0310
0	318	2300,60	0,0327
0	319	2290,88	0,0345
0	320	2280,63	0,0364
0	321	2269,83	0,0384
0	322	2258,45	0,0405
0	323	2246,45	0,0426
0	324	2233,79	0,0449
0	325	2220,44	0,0473
0	326	2206,37	0,0498
0	327	2191,52	0,0525
0	328	2175,84	0,0552
0	329	2159,30	0,0581
0	330	2141,84	0,0612
0	331	2123,39	0,0644
0	332	2103,90	0,0677
0	333	2083,30	0,0712
0	334	2061,52	0,0749
0	335	2038,47	0,0788
0	336	2014,07	0,0828
0	337	1988,22	0,0871
0	338	1960,83	0,0916

Trabajando a una temperatura en torno a los 318 K (45 °C), conseguimos una eliminación de agua razonable, en torno al 0,075 % molar (0,035% másico) de acuerdo con los datos bibliográficos. Tenemos que tener en cuenta que en nuestra planta no consideramos la



purificación de la corriente de dióxido de carbono. Los resultados obtenidos tras la simulación del bloque se muestran a continuación (Tabla 7.25).

Tabla 7.25. Resultados de las corrientes del condensador.

	CO2	CO2-PURO	WATER
Temperature K	364,5	318	318
Pressure bar	1,3	1,3	1,3
Mass Flow kg/hr	124419,30	82909,82	41509,49
Volume Flow l/min	1659660,00	683616,41	700,73
Mole Flow kmol/hr			
WATER	2451,23	150,63	2300,6
MEA	0,000	0,000	0,000
CO2	1707,18	1706,21	0,967
HCO3-	0,000	0,000	0,005
MEACOO-	0,000	0,000	0,000
MEA+	0,000	0,000	0,000
CO3-2	0,000	0,000	0,000
H3O+	0,000	0,000	0,005
OH-	0,000	0,000	0,000
HYDRO-01	0,002	0,002	0,000
CARBO-01	162,17	161,86	0,30
METHA-01	36,43	35,67	0,76
Mole Frac			
WATER	0,563	0,073	0,999
MEA	0,000	0,000	0,000
CO2	0,392	0,831	0,000
HCO3-	0,000	0,000	0,000
MEACOO-	0,000	0,000	0,000
MEA+	0,000	0,000	0,000
CO3-2	0,000	0,000	0,000
H3O+	0,000	0,000	0,000
HYDRO-01	0,000	0,000	0,000
CARBO-01	0,037	0,079	0,000
METHA-01	0,008	0,017	0,000



Los datos de diseño del equipo se muestran en la Tabla 7.26. En la Tabla 7.27 aparece el perfil de fases del separador (equilibrio líquido-vapor).

Tabla 7.26. Datos de diseño del condensador.

T de salida (K)	318
P salida (bar)	1,3
Fracción de vapor	0,47
Heat Duty (MMkcal/h)	-25,43

Tabla 7.27. Resultados del equilibrio de fases en el condensador.

Component	F	X	Y	K
WATER	0,563	0,999	0,073	0,073
MEA	0,000	0,000	0,000	0,000
CO2	0,392	0,000	0,831	1977,326
HCO3-	0,000	0,000	0,000	0,000
MEACOO-	0,000	0,000	0,000	0,000
MEA+	0,000	0,000	0,000	0,000
CO3-2	0,000	0,000	0,000	0,000
H3O+	0,000	0,000	0,000	0,000
OH-	0,000	0,000	0,000	0,000
HYDRO-01	0,000	0,000	0,000	140838582
CARBO-01	0,037	0,000	0,079	602,064
METHA-01	0,008	0,000	0,017	52,45



7.4 INTERCAMBIADOR Y VÁLVULA

La válvula reductora de presión de la corriente MEA-RICA se emplea para adaptar la presión de la corriente a las condiciones de entrada del stripper. Para este bloque seleccionamos la opción **Pressure Changers** y pinchamos la opción *Valve*.

La presión de trabajo seleccionada no es la presión de trabajo de la columna de desorción ya que a esta última presión la corriente a tratar no alcanzaba la temperatura de trabajo a la entrada de la columna. Por ello seleccionamos una presión superior a la presión de la torre de manera que tras el intercambio de calor con la corriente regenerada, la corriente MEA-RICA alcance una temperatura de trabajo apropiada.

Realizamos un análisis de sensibilidad de manera que variamos la presión de la corriente (presión de descarga de la válvula), y analizamos la temperatura de salida de esta corriente tras el intercambiador. A partir de un valor de la presión en torno a los 3 bar, podíamos alcanzar una temperatura adecuada para la desorción en el stripper. Esta temperatura es superior a la de trabajo en la columna, pero no influye negativamente en la operación, ya que al entrar en esta "flashea".

Para el caso del intercambiador de calor entre las corrientes de salida del stripper y del absorbedor, empleamos el modelo *Heater* en una primera aproximación para calcular el calor necesario intercambiar para alcanzar la temperatura de trabajo en el stripper, asumiendo un 25% de pérdidas, según las recomendaciones bibliográficas. Con el resultado de la simulación obtuvimos los datos necesarios para realizar el prediseño. Como comentamos en el capítulo anterior, empleamos la opción *HeatX* y seleccionamos *Shortcut* para realizar un cálculo abreviado.

Los resultados son los mostrados a continuación (Tabla 7.28).



Tabla 7.28. Resultados térmicos del intercambiador.

	ENTRADA	SALIDA
LADO CALIENTE	MEA-LEAN	MEA-L
T (K)	382,58	342,06
P (bar)	1,3	1,3
Fracción de vapor	0	0
LADO FRÍO	MEA-R	MEA-RH
T (K)	340,59	374,93
P (bar)	3	3
Fracción de vapor	0,0021	0,01
Calor intercambiado (cal/s)	12999990,6	
DLTM (K)	3,76	

Los resultados de las corrientes del sistema se muestran a continuación (Tabla 7.29).



Tabla 7.29. Resultados de las corrientes en el bloque EXCHANGE.

	MEA-R	MEA-LEAN	MEA-L	MEA-RH
Temperature K	340,6	382,6	342,1	374,9
Pressure bar	3	1,3	1,3	3
Vapor Frac	0,002	0,000	0,000	0,010
Mass Flow kg/hr	1,3532E+6	1,23402E+6	1,23402E+6	1,3532E+6
Volume Flow l/min	44221,23	21812,3	21101,5	129474,06
Mole Flow kmol/hr				
WATER	57999,89	56206,78	56207,45	58127,38
MEA	294,89	3285,24	3282,01	650,41
CO2	29,65	0,021	0,001	267,49
HCO3-	367,96	6,65	3,69	247,83
MEACOO-	1422,53	118,59	119,50	1312,20
MEA+	1814,44	128,04	130,35	1569,26
CO3-2	11,96	0,804	2,873	4,59
H3O+	0,000	0,000	0,000	0,000
OH-	0,022	1,194	1,419	0,049
HYDRO-01	0,002	0,000	0,000	0,002
CARBO-01	161,86	0,00	0,00	161,86
METHA-01	35,67	0,00	0,00	35,67
Mole Frac				
WATER	0,933	0,941	0,941	0,932
MEA	0,005	0,055	0,055	0,010
CO2	0,000	0,000	0,000	0,004
HCO3-	0,006	0,000	0,000	0,004
MEACOO-	0,023	0,002	0,002	0,021
MEA+	0,029	0,002	0,002	0,025
CO3-2	0,000	0,000	0,000	0,000
H3O+	0,000	0,000	0,000	0,000
OH-	0,000	0,000	0,000	0,000
HYDRO-01	0,000	0,000	0,000	0,000
CARBO-01	0,003	0,000	0,000	0,003
METHA-01	0,001	0,000	0,000	0,001



7.5 EQUIPOS AUXILIARES

7.5.1 REFRIGERADOR

El refrigerador (bloque COOLER) lleva la corriente agotada tras la salida de la purga (MEA-P) hasta la temperatura de trabajo de la torre de absorción. Para modelar este bloque empleamos la opción *Heater* del menú de bloques **Heat Exchangers**.

Las especificaciones introducidas fueron una temperatura de salida de 40°C y una presión de 1,3 bar.

7.5.2 BOMBA

La bomba está situada a la salida del refrigerador y eleva la presión de la corriente de salida del bloque anterior (MEA-LC), con el objeto de adaptar su presión a las condiciones de trabajo del absorbedor. Para modelar este bloque (PUMP), seleccionamos la opción *Pump* del menú **Pressure Changers**.

Las condiciones de operación del equipo se muestran a continuación (Tabla 7.30):

Tabla 7.30. Resultados de la bomba.

DATOS DE DISEÑO	
Discharge pressure (bar)	15
Pump efficiency	0,9
Driver efficiency	0,99
Fluid power (kW)	495,33
Brake power(kW)	550,36
Electricity (kW)	555,92
Volumetric flow rate (m ³ /h)	1301,59
Pressure charge (bar)	13,70
NPSH available (m)	12,71
Head Developer (m)	141,51
Net work (kW)	555,92



Los resultados de la corriente de salida son los siguientes (Tabla 7.31):

Tabla 7.31. Resultados de la corrientes del bloque PUMP.

	MEA-LC	MEA-IN
Temperature °C	40,0	40,1
Pressure bar	1,3	15
Vapor Frac	0,0	0,0
Mole Flow kmol/hr	62363,47	62363,47
Mass Flow kg/hr	1290204,4	1290204,4
Volume Flow cum/hr	1310,524	1309,98
Mole Flow kmol/hr		
WATER	58268,42	58268,42
MEA	3529,36	3529,36
CO2	565,69	565,69
HCO3-	0,000	0,000
MEACOO-	0,000	0,000
MEA+	0,000	0,000
CO3--	0,000	0,000
H3O+	0,000	0,000
HYDRO-01	0,000	0,000
CARBO-01	0,000	0,000
METHA-01	0,000	0,000
Mole Frac		
WATER	0,937	0,937
MEA	0,057	0,057
CO2	0,007	0,007
HCO3-	0,000	0,000
MEACOO-	0,000	0,000
MEA+	0,000	0,000
CO3--	0,000	0,000
H3O+	0,000	0,000
HYDRO-01	0,000	0,000
CARBO-01	0,000	0,000
METHA-01	0,000	0,000



7.5.3 MEZCLADOR Y PURGA

El mezclador (MAKE-UP) que aparece en la planta, mezcla la corriente de salida de la bomba antes de entrar en la torre de absorción con una corriente de acondicionamiento de la solución con objeto de adaptar la relación agua-MEA a las condiciones de trabajo de la columna, ya que en el transcurso de la operación se producen pérdidas de disolvente. Junto con la purga (PURGE), acondiciona la corriente de disolvente. Realizamos una purga de la corriente de salida del intercambiador MEA-L, con el fin de eliminar los posibles inertes del sistema y evitar su acumulación. Además, la regeneración completa del absorbente supone un consumo energético muy elevado, y en la práctica no se lleva hasta el 100%, de manera que permanecen en disolución tras la regeneración, productos resultantes de las reacciones que tienen lugar en la absorción.

En nuestro caso se trata fundamentalmente de un producto, el carbamato (MEACOO⁻), que es el producto de la reacción principal y su presencia afecta a las reacciones de equilibrio. Recordamos que nuestra corriente a tratar se caracteriza por la ausencia de contaminantes y oxígeno. Con la purga eliminamos parte de estos productos, aunque, lógicamente, también produce una pérdida de MEA y agua fundamentalmente que reponemos con el bloque MAKE-UP.

Obtenemos una corriente en las condiciones idóneas de trabajo. Suponemos además que la caída de presión que sufre el fluido al atravesar la purga y el mezclador es nula.

Para modelar la purga y el mezclador elegimos el modelo *Triangle* del menú **Mixers/Splitters**, la purga es un bloque divisor de corrientes y el bloque MAKE-UP es un mezclador sujeto a una especificación de diseño.

Como hemos indicado, el bloque MAKE UP viene afectado por una especificación de diseño global que afecta al caudal de la corriente de alimentación (MAKEUP) constituida por agua y monoetanolamina. Realizamos un balance global del caudal de cada uno de estos componentes que entra y sale de la planta para calcular el caudal de mezcla aportada. A continuación describiremos estas especificaciones.

- Se despliega el menú del equipo y seleccionamos la opción de la especificación de diseño.



- Dentro de la ventana que aparece seleccionamos la especificación. Previamente hay que enumerar o nombrar dicha especificación. Designamos DS-1 para el balance de agua y DS-2 para el balance de MEA.
- Seleccionamos las variables, que son los flujos molares de agua y MEA de las corrientes entrantes y salientes del sistema, para el caso DS-1: CO2PW (flujo molar de agua de la corriente CO2-PURO), GASPW (flujo molar de agua de la corriente GAS-PURO), GASW (flujo molar de agua de la corriente GAS), PURGEW (flujo molar de agua de la corriente PURGE), MAKEW (flujo molar de agua de la corriente MAKEUP). En el caso de la segunda especificación se procede de la misma forma, pero para el flujo molar de MEA.
- Introducimos el valor de la especificación en **Spec**: (CO2PW+GASPW+PURGEW-GASW-MAKEW), y se selecciona un valor Target = 0.
- Pulsamos la pestaña **Vary** para elegir la variable que vamos a modificar, en el caso de DS-1, modificamos el caudal molar de agua de la corriente MAKEUP y para el caso DS-2, el caudal molar de MEA en la misma corriente.

Realizamos un balance de materia inicial para estimar el caudal molar necesario de los componentes de la corriente MAKEUP para facilitar la convergencia y proporcionar un rango de variación a las variables que introducimos en las especificaciones. Los resultados del balance se muestran a continuación (Tabla 7.32):

Tabla 7.32. Corriente de entrada en el mezclador.

Component (Kmol/h)	Value
WATER	3091,151
MEA	276,608
CO2	0
MEACOO-	0
MEA+	0
H3O+	0
OH-	0



Los resultados obtenidos se muestran a continuación (Tabla 7.33).

Tabla 7.33. Resultados de las corrientes del bloque MAKE-UP.

	MEA-IN	MAKEUP	MEA
Temperature C	40,1	40,0	40,2
Pressure bar	15	15	15
Mole Flow kmol/hr	62363,472	236,21	62599,75
Mass Flow kg/hr	1,29E+6	4363,84	1,29456E+6
Volume Flow cum/hr	1309,98	4,38	1314,36
Mass Flow kg/hr			
WATER	1,04972E+6	4210,16	1,05394E+6
MEA	215586,48	153,677	215740,16
CO ₂	24896,04	0,000	24878,75
Mass Frac			
WATER	0,814	0,965	0,814
MEA	0,167	0,035	0,167
CO ₂	0,019	0,000	0,019
Mole Flow kmol/hr			
WATER	58268,418	233,700	58502,572
MEA	3529,361	2,516	3531,877
CO ₂	565,693	0,000	565,300
Mole Frac			
WATER	0,934	0,989	0,935
MEA	0,057	0,011	0,056
CO ₂	0,009	0,000	0,009

Si tenemos en cuenta el consumo de MEA en kg en la corriente MAKEUP, se sitúa en torno a los 2 kg MEA/ t de CO₂ eliminado, de acuerdo con los datos bibliográficos disponibles, que indican un consumo de MEA de reposición en torno a 1,5-3,6 kg MEA/ t de CO₂, para una planta de absorción de CO₂ con MEA, sin SO_x, el consumo típico está en torno a los 2 kg MEA/ t de CO₂ y para el proceso ECONAMINE FG, que está optimizado, el consumo es inferior, 1,6 kg MEA/ t de CO₂. (Datos obtenidos de las referencias bibliográficas [5], [10], [17])



En cuanto a la purga (bloque PURGE), se modela como hemos comentado anteriormente como un divisor de corrientes. Las especificaciones del bloque son las siguientes (Tabla 7.34):

Tabla 7.34. Especificaciones del bloque PURGE.

Stream	Specification	Basis	Value
MEA-P	Split fraction	Mole	0,99929
PURGE	Split fraction	Mole	0,00071

En cuanto a los resultados de las corrientes (Tabla 7.35):

Tabla 7.35. Resultados de las corrientes del separador.

	MEA-L	MEA-P	PURGE
Temperature C	66,347	66,347	66,347
Pressure bar	0,815	0,815	0,815
Mole Flow kmol/hr	62407,78	62363,47	44,31
Mass Flow kg/hr	1291121,1	1290204,4	916,69
Volume Flow cum/hr	1331,73	1330,79	0,94
Mole Flow kmol/hr			
WATER	58309,82	58268,42	41,40
MEA	3531,87	3529,36	2,51
CO2	566,10	565,69	0,40
Mole Frac			
WATER	0,93	0,93	0,93
MEA	0,06	0,06	0,06
CO2	0,01	0,01	0,01



7.6 SIMULACIÓN DE LA PLANTA COMPLETA

Para la simulación de la planta completa, definimos cada bloque y cerramos el bucle. El sistema completo plantea distintas opciones de convergencia y errores que analizaremos en cada caso.

Las simulaciones realizadas incluyen los modelos *emea* y *electrolytes*, empleando componentes reales y aparentes. Los distintos equipos se modifican además para adaptar las condiciones de operación a las necesidades del sistema.

7.6.1 CONVERGENCIA DEL SISTEMA

En el capítulo anterior tratamos del tema de la convergencia. La convergencia y los resultados derivados de ella, se hacen visibles cuando conectamos distintos bloques entre sí. Generalmente los errores que se producen en la simulación de bloques independientes son derivados del empleo de herramientas del programa como son los análisis de sensibilidad, las especificaciones de diseño y la optimización.

Los principales problemas de convergencia se producen cuando se cierran los bucles y aparecen corrientes de reciclo. El programa genera automáticamente los bloques de convergencia, las corrientes de corte y la secuencia de ejecución. En muchos casos, no es la secuencia adecuada y el programa ejecuta los bloques de convergencia asociados a los equipos antes de que el proceso cuente con entradas, lo que produce errores frecuentes. Para solucionarlos, el usuario puede seleccionar cada uno de estos parámetros.

El procedimiento general es seleccionar una corriente de corte por cada bucle de recirculación, por lo tanto lo más práctico es elegir como corriente de corte aquella que sea común a todos los bucles, o bien conecte bucles a través de algún bloque. Si observamos el diagrama de flujo del proceso, vemos que el intercambiador introduce un bucle, que no contiene corriente común con los anteriores, ya que la corriente que pasa por los tubos es distinta de la que atraviesa la carcasa. De aquí que sea necesario



introducir otra corriente de corte que represente a dicho bucle, de manera que los bloques de convergencia quedan divididos en dos grandes grupos.

En principio, dejamos que el programa elija las corrientes de corte. Una vez realizada la simulación, se realiza el estudio de cambio de corrientes de corte para acelerar la convergencia.

Con respecto a los bloques de convergencia, como situación de partida se respetan tanto el bloque como el método de convergencia que el programa toma por defecto, para luego cambiarlo conforme aparezcan limitaciones.

El bloque de convergencia sólo se cambia en caso de que no se obtenga la convergencia, ya que es una operación compleja. El bloque inicial es `$OLVER01`, definido para operar con las corrientes de corte. En nuestro caso, combinamos bloques generados por el programa con los creados para corregir los errores.

En cuanto a los métodos de convergencia, podemos seleccionarlo nosotros. En la página de convergencia podemos introducir los parámetros de convergencia como podemos ver en la Figura 7.2.

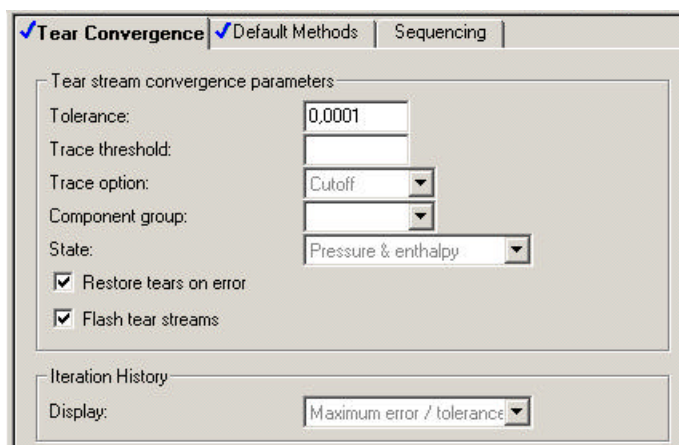


Figura 7.2. Ventana de opciones de convergencia.

Respetamos el valor de la tolerancia inicial, (0,0001), en todo el proyecto, ya que establece una buena precisión para el cálculo.

Como se nos muestra la página en la cual se introducen los métodos de convergencia (Figura 7.3), los métodos fijados por defecto son: el método Wegstein para la



convergencia global debido a los bucles y el método de la secante para las especificaciones.

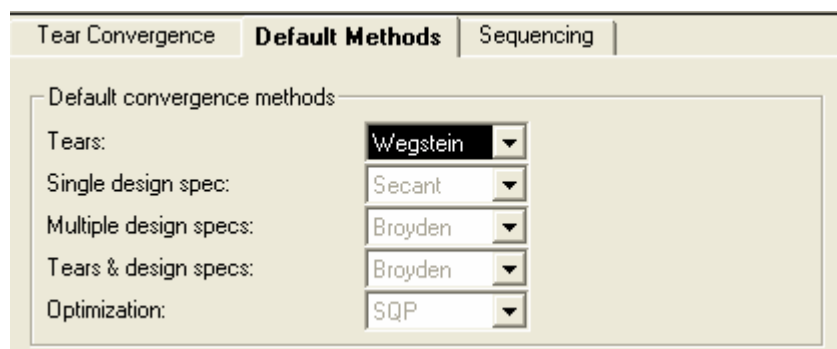


Figura 7.3. Métodos de convergencia utilizados en la simulación.

Podemos cambiar los parámetros de aceleración del método elegido y se seleccionar el que más se ajuste a las necesidades de nuestra simulación. La siguiente figura nos muestra los parámetros con los que se trabaja por defecto (Figura 7.4):

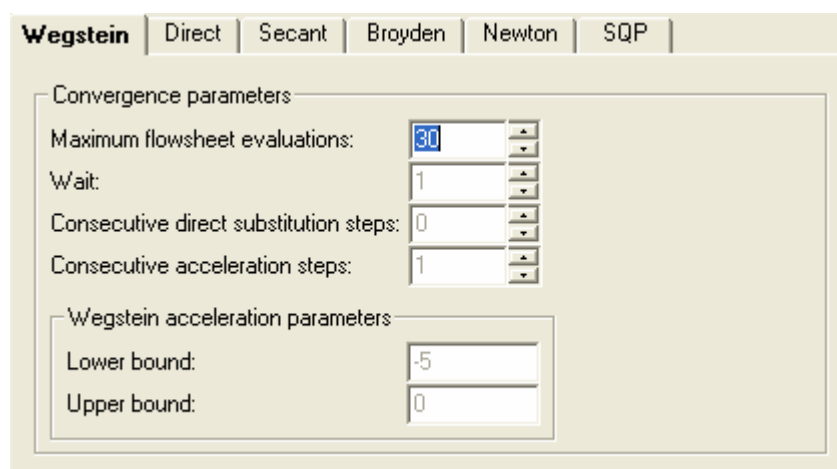


Figura 7.4. Parámetros del modelo de convergencia.

Estas especificaciones son:

- Número de iteraciones: 30 (posteriormente se ha realizado simulación con 50 iteraciones con el objeto de mostrar más claramente la evolución de las iteraciones).
- Wait: = 1.



- Parámetros de aceleración: límite inferior y superior 1 y 0, respectivamente.

Estos se cambian según la naturaleza de los problemas de convergencia, como veremos más adelante. En cuanto a la secuencia de iteración, se toma por defecto la del programa aunque posteriormente la adaptamos a los bloques de convergencia creados. Para establecer una secuencia con bloques de convergencia podemos acceder a la opción *Secuencing* de la ventana de convergencia.

El bucle de convergencia establecido para la primera simulación sólo consta del bloque \$SOLVER01. El orden computacional se muestra en el panel del control al comienzo de cada simulación. La secuencia inicial generada por el bloque de convergencia se muestra a continuación:

```
->Processing input specifications ...
```

```
Flowsheet Analysis :
```

```
Block $SOLVER01 (Method: WEGSTEIN) has been defined to converge
streams: MEA-LEAN WATER
```

```
COMPUTATION ORDER FOR THE FLOWSHEET:
```

```
| $SOLVER01 EXCHANGE STRIPPER CONDEN
| ABSORBER VALVE
| COND
| COOLER PUMP MAKE-UP PURGE
| (RETURN $SOLVER01)
```

Esta secuencia de cálculo mostrada correspondiente al bloque de convergencia creado por el programa no era la idónea y daba lugar a problemas de convergencia. Posteriormente mostraremos la secuencia correcta y lo ilustraremos con un diagrama de bloques explicativo.

7.6.2. PROBLEMAS DE CONVERGENCIA. ERRORES

Una vez completados los componentes del sistema tras el prediseño, pasamos a la simulación completa de la planta. En esta situación es posible que muchas de las especificaciones introducidas en la simulación preliminar de los equipos que constituyen el sistema tengan que modificarse para adaptarse las condiciones globales impuestas por



otros equipos. Generalmente vamos realizando estas modificaciones pasando por una serie de simulaciones hasta ajustar los parámetros necesarios.

Al cerrarse el sistema, aparecen corrientes de reciclo y es necesario establecer las corrientes de corte adecuadas para conseguir la convergencia global.

Cuando pasamos de una simulación a otra podemos proceder de dos formas:

- Aprovechar los valores obtenidos en la simulación anterior como valores iniciales para la nueva.
- Borrar los valores de la simulación anterior para partir de cero en cada nueva simulación.

En un principio, se procede de la primera forma con objeto de disminuir el número de iteraciones para obtener la convergencia. Se estiman así los valores de flujo de las corrientes, a partir de estos se analizan tanto el orden de magnitud de las corrientes, como los errores que muestra la simulación en el panel de control.

Los errores que pueden producirse son de distintos tipos:

- Relativos a la convergencia global. Cuando no se produce la convergencia del sistema en el número de iteraciones especificadas.
- Relacionados con los equipos. Se deben sobre todo a que no cuadran los balances de materia y energía, o de cargas en el caso de los electrolitos y a las especificaciones de diseño y análisis de sensibilidad relacionados de los equipos. Siempre que el programa presente resultados, aunque contengan errores se deben analizar, ya que los errores pueden estar muy localizados y tener corrección simple.
- Debidos a las especificaciones de diseño. Están relacionados con el procedimiento de cálculo de estas, de manera que en ocasiones los límites no son apropiados y dan lugar a errores.
- De los análisis de sensibilidad. Son similares al caso anterior.



En el Anexo C, se describen los errores más comunes y como aparecen indicados en el programa.

7.6.3 CORRECCIÓN DE ERRORES

Una vez analizados estos errores generales, realizamos una serie de modificaciones para lograr la convergencia global del sistema. En ellas modificamos las corrientes de corte, el método de convergencia y la secuencia de ejecución.

Si bien el método de *Wegstein* es clásicamente utilizado para la convergencia cuando se tiene una sola corriente de corte, con dos o más o para el caso de especificaciones de diseño exteriores a los equipos, el método recomendado es el método de *Broyden*. En el caso de modelo de planta de la Figura 7.1, las modificaciones realizadas fueron las siguientes comenzando por la elección de las corrientes de corte, que son las mostradas en la Tabla 7.36:

Tabla 7.36. Corrientes de corte y tolerancia.

Stream	Tolerance	Trace	State variables	Component group
MEA	0,0001	-	NONE	-
MEA-RH	0,0001	-	NONE	-

Seleccionamos la tolerancia de estas corrientes de corte y las opciones de cálculo, de manera que cuando se producen errores el programa reinicializa los cálculos a aquellos valores de partida. Además asignamos valores iniciales a todas las variables asociadas a estas corrientes. Las opciones de convergencia de dichas corrientes generadas se muestran en la siguiente figura (Figura 7.5).



Figura 7.5. Especificaciones de las corrientes de corte.

Creamos un bloque de convergencia C-1 para las corrientes de corte seleccionadas, modificamos la secuencia de cálculo de manera que el bucle de ejecución se muestra a continuación:

INFORMATION

PURE COMPONENT PARAMETERS FOR SOME COMPONENTS ARE RETRIEVED FROM SDF TABLE. THESE PARAMETERS ARE USED WITH THE ELECNRTL OPTION SET UNLESS YOU ENTER YOUR OWN PARAMETERS IN PROP-DATA PARAGRAPHS

PARAMETERS RETRIEVED FOR COMPONENT H2O ARE:

VLBROC PLXANT

PARAMETERS RETRIEVED FOR COMPONENT CO2 ARE:

VLBROC

PARAMETERS RETRIEVED FOR COMPONENT C2H7NO ARE:

DHFORM CPDIEC PLXANT

PARAMETERS RETRIEVED FOR COMPONENT C2H7NO ARE:

RKTZRA

Flowsheet Analysis :

Block \$OLVER01 (Method: WEGSTEIN) has been defined to converge streams: WATER



Block \$OLVER02 (Method: SECANT) has been defined to converge
specs : DS-2

Block \$OLVER03 (Method: SECANT) has been defined to converge
specs : DS-3

COMPUTATION ORDER FOR THE FLOWSHEET:

C-1 ABSORBER VALVE EXCHANGE COOLER PUMP

```
| $OLVER01 STRIPPER COND
| (RETURN $OLVER01)
| PURGE
| $OLVER02
| | $OLVER03
| | (RETURN $OLVER03)
| (RETURN $OLVER02)
| MAKE-UP
| (RETURN C-1)
```

Como podemos observar, el programa genera tres bloques de convergencia además del creado, dos de ellos para converger las especificaciones de diseño. El bloque \$OLVER02 para converger la especificación relacionada con el flujo molar de agua en el equipo MAKE-UP, y el bloque \$OLVER03 para el flujo molar de MEA. En ambos se emplea el método *Secant* para la convergencia. Para una corriente de corte elegida por el programa , WATER, en programa genera el bloque \$OLVER01.

Tras la simulación, podemos ver los resultados para las corrientes de corte (Tabla 7.37):

Tabla 7.37. Resultados de las corrientes de corte.

Tear	Status	Maximum error	Tolerance	Maximum error / Tolerance	Variable with maximum error	Convergence block
MEA	Converged	4,40e-05	0,0016241	0,0271064	WATER MOLEFLOW	C-1
MEA-LEAN	Converged	4,79e-07	3,52e-06	0,1361167	CO2 MOLEFLOW	C-1
WATER	Converged	3,63e-19	4,26e-19	0,8524366	HYDRO-01MOLEFLOW	\$OLVER01

Para el caso de las especificaciones, los resultados son los siguientes (Tabla 7.38):



Tabla 7.38. Resultados de convergencia de las especificaciones.

DesignSpec	Status	Error	Tolerance	Error / Tolerance	Variable value	Convergence block
DS-1	Converged	0	0,0001	0	162,787487	\$OLVER02
DS-2	Converged	0	0,0001	0	0,01239569	\$OLVER03

En la tabla anterior aparecen los valores finales de las variables sujetas a la especificación a los que se llega tras la simulación.

Representando Max error/tolerancia frente al número de iteraciones, Figura 7.6, se comprueba como tiende a valores menores que la unidad, obteniéndose finalmente la convergencia. Los datos de la figura corresponden a la corriente de corte WATER, ya que el resto de las corrientes de corte, al estar en el bucle externo, sólo precisaron una iteración para converger.

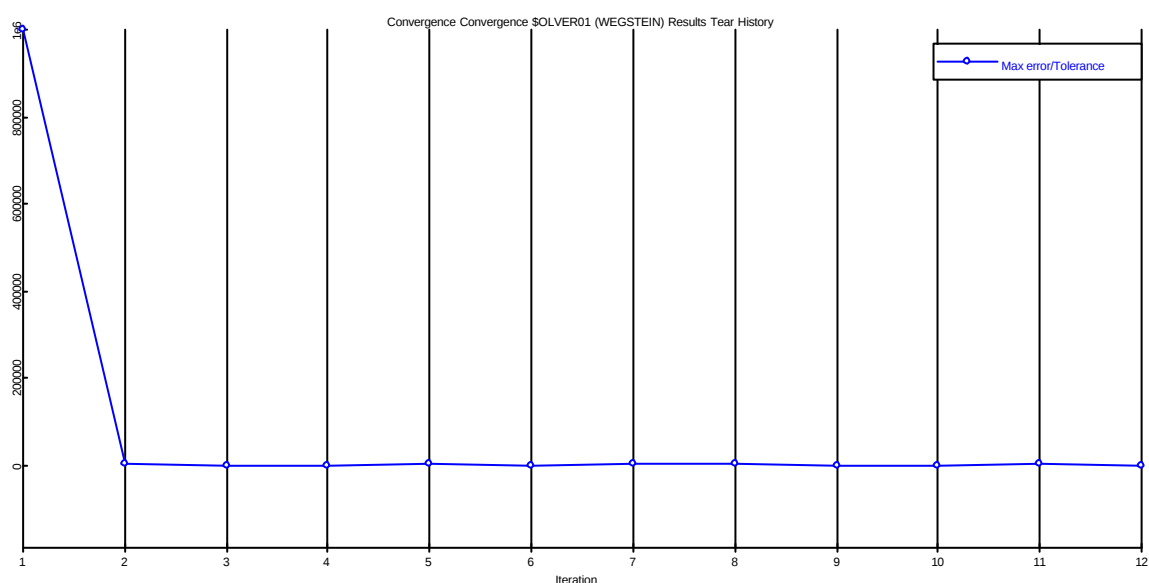


Figura 7.6. Convergencia para la corriente de corte WATER.

A continuación se presentan los valores finales de convergencia, en la Tabla 7.39 en los que se ve como los últimos valores de iteración están dentro de los límites de tolerancia. Se presentan los resultados tal y como aparecen en el programa, sin truncar cifras decimales ya que la tolerancia es del orden de 10E-04.



Vemos en la tabla como la utilización de componentes aparentes simplifica la convergencia al reducir en número de variables a converger en cada iteración.

Tabla 7.39. Resultados de la convergencia.

Status	Variable	Units	Final value	Previous value	Error / Tolerance
Converged	TOTAL MOLEFLOW	kmol/hr	62000,2556	62000,097	0,02558583
Converged	TOTAL MOLEFLOW	kmol/hr	61964,1208	61964,1983	-0,0124987
Converged	WATER MOLEFLOW	kmol/hr	58468,3789	58468,2204	0,02710647
Converged	MEA MOLEFLOW	kmol/hr	3531,87676	3531,87661	0,00041250
Converged	CO2 MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	HCO3- MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	MEACOO-MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	MEA+ MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	CO3-- MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	H3O+ MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	OH- MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	HYDRO01MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	CARBO01MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	METHA-01MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	WATER MOLEFLOW	kmol/hr	58305,5158	58305,5914	-0,0129621
Converged	MEA MOLEFLOW	kmol/hr	3531,86421	3531,86436	-0,0004128
Converged	CO2 MOLEFLOW	kmol/hr	126,740778	126,742503	-0,1361167
Converged	HCO3- MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	MEACOO-MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	MEA+ MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	CO3-- MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	H3O+ MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Converged	OH- MOLEFLOW	kmol/hr	0	0	0
Trace	HYDRO01MOLEFLOW	kmol/hr	0	1,7214e-35	-10000
Trace	CARBO01MOLEFLOW	kmol/hr	5,2915e-32	5,3367e-32	-84,647348
Trace	METHA-01MOLEFLOW	kmol/hr	2,1294e-20	2,1441e-20	-68,301012



Como puede observarse en la tabla anterior, el empleo del modelo de propiedades con componentes aparentes simplifica en gran medida en número de variables que interfieren en el proceso de convergencia. En este caso son todas aquellas que aparecen en la tabla con un valor igual a cero.

7.6.4 MODELADO DE EQUIPOS

En este apartado presentamos los primeros resultados de los distintos equipos obtenidos al simular la planta completa y alcanzar la convergencia global del sistema. Tras corregir los errores de convergencia, pasamos a realizar modificaciones en los equipos de manera que ajustamos los datos a las necesidades de la planta. Para ello empleamos el modelo *electrolyte* que emplea las mismas aproximaciones de equilibrio que el modelo *emea*, pero se puede trabajar con componentes aparentes, lo que en muchos casos mejora la convergencia de los equipos ya que reduce el número de variables a evaluar en cada iteración, como hemos visto anteriormente.

Posteriormente en el apartado de ingeniería básica de equipos, compararemos los resultados de diseño obtenidos con los datos bibliográficos disponibles y realizaremos las modificaciones necesarias para ajustar nuestros parámetros a resultados más reales.

7.6.4.1 RESULTADOS PARA EL MODELO ELECTROLYTES

A continuación iremos mostrando los resultados del modelo para los distintos equipos integrados en la planta así como los valores de los datos de diseño obtenidos.

ABSORBEDOR

En cuanto a los datos de diseño, los resultados obtenidos se muestran, aplicando una eficiencia de etapa del 62 %, en la Tabla 7.40.



Tabla 7.40. Resultados del absorbedor.

T sup(K)	342,06
Distillate rate (kmol/h)	6240,43
Reflux rate (kmol/h)	62267,11
Reflux ratio	9,98
T inf (K)	338,92
Bottoms rate (kmol/h)	62180,51
Boilup rate (kmol/h)	8211,31
Boilup ratio	0,13
Nº etapas teóricas	4
Tipo de plato	Sieve
Espaciado (m)	0,610
Diámetro	5,207
Downcomer/diámetro	0,147
Velocidad (m/s)	0,127

Si comparamos con los resultados de la simulación preliminar, las especificaciones de la torre están más ajustadas y tenemos ya un resultado con respecto a la ingeniería básica, es decir un diámetro aproximado (5,207 m). Tras el ajuste del resto de los equipos realizaremos el dimensionado final. Los resultados se muestran en el siguiente apartado.

Los resultados de las corrientes se muestran a continuación (Tabla 7.41).



Tabla 7.41. Resultados de las corrientes.

	MEA	GAS	GAS-PURO	MEA-RICA
Temperature K	313,1	305,2	342,1	338,9
Pressure bar	15,000	15,000	15,000	15,000
Vapor Frac	0,000	0,999	1,000	0,000
Mass Flow kg/hr	1,27462E+6	180740,864	99513,248	1,35584E+6
Volume Flow l/min	21394,72	224062,55	195222,34	23816,54
Mole Flow kmol/hr				
WATER	58458,57	37,42	121,18	57976,86
MEA	3280,746	0,000	0,009	279,506
CO2	0,000	2031,48	268,63	63,99
HCO3-	2,24	0,000	0,000	397,31
MEACOO-	116,99	0,000	0,000	1416,48
MEA+	134,16	0,000	0,000	1835,90
CO3-2	6,737	0,000	0,000	11,046
H3O+	0,000	0,000	0,000	0,000
OH-	1,450	0,000	0,000	0,020
HYDRO-01	0,000	3002	3001,99	0,002
CARBO-01	0,000	2984	2820,61	163,39
METHA-01	0,000	64	27,999	36,001
Mole Frac				
WATER	0,943	0,005	0,019	0,932
MEA	0,053	0,000	0,000	0,004
CO2	0,000	0,250	0,043	0,001
HCO3-	0,000	0,000	0,000	0,006
MEACOO-	0,002	0,000	0,000	0,023
MEA+	0,002	0,000	0,000	0,030
CO3-2	0,000	0,000	0,000	0,000
H3O+	0,000	0,000	0,000	0,000
OH-	0,000	0,000	0,000	0,000
HYDRO-01	0,000	0,370	0,481	0,000
CARBO-01	0,000	0,368	0,452	0,003
METHA-01	0,000	0,008	0,004	0,001



INTERCAMBIADOR

Tras introducir los datos de diseño en los equipos anteriores , mostraremos los resultados del intercambiador. Los resultados obtenidos con el modelo simplificado se muestran en la Tabla 7.42.

Tabla 7.42. Datos de diseño del intercambiador.

Zone	Hot-side Temp	Cold-side Temp	LMTD	U	Duty	Area
	K	K	K	cal/sec-sqcm-K	cal/sec	sqm
1	343,24	373,53	6,02	0,02	12999863,1	10639,73

Por lo tanto los datos de diseño no varían demasiado con respecto a la simulación preliminar.

STRIPPER

Mostramos a continuación las modificaciones introducidas debidas a la simulación de la planta completa. En cuanto a los datos de diseño, los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 7.43. Tabla 7.43. Resultados del stripper.

T condensador (K)	363,65
Distillate rate (kmol/h)	4317,69
Reflux rate (kmol/h)	30314,59
Reflux ratio	7,02
T reboiler (K)	382,51
Bottoms rate (kmol/h)	61761,92
Boilup rate (kmol/h)	35282,32
Boilup ratio	0,57
Nº etapas	13
Heat Duty (MMkcal/h)	342,92
Tipo de plato	Sieve
Espaciado (m)	0,6096
Diámetro	13,61
Downcomer/diámetro	0,10
Velocidad (m/s)	8,07



Como puede desprenderse de los resultados, el diseño de la columna de desorción debe ser ajustado ya que el diámetro resulta excesivo para un único equipo. El requerimiento energético del reboiler también resulta muy elevado. En cuanto a las corrientes los resultados se muestran en la Tabla 7.44.

Tabla 7.44. Resultados de las corrientes.

	MEA-RH	WATER	CO2	MEA-LEAN
Temperature K	373,5	318,0	363,6	382,5
Pressure bar	3,000	1,300	1,3	1,3
Mass Flow kg/hr	1,355E+6	39663,04	125196,71	1,27E+6
Volume Flow l/min	133685,41	669,53	1,64E+6	22446,49
Mole Flow kmol/hr				
WATER	58117,86	2198,28	2353,52	58221,1
MEA	607,50	0,000	0,000	3285,58
CO2	295,38	0,926	1763,787	0,021
HCO3-	262,554	0,004	0,000	6,826
MEACOO-	1326,107	0,000	0,000	118,3
MEA+	1598,278	0,000	0,000	128,01
CO3-2	4,783	0,000	0,000	0,822
H3O+	0,000	0,004	0,000	0,000
OH-	0,046	0,000	0,000	1,232
HYDRO-01	0,002	0,000	0,002	0,000
CARBO-01	163,39	0,282	163,67	0,000
METHA-01	36,001	0,713	36,715	0,000
Mole Frac				
WATER	0,931	0,999	0,545	0,943
MEA	0,010	0,000	0,000	0,053
CO2	0,005	0,000	0,409	0,000
HCO3-	0,004	0,000	0,000	0,000
MEACOO-	0,021	0,000	0,000	0,002
MEA+	0,026	0,000	0,000	0,002
CO3-2	0,000	0,000	0,000	0,000
CARBO-01	0,003	0,000	0,038	0,000
METHA-01	0,001	0,000	0,009	0,000



7.6.4.2 SIMULACIÓN RIGUROSA DEL INTERCAMBIADOR

El cálculo que hemos realizado hasta ahora para el equipo de intercambio es un cálculo aproximado, en el que fijamos una temperatura deseada de salida de la corriente de entrada al stripping y se calcula el calor necesario para alcanzar dicha temperatura (calor intercambiado). Con el fin de realizar un dimensionado del equipo empleamos el programa ASPEN Hetran para realizar el diseño del intercambiador e introducirlo en la planta.

Como dato de partida introducimos el valor del calor intercambiado resultado de las simulaciones anteriores que después ajustamos en vista de los mensajes de error a lo largo del proceso. Los resultados de la simulación se muestran a continuación (Tabla 7.45).

Tabla 7.45. Resultados del intercambiador.

Heat Exchanger Specification Sheet					
Size	1400/ 6096 mm	Type BEM	vert	Connected in	6parallel 4series
Surf/unit(eff.)	24814,4m ²	Shells/unit	24	Surf/shell (eff.)	1033,9 m ²
PERFORMANCE OF ONE UNIT					
Fluid allocation		Shell Side		Tube Side	
Fluid quantity, Total		kg/h	1285074	1363893	
Vapor (In/Out)		kg/h	2	8693	27312
Liquid		kg/h	1285072	1285074	1355200 1336581
Temperature (In/Out)		C	108,63	72,54	71,25 100,61
Dew / Bubble point		C	108,63	108,63	71,25
Density		kg/m ³	0,76	967,57	950,78 3,09
Viscosity		cp	0,013	0,419	0,491 0,018
Molecular wt, Vap			18,38	18,38	32,76 31,67
Specific heat		kcal/(kg*°C)	0,4504	0,9155	0,8481 0,2771
Thermal conductivity		kcal/(h*m*°C)	0,022	0,414	0,476 0,022
Latent heat		kcal/kg	537,22	19,14	442,51 483,86
Pressure		kgf/cm ²	1,326	1.326	3,059 3.059



Velocity	m/s	0,2		1,09	
Pressure drop, allow./calc.	kgf/cm ²	0,066	0,143	0,141	0,049
Fouling resist. (min)	m ² *h*C/kcal				
Heat exchanged	42857400 kcal/h	MTD corrected		3,18 C	
Transfer rate, Service	543,6	Dirty	909,3	Clean	909,3
CONSTRUCTION OF ONE SHELL					
		Shell Side		Tube Side	
Design/Test pressure	kgf/cm ²	5,273	Code	5,273	Code
Design temperature	C	143,33		137,78	
Number passes per shell		1		1	
Corrosion allowance	mm	1,59		1,59	
Connections	In	406,4		355,6	
Size/rating	Out	304,8		457,2	
Tube No.	2879	OD	19,05 Tks-avg	1,65 mm	Length 6096 mm Pitch 23,81 mm
Tube type		Material	CS		Tube pattern 30
Shell	CS	ID	OD	mm	Shell cover
Channel or bonnet	CS				Channel cover
Tubesheet-stationary	CS				Tubesheet-floating
Floating head cover					Impingement protection Circular plate on bundle
Baffle-crossing	CS	Type single seg	Cut(%d)	45 hor	Spacing: c/c mm
Baffle-long		Seal type			Inlet 706,44 mm
RhoV2-Inlet nozzle	272	Bundle entrance	0	Bundle exit	1427 kg/(m*s ²)
Code requirements	ASME Code Sec VIII Div 1		TEMA class	B	
Weight/Shell	18685,4	Filled with water	29927,4	Bundle	14403,2 kg

Thermal Details - General

		Shell Side		Tube Side	
Gases (in/out)	kg/h	2		8693	27312



Liquids (in/out)	kg/h	1285072	1285074	1355200	1336581
Temperature (in/out)	C	108,63	72,54	71,25	100,61
Dew point or bubble point	C	108,63	108,63		71,25
Film coefficient	kcal/(h*m2*C)	2797,6		1747,6	
Pressure drop (allow./calc.)	kgf/cm2	0,066	0,143	0,141	0,049
Total heat exchanged	kcal/h	42857400	Type	BEM	vert 4ser 6par
Overall coef. - dirty	kcal/(h*m2*C)	909,3	Shell size	1400	/ 6096 mm
Effective surface area	m2	24814,4	Tube No-OD	2879	/ 5 mm
MTD corrected	C	3,18	Baffles	single seg	45 %hor
MTD correction factor		1	Tube passes	1	

Thermal Details - Thermal Resistances

	Clean	Specified Foul	Max. Foul
Area reqd.	m2	14833,2	24814,4
Excess surface		67,29	
Overall coefficient	kcal/(h*m2*C)	909,3	543,6
Overall resistance	m2*h*C/kcal	0,0011	0,00184
Shell side film	%	32,5	19,43
Tube wall	%	4,55	2,72
Tube side film	%	62,94	37,63

Thermal Details - Coefficients



	Shell Side	Tube Side
Film coefficients kcal/(h*m²*C)		
As calculated by program	2797,6	1747,6
User specified multiplier	1	1
As used in design	2797,6	1747,6
Condensing coefficient	5440,8	
Boiling coefficient		1747,6
Liquid cooling coefficient	2797,6	
Reynolds number	5194,56	4432,76
Fin efficiency factor	1	
Mean metal temperature C	90,58	86,25

Thermal Details - MTD and Flux

Mean temperature difference C	Flux kcal/(h*m²)
Corrected MTD used in design 3,18	Actual flux 1727
LMTD	Boiling fluid
MTD correction factor 1	Nucleate maximum flux 1761720
Long. baffle efficiency factor	Program maximum flux 81374
Calculated corrected MTD 3,18	Specified maximum flux
User specified corrected MTD	Controlling maximum flux 81374
Flow direction Countercurrent	

Thermal Details - Pressure Drop

	Shell Side	Tube Side
--	------------	-----------



Press Drop	kgf/cm2			
Allowable		0,066		0,141
Calculated, clean		0,143		0,049
Calculated, dirty		0,143		0,049
User specified bundle multiplier		1		1
Velocity and pressure drop distribution	m/s	%dp	m/s	%dp
Inlet nozzle	0,54	5,79	2,85	32,3
Entering bundle	0,74	0	0,43	0,01
Crossflow	0,2	84,87		
Through baffle windows	0,13	4,31		
Through tubes			1,09	33,12
Exiting bundle	1,21		1,09	0,07
Outlet nozzle	0,87	5,03	4,55	34,49

Thermal Details - Shell Side Flow

Shell Side Stream Analysis	Flow Fraction	Diametric Clearances
		mm
Crossflow	55,38	
Clearance: Baffle hole - tube OD	21,74	0,4
Clearance: Shell ID - baffle OD	16,64	7,94
Clearance: Shell ID - bundle OTL	6,23	14,29
Rho*V2 Analysis	Rho*V2	TEMA Limit
	kg/(m*s2)	kg/(m*s2)



Inlet nozzle	272	2232
Shell entrance	0	5953
Bundle entrance	0	5953
Bundle exit	1427	5953
Shell exit	5261	5953

Mechanical Details - Shell & Heads Nozzles

TEMA Type	BEM	Shell	Front Head
Cylinder outside diameter	m	1422,4	1422,4
Cylinder inside diameter	m	1400,18	1400,18
Nozzles - nominal OD		Shell Side	Tube Side
Inlet nozzle	m	406,4 / 1	355,6 / 1
Outlet nozzle	m	304,8 / 1	457,2 / 1
Arrangement - total shells: 24 Connected in 6 parallel 4 series			
Total price Dollar(US) 2154720			

Mechanical Details - Bundle

Baffle type	single seg	Clearance: Shell id - bundle otl	14,29
Inlet spacing	mm706,44	Clearance: Baffle hole - tube od	0,4
C-C spacing	mm673,1	Clearance: Shell id - baffle od	7,94
Outlet spacing	mm582,61	Clearance: Baffle od - bundle otl	6,35



Number of baffles	8	
Supports	Impingement protection	Circular plate on bundle
Baffle cut	45hor	Sealing strips (pairs)
Multi-segmental inner cut	%	Outer tube limit 1385,89
Multi-segmental outer cut	%	Open distance at top 129,37
Baffle thickness	mm 15,88	Open distance at bottom 14,42

Mechanical Details - Tubes

Tube length	mm 6096	Tube o.d.	mm 19,05
Number of tubes	2879	Tube wall thickness	mm 1,65
Tube pitch	mm 23,81	Tube wall specification	avg
Tubesheet thickness (est.)	mm 47,62	Fin density	#/m
Tube-tubesheet joint	groove/expand	Area ratio Ao/Ai	1,21

Mechanical Details - Vibration Analysis

For liquids and gases	Inlet	Bundle	Outlet	U-bend
Vibration Indication	no	no	no	no
Tube unsupported span	mm 1379,54	mm 1346,2	mm 1255,71	
Crossflow velocity	v m/s 0,62	0,16	1,21	
Critical velocity	vc m/s 0,95	0,67	1,46	
Crossflow/critical velocity	v/vc 0,65	0,24	0,83	
Vibration indicated if > 1.0				
Tube natural frequency	fn Hz 31,3	21,7	38	



	m				
Turbulent buffeting amplitude (limit 0.4)	m	0,14	0,01	0,29	
Mechanical Details - Acoustic Analysis					
For gases only		Inlet	Bundle	Outlet	U-bend
Acoustic resonance indication		no	no	no	no
Tube unsupported span	l	1379,54	1346,2	1255,71	
Crossflow velocity	v	0,62	0,16	1,21	
Shell acoustic frequency	fa				
Vortex shedding frequency	fs	7,3	1,9		
Turbulent buffeting freq.	ftb				
Resonance indicated if 0.8 - 1.2					

En los resultados que nos proporciona el programa aparecen advertencias por problemas de vibración. En la Figura 7. 7 se resumen los resultados más relevantes.

Overall	Shellside Thermal	Shellside Delta P	Tubeside Thermal	T
Overall results				
Hot stream location:	SHELL			
Heat duty:	42,8578561	MMkcal/hr		
Required exchanger area:	7731,41352	sqm		
Actual exchanger area:	7914,9442	sqm		
% excess surface area clean:	2,3738308			
% excess surface area dirty:	2,3738308			
Avg. heat transfer coefficient (Dirty):	1442,83227	kcal/hr-sqm-K		
Avg. heat transfer coefficient (Clean):	1442,83227	kcal/hr-sqm-K		
LMTD (Corrected):	3,84194378	C		
LMTD correction factor:	1			
Vibration indication:	YES			
High Rhov2 indication:	YES			

Figura 7.7. Resultados de la simulación con Aspen Hetrán.



Las advertencia a la que hacemos referencia se muestra a continuación:

*WARNING

WARNING DURING EXECUTION OF PROGRAM HETRAN

A POTENTIAL TUBE VIBRATION PROBLEM IS INDICATED

El programa predice un problema de vibración en el intercambiador. Tenemos que tener en cuenta que el programa realiza la simulación suponiendo que el equipo está construido con un material estándar que el programa selecciona por defecto. Por lo tanto, cuando se realizan los cálculos es probable que los materiales no sean los apropiados.

En cuanto a las corrientes, los resultados se muestran en la Tabla 7.46.

Tabla 7.46. Resultados térmicos del intercambiador.

	ENTRADA	SALIDA
LADO CALIENTE	MEA-LEAN	MEA-L
T (°C)	108,98	73,10
P (bar)	1,30	0,82
Fracción de vapor	0	0
LADO FRÍO	MEA-R	MEA-RH
T (°C)	71,25	100,43
P (bar)	3,00	2,91
Fracción de vapor	0,00	0,01



7.7 INGENIERÍA BÁSICA. RESULTADOS FINALES

7.7.1 INGENIERÍA BÁSICA DE LOS EQUIPOS PRINCIPALES

7.7.1.1 ABSORBEDOR

Para la ingeniería básica de las columnas seleccionamos las opciones **Tray Sizing** y **Tray Rating** que ofrece el programa en el menú del equipo. Los resultados se muestran a continuación. La Tabla 7.47 expone los resultados del cálculo del diseño hidráulico de la columna, para las etapas ideales. Posteriormente los resultados se ajustarán a las etapas reales necesarias según la eficiencia.

Tabla 7.47. Resultados del dimensionamiento del absorbedor.

Stage	Diameter	Total area	Active area	Side downcomer area
	meter	sqm	sqm	sqm
1	4,987	19,529	6,725	1,520
2	5,205	21,276	7,483	1,577
3	5,270	21,809	7,702	1,602
4	5,240	21,569	7,579	1,603

Como hemos indicado anteriormente cuando hicimos referencia a este modelo, en el diseño de columnas, el modelo Radfrac establece dos parámetros básicos, por una parte el *Reflux Rate*, que determina la cantidad de líquido o reflujo que desciende desde el plato superior o del condensador, y el *Boilup Rate*, que determina la cantidad de vapor que asciende desde el fondo de la columna o del reboiler, que no tienen porque coincidir con L y V o G, ya que el líquido que desciende por la columna arrastra parte del gas disuelto y lo mismo ocurre en el caso del gas, parte del disolvente es arrastrado por este y condensa en la parte superior. Por esta razón el programa asigna diámetros distintos a cada plato, diferencia que se aprecia fundamentalmente entre el superior y el inferior. Seleccionamos el diámetro mínimo y aplicando la opción **Tray Rating**, el resultado es el mostrado a continuación (Tabla 7.48).



Tabla 7.48. Resultados de diseño del absorbedor.

Section starting stage:	1	
Section ending stage:	4	
Maximum flooding factor:	0,71	
Stage:	3	
Section pressure drop:	0,04	bar
Maximum backup / Tray spacing:	1,23	
Stage:	4	
Location:	SIDE	
Backup:	0,788	meter
Maximum Stage velocity:	4	
Location:	SIDE	
Velocity:	0,1767	m/sec

Stage	Flooding factor	Downcomer velocity	Downcomer backup	Backup / Tray space	Pressure drop
		m/sec	meter		bar
1	0,643	0,167	0,694	1,139	0,011
2	0,696	0,174	0,731	1,200	0,011
3	0,710	0,176	0,748	1,227	0,011
4	0,701	0,176	0,749	1,228	0,011

En la Tabla 7.49 aparecen los datos de diseño de la torre.

Tabla 7.49. Resultados de la simulación del absorbedor.



T sup(°C)	51,94
Distillate rate (kmol/h)	6252,67
Reflux rate (kmol/h)	63628,85
Reflux ratio	10,17
T inf (°C)	66,50
Bottoms rate (kmol/h)	64465,98
Boilup rate (kmol/h)	8129,29
Boilup ratio	0,126
Nº etapas teóricas	4
Tipo de plato	Sieve
Espaciado (m)	0,6096

Los resultados de la configuración de la columna son los siguientes (Figura 7.8):

Figura 7.8. Resultados del dimensionamiento. Etapas reales.

Name	Units	Item 1
Item Reference Number		1
Remarks 1		Equipment mapped from 'ABSORBER'.
Remarks 2		
Item description		ABSORBER-tower
User tag number		ABSORBER-tower
Structure tag		
Component WBS		
Quoted cost per item		
Number of identical items		
Tray type		SIEVE
Application		
Shell material		
Vessel diameter	M	4,2672
Vessel tangent to tangent height	M	7,4676
Design gauge pressure	KPA	1.670
Vacuum design gauge pressure	KPA	
Design temperature	DEG C	125
Operating temperature	DEG C	68,22718
Tray material		
Number of trays		7
Tray spacing	MM	609,6



En la figura anterior vemos que aparece el número de platos reales, resultando un total de 7. En el proceso de dimensionamiento el programa ajusta el diámetro al número de platos reales. Si recordamos como se obtiene el número de platos reales con el método de la Eficiencia de Murphree:

$$N^{\circ} \text{ etapas (platos) reales} = N^{\circ} \text{ etapas ideales} / \text{Eficiencia} \quad (\text{Ecuación 7.8})$$

Teniendo en cuenta la ecuación anterior, para nuestro caso:

$$N^{\circ} \text{ platos reales} = 4 / 0,62 = 6,45$$

El programa selecciona el entero inmediatamente superior, lo que da como resultado 7 platos reales y se reduce el diámetro (4,267 m) con respecto al calculado inicialmente (4,96 m).

En la Tabla 7.50 se muestran los resultados de los perfiles a lo largo de la columna.

Tabla 7.50. Perfiles L y V en la torre de absorción.

Stage	Temperature	Pressure	Heat duty	Liquid flow	Vapor flow
	C	bar	MMkcal/hr	kmol/hr	kmol/hr
1	51,940	15	0	63628,875	6252,673
2	65,760	15	0	64357,467	7281,799
3	68,236	15	0	64476,368	8010,391
4	66,503	15	0	64465,984	8129,292



7.7.1.2 INTERCAMBIADOR

Presentamos a continuación los datos de diseño del intercambiador obtenidos de nuevo por el programa Aspen Hetrán. Para acceder a ellos nos dirigimos a la carpeta del bloque del directorio principal seleccionamos la opción **Hetrán Browser** para acceder a los resultados de la simulación. Los mas relevantes se muestran a continuación (Figuras 7.9-7.15).

		A
Shell size	mm	1828,8
Tube length - actual	mm	4876,8
Tube length - required	mm	4502,5
Pressure drop, SS	kgf/cm ²	0,495
Pressure drop, TS	kgf/cm ²	0,08
Baffle spacing	mm	638,17
Number of baffles		6
Tube passes		1
Tube number		4997
Number of units in series		3
Number of units in parallel		2
Total price	Dollar[US]	842580
RhoV2 problem		yes
Vibration problem		yes

Figura 7.9. Datos de diseño.

		Shell Side		Tube Side	
Gases (in/out)	kg/h			10923	32470
Liquids (in/out)	kg/h	1291152	1291152	1363352	1341805
Temperature (in/out)	C	108,58	66,34	64,27	98,65
Dew point or bubble point	C				64,27
Film coefficient	kcal/(h*m ² *C)	4513,9		2656,5	
Fouling resistance	m ² *h*C/kcal				
Velocity	m/s	0,35		2,07	
Pressure drop (allow./calc.)	kgf/cm ²	0,53/0,495		0,141 / 0,08	
Total heat exchanged	kcal/h	49999470	Type	BEM	vert 3 ser 2 par
Overall coef. - dirty	kcal/(h*m ² *C)	1375,4	Shell size	1803—4876,8	mm
Effective surface area	m ²	8539,9	Tube No-OD	4997—19,05	mm
MTD corrected	C	4,62	Baffles	single seg	25 % hor
MTD correction factor		1	Tube passes	1	



Figura 7.10. Datos de operación.

		Clean	Spec. foul	Max. foul
Area reqd.	m ²	7868,2	7868,2	8539,9
Excess surface	%	8,54	8,54	
Overall coefficient	kcal/(h*m ² *C)	1375,4	1375,4	1267,2
Overall resistance	m ² *h*C/kcal	0,00073	0,00073	0,00079
Shell side fouling	m ² *h*C/kcal	0.0		
Tube side fouling (at tube ID)		0.0		
Distribution of overall resistance				
Shell side film	%	30,47	30,47	28,07
Shell side fouling	%	0.0		
Tube wall 0,00005	%	6,9	6,9	6,36
Tube side fouling	%	0.0		
Tube side film	%	62,63	62,63	57,71

Figura 7.11. Análisis de la resistencia térmica.

	Shell Side	Tube Side
Film coefficients		
As calculated by program	4513,9	2656,5
As specified by user in input		
User specified multiplier	1	1
As used in design	4513,9	2656,5
Desuperheating coefficient		
Condensing coefficient		
Vapor sensible coefficient		
Liquid sensible coefficient	4513,9	
Boiling coefficient		2656,5
Liquid cooling coefficient		
Reynolds number	18609,72	7251,08
Fin efficiency factor	1	
Mean metal temperature	87,36	82,54



Figura 7.12. Resultados para los coeficientes en el análisis térmico.

	Shell Side		Tube Side	
Pressure Drop kgf/cm²				
Allowable	0,53		0,141	
Calculated, clean	0,495		0,08	
Calculated, dirty	0,495		0,08	
User specified bundle multiplier	1		1	
Velocity and pressure drop distribution	m/s	%dp	m/s	%dp
Inlet nozzle	1,27	6,98	3,81	25,35
Entering bundle	2,27	4,65	0,81	0,02
Crossflow	0,35	78,22		
Through baffle windows	0,35	3,39		
Through tubes			2,07	41,69
Exiting bundle	2,2	4,5	2,07	0,13
Outlet nozzle	1,23	2,26	6,76	32,8

Figura 7.13. Caídas de presión.

TEMA type:	BEM	Shell	Front head
Cylinder outside diameter	mm	1828,8	1828,8
Cylinder inside diameter	mm	1803,4	1803,4
Kettle outside diameter	mm		
Vapor belt outside diameter	mm		
Vapor belt length	mm		
Nozzles - nominal OD / quantity		Shell Side	Tube Side
Inlet nozzle	mm	457,2 / 1	558,8 / 1
Outlet nozzle	mm	457,2 / 1	660,4 / 1
Drain	mm	/	/
Inlet dome	mm		
Distributor belt	mm		
Arrangement - total shells:	6 Connected in	2 parallel	3 series
Total price	Dollar(US)	842580	



Figura 7.14. Dimensionamiento de componentes y coste total.

For liquids and gases			Inlet	Bundle	Outlet	U-bend
Vibration Indication			yes	no	yes	no
Tube unsupported span		mm	1422,4	1276,35	1422,4	
Crossflow velocity	v	m/s	2,27	0,35	2,2	
Critical velocity	vc	m/s	1,26	1,1	1,25	
Crossflow/critical velocity	v/vc		1,81	0,32	1,76	
Vibration indicated if > 1.0						
Tube natural frequency	fn	Hz	29,6	24,4	29,9	
Vortex shedding amplitude		mm	2,9		2,78	
Vortex shedding amplitude limit	0,38					
Turbulent buffeting amplitude		mm	1,26	0,02	1,22	
Turbulent buffeting amplitude limit	0,38					

Figura 7.15. Vibración y resonancia.

A continuación, mostraremos los resultados del TEMA (Tabla 7.51).

Tabla 7.51. Resultados TEMA.

Size	1803-- 4876,8	mm	Type BEM	vert	Connected in	2 parallel	3series
Surf/unit(eff.)	8539,9	m2	Shells/unit	6	Surf/shell (eff.)	1423,3	m2
PERFORMANCE OF ONE UNIT							
Fluid allocation		Shell Side			Tube Side		
Fluid name							
Fluid quantity, Total		kg/h	1291152			1374275	
Vapor (In/Out)		kg/h			10923	32470	
Liquid		kg/h	1291152	1291152	1363352	1341805	
Noncondensable		kg/h					
Temperature (In/Out)		C	108,58	66,34	64,27	98,65	
Dew / Bubble point		C				64,27	
Density		kg/m3	938,24	969,44	957,3	3,24	
Viscosity		cp	0,269	0,461	0,539	0,018	
Molecular wt, Vap					35,16	33,04	
Molecular wt, NC							
Specific heat		kcal/(kg°C)	0,9257	0,906	0,8372	0,2683	
Thermal conductivity		kcal/(h*m°C)	0,426	0,421	0,477	0,021	
Latent heat		kcal/kg			452,28	487,75	
Pressure		kgf/cm2	1,326	1,326	3,059	3,059	
Velocity		m/s	0,35			2,07	
Pressure drop, allow./calc.		kgf/cm2	0,53	0,495	0,141	0,08	
Fouling resist. (min)		m2*h°C/kcal					
Heat exchanged	49999470	kcal/h	MTD corrected			4,62	C
Transfer rate, Service	1267,2		Dirty	1375,4	Clean	1375,4	kcal/(h*m2°C)



CONSTRUCTION OF ONE SHELL										Sketch	
		Shell Side			Tube Side						
Design/Test pressure		kgf/cm2	5,273/	/Code	5,273/	/Code					
Design temperature		C	143,33		132,22						
Number passes per shell			1		1						
Corrosion allowance		mm	1,59		1,59						
Connections	In		457,2/		558,8/						
Size/rating	Out		457,2/		660,4/						
mm/	Intermediate		/		/						
Tube No. 4997		OD 19,05	Tks-avg 1,65	mm	Length 4876,8		mm	Pitch 23,81		mm	
Tube type		Material CS					Tube pattern 30				
Shell	CS	ID	OD	mm	Shell cover						
Channel or bonnet		CS			Channel cover						
Tubesheet-stationary		CS			Tubesheet-floating						
Floating head cover					Impingement protection		None				
Baffle-crossing	CS	Type	single seg		Cut(%d)	25	hor	Spacing: c/c 638,17		mm	
Baffle-long		Seal type					Inlet 784,22		mm		
Supports-tube		U-bend					Type				
Bypass seal					Tube-tubesheet joint		groove/expand				
Expansion joint					Type						
RhoV2-Inlet nozzle	1509	Bundle entrance		4839	Bundle exit		4683	kg/(m².s²)			
Gaskets - Shell side					Tube Side						
Floating head											
Code requirements		ASME Code Sec VIII Div 1				TEMA class		B			
Weight/Shell	27116	Filled with water		45631,1	Bundle		20846,4	kg			

Los resultados térmicos de las corrientes se muestran a continuación (Tabla 7.52).

Tabla 7.52. Temperatura y presión de las corrientes.

	ENTRADA	SALIDA
LADO CALIENTE	MEA-LEAN	MEA-L
T (°C)	108,57	66,347
P (bar)	1,30	0,815
Fracción de vapor	0,0048	0,015
LADO FRÍO	MEA-R	MEA-RH
T (°C)	64,27	98,50
P (bar)	3,00	2,92
Fracción de vapor	0,004	0,014



En la Figura 7.16 aparecen resumidos los resultados más relevantes:

Overall results		
Hot stream location:	SHELL	
Heat duty:	50,0000002	MMkcal/hr
Required exchanger area:	7874,58872	sqm
Actual exchanger area:	8539,85432	sqm
% excess surface area clean:	8,4482584	
% excess surface area dirty:	8,4482584	
Avg. heat transfer coefficient (Dirty):	1375,5423	kcal/hr-sqm-K
Avg. heat transfer coefficient (Clean):	1375,5423	kcal/hr-sqm-K
LMTD (Corrected):	4,61597574	C
LMTD correction factor:	1	
Vibration indication:	YES	
High Rhov2 indication:	YES	

Figura 7.16.

Si comparamos estos resultados con los mostrados en la Figura 7.7 correspondientes a la simulación previa de la planta, vemos que el calor intercambiado en este caso es superior pero la DTML corregida es mayor (4,616 frente a 3,846 del caso anterior), por lo que el área de intercambio es prácticamente la misma. También pueden verse diferencias respecto a otros parámetros de diseño de manera que también la estimación económica que el programa realiza del equipo da como resultado un coste que también difiere del anterior, siendo, en este caso, menor.

Este resultado era de esperar ya que hemos modificado el diseño de otro de los equipos principales, la torre de absorción cuyo diseño básico veremos a continuación. Además la temperatura de la corriente de entrada a la torre (MEA-RH) también es distinta, ligeramente inferior. Si recordamos estos, para dicha corriente la temperatura de salida del intercambiador en el diseño previo se situaba en torno a los 100 °C, y en este caso es de 98,50 °C. veremos más adelante el efecto de estas modificaciones en las corrientes del sistema.



7.7.1.3 STRIPPER

A la vista de los resultados anteriores, es necesario modificar los parámetros de diseño de la columna para mejorar nuestro diseño tomando como referencia para ello los datos bibliográficos disponibles. El diseño preliminar del stripper se realizó conforme a la metodología recomendada por Aspen, en el manual de operación y diseño con electrolitos, en el que dedica un apartado al diseño de desorbedores de gases ácidos.

Procedimos a ajustar el caudal de vapor generado en el reboiler ya que el consumo energético resultaba excesivo. Si tenemos en cuenta los datos obtenidos de la bibliografía, el consumo energético se sitúa en torno a 3,8-5,2 (MJ/kg), y con el diseño actual quedaríamos fuera del rango como comprobamos en el apartado 7.5.4.1. Nuestro objetivo por tanto es reducir el consumo energético del reboiler de la columna de stripping, para ello también se modifican el resto de los parámetros de diseño de la columna.

Tras el ajuste de los parámetros los resultados se muestran a continuación. En la Tabla 7.53 aparecen los datos de diseño modificados.

Tabla 7.53. Resultados de la simulación para el bloque STRIPPER.

T condensador (C)	97,36
Distillate rate (kmol/h)	6600
Reflux rate (kmol/h)	5526,06
Reflux ratio	0,836
T reboiler (C)	108,57
Bottoms rate (kmol/h)	62407,78
Boilup rate (kmol/h)	8963,37
Boilup ratio	0,14
Nº etapas	13,00
Heat Duty (MMkcal/h)	88,70
Tipo de plato	Sieve



Como podemos observar a la vista de los resultados plasmados en la tabla anterior, la temperatura en la parte alta de la columna es superior al caso anterior, cabía pensar que podría ser inferior ya que la corriente entra a menor temperatura, pero el ajuste del resto de los parámetros hace que las condiciones de operación prácticamente no se vean afectadas.

Presentamos ahora los resultados de las corrientes para ver si se ajustan a nuestras especificaciones. Los resultados se muestran en la Tabla 7.54:

Tabla 7.54. Resultados de las corrientes.

	MEA-RH	WATER	CO2	MEA-LEAN
Temperature C	98,5	45,0	97,4	108,6
Pressure bar	2,92	1,30	1,30	1,30
Mole Flowkmol/hr	64465,92	4541,863	6600	62407,78
Mass Flow kg/hr	1,3742E+6	81874,811	165009,83	1,2911E+6
Mass Flow kg/hr				
WATER	1,05324E+6	81752,72	84528,28	1,05047E+6
MEA	215739,66	0,00	0,00	215739,66
CO2	100408,33	83,30	75577,90	24913,73
HYDRO-01	0,004	0,00	0,004	0,00
CARBO-01	4302,242	15,512	4317,754	0,00
METHA-01	562,602	23,276	585,88	0,00
Mass Frac				
WATER	0,766	0,999	0,512	0,814
MEA	0,157	0,000	0,000	0,167
CO2	0,073	0,001	0,458	0,019
HYDRO-01	0,000	0,000	0,000	0,000
CARBO-01	0,003	0,000	0,026	0,000
METHA-01	0,000	0,000	0,004	0,000
Mole Flowkmol/hr				
WATER	58463,886	4537,965	4692,033	58309,818
MEA	3531,868	0,000	0,000	3531,868
CO2	2281,499	1,893	1717,297	566,095
HYDRO-01	0,002	0,000	0,002	0,000
CARBO-01	153,594	0,554	154,148	0,000



METHA-01	35,069	1,451	36,520	0,000
Mole Frac				
WATER	0,907	0,999	0,711	0,934
MEA	0,055	0,000	0,000	0,057
CO2	0,035	0,000	0,260	0,009
HYDRO-01	0,000	0,000	0,000	0,000
CARBO-01	0,002	0,000	0,023	0,000
METHA-01	0,001	0,000	0,006	0,000

Como podemos ver en la tabla anterior, la fracción molar de CO₂ a la salida se mantiene por debajo de las especificaciones, entre un 80-90 % de regeneración. Además, hemos reducido el consumo energético desde 342,92 MMkcal/h, hasta el valor indicado en la tabla 88,715 MMkcal/h (371391,76 MJ/h), lo que supone una reducción del 74,13%.

El consumo energético del reboiler se sitúa ahora:

(371391,76 MJ /h)/ 75577,90 kg/h CO₂ eliminado = 4,914 MJ/ kg que si recordamos las especificaciones indicadas anteriormente, está dentro del rango y concretamente se corresponde con el valor típico.

Para la ingeniería básica de la columna procedimos como en el caso del absorbedor. La Tabla 7.55 expone los resultados del cálculo del diseño hidráulico de la columna:

Tabla 7.55

Stage	Diameter (m)	Total area (m ²)	Active area (m ²)	Side downcomer area (m ²)
2	5,348	22,47	8,99	1,12
3	7,77	47,49	19,00	2,37
4	7,48	43,96	17,58	2,20
5	7,57	45,07	18,03	2,25
6	7,62	45,64	18,26	2,28
7	7,65	46,00	18,40	2,30
8	7,67	46,26	18,51	2,31
9	7,693	46,49	18,60	2,32
10	7,71	46,70	18,68	2,34
11	7,73	46,93	18,77	2,35
12	7,75	47,23	18,89	2,36



Seleccionamos el diámetro de plato menor como en el caso anterior, y aplicando la opción *Tray Rating*, realizamos el dimensionado de la columna. El resultado es el mostrado a continuación (Tabla 7. 56).

Tabla 7.56

Section starting stage:		2			
Section ending stage:		12			
Maximum flooding factor:		1,37			
Stage:		3			
Section pressure drop:		0,146 bar			
Maximum backup / Tray spacing:		1,26			
Stage:		3			
Backup:		0,768 meter			
Maximum Stage velocity:		6			
Velocity:		0,16 m/sec			
Stage	Flooding factor	Downcomer velocity	Downcomer backup	Backup / Tray space	Pressure drop
		m/sec	meter		bar
2	0,783	0,011	0,166	0,272	0,009
3	1,369	0,158	0,768	1,260	0,016
4	1,268	0,159	0,755	1,239	0,014
5	1,295	0,160	0,760	1,246	0,014
6	1,309	0,160	0,762	1,249	0,014
7	1,318	0,160	0,762	1,251	0,015
8	1,325	0,160	0,763	1,252	0,015
9	1,330	0,160	0,763	1,252	0,015
10	1,336	0,160	0,764	1,253	0,015
11	1,342	0,160	0,764	1,253	0,015
12	1,349	0,159	0,764	1,253	0,015



Los resultados de configuración de la columna son los siguientes (Figura 7.17):

Name	Units	Item 1
Item Reference Number		7
Remarks 1		Equipment mapped from 'STRIPPER'.
Remarks 2		
Item description		STRIPPER-tower
User tag number		STRIPPER-tower
Structure tag		
Component WBS		
Quoted cost per item		
Number of identical items		
Tray type		SIEVE
Application		
Shell material		
Vessel diameter	M	5,334
Vessel tangent to tangent height	M	14,7828
Design gauge pressure	KPA	345
Vacuum design gauge pressure	KPA	
Design temperature	DEG C	138,5768
Operating temperature	DEG C	108,5768
Tray material		
Number of trays		19
Tray spacing	MM	609,6

Figura 7.17.

Si observamos la figura anterior, resultan 19 platos teóricos. Si tenemos en cuenta la Ecuación 7.8, el número de platos reales en nuestro caso:

$$N^{\circ} \text{ etapas reales} = 13 / 0,7 = 18,57$$

El programa redondea al entero inmediatamente superior, es decir 19. Como en este caso no se realiza mucho redondeo, el valor del diámetro final (5,336 m) no varía sensiblemente con respecto al inicial (5,36 m)

Si realizamos el mismo cálculo aproximado que en el caso anterior, para tener una idea del orden de magnitud de la modificación realizada, vemos que:

$$\text{kg vapor/kg CO}_2 = 164974,47 / 75577,90 = 2,18$$

Teniendo en cuenta los datos aportados por la Tabla 7.15, estamos dentro del rango de consumo de vapor según los datos bibliográficos (1,9-2,1).

A continuación presentamos los resultados obtenidos para el reboiler y el condensador.



El reboiler es tipo kettle y para el diseño se a tenido en cuenta una bomba de reflujo. Los resultados de dimensionamiento se muestran en la Tabla 7.57.

Tabla 7.57. Dimensionamiento del reboiler.

Description	Value	Units
Lmtd	55.97	Deg C
Raw surface area	1462.92	m ²
Shell side fouling resistance	0.000123	h m ² C/kcal
Shell side heat transfer coefficient	2990.526	W/ m ² / Deg C
Side for hot stream	Tube	
Temperature correction factor	0.999	
Tube side fouling resistance	6.14e-005	h m ² C/kcal
Tube side heat transfer coefficient	5682	W/ m ² / C

En cuanto a los datos de diseño (Tabla 7.58):

Tabla 7.58. Resultados de diseño del reboiler.

Parameter	Value	Units
Item type	U TUBE	
Number of identical items	1	
GENERAL DESIGN DATA		
TEMA type	BKU	
Heat exchanger design option	STAND	
Heat transfer area	1682.36	m ²
Area per shell	280.393	m ²
Number of tube passes	2	
Number of shell passes	1	
SHELL DATA		
Shell material	A285C	



Shell diameter	1775	mm
Shell length	4	m
Shell design gauge pressure	345	KPa
Shell design temperature	138	Deg C
Shell operating temperature	138	Deg C
Shell corrosion allowance	3	mm
Shell wall thickness	12	mm
ASA rating Shell side	150	CLASS
Number of baffles	7	
Shell fabrication type	PLATE	
TUBE DATA		
Tube material	A 214	
Number of tubes per shell	578	
Tube outside diameter	25.4	mm
Tube port diameter	1194	mm
Tube length extended	6.096	m
Tube design gauge pressure	859	KPa
Tube design temperature	194	Deg C
Tube operating temperature	194	Deg C
Tube corrosion allowance	0.06	mm
Tube wall thickness	3.17	mm
Tube pitch symbol	TRIANGULAR	
Tube pitch	31.75	mm
Tube seal type	SEALW	
TUBE SHEET DATA		
Tube sheet material	A 515	
Tube sheet thickness	65	mm
Tube sheet corrosion allowance	3	mm
Channel material	A 515	



PROCESS DESIGN DATA		
Duty	103.075	MEGAW
Heat of vaporization	350	KJ/Kg
Vaporization	90	PERCENT
Specific gravity tower bottoms	0.50	
Molecular weight Bottoms	100	
TUBE SIDE HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
ASA rating Tube side	150	CLASS
Head thickness Tube side	7	mm
SHELL SIDE HEAD DATA		
Head material Shell side	A285C	
ASA rating Shell side	150	CLASS
Head thickness Shell side	12	mm
WEIGHT DATA		
Shell	2100	Kg
Tubes	6100	Kg
Heads	420	Kg
Internals and baffles	570	Kg
Nozzles	360	Kg
Flanges	390	Kg
Base ring and lugs	20	Kg
Tube sheet	340	Kg
Saddles	340	Kg
Fittings and miscellaneous	890	Kg
Total weight per item	11500	Kg
Total weight	69000	Kg

Los resultados de diseño referentes a la bomba de reflujo del reboiler se muestran a continuación (Tabla 7.59):



Tabla 7.59

Parameter	Value	Units
Item type	CENTRIF	
EQUIPMENT DESIGN DATA		
Casing material	CS	
Design temperature	127.36	Deg C
Design gauge pressure	345	KPa
Fluid head	70	m
ASA rating	150	CLASS
Driver power	45	KW
Speed	3600	rpm
Driver type	MOTOR	
Motor type	ODP	
Pump efficiency	70	PERCENT
Seal type	SNGL	
PROCESS DESIGN DATA		
Liquid flow rate	45.029	l/s
Fluid specific gravity	0.9382	
Power per liquid flow rate	0.9994	KW/l/s
Liquid flow rate times head	3152	l/s m
WEIGHT DATA		
Pump	170	Kg
Motor	280	Kg
Base plate	39	Kg
Fittings and miscellaneous	33	Kg
Total weight	530	Kg

Para el condensador, se trata de un condensador parcial y el programa considera además un tanque de reflujo. Los datos referidos al dimensionado se muestran en la Tabla 7.60:



Tabla 7.60. Dimensionado del condensador.

Description	Value	Units
Duty	6373050	W
Lmtd	68.57	Deg C
Raw surface area	64.44	m ²
Shell side fouling resistance	0.0002048341	h m ² C/kcal
Shell side heat transfer coefficient	5981.053	W/ m ² / C
Side for hot stream	Tube	
Temperature correction factor	0.999	
Tube side fouling resistance	6.14e-005	h m ² C/kcal
Tube side heat transfer coefficient	5792.049	W/ m ² / C

En cuanto a los datos de diseño (Tabla 7.61):

Tabla 7.61.

Parameter	Value	Units
Item type	FIXED T S	
Number of identical items	1	
GENERAL DESIGN DATA		
TEMA type	BEM	
Heat exchanger design option	STAND	
Heat transfer area	74.1	m ²
Number of shells	1	
Number of tube passes	1	
Number of shell passes	1	
Vendor grade	HIGH	
SHELL DATA		
Shell material	A285C	



Shell diameter	450.002	mm
Shell length	6.1000	m
Shell design gauge pressure	515.000	KPa
Shell design temperature	125.000	Deg C
Shell operating temperature	125.000	Deg C
Shell corrosion allowance	3.0002	mm
Shell wall thickness	9.5250	mm
ASA rating Shell side	150	CLASS
Number of baffles	16	
Shell fabrication type	PIPE	
Expansion joint	NO	
TUBE DATA		
Tube material	A 214	
Number of tubes per shell	153	
Tube outside diameter	25.400	mm
Tube length extended	6.0960	m
Tube design gauge pressure	345.000	KPa
Tube design temperature	128.000	Deg C
Tube operating temperature	128.000	Deg C
Tube corrosion allowance	0.0600	mm
Tube wall thickness	3.1750	mm
Tube pitch symbol	TRIANGULAR	
Tube pitch	31.750	mm
Tube seal type	SEALW	
TUBE SHEET DATA		
Tube sheet material	A 515	
Tube sheet thickness	20.000	mm
Tube sheet corrosion allowance	3.0001	mm
Channel material	A 515	



HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
ASA rating Tube side	150	CLASS
Head thickness Tube side	7.0002	mm
WEIGHT DATA		
Shell	640	Kg
Tubes	1600	Kg
Heads	100	Kg
Internals and baffles	60	Kg
Nozzles	80	Kg
Flanges	160	Kg
Base ring and lugs	7	Kg
Tube sheet	46	Kg
Saddles	38	Kg
Fittings and miscellaneous	320	Kg
Total weight	3100	Kg

Para el caso del tanque de reflujo, los parámetros de diseño se muestran a continuación (Tabla 7.62).

Tabla 7.62

Description	Value	Units
Average liquid particle diameter	0.003	m



Bootleg liquid velocity	0.1524	m/min
Design factor multiplier for disengagement velocity	0.5	
Minimum bootleg diameter	0.4572	m
Minimum bootleg length	0.9144	m
Minimum vessel diameter	1	m
Process vessel height to diameter ratio	3	
Residence time	5	min
Separation factor multiplier	1.25	
Vapor area / cross sectional area	0.2	

Los resultados de diseño se muestran a continuación (Tabla 7.63):

Tabla 7.63

Parameter	Value	Units
Item type	HORIZ DRUM	
Number of identical items	1	
EQUIPMENT DESIGN DATA		
Liquid volume	16.369	m ³
Design gauge pressure	345.000	KPa
Design temperature	127.359	Deg C
Operating temperature	97.359	Deg C
Fluid specific gravity	1.0000	
SHELL DATA		
Shell material	A 515	
Diameter option	ID	
Vessel diameter	2.4384	m
Vessel tangent to tangent length	3.5052	m
Head type	TORI	



MECHANICAL DESIGN DATA		
Weld efficiency	85.000	PERCENT
Base material thickness	8.0003	mm
Corrosion allowance	3.0002	mm
Head thickness Top	8.0002	mm
Head thickness Bottom	8.0002	mm
THICKNESSES REQUIRED		
Circumferential stress thickness	3.5949	mm
NOZZLE AND MANHOLE DATA		
Nozzle ASA rating	150	CLASS
Nozzle material	A 515	
Nozzle A Quantity	1	
Nozzle A Diameter	100.000	mm
Nozzle A Location	S	
Nozzle B Quantity	2	
Nozzle B Diameter	150.000	mm
Nozzle B Location	S	
Nozzle C Quantity	2	
Nozzle C Diameter	80.000	mm
Nozzle C Location	S	
Nozzle D Quantity	4	
Nozzle D Diameter	50.000	mm
Nozzle D Location	S	
Number of manholes	1	
Manhole diameter	450	mm
WEIGHT DATA		
Shell	1700	Kg
Heads	730	Kg
Nozzles	80	Kg



Manholes and Large nozzles	180	Kg
Base ring and lugs	39	Kg
Saddles	580	Kg
Total weight	3300	Kg

7.7.1.4. CONDENSADOR

Los resultados referentes al dimensionamiento del condensador se muestran en la Tabla 7.64.

Tabla 7.64. Condensador

Description	Value	Units
Average liquid particle diameter	0.003	m
Design factor multiplier for disengagement velocity	0.5	m
Height of mist eliminator	0.15	m
Minimum disengagement height	0.3	m
Minimum height above the mist eliminator	0.6	m
Minimum vessel diameter	1	m
Process vessel height to diameter ratio	3	
Residence time	5	min

Los datos de diseño se muestran a continuación (Tabla 7.65):

Tabla 7.65

Parameter	Value	Units
Item type	CYLINDER	
Number of identical items	1	



EQUIPMENT DESIGN DATA		
ASME design basis	D1NF	
Liquid volume	20.67	m ³
Design gauge pressure	345	KPa
Design temperature	127.36	Deg C
Operating temperature	97.36	Deg C
Fluid specific gravity	1.0	
SHELL DATA		
Shell material	A 515	
Vessel diameter	3.96	m
Vessel tangent to tangent height	1.67	m
Head type	ELLIP	
MECHANICAL DESIGN DATA		
Wind or seismic design	W+S	
Weld efficiency	85.00	PERCENT
Base material thickness	9.00	mm
Corrosion allowance	3.00	mm
Head thickness Top	8.00	mm
Head thickness Bottom	9.00	mm
THICKNESSES REQUIRED		
Circumferential stress thickness	5.91	mm
VESSEL LEG DATA		
Leg material	CS	
Vessel leg height	1.2	m
NOZZLE AND MANHOLE DATA		
Nozzle ASA rating	150	CLASS
Nozzle material	A 515	
Nozzle A Quantity	2	
Nozzle A Diameter	25	mm



Nozzle A Location	S	
Nozzle B Quantity	5	
Nozzle B Diameter	50	mm
Nozzle B Location	S	
Number of manholes	1	
Manhole diameter	450	mm

7.7.1.5. REFRIGERADOR

a continuación se muestran los parámetros de dimensionamiento del equipo (Tabla 7.66):

Tabla 7.66

Description	Value	Units
Duty	3.5735e+007	W
Lmtd	22.947	Deg C
Raw surface area	2294.34	m ²
Shell side fouling resistance	0.00017	h m ² C/kcal
Shell side heat transfer coefficient	1420.5	W/ m ² / C
Side for hot stream	Shell	
Temperature correction factor	0.895	
Tube side fouling resistance	0.00020	h m ² C/kcal
Tube side heat transfer coefficient	5981.053	W/ m ² / CC

Los resultados de la ingeniería básica del refrigerador se muestran a continuación (Tabla 7.67):

Tabla 7.67

Parameter	Value	Units
-----------	-------	-------



Item type	FLOAT HEAD	
Number of identical items	1	
GENERAL DESIGN DATA		
TEMA type	BES	
Heat exchanger design option	STAND	
Heat transfer area	2638.49	m ²
Area per shell	527.67	m ²
Number of tube passes	2	
Number of shell passes	1	
Vendor grade	HIGH	
SHELL DATA		
Shell material	A285C	
Shell diameter	1150	mm
Shell length	7	m
Shell design gauge pressure	104	KPa
Shell design temperature	125	Deg C
Shell operating temperature	125	Deg C
Shell corrosion allowance	3	mm
Shell wall thickness	12	mm
ASA rating Shell side	150	CLASS
Number of baffles	15	
Shell fabrication type	PLATE	
Expansion joint	NO	
TUBE DATA		
Tube material	A 214	
Number of tubes per shell	1086	
Tube outside diameter	25.40	mm
Tube length extended	6.096	m
Tube design gauge pressure	515	KPa



Tube design temperature	125	Deg C
Tube operating temperature	125	Deg C
Tube corrosion allowance	0.06	mm
Tube wall thickness	3.175	mm
Tube pitch symbol	TRIANGULAR	
Tube pitch	31.75	mm
Tube seal type	SEALW	
TUBE SHEET DATA		
Tube sheet material	A 515	
Tube sheet thickness	40.000	mm
Tube sheet corrosion allowance	3.0001	mm
Channel material	A 515	
FLOATING HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
Floating head thickness	7	mm
SHELL SIDE HEAD DATA		
Head material Shell side	A285C	
ASA rating Shell side	150	CLASS
Head thickness Shell side	12	mm
HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
ASA rating Tube side	150	CLASS
Head thickness Tube side	7	mm

7.7.1.6 BOMBA

Los datos de diseño de la bomba se muestran en la Tabla 7.68:

Tabla 7.68

Parameter	Value	Units
-----------	-------	-------



Item type	CENTRIF	
Number of identical items	1	
EQUIPMENT DESIGN DATA		
Casing material	CS	
Design temperature	125	Deg C
Design gauge pressure	1670	KPa
Fluid head	142.12	m
ASA rating	300	CLASS
Driver power	630	KW
Speed	1800	rpm
Driver type	MOTOR	
Motor type	ODP	
Pump efficiency	90	PERCENT
Seal type	SNGL	
PROCESS DESIGN DATA		
Liquid flow rate	400.49	l/s
Fluid specific gravity	0.98	
Fluid viscosity	0.69	MPa-s
Power per liquid flow rate	1.573	KW/l/s
Liquid flow rate times head	56917	l/s -m

7.7.1.7 CORRIENTES

Los resultados de las corrientes principales se muestran a continuación (Tabla 7.69).



Tabla 7.69. Resultados completos de las corrientes más importantes.

	GAS-PURO	MAKEUP	MEA	MEA-LEAN	CO2-PURO
Temperature C	51,94	40	40,15	108,57	45
Pressure bar	15	15	15	1,3	1,3
Mole Flow kmol/hr	6252,67	236,22	62599,75	62407,78	2058,13
Mass Flow kg/hr	101052,70	4363,84	1294559,13	1291121,10	83134,89
Volume Flow cum/hr	11296,92	4,38	1314,36	1375,98	41657,66
Mass Flow kg/hr					
WATER	1363,07	4210,16	1053940,22	1050467,71	2775,45
MEA	0,50	153,68	215740,16	215739,66	0,00
CO2	13892,68	0,00	24878,75	24913,73	75494,60
HYDRO-01	6051,67	0,00	0,00	0,00	0,00
CARBO-01	79280,59	0,00	0,00	0,00	4302,24
METHA-01	464,18	0,00	0,00	0,00	562,59
Mass Frac					
WATER	0,01	0,96	0,81	0,81	0,03
MEA	0,00	0,04	0,17	0,17	0,00
CO2	0,14	0,00	0,02	0,02	0,91
HYDRO-01	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
CARBO-01	0,78	0,00	0,00	0,00	0,05
METHA-01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01
Mole Flow kmol/hr					
WATER	75,66	233,70	58502,57	58309,82	154,06
MEA	0,01	2,52	3531,88	3531,87	0,00
CO2	315,67	0,00	565,30	566,10	1715,40
HYDRO-01	3002,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CARBO-01	2830,40	0,00	0,00	0,00	153,59
METHA-01	28,93	0,00	0,00	0,00	35,07
Mole Frac					
WATER	0,012	0,989	0,935	0,934	0,075
MEA	0,000	0,011	0,056	0,057	0,000
CO2	0,050	0,000	0,009	0,009	0,833
HYDRO-01	0,480	0,000	0,000	0,000	0,000



CARBO-01	0,453	0,000	0,000	0,000	0,075
METHA-01	0,005	0,000	0,000	0,000	0,017

7.7.2 RESULTADOS DE LA CONVERGENCIA DEL SISTEMA

Para la convergencia del sistema una vez modificados los equipos modificamos de nuevo algunas corrientes de corte y los bloques de convergencia. Creamos de nuevo un bloque, C-1, asociado a la corriente de corte MEA. El programa genera además otros tres bloques



más, \$OLVER02 y \$OLVER03 como en el caso anterior, para la convergencia de las especificaciones de diseño, y \$OLVER01 para las corrientes de corte WATER y MEA-RH.

Imponemos además una secuencia de ejecución con el fin de evitar los errores producidos en simulaciones anteriores, de manera que el programa ejecuta una secuencia combinada de la impuesta por nosotros para los bloques creados y la de ejecución de los bloques generados por Aspen.

Tras ajustar de nuevo las corrientes de corte, el algoritmo final de convergencia es el mostrado a continuación:

```
Block $OLVER01 (Method: WEGSTEIN) has been defined to converge
      streams: WATER      MEA-RH
```

```
Block $OLVER02 (Method: SECANT ) has been defined to converge
      specs : DS-1
```

```
Block $OLVER03 (Method: SECANT ) has been defined to converge
      specs : DS-2
```

COMPUTATION ORDER FOR THE FLOWSHEET:

```
C-1 ABSORBER VALVE
| $OLVER01 STRIPPER COND EXCHANGE
| (RETURN $OLVER01)
| PURGE COOLER PUMP
| $OLVER02
| | $OLVER03
| | (RETURN $OLVER03)
| (RETURN $OLVER02)
| MAKE-UP
| (RETURN C-1)
```

Como vemos en este algoritmo de convergencia, el bloque C-1 que hemos creado y que tiene como corriente de corte MEA, es el bucle externo y se encarga de la convergencia de los bloques ABSORBER, VALVE, PURGE, COOLER, PUMP y MAKE-UP, en este orden. Además contiene anidado el bucle de convergencia \$OLVE01, que se encarga de la convergencia de los bloques STRIPPER, COND y EXCHANGE, y a los bloques de convergencia \$OLVE02 y \$OLVE03, para las convergencia de las corrientes de corte. Mostraremos a continuación un diagrama de bloques esquemático de la ejecución del proceso (Figura 7.18).



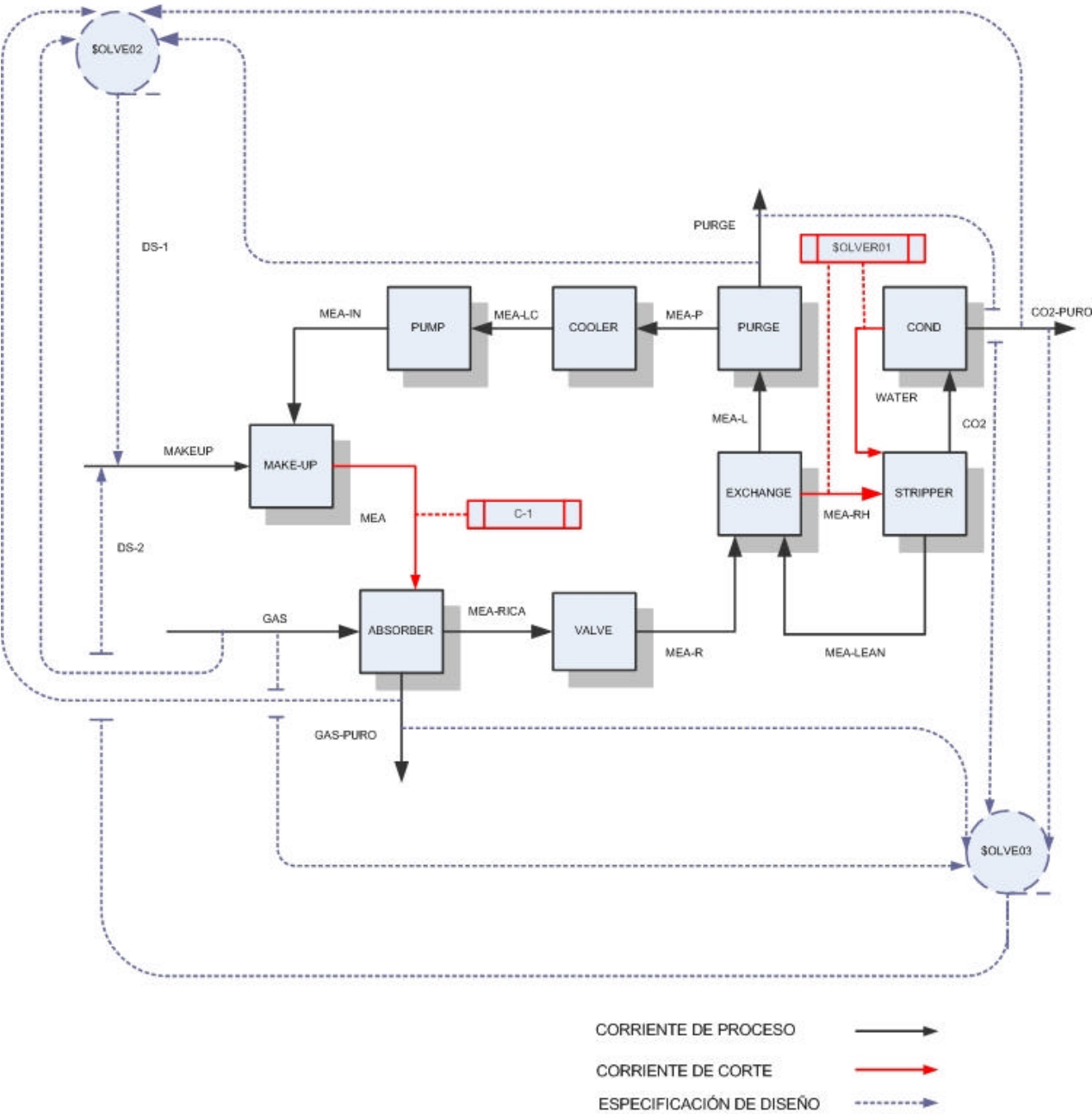


Figura 7.18.

Los resultados relativos a las corrientes de corte se muestran a continuación (Tabla 7.70).

Tabla 7.70. Corrientes de corte.

Tear	Status	Maximum error	Tolerance	Maximum error / Tolerance	Variable with maximum error	Convergence block
------	--------	---------------	-----------	---------------------------	-----------------------------	-------------------



MEA	Converged	0,000109	0,000157	0,694923	WATER MOLEFLOW	C-1
WATER	Converged	1,81E-07	4,03E-07	0,448987	CARBO-01MOLEFLOW	\$OLVER01
MEA-RH	Converged	0,000108	0,000634	0,169651	CARBO-01MOLEFLOW	\$OLVER01

En cuanto a las especificaciones de diseño, los resultados se muestran en la Tabla 7.71:

Tabla 7.71. Resultados de las especificaciones de diseño.

DesignSpec	Status	Error	Tolerance	Error / Tolerance	Variable value	Convergence block
DS-1	Converged	1,14E-13	0,001	1,14E-10	233,6995	\$OLVER02
DS-2	Converged	-9,21E-06	0,001	-0,00921	2,515848	\$OLVER03

7.8 CONTROL DE LA PLANTA DE ABSORCIÓN

En este apartado vamos a tratar la controlabilidad de la planta de absorción. Factores importantes como la corrosión de equipos pueden limitarse mediante el control de la



operación de stripping. En este último caso, para unas condiciones de operación dadas (temperatura, presión, concentración de MEA), el factor más importante, que determina el grado de regeneración en la columna, es la cantidad de vapor empleada, que suele expresarse en términos de parámetros como el boil-up rate o reflux ratio, o bien el flujo másico de vapor alimentado al reboiler por unidad de solución rica (kg de vapor por m³ de solución).

Para controlar el proceso de desorción dependiendo de las necesidades del proceso, suelen emplearse principalmente dos métodos:

- *Flow Ratio Control*: manipulamos el calor aportado al reboiler (vapor) en relación con la cantidad de solución rica (kg de vapor por m³ de solución), para controlar el flujo másico de vapor que sale del reboiler, y por tanto el proceso de desorción. Podemos ver un esquema de control en la Figura 7.19.

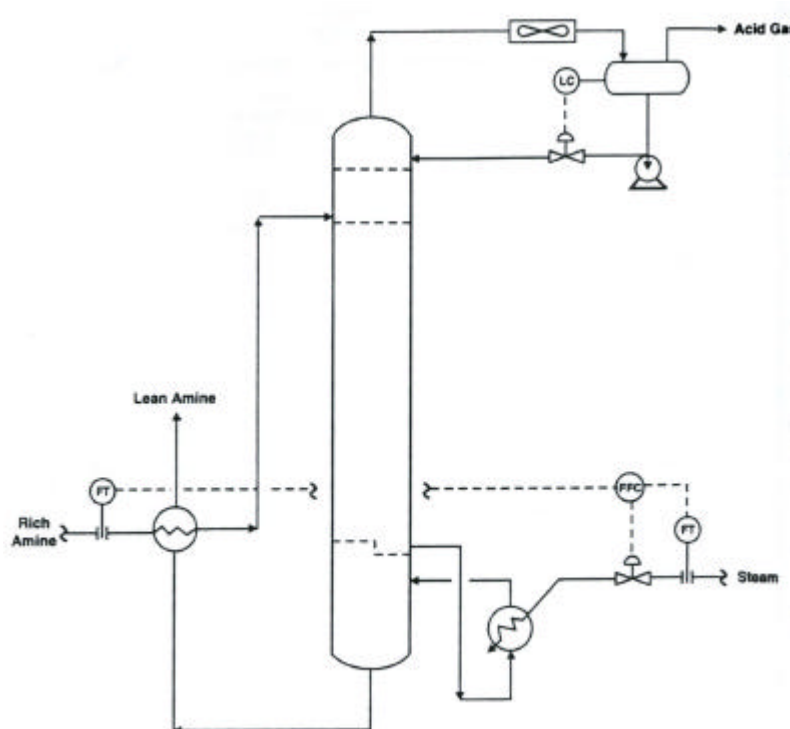


Figura 7.19. Flow Ratio Control para la columna de stripping.

- *Control de temperatura*: este método utiliza la temperatura entre el primer plato (el plato 2) de la columna y el condensador para controlar el flujo de calor aportado al reboiler, ya que, para una presión de operación dada, la temperatura de esa zona está relacionada directamente con el %molar de agua en el gas ácido es decir los moles



de reflujo de agua por mol de gas ácido que abandona la columna. Dependiendo de la temperatura de la zona, podemos conocer la carga de vapor de agua que sale con el gas ácido que depende del vapor aportado a la columna por el reboiler. Podemos ver un esquema de control en la Figura 7.20.

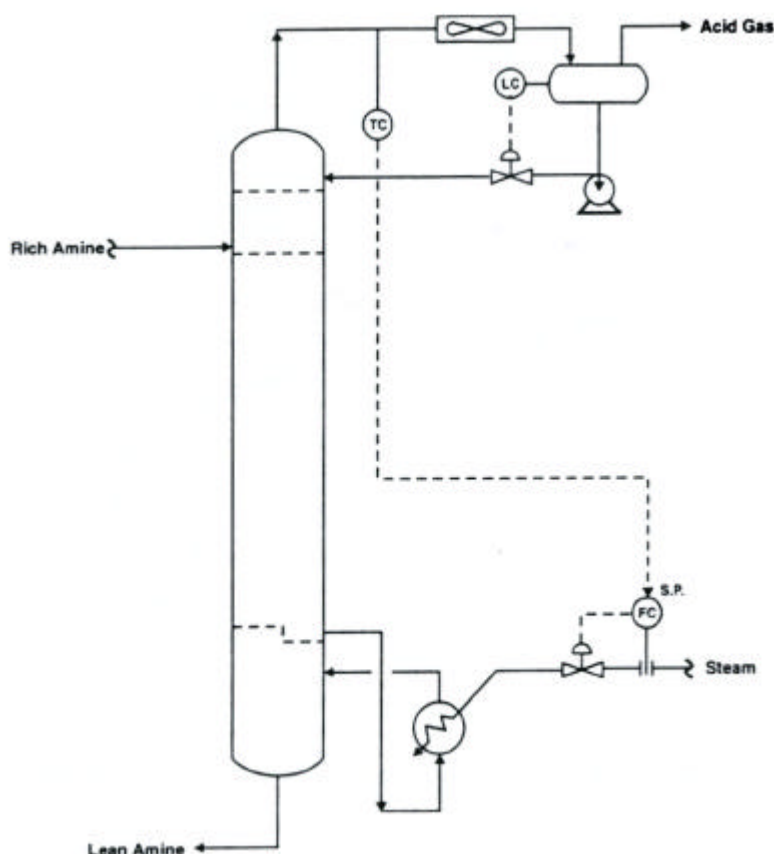


Figura 7.20. Control de la temperatura para la torre de desorción.

En cuanto a la columna de absorción, el parámetro más importante a tener en cuenta es la carga de gas ácido en la solución rica en relación con la temperatura. En la columna de absorción dada, la mayor parte del calor de reacción se libera en el fondo de la columna, ya que es ahí donde se alimenta el gas a tratar. Se produce por tanto un salto térmico durante la reacción, hasta que se alcanza una temperatura máxima, que dependerá de diversos factores, principalmente de la cantidad de reactivos. Si la cantidad de amina presente en esa zona es pequeña en relación con la cantidad de gas ácido, el salto de temperatura hasta la temperatura máxima, se localiza conforme vamos ascendiendo en la columna y la carga de gas ácido en la solución rica será mayor y por tanto, mayor corrosividad. Si por el contrario, la cantidad de amina es excesiva, este salto térmico se



produce prácticamente en el fondo y la carga de gas ácido será inferior (exceso de reactivo). Se emplea por tanto un medidor de temperatura de la zona media de la columna, que nos da una idea del perfil térmico del proceso y por tanto si la cantidad de de disolvente aportado es la apropiada en cada caso, como podemos ver en la Figura 7.21.

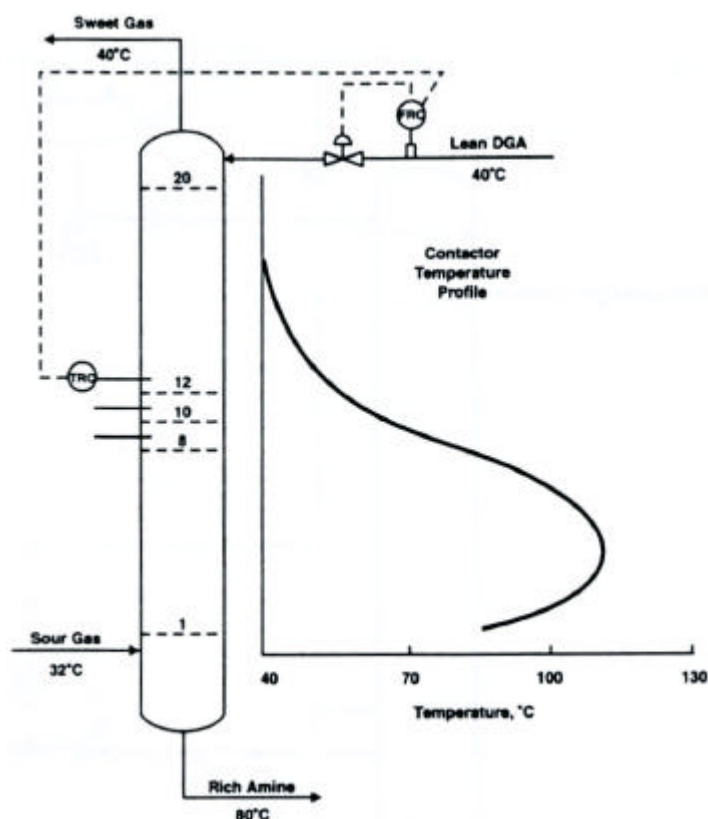


Figura 7.21. Control de la torre de absorción.

Este procedimiento minimiza los costes debidos a la corrosión causada por las cargas de gas ácido excesivas que pueden ocurrir eventualmente, además de contribuir en también en la reducción de los costes globales de regeneración y bombeo.

7.8.1 INSTRUMENTACIÓN

Con respecto a la instrumentación de la planta, el programa establece una instrumentación genérica para cada equipo y edita un diagrama P&I individual. En la evaluación económica del capítulo posterior establece una evaluación para una



instrumentación básica en los costes de inversión. A continuación mostraremos los diagramas P&I de los equipos principales.

7.8.1.1 ABSORBEDOR Y STRIPPER

En la Figura 7.20 se muestra el diagrama de instrumentación del absorbedor. En las Figuras 7.21, 7.22 y 7.23 aparecen los diagramas de la torre de stripping, el condensador y en reboiler.

Figura 7.20. Absorbedor.

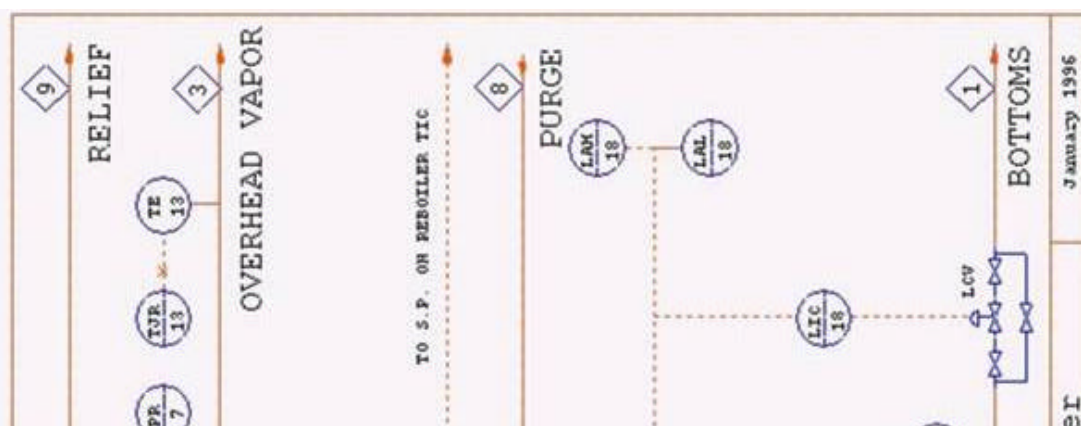


Figura 7.20. Stripper.



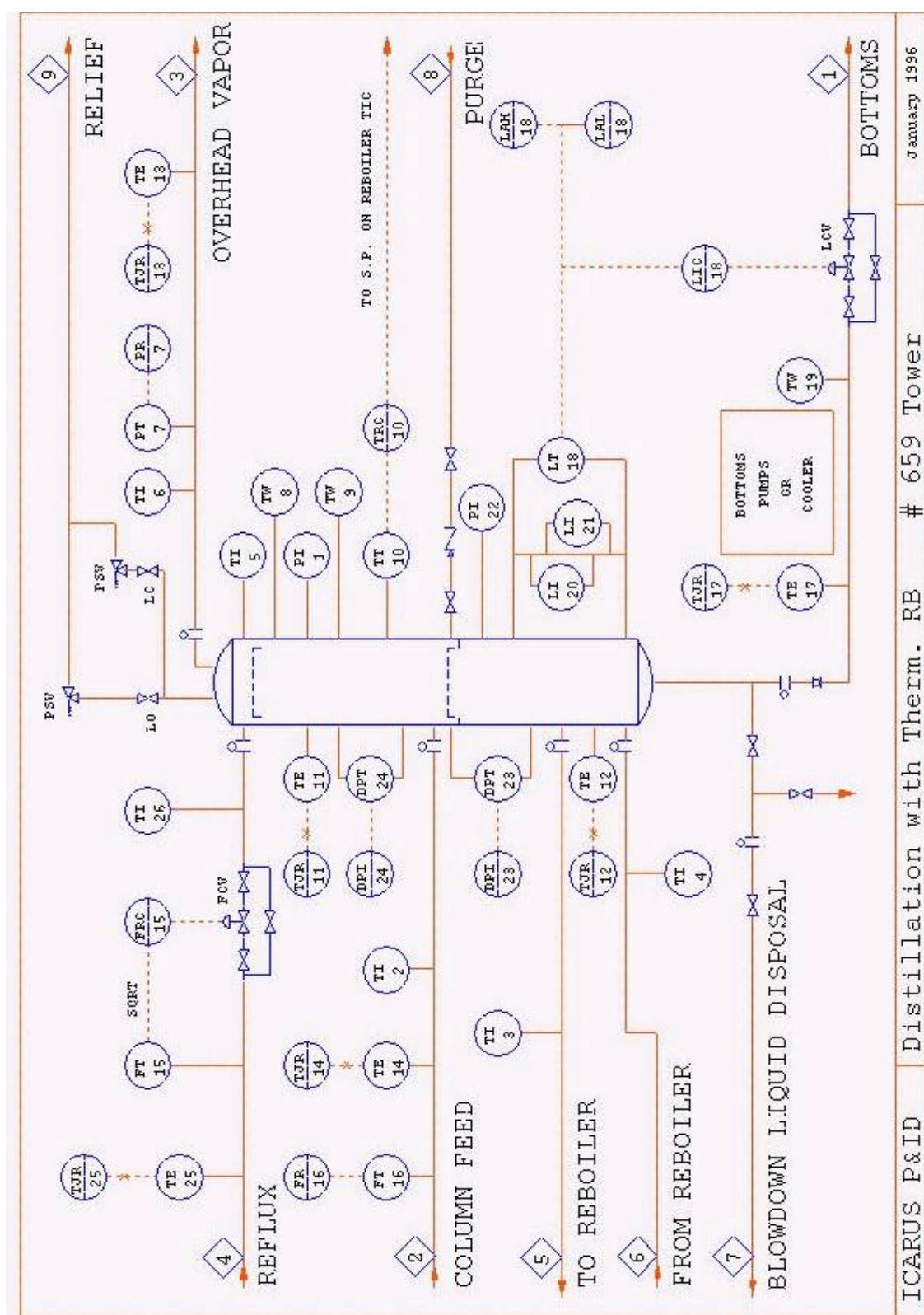


Figura 7.21. Reboiler.

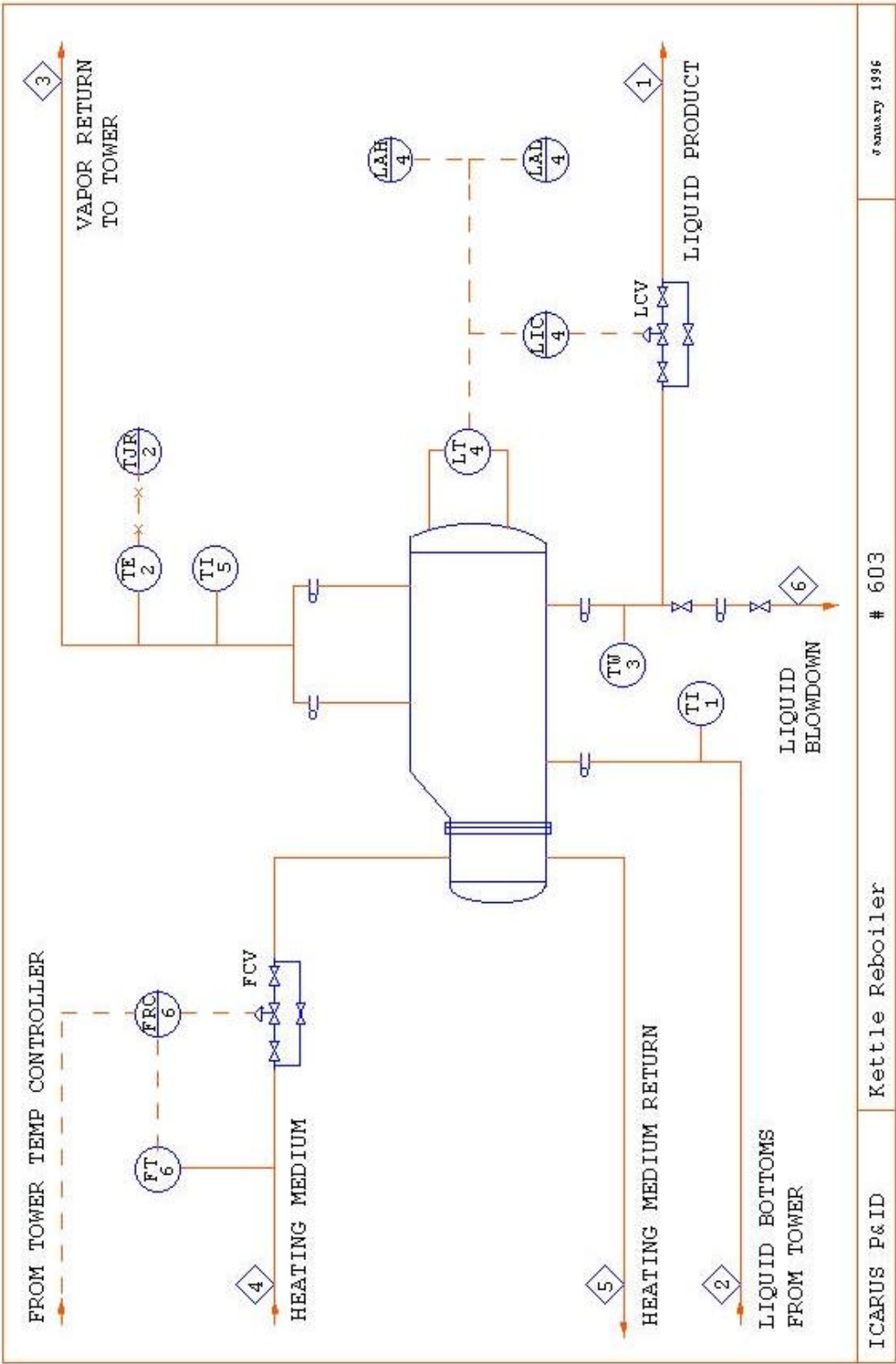
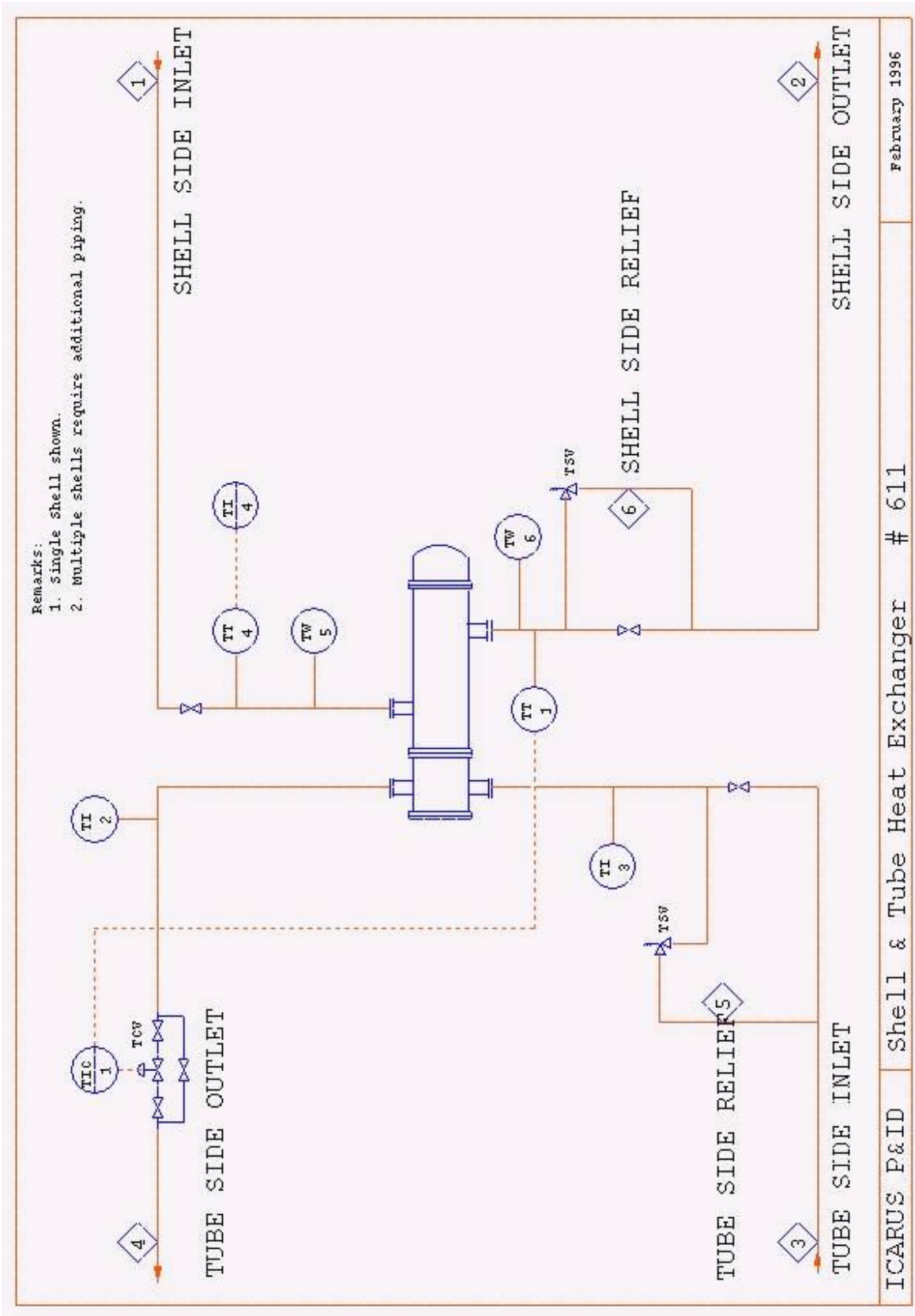


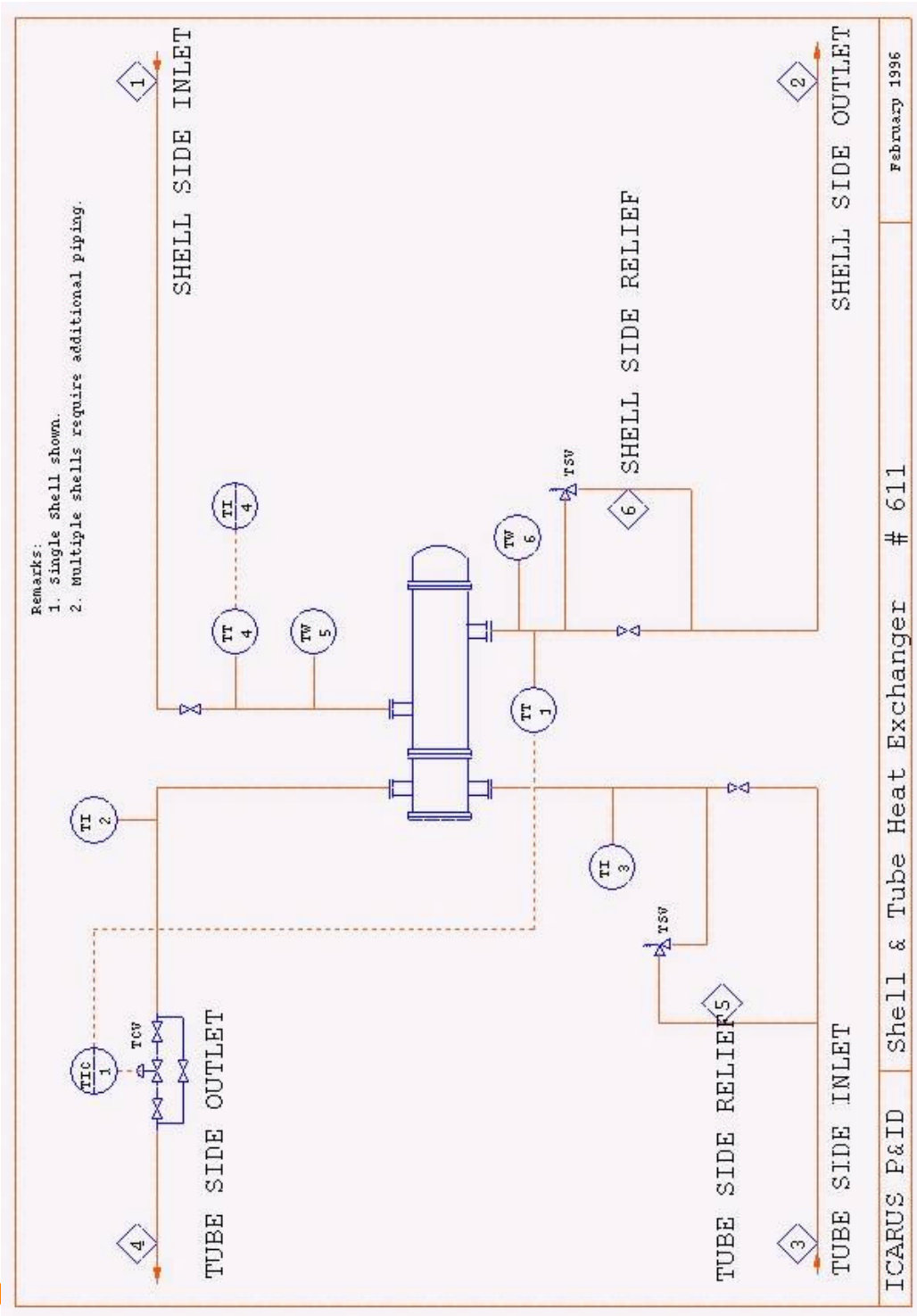
Figura 7.22. Condensador parcial.



7.8.1.2 INTERCAMBIADOR

A continuación mostramos el diagrama de instrumentación del intercambiador (Figura 7.23).

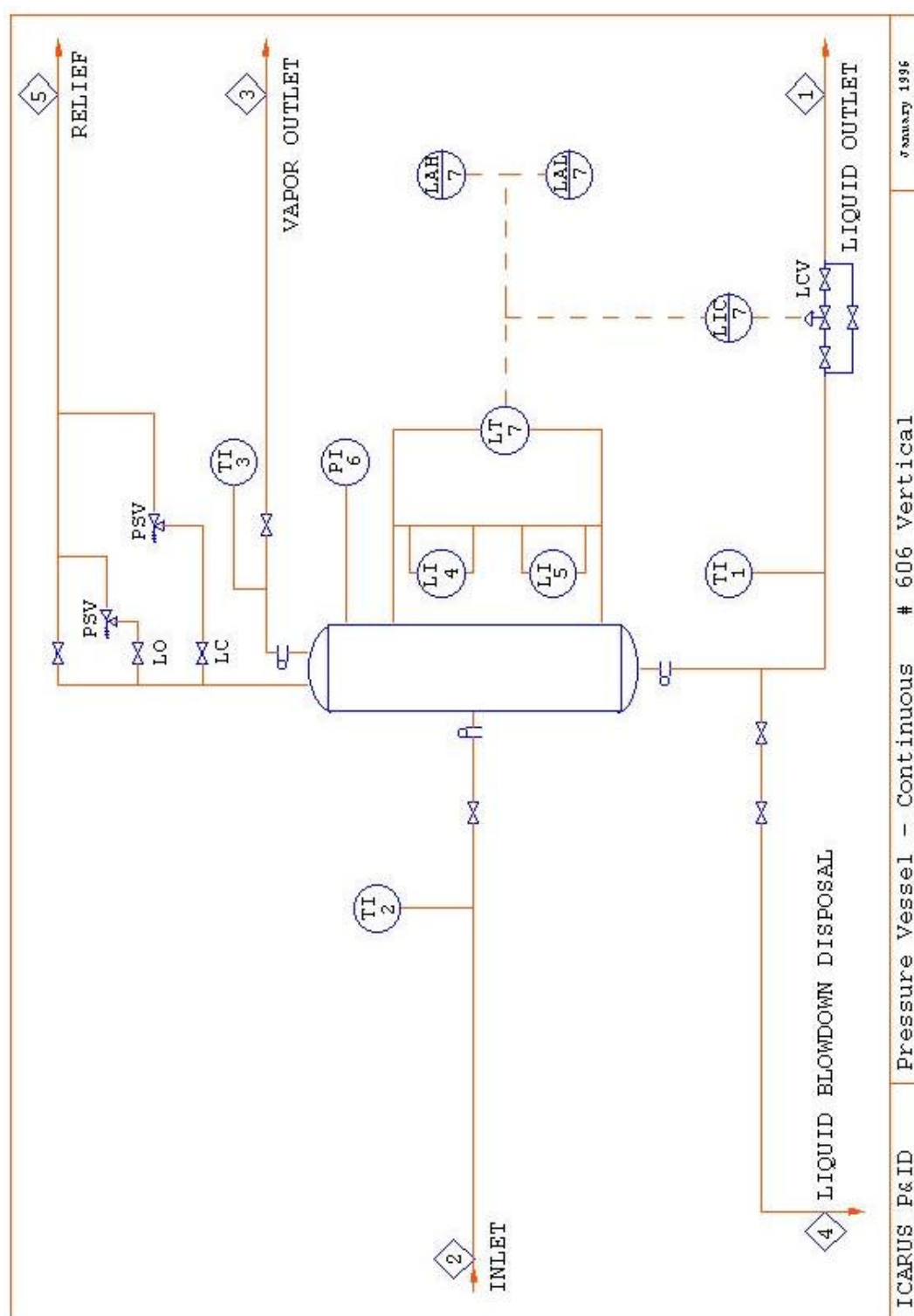
Figura 7.23. Intercambiador.



7.8.1.3 EQUIPOS AUXILIARES

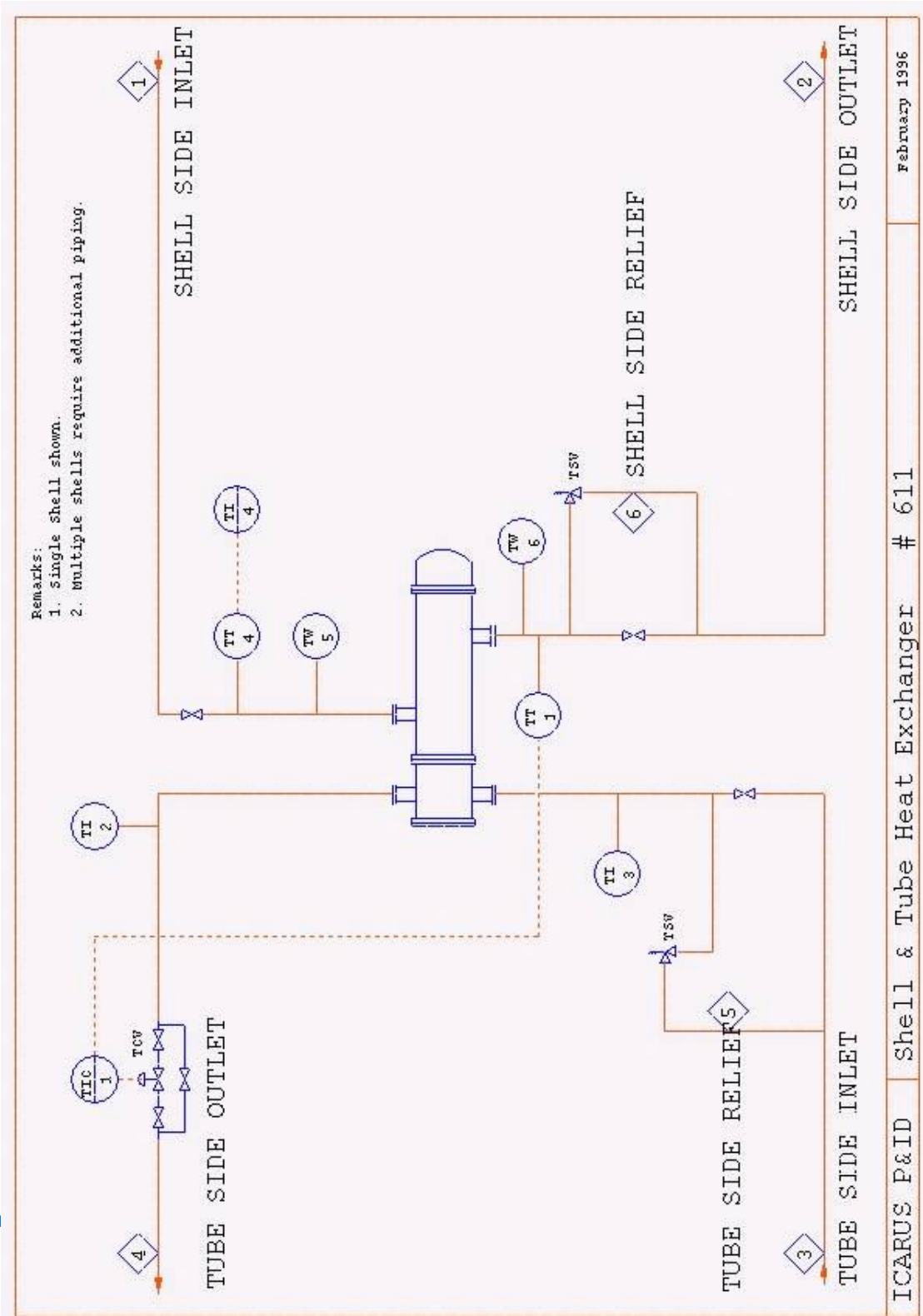
En la Figura 7.24 se muestra el diagrama de instrumentación del condensador.

Figura 7.24. Condensador.



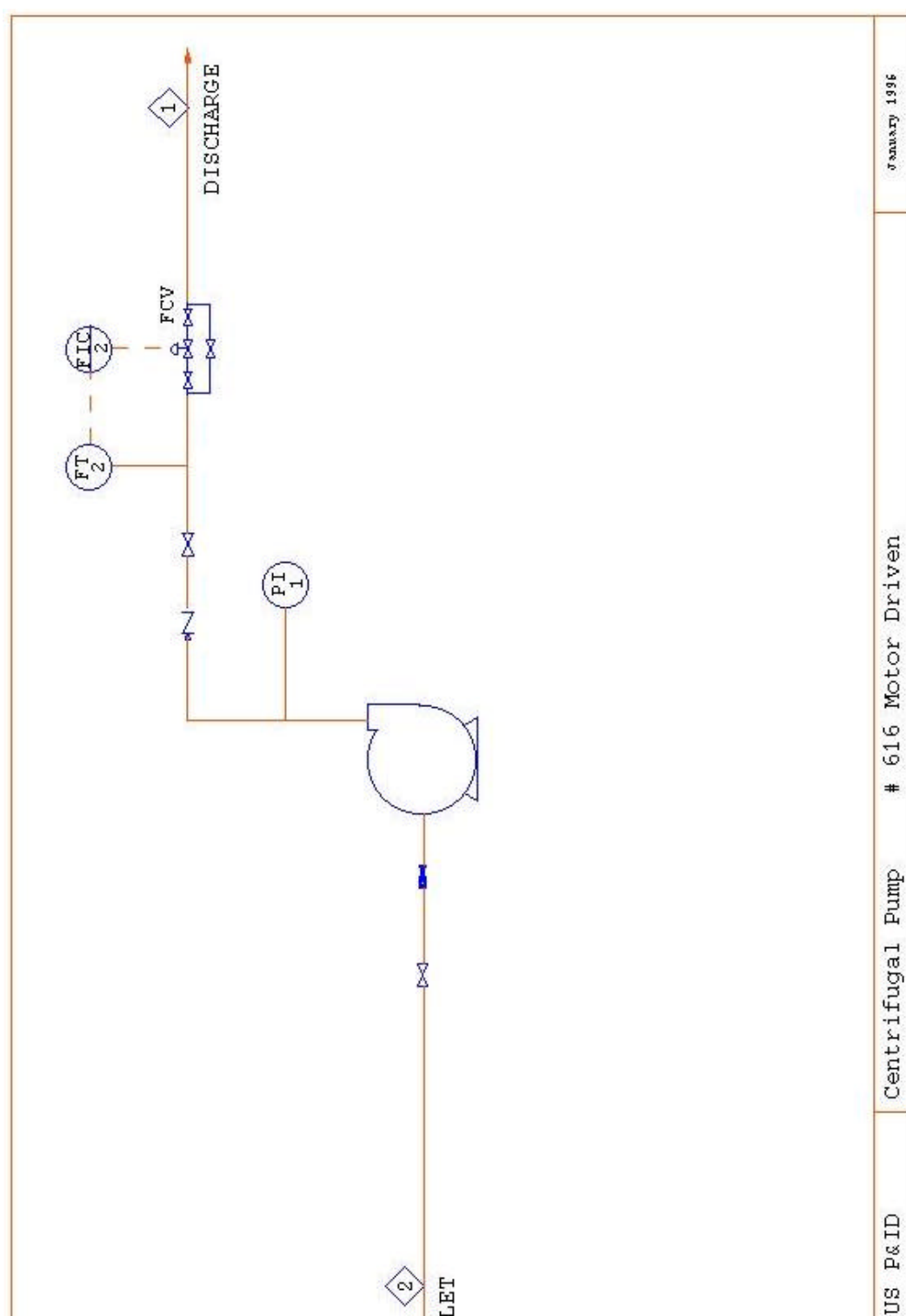
La Figura 7.25 muestra el diagrama de instrumentación del refrigerador.

Figura 7.25. Refrigerador.



En la Figura 7.26 se muestra el diagrama de instrumentación de la bomba.

Figura 7.26. Bomba.





8. EVALUACIÓN ECONÓMICA CON ASPEN ICARUS

La estimación del coste del equipamiento y otros costes relativos a la inversión de capital, juegan un importante papel en la selección de las distintas alternativas de proceso. En este capítulo mostraremos los resultados de la evaluación económica realizada con el programa Aspen Icarus Process Evaluator (IPE) y la compararemos con los distintos datos bibliográficos disponibles.

Para ello, debemos exportar los resultados obtenidos durante la simulación, realizando primero una simulación de la planta completa. Aspen IPE emplea los datos referentes a las propiedades físicas de los distintos componentes importándolos desde una plantilla, por lo que debemos cargar dichos datos dirigiéndonos al menú principal y seleccionando **File/Import/Template/Electrolytes/Load**. Una vez importadas las plantillas cargamos los resultados de la simulación seleccionando **File/Send to/Aspen Icarus**, como se muestra en la Figura 8.1.

A continuación escogemos las unidades de trabajo, en nuestro caso *METRIC*, y damos un nombre al proyecto y al escenario, el programa, por defecto, asigna un nombre genérico a los escenarios del proyecto, como se muestra en la Figura 8.2.

Nos situamos en el entorno del programa y en la parte izquierda de la ventana aparecen los distintos componentes de la planta (**Main Project/Miscellaneous Flowsheet Area**). Con el ratón seleccionamos cada elemento (**Item**) y con el botón derecho seleccionamos la opción **Map**, de manera que el programa carga los datos desde el archivo Aspen Plus. Como puede verse en la Figura 8.3, seleccionamos los componentes de cada equipo, en el caso del stripper por ejemplo, el equipo está constituido por la torre, el condensador y el reboiler, cada uno de los cuales se evalúa por separado, dependiendo de la configuración. Una vez cargados los distintos equipos, pulsando de nuevo el botón derecho del ratón, nos dirigimos a la opción **Size Item** y el programa configura el elemento seleccionado. A continuación, seleccionamos **Evaluate Item** y el programa realizará la evaluación económica del equipo. Una vez cargados todos los componentes y evaluados individualmente, podemos realizar la evaluación completa del proyecto.



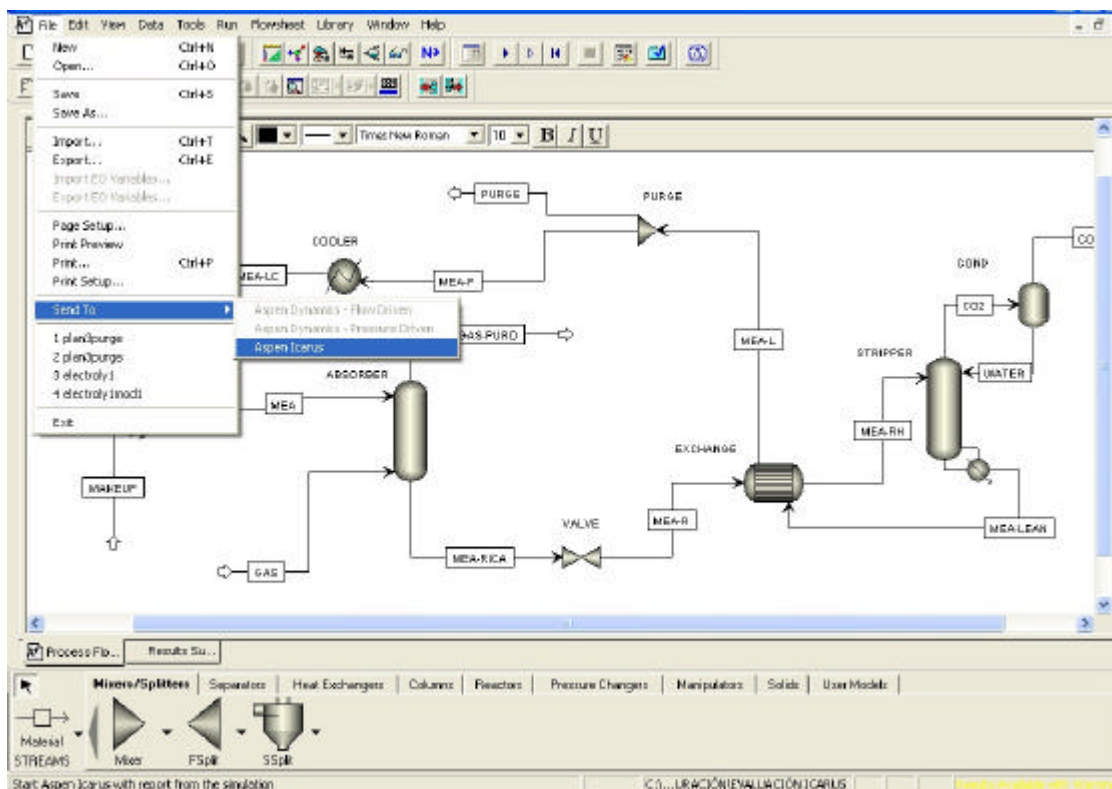


Figura 8.1

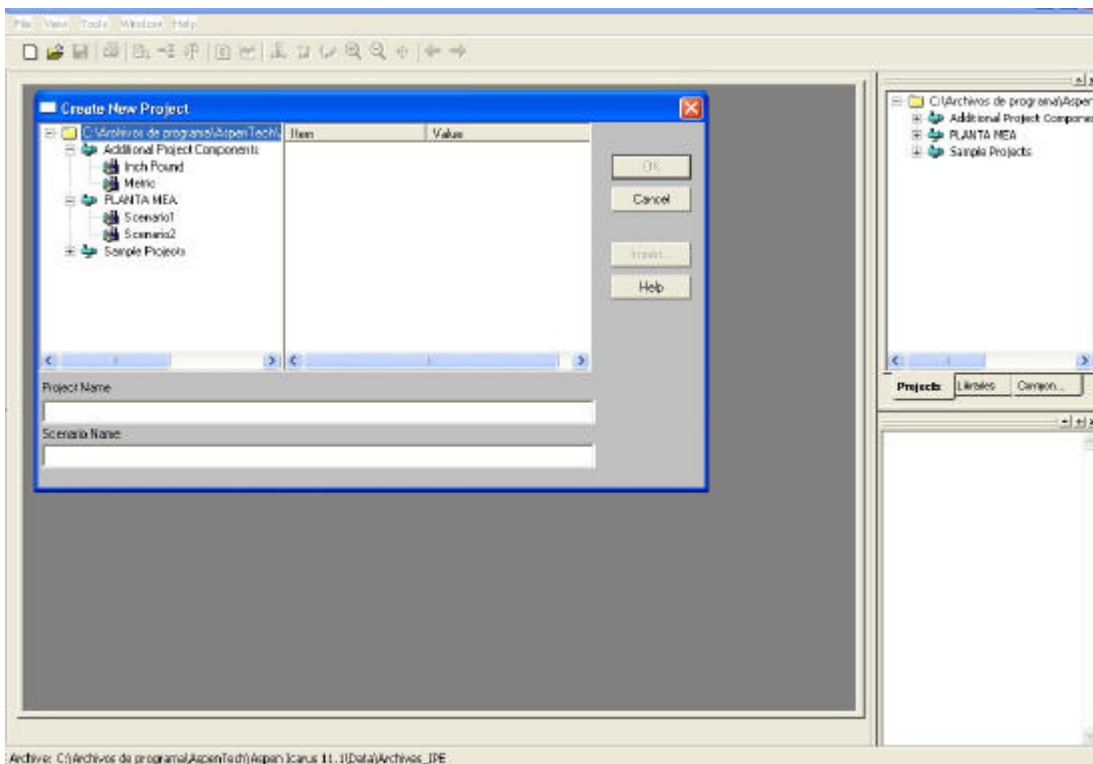


Figura 8.2



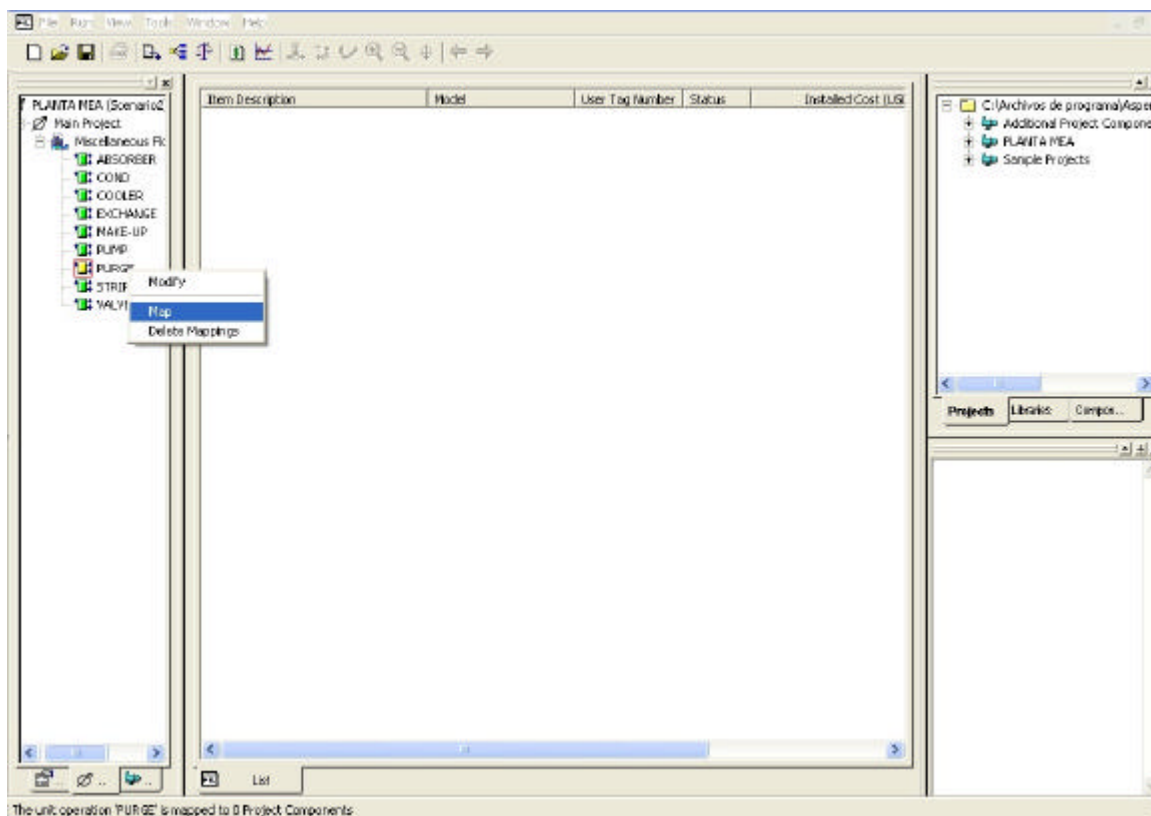


Figura 8.3

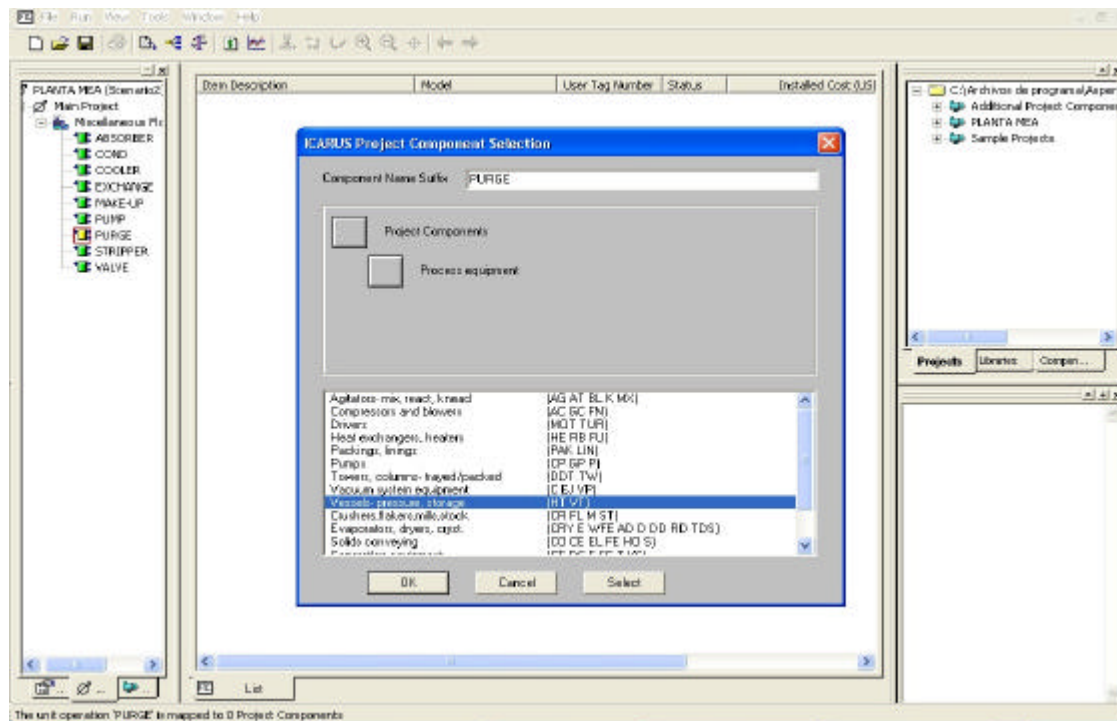


Figura 8.4



8.1 INVERSIÓN EN EQUIPOS

A continuación presentaremos los resultados de las evaluaciones económicas de los distintos componentes de la planta, teniendo en cuenta que el programa sólo evalúa los equipos principales. Los resultados se presentan en USD₂₀₀₁.

8.1.1 ABSORBEDOR

Seleccionamos la opción **Item Report** y nos aparece una ventana que contiene todos los campos relacionados con el equipo:

- Datos del proceso (corrientes asociadas, datos de dichas corrientes, componentes).
- Datos de diseño (los obtenidos del archivo de Aspen Plus).
- Resumen de costes.

A continuación presentamos el resumen de los costes del equipo extraídos del informe del equipo (Tabla 8.1):

Tabla 8.1.

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	116800	2920	143
Piping	47509	19853	865
Civil	4146	4400	260
Structural Steel	7362	4662	258
Instrumentation	36711	16566	722
Electrical	1138	658	32
Insulation	10864	10521	540
Paint	964	2078	133
Subtotal	225494	61658	2953

Total material and manpower cost = **USD 278200**.



8.1.2 INTERCAMBIADOR

El diseño del intercambiador se realizó con el programa Aspen Hetran de manera que además de aportar datos de diseño, también realiza una estimación económica del coste total del sistema de intercambio de calor, situándolo en 842580 USD.

A pesar de ello, cargamos el equipo EXCHANGE en el IPE, de manera que realizase una evaluación económica del intercambiador conjuntamente con el resto de los componentes. En primer lugar el programa realiza un dimensionamiento, los resultados se muestran a continuación (Tabla 8.2).

Tabla 8.2

Description	Value	Units
Duty	5.808887e+007	W
Lmtd	5.068587	Deg C
Raw surface area	7958.533	m ²
Side for hot stream	Tube	
Temperature correction factor	0.9	

Los datos de diseño del programa se presentan en la Tabla 8.3.

Tabla 8.3

Parameter	Value	Units
Item type	FLOAT HEAD	
Number of identical items	1	
GENERAL DESIGN DATA		
TEMA type	BES	
Heat exchanger design option	STAND	
Heat transfer area	9152.313	m ²
Area per shell	572.020	m ²
Number of tube passes	2	
Number of shell passes	1	



Vendor grade	HIGH	
SHELL DATA		
Shell material	A285C	
Shell diameter	1200.000	mm
Shell length	7.0000	m
Shell design gauge pressure	345.000	KPa
Shell design temperature	128.000	Deg C
Shell operating temperature	128.000	Deg C
Shell corrosion allowance	3.0002	mm
Shell wall thickness	12.000	mm
ASA rating Shell side	150	CLASS
Number of baffles	15	
Shell fabrication type	PLATE	
Expansion joint	NO	
TUBE DATA		
Tube material	A 214	
Number of tubes per shell	1180	
Tube outside diameter	25.400	mm
Tube length extended	6.0960	m
Tube design gauge pressure	345.000	KPa
Tube design temperature	138.000	Deg C
Tube operating temperature	138.000	Deg C
Tube corrosion allowance	0.0600	mm
Tube wall thickness	3.1750	mm
Tube pitch symbol	TRIANGULAR	
Tube pitch	31.750	mm
Tube seal type	SEALW	
TUBE SHEET DATA		
Tube sheet material	A 515	



Tube sheet thickness	35.000	mm
Tube sheet corrosion allowance	3.0001	mm
Channel material	A 515	
FLOATING HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
Floating head thickness	7.0002	mm
SHELL SIDE HEAD DATA		
Head material Shell side	A285C	
ASA rating Shell side	150	CLASS
Head thickness Shell side	12.000	mm
HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
ASA rating Tube side	150	CLASS
Head thickness Tube side	7.0002	mm
WEIGHT DATA		
Shell	2600	Kg
Tubes	12500	Kg
Heads	650	Kg
Internals and baffles	1000	Kg
Nozzles	270	Kg
Flanges	1000	Kg
Base ring and lugs	20	Kg
Tube sheet	390	Kg
Saddles	180	Kg
Fittings and miscellaneous	1300	Kg
Total weight per item	19900	Kg
Total weight	318400	Kg
VENDOR COST DATA		
Material cost	29661	DOLLARS



Shop labor cost	12686	DOLLARS
Shop overhead cost	11671	DOLLARS
Office overhead cost	5099	DOLLARS
Profit	5452	DOLLARS
Total cost	1033100	DOLLARS
Cost per unit weight	3.2447	USD/ Kg
Cost per unit area	112.879	USD m ²
Cost per shell	64568	USD/SHEL

El coste total se estima en la Tabla 8.4.

Tabla 8.4

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	1033100	12999	592
Piping	436316	90820	3947
Civil	7624	7610	447
Structural Steel	0	0	0
Instrumentation	12464	2867	125
Electrical	0	0	0
Insulation	77058	47410	2429
Paint	3047	6612	422
Subtotal	1569609	168318	7962

Total material and manpower cost =USD 1737900.

Como podemos ver en la fila relativa al coste del equipamiento (*Equipment and Setting*) se valora por un total de 1033100 USD, algo superior a la valoración realizada por el Aspen Hetran, aunque tenemos que tener en cuenta que en este último caso, la estimación económica es aproximada.

8.1.3 STRIPPER



La columna de stripping consta de la torre propiamente dicha, el condensador parcial y el reboiler. Para cada componente, el programa realiza una valoración independiente. En la Tabla 8.5 aparecen los datos de diseño finales indicando los pesos de material para su evaluación.

Tabla 8.5

Parameter	Value	Units
Item type	TRAYED	
Number of identical items	1	
WEIGHT DATA		
Shell	53200	Kg
Trays and supports	63600	Kg
Heads	19800	Kg
Nozzles	90	Kg
Manholes and Large nozzles	3300	Kg
Skirt	34300	Kg
Base ring and lugs	4100	Kg
Ladder clips	100	Kg
Platform clips	330	Kg
Fittings and miscellaneous	70	Kg
Total weight	178900	Kg
VENDOR COST DATA		
Cost per unit Trays and supports	8418	DOLLARS
Labor per unit Trays and support	96	MH/TRAY
Material cost	236507	DOLLARS
Field fabrication cost	162950	DOLLARS
Fabrication labor	4092	HOURS
Shop labor cost	50642	DOLLARS
Shop overhead cost	52158	DOLLARS
Office overhead cost	85384	DOLLARS



Profit	88159	DOLLARS
Total cost	675800	DOLLARS
Cost per unit weight	3.7775	USD/Kg
Cost per tray	35568	DOLLARS
Cost per unit height or length	45715	USD/m

En cuanto a la valoración económica de la torre de desorción, los datos se presentan en la Tabla 8.6.

Tabla 8.6

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	675800	21176	1034
Piping	269328	56836	2482
Civil	23895	22188	1298
Structural Steel	20833	13722	761
Instrumentation	54149	16715	728
Electrical	2233	1200	59
Insulation	50223	45062	2319
Paint	2569	5084	324
Subtotal	1099030	181983	9005

Total material and manpower cost = USD 1281000.

Para el caso del condensador parcial de la torre de stripping, los resultados del dimensionamiento de materiales y pesos se muestran en la Tabla 8.7.



Tabla 8.7

Parameter	Value	Units
Item type	FIXED T S	
Number of identical items	1	
TUBE SHEET DATA		
Tube sheet material	A 515	
Tube sheet thickness	20.000	mm
Tube sheet corrosion allowance	3.0001	mm
Channel material	A 515	
HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
ASA rating Tube side	150	CLASS
Head thickness Tube side	7.0002	mm
WEIGHT DATA		
Shell	640	Kg
Tubes	1600	Kg
Heads	100	Kg
Internals and baffles	60	Kg
Nozzles	80	Kg
Flanges	160	Kg
Base ring and lugs	7	Kg
Tube sheet	46	Kg
Saddles	38	Kg
Fittings and miscellaneous	320	Kg
Total weight	3100	Kg
VENDOR COST DATA		
Material cost	5696	DOLLARS
Shop labor cost	4487	DOLLARS
Shop overhead cost	3967	DOLLARS



Office overhead cost	1557	DOLLARS
Profit	1793	DOLLARS
Total cost	17500	DOLLARS
Cost per unit weight	5.6452	USD/Kg
Cost per unit area	236.148	USD/m ²

A continuación se muestran los resultados de la valoración económica (Tabla 8.8).

Tabla 8.8

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	17500	841	38
Piping	13302	9167	401
Civil	721	1187	71
Structural Steel	0	0	0
Instrumentation	7692	2850	124
Electrical	0	0	0
Insulation	5513	3664	186
Paint	290	699	45
Subtotal	45018	18408	865

Total material and manpower cost= USD 63400.

Considerando además el tanque de reflujo de condensado cuyas dimensiones y datos de diseño se indicaron en el capítulo anterior, se muestran a continuación los datos referentes al peso de materiales y costes unitarios (Tabla 8.9).



Tabla 8.9.

Parameter	Value	Units
Item type	HORIZ DRUM	
Number of identical items	1	
WEIGHT DATA		
Shell	1700	Kg
Heads	730	Kg
Nozzles	80	Kg
Manholes and Large nozzles	180	Kg
Base ring and lugs	39	Kg
Saddles	580	Kg
Total weight	3300	Kg
VENDOR COST DATA		
Material cost	2556	DOLLARS
Shop labor cost	5644	DOLLARS
Shop overhead cost	5942	DOLLARS
Office overhead cost	2404	DOLLARS
Profit	2454	DOLLARS
Total cost	19000	DOLLARS
Cost per unit weight	5.7576	USD/Kg
Cost per unit liquid volume	1160.750	USD/m ³

A continuación se presenta el resumen de costes (Tabla 8.10).

Tabla 8.10



Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	19000	511	25
Piping	15733	9691	423
Civil	2616	3043	180
Structural Steel	0	0	0
Instrumentation	29296	3734	160
Electrical	0	0	0
Insulation	6280	5512	282
Paint	309	751	48
Subtotal	73234	23242	1118

Total material and manpower cost= USD 96500.

Para el caso del reboiler de la columna, los datos referentes al dimensionado, materiales y precios se muestran a continuación (Tabla 8.11).

Tabla 8.11

Parameter	Value	Units
Item type	U TUBE	
Number of identical items	1	
TUBE SIDE HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
ASA rating Tube side	150	CLASS
Head thickness Tube side	7.0002	mm
SHELL SIDE HEAD DATA		
Head material Shell side	A285C	
ASA rating Shell side	150	CLASS
Head thickness Shell side	12.000	mm
WEIGHT DATA		



Shell	2100	Kg
Tubes	6100	Kg
Heads	420	Kg
Internals and baffles	570	Kg
Nozzles	360	Kg
Flanges	390	Kg
Base ring and lugs	20	Kg
Tube sheet	340	Kg
Saddles	340	Kg
Fittings and miscellaneous	890	Kg
Total weight per item	11500	Kg
Total weight	69000	Kg
VENDOR COST DATA		
Material cost	17949	DOLLARS
Shop labor cost	10851	DOLLARS
Shop overhead cost	10059	DOLLARS
Office overhead cost	3978	DOLLARS
Profit	4313	DOLLARS
Total cost	282900	DOLLARS
Cost per unit weight	4.1000	USD/Kg
Cost per unit area	168.157	USD/m ²
Cost per shell	47150	USD/SHEL

El sumario de costes se presenta en la siguiente tabla (Tabla 8.12)



Tabla 8.12.

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	282900	4979	227
Piping	141155	32574	1421
Civil	3681	4037	238
Structural Steel	0	0	0
Instrumentation	18833	4626	202
Electrical	0	0	0
Insulation	28772	17438	893
Paint	1069	2359	150
Subtotal	476410	66013	3131

Total material and manpower cost= **USD 542400.**

Para el caso de la bomba de reflujo del stripper, los datos referentes a los materiales y pesos se muestran a continuación (Tabla 8.13).

Tabla 8.13.

Parameter	Value	Units
Item type	CENTRIF	
Number of identical items	1	
WEIGHT DATA		
Pump	170	Kg
Motor	280	Kg
Base plate	39	Kg
Fittings and miscellaneous	33	Kg
Total weight	530	Kg
VENDOR COST DATA		
Motor cost	2681	DOLLARS



Material cost	749	DOLLARS
Shop labor cost	1883	DOLLARS
Shop overhead cost	1921	DOLLARS
Office overhead cost	1230	DOLLARS
Profit	1336	DOLLARS
Total cost	9800	DOLLARS
Cost per unit weight	18.491	USD/Kg
Cost per unit liquid flow rate	217.637	USD/l/s
Cost per unit power	217.778	USD/KW

La valoración económica de la bomba se muestra a continuación (Tabla 8.14)

Tabla 8.14.

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	9800	914	45
Piping	12333	5682	248
Civil	459	840	50
Structural Steel	0	0	0
Instrumentation	6234	1741	76
Electrical	659	961	45
Insulation	3770	2196	112
Paint	200	485	31
Subtotal	33455	12819	607

Total material and manpower cost= USD 46300.

Además de los componentes citados anteriormente, el programa considera dos divisores de corriente, para la parte superior e inferior de la columna pero no los valora económicamente.



8.1.4 CONDENSADOR

El condensador se modeló como un separador flash, de manera que los datos referentes al dimensionado, materiales y costes unitarios se muestran en la Tablas 8.15.

Tabla 8.15. Dimensionamiento del condensador.

Parameter	Value	Units
Item type	CYLINDER	
Number of identical items	1	
WEIGHT DATA		
Shell	1500	Kg
Heads	2700	Kg
Nozzles	70	Kg
Base ring and lugs	180	Kg
Structural steel	47	Kg
Total weight	490	Kg
VENDOR COST DATA	70	
Material cost	5100	DOLLARS
Shop labor cost		DOLLARS
Shop overhead cost	3534	DOLLARS
Office overhead cost	7559	DOLLARS
Profit	7946	DOLLARS
Total cost	3237	DOLLARS
Cost per unit weight	3124	USD/KG
Cost per unit liquid volume	25400	USD/m ³

En la Tabla 8.16 aparece el sumario de costes.



Tabla 8.16.

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	25400	512	25
Piping	15713	9568	417
Civil	4891	5011	297
Structural Steel	0	0	0
Instrumentation	28366	3733	160
Electrical	0	0	0
Insulation	7158	7872	405
Paint	301	734	47
Subtotal	81829	27430	1351

Total material and manpower cost= **USD 109300.**

8.1.5 REFRIGERADOR

En este caso, como ocurre con la torre de stripping, el programa realiza un diseño más detallado del equipo lo que nos permite obtener un dimensionamiento y unos datos de diseño más rigurosos que el realizado por el Aspen Plus. En la Tabla 8.17 se muestran los resultados obtenidos relativos los materiales y precios. En la Tabla 8.18, aparece indicado el resumen de costes del equipo.



Tabla 8.17. Datos de diseño.

Parameter	Value	Units
Item type	FLOAT HEAD	
TUBE SHEET DATA		
Tube sheet material	SS316	
Tube sheet thickness	40.000	mm
Tube sheet corrosion allowance	3.0001	mm
Channel material	A 515	
FLOATING HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
Floating head thickness	7.0002	mm
SHELL SIDE HEAD DATA		
Head material Shell side	A285C	
ASA rating Shell side	150	CLASS
Head thickness Shell side	12.000	mm
HEAD DATA		
Head material Tube side	A 515	
ASA rating Tube side	150	CLASS
Head thickness Tube side	7.0002	mm
WEIGHT DATA		
Shell	2500	Kg
Tubes	11500	Kg
Heads	600	Kg
Internals and baffles	970	Kg
Nozzles	270	Kg
Flanges	930	Kg
Base ring and lugs	18	Kg
Tube sheet	410	Kg
Saddles	170	Kg



Fittings and miscellaneous	1300	Kg
Total weight per item	18700	Kg
Total weight	93500	Kg
VENDOR COST DATA		
Material cost	27762	DOLLARS
Shop labor cost	12423	DOLLARS
Shop overhead cost	11497	DOLLARS
Office overhead cost	4921	DOLLARS
Profit	5277	DOLLARS
Total cost	309400	DOLLARS
Cost per unit weight	3.3091	USD/KG
Cost per unit area	117.264	USD/M2
Cost per shell	61880	USD/SHEL

Tabla 8.18 Resumen de costes.

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	309400	2634	120
Piping	63361	23360	1024
Civil	2446	2892	171
Structural Steel	0	0	0
Instrumentation	10055	2867	125
Electrical	0	0	0
Insulation	23254	15251	782
Paint	967	2308	147
Subtotal	409483	49312	2369

Total material and manpower cost= **USD 458800.**

8.1.6 BOMBA



Con la bomba ocurre un caso similar al anterior, de manera que los datos de diseño de materiales y pesos se muestran a continuación (Tabla 8.19).

Tabla 8.19.

Parameter	Value	Units
Item type	CENTRIF	
WEIGHT DATA		
Pump	5300	Kg
Motor	1800	Kg
Base plate	1100	Kg
Fittings and miscellaneous	940	Kg
Total weight	9100	Kg
VENDOR COST DATA		
Motor cost	46856	DOLLARS
Material cost	5056	DOLLARS
Shop labor cost	57783	DOLLARS
Shop overhead cost	58938	DOLLARS
Office overhead cost	28668	DOLLARS
Profit	31599	DOLLARS
Total cost	228900	DOLLARS
Cost per unit weight	25.154	USD/Kg
Cost per unit liquid flow rate	571.545	USD/l/s
Cost per unit power	363.333	USD/KW

En la siguiente tabla (Tabla 8.20), se resumen los costes del equipo.



Tabla 8.20

Item	Material(USD)	Manpower(USD)	Manhours
Equipment&Setting	228900	6672	326
Piping	51626	15585	677
Civil	2466	2768	164
Structural Steel	0	0	0
Instrumentation	11177	3111	134
Electrical	948	1049	49
Insulation	7078	4406	224
Paint	443	1086	69
Subtotal	302638	34677	1643

Total material and manpower cost= **USD 337300.**

En el siguiente cuadro (Cuadro 8.1) se muestra un resumen de los costes totales de instalación de los equipos descritos anteriormente.

EQUIPO	COSTE (USD ₂₀₀₁)	COSTE TOTAL EQUIPO INSTALADO (USD ₂₀₀₁)
ABSORBER-Tower	225494	388100
EXCHANGE	1569609	1737900
STRIPPER-Tower	1099030	671500
STRIPPER-Cond	45018	63400
STRIPPER-Tank	73234	96500
STRIPPER-Reflux pump	33455	46300
STRIPPER-Reboiler	476410	542400
COND	81829	109300
COOLER	409483	458800
PUMP	30638	337300
TOTAL	4044200	4451500
TOTAL (€ ₂₀₀₄)	3356686	3694745

Cuadro 8.1



8.2 COSTES DE OPERACIÓN

Una vez evaluados todos los equipos que constituyen el sistema, pasamos a realizar la estimación de los costes de operación del proyecto con la opción *Evaluate Project* del menú principal. Los datos obtenidos se presentan en un informe que presentamos a continuación. En la Tabla 8.21 se muestran los parámetros empleados en la evaluación de los costes de operación.

ITEM	UNITS	VALUE
OPERATING COSTS PARAMETERS		
Operating Supplies (lump-sum)	Cost/period	0.0
Laboratory Charges (lump-sum)	Cost/period	0.0
User Entered Operating Charges (as percentage)	Percent/period	25
Operating Charges (Percent of Operating Labor Costs)	Percent/period	25
Plant Overhead (Percent of Operating Labor and Maintenance Costs)	Percent/period	50
G and A Expenses (Percent of Subtotal Operating Costs)	Percent/period	4
Tax Rate	Percent/period	40
Interest Rate	Percent/period	20
Economic Life of Project	Period	10
Salvage Value (Fraction of Initial Capital Cost)	Percent	20
TIME PERIOD		
Period Description		Year
Operating Hours per Period	Hours/period	8000
Number of Weeks per Period	Weeks/period	52
Number of Periods for Analysis	Period	20

Tabla 8.21.

En la tabla anterior, aparecen en primer lugar los parámetros que se consideran a la hora de realizar la evaluación de los costes de operación, en tanto por ciento. Entre ellos, aparece un parámetro "G and A Expenses", que hace referencia a los gastos generales y de administración durante la producción, tales como salarios, tasas, distribución del producto, costes relacionados con las ventas, etc. El programa por defecto, le asigna un valor del 8% sobre el coste de operación, nosotros hemos cambiado el valor de este parámetro al 4%, ya que consideramos que el anterior es elevado. Por otra parte no se



tendrá en cuenta a la hora de calcular los costes unitarios ya que en nuestro, la planta no está orientada a la comercialización caso de un producto concreto.

En la Tabla 8.22 se muestran los costes de las principales utilidades:

Tabla 8.22.

UTILITIES COSTS		
Electricity		
Rate	KW	729.992
Unit Cost	Cost/KWH	0.0354
Total Electricity Cost	Cost/period	206734
Potable Water		
Rate		
Unit Cost	Cost/M3	0.00
Total Potable Water Cost	Cost/period	0
Fuel		
Rate		
Unit Cost	Cost/MEGAWH	0.002427
Total Fuel Cost	Cost/period	0
Instrument Air		
Rate		
Unit Cost	Cost/M3	0.00
Total Instrument Air Cost	Cost/period	0
Subtotal Cost	Cost/period	206734
Process Utilities		
Steam @2760KPA		
Rate		
Unit Cost	Cost/TON	11.77
Total Cost	Cost/period	0
Steam @1135KPA		
Rate		
Unit Cost	Cost/TON	9.81
Total Cost	Cost/period	0
Steam @690KPA		
Rate	TON/H	179.501
Unit Cost	Cost/TON	8.18
Total Cost	Cost/period	1,17E+7
Cooling Water		
Rate	M3/H	2906,22
Unit Cost	Cost/M3	0.0145
Total Cost	Cost/period	337122
Subtotal Cost	Cost/period	1,21E+7



A continuación mostramos los costes relativos al trabajo y a mantenimiento (Tabla 8.23).

Tabla 8.23.

OPERATING LABOR AND MAINTENANCE COSTS		
Operating Labor		
Operators per Shift		2
Unit Cost	Cost/Operator/H	20
Total Operating Labor Cost	Cost/period	320000
Maintenance		
Cost/8000 Hours		108000
Total Maintenance Cost	Cost/period	108000
Supervision		
Supervisors per Shift		1
Unit Cost	Cost/Supervisor/H	35
Total Supervision Cost	Cost/period	280000

En la Tabla 8.24 aparecen los costes asociados a las materias primas:

Tabla 8.24.

RAW MATERIALS COSTS AND PRODUCTS SALES		
Raw Materials Cost per Hour	Cost/Hour	148.217
Total Raw Materials Cost	Cost/Period	1.185E+6
Products Sales per Hour	Cost/Hour	0
Total Products Sales	Cost/Period	0

Para evaluar el coste de las materias primas, tenemos que indicar que corriente de las del proceso se consideran como aportes de materias primas. En nuestro caso como "Raw Materials" seleccionamos la corriente MAKEUP, constituida fundamentalmente por agua y MEA en una proporción constante. Además tenemos que asignar un precio unitario (USD/kg) a dicha corriente. Los datos introducidos se muestran a continuación (Tabla 8.25):



Tabla 8.25

Componente	Porcentaje (% peso)	Precio unitario (USD ₂₀₀₁ /kg)
MEA	0,035	0,97
WATER	0,965	0,0000145
Precio unitario total		0,0339

8.3 OTROS COSTES

A continuación mostraremos los resultados de los costes totales del proyecto, evaluados con la opción *Capital Costs*, que realiza una estimación global del proyecto. En la siguiente tabla (Tabla 8.26) se resumen los costes totales del proyecto.

Tabla 8.26

PROJECT RESULTS SUMMARY			
Total Project Capital Cost	Cost		1,01E+7
Total Raw Materials Cost	Cost/period		1,19E+6
Total Products Sales	Cost/period		0
Total Operating Labor and Maintenance Cost	Cost/period		708000
Total Utilities Cost	Cost/period		1,23E+7
Total Operating Cost	Cost/period		1,53E+7
Operating Labor Cost	Cost/period		600000
Maintenance Cost	Cost/period		108000
Operating Charges	Cost/period		150000
Plant Overhead	Cost/period		354000
Subtotal Operating Cost	Cost/period		1, 475E+7
G and A Cost			587526



PROJECT CAPITAL SUMMARY			Total Cost
Purchased Equipment	Cost		2,53E+06
Equipment Setting	Cost		44772,7
Piping	Cost		1,19E+6
Civil	Cost		170354
Steel	Cost		36889,6
Instrumentation	Cost		537028
Electrical	Cost		460136
Insulation	Cost		353797
Paint	Cost		30118,7
Other	Cost		3,72E+6
Subcontracts	Cost		0.00
G and A Overheads	Cost		206650
Contract Fee	Cost		350519
Escalation	Cost		0.00
Contingencies	Cost		1,55E+06
Special Charges	Cost		0.00
Total Project Cost	Cost		1,02E+07
Adjusted Total Project Cost	Cost		1,01E+07

A continuación presentamos el informe que detalla los costes de de inversión del proyecto.

En la Tabla 8.27 se muestran los costes de inversión desglosados.



Tabla 8.27

 Aspen ICARUS Project Cost Summary							
Project Title: -- North Proj Location: America 3OCT04 Estimate Date: 11:40:04				Prepared By: -- Currency: DOLLARS USD			
Account	MH	Wage Rate	Labor Cost	Matl Cost	Total Cost	Percentages	
(2) Equipment	2.116	21,16	44.773	2.533.900	2.578.673	49,0%	of TDC
(3) Piping	11.509	22,97	264.344	930.104	1.194.448	25,3%	of TDC
(4) Civil	4.348	16,98	73.811	96.542	170.354	3,0%	of TDC
(5) Steel	789	18,04	14.239	22.650	36.890	0,7%	of TDC
(6) Instruments	3.050	22,80	69.521	467.507	537.028	8,2%	of TDC
(7) Electrical	2.625	20,90	54.853	405.283	460.136	7,0%	of TDC
(8) Insulation	7.557	19,50	147.382	206.415	353.797	6,2%	of TDC
(9) Paint	1.322	15,68	20.724	9.395	30.119	0,5%	of TDC
Direct Field Costs	33.315		689.648	4.671.796	5.361.444	100,0%	of TDC
(TDMH)		(TDL)		(TDM)	(TDC)		
Indirect Field Costs	7.083				1.126.100	160,7%	of TDL
(IFMH)		(IFC)					
Total Field Costs	41.118				6.487.544	65,2%	of TIC
(TFMH)		(TFC)					
Freight					186.900	4,0%	of TDM
Taxes and Permits					292.000	5,5%	of TDC
Engineering and HO	16.194				1.112.500	9,3%	of TIC
Other Project Costs					557.170	5,4%	of TIC
Contingency					1.554.501	15,3%	of TIC
Total Non-FieldCosts	16.194				3.703.071	34,8%	of TIC
(HOMH)							
Project Total Costs					10.190.650	184,3%	of TDC
(TIC)							

En la Tabla 8.28, se presentan los costes indirectos:



Tabla 8.28.

 Indirect Field Cost Summary			
Code	Description	Ind MH	Ind Cost
80	Lump Sum Const Mgmt		
81	Home Office Const Suppt	1.256	78.100
82	Construction Management		
85	Field Const Supv	6.088	373.900
86	Start-up, Commissioning	459	31.300
Field Office Staff		7.803	483.300
Code	Description	Ind MH	Ind Cost
10	Lump Sum Const Indirect		
11	Fringe Benefits		144.800
12	Burdens		165.500
13	Consumables, Small Tools		20.700
14	Misc (Insurance, Etc)		52.100
15	Scaffolding		20.700
16	Equipment Rental		176.900
17	Vendor Reps		
18	Field Services		50.900
19	Temp Const, Utilities		11.200
20	Mob / Demob		
21	Camp & Catering		
22	Travel		
23	Overtime Premium		
24	Special Item #1		
25	Special Item #2		
Construction Indirects Total			642.800

En la Tabla 8.29, se presentan los costes indirectos relacionados con la ingeniería, el transporte de mercancías y los permisos:



Tabla 8.29

 Non - Field Cost Summary			
Code	Description	Ind MH	Ind Cost
50	Lump Sum Freight		
51	Domestic Freight		
52	Ocean Freight		
53	Air Freight		
54	Module Freight		
55	Other Freight		186.900
Freight Total			186.900
Code	Description	Ind MH	Ind Cost
60	Lump Sum Taxes, Permits		
61	Permits		
62	Materials Taxes		292.000
63	Construction Taxes		
64	Engineering Taxes		
65	Other Taxes		
Taxes and Permits Total			292.000
Code	Description	Ind MH	Ind Cost
70	Lump Sum Engineering		
71	Basic Engineering	4.757	347.600
72	Detail Engineering	8.839	584.800
73	Material Procurement	2.817	180.100
74	Subcontract Procurement		
75	Engineering Management		
Engineering & HO Total		16.413	1.112.500
Code	Descr	SumOfInd MH	SumOfInd Cost
90	G and A Overheads		206.651,00
91	Contract Fee		350.519,00
97	Escalation		
98	Royalty, Misc Charges		
Other Project Costs Total			557.170
Code	Description	Ind MH	Ind Cost
99	Contingency		1.554.501
Contingency Total			1.554.501

A continuación se presentan los costes por horas-hombre, (Tabla 8.30):



Tabla 8.30

 Wage Rate Summary			
Indirect and HO Average Wage Rates			
Field Const Supv	61,42	per MH	
Basic Engineering	73,60	per MH	
Detail Engineering	67,39	per MH	
Material Procurement	64,48	per MH	
Home Office Construction	62,18	per MH	
Subcontract Procurement			
Start-up, Commissioning	68,19	per MH	
Construction Management			
Engineering Management			
Lump Sum Engineering			
(Excludes G&A, Fee, Escalation)			
Direct Average Wage Rate Build-up			
Direct Wage Rate (TDL / TDMH)	20,70	per MH	
Burdens & Benefits	9,31	per MH	
Consumables, Small Tools	0,62	per MH	
Misc (Insurance, Etc)	1,56	per MH	
Scaffolding	0,62	per MH	
Construction Equipment	5,31	per MH	
Field Services	1,53	per MH	
Temp Const, Utilities	0,34	per MH	
Mob / Demob			
Camp & Catering			
Travel			
Overtime Premium			
Field Office Costs	14,51	per MH	
Special Item #1			
Special Item #2			
Lump Sum Const Indirect			
Loaded Direct Wage Rate		54,50	per MH
(Excludes G&A, Fee, Escalation)			

A continuación se presentan gráficamente los resultados mostrados en las tablas anteriores.



Figura 8.5. Costes directos.

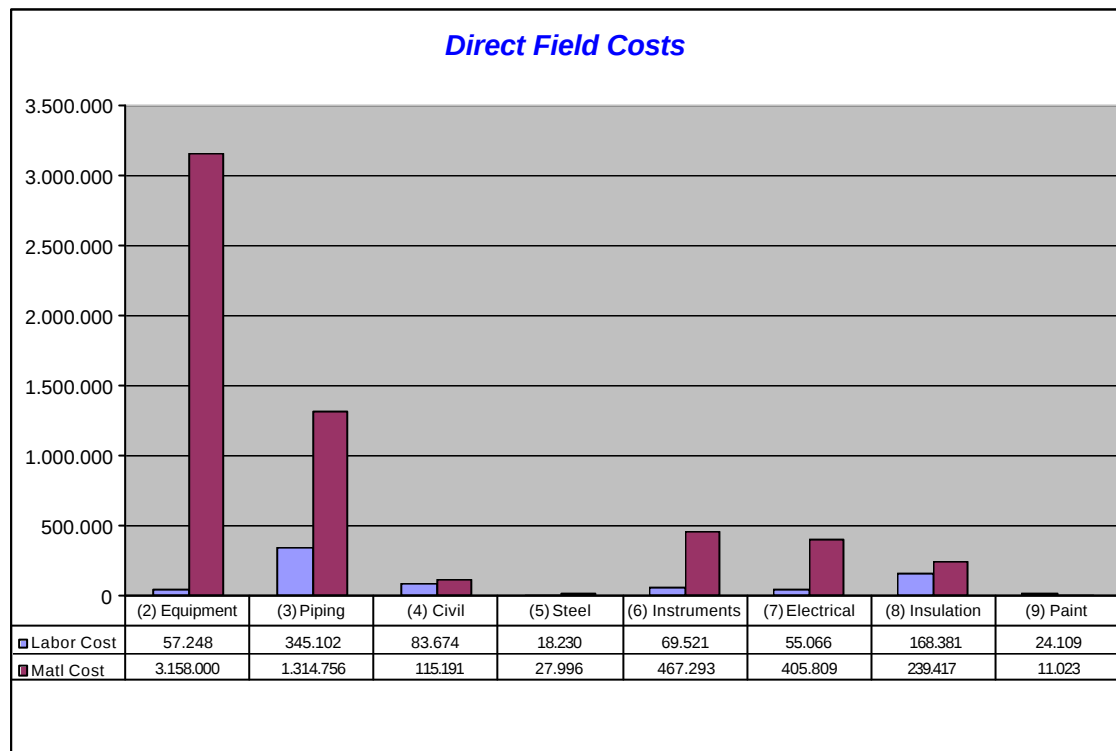


Figura 8.6. Costes de campo indirectos.

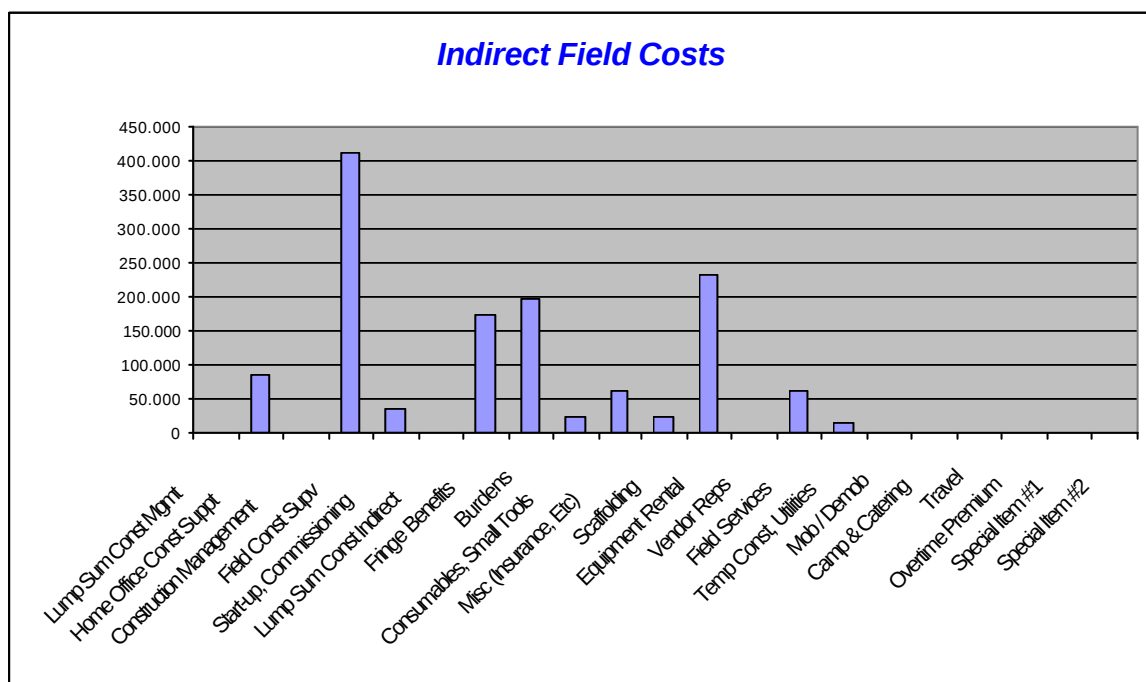


Figura 8.7. Costes de ingeniería, transporte y civiles.

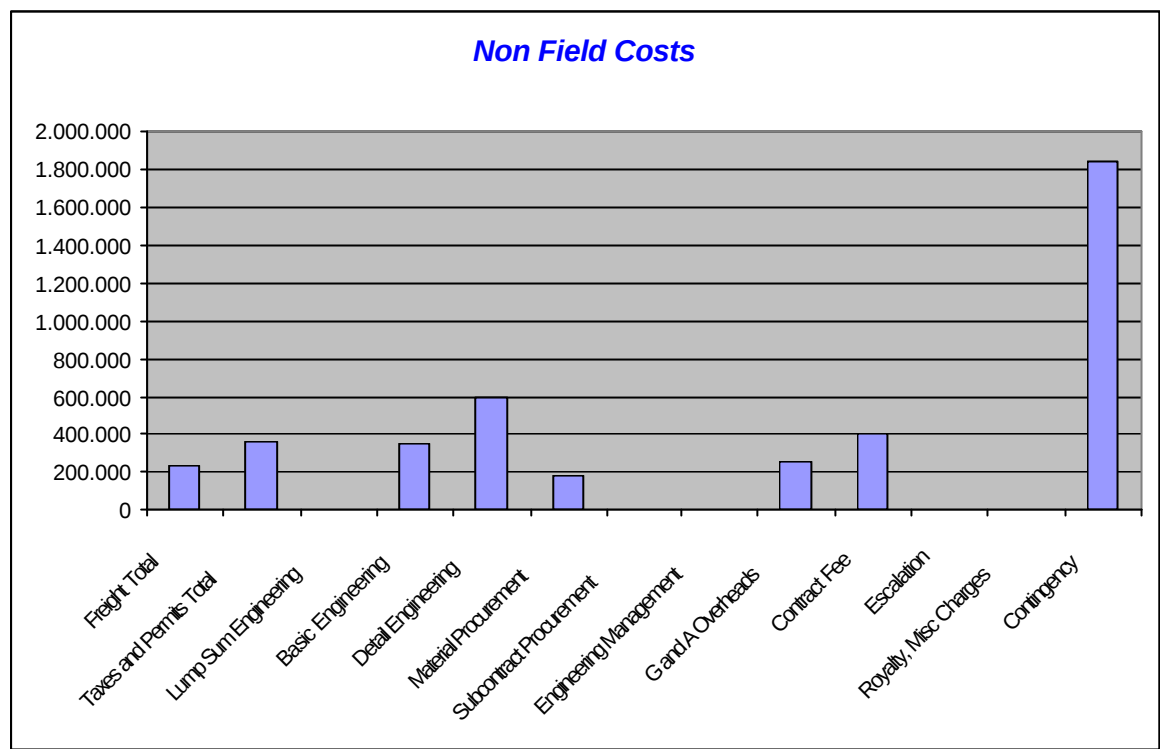
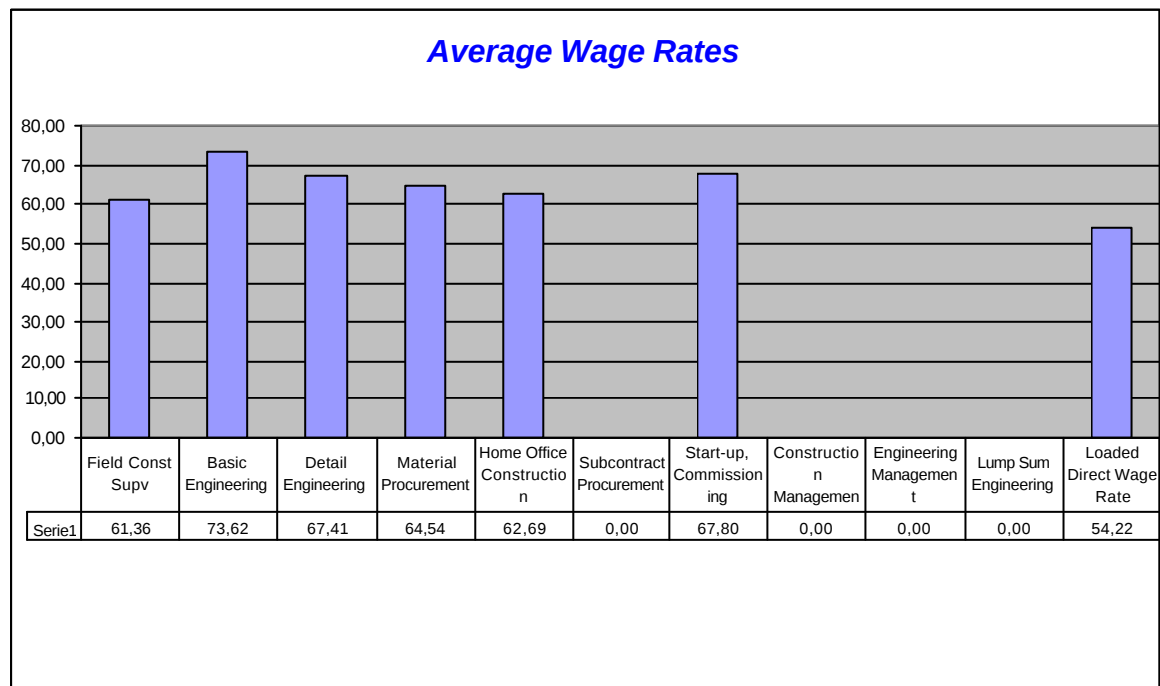


Figura 8.7. Costes relativos a las horas-hombre.



8.4. COMPARACIÓN CON LOS DATOS BIBLIOGRÁFICOS

A continuación compararemos los resultados obtenidos en la evaluación económica con las referencias bibliográficas disponibles. Los datos económicos obtenidos de las referencias en su mayoría son estimativos, por lo que hemos seleccionado los más relevantes y los que aportan estimaciones reales de plantas existentes o experimentales. Además puesto que la alternativa que se presenta como la más adecuada es la del proceso Econamine FG, hemos tomado datos económicos de esta tecnología preferentemente, además de otras más generales para realizar las valoraciones comparativas.

Si recordamos lo expuesto en el Capítulo 5 de este informe, los principales factores que influyen en los costes generales de las plantas de absorción de CO₂ son:

- % CO₂ del gas a tratar.
- Capacidad de tratamiento de la planta , tn CO₂/h eliminadas.

La concentración de CO₂ en los gases de entrada es un factor importante ya que los costes de inversión variables dependen directamente de este factor, de manera que cuanto menor sea el % CO₂ del gas a tratar, los costes de inversión variables aumentan.

Por otra parte, tanto los costes fijos como los variables dependen directamente de la capacidad de tratamiento de la planta, de manera que aumentan conforme aumenta la cantidad de dióxido de carbono tratado.

8.4.1 COSTES DE OPERACIÓN

En el informe *"Recovery of CO₂ from Flue Gases: Comercial Trends"* (Dan G. Chapel, Carl L. Mariz, 1999 [3]), constituye nuestra referencia (1), se realiza una evaluación de económica de los costes de operación para una planta que emplea el proceso Econamine FG, con un contenido de CO₂ del 13 % y una capacidad de 1000 tn/día estableciendo un coste unitario de 16,98 USD₁₉₉₉/tn sin considerar los gastos de desulfuración. En nuestro caso, atendiendo a los costes de operación indicados en el apartado 8.2:



Costes totales de operación	1,475E+7 USD ₂₀₀₁ /año
Nº horas/año	8000
tn CO ₂ /h eliminado	75,5
Coste unitario	14750000/ 8000*75,5 = 24,42 USD ₂₀₀₁ / tn CO ₂

Como costes totales de operación hemos considerado los que aparecen en la Tabla 8.26 como subtotales, sin considerar los "G and A Expenses", ya que en las bibliografías no aparecen reflejados. En estas, se consideran como gastos de operación las utilidades, el gasto de absorbente, los gastos de mantenimiento y operación de la planta y, en su caso, los costes de desulfuración.

Si tomamos una referencia común, trasladando estos valores a €, teniendo en cuenta que el cambio está en 1 € = 1,2282 USD de octubre de 2004, resulta un índice $\text{USD}_{1999}-\text{€}_{2004} = 0,838$ y $\text{USD}_{2001}-\text{€}_{2004} = 0,830$, los costes de operación para la referencia bibliográfica (1) resultan de 15,687 MM€, mientras que los de nuestra planta, referidos al 2001, resultan 19,61 MM€, lo que resulta superior al referido anteriormente en el artículo, pero tenemos que tener en cuenta que en dicho caso se trata de un proceso optimizado, y que si bien en nuestro caso la concentración molar de dióxido de carbono a la entrada es del 25%, superior al caso referido, también es superior el número de tn CO₂/h eliminadas, que en caso bibliográfico es de aproximadamente el 60 % (45,5 tn CO₂ /h).

En el artículo *"Techno-economic study of CO₂ capture from an existing coal-fired power plant: MEA scrubbing vs. O₂/ CO₂ recycle combustion"* (D. Singh et al., Energy Conversion and Management, 2003 [23]), constituye nuestra referencia (2), aparece una estimación económica de una planta de absorción de CO₂ con MEA realizada también con Aspen IPE, y estima unos costes totales de operación de 78505520 MMUSD₂₀₀₁, lo que supone en total de 18,42 USD₂₀₀₁/ ton CO₂ (18,12 USD₂₀₀₁/ tn CO₂), para 532,8 tn/h de CO₂ eliminado. Referidos a €₂₀₀₄, resulta 16,89.

En el informe *"Carbon Dioxide Recovery: Large Scale Design Trends"*, (C. Mariz, The Journal of Canadian Petroleum Technology, 1999 [10]), constituye nuestra referencia (3),



estima para las mismas condiciones del primer caso (13% de CO₂ y 45,5 tn CO₂/h eliminado), un coste unitario de operación de 20,36 USD₁₉₉₉/ tn CO₂, de manera que también nos situamos dentro del rango aportado por esta referencia. Referidos a €₂₀₀₄, resulta 17,03.

A continuación presentaremos un resumen de los costes de operación desglosados para cada referencia , por tn de CO₂ eliminado (Tabla 8.31):

Tabla 8.31

Parámetro	Referencia (USD/tn CO ₂)			
	1	2	3	Planta
%CO ₂ a la entrada	13	15	13	25
Capacidad (tn/h CO ₂)	45,5	532,8	45,5	75,5
Utilities				
Steam	7,90	-	7,90	19,37
Cooling water	0,34	3,86	3,35	0,557
Electric power	2,77	4,13	2,77	0,34
Subtotal	11,01	-	14,02	20,26
Chemicals and absorbents				
MEA+Inhibitor	2,4	2,3	2,4	1,97
Others	0,07		0,44	
Activated Carbon	0,19		0,19	
Subtotal	2,66		3,03	1,97
Operating & Maintenance				
Labor, Maintenance Materials				
Taxes & Insurance	3,31	3,86	3,31	2,2
Total	16,98	18,12	20,36	25,48



El coste unitario asociado al consumo de vapor en nuestro caso es superior al de las referencias señaladas, ya que tenemos que tener en cuenta que nuestro proceso no se encuentra integrado energéticamente en el proceso global. En los casos comparativos que presentamos, las unidades de eliminación de CO₂ con MEA se encuentran integradas en procesos de producción de energía, generalmente se trata de depuración de gases de combustión, por lo que parte del vapor consumido en el proceso es producido en otras secciones del sistema. En el caso de la referencia (2) concretamente, no se refleja ningún consumo de vapor extra ya que el necesario es aportado por el sistema.

Concretamente en la referencia bibliográfica [10] , que constituye nuestra referencia (3), se señala que la integración energética de la planta, sobre todo centrada en el consumo energético de vapor en el reboiler, es el parámetro más importante a tener en cuenta en la reducción de los costes de operación.

8.4.2 COSTES DE INVERSIÓN

Tomando de nuevo como referencia estos datos bibliográficos referidos anteriormente, realizaremos una comparación de los costes de inversión. En el primero de los casos referidos, referencia (1), se estima un coste de inversión de 10,83 USD₁₉₉₉/(tn/h), para un proyecto con un horizonte de vida de 20 años y una tasa de retorno de la inversión (ROI) del 15%. En este caso son excluidos "Income taxes", es decir, sin incluir sueldos de ingeniería, administración, etc. Si recogemos los datos aportados por la Tabla 8.26, se estima que el coste total de inversión sin incluir los parámetros indicados anteriormente, es de 8520980 USD₂₀₀₁, lo que supone un coste unitario de 14,107 USD₂₀₀₁/ tn CO₂, que si incluimos la amortización a 20 años (cuota anual de 426049 USD₂₀₀₁, 0,7USD₂₀₀₁/tn CO₂), resulta 14,807 (USD₂₀₀₁) también superior.

En el segundo caso, referencia (2), los costes de inversión se estiman en 14,63 USD₂₀₀₁/ tonne CO₂, para un proyecto con un horizonte de vida de 20 años con una cuota de amortización de 27,7 MMUSD₂₀₀₁.

En el tercer caso, referencia (3), realiza una estimación similar al primero, variando el rango entre 7,40-10,83USD₁₉₉₉/ tonne CO₂.

En la referencia bibliográfica [6], que aporta una guías generales para calcular los costes de plantas de eliminación de dióxido de carbono con diversas tecnologías y absorbentes.



En el caso concreto de la MEA, establece que el coste total de inversión se estima en 22 MM USD₁₉₉₄, 23,07 MM USD₂₀₀₁, para una planta de 42 tn/h de CO₂ con un 8% de dióxido de carbono a la entrada. El coste de operación se puede calcular sobre un 3,6 % del coste total de inversión más el consumo y tratamiento del absorbente.

Por lo tanto resultaría un coste de 62,28 USD₂₀₀₁/ tn .

Para finalizar, nos parece interesante señalar que Hamelinck et. Al [6], establece una ecuación para calcular el coste de inversión dependiendo de la concentración y de la cantidad de CO₂ tratado, la cual presentamos a continuación:

$$I = (I_{42\text{tph},\text{fix}} + I_{42\text{tph},\text{va}} \times \frac{C_0}{C}) \times \left(\frac{m}{m_0}\right)^R \times f \quad (\text{Ecuación 8.1})$$

Donde:

I, inversión en M€.

$I_{42\text{tph},\text{fix}}$, inversión fija en base a 42 tonne CO₂/h tratadas= 13,2 USD₁₉₉₄.

$I_{42\text{tph},\text{var}}$, inversión variable (dependiente del %CO₂ a la entrada), en base a 42 tonne CO₂/h tratadas = 8,8 USD₁₉₉₄.

C_0 , concentración de CO₂ en el caso base, 8%.

C, concentración de CO₂ en el caso actual.

m_0 , flujo de CO₂ del caso base, 42 tonne CO₂/h.

m, para el caso actual.

R, factor de escala= 0,8.

f=1,22, factor de corrección de USD₁₉₉₄ a €₂₀₀₀.

Aplicando la ecuación anterior a nuestro caso, la inversión de capital se estima en 35,76 M€, muy superior al resultado dado por el programa.



A continuación presentamos una tabla resumen con los costes totales actualizados indicados anteriormente (Tabla 8.32). La conversión actual entre USD y € está en 1 € = 1,2282 USD.

Tabla 8.32

MONEDA	FACTOR			
USD ₁₉₉₉ -€ ₂₀₀₄	0,838			
USD ₂₀₀₁ -€ ₂₀₀₄	0,830			
	REFERENCIAS			
COSTES UNITARIOS (€ ₂₀₀₄ /tn CO ₂)	1	2	3	PLANTA
COSTES DE OPERACIÓN	14,22	15,03	17,06	19,65
COSTES DE INVERSIÓN	9,07	12,14	9,07	11,88

En el Anexo D se presentan los resultados más relevantes de la evaluación completa del proyecto.



9. AGRADECIMIENTOS

Agradecemos la colaboración prestada en la realización del proyecto :

- José Caraballo Bello, por su importante aportación en el proceso de simulación y su valioso apoyo técnico.
- Profesores y personal administrativo del Dto. De Ingeniería Química y Ambiental, por el aporte de conocimientos técnicos siempre que ha sido necesario.





10. BIBLIOGRAFÍA

10.1 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Astarita G., Savage D. W., Bisio A. "Gas Treating with Chemical Solvents" . Wiley-Interscience, New York. 1983.
- [2] Burch R, Petch MI, "Kinetics and transient kinetic investigation of the synthesis of oxygenates from carbon monoxide / hydrogen mixtures on supported rhodium catalysts", Applied Catalyst A: General 88, 1992.
- [3] Chapel Dan G., C.L. Mariz, John Ernest. "Recovery of CO₂ from Flue Gases: Commercial Trends". Canadian Society of Chemical Engineers annual meeting. Saskatoon, Canada. October 4-6, 1999.
- [4] Farla, Hendriks C.A., Blok K. "Carbon Dioxide Recovery from Industrial Processes". Climatic Change, 29 pp 439-461. 1995.
- [5] Hamelinck C.N. et al. "Potential for CO₂ Sequestration and Enhanced Coalbed Methane Production in The Netherlands", Netherland Agency for Energy and the Environment NOVEM, Utrecht, the Netherlands 51 pp annexes. 2000.
- [6] Hamelinck CN, Faaij APC, "Future prospects for production of methanol and hydrogen from biomass", Universiteit Utrecht. Copernicus Institute, Departamente of Science, Technology and Society. 2001.
- [7] Herzog, Howard, "An Introduction to CO₂ Separation and Capture Technologies", MIT Energy Laboratory, August 1999.
- [8] Kohl A, Nielsen R, "Gas Purification", Gulf Publishing Company, 1997.
- [9] Kister Z., Henry, "Distillation Design". MacGraw-Hill, Inc. 1992.
- [10] Mariz C. L. "Carbon Dioxide Recovery: Large Scale Design Trends". The Journal of Canadian Petroleum Technology. Vol. 37, No. 7, pp 42-47. July 1998.



- [11] Mazzocchia C, Gronchi P, Tempesti E, Gucleliminotti E, Zanderighi L, "Hydrogenation of CO over ZrO_2 - supported Rh Catalysts: Kinetics Aspects", Journal of Molecular Catalysis, 60. 1990.
- [12] Paul JK, "Ethyl Alcohol Production and Use as a Motor Fuel", Noyes Data Corp. 1978.
- [13] Perry RH, Green DW, "Perry's Engineers' Handbook", McGraw Hill Co. 1999.
- [14] M. T. Sander and C. L. Mariz. "The Fluor Daniel Econamine Fg Process: Past Experience And Present Day Focus". Energy Conversion Management, Vol. 33, No. 5-8 pp. 341-348, 1992.
- [15] Tennyson, R.N., Schaap, R. P, "Guidelines can help chose proper", *The Oil and Gas Journal*, Jan. 10, p. 78-82,1997.
- [16] Henrik Bjere Thomsen. "Recovery of CO_2 from exhaust gasses: Another Way to Improve the Económic and Environmental Aspects of chp-plants". Proccess Manager, Union Engineering a/s. 1999.
- [17] Peter Tuke and Goving G. Mudaliar. "Econamine Fg Technology: A New Technology For CO_2 Recovery From Flue Gas". Fluor Daniel Limited. CHEMECA'90 Australian Chemical Engineering Conference, Melbourne, Australia. 1991.
- [18] White, C. W., ASPEN Plus Simulation of CO_2 Recovery Process. Final Report. 2002, National Energy Technology Laboratory. DOE/NETL-2002/1182. 2002.
- [19] Wilson, R. M. Wrubleski, L. Yarborough. "Recovery Of CO_2 From Power Plant Flue Gases Using Amines". Energy Conversion Mgnt. Vol. 33, No. 5-8 pp. 325-331, 1992.
- [20] Xioading X, Doesberg EBM, Scholten JJF, "Synthesis of Higher Alcohols from Syngas", Catalysts Today, 2. 1997.
- [21] T. Yagi, H Shibuya, T. Sasaki. "Application Of Chemical Absorption Process To CO_2 Recovery From Flue Gas Generated In Power Plants". JGC Corporation. Vol. 33, No. 5-8 pp. 349-355, 1992.



[22] Yunda Lui, Luzheng Zhang, Suphat Watanasiri, "Representing Vapor-Liquid Equilibrium for an Aqueous MEA-CO₂ System Using the Electrolyte Nonrandom-Two-Liquid Model". Ind. Eng. Chem. Res., vol. 38, p. 2080-2090. 1999.

[23] D. Singh et al. "Techno-economic study of CO₂ capture from an existing coal-fired power plant: MEA scrubbing vs. O₂/CO₂ recycle combustion", Energy Conversion and Management, 2003.

10.2 BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

[24] Aspen Plus. Aspen Plus Getting Started with Electrolytes. Cambridge , MA, US: Aspen Technology Limited; 2001.

[25] Aspen Plus. Aspen Plus Unit Operation Models. Cambridge , MA, US: Aspen Technology Limited; 2001.

[26] Aspen B-JAC. Aspen B-JAC User Manual. Cambridge , MA, US: Aspen Technology Limited; 2001.

[27] Icarus Process Evaluator. IPE User Manual. Cambridge , MA, US: Aspen Technology Limited; 2001.

[28] Aspen Plus. Aspen Plus User Manual. Cambridge , MA, US: Aspen Technology Limited; 2001.

[29] Proyecto de Fin de Carrera "ANÁLISIS Y SÍNTESIS DEL PROCESO DE OBTENCIÓN DE ETANOL A PARTIR DEL GAS PRODUCIDO POR GASIFICACIÓN DE BIOMASA". Autor: José Caraballo Bello. Tutores: Pedro Ollero De Castro y Fernando Vidal Barrero. Enero 2004.



