

Evaluación y simulación de técnicas de captura de CO₂ mediante adsorción física empleando zeolitas

Daniela Alejandra Chaparro Díaz y María Paula Figueroa Martínez

Trabajo de grado para optar el título de Ingeniero Químico

Trabajo de Investigación

Director:

Gustavo Emilio Ramírez Caballero

PhD. Ingeniería de materiales

Codirector:

Ariel Uribe Rodríguez

M.Sc Ingeniería de Sistemas e Informática

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2023

DEDICATORIA

Dedico este trabajo de investigación a mi padre por forjar en mis los valores de disciplina, fortaleza y perseverancia, pero principalmente por darme la oportunidad de perseguir mis sueños y proyectos.

A mi mamá y a mi tío Nelson por su cariño y apoyo incondicional

A mi hermana por su estímulo constante y por darme al mejor regalo mi sobrino quien me recuerda siempre que se debe soñar.

A mi familia por formarme en valores como: la sencillez, humildad y voluntad.

A mi abuelita Lilia por convertirse en una segunda madre.

A Álvaro Eduardo Huertas por su amor y por convertirse en mi compañero de vida y de camino.

A la profesora Laura por enseñarme el amor por la literatura y la poesía.

A mí misma por superar los retos impuestos por la vida con entereza

Daniela Alejandra Chaparro Diaz

Dedico este logro primeramente a Dios porque ha guiado cada uno de mis pasos, me ha dado sabiduría, fortaleza y paz para alcanzar mis objetivos.

A mis padres por su amor, esfuerzo y apoyo incondicional. Por ser el reflejo de la perseverancia y forjar mi carácter con sus enseñanzas de vida, han sido mi mayor motivación.

A mi hermana por escucharme, acompañarme y demostrarme que puedo alcanzar todo aquello que me proponga.

A mis sobrinas por su amor sin fronteras e impulsarme a ser un ejemplo para ustedes.

A mi abuelita por creer siempre en mí.

A mi tío por su apoyo, generosidad y ser inspiración.

A Peter por su apoyo emocional y decidir acompañarme en este camino.

María Paula Figueroa Martínez

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a nuestro director y codirector de grado, por confiar en nosotros y por habernos dado la oportunidad de pertenecer a este proyecto que hace parte del convenio N° 3042921 Universidad Industrial de Santander – Ecopetrol S.A. A los ingenieros Claudia Valderrama y Carlos Ulloa, por contribuir al desarrollo de esta investigación y aportar de forma oportuna su ayuda. Finalmente, agradecemos a todos nuestros compañeros y profesores quienes a lo largo de estos años nos impulsaron a cumplir nuestros sueños de ser ingenieros químicos.

Daniela Alejandra Chaparro Diaz y Maria Paula Figueroa

Tabla de contenido

	Pág.
Introducción	12
1. Objetivos	14
1.1. Objetivo general	14
1.2. Objetivos específicos	14
2. Marco conceptual	15
2.1. Adsorción física	15
2.2. Tecnologías de adsorción física de CO ₂	15
2.2.1 Adsorción por oscilación de temperatura (TSA)	15
2.2.2 Adsorción por oscilación de presión (PSA)	17
2.2.3 Adsorción por oscilación de presión al vacío (VPSA)	18
2.3. Zeolitas	19
2.4. Isotermas de adsorción	20
2.5. Curvas de ruptura	21
3. Estado del arte	22
4. Metodología	24
4.1. Elaboración análisis multicriterio	25
4.2. Selección del software	26
4.3. Análisis TRL	27
4.4. Selección del adsorbente	30
4.5. Construcción del sistema	31

4.6. Selección de la isoterma.....	33
4.8. Protocolo de simulación.....	34
4.8.1. Simulación del sistema TSA.....	35
4.8.2. Simulación del sistema PSA.....	35
4.8.3 Simulación del sistema VPSA.....	36
5. Resultados.....	37
5.1. Análisis multicriterio.....	37
5.2 Análisis de la isoterma.....	40
5.3. Estudio de la curva de ruptura.....	43
5.4. Resultados de simulaciones TSA, PSA Y VPSA.....	45
6. Conclusiones.....	47
7. Recomendaciones.....	48
Referencias bibliográficas.....	49
Apéndices.....	58

Lista de tablas

	Pág.
Tabla 1. Zeolitas y su propiedad adsorbente.....	19
Tabla 2. Propiedades sugeridas en la literatura y TRL de las tecnologías PSA, VPSA y TSA..	29
Tabla 3. Clasificación de zeolitas empleadas en PSA, TSA y VPSA.....	30
Tabla 4. Resultados curva de ruptura para la isoterma Dual-site de Langmuir	45
Tabla 5. Porcentajes de pureza y recuperación obtenidos en simulaciones TSA, PSA y VPSA	45

Lista de figuras

	Pág.
Figura 1. Representación del ciclo TSA	16
Figura 2. Representación del ciclo TSA (Cinco Pasos).....	16
Figura 3. Representación del ciclo PSA	17
Figura 4. Isotermas de adsorción para sistemas gas-sólido	20
Figura 5. Curva de ruptura típica en columna de adsorción	22
Figura 6. Diagrama de metodología para el desarrollo de la investigación.....	25
Figura 7. Nivel de Madurez de la Tecnología (TRL)	27
Figura 8. Diagrama de pasos para la construcción del sistema en Aspen Adsorption.....	32
Figura 9. Lecho Fijo simulado en Aspen Adsorption	34
Figura 10. Modelo TSA simulado en Aspen Adsorption	35
Figura 11. Modelo PSA simulado en Aspen Adsorption.....	36
Figura 12. Modelo VPSA simulado en Aspen Adsorption.....	37
Figura 13. Diagrama de decisión de las tecnologías TSA, PSA y VPSA.....	39
Figura 14. Isoterma extendida de Langmuir para CO ₂ en Zeolita 13X.....	40
Figura 15. Isoterma extendida de Langmuir para N ₂ en Zeolita 13X.....	41
Figura 16. Isoterma DSL para CO ₂ en Zeolita 13X.....	41
Figura 17. Isoterma DSL para N ₂ en Zeolita 13X	42
Figura 18. Capacidad de adsorción en PSA y TSA	43
Figura 19. Curva de ruptura de CO ₂ (15% V/V), N ₂ (75% V/V) con He (10% V/V) a 1 bar	44

Lista de apéndices

	Pág.
Apéndice A. Isotermas.....	58
Apéndice B. Modelo TSA.....	60
Apéndice C. Modelo PSA.....	62
Apéndice D. Modelo VPSA.....	63

Resumen

Título: Evaluación y simulación de técnicas de captura de CO₂ mediante adsorción física empleando zeolitas.*

Autor: Daniela Alejandra Chaparro Díaz, María Paula Figueroa Martínez **

Palabras Clave: Adsorción, TSA, PSA, VPSA, Software, Simulación, Isoterma.

Descripción:

El CO₂ como gas de efecto invernadero, se considera uno de los principales promotores del cambio climático; en consecuencia, se han desarrollado estrategias de captura y almacenamiento que minimicen su impacto al medio ambiente. El presente trabajo tuvo como fin el uso del software Aspen Adsorption como una herramienta para simular procesos de adsorción física para la captura de CO₂, tales como, adsorción por oscilación de temperatura (TSA), adsorción por oscilación de Presión (PSA) y adsorción por oscilación de presión al vacío (VPSA). Para ello, se presentó un estudio sistemático a escala laboratorio mediante simulaciones dinámicas realizadas en columnas de adsorción empleando la zeolita 13X como adsorbente. La metodología para el desarrollo de esta propuesta recurrió, inicialmente, a un análisis documental, donde se realizó un diagrama de decisión con el fin de analizar y comparar las propiedades de cada configuración, teniendo en cuenta ventajas y desventajas para su simulación. Posteriormente, se realizó la validación de los datos de la isoterma, para predecir la capacidad de adsorción sobre la mezcla gaseosa. Finalmente, se simularon los modelos y los resultados obtenidos indicaron que el sistema VPSA se desempeñó mejor con un porcentaje de recuperación y pureza de 82% y 52% respectivamente, en comparación con el PSA y TSA.

* Trabajo de Grado

** Facultad de Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Gustavo Emilio Ramírez Caballero. Ingeniero Químico, PhD. Codirector: Ariel Uribe Rodríguez. Ingeniero Químico, M.Sc.

Abstract

Title: Evaluation and simulation of CO₂ capture techniques by physical adsorption using zeolites.*

Author(s): Daniela Alejandra Chaparro Díaz, María Paula Figueroa Martínez **

Key Words: Adsorption, TSA, PSA, VPSA, Software, Simulation, Isotherm.

Description: CO₂ as a greenhouse gas is considered one of the main promoters of climate change. Consequently, capture and storage strategies have been developed that minimize their impact on the environment. The purpose of this work was to use the Aspen Adsorption software as a tool to simulate physical adsorption processes for CO₂ capture, such as temperature swing adsorption (TSA), pressure swing adsorption (PSA) and vacuum pressure swing adsorption (VPSA). A systematic study at laboratory scale was presented through dynamic simulations carried out in adsorption columns using 13X zeolite as adsorbent. The methodology for the development of this proposal resorted, initially, to a documentary analysis, where a decision diagram was made to analyze and compare the properties of each configuration, with advantages and disadvantages for the simulation. Subsequently, the validation of the isotherm data was carried out, to predict the adsorption capacity on the gas mixture. Finally, the models were simulated and the results obtained indicated that the VPSA system performed better with a percentage of recovery and purity of 82% and 52% respectively, compared to PSA and TSA.

* Degree Work

** Faculty of Physical Chemical Engineering. Chemical Engineering Department. Director: Gustavo Emilio Ramírez Caballero. Chemical engineer, PhD. Codirector: Ariel Uribe Rodríguez. Chemical engineer, M.Sc.

Introducción

El dióxido de carbono (CO_2) es uno de los gases de efecto invernadero que causan el calentamiento global. En el 2021 los niveles de CO_2 superaron las 416 partes por millón (ppm), frente a las 317 ppm registradas en 1960 a nivel mundial, es decir, ha aumentado en cifras un 31% en los últimos años (Earth System Research, 2022). Por ello, para avanzar en estrategias que minimicen las emisiones de CO_2 se requiere el uso de nuevas tecnologías de captura y almacenamiento de Carbono (CCUS), sostenibles y rentables. En consecuencia, los modelos de adsorción física tales como Adsorción por oscilación de Presión (PSA), Adsorción por oscilación de Temperatura (TSA) y Adsorción por oscilación de Presión al Vacío (VPSA), resultan ser una de las tecnologías de captura más prometedoras, en las últimas décadas como lo argumenta Sanz de Juan (2012).

En la actualidad, la simulación de procesos es una herramienta que permite analizar, reproducir y evaluar los modelos de captura de CO_2 de forma efectiva y económica. Existen varios tipos de software utilizados para simular procesos de adsorción física, tales como: Aspen HYSYS, gPROMS, COMSOL Multiphysics y MATLAB. Sin embargo, algunos desafíos significativos que se presentan al simular son: la complejidad de las técnicas de adsorción, la selección de parámetros adecuados, la falta de datos experimentales que permitan validar y escalar los modelos de simulación.

Además, para lograr obtener un porcentaje de captura considerable es importante la selección adecuada del adsorbente y su estrategia de regeneración. Por lo tanto, se proponen las zeolitas como adsorbentes debido a que presentan una alta capacidad de adsorción y selectividad hacia el CO_2 , según Hernández et al., (2018); Ortega (2019); Dantas et al., (2011) y Shi et al., (2018).

En búsqueda de estudiar y evaluar los procesos de adsorción física, en este proyecto se plantea la siguiente pregunta de investigación ¿Cómo diseñar y simular con ayuda de un software especializado el proceso de adsorción física de CO₂ con zeolitas?

1. Objetivos

1.1. Objetivo general

- Simular el proceso de captura de CO₂ empleando un software especializado, aplicando técnicas de adsorción física con zeolitas.

1.2. Objetivos específicos

- Identificar los principales factores asociados a los procesos de adsorción física mediante un análisis multicriterio.
- Determinar la capacidad de adsorción de la zeolita como adsorbente para la captura de CO₂.

2. Marco conceptual

2.1. Adsorción física

La adsorción es un proceso mediante el cual la concentración de uno o más componentes de un gas o un líquido se adhiere en la superficie de un sólido poroso. El sólido se denomina adsorbente y las moléculas adsorbidas en la superficie del sólido, se conocen como adsorbato. La adsorción física se establece debido a las fuerzas de atracción entre las moléculas de fluido y la superficie sólida, (Yang, 2003).

Generalmente, la adsorción física es reversible, por lo tanto, opera en un sistema cíclico caracterizado por dos etapas: la adsorción y la regeneración. En la etapa de adsorción, se alimenta un lecho que adsorbe uno o varios de los compuestos que se desea separar, dejando pasar el resto de la mezcla. Cuando el lecho llega a su capacidad máxima de adsorción, el flujo se detiene y el lecho se regenera por otros métodos, de este modo ocurre la desorción. Finalmente, se recupera el material adsorbido (adsorbato) y el adsorbente sólido queda listo para otro ciclo.

2.2. Tecnologías de adsorción física de CO₂

Dentro del proceso de adsorción física orientado a la captura de CO₂ se destacan las tecnologías PSA, TSA y VPSA.

2.2.1 Adsorción por oscilación de temperatura (TSA)

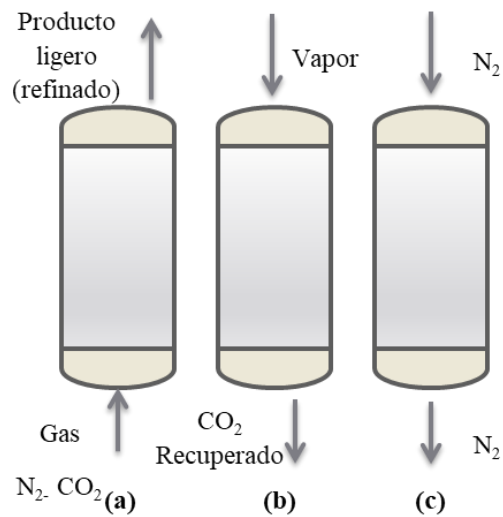
El proceso TSA utiliza la variación de temperatura para liberar y capturar gases de una mezcla, en uno o más lechos adsorbentes. En este proceso de adsorción física, la adsorción opera a bajas temperaturas y luego en la desorción se aplica calor para regenerar el adsorbente.

Existen diferentes métodos que permiten incrementar el rendimiento del proceso; dentro de estos se encuentra el directo, donde se usa un gas inerte o purga y el indirecto, en el que se utilizan camisas de calefacción, bobinas o microondas. Los pasos involucrados en TSA (figura 1),

son la adsorción, que se lleva a cabo a temperatura ambiente; regeneración, para eliminar impurezas a través del calentamiento del lecho y enfriamiento, para volver a iniciar el proceso de adsorción.

Figura 1.

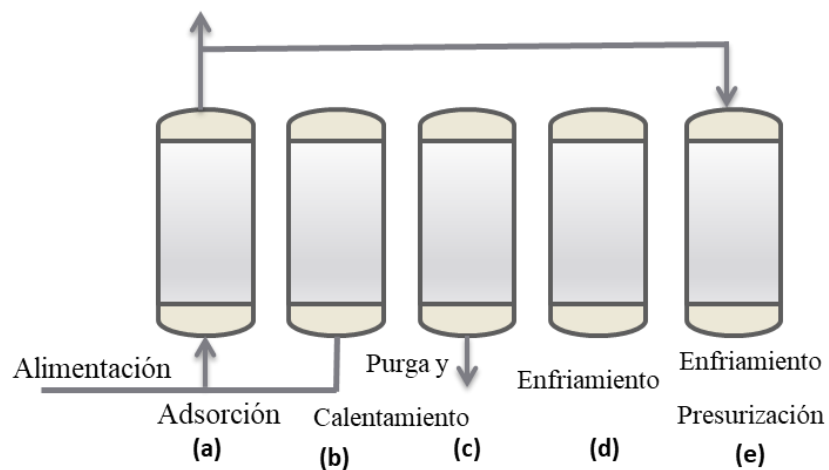
Representación del ciclo TSA



Nota. Adsorción (a), Regeneración (b), Enfriamiento (c).

Figura 2.

Representación del ciclo TSA (Cinco Pasos)



Nota. Adsorción (a), Reciclo (b), Calentamiento (c), Enfriamiento (d), Enfriamiento y Presurización (e).

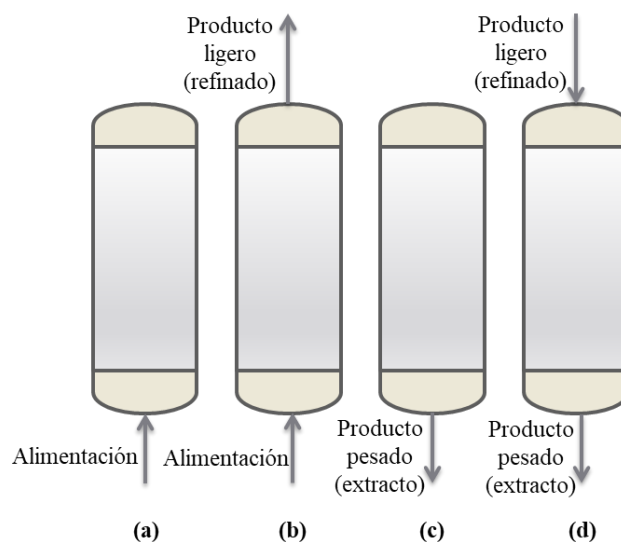
Con el fin de potencializar este método de adsorción, actualmente se han implementado y estudiado diferentes configuraciones tales como la representada en la figura 2, en donde se ilustra una configuración de cinco pasos, la cual incluye una corriente de reciclo después de la adsorción y un paso final de enfriamiento y presurización para regenerar el lecho.

2.2.2 Adsorción por oscilación de presión (PSA)

El proceso PSA emplea la variación de presión para liberar y capturar gases de una mezcla. En este proceso de separación física, se utilizan dos zonas de lechos adsorbentes empaquetados, como se muestra esquemáticamente en la figura 3. Cada columna experimenta un ciclo o bucle en donde existe una zona de alta presión para facilitar la adsorción y una zona de baja presión para facilitar la desorción y la regeneración.

Figura 3.

Representación del ciclo PSA



Nota: Adsorción (a), despresurización (b), purga (c), re-presurización(d).

La configuración del sistema está compuesta por los siguientes pasos, según el ciclo de Skarstrom (Estados Unidos Patente n°2,944,627, 1958):

1. **Adsorción:** Tiene lugar a alta presión (hasta 40 bares). La mezcla de gases pasa por un lecho adsorbente. El adsorbente atrapa las moléculas del gas objetivo hasta alcanzar su capacidad máxima de adsorción, mientras que las moléculas del gas que no son fácilmente adsorbibles pasan a través del lecho.
2. **Despresurización:** Es el primer paso de la regeneración (desorción) del lecho adsorbente. A medida que la presión desciende, las moléculas de gas del lecho adsorbente se liberan y el gas objetivo se descarga.
3. **Purga:** El lecho adsorbente se purga con el gas objetivo para regenerarlo completamente.
4. **Re-presurización:** Se presuriza el lecho con el gas inerte hasta que se restablecen las condiciones del proceso de adsorción.

2.2.3 Adsorción por oscilación de presión al vacío (VPSA)

La operación de los sistemas VPSA y PSA son idénticas, exceptuando que la primera regenera su adsorbente mediante la variación de presión y el vacío, lo cual resulta en la obtención de una mayor pureza y recuperación del CO₂. En consecuencia, existe menor probabilidad de acumulación en el lecho, aumentando la vida útil del adsorbente. Sin embargo, una de sus principales desventajas es que para lograr alcanzar el vacío supone un mayor gasto energético de la bomba empleada para la regeneración (Ortega, 2019).

2.3. Zeolitas

Las zeolitas, conocidas como tamices moleculares, son materiales de naturaleza cristalina. Poseen estructura porosa con diámetros de poro mínimos de 3 a 10 angstroms y normalmente se componen de aluminio, silicio y oxígeno para formar una red de cavidades y canales que permiten que las moléculas de agua y otras sustancias con cierto carácter polar como son el dióxido de carbono o el sulfuro de hidrógeno residan en ellas.

Se han identificado 206 tipos de zeolitas según su estructura, más de 40 se producen de forma natural y gracias a los avances tecnológicos, el restante se fabrica de forma sintética (Database of Zeolite Structures, 2017). Estas últimas, tienen la ventaja de poder ser diseñadas y adaptadas para satisfacer necesidades específicas en diferentes aplicaciones, por lo que, para procesos a gran escala, resultan económicamente viables. Existen principalmente cuatro tipos que se usan en procesos de adsorción: 3A, 4A, 5A y 13X, su elección depende plenamente del proceso y de la selectividad con el gas a adsorber (Chan et al., 2012). La tabla 1 muestra el diámetro de poro que describe los tipos de moléculas que cada adsorbente podría separar.

Tabla 1.

Zeolitas y su propiedad adsorbente

Zeolita	Diámetro efectivo molecular (Å)
3A	3
4A	4
5A	5
10X	8
13X	10

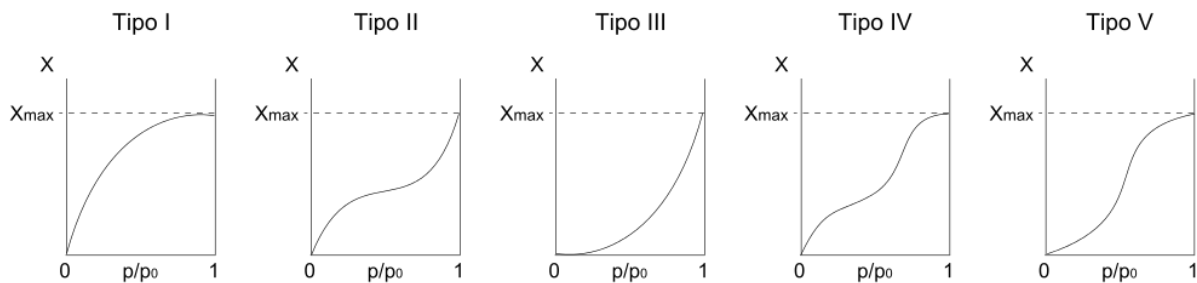
2.4. Isotermas de adsorción

El criterio principal a la hora de seleccionar el adsorbente es la isoterma de adsorción. Estas, son las representaciones gráficas del comportamiento de una partícula adsorbida sobre la superficie de un sólido o líquido, cuando se incrementa su concentración.

Las isotermas de adsorción dependen de la naturaleza del adsorbente y por ello no presentan siempre la misma forma, ya que existen diferencias en los calores de adsorción de distintos adsorbentes para un adsorbato dado. Existen varios modelos que describen las isotermas de adsorción y desorción, entre estos, se destacan los modelos de Langmuir, Freundlich, Brunauer-Emmett-Teller (BET) y Barrett-Joyner-Halenda (BJH) (Wood et al., 2018). La figura 4, muestra las principales isotermas experimentales utilizadas por Brunauer et al., (1938) para clasificar la

Figura 4.

Isotermas de adsorción para sistemas gas-sólido



adsorción de partículas gaseosas sobre sólidos. Cada una describe un proceso de adsorción diferente y se ajusta según el proceso a emplear.

Nota. Isotermas de adsorción donde $X_{\text{máx}}$ es cantidad máxima adsorbida y p/p_0 es presión relativa.

Adaptado de Pugliesi, D. (n.d.). *Tipos de isotermas de adsorción*. Lifeder.

<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0>

La isoterma de tipo I corresponde a sólidos microporosos, la cantidad adsorbida se aproxima a un valor constante al aumentar la presión relativa y el límite de adsorción está determinado por el volumen accesible frente al tamaño de poro. La isoterma de tipo II, es característica de sólidos no porosos o macroporosos, esta representa una adsorción en monocapa y multicapa sin restricciones. La de tipo III se presenta en materiales macroporosos o no porosos, mientras que en la isoterma de tipo IV se presenta en los materiales adsorbentes mesoporosos, teniendo en cuenta que, la parte inicial se atribuye a la adsorción en monocapa, asociada con la primera región de la isoterma de tipo II. Finalmente, la isoterma de tipo V es muy poco frecuente, también se obtiene para materiales mesoporosos, pero presenta un ciclo de histéresis, cuando existe poca afinidad entre el adsorbato y el adsorbente.

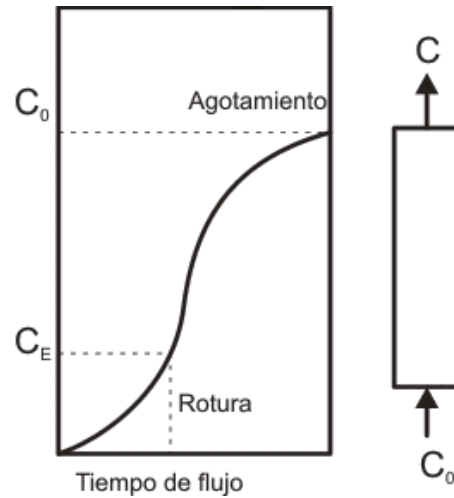
2.5. Curvas de ruptura

Una manera de estudiar el comportamiento de una columna de adsorción de lecho fijo es comprobar la curva de ruptura, la cual es la representación de la concentración de la corriente que sale del lecho frente al tiempo (Dhoke et al., 2021).

La siguiente figura representa la zona de transferencia de masa, en donde la concentración varía gradualmente desde cero, hasta la concentración adsorbida que se encuentra en equilibrio con la corriente de alimentación.

Figura 5.

Curva de ruptura típica en columna de adsorción



Nota. Adaptado de (n.d.). *Curvas de rotura.* Textos Científicos.

<http://www.textoscientificos.com/quimica/carbon-activo/curvas-rotura>

3. Estado del arte

Entre los diversos gases de efecto invernadero (GEI), el CO₂ liberado a la atmósfera destaca como uno de los problemas ambientales. El Sistema de Información Ambiental en Colombia (SIAC) expone que el CO₂ es el GEI de mayor emisión y representa el 73,98% de las emisiones totales del país y que las emisiones per cápita de Colombia son de 4,2 ton CO₂ equivalente por habitante año.

Según Sreedhar et al., (2017) las tecnologías de captura de CO₂ desarrolladas en la actualidad se centran en adsorción, absorción, membranas y combustión química en bucle. A su vez, Sánchez., (2018) afirma que el uso de procesos de separación por adsorción física ha alcanzado un amplio campo de aplicación tras el desarrollo de adsorbentes de tamices moleculares

como las zeolitas naturales y sintéticas. Chao et al., (2012) en su artículo referencian las zeolitas como materiales cristalinos, compuestos de silicio, aluminio y oxígeno en donde se destaca que, por la variación de su geometría y tamaño de poro, presentan alta capacidad de adsorción.

Existen diversas tecnologías basadas en adsorción física, diferenciadas principalmente por su principio de regeneración. Grande et al., (2005) y Song et al., (2015) exponen la adsorción por oscilación de presión (PSA), Wilkes & Brown., (2022) y Alibolandi et al., (2020) mencionan la adsorción por oscilación de presión al vacío (VPSA), mientras que Jiang et al., (2018) referencian la adsorción por oscilación de temperatura (TSA), Zhang et al., (2008) estudia la adsorción por oscilación eléctrica (ESA) y finalmente Wang et al., (2013) citan la adsorción por oscilación de temperatura al vacío (VTSA).

Debido a la complejidad de los procesos, con el tiempo se han estudiado y modelado estos tipos de tecnologías de adsorción en diferentes softwares especializados, ya que, permiten simular, analizar y optimizar de forma eficaz la adsorción de CO₂, (Park et al., 2002).

El software Aspen Adsorption es comúnmente utilizado para la simulación de estos procesos; en este, Dinca et al., (2017); He et al., (2017) y Jiang et al., (2018) realizaron estudios sobre TSA, logrando obtener porcentajes entre el 70% y 80% de captura y pureza. Del mismo modo, Behrooz et al., (2019), simularon un modelo PSA con una configuración de cuatro camas usando la zeolita 13X y obtuvieron una pureza del 99,99%. además, Vallejo et al., (2011), realizaron una modelización del proceso PSA, concluyendo que el modelo de adsorción desarrollado predice con gran exactitud los datos experimentales empleados, obteniendo resultados de pureza y recuperación mayor al 78% y 67% respectivamente.

Por otro lado, el simulador gPROMS también destaca en investigaciones reportadas tales como la de Wilkes & Brown., (2022), quienes desarrollaron un modelo VPSA, usando dos lechos

adsorbentes con zeolita 13X; validaron un modelo y luego lo llevaron a una escala mayor, encontrando inconvenientes con los tiempos de los pasos de adsorción, el tamaño de las columnas y el funcionamiento de las válvulas. Del mismo modo Morales et al., (2020) emplearon la zeolita 13X como adsorbente para evaluar un modelo TSA, con dos configuraciones distintas, encontrando algunas discrepancias en los resultados por posibles errores en los datos experimentales tomados.

Xiao et al., (2015) usaron el software COMSOL Multiphysics para un proceso PSA con Zeolita 5A, este simulador fue utilizado en la construcción de curvas de ruptura y perfiles de temperatura. Mientras que, Joss et al., (2017) emplearon Intel Fortran y realizaron un análisis detallado sobre las posibles configuraciones del ciclo TSA, usando la zeolita 13X, obteniendo un porcentaje de captura del 96% y de pureza del 90%.

Finalmente, en el software MATLAB también se reportan algunos estudios. Marx et al., (2016) simularon y validaron un modelo matemático para un sistema TSA de un lecho adsorbente, utilizando la zeolita 13X, concluyendo que se presentan cambios significativos en la eficiencia al variar la temperatura. Hasan et al., (2012) realizaron un modelo VSA y VPSA con zeolita 13X, sin embargo, es un proceso llevado a cabo en base a heurísticas de la dinámica de adsorción.

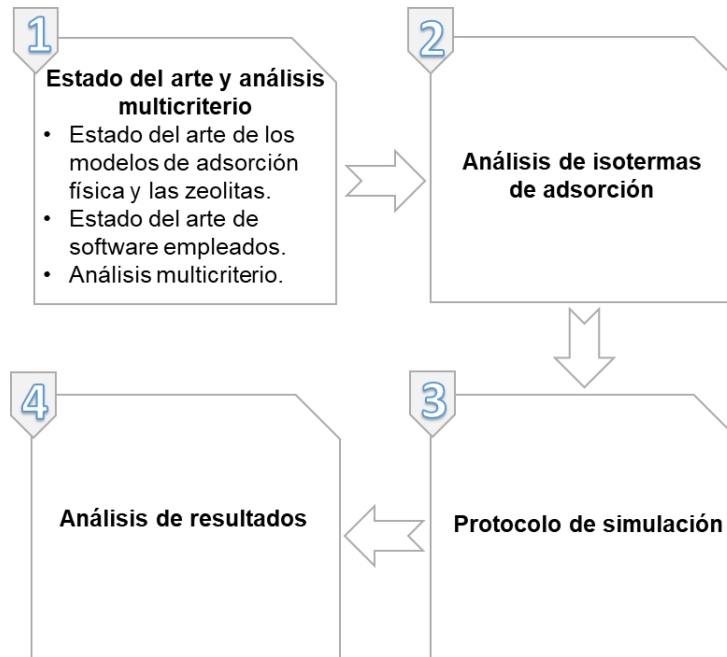
Con base a la información anterior, se hace imprescindible continuar con el estudio y simulación de las técnicas de adsorción física, evaluando alternativas de captura de CO₂ en un software especializado, aplicando posibles estrategias de recuperación para obtener porcentajes de captura de CO₂ mayores al 90%.

4. Metodología

A continuación, se describe la metodología a seguir en la presente investigación para el cumplimiento de los objetivos planteados; la cual, se dividió en cuatro fases (figura 6).

Figura 6.

Diagrama de metodología para el desarrollo de la investigación



4.1. Elaboración análisis multicriterio

Debido a la complejidad en la simulación y modelado de estas tecnologías, es importante considerar múltiples aspectos al momento de simular; por lo que, se plantea la necesidad de elaborar una estrategia que permita tomar una decisión en la que se incluyan las distintas ventajas y desventajas de cada modelo, para aumentar la confiabilidad de los resultados y evitar decisiones sesgadas o limitadas.

Se construyó un cuadro comparativo que permitió identificar, contrastar y evaluar parámetros, variables influyentes y diferentes escenarios, para la construcción de cada sistema. Para ello, se realizó una búsqueda y extenso análisis de las tecnologías de adsorción física reportadas en la literatura. Se encontraron 93 documentos y se examinaron en función del contexto de la investigación. Para cribar la información, se excluyeron los que no describían la captura de

CO₂ y no incluían simulaciones de procesos. Finalmente, se continuó revisando el resumen de 65 documentos, que incluían procesos PSA, TSA y VPSA.

4.2. Selección del software

Se realizó una revisión bibliográfica sobre investigaciones y estudios reportados en la literatura, con el fin de seleccionar el software a emplear. Actualmente, destaca el software Aspen Adsorption por contar con un nuevo e innovador enfoque de modelado para maximizar la productividad en el diseño, la simulación y la optimización de tecnologías de adsorción cíclica para la separación de gases, como PSA, VPSA y TSA.

Además, se complementó la búsqueda sobre el ambiente de modelado con manuales y guías publicadas sobre el software (Wood et al., 2018), para comprender requerimientos y sus principales aplicaciones; seguido de una exploración práctica del simulador. El modelo de lecho dinámico en Aspen Adsorption se basa en las ecuaciones fundamentales de una cama adsorbente compuesta por múltiples capas: Isotermas (termodinámica), balances de masa y energía de gas y sólido, incluidas transferencias de masa y calor, y caída de presión.

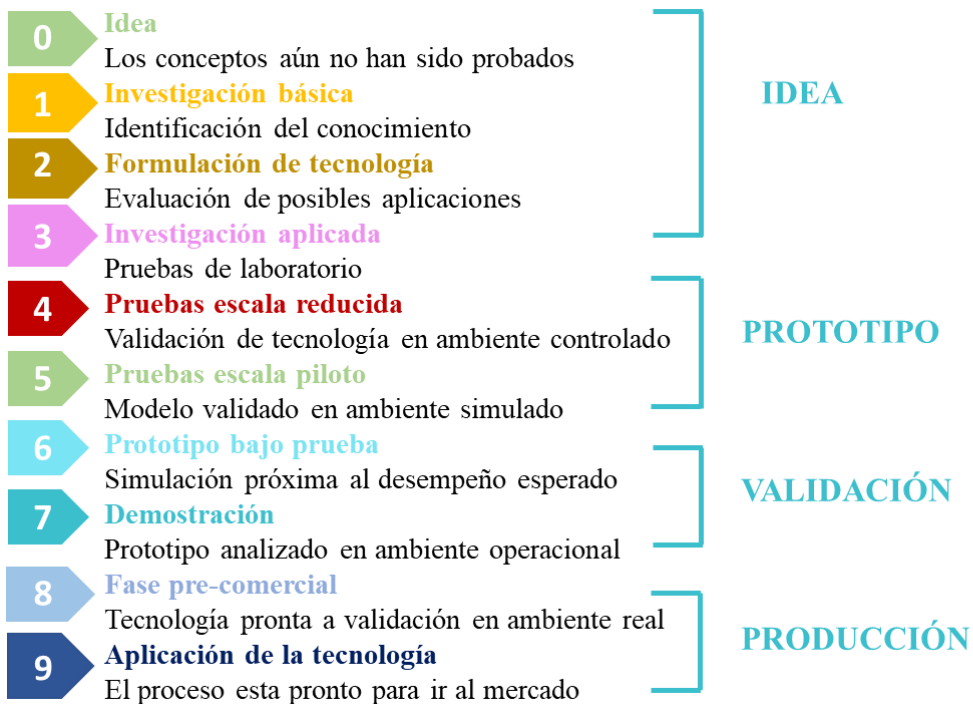
Finalmente, se seleccionó este software considerando una ventaja sobre los demás, ya que, cuenta con una herramienta potencial para desarrollar sistemas de adsorción cíclicos llamada “cycle organizer”, que permite controlar la duración de los diferentes pasos secuenciales, las variables manipuladas y el establecimiento de condiciones como caudal, composiciones, temperatura y presión.

4.3. Análisis TRL

El Nivel de Madurez de la Tecnología o Technology Readiness Level (TRL) (Neill & Hashemi, 2018), es una medida que clasifica en qué grado de desarrollo está un proceso (figura 7).

Figura 7.

Nivel de Madurez de la Tecnología (TRL)



Con el fin de definir la escala a simular de los sistemas de separación física, identificar las barreras técnicas y analizar de manera más rápida y precisa el nivel de riesgo asociado al estudio de la implementación de las tecnologías, se analizaron y categorizaron investigaciones previas de las tecnologías PSA, VPSA y TSA, mediante la clasificación de Madurez Tecnológica (TRL).

En la tabla 2, se contrastan 25 investigaciones reportadas en la literatura. Los documentos usados para la clasificación fueron seleccionados filtrando parámetros relevantes como escala,

altura, diámetro del lecho, pureza y recuperación obtenida. De acuerdo con ello, se determinó simular los procesos a escala laboratorio, ya que, la mayoría se encuentra en nivel 3 de TRL.

Tabla 2.*Propiedades sugeridas en la literatura y TRL de las tecnologías PSA, VPSA y TSA*

Tecnología	Configuración del ciclo	Ads	y_f (%)	P_{CO_2} (%)	R_{CO_2} (%)	Flujo (kgmol/h)	h (m)	d (m)	TRL	Escala	Ref
PSA	5-bed 5-step	HTLc	15	72	82	0,001	0,2724	0,019	3	Lab.	(Reynolds et al., 2006)
PSA	5-bed 5-step	HTLc	15	76	49	0,003	0,2724	0,019	3	Lab.	(Reynolds et al., 2006)
PSA	4-bed 4-step	HTLc	15	83	17	0,001	0,2724	0,019	3	Lab.	(Reynolds et al., 2006)
PSA	5-bed 5-step	HTLc	15	98,7	98,7	0,00052	0,2724	0,019	3	Lab.	(Reynolds et al., 2008)
PSA	5-bed 5-step	HTLc	15	98,6	91,8	0,00052	0,2724	0,019	3	Lab.	(Reynolds et al., 2008)
PSA	4-bed 4-step	HTLc	15	99,2	15,2	0,006	0,2724	0,019	3	Lab.	(Reynolds et al., 2008)
PSA	4-bed 4-step	HTLc	15	99,2	15,2	0,006	0,2724	0,019	3	Lab.	(Reynolds et al., 2008)
PSA	4-bed 4-step	AC	17	99,9	68	16,19	5	1	4	Bench	(Kikkiniades et al., 1993)
PSA	4-bed 8-step	NaX	13	95	50	1,116	1,01	0,4	4	Bench	(Takamura et al., 2001)
PSA	2-bed 4-step	13X	8,3	78	50	0,004	0,51	0,035	3	Lab.	(Gomes & Yee., 2002)
PSA	3-bed 8-step	AC	17	99,8	34	0,027	0,9	0,041	3	Lab.	(Na B et al., 2001)
PSA	3-bed 7-step	AC	13	99	55	0,204	1	0,165	4	Bench	(Na B et al., 2002)
PSA	3-bed 8-step	13X	13	99,5	69	0,025	0,9	0,0412	3	Lab.	(Choi et al., 2003)
PSA	2-bed 4-step	13X	15	72	94	30,35	1	0,022	4	Bench	(Ko & Biegler., 2005)
PSA	2-bed 5-step	5A	-	-	-	0,72	1	0,0904	3	Lab.	(Xiao et al., 2016)
VPSA	2-bed 4-step	13X	15	90	94	1,741	1	0,022	4	Bench	(Ko & Biegler., 2005)
PSA	2-bed 4-step	13X	15	52	66	0,007	0,83	0,00525	3	Lab.	(Grande & Rodrigues., 2005)
PSA	3-bed 5-step	13X	15	83	66	48,57	2	0,275	4	Bench	(Grande & Rodrigues., 2005)
PSA	3-bed 6-step	13X	12	83	60	0,193	1	0,078	3	Lab.	(Chaffee et al., 2007)
VPSA	3-bed 9-step	13X	12	95	60	0,193	1,2	0,076	3	Lab.	(Zhang et al., 2008)
VPSA	3-bed 9-step	13X	12	92,5	75	0,327	1	0,05	3	Lab.	(Xiao et al., 2008)
VPSA	2bed-4step	13X	15	94,7	85,4	59,06	0,867	0,3	4	Bench	(Wilkes & Brown., 2022)
TSA	1-bed-5-step	13X APG	15	76,5	79,5	0,008766	0,35	0,00625	3	Lab.	(Wang et al., 2012)
TSA	1-bed-5-step	NaUSY	15	83,6	91,4	0,005284	0,8	0,01	3	Lab.	(Ntiamoah et al., 2015)
TSA	2-bed-3-step	13X	12	93,9	91,9	1,2952	1,2	0,0125	4	Bench	(Marx et al., 2016)
TSA	2-bed-4step	5A	15	93,82	90,57	1,58	1	0,072	4	Bench	(Merel et al., 2008)
TSA	4-bed-5step	13X	12	90,2-93,9	36,5-91,9	4,63	1	0,1	4	Bench	(Jiang et al., 2018)
TSA	4-bed-5step	13X	15	93,82	90,57	0,548	1	0,1	3	Lab.	(Jiang et al., 2020)

Nota: Tipos de adsorbentes. Hidrotalcita promovida por HTLc-K; zeolitas de tamiz molecular NaX y 13X; Carbón activado AC.

4.4. Selección del adsorbente

Para lograr un proceso de adsorción eficaz es fundamental la selección del adsorbente adecuado. Por ello, a través de la revisión bibliográfica de las tecnologías de adsorción (TSA, PSA, VPSA) únicamente para la captura de CO₂; se tomaron 65 documentos y se emplearon palabras clave como adsorción de CO₂ y zeolitas. Se seleccionaron 19 de ellos y se elaboró una tabla, con los dos tipos de adsorbentes más usados (zeolita 5A y 13X), contrastando porcentaje de pureza, recuperación y composición de CO₂ presente en la mezcla (Tabla 3).

La zeolita 13X destaca por aplicarse en gran mayoría a los sistemas de adsorción de CO₂ y teniendo en cuenta los resultados reportados en porcentaje de pureza y recuperación, se seleccionó este material como adsorbente para el desarrollo de la investigación; además de considerar la disponibilidad de información reportada sobre el mismo.

Tabla 3.

Clasificación de zeolitas empleadas en PSA, TSA y VPSA

Tecnología	Adsorbente (Zeolita)	Pureza (%)	Recup. (%)	Comp. CO₂ (%vol)	Ref.
TSA	13X 5 ^a	13X= 94 5A= 98	13X= 65 5A= 83	10	(Merel et al., 2008)
TSA	13X	93,82	90,57	15	(Jiang et al., 2020)
TSA	13X	90,2-93,9	36,5-91,9	12	(Marx et al., 2016)
TSA	13X-APG	94.4	98.5	15	(Wang et al., 2012)
TSA	5 ^a	99	98	13	(Tili et al., 2009)
PSA	13X	80	66	15	(Grande et al., 2005)
PSA	13X	50	78	8,3	(Gomes & Yee, 2002)

PSA	13X	99	80	12	(Ko et al., 2005)
PSA	13X	89,2	93,56	13,5	(Cheng et al., 2021)
PSA	13X	90	90	10	(Hasan et al., 2012)
PSA	5 ^a	95	90	1,7	(Riboldi & Bolland., 2017)
VPSA	13X APG	95,6	90,2	15	(Wang et al., 2013)
VPSA	13X APG	85	79	15	(Liu et al., 2012)
VPSA	13X	94,7	85,4	15	(Wilkes & Brown., 2022)
VPSA	13X	95	80	15	(Agarwal et al., 2010)
VPSA	13X	94-96	84-95	15	(Krishnamurthy et al., 2014)
VPSA	5 ^a	99	24,3	15	(Zhao et al., 2017)
VPSA	13X	99	80	15	(Choi et al., 2003)
VPSA	13X	95,46	84-97	15	(Nikolaidis et al., 2017)

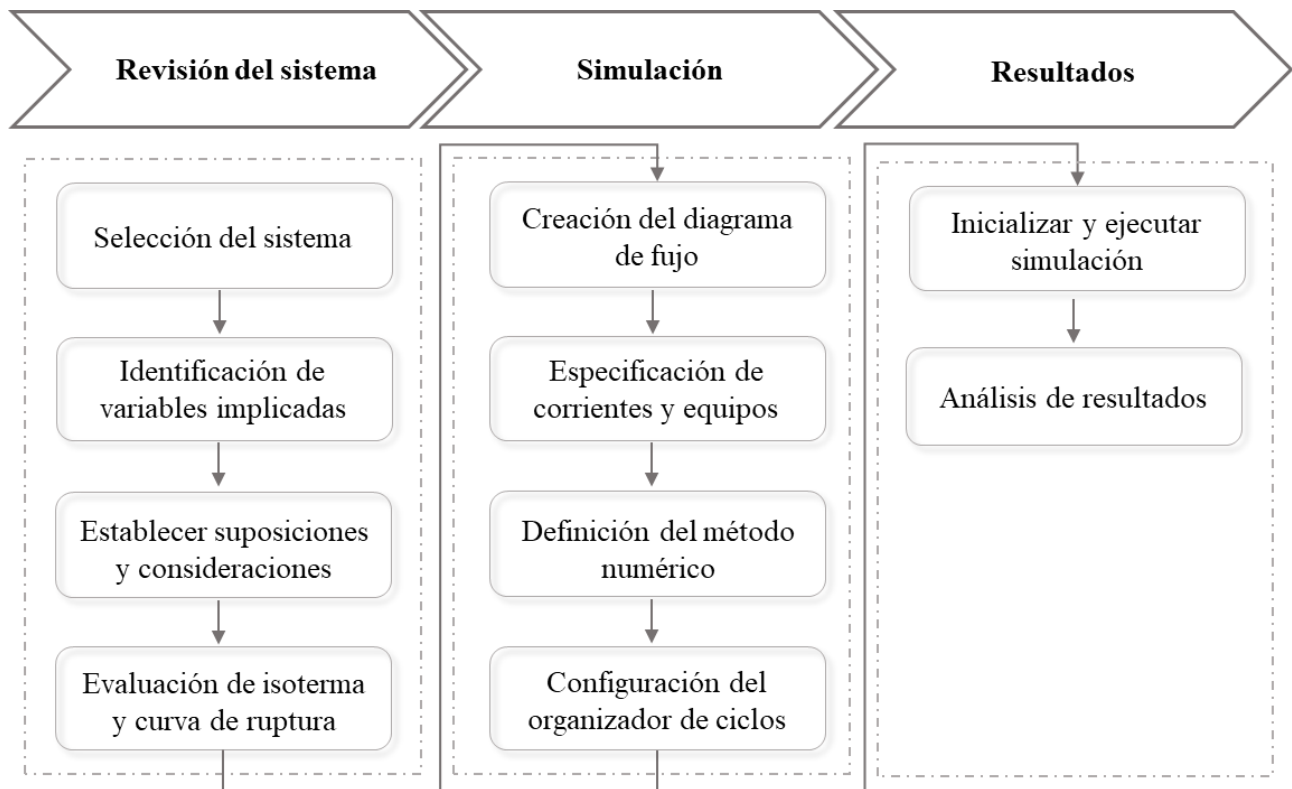
4.5. Construcción del sistema

Para orientar la construcción de cada sistema a simular en Aspen Adsorption, se elaboró un diagrama con tres etapas principales; como se muestra en la figura 8, estas se dividieron en la revisión del sistema, simulación y resultados. De este modo, será posible identificar requerimientos y condiciones en cada uno de ellos.

Adicionalmente, se seleccionaron cuatro artículos para utilizarlos como base en las simulaciones a realizar; Jiang et al., (2020), Xiao et al., (2016), Wilkes & Brown., (2022) y Morales et al., (2020). La elección de estos documentos se basó en la cantidad de información disponible que proporcionaron en términos de especificaciones del lecho adsorbente, parámetros de isoterma y supuestos principales del problema.

Figura 8.

Diagrama de pasos para la construcción del sistema en Aspen Adsorption



4.6. Selección de la isoterma

Para determinar la capacidad del material adsorbente, se seleccionaron las investigaciones de Jiang et al., (2020) y la de Morales et al., (2020); pues, sus isotermas mostraban mejores resultados de adsorción, además están dentro del paquete de datos disponibles en el software.

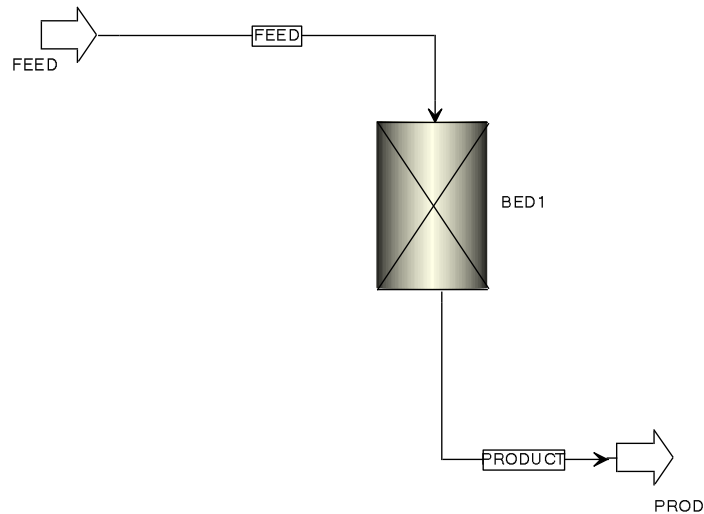
Con el fin de validar y contrastar los resultados de cada una, se construyó la curva de equilibrio usando los parámetros de isoterma de adsorción (IP) y reemplazándolos en la ecuación característica de cada modelo; para ello, se realizaron en Microsoft Excel gráficas en función de la cantidad de CO₂-N₂ adsorbida y la variación de presión a diferentes temperaturas. Además, se hizo un análisis y ajuste previo de dimensionamiento de los valores IP, teniendo en cuenta que, estos deben obedecer a un conjunto específico de unidades que establece el software Aspen Adsorption.

4.7. Curva de ruptura

Para evaluar las curvas de ruptura y capacidad máxima de adsorción, fue necesario realizar simulaciones en una unidad de lecho fijo (figura 9). Se empleó el software Aspen Adsorption, en donde se insertó una cama adsorbente y a cada extremo se conectó una corriente de alimentación y otra de producto. Además, las propiedades del lecho se especificaron según las reportadas en el paper base, según composiciones de entrada, dimensionamiento de la columna y características del adsorbente utilizado.

Figura 9.

Lecho Fijo simulado en Aspen Adsorption

**4.8. Protocolo de simulación**

Los principales supuestos para cada simulación fueron:

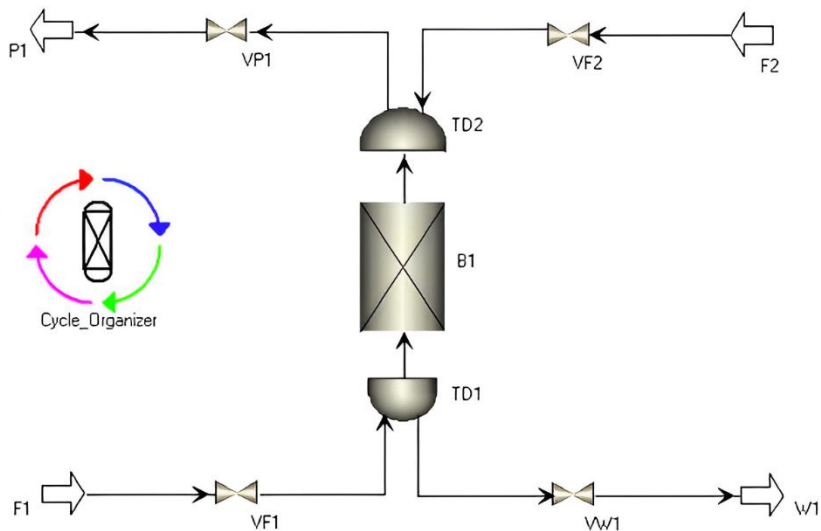
1. El gas se comporta como una mezcla de gases ideales.
2. Los gradientes radiales de concentración y temperatura son despreciables (1D).
3. El comportamiento del gas está descrito por la ecuación de estado Peng-Robinson.
4. PSA y VPSA son procesos isotérmicos, sin conducción y considerado no adiabático.
5. TSA es un proceso no isotérmico, sin conducción y considerado no adiabático.
6. Se considera el modelo de flujo pistón disperso axialmente.
7. La tasa de transferencia de masa es representada por un modelo de fuerza motriz lineal (LDF).
8. Se emplea la ecuación de Ergun para la caída de presión a lo largo del lecho.

4.8.1. Simulación del sistema TSA

La figura 10 representa un modelo TSA con corriente indirecta de calentamiento, un sistema configurado en cinco pasos (adsorción, despresurización, calentamiento, enfriamiento y represurización), con una duración de 2400 s por ciclo. La corriente de alimentación es una mezcla binaria de CO_2/N_2 (15%/85% V/V). El adsorbente elegido fue zeolita 13X y la isoterma utilizada fue la reportada por Morales et al., (2020). En cuanto a las condiciones operacionales, se tomaron del paper de Jiang et al., (2020), con una temperatura máxima alcanzada fue 398,15 K y la mínima 298,15 K.

Figura 10.

Modelo TSA simulado en Aspen Adsorption



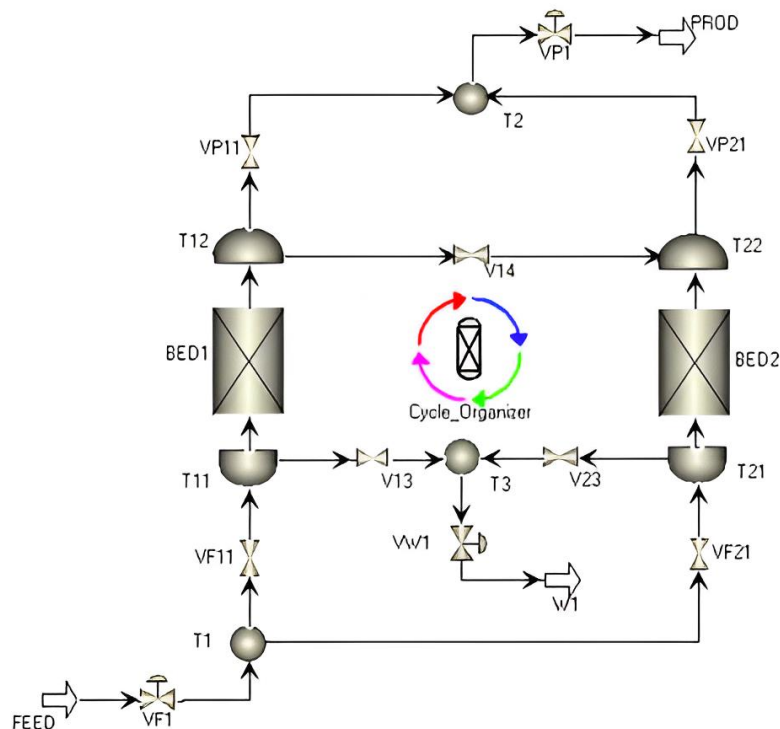
4.8.2. Simulación del sistema PSA

La figura 11 representa un modelo PSA, el cual consiste en un sistema configurado en cuatro pasos (ciclo Skarstrom) con una duración de 1200 s por ciclo. El adsorbente elegido fue zeolita 13X y la isoterma utilizada fue la reportada por Morales et al., (2020). La corriente de

alimentación es una mezcla binaria de CO_2/N_2 (15%/85% V/V). Las condiciones operacionales, se tomaron del paper Xiao et al., (2016), donde la presión máxima alcanzada fue 9,8 bar y la mínima 1,2 bar; además, el proceso opera a 298,15 K.

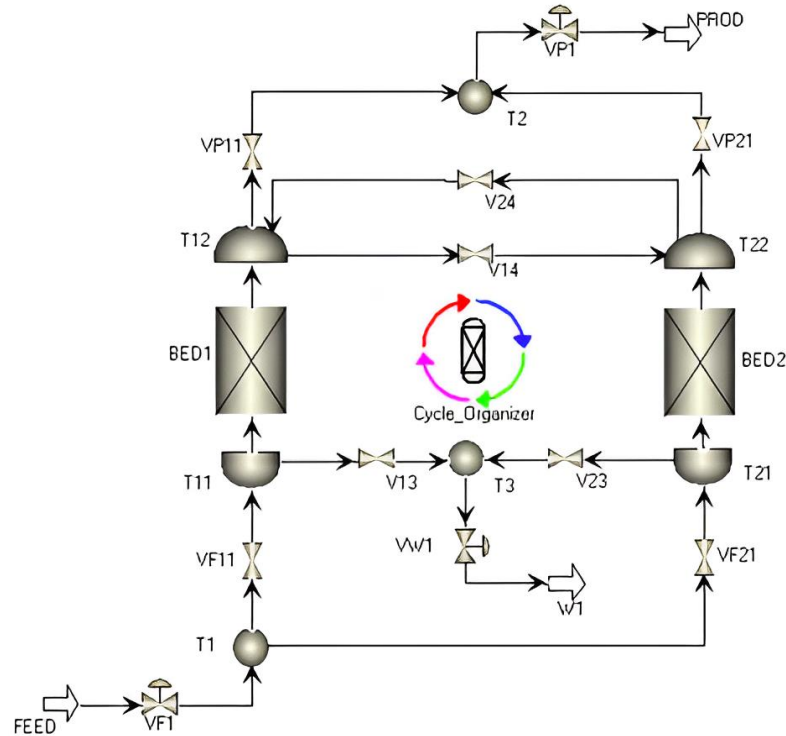
Figura 11.

Modelo PSA simulado en Aspen Adsorption



4.8.3 Simulación del sistema VPSA

La figura 12 representa un modelo VPSA, el cual está configurado en cuatro pasos (adsorción, despresurización, purga, represurización), con una duración de 1140 s por ciclo. La corriente de alimentación es una mezcla binaria de CO_2/N_2 (15%/85% V/V). El adsorbente elegido fue Zeolita13X y la isoterma utilizada fue la reportada por Morales et al., (2020). Finalmente, las condiciones operacionales se tomaron de Wilkes & Brown (2022), donde la presión máxima alcanzada fue de 1,2 bar y la mínima 0,025 bar; además, el proceso opera a 298,15 K.

Figura 12.*Modelo VPSA simulado en Aspen Adsorption*

5. Resultados

5.1. Análisis multicriterio

De acuerdo con el diagrama de decisión (figura 13), realizado en base a un estimado de la información obtenida en la literatura, se exponen y contrastan factores relevantes como: Estructura del sistema, parámetros de operación, estrategias de operación e indicadores de rendimiento.

Inicialmente se describe la estructura del sistema de cada configuración mencionada anteriormente en el apartado 2.2. Se resalta que, los ciclos dinámicos están directamente relacionados con el número de pasos y lechos adsorbentes implicados en el proceso, además de las variables manipuladas incluidas.

La viabilidad del proceso de adsorción también depende de los parámetros de operación seleccionados. Para la elección del material adsorbente es importante definir la composición del

gas de entrada y la selectividad de este hacia el gas de interés. Para gases post combustión se recomienda emplear un porcentaje de CO₂ menor o igual al 15%. Además, se debe considerar la escala en la que se desea trabajar, con el fin de establecer las dimensiones del lecho adsorbente, tales como diámetro interno y altura.

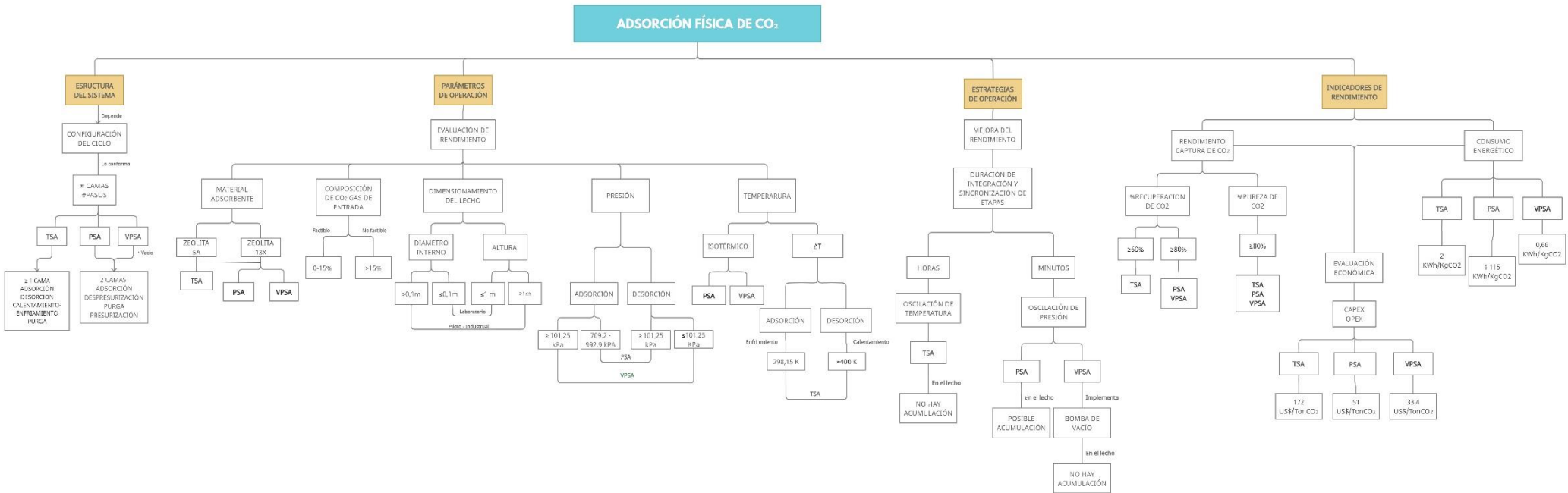
Un paso fundamental, para desarrollar estos procesos es la estrategia de regeneración. Es importante considerar las tecnologías de adsorción, en el caso de PSA y VPSA, son sistemas isotérmicos donde la adsorción se da a altas presiones y la desorción a bajas presiones, resaltando que VPSA alcanza en este último la presión del vacío y evita por esta razón posibles acumulaciones; mientras que, en TSA el lecho se enfría para facilitar la adsorción y se aumenta la temperatura para la desorción. Cabe resaltar que, en este último su ciclo puede durar más tiempo, incluso horas en comparación con la oscilación de presión.

Por otro lado, el objetivo de cada investigación determina la tecnología de adsorción a elegir y de ello depende los indicadores de rendimiento; los cuales, generalmente se evalúan por el porcentaje de recuperación y pureza obtenidos. Además de otros parámetros como, el consumo energético que está relacionado directamente en costos; estos dos factores son considerablemente mayores en TSA, teniendo en cuenta que se requiere mayor energía para la etapa de regeneración; seguido de VPSA, que, aunque demuestra tener un mayor rendimiento en investigaciones previas, llevarlo a una escala mayor puede aumentar económicamente el valor de operación por las bombas empleadas para generar el vacío.

Finalmente, según la información contrastada en el diagrama, se esperaría que el sistema VPSA tenga mejores resultados en las simulaciones a escala laboratorio, por sus múltiples ventajas.

Figura 13.

Diagrama de decisión de las tecnologías TSA, PSA y VPSA



5.2 Análisis de la isoterma

Se construyó y validó la isoterma Extendida de Langmuir para CO_2 y N_2 , usando los datos de la investigación de Jiang et al., (2020) en zeolita 13X (figuras 14 y 15); y la isoterma Dual-Site Langmuir II (DSL) empleada en la investigación de Morales et al., (2020) en zeolita 13X (figuras 16 y 17). Estas presentaron un comportamiento similar a los modelos expuestos en la figura 4 (apartado 2.4), en donde la primera corresponde a una isoterma tipo I y la segunda a un tipo II.

Además, los resultados obtenidos en este estudio muestran que la curva de equilibrio de CO_2 es cóncava hacia abajo lo cual es favorable y la del N_2 es lineal, por ello el adsorbente exhibe una mayor afinidad para CO_2 sobre N_2 en el rango completo de presión estudiado, además de tener en cuenta la mayor polarizabilidad del gas de interés y su momento cuadrupolar (Apéndice A.3).

Figura 14.

Isoterma extendida de Langmuir para CO_2 en Zeolita 13X

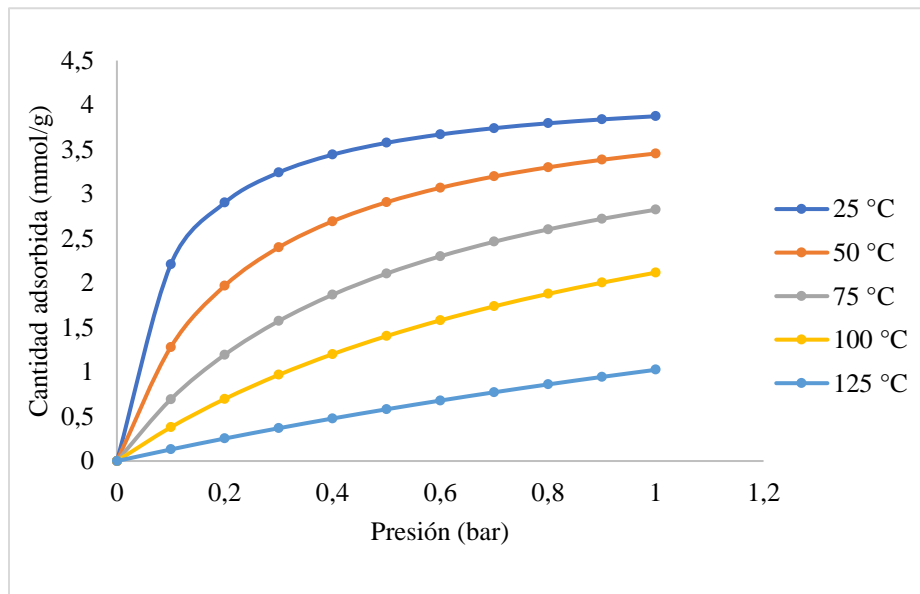


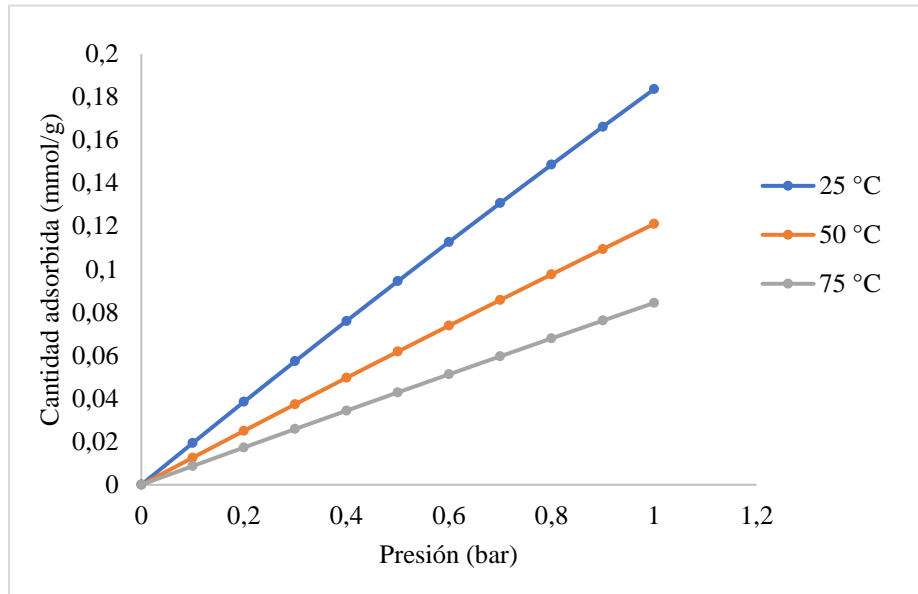
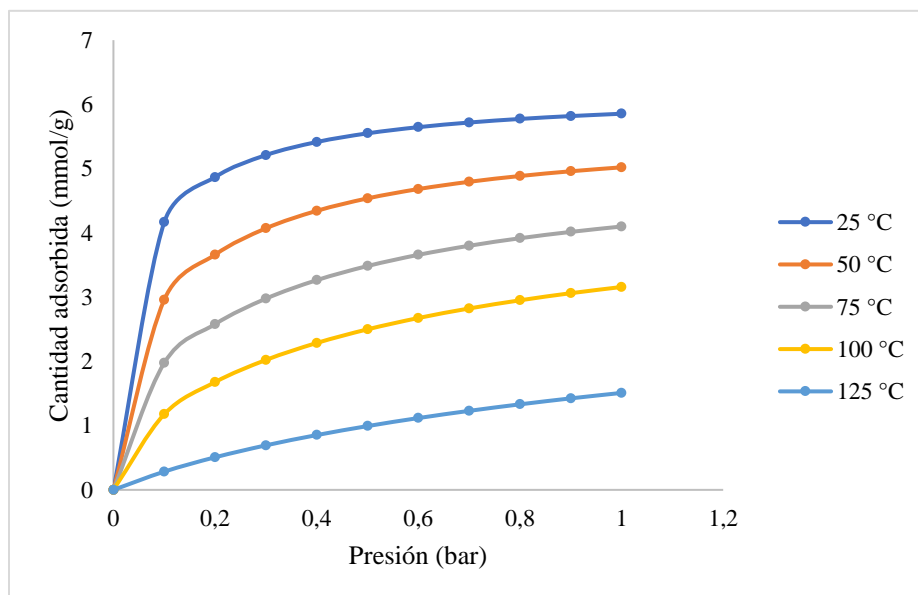
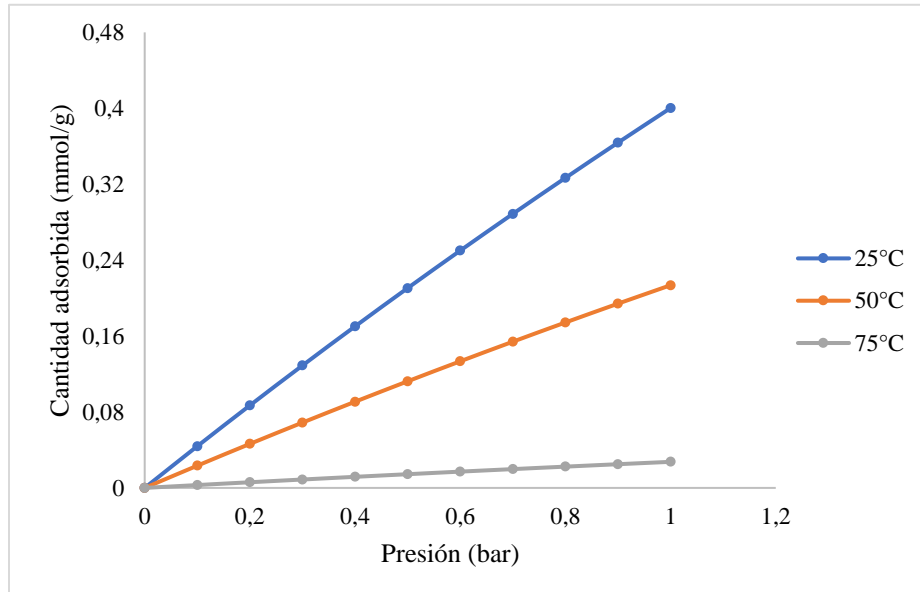
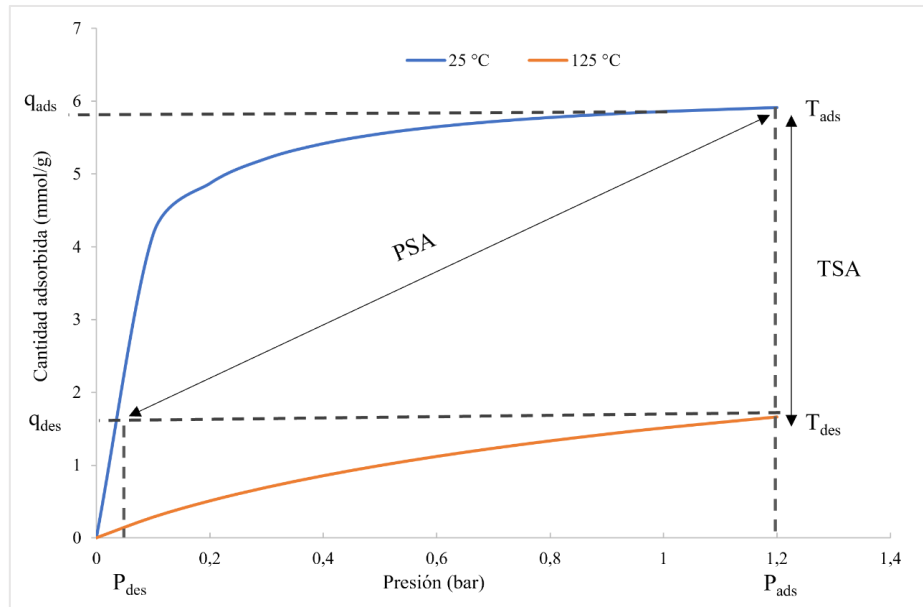
Figura 15.*Isoterma extendida de Langmuir para N₂ en Zeolita 13X***Figura 16.***Isoterma DSL para CO₂ en Zeolita 13X*

Figura 17.*Isoterma DSL para N₂ en Zeolita 13X*

Se seleccionó la isoterma reportada en el paper de Morales et al., (2020) para utilizarla en las simulaciones de cada tecnología, debido a su alta capacidad de adsorción de CO₂. Según el análisis realizado a la curva de equilibrio (figura 18), se identifica que, para PSA la adsorción tiene lugar a presiones más altas (p.ej., 1,2 bar) y el adsorbente tiene una carga de equilibrio, correspondiente a la isoterma (curva azul), de 5,9 mmol por gramo. Reduciendo la presión a 0,08 bar, la cantidad adsorbida disminuyó a lo largo de la isoterma (en el caso mostrado hasta 1,6 mmol por gramo). Finalmente, entre ambas presiones el material tendrá una capacidad de trabajo de 4,3 mmol por gramo de adsorbente. Ahora bien, TSA funciona de la misma manera, pero alternando los valores de temperatura, pues la adsorción tiene lugar a una temperatura más baja (25°C) y la desorción al calentar la corriente (125°C).

Figura 18.*Capacidad de adsorción en PSA y TSA*

Nota. La capacidad de adsorción del adsorbente depende de la forma de su isoterma. Esta ilustración muestra los ciclos de oscilación de presión y oscilación de temperatura en PSA y TSA, donde q es la cantidad de equilibrio adsorbida, P es la presión, T es la temperatura y la capacidad de trabajo en cada caso está dada entre $q_{ads}-q_{des}$.

5.3. Estudio de la curva de ruptura

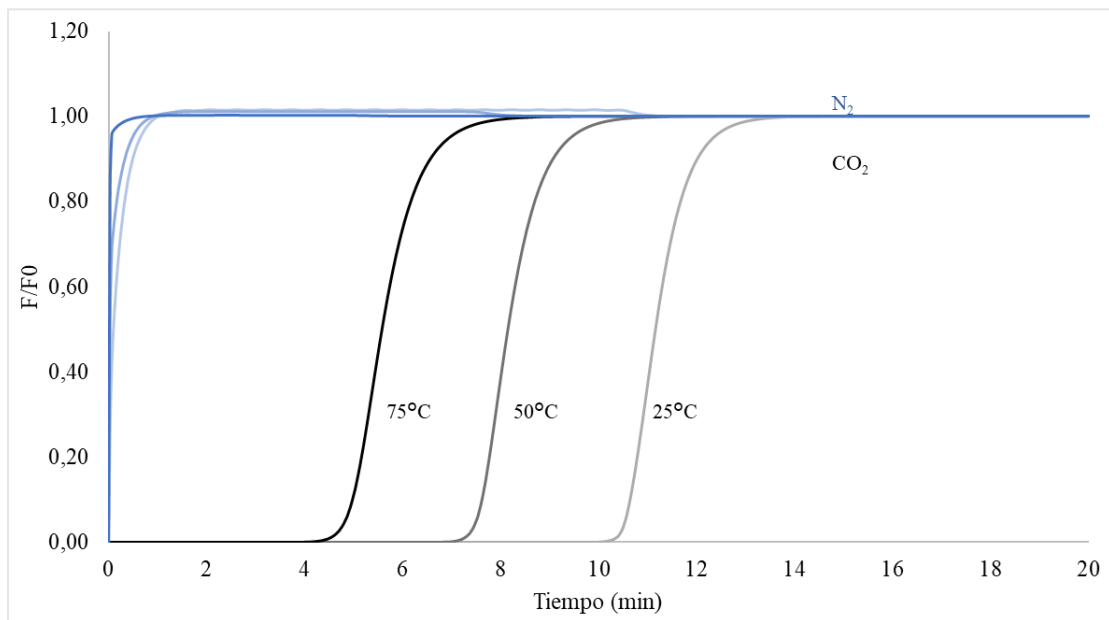
De acuerdo con la isoterma tomada de la investigación de Morales et al., (2020), se realizaron las curvas de ruptura de CO_2 (15 % V/V) - N_2 (75 % V/V) con He (10 % V/V) a tres temperaturas diferentes (25, 50 y 75 °C), evidenciadas en la figura 19.

La gráfica indica que la velocidad a la que se alcanza el tiempo de ruptura está estrechamente relacionada con la temperatura. A medida que aumenta la temperatura, disminuye el tiempo necesario para llegar a la saturación de adsorción. Este comportamiento sugiere que la temperatura es un parámetro importante en la determinación de la pureza del producto en sistemas

adsorbentes. Además, se observa que las tres curvas de ruptura correspondientes a cada componente (N_2 y CO_2) presentan patrones similares con pendientes elevadas, lo que indica una alta velocidad de transferencia de masa.

Figura 19.

Curva de ruptura de CO_2 (15% V/V), N_2 (75% V/V) con He (10% V/V) a 1 bar



Al comparar los resultados obtenidos en el presente trabajo con los de Morales et al., (2020), (tabla 4); el porcentaje de desviación varía entre el 0% y 13%. Las diferencias observadas pueden deberse a la selección inadecuada del modelo de ajuste, ya que algunas veces estos pueden describir de manera poco precisa el comportamiento dinámico del proceso. Otro factor a tener en cuenta es el software empleado en cada simulación, pues el paper base usa gPROMS y en este estudio Aspen Adsorption, por lo cual, los parámetros de isoterma (IP) varían según los requerimientos de cada uno; además, los métodos numéricos para resolver los modelos matemáticos de cada simulador son distintos.

Tabla 4.*Resultados curva de ruptura para la isoterma Dual-site de Langmuir*

Parámetro	Referencia	25°C	50°C	75°C
		CO ₂	CO ₂	CO ₂
Tiempo de ruptura (s)	(Morales et al., 2020)	633	483	320
	Simulación	630	450	279
Porcentaje de desviación (%)	-	0,47%	6,83%	12,81%
Tiempo de saturación (s)	(Morales et al., 2020)	760	620	465
	Simulación	828	648	492
Porcentaje de desviación (%)	-	8,95%	4,52%	5,81%

Nota. Comparación de resultados obtenidos en simulación propia usando Aspen Adsorption con los reportados por Morales et al., (2020)

5.4. Resultados de simulaciones TSA, PSA Y VPSA

Tabla 5.*Porcentajes de pureza y recuperación obtenidos en simulaciones TSA, PSA y VPSA*

	TSA	PSA	VPSA
Pureza	53%	37%	52%
Recuperación	44.42%	79%	82%
Ref. condiciones Operativas	(Jiang et al., 2020)	(Xiao et al., 2016)	(Wilkes & Brown., 2022)

En este estudio, se decidió evaluar dos de los aspectos claves que permiten determinar la eficacia del proceso de separación, estos son pureza y recuperación del compuesto de interés. Para ello, se realizaron tres configuraciones dinámicas de las tecnologías de adsorción. Los resultados obtenidos evidencian que TSA, PSA y VPSA tienen un porcentaje de recuperación de CO₂ de 44,42%, 79% y 82% respectivamente; y de pureza 53%, 37% y 52% respectivamente (tabla 5).

El sistema VPSA se desempeñó mejor en términos de pureza y recuperación de CO_2 . Se atribuye estos resultados a la condición operativa del vacío, ya que este es un factor dominante que evita posibles acumulaciones en la cama adsorbente y permite su regeneración en menor tiempo.

Sin embargo, en cada una de las tecnologías es importante evaluar y revisar la configuración de cada ciclo y los tiempos de paso ya que estos afectan significativamente la adsorción y recuperación del CO_2 . En el caso del TSA, la pureza y recuperación se pudieron ver afectadas por la temperatura de adsorción-desorción, ya que, esta debe ser lo suficientemente alta para desorber al CO_2 , pero lo suficientemente baja para evitar la desorción de N_2 . Por otro lado, en el PSA se pudieron presentar posibles acumulaciones en la cama adsorbente.

Pese a que se tomaron en consideración los parámetros definidos en los paper base, estos indican únicamente algunos de los caudales sin detallar las especificaciones de las válvulas para cada paso del ciclo. Este es un factor a tener en cuenta en los resultados, pues las válvulas mal operadas y diseñadas pueden dar lugar a una distribución desigual de la mezcla gaseosa y con ello reducir la eficiencia del proceso.

Por ello, otro desafío al ejecutar el software en procesos PSA y VPSA, fue sincronizar las diferentes configuraciones de las válvulas con los pasos de cada ciclo. Estas se definen por la especificación activa donde sus valores varían entre: completamente cerrada (0), completamente abierta (1), con CV constante (2) o con caudal constante (3). Además, fijar los valores del coeficiente de flujo de las válvulas (C_v) requirió de varias pruebas, pues, a pesar de que Aspen Adsorption incluye una herramienta para calcularlo, estos resultados no eran lo suficientemente precisos y algunas veces generaban errores en la simulación. Por último, se debe tener en cuenta el caudal de paso en cada válvula, pues otra de sus funciones es controlar el flujo entre unidades.

Finalmente, otra dificultad fue la falta de mensajes precisos en cuanto a errores presentes en la simulación, pues se encontraron fallas en la interpretación de resultados, en algunos casos el caudal en corrientes era nulo y, aun así, arrojaba los valores de las composiciones. Además del flujo inverso en las válvulas causado por errores numéricos. Por ello, fue importante analizar cuidadosamente cada sistema para una mejor comprensión del software y una correcta lectura de datos.

6. Conclusiones

Se logró simular el proceso de captura de CO₂, empleando las técnicas de adsorción física TSA, PSA y VPSA, con la zeolita 13X a escala laboratorio, en el software Aspen Adsorption. Se comprobó que el simulador es una herramienta completa y con potencial para el diseño de procesos de adsorción. Sin embargo, se presentaron algunos desafíos como la complejidad y alta sensibilidad del software, además de sus diversos detalles críticos en la configuración de ciclos y definición de variables manipuladas.

Se realizó un cuadro comparativo, que permitió identificar y contrastar parámetros para la construcción del sistema en la simulación de las tecnologías de adsorción TSA, PSA y VPSA. Si bien, cada tecnología tiene ventajas y desventajas, por ello la aplicación de cada una de ellas depende plenamente del propósito de cada proyecto. Entre ellas, TSA destaca por la simplicidad de su proceso y evita posibles acumulaciones, sin embargo, su ejecución puede tardar horas. Por otro lado, PSA y VPSA destacan por ser procesos más rápidos, pero más complejos, requiriendo mayor número de pasos y equipos.

La isoterma Dual Site de Langmuir fue seleccionada para evaluar la capacidad de adsorción de CO₂ de la zeolita 13X. Los resultados obtenidos muestran que la cantidad de CO₂ adsorbida aumenta rápidamente con el incremento de presión y disminuye con el aumento de temperatura,

principio que favorece el proceso de captura en TSA, PSA y VPSA. El conocimiento de la capacidad de adsorción fue crucial para el diseño de condiciones operativas durante el ciclo dinámico. Sin embargo, la recuperación de CO₂ obtenida fue menor al 90%, lo que sugiere que la utilización incompleta de la superficie del material adsorbente pudo ser una de las causas. A pesar de esto, los resultados obtenidos son prometedores y sugieren que la zeolita 13X tiene el potencial de ser un adsorbente altamente efectivo.

7. Recomendaciones

Para investigaciones futuras, se recomienda realizar un estudio detallado en la definición de los ciclos y la posible adición de pasos tales como: purga con vacío, reciclo y re-presurización que podrían influir positivamente en el rendimiento de cada proceso.

Las tecnologías de adsorción física evaluadas (TSA, PSA y VPSA), son alternativas prometedoras, sin embargo para poder integrar estas tecnologías en la industria petroquímica se requiere continuar en la ejecución pruebas experimentales a nivel laboratorio y posteriormente a escala piloto en un ambiente controlado, ya que es importante evaluar estos procesos en condiciones reales para validar y contrastar la eficiencia del proceso con respecto a las simulaciones, esto con el fin de optimizar el diseño y ajustar diferentes parámetros operativos en aras de la obtención de porcentajes de pureza y recuperación significativos para así finalmente realizar un análisis económico y ambiental de la propuesta y determinar la viabilidad del proceso.

Se resalta que estos sistemas de adsorción son procesos en desarrollo e investigación, y el uso de Aspen Adsorption aún es innovador, por ello, un apoyo fundamenta es la literatura disponible; es realmente importante entender y conocer cómo funciona cada tecnología, de este modo, detalles crítico como modelar con precisión las válvulas y tener en cuenta su impacto en el rendimiento general del proceso, marcaran la diferencia.

Referencias bibliográficas

- Agarwal, A. (2010). Advanced strategies for optimal design and operation of pressure swing adsorption processes. (*Tesis de Doctorado publicada*). Carnegie Mellon University, Pittsburgh.
- Alibolandi, M., Sadrameli, S. M., Rezaee, F., & Towfighi, J. (2020). Separation of CO₂/N₂ mixture by vacuum pressure swing adsorption (VPSA) using zeolite 13X type and carbon molecular sieve adsorbents. *Springer*, 56(4). doi:<https://doi.org/10.1007/s00231-020-02823>
- Behrooz, H. A., Hoseini, M., Mohamadzade, M., & Ranjbaran, N. (2019). Economic Comparison between Membrane and Adsorption Processes. *Asian Journal of Research in Chemistr*, 13(6), 509-514. doi:DOI:10.5958/0974-4150.2020.00090.5
- Brunauer, S., Emmett, P., & Teller, E. (1938). Adsorption of Gases in Multimolecular Layers. *Journal of the American Chemical Society*, 60(2), 309-319. doi:DOI: 10.1021/ja01269a023
- Chaffee, A., Knowles, G., Liang, Z., Zhang, J., & Xiao, P. (2007). CO₂ capture by adsorption: Materials and process development. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 1(1), 11-18. doi:[https://doi.org/10.1016/S1750-5836\(07\)00031-X](https://doi.org/10.1016/S1750-5836(07)00031-X).
- Chan, K., CYH, C., & Bahrami, M. (2012). Heat and Mass Transfer Characteristics of a Zeolite 13X/CaCl₂ Composite Adsorbent in Adsorption Cooling Systems. *ASME 2012 6th International Conference on Energy Sustainability*, 49-58. doi:<https://doi.org/10.1115/ES2012-91246>

- Cheng, C., kuo, C.-C., Yang, M.-W., Zhuang, Z.-Y., Lin, W., Chen, Y.-F., . . . Chou, C.-T. (2021). CO₂ Capture from Flue Gas of a Coal-Fired Power Plant Using Three-Bed PSA process. *Energies MDPI*, 14(12), 1-15. doi:<https://doi.org/10.3390/en14123582>
- Choi, W.-K., Kwon, T.-I., Yeo, Y.-K., Lee, H., Song, H., & Na, B.-K. (2003). Optimal Operation of the Pressure Swing Adsorption (PSA) Process for CO₂ Recovery. *Korean Journal Chemical*, 20(4), 617-623. doi:<https://doi.org/10.1007/BF02706897>
- Dantas, T., Luna, F., Silva Jr, I., Torres, A., Azevedo, D., & Rodrigues, R. (2011). Modeling of the fixed-bed adsorption of Carbon Dioxide and a Carbon Dioxide-Nitrogen mixture on zeolite 13X. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 28(3), 3893-3906. doi:<https://doi.org/10.1590/S0104-66322011000300018>
- Database of Zeolite Structures. (2017). Structure Commission of the International Zeolite Association. <http://www.iza-structure.org/databases/>
- Dhoke, C., Zaabout, A., Cloete, S., & Amini, S. (2021). Review on Reactor Configurations for Adsorption-Based CO₂ Capture. *Industrial & Engineering Chemistry*, 60(10), 3779–3798. doi:<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c04547>
- Dinca, C., Slavu, N., Badea, A., & Badea, A. (2017). CO₂ adsorption process simulation in ASPEN Hysys. *International Conference on ENERGY and ENVIRONMENT*, 505-509. doi:[doi:10.1109/CIEM.2017.8120808](https://doi.org/10.1109/CIEM.2017.8120808).
- Durán, I., Rubiera, F., & Pevida, C. (2020). Vacuum swing CO₂ adsorption cycles in Waste-to-Energy plants. *Chemical Engineering Journal*, 382(1). doi:<https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122841>.

- Earth System Research, L. (14 de febrero de 2022). *Statista*. Obtenido de <https://es.statista.com/estadisticas/1269928/concentracion-atmosferica-global-de-dioxido-de-carbono/>
- Gomes, V., & Yee, K. (2002). Pressure swing adsorption for carbon dioxide sequestration from exhaust gases. *Separation and Purification Technology*, 28(2), 161-171. doi:[https://doi.org/10.1016/S1383-5866\(02\)00064-3](https://doi.org/10.1016/S1383-5866(02)00064-3).
- Grande, C., Cavenati, S., & Rodrigues, A. (2005). Pressure Swing Adsorption For Carbon Dioxide. *ResearchGate*.
- Hasan, F., Baliban, R., & A, J. (2012). Modeling, Simulation, and Optimization of Postcombustion CO₂ Capture for Variable Feed Concentration and Flow Rate. 2. Pressure Swing Adsorption and Vacuum Swing Adsorption Processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(48), 15665-15682. doi:DOI: 10.1021/ie301572n
- He, J., Deng, S., Zhao, L., Zhao, R., & Li, S. (2017). A numerical analysis on energy-efficiency performance of temperature swing adsorption for CO₂ capture. *Energy Procedia*, 142, 3200-3207. doi:<https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.12.490>.
- Hernandez Carrillo, W. D., & Sepulveda Alvarez, J. (2018). Simulación de purificación de Oxígeno de Aire por medio de Adsorción con Zeolitas. (*Tesis de pregrado no publicada*). Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga.
- Jiang, L., Roskilly, A., & Wang, R. (2018). Performance exploration of temperature swing adsorption technology for carbon dioxide capture. *Energy Conversion and Management*, 165(1), 396-404. doi:<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.03.077>.

- Jiang, N., Shen, Y., Liu, B., Zhang, D., Li, G., & Fu, B. (2020). CO₂ capture from dry flue gas by means of VPSA, TSA and TVSA. *Journal of CO₂ Utilization*, 35(1), 153-168. doi:<https://doi.org/10.1016/j.jcou.2019.09.012>.
- Joss, L., Gazzani, M., & Mazzoti, M. (2017). Rational design of temperature swing adsorption cycles for post-combustion CO₂ capture. *Journal of Chemical Engineering Science*, 158, 381-394. doi: <https://doi.org/10.1016/J.CES.2016.10.013>
- Kikkinides, E., Yang, R. & Cho, S. (1993). Concentration and Recovery Adsorption very of CO₂ from Flue Gas by Pressure Swing. *Ind Eng. Chem. Res.*, 32(11), 2714. <https://doi.org/10.1021/IE00023A038>
- Ko, D., Siriwardane, R., & Biegler, L. (2005). Optimization of Pressure Swing Adsorption and Fractionated Vacuum Pressure Swing Adsorption Processes for CO₂ Capture. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44(21), 8084–8094. doi:<https://doi.org/10.1021/ie050012z>
- Krishnamurthy, S. (2014). Simulation and Optimization of a Dual-Adsorbent, Two-Bed Vacuum Pressure Swing Adsorption Process for CO₂ Capture from Wet Flue Gas. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(37), 14462-14473. doi:<https://doi.org/10.1021/ie5024723>
- Li, D., Zhou, Y., Shen, Y., Sun, W., Fu, Q., & Yan, H. (2016). Experiment and simulation for separating CO₂/N₂ by dual-reflux pressure swing adsorption process. *Chemical Engineering Journal*, 297, 315-324. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.03.075>.
- Liu, Z., Wang, L., Kong, X., Li, P., Yu, J., & Rodrigues, A. (2012). Onsite CO₂ Capture from Flue Gas by an Adsorption Process in a Coal-Fired Power Plant. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(21), 7355-7363. doi:<https://doi.org/10.1021/ie3005308>

- Marx, D., Joss, L., Hefti, M., & Mazzoti, M. (2016). Temperature Swing Adsorption for Postcombustion CO₂ Capture: Single- and Multicolumn Experiments and Simulations. *Industrial & Engineering Chemistry research*, 55(5), 1401-1412. doi:[https://doi-org.bibliotecavirtual.uis.edu.co/10.1021/acs.iecr.5b03727](https://doi.org/bibliotecavirtual.uis.edu.co/10.1021/acs.iecr.5b03727)
- Merel, J., Clause, M., & Meunier, F. (2008). Experimental Investigation on CO₂ Post-Combustion Capture by Indirect Thermal Swing Adsorption Using 13X and 5A Zeolites. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 47, 1, 209–215. <https://doi.org/10.1021/ie071012x>
- Morales-Ospino, R., Rafaelle Gomes, S., Magalhães Siqueira, R., & Silva de Azevedo, D. (2020). Assessment of CO₂ desorption from 13X zeolite for a prospective TSA process. *Adsorption*, 26, 813–824. doi: <https://doi.org/10.1007/s10450-019-00192-5>
- Na, B.-K., Koo, K.-K., Eum, H.-M., Lee, H., & Song, H. K. (2001). CO₂ recovery from flue gas by PSA process using activated carbon. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 18, 220-227. doi:<https://doi.org/10.1007/BF02698463>
- Na, B.-K., Lee, H., Koo, K.-K., & Song, H. (2002). Effect of Rinse and Recycle Methods on the Pressure Swing Adsorption Process To Recover CO₂ from Power Plant Flue Gas Using Activated Carbon. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 41(22), 5498–5503. doi:<https://doi.org/10.1021/ie0109509>
- Neill, S., & Hashemi, R. (2018). *Fundamentals of Ocean Renewable Energy*. Academic Press. doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-810448-4.00001-X>.
- Nikolaidis, G. N., Kikkinides, E. S., & Georgiadis, M. C. (2017). An Integrated Two-Stage P/VSA Process for Postcombustion CO₂ Capture Using Combinations of Adsorbents Zeolite 13X

- and Mg-MOF-74. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 56(4), 974-988.
doi:<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.6b04270>
- Ntiamoah, A., Ling, J., Xiao, P., Webley, P., Zhai, Y. (2015). *Ind. Eng. Chem. Res.* 2016, 55, 703–713. <http://dx.doi.org/10.1021/acs.iecr.5b01384>
- Park, J.-H., Beum, H.-T., Kim, J.-N., & Haeng Cho, S. (2002). Numerical Analysis on the Power Consumption of the PSA Process for Recovering CO₂ from Flue Gas. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 41(16), 4122–4131.
doi:<https://doi.org/10.1021/ie010716i>
- Reynolds, S., Ebner, A. D., & Ritter, J. A. (2006). Stripping PSA Cycles for CO₂ Recovery from Flue Gas at High Temperature Using a Hydrotalcite-Like Adsorbent. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(12), 4278-4294.
doi:<https://doi.org/10.1021/ie051232f>
- Reynolds, S., Mehrotra, A., & Ebner, A. (2008). Heavy reflux PSA cycles for CO₂ recovery from flue gas: Part I. Performance evaluation. *Adsorption*, 14, 399–413.
doi:<https://doi.org/10.1007/s10450-008-9102-4>
- Riboldi, L., & Bolland, O. (2017). Overview on Pressure Swing Adsorption (PSA) as CO₂ Capture Technology: State-of-the-Art, Limits and Potentials. *Energy Procedia*, 114, 2390-2400.
doi:<https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.1385>.
- Sánchez, L. Y. (2018). Empleo de Zeolitas en Procesos de adsorción y separación de hidrocarburos de cadena corta. (*Tesis doctoral no publicada*). Universitat politècnica de Valencia, Valencia.

- Sanz de Juan, A. (2012). Diseños de Ciclos PSA para la captura de CO₂ de Gases de Combustión con adsorbentes Comerciales. (*Tesis doctoral no publicada*). Universidad Complutense de Madrid, Madrid.
- Shi, W., Huawei, Y., Yuanhui, S., Qiang, F., Donghui, Z., & Bo, F. (2018). Two-stage PSA/VSA to produce H₂ with CO₂ capture via steam methane reforming (SMR). *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(41), 19057-19074. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.08.077>
- Sistema de Información Ambiental de Colombia. (15 de Diciembre de 2021). SIAC. Obtenido de http://cifras.siac.gov.co/Portal-SIAC-web/faces/aire_inicio.xhtml
- Skarstrom, C. W. (1958). *Estados Unidos Patente n° 2,944,627*.
- Song, C., Kansha, Y., Ishizuka, M., Fu, Q., & Tsutsumi, A. (2015). Conceptual design of a novel pressure swing CO₂ adsorption process based on self-heat recuperation technology. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 94, 20-28. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cep.2015.03.008>.
- Sreedhar, I., Tanisha, N., Venugopal, A., & Srinivas, B. (2017). Carbon capture by absorption – Path covered and ahead. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 76, 1080-1107. doi:<https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.03.109>.
- Takamura, Y., Narita, S., Aoki, J., Hironaka, S., & Uchida, S. (2001). Evaluation of dual-bed pressure swing adsorption for CO₂ recovery from boiler exhaust gas. *Separation and Purification Technology*, 24(3), 519-528. doi:[https://doi.org/10.1016/S1383-5866\(01\)00151-4](https://doi.org/10.1016/S1383-5866(01)00151-4).

- Tili, N., Grévillet, G., & Vallières, C. (2009). Carbon dioxide capture and recovery by means of TSA and/or VSA. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 3(5), 519-527. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2009.04.005>.
- Vallejo, D., Pevida, C., Rubiera, F., Prieto, M. (2011). Aproximación a un proceso PSA para la captura de CO₂ precombustión. *Máster Universitario en Ingeniería Energética*. <https://digibuo.uniovi.es/dspace/handle/10651/3944>.
- Wang, L., Liu, Z., Li, P., Yu, J., & Rodrigues, A. (2012). Experimental and modeling investigation on post-combustion carbon dioxide capture using zeolite 13X-APG by hybrid VTSA process. *Chemical Engineering Journal*, 197, 151-161. doi:<https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.05.017>.
- Wang, L., Yang, Y., Shen, W., Kong, X., Li, P., & Yu, J. (2013). CO₂ Capture from Flue Gas in an Existing Coal-Fired Power Plant by Two Successive Pilot-Scale VPSA Units. *Industrial & Engineering Chemistry*, 52(23), 7947–7955. doi:<https://doi.org/10.1021/ie4009716>
- Wilkes, M. D., & Brown, S. (2022). Flexible CO₂ capture for open-cycle gas turbines via vacuum-pressure swing adsorption: A model-based assessment. *Energy*, 250(1). doi:<https://doi.org/10.1016/j.energy.2022.123805>.
- Wood, K. R., Liu, Y. A., & Yu, Y. (2018). *Design, Simulation, and Optimization of Adsorptive and Chromatographic Separations*. WILEY-VCH.
- Xiao, J., Li, R., Pierre, B., & Chahine, R. (2015). Heat and mass transfer model of multicomponent adsorption system for hydrogen purification. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(14), 4794-4803. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.02.042>

- Xiao, J., Peng, Y., Bénard, P., & Chahine, R. (2016). Thermal effects on breakthrough curves of pressure swing adsorption for hydrogen purification. *International Journal of Hydrogen Energy*, *41*(19), 8236-8245. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.11.126>.
- Xiao, P., Zhang, J., Webley, P., Li, G., Singh, R., & Todd, R. (2008). Capture of CO₂ from flue gas streams with zeolite 13X by vacuum-pressure swing adsorption. *Adsorption*, *14*, 575–582. doi:<https://doi.org/10.1007/s10450-008-9128-7>
- Yang, R. (2003). *Adsorbents: fundamentals and applications*. Wiley, New Jersey, pp 157–190. <https://doi.org/10.1002/047144409x>
- Zhang, J., Webley, P., & Xiao, P. (2008). Effect of process parameters on power requirements of vacuum swing adsorption technology for CO₂ capture from flue gas. *Energy Conversion and Management*, *49*(2), 346-356. doi:<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2007.06.007>.
- Zhao, R., Zhao, L., Deng, S., Song, C., He, J., & Shao, Y. (2017). A comparative study on CO₂ capture performance of vacuum-pressure swing adsorption and pressure-temperature swing adsorption based on carbon pump cycle. *Energy*, *137*, 495-509. doi:<https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.01.158>.

Apéndices

Apéndice A. Isotermas

A.1. Isoterma Dual-Site Langmuir 2

Tabla A.1.

IP Isoterma Dual-Site Langmuir 2

Componente	IP1 (Kmol/Kg)	IP2 (Kmol/Kg/K)	IP3 (1/bar)	IP4 (K)	IP5 (Kmol/Kg)	IP6 (Kmol/Kg*K)	IP7 (1/bar)	IP8 (K)
CO ₂	6.71e-3	-8.44e-6	5.59e- 4	2938.176	5.72e-3	-1.24e-5	3.63e-6	5778.085
N ₂	1.84e-3	-5.11e-6	5.98e- 3	211.45	2.61e-2	-7.42e-5	0.109	4.442

Ecuación A.1. Isoterma Dual-Site Langmuir 2

$$W_i = \frac{(IP_{1i} + IP_{2i}T)IP_{3i}e^{IP_{4i}/T}P_i}{1 + \sum_k (IP_{3k}e^{\frac{IP_{4k}}{T}}P_k)} + \frac{(IP_{5i} + IP_{6i}T)IP_{7i}e^{IP_{8i}/T}P_i}{1 + \sum_k (IP_{7k}e^{\frac{IP_{8k}}{T}}P_k)} \quad (\text{Ecuación 1})$$

P_i: presión parcial

A.2. Isoterma Extendida de Langmuir

Tabla A.2.

IP Isoterma Extendida de Langmuir

Componente	IP1 (Kmol Kg ⁻¹ bar ⁻¹)	IP2 (K)	IP3 (bar ⁻¹)	IP4 (K)
CO ₂	2.88e-7	3574	6.18e-5	3603
N ₂	7.18e-7	1670	6.21e-4	1359

Ecuación A.2. *Isoterma Extendida de Langmuir*

$$W_i = \frac{IP_{1i}e^{IP_{2i}/T}P_i}{1+\sum_k(IP_{3k}e^{\frac{IP_{4k}}{T}}P_k)} \quad (\text{Ecuación 2})$$

P_i : presión parcial

A.3. Propiedades de adsorción**Tabla A.3.**

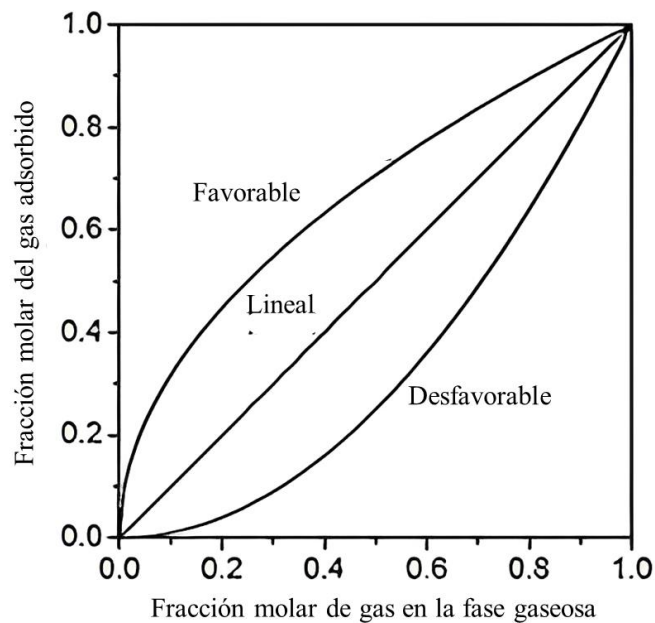
Propiedades físicas de los gases

	σ (Å)	μ (Å ³)	α (Å ³)
CO ₂	3.30	0.60	1.9
N ₂	3.64	0.31	1.4

σ - Diámetro cinético / μ - Momento cuadrupolar / α - Polarizabilidad

Figura A.3.

Diagrama de equilibrio de adsorción de mezclas binarias



Apéndice B. Modelo TSA

Tabla B.1.

Especificaciones propiedades del adsorbente TSA

Propiedades del adsorbente			
	Valor	unidades	Descripción
Hb	1	m	Altura
Db	0,1	m	Diámetro interno
Ei	0,38	m ³ vol/ m ³ lecho	Porosidad total
Ep	0,384	m ³ vol/ m ³ lecho	Porosidad intra-partícula
RHOs	756	Kg/m ³	Densidad
Rp	9,00E-04	mm	Radio
Sfac	1	n/a	Factor de forma del adsorbente

Tabla B.2.

Especificaciones modelos matemáticos TSA

Especificaciones cama adsorbedora	
Método de discretización	UDS1
Numero de nodos	20
Balance de materia	Convectivo
Caída de presión	Ecuación de Ergun
Modelo cinético	Modelo fuerzas lineales
Coefficiente de transferencia de masa	Constante
Modelo de isoterma	Dual site
Balance de energía	No isotérmico sin conducción
Reacciones	-

Tabla B.3.*Organizador de ciclos TSA*

Organizador de ciclos	
ETAPA	TIEMPO (s)
Adsorción	600
Despresurización	120
Calentamiento	720
Enfriamiento	360
Represurización	600

Tabla B.4.*Organizador de ciclos variables manipuladas TSA*

Variables manipuladas								
Etapa	VF1	VF1	VF2	VF2	VP1	VW1	VW1	F2
Tipo	AE	Flujo	AE	CV	AE	AE	CV	T
	-	Kmol s ⁻¹ bar ⁻¹	-	Kmol s ⁻¹	-	-	Kmol s ⁻¹	K
Adsorción	3	0,005	0	-	2	0	-	-
Despresurización	0	-	0	-	0	2	1,00E-04	-
Calentamiento	-	-	2	0,074	-	2	0,006	398,15
Enfriamiento	0	-	0	-	-	2	0,0055	298,15
Represurización	1	-	2	6,00E-05	0	0	-	298.15

AE: Especificación activa de la válvula**CV:** Coeficiente de flujo de la válvula

Apéndice C. Modelo PSA

Tabla C.1.

Especificaciones propiedades del adsorbente PSA

Propiedades del adsorbente			
	Valor	Unidades	Descripción
Hb	1	m	Altura
Db	0,037	m	Diámetro interno
Ei	0,357	m ³ vol/ m ³ lecho	Porosidad total
Ep	0,413	m ³ vol/ m ³ lecho	Porosidad intra-partícula
RHOs	1160	kg/m ³	Densidad
Rp	0,00157	mm	Radio
Sfac	1	n/a	Factor de forma del adsorbente

Tabla C.2.

Especificaciones modelos matemáticos cama adsorbedora PSA

Especificaciones cama adsorbedora	
Método de discretización	UDS1
Numero de nodos	10
Balance de materia	Convectivo
Caída de presión	Ecuación de Ergun
Modelo cinético	Modelo fuerzas lineales
Coefficiente de transferencia de masa	Constante
Modelo de isoterma	Dual Site
Balance de energía	Isotérmico
Reacciones	-

Tabla C.3.*Organizador de ciclos PSA*

Organizador de ciclos	
ETAPA	TIEMPO (s)
Adsorción	120
Despresurización	550
Purga	120
Presurización	410

Tabla C.4.*Organizador de ciclos variables manipuladas PSA*

Etapa	Variables manipuladas						
	VF11	VP11	V13	VF21	VP21	V23	V14
Adsorción	1	1	0	0	0	0	2
Despresurización	0	0	1	1	0	0	0
Purga	0	0	1	1	1	0	2
Presurización	1	0	0	0	0	1	0

Apéndice D. Modelo VPSA**Tabla D.1.***Especificaciones propiedades del adsorbente VPSA*

Propiedades del adsorbente			
	Valor	unidades	Descripción
Hb	1	m	Altura
Db	0,1	m	Diámetro interno
Ei	0,38	m ³ vol/ m ³ lecho	Porosidad total
Ep	0,384	m ³ vol/ m ³ lecho	Porosidad intra-partícula
RHOs	756	kg/m ³	Densidad
Rp	9,00E-04	mm	Radio
Sfac	1	n/a	Factor de forma del adsorbente

Tabla D.2.*Especificaciones modelos matemáticos cama adsorbedora VPSA*

Especificaciones cama adsorbedora	
Método de discretización	UDS1
Numero de nodos	20
Balance de materia	Convectivo
Caída de presión	Ecuación de Ergun
Modelo cinético	Modelo fuerzas lineales
Coefficiente de transferencia de masa	Constante
Modelo de isoterma	Dual site
Balance de energía	No isotérmico sin conducción
Reacciones	-

Tabla D.3.*Organizador de ciclos VPSA*

Organizador de ciclos	
ETAPA	TIEMPO (s)
Adsorción	90
Despresurización	550
Purga	90
Presurización	410

Tabla D.4.*Organizador de ciclos variables manipuladas VPSA*

Variables Manipuladas													
Etapa	VF1	VF11	VF21	VP11	VP1	V14	V24	V13	V23	VW1	VP1	FEED P (Bar)	WASTE P (Bar)
Adsorción	1	1	0	0	1	0	0	0	0	1	1	1.5	-
Despresurización	1	1	0	1	0	0,1	0	0	1	1	1	1.5	-
Purga	1	0	1	1	0	0	0	0	0	1	1	-	-
Presurización	1	0	1	0	1	0	0,1	1	0	1	1	-	0,025
Cv (Kmol s ⁻¹ bar ⁻¹)	20	88	88	84,4	84,4	0,15	0,15	8,2	8,2	0,34	8	-	-