



Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Ingeniería y Ciencias Agropecuarias

***Simulación del proceso de captura de dióxido de carbono
empleando absorbentes sólidos***

Panelo Juan Pablo

Trabajo final de Ingeniería *Química*

Director

Dr. Pablo Santiago Belzunce

Co directora

Dra. Maria Laura Rodriguez

Villa Mercedes, San Luis

2025

RESUMEN

Este trabajo estudia la captura de dióxido de carbono (CO_2) de gases de combustión provenientes de una central térmica de ciclo combinado empleando un sólido reactivo, el ortosilicato de litio (Li_4SiO_4). Se combinaron simulaciones en software HYSYS y cálculos de ingeniería en software MATLAB para definir condiciones operativas y dimensiones preliminares de columnas de lecho fijo a alta temperatura donde se lleva a cabo el proceso de absorción. Primero se evaluó el efecto de la presión, la temperatura, la composición y el caudal sobre el rendimiento, verificando que una mayor presión parcial de CO_2 favorece la conversión y que el calor liberado por la reacción perjudica la termodinámica de reacción condicionando el avance de la reacción. En cuanto al diseño, se estimó la masa total de sólido, el volumen de lecho poroso y se analizaron alternativas de velocidad del gas y tamaño de partícula, priorizando pérdidas de presión moderadas para contener el consumo eléctrico. Como compromiso técnico se adoptó una velocidad de 0.5 m/s y partículas de 10 mm, lo que mantiene la caída de presión total por columna en valores bajos con dimensiones constructivas razonables. A partir del volumen total, se compararon configuraciones con 20, 40 y 100 torres; la opción de 40 torres se consideró la más equilibrada por la distribución del flujo, criterios de redundancia, facilidad de instalación y superficie a aislar, respetando relaciones geométricas usuales. En conjunto, el estudio ofrece una base consistente para decisiones de diseño y deja lineamientos claros para su optimización y verificación futura.

Palabras clave: Absorción reactiva; Captura de CO_2 ; Columnas de lecho fijo; Simulación de procesos; Sólidos a alta temperatura.

DEDICATORIA

Este trabajo está dedicado a mi abuelo, quien con su sabiduría, fortaleza y valores me ha inspirado a superar cualquier desafío; y a mi madre, cuyo amor incondicional, sacrificio y apoyo constante han sido el motor que me ha llevado a alcanzar cada meta. Sin su ejemplo y presencia en mi vida, este logro no habría sido posible. A ambos les dedico este esfuerzo, con todo mi agradecimiento y cariño.

AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento a mi director y codirectora, quienes con su orientación, paciencia y vasto conocimiento hicieron posible la realización de este trabajo. A mis amigos, por su apoyo constante y compañía en los momentos más difíciles. A mi familia, por ser mi pilar inquebrantable, brindándome ánimo y comprensión en cada paso. Y, en especial, a mi madre, cuyo esfuerzo y amor incondicional han sido esenciales para llegar hasta aquí. Este logro es tanto mío como de todos ustedes.

INDICE

RESUMEN	3
CAPITULO 1: Introducción	9
1.1 Diseños de columnas de absorción	15
1.1.1 Condiciones Operativas y Parámetros de Diseño	16
1.2 Simulación de procesos en software comerciales	21
1.2.1 Aspen HYSYS: Estructura, Componentes y Funcionamiento	23
1.2.2 Capacidades de Simulación y Aplicaciones Industriales	26
1.2.3 Importancia de Aspen HYSYS en el Diseño de Procesos de Captura de CO ₂	26
1.3 Objetivo del trabajo final	28
1.3.1 Objetivo general	28
1.3.2 Objetivos específicos	28
1.3.3 Alcance del trabajo	28
1.3.4 Organización del trabajo final	29
CAPITULO 2: Metodología	30
2.1 Recopilación de datos teóricos	31
2.2 Hipótesis del modelo	33
2.3 Simulación	35
2.3.1 Absorción y desorción	39
2.3.2 Cálculos teóricos y balances	41
2.3.3 Validación de Datos	42
2.3.4 Ventanas operativas exploradas	43
2.4 Diseño de columnas reactivas	44
2.4.1 Hipótesis de Cálculo	44
2.4.2 Criterios de diseño	44
2.4.3 Secuencia de cálculo realizada	45
CAPITULO 3: Resultados	52
3.1 Parámetros simulados	52
3.1.1 Efecto de la variación de la temperatura en el reactor	52
3.1.2 Efecto de la variación de presión en el reactor	54
3.1.3 Efecto de la variación de la concentración de CO ₂ en la alimentación al reactor	57
3.1.4 Efecto de la variación del flujo de la alimentación sobre el reactor	59
3.1.5 Análisis de Simulación de Captura de CO ₂ : Comparación entre MATLAB y HYSYS	60
3.2 Diseño de columnas de absorción	61

3.2.1 Impacto de las distintas variables en el tiempo de residencia y la determinación del número de torres.....	67
3.2.2 Selección de cantidad de torres.....	69
3.2.3 Instalación y montaje.....	70
3.2.4 Mantenimiento y confiabilidad.....	70
3.2.5 Distribución del flujo y operación del múltiple.....	70
3.2.6 Área disponible y lay-out.....	71
3.2.7 Consideraciones mecánicas: diámetro, altura, espesor y estabilidad.....	71
3.2.8 Superficie externa.....	71
3.2.9 Costos y economía de escala.....	72
CAPITULO 4: Conclusión.....	73
GLOSARIO.....	75
BIBLIOGRAFIA.....	77

INDICE DE FIGURAS

CAPITULO 1: Introducción

Figura 1. 1 matriz de generación eléctrica, % de participación.....	11
Figura 1. 2 Componentes de un software de simulación e interacción con los pasos a seguir para simular procesos.....	22
Figura 1. 3 Selección de componentes en un software de simulación.....	24
Figura 1. 4 Opción de generación de sólidos hipotéticos.....	24
Figura 1. 5 Interfaz para selección de paquete termodinámico en el simulador.....	25

CAPITULO 2: Metodología

Figura 2. 1 Curva de equilibrio de reacción gas-sólido entre CO_2 - Li_4SiO_4	34
Figura 2. 2 Flowsheet del sistema de absorción y desorción de CO_2 - Li_4SiO_4	35
Figura 2. 3 Interfaz de propiedades termo-físicas de las corrientes.....	37
Figura 2. 4 Interfaz de carga de composición de gases.....	38
Figura 2. 5 Interfaz del reactor de equilibrio.....	38
Figura 2. 6 Esquema de simulación de reacción de absorción.....	40
Figura 2. 7 Esquema de simulación de reacción de desorción.....	40
Figura 2. 8 Esquema de cálculo seguido durante el diseño de torres de absorción.....	46

CAPITULO 3: Resultados

Figura 3. 1 Comparación entre los resultados simulados y teóricos para diferentes temperaturas.....	53
Figura 3. 2 Comparación resultados simulados y teóricos para diferentes temperaturas.....	54
Figura 3. 3 Comparación simulados resultados simulados y calculado para diferentes presiones.....	56
Figura 3. 4 Comparación simulados resultados simulados y calculado para diferentes presiones.....	57
Figura 3. 5 Comparación entre los resultados simulados y calculado para diferentes composiciones de alimentación.....	58
Figura 3. 6 Comparación de resultados simulados y calculado para diferentes composiciones de alimentación.....	59

Figura 3. 7 Representación de la ecuación 2.19 para distintos tamaños de partículas esféricas.....	64
--	----

CAPITULO 1: Introducción

Tabla 1.1 Producción bruta de gas natural en Argentina. En millones de m ³ /día de 9.300 kcal. Enero a mayo 2010-2023.....	10
Tabla 1. 2 Consumo promedio de gas natural en Argentina, total sistema, por tipo de cliente, En millones de m ³ /día de 9.300 kcal. Enero a mayo 2022-2023.....	10
Tabla 1. 3 Comparativa de parámetros claves en la selección del tipo de lecho de absorción	18

CAPITULO 2: Metodología

Tabla 2. 1Propiedades de los solidos	32
Tabla 2. 2 Constantes de capacidad calorífica.....	31
Tabla 2. 3 Condiciones operativas propuestas	44
Tabla 2. 4 Valores típicos reportados en bibliografía [36].....	47
Tabla 2. 5 Criterios adoptados de bibliografía	50

CAPITULO 3: Resultados

Tabla 3. 1 Ventana operativa de temperatura	51
Tabla 3. 2 Ventana operativa de presión.....	53
Tabla 3. 3 Ventana operativa de composición.....	56
Tabla 3. 4 Ventana operativa de flujo de alimentación	58
Tabla 3. 5 Condiciones operativas	60
Tabla 3. 6 Propiedades de los solidos	61
Tabla 3. 7 Variación de flujos en función del tiempo de operación	62
Tabla 3. 8 Composición de los gases a la salida del reactor	62
Tabla 3. 9 Propiedades del lecho.....	64
Tabla 3. 10 Influencia de la velocidad en el área total.....	64
Tabla 3. 11 Variación de la caída de presión para distintas velocidades y diámetros de partícula	Error! Bookmark not defined.
Tabla 3. 12 Dimensionamiento de columnas según la cantidad de torres.....	69

CAPITULO 1: Introducción

La magnitud, velocidad e intensidad del cambio climático están aumentando. Según el informe publicado por el Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático de las Naciones Unidas [1], podría superarse un umbral crítico de +1.5 °C de calentamiento global hacia alrededor de 2030, con consecuencias irreversibles e inéditas como el aumento del nivel del mar, olas de calor, inundaciones y otros eventos extremos. Sin embargo, una reducción significativa y sostenida de las emisiones de dióxido de carbono podría mitigar el impacto del cambio climático según el IPCC [1]. El organismo Global Carbon Budget [2] anunciaba para 2024 unos 37400 millones de toneladas de emisiones de dióxido de carbono (CO₂) de origen fósil, lo que indica un aumento del 0,8 % con respecto a 2023. A pesar de la urgente necesidad de reducir las emisiones para frenar el cambio climático, los investigadores afirman que todavía “no hay indicios” de que el mundo haya alcanzado el pico de emisiones de CO₂ fósil. La necesidad de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero es imperiosa y ha impulsado la búsqueda de soluciones para la optimización del consumo energético y la captura de CO₂ en diversas industrias. En este contexto, el gas natural juega un papel fundamental como fuente de energía de transición hacia una matriz energética más sostenible. Sin embargo, es crucial analizar tanto el consumo como la producción de este recurso para evaluar su impacto en términos de eficiencia energética y huella de carbono.

En las tablas 1 y 2, se presentan datos sobre el consumo promedio de gas natural en Argentina desglosado por tipo de cliente para los períodos de enero a mayo de 2022 y 2023, así como la variación interanual correspondiente. Estos datos permiten identificar tendencias en el uso del gas natural en sectores claves, como centrales eléctricas, industrias, residencias y transporte. Además, se analiza la producción bruta de gas natural en Argentina durante el mismo período, proporcionando un marco de referencia sobre la disponibilidad del recurso y su relación con la demanda.

Tabla 1.1 Producción bruta de gas natural en Argentina. En millones de m³/día de 9.300 kcal. Enero a mayo 2010-2023

Fuente: Ente Nacional Regulador del Gas (ENARGAS). (2023). [3]

	ENERO 2023 A MAYO 2023	VAR. INTERANUAL	MAYO 2023	VAR. INTERANUAL
PRODUCCIÓN BRUTA	130,24	0,74%	134,93	-0,82%

Tabla 1. 2 Consumo promedio de gas natural en Argentina, total sistema, por tipo de cliente, En millones de m³/día de 9.300 kcal. Enero a mayo 2022-2023

Fuente: Ente Nacional Regulador del Gas (ENARGAS). (2023). [3]

	ENERO 2023 A MAYO 2023	ENERO 2022 A MAYO 2022	VAR. INTERANUAL	MAYO 2023	MAYO 2022	VAR. INTERANUAL
Centrales eléctricas	38,92	38,76	0,42%	38,88	32,66	19,06%
Industriales	33,74	31,42	7,39%	34,52	31,06	11,14%
Residencial	16,83	20,51	-17,93%	31,41	41,02	-23,44%
GNC	6,14	6,46	-4,92%	6,06	6,56	-7,70%
Destilería	2,1	2,1	0,16%	0,37	2,58	-85,86%
Comercial	2,74	2,76	-0,63%	3,59	4,05	-11,30%
SDB	1,67	1,86	-9,99%	2,72	3,3	-17,63%
Entes oficiales	0,68	0,83	-17,30%	1,37	1,79	-23,84%
CONSUMO TOTAL	102,83	104,68	-1,77%	118,9	123,02	-3,35%

El reciente aumento en la generación de energía eléctrica mediante gas natural debido a un aumento en la demanda de electricidad, así como la instalación de nuevas centrales térmicas y el aumento de la capacidad en plantas existentes para reemplazar la generación de energía mediante carbón más emisora [3]; [4] explican la tendencia de las tablas, las cuales indican que las centrales térmicas alimentadas a gas natural seguirán operando durante décadas.

Otro factor en el cambio hacia las plantas de gas natural radica en el menor aumento de precio del gas natural debido a su creciente suministro [4]; [5], así como a sus menores emisiones de carbono en comparación con otros combustibles fósiles, su fácil almacenamiento y suministro a través de gasoductos o licuefacción, su mayor versatilidad (las plantas de energía de gas pueden encenderse y apagarse rápidamente), así como por garantizar un suministro de energía de respaldo para las energías renovables [6]; [7].

La estructura de generación eléctrica en Argentina presenta una fuerte dependencia de fuentes de energía no renovables, con una participación del 70% del total, según datos oficiales de CAMMESA tal y como se presenta en la Figura 1.1. De este segmento, la

generación térmica representa la mayor fracción, con un 62%, seguida por la nuclear con un 8%, mientras que la importación de energía es prácticamente nula (0%). Por otro lado, la Figura 1.1 muestra que las fuentes de energía renovables alcanzan una participación del 30%, divididas en hidráulica de gran escala (>50 MW) con un 24% y de tecnologías renovables promovidas por la Ley 26.190, como eólica y solar, que representan un 6% [4]. Estos porcentajes se reflejan también en la distribución horaria real del despacho eléctrico del Sistema Argentino de Interconexión (SADI), donde se observa una dominancia sostenida del parque térmico a lo largo del día. A pesar del crecimiento reciente de las renovables la matriz aún presenta un perfil fuertemente carbonizado, con impactos significativos en términos de emisiones de gases de efecto invernadero. Este escenario pone de manifiesto la urgente necesidad de implementar tecnologías de “Captura, Utilización y Almacenamiento de carbono” (CCUS por sus siglas en inglés), especialmente en sectores térmicos a base de gas natural o fuel oil, que son responsables de una proporción mayoritaria de las emisiones nacionales del sector energético. Además, el comportamiento horario observado sugiere que las tecnologías de captura deben adaptarse a variaciones de carga y operación en plantas con despachos intermitentes o flexibles, lo que implica desafíos técnicos adicionales para los sistemas de captura postcombustión.



Figura 1. 1 matriz de generación eléctrica, % de participación

Fuente: Compañía Administradora del Mercado Mayorista Eléctrico (CAMMESA). (2023). [4]

En este contexto, la evaluación y diseño de tecnologías de captura de CO₂, como las basadas en absorción con materiales sólidos reactivos, resultan fundamentales para contribuir a la descarbonización sin comprometer la confiabilidad energética del sistema nacional.

La captura, utilización y almacenamiento de carbono (CCUS por sus siglas en inglés) es una tecnología promisoría y un pilar clave de los esfuerzos para alcanzar emisiones netas cero para 2050, desempeñando un papel central junto con otras soluciones como la energía renovable, la reforestación, la electrificación, el hidrógeno, la bioenergía sostenible y la eficiencia energética [8]. Las tecnologías de CCUS ayudan a mitigar el cambio climático mediante la captura de las emisiones de dióxido de carbono antes de que puedan llegar a la atmósfera en sectores clave donde las emisiones de CO₂ no pueden evitarse (parte crítica de los objetivos del cero "neto"), o eliminando las emisiones históricas de la atmósfera. La necesidad de una transición acelerada hacia emisiones netas cero incrementa la importancia de estas tecnologías, las cuales contribuyen con cerca del 15% a la reducción acumulada de emisiones en un escenario de desarrollo sostenible [8].

Alrededor de 46 instalaciones comerciales de CCUS capturan actualmente más de 51 Mt de CO₂ por año (datos de 2020) [8]. A pesar de los pocos proyectos en operación hasta la fecha, sería necesario capturar 10 mil millones de toneladas de CO₂ para frenar el calentamiento global, lo que requeriría el desarrollo de alrededor de 2000 plantas de captura de carbono (estimación de 2023) [9]. Actualmente, el 65% de la capacidad de captura de CO₂ en funcionamiento se concentra en plantas de procesamiento de gas natural, lo cual refleja el papel fundamental de este sector en la adopción de tecnologías de captura, utilización y almacenamiento de carbono (CCUS). Para alcanzar las metas de reducción de emisiones a nivel mundial, sería necesario expandir considerablemente las instalaciones de captura en este y otros sectores. De hecho, se estima que para lograr los objetivos climáticos de reducción de emisiones sería necesario implementar miles de plantas de captura de carbono, enfocándose en industrias difíciles de descarbonizar. Sin embargo, el enfoque en centrales de ciclo combinado proporciona una base sólida para el desarrollo y optimización de estas tecnologías en otros sectores industriales. Actualmente, se han desarrollado diversas tecnologías para la captura de CO₂, las cuales se clasifican según la etapa del proceso de combustión en la que se implementan [8]. En términos generales, estos métodos se dividen en captura postcombustión, donde el CO₂ se separa de los gases residuales tras la combustión; captura precombustión, que implica la eliminación del carbono antes de la combustión mediante la conversión del combustible en gas de síntesis; y oxidación, en la que la combustión ocurre en un ambiente enriquecido con oxígeno para facilitar la

recuperación del CO₂ en forma concentrada. Cada una de estas tecnologías presenta ventajas y desafíos específicos en términos de eficiencia, costos operativos y viabilidad industrial, por lo que su aplicación depende de las condiciones del proceso y los requerimientos de mitigación de emisiones.

Dentro de la captura postcombustión, que es la más aplicada en plantas termoeléctricas, se han desarrollado diferentes métodos basados en la interacción del CO₂ con materiales líquidos o sólidos. Estos enfoques buscan maximizar la eficiencia de separación y reducir el consumo energético, adaptándose a las características del gas residual y a las condiciones operativas del proceso. A continuación, se describen las principales alternativas empleadas en esta etapa, diferenciadas por el tipo de medio utilizado para retener el CO₂ y por los mecanismos fisicoquímicos involucrados.

Adsorción con materiales sólidos: Utiliza materiales sólidos como zeolitas o carbón activado para adsorber el CO₂ a partir de los gases de combustión. Una de sus ventajas es su menor consumo energético en comparación con los solventes líquidos, y se caracterizan por su baja capacidad de captura [10].

Absorción con líquidos: Usa solventes como aminas para reaccionar químicamente con el CO₂ contenido en el flue gas (mezcla de gases de salida de la central térmica) proveniente de las chimeneas de las plantas termoeléctricas y separarlo del gas residual. Este es el método más maduro y ampliamente utilizado a escala industrial [11].

La captura de CO₂ mediante absorción reactiva se basa en una reacción química que forma un compuesto estable con un sólido o con un líquido, a diferencia de la adsorción física, donde el gas solo se adhiere superficialmente a un material sólido mediante fuerzas de Van der Waals.

La absorción reactiva es ampliamente utilizada en la captura postcombustión de CO₂ en aplicaciones industriales y en procesos de refinamiento de gases. Entre sus ventajas se encuentran su alta selectividad, regenerabilidad del absorbente y eficiencia en condiciones de alta temperatura [12].

La postcombustión con aminas como MEA o MDEA, y la tecnología de bucle químico son las más comúnmente aplicadas [13]; [14]. Aunque la tecnología basada en aminas se considera la más cercana al mercado [15], presenta varias desventajas, incluidas (1) baja capacidad de carga de CO₂; (2) alta velocidad de corrosión del equipo; (3) degradación ante la presencia de SO₂, NO₂ y O₂ en los gases de combustión que induce una alta tasa de reposición del absorbente; (4) alto consumo de energía durante la regeneración del

absorbente a alta temperatura; y (5) gran volumen de absorbedor [16]; [17]. Las simulaciones realizadas en este trabajo se enfocaron en el uso de absorbentes sólidos en la captura de CO₂, los cuales en los últimos años han cobrado relevancia como una alternativa más eficiente y sostenible en comparación con los absorbentes líquidos. Este enfoque permite reducir el consumo energético asociado a la regeneración del material y minimizar la huella de carbono en industrias de alta emisión [12]. Los procesos de captura basados en sólidos se consideran ventajosos en comparación con los procesos convencionales basados en solventes porque exhiben mayores cargas de CO₂ (10-40% en peso de CO₂) y tienen bajas capacidades caloríficas (aproximadamente 1.5 kJ/kg-K contra aproximadamente 4.0 kJ/kg-K para soluciones alcano-aminas acuosas [16]), un punto clave en la reducción del consumo de energía de regeneración.

Los materiales sólidos empleados para la captura de CO₂ deben combinar alta capacidad de sorción, estabilidad térmica y facilidad de regeneración. Entre los más estudiados se encuentran las zeolitas, materiales microporosos con estructura cristalina que permiten una adsorción selectiva de CO₂; en particular, la zeolita 13X destaca por su elevada capacidad a bajas temperaturas y su regeneración mediante oscilación de presión o temperatura. Además, estos sólidos pueden reaccionar químicamente con el CO₂ a temperaturas moderadas, liberándolo posteriormente a temperaturas superiores. Por otro lado, los materiales de base carbonosa, como carbones activados y aerogeles de carbono, han sido ampliamente explorados debido a su gran área superficial y la posibilidad de modificar sus grupos funcionales para mejorar la adsorción del gas. Aunque se han propuesto numerosos sorbentes hasta la fecha, tales como: sorbentes químicos (basados en aminas, óxidos metálicos inorgánicos porosos, como metales alcalinos o alcalinotérreos, impregnados con aminas, entre otros) y sorbentes físicos (carbón activado, zeolitas, sílice mesoporosa ordenada y MOFs), aún se necesita desarrollar sorbentes de CO₂ con alta capacidad de captura [18]. En los últimos años, se ha estudiado el uso de sorbentes de óxido de litio como aceptores de CO₂ a alta temperatura, en el rango de 450-700 °C. Particularmente, el ortosilicato de litio (Li₄SiO₄) se considera un material prometedor, sobre el que se han realizado varios estudios experimentales [19]; [20] y teóricos [21]; [22]

El ortosilicato de litio muestra una alta capacidad de captura de CO₂ (hasta un 36.7% en peso), así como una temperatura de regeneración cercana a 700 °C más baja que la de otros absorbentes sólidos, además de una alta estabilidad cíclica y térmica [21], lo que deriva en ahorros energéticos y mejora su factibilidad tecnológica.

Cuando el Li₄SiO₄ se expone a un flujo de CO₂ a una temperatura adecuada y presiones parciales de CO₂ mayores que las del equilibrio gas-sólido, el sorbente captura CO₂

para formar carbonato de litio y metasilicato de litio siguiendo una reacción química reversible exotérmica como se indica a continuación.



A pesar de su potencial para capturar CO_2 del gas de escape (flue gas) de las plantas de energía de ciclo combinado, se deben superar varios desafíos relacionados con el proceso de captura: 1) Necesidad de intensificar el proceso, esto es, minimizar el número de equipos maximizando la capacidad de captura de CO_2 bajo condiciones realistas de operación (altos caudales del gas de escape con baja concentración de CO_2); 2) Minimizar la carga energética de regeneración térmica para reducir el uso de combustible adicional; 3) Integración energética del proceso considerando intercambio de calor indirecto (convencional) y estrategias de quenching o enfriamiento por mezcla con fluidos a menor temperatura.

Particularmente, se obtuvieron resultados prometedores de absorción reactiva de CO_2 llevada a cabo en un lecho fijo operando a $550\text{ }^\circ\text{C}$ y 10 bar ($p_{\text{CO}_2} = 0.7\text{ bar}$) [19]. Bajo estas condiciones, se logra una alta capacidad de captura de CO_2 , así como un aumento en los tiempos de funcionamiento de la columna, ya que tanto la cinética como la termodinámica de absorción de CO_2 están favorecidas [19]. La desorción de CO_2 , por otro lado, es un proceso reversible endotérmico que tiene lugar a altas temperaturas (aproximadamente $700\text{-}720\text{ }^\circ\text{C}$ en el caso del Li_4SiO_4) y baja presión. El calor necesario para llevar a cabo esta etapa suele ser proporcionado por calentamiento directo por medio de gases calientes producidos en la combustión de gas natural con oxígeno puro en una cámara de combustión auxiliar [19].

1.1 Diseños de columnas de absorción

En esta sección, se abordan los principios de diseño, las configuraciones más utilizadas y los criterios operativos que garantizan un buen desempeño de torres de captura de CO_2 . Entre las distintas configuraciones las más utilizadas son las siguientes:

Torres de Lecho Empacado (Packed-Bed Towers): Son las más utilizadas en procesos industriales debido a su diseño simple y su eficiencia en la transferencia de masa. Se dividen en empacadas aleatoriamente y estructuradas, donde las primeras utilizan cuerpos de relleno distribuidos aleatoriamente y las segundas poseen estructuras diseñadas para optimizar el contacto gas-sólido. Son eficaces en la captura postcombustión y permiten una alta superficie de contacto con el absorbente.

Torres de Lecho Móvil (Moving-Bed Reactors): A diferencia del lecho fijo, en este tipo de torres el absorbente se mueve continuamente mientras el gas fluye en contracorriente, lo

que permite una regeneración continua. Reduce la caída de presión en comparación con los lechos empacados, pero su operación es más compleja debido al manejo de materiales sólidos en movimiento

Torres de Lecho Fluidizado (Fluidized-Bed Towers): Operan mediante la suspensión de partículas absorbentes en el flujo de gas, lo que mejora la transferencia de masa y calor. Se han implementado en procesos de captura de CO₂ con regeneración térmica eficiente, pero presentan desafíos en la estabilidad operativa, problemas de atrición de partículas y el control de flujo

Lecho Rotatorio (Rotating Packed-Bed Towers): Son una alternativa innovadora donde el lecho se somete a un movimiento rotacional para mejorar la eficiencia de contacto gas-sólido. Se ha demostrado que este diseño puede reducir significativamente la caída de presión y aumentar la eficiencia de captura en comparación con los lechos fijos tradicionales [23].

1.1.1 Condiciones Operativas y Parámetros de Diseño

Los parámetros operativos juegan un papel clave en la eficiencia de captura de CO₂ en estos sistemas. Entre los más importantes se encuentran:

Velocidad del gas: En lechos empacados, debe mantenerse en un rango óptimo para evitar canalización o sobrepresión en el sistema.

Tamaño de partícula: Influye en la eficiencia de adsorción y en la caída de presión; en estudios de laboratorio se reportan valores típicos entre 1–3 mm para optimizar el contacto gas-sólido [14], mientras que en aplicaciones industriales se emplean tamaños mayores (≈10 mm) para reducir pérdidas de carga [24]; [25].

Caída de presión: Un parámetro crítico que afecta el consumo energético del sistema. En diseños optimizados, la caída de presión puede reducirse hasta un 50% mediante empaques estructurados o sistemas de flujo controlado.

Temperatura de operación: Generalmente varía entre 550-720°C dependiendo del tipo de absorbente y del método de regeneración aplicado.

Escalado de sistemas de captura en plantas industriales: El escalado de estos sistemas desde el laboratorio hasta el nivel industrial implica una serie de desafíos técnicos. En estudios recientes, se han desarrollado plantas piloto con torres de absorción de diámetros

entre 2.5 y 5 m y alturas de lecho de hasta 15 m, dependiendo del volumen de gas tratado y del tipo de configuración utilizada [26].

La tabla 1.3 presenta una comparación técnica de distintos tipos de lechos reactivos empleados en procesos de captura de dióxido de carbono (CO₂), evaluando múltiples parámetros operativos claves. Los sistemas analizados incluyen: lecho fluidizado, lecho móvil, lecho empacado y lecho rotatorio, destacando sus ventajas y limitaciones frente a variables críticas de diseño y operación.

Contacto gas-sólido: El contacto eficiente entre el gas y el sólido es esencial para una buena conversión y velocidad de reacción. En este aspecto, el lecho rotatorio se posiciona como el más efectivo (excelente), mientras que el lecho fluidizado presenta limitaciones por la dispersión del sólido.

Control de temperatura: Un perfil de temperatura uniforme es deseado para evitar zonas frías o calientes que afecten la eficiencia del transporte de oxígeno. Aquí, tanto el lecho fluidizado como el lecho rotatorio ofrecen un control excelente, en contraste con el lecho empacado, que resulta limitado.

Regenerabilidad: Este parámetro evalúa la capacidad del material para operar en múltiples ciclos. El lecho rotatorio sobresale con regenerabilidad excelente, mientras que el lecho empacado es el menos favorable.

Escalabilidad: La capacidad de trasladar la tecnología a mayor escala sin pérdida de eficiencia es vital. El lecho rotatorio es nuevamente el más adecuado (excelente), en tanto que el empacado tiene desempeño regular.

Caída de presión: Una menor caída de presión permite reducir el consumo energético del sistema. En este sentido, el lecho fluidizado y el rotatorio presentan mejor desempeño que el empacado.

Aglomeración y Atrición de Partículas: La pérdida de material por desgaste afecta la eficiencia de la captura. El lecho fluidizado presenta muy alta atrición, siendo su principal desventaja, mientras que el lecho rotatorio minimiza este efecto.

Circulación del transportador de oxígeno: Este parámetro refleja la necesidad de mover el sólido en forma continua. El lecho fluidizado requiere tasas altas de circulación, lo que implica mayor complejidad mecánica y energética. En cambio, en lechos rotatorios o empacados es más limitada.

Conversión del combustible: La eficiencia en la conversión del combustible es clave para sistemas integrados. Los lechos empacado y rotatorio logran conversión excelente, mientras que los demás presentan valores más bajos.

Fugas de gas: Las fugas de aire aumentan el costo de la separación de CO₂, aquí se especifican tecnologías de separación asociadas según el tipo de lecho, como Oxy-Fuel combustión (OFC), membranas, absorción, adsorción TSA/PSA, y separación criogénica, entre otras.

Separación de CO₂: Se detalla el método utilizado para separar el CO₂ de los gases de combustión, destacando tecnologías postcombustión (Post-CCC, OFC-I, II, III) o precombustión. La elección depende del tipo de lecho utilizado y de la integración en el ciclo termodinámico.

Es importante destacar que la Tabla 1.3 hace referencia a la tecnología de combustión química en bucle (Chemical Looping Combustion, CLC). En este proceso, el oxígeno necesario para la combustión no se mezcla directamente con el combustible, sino que se utiliza un portador de oxígeno, generalmente un óxido metálico. Este portador transfiere oxígeno al combustible dentro de un reactor de combustión, donde ocurre la reacción. Como resultado, los productos de combustión son principalmente CO₂ y vapor de agua, lo que facilita la separación del CO₂ sin necesidad de procesos adicionales de captura. Esta característica convierte a la combustión química en bucle en una alternativa eficiente para la mitigación de emisiones en comparación con métodos convencionales.

Tabla 1. 3 Comparativa de parámetros claves en la selección del tipo de lecho de absorción
Adaptada de Sreenivasulu, et al., 2015 [23]

Parámetro	Importancia del parámetro	Lecho fluidizado	Lecho móvil	Lecho empacado	Lecho rotatorio
Contacto gas-sólido	El contacto perfecto es esencial para una operación rápida y completa.	Limitado	Regular	Bueno	Excelente
Control de temperatura	Se diseña un perfil de temperatura uniforme para el transportador de oxígeno.	Excelente	Bueno	Limitado	Excelente
Regenerabilidad	Disponibilidad en función del número de ciclos.	Bueno	Bueno	Limitado	Excelente
Escalabilidad	La retención de ventajas con el escalado es un desafío.	Bueno	Bueno	Regular	Excelente

Caída de presión	Se prefiere una caída de presión más baja para minimizar el consumo de energía externo.	Bueno	Bueno	Regular	Excelente
AAP (aglomeración y atrición de partículas)	La aglomeración y las pérdidas por atrición afectan la eficiencia de captura de carbono.	Muy alta	Media	Limitada	Limitada
Conversión de combustible	Se desea una conversión del 100%.	Buena	Regular	Excelente	Excelente
Fugas de gas	La fuga de aire incrementa el costo de la separación de CO ₂ .	OFC-II, OFC-III, SAFB	OFC-II, OFC-III	Membrana, adsorción, absorción, TSA, PSA, ESA, separación criogénica de CO ₂	OFC-II, OFC-III
Separación de CO ₂	Método utilizado para la separación de CO ₂ de los gases de combustión.	Post-CCC, OFC-I	Post-CCC	Post-CCC, Pre-CCC	Post-CCC, OFC-II, OFC-III

Para aplicar la teoría y las estrategias de optimización en el diseño de torres de captura de CO₂, es clave analizar experiencias previas y estudios reales. A través de distintos casos, se ha evaluado la influencia de variables tales como el tipo de absorbente, las condiciones operativas y la configuración del lecho, todas ellas afectan la eficiencia del proceso. A continuación, se presentan ejemplos concretos que han servido de referencia para el desarrollo de este trabajo. En el campo de la captura de CO₂ se evaluaron distintos sistemas de captura de CO₂ en función de su rendimiento, diseño estructural y condiciones operativas.

Uno de los ejemplos más representativos de estos estudios es la utilización de un reactor de lecho fijo con zeolita 13X como adsorbente. Este sistema operó bajo condiciones específicas que incluyeron una temperatura de adsorción de 30 °C, una temperatura de regeneración de 70 °C y una presión de operación de 1 atm, utilizando partículas de adsorbente con un diámetro de 2 mm. La torre diseñada para este sistema tenía un diámetro de 2.5 m y una altura del lecho de 8 m, lo que permitía un volumen total de 39.27 m³. Los resultados obtenidos mostraron una eficiencia de captura del 90% y un tiempo de agotamiento del adsorbente de 1,931.93 s, lo que confirma la viabilidad de este método para aplicaciones industriales [11]. Sin embargo, uno de los principales inconvenientes detectados fue la pérdida del 20 % en la capacidad de adsorción debido al sobrecalentamiento del lecho, lo que indica la necesidad de implementar estrategias de enfriamiento o mejorar la distribución del flujo de gas para mantener la estabilidad térmica del sistema. Para abordar este tipo de limitaciones, se han desarrollado configuraciones alternativas, como los sistemas de lecho estructurado.

En estos diseños, el adsorbente se dispone en empaques estructurados en lugar de partículas dispersas, lo que permite una mejor distribución del flujo de gas y una reducción significativa de la caída de presión. Los estudios demostraron que esta configuración puede disminuir la caída de presión en un 50% en comparación con los sistemas de lecho fijo tradicionales, además de proporcionar una mayor estabilidad operativa. En términos de diseño, estas torres suelen tener un diámetro mayor, en el rango de 3 a 3.5 m, con alturas de lecho variables entre 10 y 12 m, dependiendo de la capacidad de captura requerida y del caudal de gas tratado. Estas mejoras en el diseño representan un avance significativo para aplicaciones a gran escala, ya que permiten reducir los costos energéticos asociados con el bombeo del gas a través del sistema y mejorar la eficiencia de captura de CO₂ sin comprometer la capacidad de adsorción del material [11].

Un enfoque ampliamente estudiado en la captura de CO₂ es la absorción química en torres de contacto gas-líquido, utilizando soluciones como monoetanolamina (MEA) o mezclas mejoradas como CESAR-1. Estas tecnologías han sido aplicadas en plantas piloto y entornos industriales, permitiendo evaluar distintos tipos de configuración de torres, como torres de platos, torres de relleno empacado y torres estructuradas, cada una con implicancias operativas específicas. Por ejemplo, García et al. (2017) [27] compararon la eficiencia térmica de una torre empacada con una torre estructurada, demostrando que la segunda presentaba menores pérdidas de carga y mejor regeneración térmica, lo cual impactaba positivamente en la eficiencia energética global del sistema. Asimismo, Saleh et al. (2019) [26] utilizaron simulaciones en Aspen Plus para analizar distintos escenarios de integración de la absorción postcombustión con regeneración térmica, concluyendo que el diseño de la torre influye significativamente en la penalización energética total del sistema. En general, los estudios coinciden en que las torres estructuradas permiten mayor compactación y reducción de la caída de presión, mientras que las torres empacadas tradicionales ofrecen mayor flexibilidad operativa y menor complejidad de fabricación. Estas experiencias previas permiten establecer criterios de diseño más robustos para futuras implementaciones industriales, particularmente en lo que respecta a la selección del tipo de torre, el solvente y las condiciones de operación óptimas para maximizar la eficiencia de captura y minimizar los costos asociados.

A partir de lo expuesto sobre la captura de CO₂, se establece la necesidad de evaluar el comportamiento de estos sistemas bajo condiciones operativas específicas. Para ello, es fundamental simular los procesos de absorción y desorción de CO₂ con el fin de comprender la eficiencia de captura y regeneración de los materiales absorbentes utilizados. Mediante herramientas de simulación como Aspen HYSYS o Aspen Plus, es posible predecir el comportamiento térmico del sistema de captura, optimizar el diseño del lecho y estimar

parámetros clave como la eficiencia de captura, la caída de presión y las condiciones óptimas de regeneración, sin necesidad de realizar ensayos experimentales extensivos.

1.2 Simulación de procesos en software comerciales

El objetivo de la simulación de procesos es predecir cómo se comportaría un proceso definido bajo un conjunto dado de condiciones de operación. La principal ventaja de la simulación es evaluar diferentes aspectos del proceso tales como su operabilidad, costes, etc. sin la necesidad de ponerlo en marcha físicamente. Algunas aplicaciones de la simulación son la evaluación económica de diferentes alternativas de proceso, la extrapolación para hallar límites en las condiciones de operación, el estudio de implementación de nuevos factores o elementos a un sistema y el estudio de estabilidad de un sistema frente a perturbaciones. A partir de estos ejemplos puede observarse que el análisis y la simulación simplifica la toma de decisiones a un bajo costo. Sin embargo, una buena simulación debe ir acompañada de una correcta síntesis de proceso para que sus resultados sean acertados. El diseño de procesos busca crear diagramas de flujo para procesos desconocidos en condiciones de entrada y salidas definidas, por lo que es un área complementaria a la simulación. La primera etapa, en la mayoría de los casos, es la definición de un diagrama de flujo sencillo para el proceso que se requiere simular, lo que es posible utilizando la síntesis como herramienta.

Como se muestra en la Figura 1.2 un software de simulación incluye generalmente los siguientes componentes:

- Base de datos de componentes que contiene las constantes necesarias para calcular las propiedades físicas de cada compuesto a partir de los modelos termodinámicos.
- Bases de paquetes termodinámicos que permiten representar una amplia variedad de sistemas, desde compuestos puros hasta mezclas complejas, y calcular equilibrios LLE (Liquid-Liquid Equilibrium) y VLE, (Vapor-Liquid Equilibrium) así como propiedades termodinámicas esenciales para el diseño de procesos
- Generador de diagramas de flujo o flowsheets, que realiza un seguimiento de cómo las corrientes materiales y energéticas se conectan con cada equipo o proceso.
- Base de datos de unidades de operación o módulos que permiten realizar cálculos de diseño para varios tipos de operaciones unitarias, y a la vez, conectan corrientes de materia y energía.

- Generador de salidas de datos o visualización de datos que permite personalizar los resultados de la simulación en forma de un reporte. Pueden generar gráficos, imágenes y tablas.

- Resolutor de diagramas de flujo que controla la secuencia de cálculos y la convergencia global de la simulación.

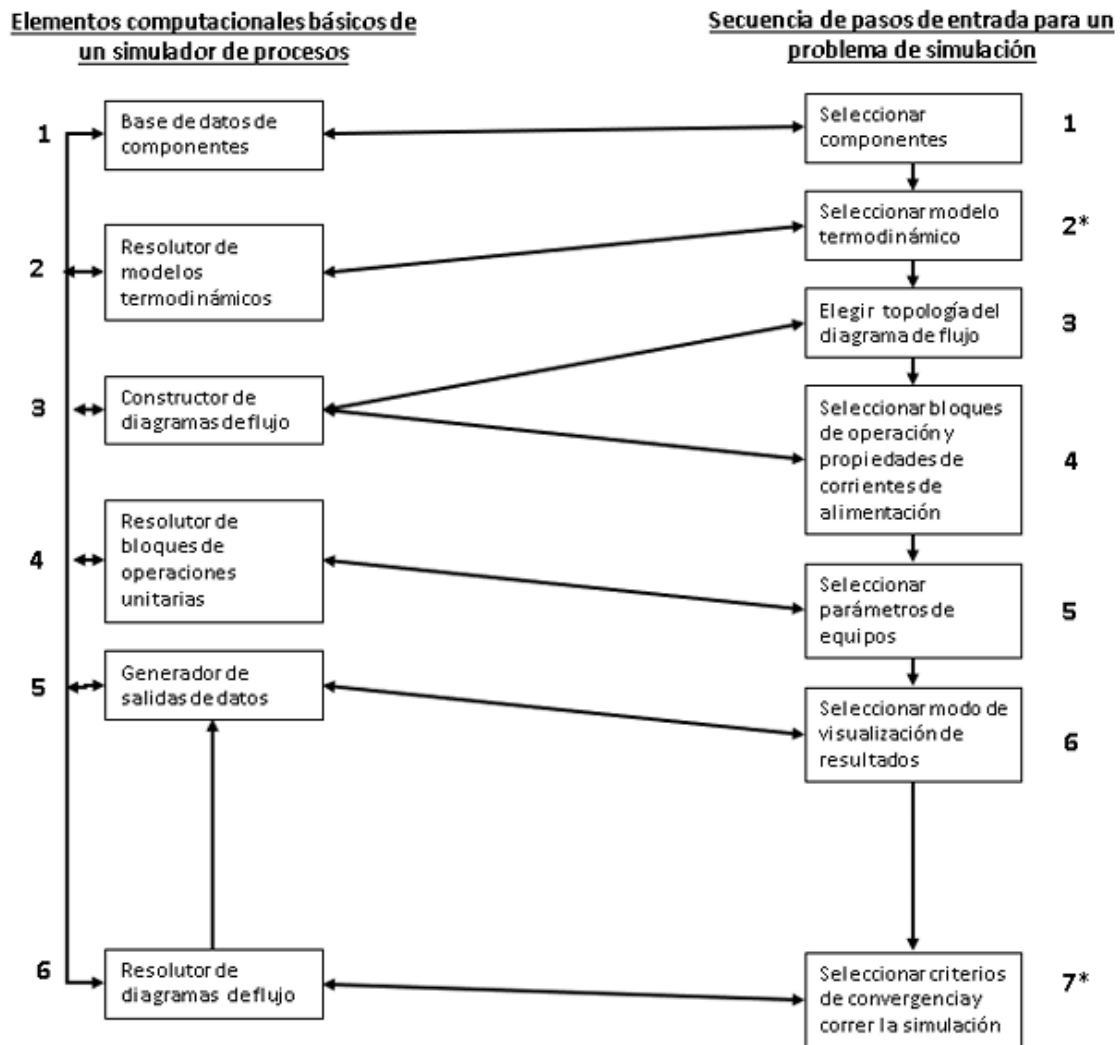


Figura 1. 2 Componentes de un software de simulación e interacción con los pasos a seguir para simular procesos

Fuente: García Lagos, M. V. (2017). Simulación de las etapas de proceso de una central térmica de ciclo combinado [Tesis de grado, Universidad Nacional de San Luis – Facultad de Ingeniería y Ciencias Agropecuarias].

Es importante destacar que sin importar el algoritmo de resolución que utilice el simulador, la simulación solo será precisa y el uso del software nos beneficiará siempre y cuando se sigan buenas prácticas en cada etapa del proceso de simulación. Se debe tener

en cuenta lo siguiente: es recomendable seleccionar todos los componentes necesarios para el diagrama de flujo, aunque algunos componentes solo se utilicen en la parte final del diagrama de flujo. La selección del modelo termodinámico es, como se mencionó anteriormente, un paso clave, ya que diferentes modelos termodinámicos conducirán a balances de masa y energía muy diferentes dependiendo del proceso. Al construir el diagrama de flujo del proceso utilizando el generador de diagramas de flujo deben seleccionarse modelos de unidades de operación (de la base de datos de operaciones unitarias) y las conexiones entre ellas con sus respectivos flujos de proceso, entre las cuales estarán las corrientes de materia y energía. Luego de generar el diagrama de flujo, deben proporcionarse especificaciones de los equipos, así como de los principales parámetros de las corrientes de entrada como la composición, presión, temperatura y caudal. Al ejecutar la simulación puede optarse por mostrar los resultados de la simulación en varias formas, dependiendo el software utilizado. Finalmente es importante verificar los resultados de la simulación, ya sea a través de modelos empíricos, balances de masa y de energía, o a través de datos de plantas o experimentales reportados. Esta práctica aumentará el nivel de confianza del modelo de simulación.

1.2.1 Aspen HYSYS: Estructura, Componentes y Funcionamiento

Es un software de simulación de procesos ampliamente utilizado en la industria química, diseñado para modelar sistemas termodinámicos complejos y optimizar el desempeño de plantas de procesamiento. Su aplicación se extiende a procesos de refinación, producción de gas natural, generación de energía y captura de CO₂. Su capacidad para predecir el comportamiento de sistemas multifásicos y su integración con herramientas de optimización lo convierten en una de las plataformas más utilizadas para el diseño y análisis de procesos industriales. Se compone de varios módulos que permiten modelar procesos químicos desde una perspectiva termodinámica, operativa y de control de procesos. Entre sus principales elementos se encuentran:

El entorno de propiedades: Punto de partida en cualquier simulación en Aspen HYSYS. En esta sección, se seleccionan los componentes químicos y los modelos termodinámicos que definen el comportamiento del sistema.

Base de datos de componentes: Como se observa en las figuras figura 1.3 y 1.4 esta ventana incluye una amplia gama de sustancias químicas predefinidas, además de permitir la incorporación de componentes hipotéticos con propiedades personalizadas.

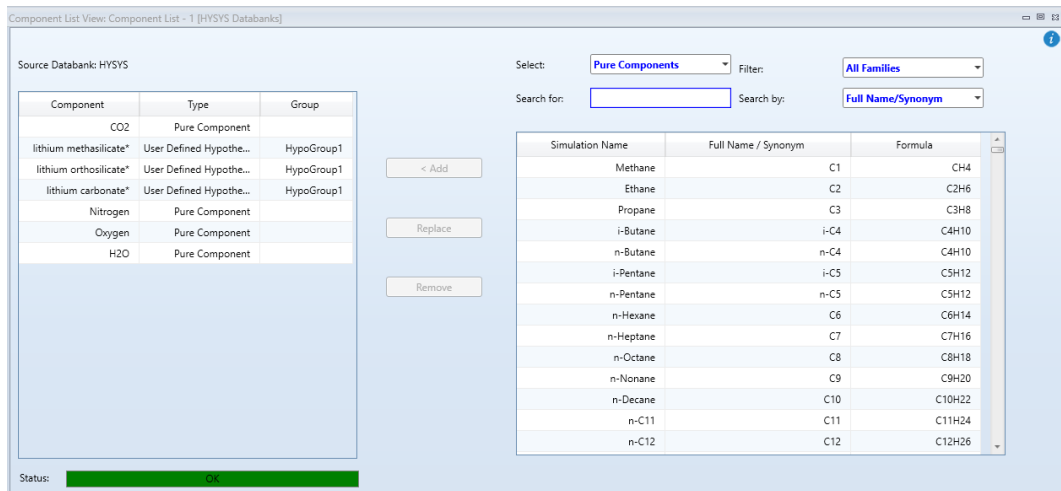


Figura 1. 3 Selección de componentes en un software de simulación.

Fuente: Aspen Technology, Inc. (2023). Aspen HYSYS®

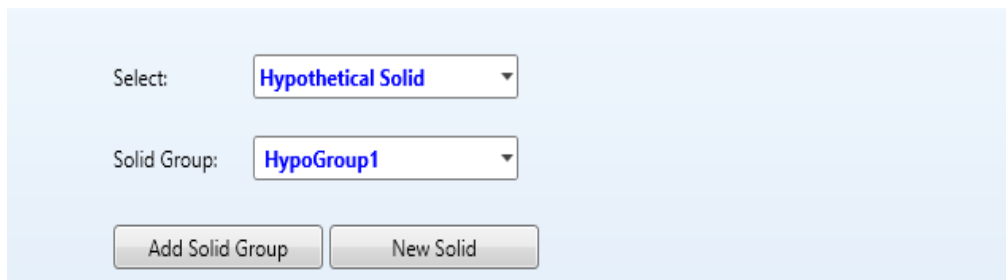


Figura 1. 4 Opción de generación de solidos hipotéticos

Fuente: Aspen Technology, Inc. (2023). Aspen HYSYS®

Modelos termodinámicos: En la figura 1.5 se observan los modelos termodinámicos en donde se utilizan ecuaciones de estado como Peng-Robinson (PR), Soave-Redlich-Kwong (SRK) y modelos de coeficientes de actividad como NRTL y Wilson, dependiendo de la naturaleza del sistema y del equilibrio de fases requerido.

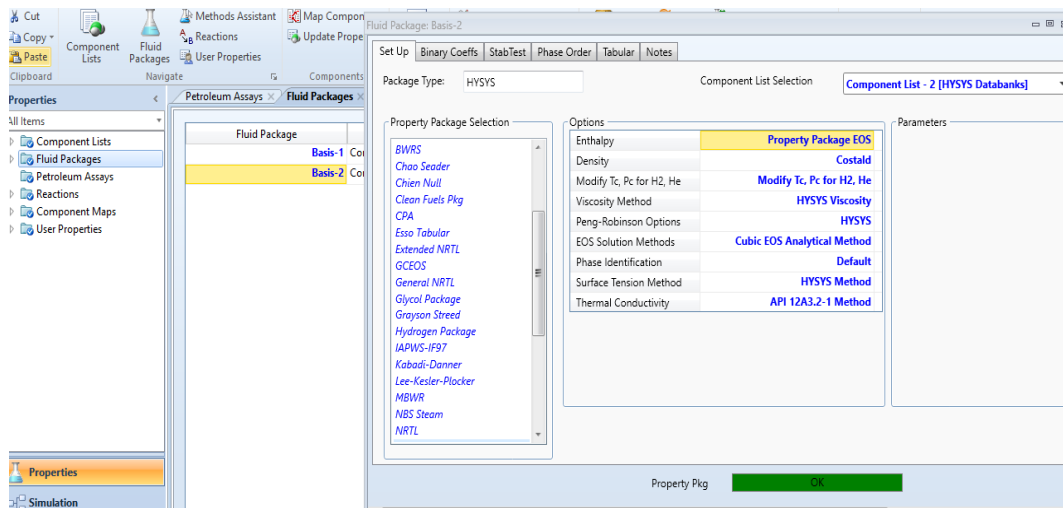


Figura 1. 5 Interfaz para selección de paquete termodinámico en el simulador

Fuente: Aspen Technology, Inc. (2023). Aspen HYSYS®

Cálculos de equilibrio de fases: Permite la predicción de la distribución de los componentes entre fases líquida, gaseosa y sólida, utilizando métodos de cálculo como flash isotérmico y flash adiabático.

Entorno de Simulación: En esta sección, se diseña el diagrama de flujo del proceso, interconectando unidades de operación a través de corrientes de materiales y de energía. Las principales funcionalidades del entorno de simulación incluyen:

Biblioteca de operaciones unitarias: Aspen HYSYS cuenta con un extenso catálogo de equipos, incluyendo reactores, intercambiadores de calor, columnas de absorción y destilación, bombas y compresores, cada uno de los cuales puede configurarse según parámetros operativos específicos.

Configuración de corrientes de proceso: Permite definir propiedades como caudal, temperatura, presión y composición de las corrientes de entrada y salida.

Resolución de balances de materia y energía: El software calcula el equilibrio de masas y energía en todo el sistema, asegurando la consistencia en cada una de las unidades de proceso.

Métodos de Resolución y Algoritmos de Cálculo: Aspen HYSYS ofrece dos enfoques principales para la resolución de ecuaciones en sistemas de simulación:

Sequential Modular (SM): En este enfoque, cada unidad de proceso se resuelve de manera independiente, utilizando los resultados obtenidos como entrada para la siguiente unidad. Es el método más comúnmente utilizado en simulaciones de procesos industriales.

Equation Oriented (EO): En este enfoque, todas las ecuaciones del sistema se resuelven simultáneamente en un solo paso iterativo, permitiendo la optimización de múltiples variables de forma simultánea. Este método es más eficiente para sistemas altamente acoplados y complejos.

1.2.2 Capacidades de Simulación y Aplicaciones Industriales

Aspen HYSYS no solo permite modelar procesos en estado estacionario, sino que también ofrece herramientas para la simulación dinámica, permitiendo estudiar el comportamiento transitorio de los sistemas y diseñar estrategias de control y optimización. Por ejemplo, dentro de la simulación dinámica y control de procesos nos encontramos con:

Análisis de perturbaciones operativas: Se pueden evaluar cambios en la alimentación del sistema, perturbaciones de temperatura o presión, y determinar estrategias de mitigación.

Diseño de sistemas de control: Aspen HYSYS permite la integración de controladores PID y la simulación de la respuesta dinámica de los equipos ante variaciones operativas.

Aspen HYSYS es utilizado en diversos sectores, tales como:

Industria del gas natural: Modelado de plantas de procesamiento de gas, deshidratación y endulzamiento.

Refinación de petróleo: Simulación de unidades de destilación y conversión de crudos pesados.

Generación de energía: Análisis de plantas de ciclo combinado y captura de CO₂ en procesos termoquímicos.

Captura y almacenamiento de carbono (CCS): Evaluación de la eficiencia de diferentes tecnologías de captura de CO₂, incluyendo procesos de absorción con solventes y adsorción en lechos fijos.

1.2.3 Importancia de Aspen HYSYS en el Diseño de Procesos de Captura de CO₂

En los últimos años, herramientas como Aspen HYSYS y Aspen Plus se han consolidado como plataformas fundamentales para la simulación y optimización de procesos

de captura de CO₂, permitiendo evaluar detalladamente tanto la absorción como la regeneración en condiciones industriales complejas. Diversos autores han empleado estas herramientas para estudiar la integración de sistemas de captura con bucle de sorbentes sólidos en plantas de ciclo combinado. Por ejemplo, Saleh et al. (2019) desarrollaron un diseño conceptual de integración de un sistema de captura con Li₄SiO₄ en una planta NGCC (Natural Gas Combined Cycle), simulando en Aspen Plus la absorción a 525 °C y regeneración a 700 °C, y demostrando que este enfoque presenta una penalización energética comparable e incluso inferior a tecnologías con aminas convencionales [26]. Asimismo, García et al. (2017) [27] evaluaron la integración térmica de la captura postcombustión con Li₄SiO₄/Li₂CO₃, obteniendo una penalización de solo 6.9 puntos porcentuales en la eficiencia neta de planta, inferior a la penalización obtenida con MEA (8.4%) o CESAR-1 (7.5%). Estos trabajos validan la utilidad de la simulación de procesos como herramienta para predecir el comportamiento termodinámico y operativo de tecnologías emergentes de captura en condiciones reales.

En el contexto de la presente investigación, Aspen HYSYS es utilizado como una herramienta clave para evaluar el diseño y optimización de torres de captura de CO₂ en reactores de lecho fijo. El uso de este software proporciona datos cuantitativos precisos, minimizando la necesidad de pruebas experimentales extensivas y permitiendo evaluar múltiples configuraciones de diseño antes de la implementación industrial. En la siguiente sección, se detallan las simulaciones realizadas y los criterios adoptados para validar el diseño de las torres de absorción. La simulación de procesos de captura de CO₂ ha demostrado ser esencial para optimizar y diseñar sistemas eficientes en la industria energética. Estudios recientes han empleado herramientas como Aspen HYSYS para modelar y evaluar diferentes configuraciones de captura de carbono. Por ejemplo, investigaciones previas han utilizado este software para simular procesos de captura de CO₂ utilizando mezclas de monoetanolamina (MEA) y líquidos iónicos, analizando su eficiencia y viabilidad operativa [28]. En el presente trabajo, se adopta un enfoque similar, para la simulación en las etapas críticas de absorción y desorción del CO₂. A diferencia de estudios que modelan la planta completa, aquí se emplea Aspen HYSYS para analizar detalladamente estas etapas, mientras que el diseño estructural de las torres se realiza mediante cálculos analíticos basados en ecuaciones fundamentales (diámetro, altura, área, volumen, cantidad de relleno, cantidad de material a emplear). Este enfoque combinado permite una evaluación precisa de los fenómenos de transferencia de masa y energía, garantizando un diseño óptimo y eficiente de los sistemas de captura de CO₂.

1.3 Objetivo del trabajo final

1.3.1 Objetivo general

Recopilar información y simular el proceso de absorción reactiva de CO₂ empleando materiales sólidos con el objetivo de proponer diseños preliminares para columnas del proceso.

1.3.2 Objetivos específicos

- Obtener desde bibliografía las propiedades físicas de los distintos componentes sólidos intervinientes en la absorción reactiva de CO₂, así como la información de equilibrio termodinámico.
- Incorporar dichas propiedades para una correcta implementación en el software de simulación.
- Definir la ventana operativa y las principales características de diseño de operación de la columna de absorción química de CO₂.
- Evaluar la reacción en los módulos de reactor que ofrece el simulador: reactor de conversión y reactor de equilibrio.
- Estudiar el efecto de las principales variables operativas (caudales, flujos de la corriente gaseosa, temperatura y presión) sobre el comportamiento de la columna.
- Implementar un modelo matemático riguroso para la predicción de avance de reacción, composición de equilibrio de la mezcla y calor de reacción.
- Constatar la validez de los resultados obtenidos en el simulador frente a los cálculos rigurosos.
- Definir, con base a los resultados obtenidos, diseños preliminares de las columnas

1.3.3 Alcance del trabajo

El presente trabajo se circunscribió al análisis, simulación y diseño preliminar de columnas de absorción reactiva de CO₂ empleando materiales sólidos, bajo condiciones operativas definidas para procesos industriales de captura postcombustión. El alcance incluyó la recopilación y validación de datos termodinámicos y cinéticos, la selección de parámetros de diseño, la evaluación de distintas configuraciones de columnas y la estimación de su rendimiento teórico. No se consideraron aspectos relacionados con el diseño detallado de equipos auxiliares, costos de fabricación ni implementación a escala comercial, dado que estos puntos exceden el propósito del estudio.

1.3.4 Organización del trabajo final

El trabajo se estructuró en capítulos que permiten un desarrollo progresivo del análisis:

- Capítulo 1: Introducción, donde se expone la problemática del cambio climático y la necesidad de reducir las emisiones de CO₂. Se describe el contexto de las centrales térmicas de ciclo combinado a gas natural, el incremento de la demanda energética, las diferentes tecnologías de captura disponibles y los absorbentes empleados. Se presenta el diseño de columnas de absorción, sus condiciones operativas y parámetros de diseño, la importancia de la simulación del proceso, así como los objetivos y alcances del estudio.

- Capítulo 2: Metodología, que desarrolla la hipótesis de trabajo y describe el proceso de absorción y desorción, la validación de datos y el diseño de columnas de absorción. Se detallan los parámetros de diseño seleccionados, la secuencia de cálculo y las fórmulas empleadas. Incluye el marco teórico necesario para la simulación del proceso y la fundamentación de los criterios de diseño.

- Capítulo 3: Resultados, donde se presentan y analizan los resultados de la simulación del proceso, incluyendo el efecto de la variación de la temperatura, la presión y la concentración de CO₂ en la alimentación, así como el impacto del caudal de alimentación sobre el reactor. Se expone el diseño de la columna, con el cálculo del volumen total, la selección de área transversal y la altura, la estimación de la caída de presión, la determinación de la velocidad espacial y del tiempo de residencia, así como los criterios de selección del número de columnas y el diseño recomendado.

- Capítulo 4: Conclusiones, donde se presentan las ideas centrales derivadas del análisis realizado, destacando las tendencias observadas en la simulación y los criterios que guiaron el diseño preliminar. Este capítulo resume los aportes más relevantes del estudio y plantea recomendaciones para futuras optimizaciones.

- Páginas finales: Glosario y referencias bibliográficas.

CAPITULO 2: Metodología

En este capítulo se abordan dos aspectos metodológicos clave para el desarrollo del sistema de captura de dióxido de carbono (CO₂): por un lado, la simulación y verificación de los resultados de absorción y desorción mediante herramientas computacionales; y por otro, el diseño de los equipos (columnas reactivas) involucrados en el proceso, siguiendo criterios de ingeniería aplicables a sistemas multitorres en condiciones industriales. Ambos enfoques son tratados de forma complementaria para estimar la precisión del modelo y la viabilidad técnica del diseño propuesto. A partir de esta perspectiva, se describe la metodología empleada para el diseño de un sistema de captura de CO₂ utilizando ortosilicato de litio (Li₄SiO₄) como sorbente en columnas de lecho fijo. El objetivo fue dimensionar un sistema capaz de operar bajo condiciones industriales de alta temperatura y presión, asegurando una adecuada eficiencia de captura y viabilidad operativa. Para ello, se implementaron simulaciones mediante los softwares Aspen HYSYS y MATLAB, que permitieron modelar el comportamiento de la reacción de captura bajo distintas condiciones operativas. Estas herramientas se complementaron con cálculos analíticos de diseño geométrico y térmico, siguiendo fundamentos de ingeniería de reactores y diseño de columnas empacadas. La selección de estas metodologías se fundamenta en su validez para estimar la eficiencia de captura, optimizar las condiciones de operación y definir las dimensiones requeridas para la implementación del proceso en un entorno industrial real.

Para llevar a cabo las simulaciones del sistema de captura de CO₂, se utilizó un software especializado en simulación de procesos químicos. Este tipo de herramienta permite modelar el comportamiento de los reactivos, productos y las condiciones de operación del sistema, como la temperatura, presión y composición de los gases involucrados. El software permite concatenar varios modelos termodinámicos del proceso, utilizando ecuaciones de estado que predicen con precisión el equilibrio entre las fases sólida, líquida y gaseosa. A partir de los datos de entrada, como las propiedades físicas y químicas de los compuestos, se simula el desempeño del sistema bajo diferentes escenarios operativos. Esto facilita el análisis del comportamiento del absorbente en las etapas de absorción y desorción de CO₂, permitiendo obtener parámetros clave como la eficiencia de captura, las penalizaciones energéticas y el calor de reacción. El proceso de captura se basa en la reacción de carbonatación del ortosilicato de litio, la cual puede expresarse de manera global como:



Esta reacción es de tipo gas- sólido, no catalítica, de naturaleza exotérmica, y ocurre a altas temperaturas, típicamente en el rango de 500–650 °C. La elección del ortosilicato de

litio como absorbente se fundamenta en su elevada capacidad de captura, estabilidad térmica y regenerabilidad, atributos que lo posicionan como uno de los sorbentes más prometedores para tecnologías de captura de CO₂ a alta temperatura.

El proceso de absorción/desorción reactiva de CO₂ se plantea en dos etapas, que representan la absorción/desorción cíclica y en paralelo que tienen lugar en dos reactores de equilibrio. Se considera que el flue gas descontaminado que sale de la etapa de absorción y el flujo de CO₂ de alta pureza que sale de la etapa de desorción están, respecto de la concentración molar de CO₂, en condiciones de equilibrio. El calor removido en la etapa de absorción se utiliza para lograr una condición de operación isotérmica. La energía requerida para elevar la temperatura del sólido carbonatado (después de la absorción) hasta la temperatura de regeneración del absorbente sólido (700 °C) es provista por un calentador el cual se encarga de suministrar la cantidad de energía necesaria para que la corriente a desorber ingrese en las condiciones requeridas para la operación.

2.1 Recopilación de datos teóricos

El primer objetivo fue la recopilación de las propiedades termodinámicas de los compuestos involucrados en la reacción química, como el ortosilicato de litio (Li₄SiO₄), metasilicato de litio (Li₂SiO₃), carbonato de litio (Li₂CO₃) y dióxido de carbono (CO₂). Los parámetros clave que se obtuvieron incluyen la entalpía estándar de formación (ΔH_f°), la energía libre de formación (ΔG_f°), el peso molecular (M_i) y la densidad de cada compuesto (ρ_i). El dióxido de carbono no se incluyó en la tabla ya que sus propiedades están predefinidas en el simulador utilizado.

Posteriormente, se recabaron datos de capacidad calorífica (C_p) a diferentes temperaturas para cada compuesto [29]; [30]. Se realizó una regresión para obtener las constantes A, B, C, D y E de la ecuación de $C_{p_i}(T)$, expresada como:

$$C_{p_i}(T) = A + B * T + C * T^2 + D * T^3 + \frac{E}{T^2} \quad \text{Ec. 2.2}$$

En la tabla 2.1 se muestran los coeficientes adoptados de cada especie:

Tabla 2.1 Constantes de capacidad calorífica

Ortosilicato de litio		Carbonato de litio		Metasilicato de litio	
A	224165.0975	A	68.3323	A	-1425.19268
B	-1064.92141	B	146.639	B	509.4296763
C	4.377517067	C	-162.573	C	-0.68076003
D	-0.00618645	D	248.026	D	0.0004357

E	3.00794E-06	E	-0.702297	E	-1.0511E-07
---	-------------	---	-----------	---	-------------

Dado que los materiales sólidos (reactivos y productos) involucrados en el proceso de absorción reactiva no se encuentran incluidos originalmente en la base de datos del simulador, se definen como pseudo compuestos y se generan a partir de sus propiedades físicas, lo que permite, junto con la información de CO₂, el cálculo de los calores de absorción y desorción, y los requisitos de enfriamiento y calentamiento de cada etapa. La Tabla 2.2 enumera las principales propiedades físicas de los sólidos involucrados en los procesos de absorción y desorción, tales como: entalpía y entropía de formación, peso molecular, densidad y capacidad calorífica, respectivamente.

Tabla 2.2 Propiedades de los sólidos

Compuesto	ΔH_f° [kJ mol ⁻¹]	ΔS_f° [kJ K ⁻¹ mol ⁻¹]	M [g mol ⁻¹]	ρ [kg m ⁻³]	Cp_{Av} [kJ kg ⁻¹ K ⁻¹]
Li ₄ SiO ₄	-2361.20	119.88	119.85	911	1.80
Li ₂ SiO ₃	-1640.49	81.52	89.97	2520	1.75
Li ₂ CO ₃	-1216.04	90.31	73.89	2110	2.20

La capacidad calorífica media o promedio se obtiene se obtuvieron como el promedio integral de la relación de la capacidad calorífica versus la temperatura reportada en la literatura en el rango de 25-600 °C para cada compuesto considerado, cuyos datos se obtuvieron de la bibliografía. La ley termodinámica de equilibrio gas-sólido se incluye en el simulador como una función entre la presión parcial de CO₂ y la temperatura. La ecuación de van 't Hoff en termodinámica química relaciona la variación de la constante de equilibrio con la temperatura absoluta de acuerdo con la Ec 2.3, y dicha constante se obtiene mediante la *ley de acción de masas*, que define el equilibrio como el producto de las presiones parciales de los productos dividido por el de los reactivos, cada uno elevado a su coeficiente estequiométrico:

$$\ln(K_{eq}) = \ln\left(\frac{1}{p_{CO_2,eq}}\right) = \frac{\Delta S^0}{R} - \frac{\Delta H^0}{RT} \quad \text{Ec 2.3}$$

Esta expresión se utiliza cuando las capacidades caloríficas de reactantes y productos son casi las mismas ($\Delta Cp = 0$) o cuando la temperatura no difiere significativamente del valor estándar, o sea que podemos considerar a la entalpía independiente de la temperatura.

Si las capacidades caloríficas de reactivos y productos no son iguales, entonces:

$$\Delta C_p = \sum v_i C_{p,i}^{Productos} - \sum v_j C_{p,j}^{Reactivos} \quad \text{Ec 2.4}$$

Y por lo tanto ΔH y ΔS dejan de ser constantes con la temperatura, T. Para corregirlo, se agrega el término de calor sensible, que ajusta cómo varía la entalpía estándar con T:

$$\Delta H^\circ(T) = \Delta H^\circ(T_0) + \int_{T_0}^T \Delta C_p dT \quad \text{Ec 2.5}$$

y de forma análoga:

$$\Delta S^\circ(T) = \Delta S^\circ(T_0) + \int_{T_0}^T \frac{\Delta C_p}{T} dT \quad \text{Ec 2.6}$$

Reemplazando estos términos, la expresión de van 't Hoff generalizada completa queda:

$$\ln K_{eq}(T) = \frac{\Delta S^\circ(T_0)}{R} - \frac{\Delta H^\circ(T_0)}{RT} + \frac{1}{R} \int_{T_0}^T \frac{\Delta C_p}{T} dT - \frac{1}{RT} \int_{T_0}^T \Delta C_p dT \quad \text{Ec 2.7}$$

En muchos casos, el término de calor sensible (las integrales con ΔC_p) se modela con aproximaciones lineales o polinómicas de ΔC_p , para obtener una ecuación sencilla. En este caso, el simulador utiliza una expresión general Ec 2.8, para incorporar el ajuste por temperatura

$$\ln(K_{eq}) = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT \quad \text{Ec 2.8}$$

2.2 Hipótesis del modelo

La operación de la absorción se lleva a cabo en condiciones isotérmicas e isobáricas, a 600 °C y 10 atm. En estas condiciones, el proceso de absorción de CO₂ se encuentra cinética y, termodinámicamente favorecido, Figura 2.1.

La operación de desorción se lleva a cabo en condiciones adiabáticas e isobáricas, a 700 °C y 1 atm. En estas condiciones, el proceso de desorción de CO₂ (regeneración del reactivo sólido) se encuentra cinética y termodinámicamente favorecido, Figura 2.1.

Para el proceso de simulación se selecciona el paquete termodinámico *Peng Robinson* [24] para realizar el cálculo de las propiedades del gas de escape y de los sólidos

absorbentes, a su vez se realizan una serie de supuestos los cuales permiten dimensionar de forma aproximada el comportamiento dentro del reactor.

Se consideran los siguientes supuestos:

- Las etapas de absorción y desorción de CO_2 se simulan en estado estacionario utilizando modelos de equilibrio. Cada etapa es una representación global de la operación no estacionaria cíclica y en paralelo de los lechos fijos que la componen.
- Se asume que los flujos de salida de la etapa de absorción están en equilibrio a la temperatura de reacción. Se asume que la reacción de absorción se produce en proporción estequiométrica entre CO_2 y Li_4SiO_4 .
- Se asume que la capacidad calorífica promedio es constante para los sólidos involucrados en la reacción.

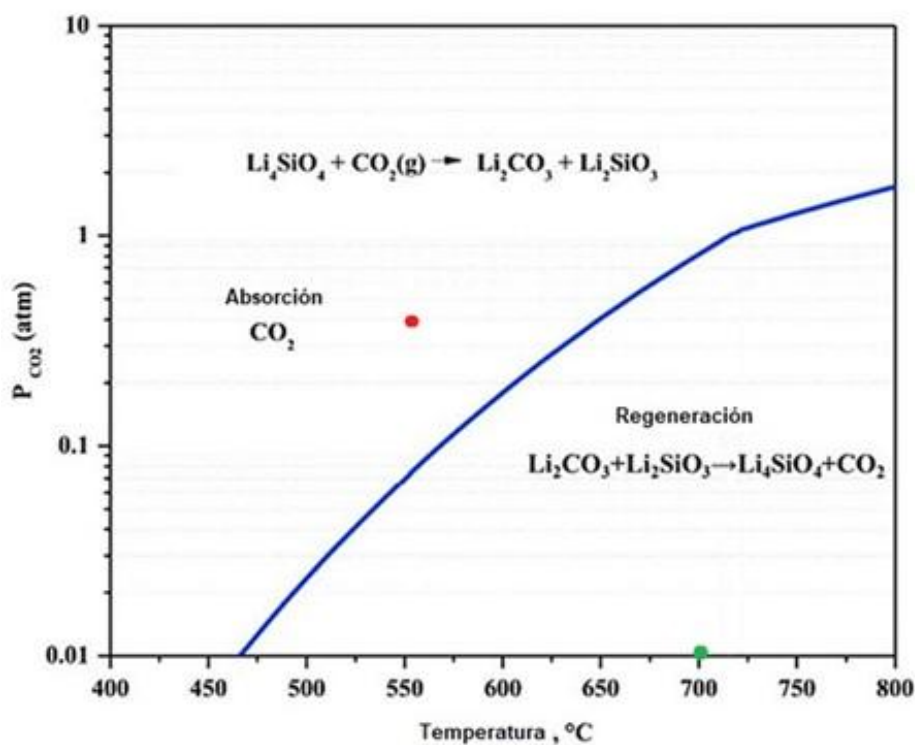


Figura 2. 1 Curva de equilibrio de reacción gas-sólido entre CO_2 - Li_4SiO_4

Fuente: Lopez Ortiz- Experimental and modeling kinetic study of the CO_2 absorption by Li_4SiO_4

2.3 Simulación

Con la información recopilada, se modeló la reacción química entre Li_4SiO_4 y CO_2 , calculando la curva de equilibrio y los valores de la constante de equilibrio (K_{eq}) con las siguientes ecuaciones en concordancia con la ley de acción de masas:

$$K_{eq} = \frac{1}{p_{\text{CO}_2, Eq}} \quad (\text{Constante de equilibrio para la absorción}) \quad \text{Ec. 2.9}$$

$$K_{eq} = p_{\text{CO}_2, Eq} \quad (\text{Constante de equilibrio para la desorción}) \quad \text{Ec. 2.10}$$

Para calcular la constante de equilibrio (K_{eq}) de las reacciones de absorción y desorción de CO_2 , se utilizó la ecuación 2.8 de equilibrio, que permitió obtener las presiones parciales de CO_2 a diferentes temperaturas (464 – 750 °C). Los valores de la constante de equilibrio (K_{eq}) para la absorción corresponden al inverso de la presión parcial del dióxido de carbono (CO_2) en el equilibrio (Ec 2.9). En el caso de la desorción, la constante de equilibrio es equivalente a esta presión, lo que refleja la relación directa entre la cantidad de CO_2 desorbido y la presión en el sistema (Ec 2.10). El proceso representado en la Figura 2.2 corresponde al esquema general de simulación del sistema de captura y regeneración de CO_2 , modelado en Aspen HYSYS®. El *flowsheet* incluye dos reactores principales y equipos auxiliares que permiten representar de forma secuencial las etapas de absorción y desorción utilizando ortosilicato de litio (Li_4SiO_4) como absorbente sólido.

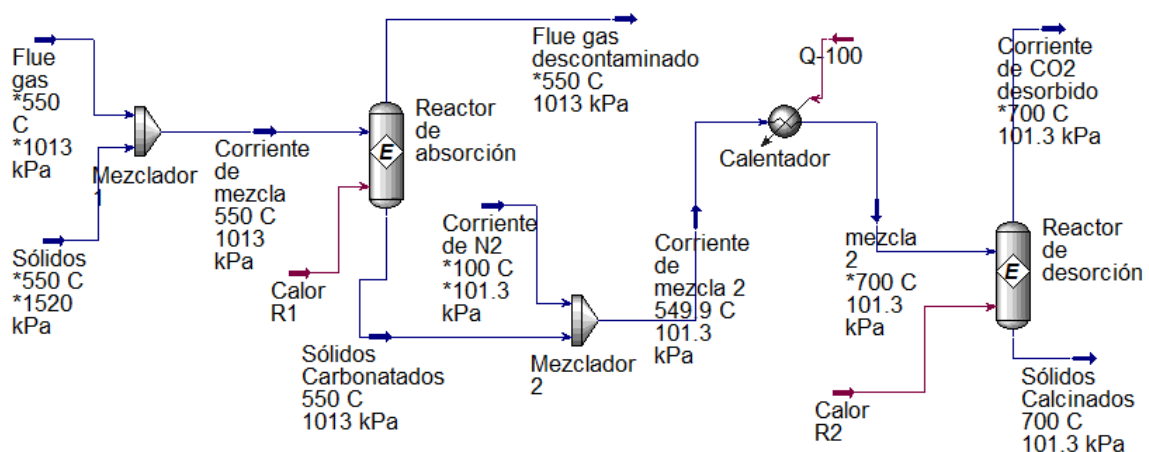


Figura 2. 2 Flowsheet del sistema de absorción y desorción de CO_2 - Li_4SiO_4

Fuente: Aspen Technology, Inc. (2023). Aspen HYSYS®

A continuación, se describen los equipos y corrientes principales que integran el modelo:

- Flue gas: Representa el ingreso de gases residuales compuestos mayoritariamente por N_2 y CO_2 (4.27% molar), a $550\text{ }^\circ\text{C}$ y 10 atm. Es la corriente base a tratar en la etapa de captura.
- Sólidos (Reactivo Li_4SiO_4). Simula el ingreso del absorbente sólido. Se define de forma conceptual para representar su participación en la reacción.
- Mezclador 1 (Mixer – Absorción). Unidad donde se produce la mezcla conceptual gas-sólido entre el flue gas y el ortosilicato de litio, previo a la reacción. Se considera mezcla ideal bajo equilibrio.
- Reactor 1: Absorción. Reactor isotérmico de equilibrio donde se lleva a cabo la reacción exotérmica de captura de CO_2 por parte del Li_4SiO_4 . La reacción genera como productos Li_2SiO_3 y Li_2CO_3 en fase sólida.
- Flue gas descontaminado. Corriente gaseosa de salida de la etapa de absorción, con baja concentración de CO_2 . Permite evaluar la eficiencia del proceso.
- Sólidos carbonatados. Corriente conceptual de fase sólida que contiene los productos de la captura, destinados a la regeneración.
- Corriente de N_2 . Gas inerte añadido como medio portador en la desorción. Su inclusión asegura condiciones homogéneas en la mezcla y facilita la conducción de calor.
- Mezclador 2 (Mixer – Desorción). Simula la combinación del sólido carbonatado con el gas portador antes del ingreso al segundo reactor.
- Calentador. Equipo encargado de elevar la temperatura de la mezcla hasta valores cercanos a $700\text{ }^\circ\text{C}$, requeridos para iniciar la desorción del CO_2 .
- Reactor de desorción: Reactor isotérmico en el cual ocurre la reacción inversa, liberando el CO_2 previamente capturado y regenerando el absorbente.
- CO_2 desorbidos. Corriente gaseosa rica en CO_2 a la salida del segundo reactor. Representa el producto principal del proceso de desorción.

- Sólidos calcinados. Corriente conceptual que representa el absorbente regenerado, listo para ser reintroducido en un nuevo ciclo.

Para llevar a cabo la simulación del sistema de captura, se configuraron las propiedades de cada corriente involucrada en el proceso dentro del entorno de Aspen HYSYS®. En la Figura 2.3, se observa la interfaz donde se definieron parámetros fundamentales como el caudal másico, la temperatura, la presión y el flujo de gases. Esta configuración inicial es esencial para garantizar que las condiciones operativas utilizadas reflejen un entorno industrial realista, particularmente en un sistema de lecho fijo operando a alta temperatura y presión.

Worksheet	Stream Name	flue gas	Vapour Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	550.0	550.0
Composition	Pressure [kPa]	1013	1013
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	7.787e+004	7.787e+004
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	2.234e+006	2.234e+006
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	2767	2767
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-370.9	-370.9
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	162.8	162.8
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-2.888e+007	-2.888e+007
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	<empty>	<empty>
Emissions	Fluid Package	Basis-1	

Figura 2. 3 Interfaz de propiedades termo-físicas de las corrientes

Fuente: Aspen Technology, Inc. (2023). Aspen HYSYS®

Luego, se definió la composición de entrada del gas, especificando la fracción molar de cada uno de los componentes presentes. En la Figura 2.4 se muestra la ventana utilizada para ingresar dicha composición, en la cual se estableció una fracción molar de CO₂ del 0.0425, valor representativo de los gases de combustión de una central térmica de ciclo combinado. Esta etapa permite ajustar el modelo a condiciones reales de operación, asegurando precisión en los resultados de equilibrio y transferencia.

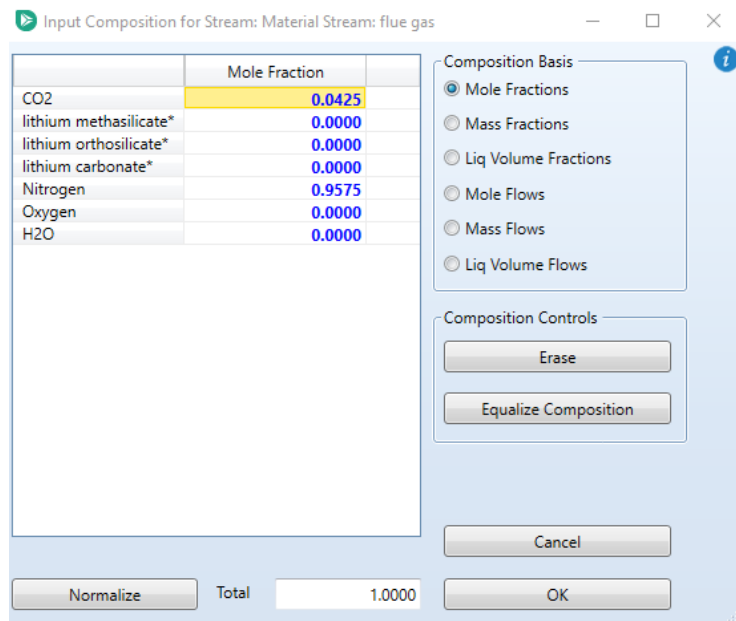


Figura 2. 4 Interfaz de carga de composición de gases
Fuente: Aspen Technology, Inc. (2023). Aspen HYSYS®

En la Figura 2.5, se detalla la configuración del reactor de equilibrio donde se define la reacción principal de absorción del CO₂ con ortosilicato de litio. Allí se ingresaron las estequiometrías, pesos moleculares y coeficientes de cada reactivo y producto, permitiendo al simulador calcular automáticamente el balance de masa, la conversión y el calor de reacción asociado. Esta interfaz es clave para modelar el comportamiento termodinámico del sistema y validar su desempeño frente a las hipótesis planteadas.

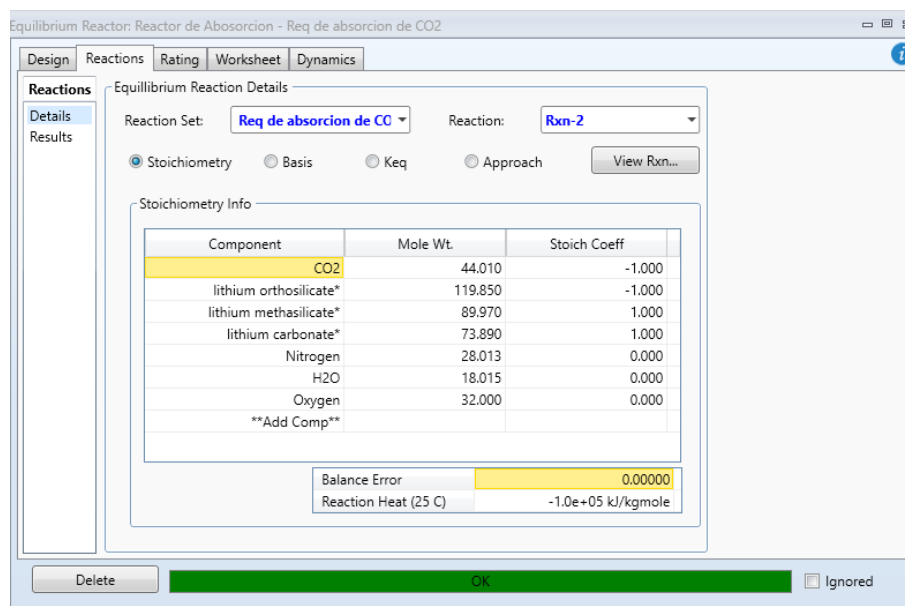


Figura 2. 5 Interfaz del reactor de equilibrio

2.3.1 Absorción y desorción

Los módulos de Hysys en general, específicamente los reactores, resuelven un conjunto de ecuaciones en cuanto tienen suficiente información de entrada para hacerlo. Para operar un reactor en modo isotérmico se especifica la temperatura de la alimentación y las composiciones de salida en la temperatura deseada por lo que el módulo calcula el progreso de la reacción y el calor involucrado para satisfacer ese requisito. En el caso de operación adiabática, se especifica la temperatura de alimentación y se anula el calor intercambiado con el medio ($Q=0$) por lo que el módulo calcula el progreso de la reacción y las temperaturas de salida.

Para la simulación de las etapas de absorción / desorción se determinó que el medio gaseoso es un requerimiento para que el software pueda resolver el cálculo ya que el programa lo necesita para poder comenzar la reacción que es siempre función del CO_2 . En este sentido se introdujo una corriente de N_2 , Figura 2.4 que no participa en las reacciones, pero proporciona el medio para que suceda. Se cargaron dos tipos de reacciones en el simulador para evaluar su comportamiento con los datos ingresados y observar cómo el software modelaba cada situación. La primera reacción cargada fue una reacción de conversión, con una conversión del 100%, utilizando el CO_2 como reactivo limitante. Posteriormente, se cargaron las reacciones de equilibrio de absorción y desorción de CO_2 , junto con sus respectivos datos de equilibrio. Estos se ingresaron en función de diferentes temperaturas, y el software se encargó de realizar la regresión de los datos correspondientes (ver Ec. 2.7). Se realizó la simulación en un reactor de equilibrio isotérmico a partir de los datos de la constante K_{eq} que genera la curva de equilibrio. Según la hipótesis planteada, la capacidad calorífica es constante. La Figura 2.6 representa esquemáticamente la etapa de absorción en el simulador Aspen HYSYS®, donde se observa el ingreso de la corriente gaseosa (flue gas) y del absorbente sólido (Li_4SiO_4) hacia un mezclador (mixer), que da paso al reactor de absorción. En esta unidad se lleva a cabo la captura de CO_2 bajo condiciones isotérmicas de 600 °C y 10 atm. La configuración del reactor está definida como un equipo de equilibrio, modelando la reacción entre el gas y el sólido en base a la constante de equilibrio K_{eq} ingresada. Los productos generados son, por un lado, una corriente de gases sin reaccionar y por otro, una de sólidos agotados. Este esquema refleja la interacción entre las corrientes involucradas y el comportamiento del sistema durante la etapa de captura.

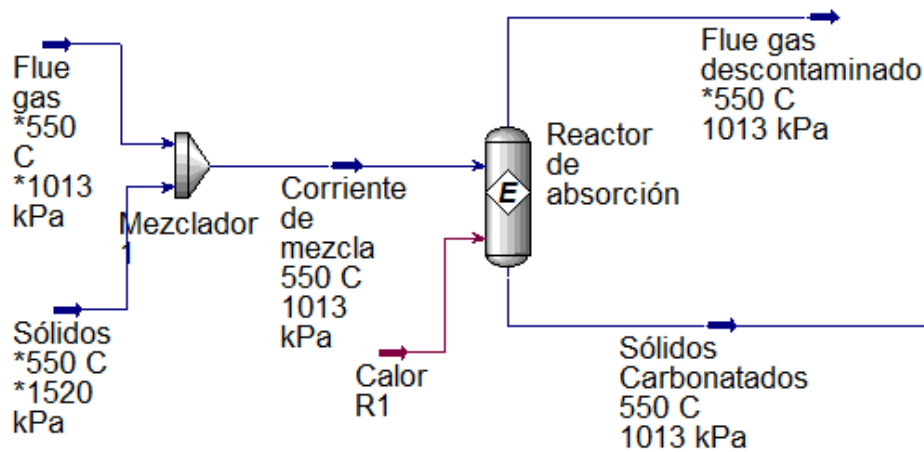


Figura 2. 6 Esquema de simulación de reacción de absorción
 Fuente: Aspen Technology, Inc. (2023). Aspen HYSYS®

La etapa de desorción (Figura 2.7) es el proceso en donde ocurre la regeneración del absorbente sólido después de la captura de CO₂. La desorción se refiere a la liberación del CO₂ previamente absorbido por el ortosilicato de litio (Li₄SiO₄), que durante la absorción forma carbonato de litio (Li₂CO₃) y metasilicato de litio (Li₂SiO₃). Para facilitar la desorción, se introdujo una corriente de N₂ gaseoso inerte que no participa directamente en la reacción, pero actúa como medio para permitir la liberación del CO₂. El N₂ se mezcla con los sólidos absorbidos, generando una corriente que es calentada para alcanzar las condiciones de desorción.

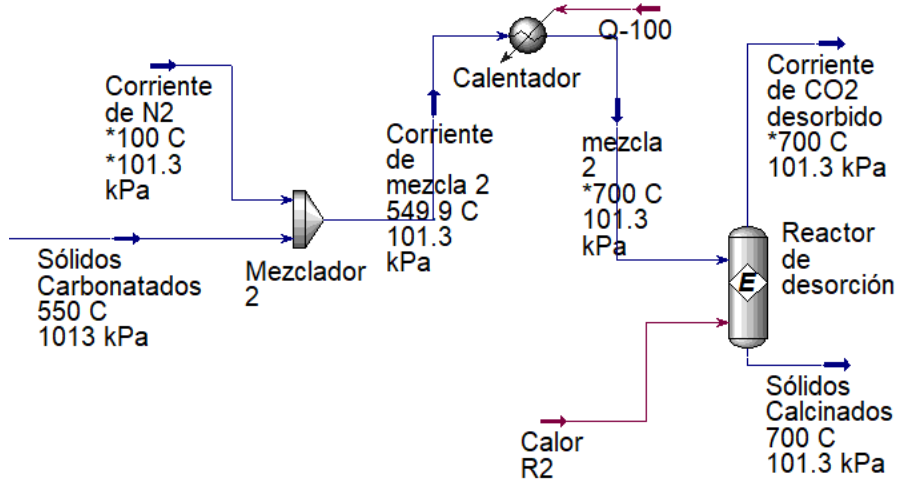


Figura 2. 7 Esquema de simulación de reacción de desorción
 Fuente: Aspen Technology, Inc. (2023). Aspen HYSYS®

La corriente de N₂ y los sólidos son llevados a las condiciones de operación requeridas para la desorción de CO₂ (700 °C y 1 atm). Este proceso puede realizarse tanto en condiciones isotérmicas como adiabáticas, lo que asegura, ya sea, que la temperatura se mantenga constante durante la reacción mediante un aporte continuo de calor (isotérmico- no adiabático) o que la temperatura del reactor cambie (disminuya) sin intercambiar calor con el medio.

2.3.2 Cálculos teóricos y balances

Con el objetivo de validar los resultados obtenidos en la simulación, particularmente el calor de reacción, se realizó una comparación cuantitativa entre los resultados generados por el simulador Aspen HYSYS y los cálculos teóricos desarrollados en MATLAB. La comparación se centró en dos variables clave: el avance de reacción (ϵ) y el calor de reacción (Q), a partir de condiciones termodinámicas equivalentes. En Aspen HYSYS, el sistema de captura fue configurado con dos reactores de equilibrio en serie que representan las etapas de absorción y desorción de CO₂. Para definir el comportamiento termodinámico, se ingresaron datos de equilibrio en función de temperatura y presión parcial de CO₂. A partir de esta información, el software aplicó automáticamente una regresión numérica que generó una función empírica para estimar la constante de equilibrio en todo el rango de operación. El simulador resolvió el sistema mediante balances de energía y materia, utilizando modelos termodinámicos incorporados y propiedades termofísicas de los componentes para calcular como salidas las fracciones molares de salida de cada corriente, el avance de reacción, y la entalpía del sistema. Por otro lado, en MATLAB se desarrolló una rutina de validación que incluyó el cálculo del avance de reacción, la capacidad calorífica de la mezcla (Cp_m) y el calor de reacción. La comparación entre ambos enfoques permitió contrastar los resultados de equilibrio y energía, verificar la coherencia entre métodos, validar el modelo de simulación y justificar el uso de sus resultados como base confiable para el posterior dimensionamiento del sistema de captura.

Cálculo de ΔCp de Mezcla (Cp_m): se realizó considerando las capacidades caloríficas específicas de cada uno de los componentes involucrados: Li₄SiO₄, Li₂SiO₃, Li₂CO₃, y CO₂. La ecuación para el Cp de la mezcla se expresa como:

$$\Delta Cp_m = +Cp_{Li_2SiO_3} + Cp_{Li_2CO_3} - Cp_{CO_2} - Cp_{Li_4SiO_4} \text{ Ec. 2.11}$$

Donde cada Cp_i fue calculado en función de la temperatura, utilizando datos empíricos y ajustando los coeficientes en función de las condiciones del proceso.

Cálculo del Avance de la Reacción (ϵ): El avance de la reacción, simbolizado por ϵ , se define como la cantidad de moles reaccionados. Esta variable es fundamental para calcular el calor de reacción. La ecuación es la siguiente:

$$\epsilon = \frac{(n_{CO_2} - nt \cdot y_{eqCO_2})}{1 - y_{eqCO_2}} \quad \text{Ec. 2.12}$$

- $n_{CO_2} = N^\circ$ de moles de CO_2
- $nt = N^\circ$ de moles totales
- $y_{eqCO_2} =$ Composición en el equilibrio de CO_2

En la siguiente tabla se observa como el avance de reacción puede ser utilizado para calcular los moles reaccionados en el sistema según Ec.2.12

Especie	Iniciales	Cambio	Finales
CO_2	N_{A0}	$-\epsilon$	$N_A = N_{A0} - \epsilon$
Li_4SiO_4	N_{B0}	$-\epsilon$	$N_B = N_{B0} - \epsilon$
Li_2SiO_3	N_{C0}	$+\epsilon$	$N_C = N_{C0} + \epsilon$
Li_2CO_3	N_{D0}	$+\epsilon$	$N_D = N_{D0} + \epsilon$
Inertes	N_{I0}	-	$N_I = N_{I0}$
Totales	N_{T0}	-	$N_T = N_{T0}$

Cálculo del Calor de Reacción (Q): Una vez obtenido el valor de avance de reacción (ϵ), se calculó el calor de reacción utilizando la siguiente fórmula:

$$Q = \epsilon \cdot (H^\circ + \Delta C_{pm} \cdot (T - T_0)) \quad \text{Ec. 2.13}$$

- $Q =$ Calor
- $\epsilon =$ Avance de reaccion
- $H^\circ =$ Entalpia estandar de reaccion
- $\Delta C_{pm} =$ Variacion de Capacidad calorifica de mezcla
- $T - T_0 =$ Variacion de temperatura

2.3.3 Validación de Datos

La validación de los datos obtenidos en la simulación se llevó a cabo mediante la comparación de los resultados generados por el software de simulación de procesos (Aspen

HYSYS) con los valores obtenidos a partir de los balances teóricos y cálculos analíticos realizados en software de cálculo matemático (MatLab).

Composición de CO₂ en el equilibrio: Se compararon los valores de fracción molar de CO₂ en el equilibrio obtenidos en el software con los resultados calculados teóricamente. Este parámetro es esencial para evaluar el rendimiento del absorbente en la captura de CO₂, ya que define el punto de saturación del sólido y la cantidad de CO₂ que permanece en la fase gaseosa.

Avance de Reacción (ϵ): El avance de reacción (ϵ), que cuantifica la cantidad de moles de CO₂ que han reaccionado, también fue validado en ambos softwares. Se calculó en función de la fracción molar de CO₂ en el equilibrio, comparando los resultados obtenidos en ambos softwares (Aspen HYSYS y MATLAB) para verificar que las simulaciones reproducen adecuadamente el comportamiento termodinámico del proceso. La comparación incluyó el avance de reacción calculado a partir de la fracción molar de CO₂ en equilibrio y el calor de reacción estimado bajo las mismas condiciones operativas (temperatura y presión). Este análisis permitió confirmar que las tendencias predichas por el simulador coinciden con las del modelo teórico, validando la consistencia del enfoque.

Calor Producido: El calor de reacción es un parámetro crítico para evaluar la energía involucrada en el proceso y por lo tanto su factibilidad. En el simulador, el software HYSIS calcula automáticamente el calor generado o consumido durante la absorción y desorción de CO₂. El calor producido se validó en Matlab en función del avance de reacción, la composición del sistema y las condiciones de operación (temperatura y presión).

2.3.4 Ventanas operativas exploradas

Durante la validación del proceso, se analizaron cuatro variables operativas (temperatura, presión, composición de CO₂, flujo de entrada), las cuales se perturbaron individualmente para evaluar su impacto en el rendimiento del reactor. Las condiciones evaluadas se encuentran alrededor de condiciones de operación de un caso base (tipo) de absorción, con caudales y composiciones típicas de una planta de energía de gas natural de ciclo combinado, junto con variables operativas que reportaron buen desempeño cinético y de equilibrio [6] estas son: Temperatura 550 °C, Presión 10 atm, concentración de CO₂ de 4,25% molar y el flujo de alimentación a tratar 629.16 kg/s. Se exploraron las siguientes ventanas operativas: variación de temperatura (500–600 °C), presión (1–15 atm), fracción molar de CO₂ (0.03–0.07) y caudales totales de alimentación (15000 – 21630 mol/s) .

En esta sección se aborda el desarrollo detallado de los cálculos necesarios para el diseño de columnas reactivas empleadas en procesos de captura de CO₂. A diferencia de la parte anterior, aquí se profundiza en aspectos cuantitativos y constructivos, presentando las expresiones y criterios que permiten dimensionar las torres, estimar la cantidad de

2.4 Diseño de columnas reactivas

absorbente, evaluar la caída de presión y determinar los requerimientos térmicos del sistema. Estos cálculos son fundamentales para definir configuraciones óptimas y garantizar la viabilidad técnica y operativa en aplicaciones industriales.

2.4.1 Hipótesis de Cálculo

Flujo constante de CO₂: Se asume que el flujo de alimentación a tratar es constante a lo largo del sistema, con un valor de 629.16 kg/s y una concentración de CO₂ de 4.25% molar, flujos molares y composiciones típicas de una planta de energía de gas natural de ciclo combinado. Para efectos del dimensionamiento del sistema, se asumió como base de cálculo el tratamiento de una cantidad de flue gas equivalente a una hora de operación continua, es decir, el volumen que pasaría por el sistema durante 3600 segundos bajo las condiciones establecidas Tabla 2.3. Esta hipótesis permite simplificar el balance de masa y determinar la cantidad de absorbente necesaria para ciclos definidos de operación.

Tabla 2.3 Condiciones operativas propuestas

Temperatura [33]	550 °C
Presión [33]	10 atm
Viscosidad de flue gas [33]	3.94×10^{-5} Pa·s
Capacidad de captura de CO ₂ [33]	0.25 kg CO ₂ /kg sólido
Diámetro de partícula de Li ₄ SiO ₄	10 mm

2.4.2 Criterios de diseño

Velocidades lineales: Se plantearon seis velocidades lineales de flue gas distintas para evaluar el comportamiento de la presión en diferentes configuraciones geométricas de las torres. Esto permite analizar la sensibilidad de parámetros como la caída de presión, tiempo de residencia y cantidad de unidades necesarias.

Material de construcción y cantidad de torres: Se considera el uso de torres construidas en acero inoxidable AISI 304, seleccionadas por sus propiedades térmicas estables a alta temperatura, resistencia mecánica adecuada para operación a presión, y excelente comportamiento frente a la corrosión en ambientes ricos en vapor de agua y dióxido

de carbono. Estas características lo convierten en un material idóneo para aplicaciones en sistemas de captura de CO₂ con operación continua.

2.4.3 Secuencia de cálculo realizada

La Figura 2.8 presenta el esquema general de la secuencia de cálculo utilizada para el diseño de las columnas reactivas. Este diagrama resume las etapas principales que se siguieron, desde la determinación de las propiedades del gas y del sorbente hasta el dimensionamiento geométrico y la estimación de parámetros operativos críticos. El objetivo de este esquema es proporcionar una visión clara y ordenada del procedimiento aplicado, facilitando la comprensión del flujo lógico de cálculos que sustenta el diseño preliminar del sistema multitorre.

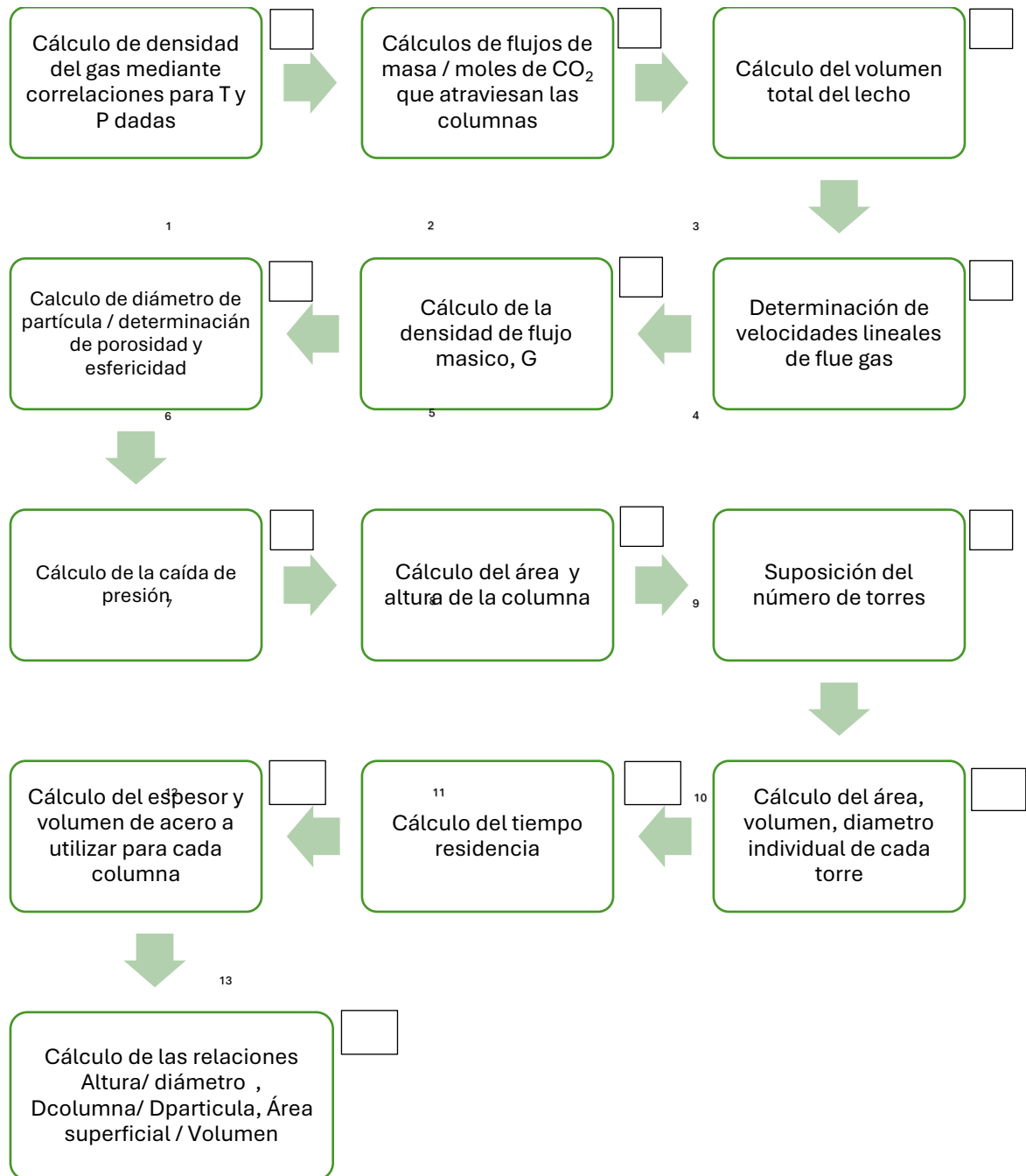


Figura 2. 8 Esquema de cálculo seguido durante el diseño de torres de absorción

En cada etapa se realizan los cálculos necesarios de acuerdo con las siguientes ecuaciones:

1. Cálculo de Densidad (Correlación SRK)

La densidad del gas se calculó a partir de la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK), una correlación termodinámica ampliamente utilizada para representar el

comportamiento de gases reales, especialmente a altas presiones y temperaturas, como las condiciones empleadas en este trabajo (550 °C y 10 atm). Esta metodología permite determinar el factor de compresibilidad del gas (Z), a partir del cual se estima la densidad mediante la ecuación del gas ideal corregida:

$$\rho = \frac{PM}{ZRT} \quad \text{Ec. 2.14}$$

2. Cálculo de flujos de masa

Para dimensionar el sistema de captura y estimar la cantidad total de absorbente necesario, se determinó en primer lugar el flujo másico de dióxido de carbono (CO₂) presente en la corriente de gases de combustión (flue gas). Este valor se obtuvo multiplicando el flujo molar total del gas de entrada por la fracción másica de CO₂ en dicha corriente, de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$M_{CO_2} = \dot{m}_{flue\ gas} * y_{CO_2} \quad \text{Ec. 2.15}$$

$$m_{CO_2\ en\ una\ hora} = \dot{m}_{CO_2} * 3600\ s \quad \text{Ec. 2.16}$$

3. Cálculo volumen del lecho

El volumen del lecho es la base del diseño geométrico de las columnas. Se calcula en función de la masa de sólido necesaria para capturar el CO₂ durante un ciclo, considerando la capacidad de captura del sorbente y su densidad aparente.

$$m_{Li_4SiO_4} = \frac{\dot{m}_{CO_2} * t_{ciclo}}{C_{captura}} \quad \text{Ec. 2.17}$$

$$V_{lecho} = \frac{m_{Li_4SiO_4}}{\rho_{lecho}} \quad \text{Ec. 2.18}$$

$m_{Li_4SiO_4}$	Masa de sólido [Kg]
$C_{captura}$	Capacidad de captura del sólido [kg CO ₂ capturado/kg sorbente]
t_{ciclo}	Tiempo de ciclo / operación [s]
V_{lecho}	Volumen del lecho [m ³]

ρ_{lecho} Densidad aparente del lecho [kg/m³]

4. Velocidad Lineal:

Se optó por la utilización de valores típicos extraídos de bibliografía sobre diseño de reactores Tabla 2.4.

Tabla 2. 4 Valores típicos reportados en bibliografía [36]

Velocidad m/s
0.1
0.5
1
1.5
2

5. Determinación del diámetro de partícula, la porosidad y la esfericidad

Para la determinación de los parámetros geométricos del lecho se consideró una esfericidad del sólido igual a 1, suponiendo partículas de forma regular y comportamiento equivalente al de esferas perfectas, tal como se adopta en diseños preliminares de lechos empacados. La porosidad del lecho (ϵ) se calculó utilizando las correlaciones propuestas por Dixon [31], que relacionan la fracción de vacío con la razón entre el diámetro de partícula y el diámetro del lecho. Este valor permite estimar el volumen libre disponible para el flujo gaseoso y evaluar su influencia sobre la caída de presión. Finalmente, el diámetro de partícula (d_p) se seleccionó de manera que cumpliera las restricciones geométricas indicadas por dicha correlación, asegurando una relación d_p/D dentro del rango recomendado para evitar efectos de pared y mantener la validez de la ecuación de Ergun.

$$\epsilon_B = 0.4 + 0.05 \left(\frac{d_p}{D}\right) + 0.412 \left(\frac{d_p}{D}\right)^2 \quad \left(\frac{d_p}{D}\right) \leq 0.5 \quad \text{Ec 2.19}$$

6. Cálculo de la caída de presión

En la Ec 2.20 se puede observar que se utilizó la “Ecuación de Ergun” para realizar el cálculo de la caída de presión. Esta determina el esfuerzo energético

necesario para hacer circular el gas a través del lecho. Es una limitación crítica en el diseño porque afecta el consumo energético del sistema.

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{150*(1-\epsilon)^2 \mu u}{d_p^2 \epsilon^3} + \frac{1.75*(1-\epsilon) \rho u^2}{d_p \epsilon^3} \quad \text{Ec 2.20}$$

$\Delta P / L$	Caída de presión por unidad de longitud [Pa/m]
ϵ	Porosidad del lecho (fracción de volumen vacío)
μ	Viscosidad dinámica del gas [Pa·s]
u	Velocidad superficial del gas [m/s]
d_p	Diámetro de partícula [m]
ρ	Densidad del gas [kg/m ³]

7. Cálculo de densidad de flujo másico

Este valor representa la carga másica de flue gas que atraviesa una sección transversal de la torre. Es clave para dimensionar la sección interna de las columnas y evaluar el régimen de flujo.

$$G = \frac{m_{flue\ gas}}{A} = \rho u_s \quad [kg / (m^2 s)] \quad \text{Ec. 2.21}$$

8. Cálculo de área y altura

Estas expresiones permiten obtener el área y altura necesarias de cada torre. Son fundamentales para evaluar distintas configuraciones geométricas que cumplan con el volumen total del lecho requerido.

$$A = \frac{m_{flue\ gas}}{\rho u_s} \quad \text{Ec. 2.22}$$

$$H = \frac{V_t}{A} \quad \text{Ec. 2.23}$$

9. Suposición de número de torres

Se establecieron diferentes escenarios numéricos para la cantidad de torres a emplear, con el objetivo de evaluar múltiples configuraciones geométricas y operativas.

10. Dimensiones individuales de cada torre

Una vez obtenido las dimensiones totales para llevar a cabo la operación planteada se dividieron las dimensiones (Área total / Volumen total) por la cantidad de torres supuestas para determinar las dimensiones individuales de cada torre.

11. Cálculo de tiempo de residencia

Permite conocer el tiempo de contacto entre el gas y el sorbente dentro de cada torre. Es un parámetro fundamental para garantizar una conversión eficiente del CO₂ en condiciones de equilibrio.

$$t_{res} = \frac{H}{u} \quad \text{Ec. 2.24}$$

t_{res} Tiempo de residencia del gas en la torre [s]

H Altura de la torre [m]

u Velocidad superficial del gas [m/s]

12. Cálculo de espesor de pared de recipiente a presión para construcción

Esta ecuación permite calcular el espesor mínimo requerido para las paredes de las torres considerando la presión interna y las propiedades mecánicas del acero inoxidable utilizado.

$$e = \frac{P*r}{2*\sigma_t E - 0.4P} \quad \text{Ec. 2.25}$$

e Espesor mínimo requerido [m]

P Presión interna de operación [Pa]

r Radio interior de la torre [m]

σ_t Esfuerzo admisible del material (acero inoxidable) [Pa]

E Coeficiente de eficiencia del diseño
(adimensional)

Cálculo de volumen de acero y aislante:

Se utiliza para estimar la cantidad de material constructivo requerido (acero y aislante) que sean conducentes para realizar evaluaciones económicas y térmicas del diseño.

$$V = \pi * H * [(r + e)^2 - r^2] \quad \text{Ec. 2.26}$$

V Volumen de material (acero /aislante) por torre
[m³]

π Pi (constante ≈ 3.1416)

H Altura de la torre [m]

r Radio interior de la torre [m]

e Espesor de pared/aislante [m]

13. Cálculo de la relación entre las dimensiones

Se determinaron las relaciones entre las principales dimensiones del sistema Tabla 2.5, tales como altura/diámetro de columna, diámetro de columna/diámetro de partícula y área superficial/volumen útil. Estos parámetros son esenciales para garantizar un flujo uniforme, una adecuada transferencia de masa y minimizar zonas muertas dentro del lecho, contribuyendo así al diseño eficiente y estable de las torres.;

Tabla 2. 5 Criterios adoptados de bibliografía

Relación geométrica	Criterio o límite recomendado
Altura / Diámetro [24]	H/D < 3
Diámetro de columna / Diámetro de partícula [25]	D/d _p > 15
Área superficial / Volumen útil [31]; [32]	10–50 m ⁻¹ (óptimo ≈ 40 m ⁻¹)
Porosidad [31]	D _p /D < 0.1

CAPITULO 3: Resultados

En el presente capítulo se exponen y analizan los resultados obtenidos a partir de un simulador de procesos (HYSYS) en adelante “simulación”, respecto de los cálculos teóricos del planteo de ecuaciones de conservación de masa y energía, junto a propiedades termodinámicas explicados en el Capítulo 2 (MATLAB) en adelante “teóricos”. Los resultados presentados permiten contrastar los modelos teóricos propuestos con los valores obtenidos del simulador de procesos, identificando las tendencias, discrepancias y concordancias más relevantes. El objetivo de este apartado es interpretar los resultados obtenidos desde una perspectiva termodinámica, cinética e ingenieril, estableciendo las relaciones entre las variables de operación presión, temperatura, composición y flujo de gas y los parámetros de desempeño del proceso. Este análisis constituye la base para la posterior selección de las condiciones óptimas de operación y el dimensionamiento preliminar de las columnas de absorción, asegurando la coherencia entre la simulación, la modelización matemática y los fundamentos teóricos establecidos en los capítulos previos.

3.1 Parámetros simulados

En esta sección se presentan los resultados derivados de la simulación del proceso, realizados en condiciones definidas de temperatura, presión y composición de gas. Los parámetros simulados incluyen el avance de reacción, el calor de reacción, la variación con la presión y la composición de alimentación, así como el comportamiento energético del sistema en régimen isotérmico. El análisis de estos resultados permite evaluar el grado de concordancia entre el modelo termodinámico y la respuesta del simulador sentando las bases para la interpretación técnica y el dimensionamiento de los equipos de absorción.

3.1.1 Efecto de la variación de la temperatura en el reactor

Temperatura: Se estudió el efecto de modificar la temperatura del sistema en cinco niveles diferentes manteniendo constantes los demás parámetros operativos (presión, composición de CO₂, y flujo molar total de gas). Dado que el proceso es altamente dependiente de la temperatura, este análisis permitió además identificar las condiciones óptimas para maximizar la absorción de CO₂ y minimizar el calor requerido para la desorción.

Tabla 3. 1 . Condiciones Operativas - Variación con Temperatura

T (°C)	Composición yCO ₂	Flujo de entrada (kmol/h Li ₄ SO ₄)	Flujo de entrada (kmol/h CO ₂ + N ₂)	Presión (atm)
500	0.0424	7000	77868	10
525	0.0424	7000	77868	10

550	0.0424	7000	77868	10
575	0.0424	7000	77868	10
600	0.0424	7000	77868	10

La figura 3.1 muestra cómo varía el avance de reacción (ϵ) con la temperatura, en condiciones donde se mantuvieron constantes la presión y el flujo de gas. A medida que la temperatura aumenta de 500°C a 600°C, el avance de reacción disminuye de forma significativa, lo que indica que, a temperaturas más altas, la capacidad del absorbente para reaccionar con el CO₂ es menor. Las reacciones exotérmicas ($\Delta H < 0$) se ven termodinámicamente favorecidas a bajas temperaturas (principio de Le Chatelier). Aunque el equilibrio se desplaza hacia productos a baja T, la cinética (velocidad de reacción) puede ser lenta, requiriendo un balance entre factores termodinámicos y cinéticos.

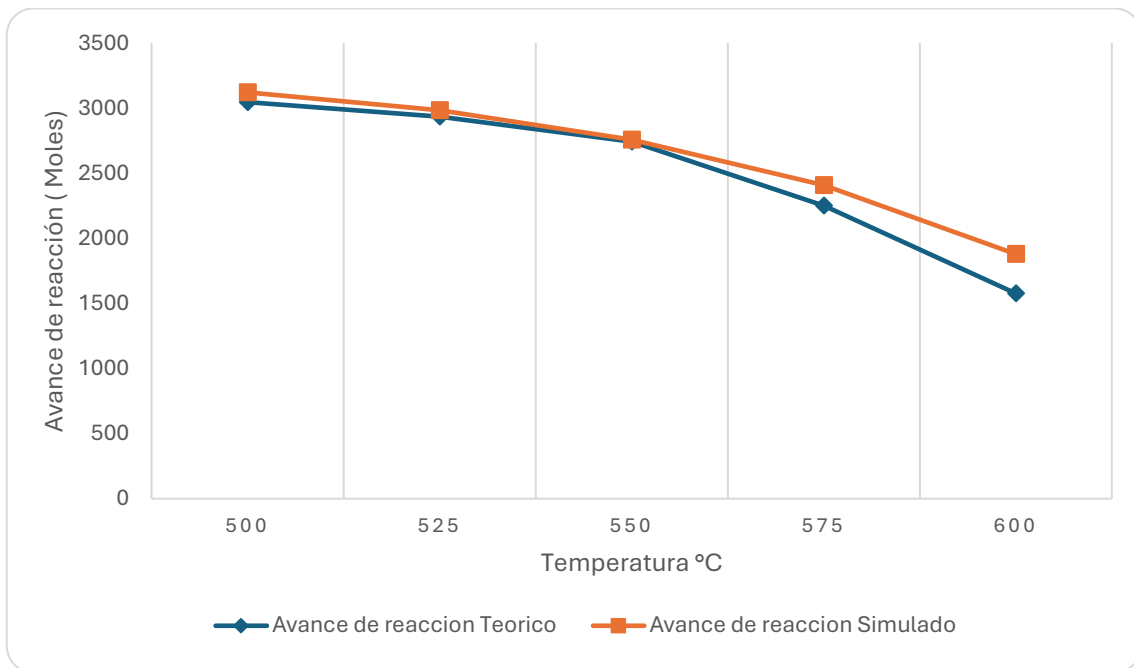


Figura 3. 1 Comparación entre los resultados simulados y teóricos para diferentes temperaturas

En la figura 3.2 se observa cómo varía el calor de reacción con la temperatura, este calor calculado corresponde a la cantidad de energía que se necesita extraer para lograr una reacción isotérmica. El calor generado durante la reacción es un parámetro crucial para entender la eficiencia energética del sistema. A temperaturas más bajas, como 500°C, el calor de reacción simulado en HYSYS es inferior a los valores teóricos. Sin embargo, al alcanzar 600°C, la desviación entre los valores simulados y teóricos es mínima, con un error en el calor de reacción de 1.11%. Esto puede explicarse en que el calor de reacción liberado depende de

los moles reaccionados y de la variación de las capacidades caloríficas las cuales no son contempladas en el simulador.

El gráfico de variación de calor vs. temperatura refleja el comportamiento exotérmico de la reacción de captura de CO₂, en la cual se libera calor durante el proceso de absorción del CO₂ por el ortosilicato de litio (Li₄SiO₄). A mayor cantidad de moles reaccionados se debe retirar más energía, esto sucede a menores temperaturas ya que allí la reacción exotérmica se ve favorecida, requiriendo más enfriamiento del medio. La diferencia entre el calor teórico y el obtenido del simulador se justifica debido a las diferencias en los Cp utilizados, el simulador (HYSYS) usa capacidad calorífica de sólidos constantes mientras que en el cálculo teórico se tuvo en cuenta su dependencia con la temperatura.

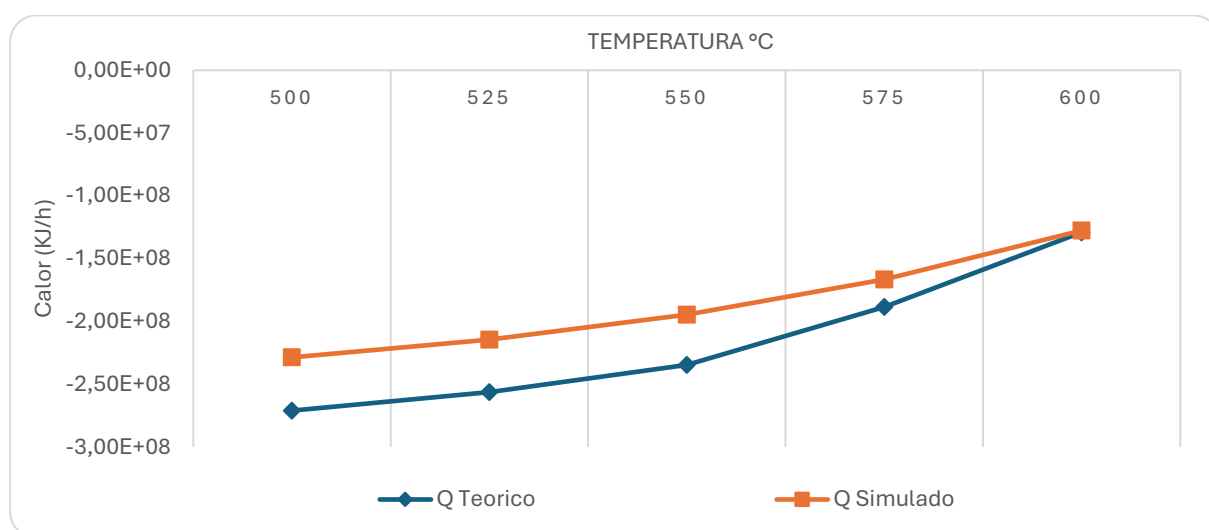


Figura 3. 2 Comparación resultados simulados y teóricos para diferentes temperaturas

3.1.2 Efecto de la variación de presión en el reactor

Presión: En la segunda ventana operativa, se varió la presión del sistema en cinco niveles. Este análisis fue crucial para determinar cómo la presión influye en la constante de equilibrio de la reacción y en el avance de la reacción de absorción.

Tabla 3. 2 Condiciones Operativas - Variación con la presión

T (°C)	Composición yCO ₂	Flujo de entrada (kmol/h Li ₄ SO ₄)	Flujo de entrada (kmol/h CO ₂ +N ₂)	Presión (atm)
550	0.0424	7000	77868	1
550	0.0424	7000	77868	5
550	0.0424	7000	77868	10
550	0.0424	7000	77868	12
550	0.0424	7000	77868	15

La figura 3.3 muestra cómo varía el avance de reacción (ϵ) con la presión, manteniendo constantes la temperatura y el flujo molar total del gas. Se observa que, a presiones más bajas, como 1 atm, el avance de reacción predicho por el simulador difiere notablemente de los cálculos teóricos. Sin embargo, a 10 atm, los valores del simulador y los teóricos son muy cercanos, con un error porcentual menor al 1 %. Esta discrepancia entre el cálculo teórico y el simulador a baja presión (≤ 2 atm) se explica por la menor presión parcial de CO_2 , que reduce la fuerza impulsora de la carbonatación del ortosilicato de litio. En este régimen, el equilibrio termodinámico favorece poco la formación de carbonato e incluso puede presentarse reversión de la reacción, por lo que el modelo teórico (basado en equilibrio estricto) predice avances muy pequeños o negativos. No obstante, el simulador predice solo conversiones positivas debido a que no dispone de material carbonatado de partida por lo que no puede calcular reacción inversa, también combina la misma base termodinámica con propiedades de mezcla no ideales, restricciones numéricas y supuestos internos de operación, atenúa esa reversión y devuelve conversiones positivas bajas. A medida que la presión aumenta, también lo hace la presión parcial de CO_2 ; la reacción se vuelve más favorable y ambas curvas convergen, como se observa a 10 atm, donde la diferencia es menor al 1 %.

En síntesis, la separación a bajas presiones no indica un error de cálculo, sino el comportamiento esperado cuando se opera con poca presión parcial de CO_2 , donde pequeñas diferencias de modelado y datos de propiedades se vuelven más visibles. Además, se observa una tendencia clara: el avance de reacción aumenta con la presión, pero existe un fenómeno de “amesetamiento” que muestra que incrementar la presión por encima de 10 atm no genera mejoras significativas. Esto se debe a que las presiones de equilibrio en los casos de 10, 12

y 15 atm son muy similares, lo que en definitiva determina la capacidad de captura máxima o el avance máximo alcanzable.

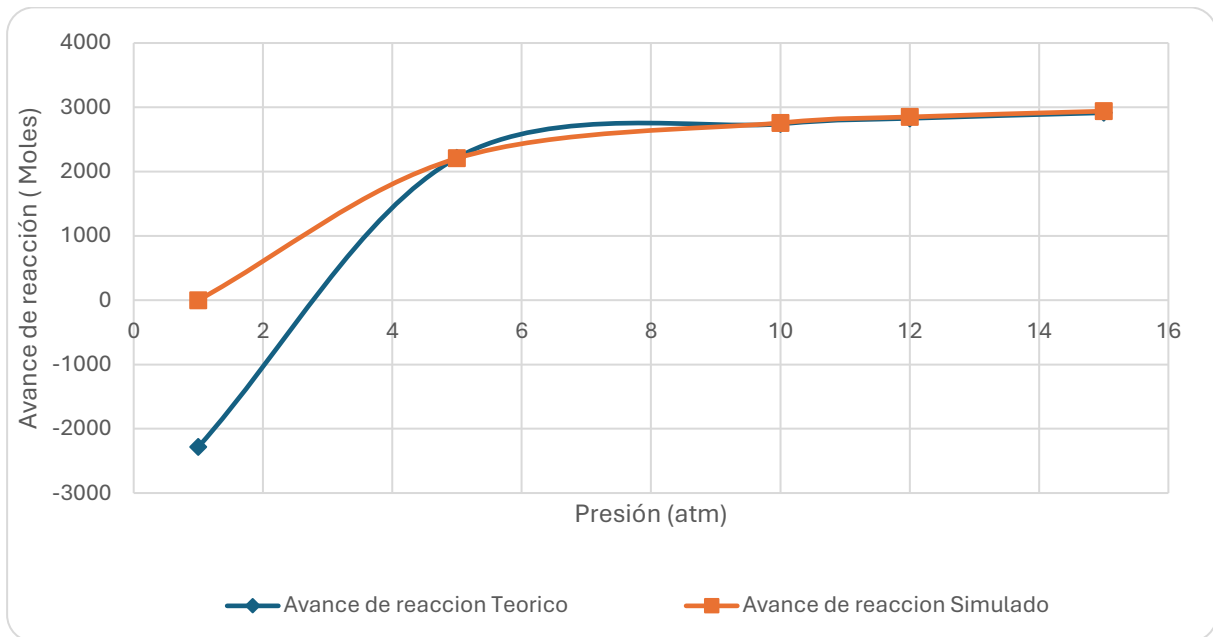


Figura 3. 3 Comparación simulados resultados simulados y calculado para diferentes presiones

La figura 3.4 muestra cómo cambia el calor de reacción en función de la presión. Al igual que con el avance de reacción, a presiones intermedias los valores predichos por el simulador y los calculados mediante Matlab son cercanos, pero se ven desviaciones a bajas y a altas presiones. A 10 atm, el calor de reacción simulado se aproxima al valor teórico. Este resultado confirma que el sistema es más eficiente a presiones intermedias, dado que las desviaciones son menores.

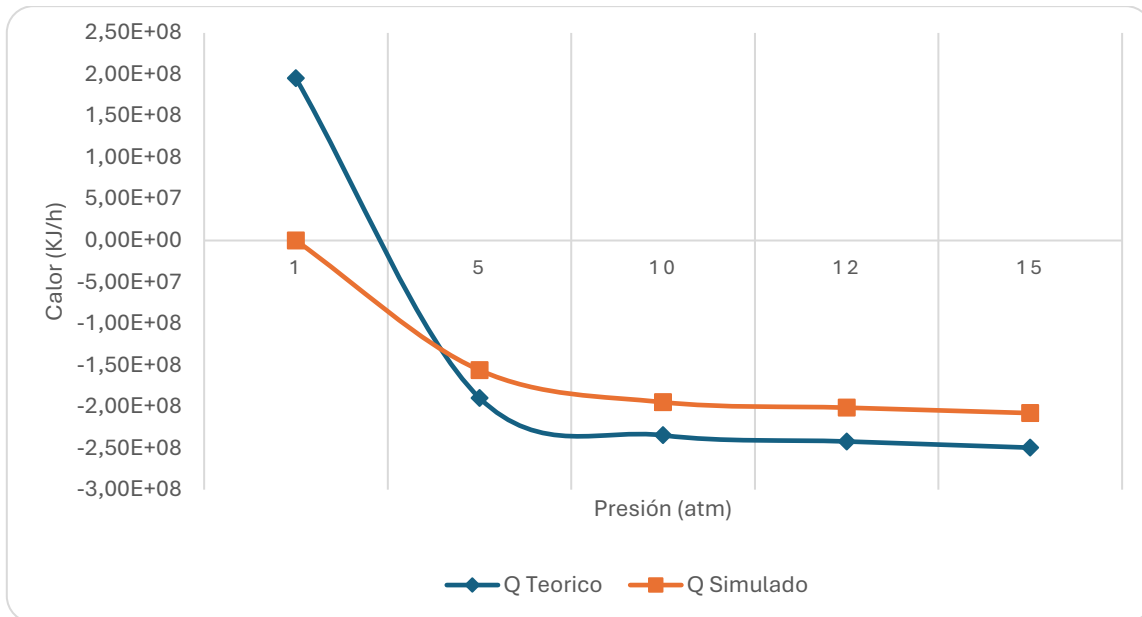


Figura 3. 4 Comparación simulados resultados simulados y calculado para diferentes presiones

3.1.3 Efecto de la variación de la concentración de CO₂ en la alimentación al reactor

Composición de CO₂ en la entrada: Se evaluó cómo la variación en la fracción molar de CO₂ en el gas de entrada afecta la eficiencia de captura. Se consideraron cinco valores de concentración de CO₂, lo que permitió observar el efecto directo de la concentración en el rendimiento del absorbente y la cantidad de CO₂ absorbido.

Tabla 3. 3 Condiciones Operativas - Variación de composición de CO₂

T°C	Composición yCO ₂	Flujo de entrada (kmol/h Li ₄ SO ₄)	Flujo de entrada (kmol/h CO ₂ +N ₂)	Presión atm
550	0.03	7000	77868	10
550	0.0424	7000	77868	10
550	0.05	7000	77868	10
550	0.06	7000	77868	10
550	0.07	7000	77868	10

La figura 3.5 muestra cómo varía el avance de reacción cuando se modifica la composición de CO₂ en la corriente de entrada. El avance de reacción aumenta progresivamente con una mayor concentración de CO₂, como era de esperar. Ambas predicciones coinciden.

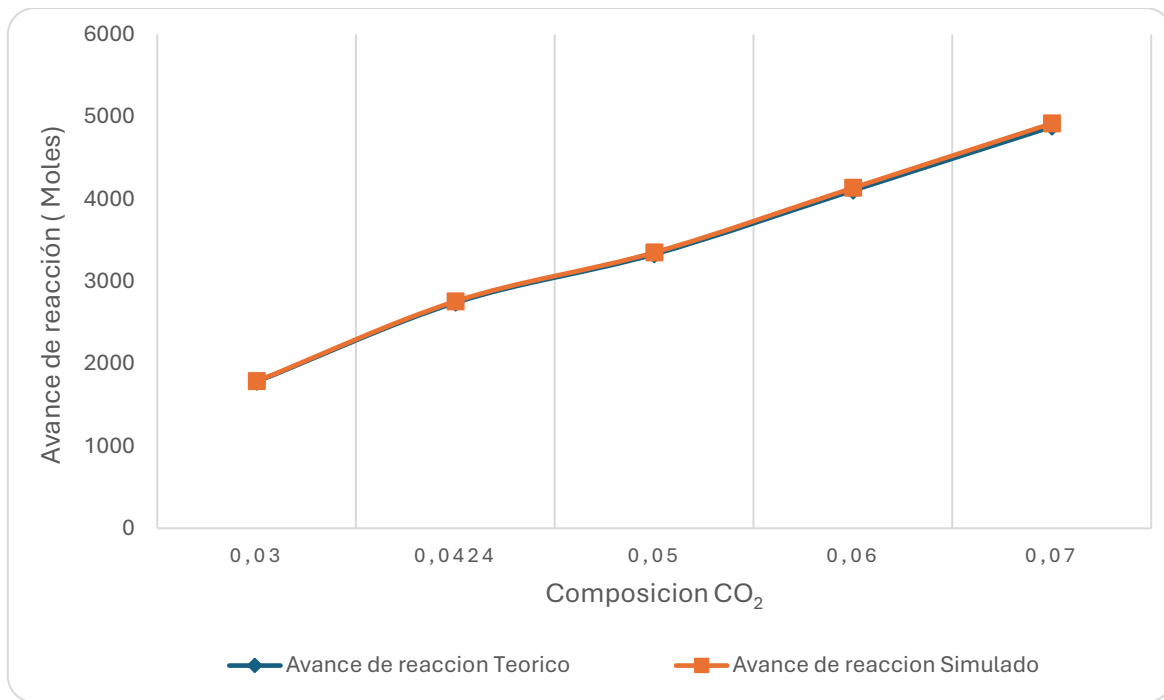


Figura 3. 5 Comparación entre los resultados simulados y calculado para diferentes composiciones de alimentación

La figura 3.6 muestra cómo varía el calor de reacción cuando se modifica la composición de CO₂ en la corriente de entrada dejando en evidencia que, a bajas concentraciones de CO₂ en la corriente de alimentación (por debajo de 0.03), los valores del calor de reacción removido para garantizar operación isotérmica, que fueron calculados teóricamente y los obtenidos en el simulador son similares, con una desviación reducida. Sin embargo, a medida que aumenta la fracción molar de CO₂, el modelo teórico predice una liberación de calor significativamente mayor (más negativa), mientras que el simulador tiende a subestimar el efecto exotérmico de la reacción. Esta diferencia creciente puede atribuirse a la forma en que el simulador linealiza la entalpía de reacción y aplica propiedades termodinámicas promedio para las mezclas a alta concentración de CO₂, lo que suaviza el cambio energético asociado a la carbonatación. Por el contrario, el cálculo teórico, basado en un modelo estequiométrico ideal, refleja completamente la variación del calor de formación con la conversión. En conjunto, los resultados indican que el simulador mantiene una tendencia coherente, pero con menor sensibilidad a la composición de entrada, lo cual podría implicar subestimación del calor real liberado en condiciones más ricas en CO₂, siendo necesario ajustar este aspecto mediante datos experimentales o un refinamiento del modelo termodinámico.

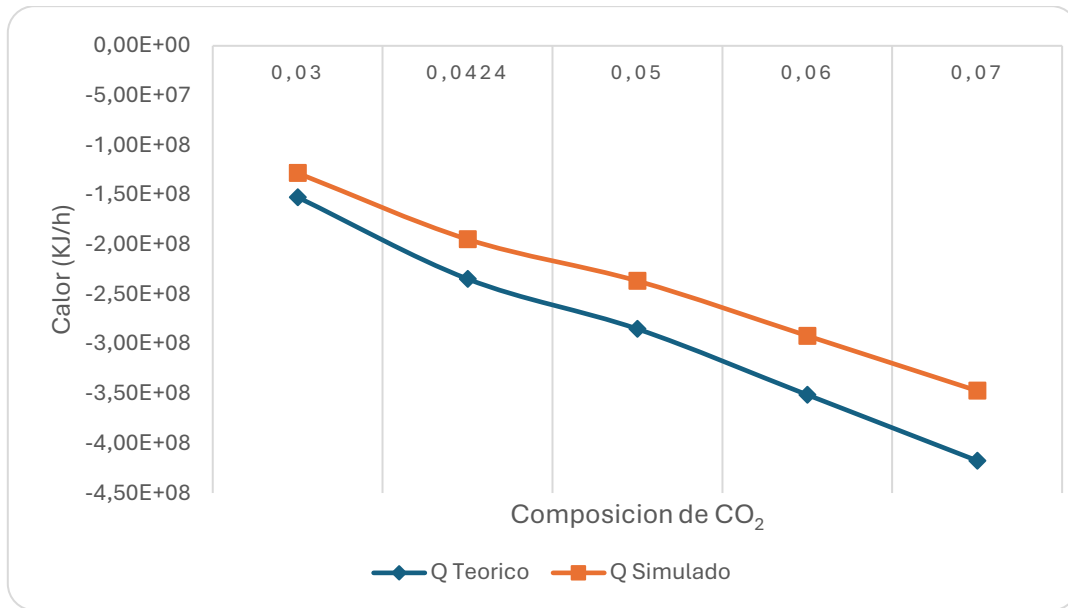


Figura 3. 6 Comparación de resultados simulados y calculado para diferentes composiciones de alimentación

3.1.4 Efecto de la variación del flujo de la alimentación sobre el reactor

En la tabla 3.4 se analizó el efecto del flujo de gas en la entrada. Se evaluaron 2 valores de flujo molar y se observaron sus efectos sobre la composición de CO₂ en el equilibrio, el avance de reacción y el calor de reacción.

Tabla 3. 4 **Condiciones Operativas - Variación con flujo molar total de alimentación**

T °C	Composición y yCO ₂	Flujo de entrada (kmol/h Li ₄ SO ₄)	Flujo de entrada (kmol/h CO ₂ +N ₂)	Presión atm
550	0.0424	7000	77868	10
550	0.0424	7000	54000	10

El análisis indica que, dentro del rango de flujos evaluados, este parámetro no afecta la composición de CO₂ en equilibrio por lo que los parámetros clave del sistema de captura de CO₂, como el avance de la reacción, y el calor de reacción son proporcionales al caudal alimentado. Esto sugiere que la simulación del sistema responde de manera correcta frente a cambios en el flujo de gas y que las condiciones de temperatura y presión son los factores predominantes que controlan la eficiencia del proceso. Esto se debe a que el caudal genera efectos en reactores en flujo, donde los fenómenos de transferencia de masa y calor afectan el desempeño del reactor.

3.1.5 Análisis de Simulación de Captura de CO₂: Comparación entre MATLAB y HYSYS

En esta etapa se evaluó la reacción de captura de CO₂ mediante ortosilicato de litio (Li₄SiO₄) bajo condiciones de equilibrio químico, comparando los resultados obtenidos por simulación en MATLAB frente al simulador comercial Aspen HYSYS. Se analizaron distintas ventanas operativas: variación de temperatura (500–600 °C), presión (1–15 atm), fracción molar de CO₂ (0.03–0.07) y flujo molar total de entrada. El objetivo fue validar el comportamiento del modelo de equilibrio en condiciones similares a las industriales. La simulación y la verificación por medio del cálculo de los balances correspondiente reflejaron tendencias coherentes con la termodinámica del sistema. Frente a los cambios en la temperatura, se observó que, al aumentar esta variable desde 500 °C a 600 °C, la conversión disminuye progresivamente en ambos simuladores, lo cual concuerda con el carácter exotérmico de la reacción. Esta disminución se tradujo en menores avances de reacción y calores totales liberados por reacción más bajos, como es esperable cuando el equilibrio se desplaza hacia los reactivos. En la ventana de presión, el aumento desde 1 atm hasta 15 atm mostró una mejora significativa en la conversión de CO₂, reduciendo las fracciones molares residuales en equilibrio y aumentando el calor total de reacción liberado. Esta tendencia se explica por el principio de Le Chatelier, ya que el sistema reacciona desplazando el equilibrio hacia los productos al aumentar la presión parcial del reactivo gaseoso. Este efecto es importante a presiones bajas, pero disminuye a presiones mayores a diez atmósferas. En cuanto a la fracción molar de CO₂ en la alimentación, se observó que un mayor contenido inicial de CO₂ incrementa tanto el avance de reacción como el calor total de reacción, confirmando que la disponibilidad del reactivo impulsa la conversión química. La energía liberada por la reacción aumentó proporcionalmente al contenido de CO₂ tratado, lo cual fue consistente entre ambos modelos. Finalmente, en la ventana de flujo molar total de entrada, se comprobó que el equilibrio no es sensible a estas variables cuando se mantienen constantes la composición y las condiciones de temperatura y presión, por lo que los valores de avance de reacción y calor involucrados fueron proporcionales al caudal alimentado, lo que es esperable en un modelo sin cinética. Esta invariancia de los resultados frente a la variación del flujo valida que las simulaciones efectivamente operan bajo el supuesto de equilibrio termodinámico.

Aunque se observaron pequeñas diferencias numéricas entre los cálculos realizados en MATLAB y HYSYS, las tendencias generales fueron consistentes. A modo de ejemplo, a 600 °C y 10 atm, las composiciones de equilibrio fueron 0.0224 (MATLAB) y 0.0187 (HYSYS), mientras que el calor total liberado en ambos casos fue prácticamente el mismo (-1.29×10^8 kJ/h). Estas diferencias, se atribuyen a diferencias en la implementación del equilibrio químico

(en HYSYS se utiliza regresión de los datos de equilibrio mientras que en Matlab se utilizó interpolación), las propiedades cargadas (en HYSYS se utilizaron capacidades caloríficas constantes de los sólidos) y algoritmos de cálculo.

3.2 Diseño de columnas de absorción

Una vez analizados los efectos de la variación de las condiciones operativas en el proceso de absorción en condiciones de equilibrio y contrastados los valores de los resultados de la simulación con los balances globales se procede al diseño preliminar de las columnas.

Se definieron las condiciones de alimentación del gas de combustión a tratar. La corriente corresponde a los gases de salida de una central térmica de ciclo combinado de 400 MW, comprimidos y precalentados hasta la presión y temperatura de operación seleccionadas. En la Tabla 3.5 se presentan las condiciones operativas adoptadas, incluyendo presión, temperatura, flujo másico, flujo volumétrico y molar (composiciones de flue gas), así como la composición molar y másica de los principales componentes, en particular el dióxido de carbono. Esta información constituye la base para calcular la cantidad de CO₂ a remover y, en consecuencia, la cantidad de sorbente requerida.

Tabla 3. 5 Condiciones operativas

Temperatura [°C]	550
Presión [Atm]	10
Flujo másico del gas flue [kg/s] [33]	649.7
Peso molecular promedio del gas flue [kg/kmol]	29.02
Fracción molar de CO ₂ [33]	0.0425
Fracción molar de O ₂ [33]	0.1295
Fracción molar de H ₂ O [33]	0.0191
Fracción molar de N ₂ [33]	0.8087
Viscosidad dinámica, μ [Pa·s] [33]	1.80E-05
Flujo molar del gas flue [mol/s]	22388
Flujo molar de CO ₂ [mol/s]	955.9
Flujo másico de CO ₂ (kg/s)	42
Densidad (kg/m ³)	4.3

En la tabla 3.6 se presentan los datos considerados para el cálculo de los sólidos

Tabla 3. 6 Propiedades de los solidos

Peso molecular Li ₄ SiO ₄ [g/mol] [30]	119.85
Capacidad de captura de CO ₂ [kg CO ₂ / kg de sólido] [38]	0.25

La cantidad de ortosilicato de litio (Li_4SiO_4) necesaria para tratar la corriente de gases de combustión depende directamente del tiempo de operación de la columna isotérmica y de la eficiencia de captura alcanzada. Esta eficiencia puede interpretarse como el porcentaje de conversión del sólido reactivo hasta que la columna deja de cumplir con la composición de equilibrio de salida preestablecida. En la práctica, la capacidad de captura efectiva está condicionada por múltiples factores: la densidad de flujo del gas a tratar, la temperatura de operación, el tamaño de partícula del sólido, la cinética de la reacción de carbonatación y, finalmente, el propio diseño geométrico de la columna, todos estos parámetros deberán ser verificados experimentalmente o mediante simulación detallada.

En este estudio, el dimensionamiento se realiza en función de condiciones de salida en equilibrio termodinámico. Por lo que, una vez establecida la cantidad de dióxido de carbono en la corriente de entrada, y considerando que en condiciones de equilibrio se alcanza una eficiencia de captura del 90 % (eficiencia de captura = $\frac{\varepsilon}{n_{\text{CO}_2}}$) valor que corresponde al equilibrio de reacción a la temperatura y presión de operación., se calcula la masa total de CO_2 que será posible absorber (Ec 2.12) y con ello la masa/cantidad del sólido sorbente necesaria. Este valor depende linealmente de la capacidad específica de captura del Li_4SiO_4 , adoptada como 0.25 kilogramos de CO_2 por cada kilogramo de sólido fresco, y del tiempo de operación supuesto para cada ciclo de captura. La relación entre el tiempo de operación y la masa de sólido requerida se muestra en la Tabla 3.7, donde se observa que, para un mayor tiempo de operación, la cantidad de sorbente crece proporcionalmente. Tiempos más prolongados permiten procesar un volumen mayor de gas sin interrupciones, pero exigen una cantidad inicial más elevado de material absorbente, lo cual implica un incremento significativo en la inversión y en los requerimientos de espacio de almacenamiento. En contraste, tiempos de operación demasiado cortos disminuyen la masa total de sólido necesaria, pero incrementan la frecuencia de regeneración o reposición del material, generando mayores costos operativos asociados a sistemas de monitoreo, control y mantenimiento. En consecuencia, se plantea la necesidad de adoptar un valor conservador para el tiempo de operación, dentro de un rango de referencia industrial que típicamente oscila entre 30 minutos y 3 horas por ciclo [32], de manera de balancear adecuadamente el costo de inversión en sólido con los costos de operación asociados.

Tabla 3. 7 Variación de flujos en función del tiempo de operación

Flujos	1 hora	2 horas	3 horas
Cantidad de moles del flue gas	80599340	161198681	241798022
Kg de flue gas	2338920	4677840	7016760

Cantidad de moles de CO ₂	3441591	6883183	10324775
Kg de CO ₂	151464	302928	454393
Cantidad de solido (kg)	3547176	7094353	10641530

Debido a los resultados obtenidos en el análisis comparativo, se seleccionó un tiempo de operación de 1 hora como base para el diseño. Si bien tiempos más largos permiten procesar un mayor caudal acumulado de gas, estos implican un incremento considerable en la cantidad de sólido absorbente requerido, lo cual genera dificultades a nivel económico, de manipulación del material, de construcción y de mantenimiento de los equipos. Por este motivo, se consideró que una operación de 1 hora representa el compromiso más adecuado entre inversión inicial y operatividad. La composición a la salida de la columna se considera fija, dado que el diseño parte del supuesto de equilibrio químico alcanzado en el lecho. En la Tabla 3.8 se presentan las fracciones molares y másicas de la corriente de salida, junto con la comparación respecto a la composición de entrada, Tabla 3.5. Se observa una disminución significativa del dióxido de carbono, que pasa de 4.25 % molar a 0.43 % molar (reducción del 90%), mientras que las fracciones de oxígeno, vapor de agua y nitrógeno experimentan un leve aumento relativo debido a las condiciones adoptadas de equilibrio. Estos resultados constituyen la base para la evaluación de la eficiencia global del proceso y permiten dimensionar los balances de materia alrededor del sistema de captura.

Tabla 3. 8 Composición de los gases a la salida del reactor

yCO ₂ [mol CO ₂ / moles de flue gas]	0.0043
yO ₂ [mol O ₂ / moles de flue gas]	0.1347
yH ₂ O [mol H ₂ O / moles de flue gas]	0.0199
yN ₂ [mol N ₂ / moles de flue gas]	0.8411

La masa total de sólido puede distribuirse en diferente número de columnas y con distintas configuraciones geométricas. El volumen de las columnas reactivas para lecho empacado resulta de la suma del volumen del sólido más el volumen de huecos, estos últimos representados por la porosidad del lecho. De esta manera, se obtiene la densidad aparente de lecho, que constituye un parámetro clave para el diseño. La porosidad del lecho puede seleccionarse dentro de un rango de referencia, y en este trabajo se adoptó un valor de 0.40, de acuerdo con los estudios de Dixon [31] Ec 3.2, Figura 3.7. Este autor propuso correlaciones específicas que relacionan la porosidad con la razón entre el diámetro de partícula y el diámetro de la columna (dp/D) para partículas esféricas que no se deforman, considerando diferentes rangos de (dp/D).

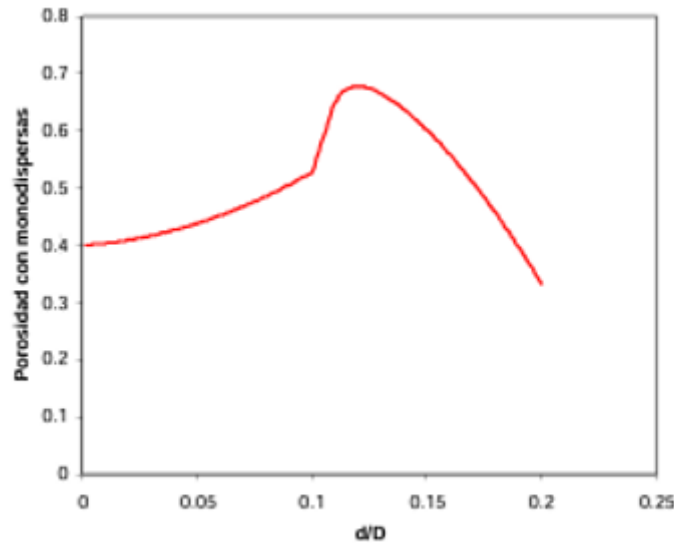


Figura 3. 7 Representación de la ecuación 2.19 para distintos tamaños de partículas esféricas
Fuente: Dixon, A.G., Ergun-type equations for fixed beds of spherical particles, AIChE Journal, 1988

Para el volumen total del lecho con el fin de cubrir posibles desviaciones operativas, pérdidas de material activo o irregularidades en la carga del lecho, se adoptó un exceso del 20 %, lo que incrementa el volumen efectivo previsto para cada torre. A partir de estas condiciones globales se definieron los parámetros base del sistema: la masa total de sólido absorbente, el volumen de sólido requerido, el volumen total de lecho considerando la porosidad y el tiempo de residencia del gas en cada columna. Estos valores permiten establecer el tamaño global del sistema y constituyen el punto de partida para evaluar distintas configuraciones de diseño. En este caso, la masa total de ortosilicato de litio resultó en 3547176.97 kg para una hora de operación. Con una porosidad adoptada de 0.40, el volumen de lecho se ajustó a 797.26 m³, incluyendo el 20 % adicional mencionado. Los parámetros fijados (tabla 3.9) están directamente relacionados con la caída de presión y la eficiencia de captura del proceso. Un mayor diámetro de partícula aumentaría la porosidad y por lo tanto disminuiría la caída de presión, pero afectaría a la eficiencia del proceso debido a problemas difusionales internos. Diversos autores han reportado que el diámetro de partícula constituye un parámetro crítico en el desempeño de reactores de lecho fijo, ya que afecta simultáneamente la caída de presión y las resistencias difusionales internas. En general, para procesos gas-sólido con empaques granulares se emplean partículas en el rango de 0.5 a 10 mm, buscando un equilibrio entre baja pérdida de carga y adecuada transferencia de masa [34]; [35]. En el caso específico de la captura de CO₂ con Li₄SiO₄, varios estudios experimentales han utilizado diámetros promedio de 0.2 a 2 mm en lechos fluidizados o pellets compactos, priorizando la cinética y la accesibilidad del reactivo [35]; [36]. Por otra parte, para

configuraciones de lecho fijo a gran escala, Dixon (1988) [31] recomienda que la relación geométrica D/d_p sea mayor a 15, criterio que también se cumple en el presente diseño. Durante los cálculos se pudo observar que la porosidad no se ve afectada con la variación del diámetro de partícula según los valores adoptados en bibliografía.

En este contexto, el cálculo de la caída de presión en el lecho empacado mediante la ecuación de Ergun resulta fundamental, dado que el flujo de gas a través de un medio granular depende de manera sensible de los parámetros geométricos y físicos del lecho. Para su aplicación es necesario conocer el diámetro de partícula, la esfericidad y la porosidad efectiva, los cuales fueron definidos en base a valores reportados en simulaciones previas y en estudios experimentales. En este trabajo se adoptaron las siguientes condiciones Tabla 3.9

Tabla 3. 9 Propiedades del lecho

Diámetro de partícula (d_p) (mm) [31]	0.0- 10
Porosidad (ϵ) [31]	0.4
Densidad del lecho kg/m^3	911

Para la determinación de la caída de presión por unidad de longitud del lecho se aplicó la ecuación de Ergun, evaluando distintos valores de velocidad superficial del gas con el fin de identificar la condición más adecuada de acuerdo con los límites de diseño aceptados. Se analizaron los siguientes escenarios:

Tabla 3. 10 Influencia de la velocidad en el área total

Velocidad m/s	G $\text{Kg/m}^2 \text{ s}$	Área total m^2
0.1	0.43	1510.93
0.5	2.15	302.18
1	4.3	151.09
1.5	6.45	100.72
2	8.6	75.5

El análisis de la variación de velocidad superficial y su impacto sobre la densidad de flujo másico (G) y el área transversal total requerida permite dimensionar las implicancias directas en el diseño de las columnas. Como puede observarse en la Tabla 3.10, al aumentar la velocidad superficial desde 0,1 hasta 2,0 m/s, el valor de G crece de manera proporcional a densidad constante ($G=\rho u_s$), mientras que el área necesaria para procesar el mismo caudal ($A=G/F_{\text{mas}}$) disminuye a medida que G aumenta. Esto significa que velocidades más bajas requieren áreas de sección transversal mucho mayores, lo cual se traduce en un número elevado de torres o en columnas de gran diámetro. Por el contrario, velocidades más altas reducen drásticamente el área necesaria (75,5 m^2 a 2,0 m/s), concentrando el volumen de

proceso en menos columnas y disminuyendo la superficie total a construir y aislar. Sin embargo, este efecto positivo en los costos de infraestructura se contrapone con el incremento en la caída de presión por metro de lecho, lo cual eleva las exigencias energéticas del sistema (bombeo) y puede comprometer la eficiencia de absorción si se sobrepasan los rangos recomendados en bibliografía [35];[36]. Adicionalmente, disminuyen los tiempos de residencia de los gases en la columna, que también puede afectar negativamente el avance de reacción. En consecuencia, la selección de la velocidad de operación debe entenderse como un balance técnico-económico, donde el ahorro en construcción debe ser ponderado frente al mayor costo por bombeo y a la posible penalización en la transferencia de masa.

La Tabla 3.11 muestra la variación de la caída de presión para diferentes combinaciones de velocidad superficial y diámetro de partícula. Obsérvese que debido a que el volumen de sólidos requerido para operar la columna durante una hora de captura se mantuvo constante, se obtienen diferentes velocidades lineales para diferentes secciones de flujo y por lo tanto las alturas mostradas en la tabla cambian. Los resultados confirman la dependencia cuadrática de la caída de presión con la velocidad del gas, de acuerdo con la ecuación de Ergun: incrementos relativamente pequeños en la velocidad conducen a aumentos significativos en la pérdida de carga. Para un diámetro de partícula de 7 mm, los valores de $\Delta P/L$ se ubican entre ≈ 464 Pa/m a $u=0.2$ m/s y ≈ 40.889 Pa/m a $u=2.0$ m/s. Estos resultados evidencian que, a medida que la velocidad aumenta, la caída de presión crece muy por encima de los rangos de diseño aceptados en bibliografía (Caída de presión admisible: no debe superar el 10 % de la presión de operación) . Esto implica que operar a velocidades de 1,0 o 1,5 m/s resulta inviable desde el punto de vista energético y de estabilidad operativa. Al considerar un diámetro de partícula mayor, de 10 mm, la caída de presión se reduce de forma significativa: para $u=0,5$ m/s se obtiene un valor de ≈ 1836 Pa/m. En este sentido, el aumento de tamaño de partícula en conjunto con la porosidad del lecho reduce la resistencia al flujo, permitiendo trabajar con menores caídas de presión y evitando excesivos requerimientos de energía de bombeo. Si se toma una altura de lecho de 2.638 m, la caída de presión total por columna en este caso resulta en 0.047 atm, manteniéndose por debajo del criterio de no superar el 10 % de la presión de operación [24]; [36]. Este balance entre condiciones hidráulicas aceptables y estabilidad mecánica constituye la base para la selección de un diámetro de partícula de 10 mm como referencia de diseño. La comparación de las diferentes condiciones de velocidad y tamaño de partícula indica que la opción de $u=0.5$ m/s con $d_p=10$ mm representa un compromiso entre caída de presión específica, caída de presión total, eficiencia operativa y factibilidad constructiva. No obstante, la decisión final debe quedar abierta a un análisis económico posterior, ya que un incremento en el tamaño de partícula puede reducir la eficiencia de captura por resistencias difusionales internas, mientras que

operar con caídas de presión más bajas podría limitar la transferencia de masa. Estos resultados constituyen una primera aproximación que enmarca la magnitud del sistema y sirven como base para las siguientes etapas del análisis

Tabla 3. 11 Variación de la caída de presión para distintas velocidades y diámetros de partícula

Velocidad superficial (m/s)	Diámetro de partícula (mm)	Altura de cada torre (m)	Caída de presión por torre (Pa/m)	Caída de presión Total (Pa)
0.2	7	1.055	464.61	489,400
0.5	7	2.638	2671.66	7047,154
1	7	5.276	10377.08	54752,990
2	7	10.553	40889.18	431502,645
0.5	2	2.638	10713.51	28265,622
0.5	4	2.638	4880.82	12876,381
0.5	6	2.638	3147.52	8303,584
0.5	10	2.638	1836.80	4845,362

3.2.1 Impacto de las distintas variables en el tiempo de residencia y la determinación del número de torres

En los escenarios comparados se mantuvo una velocidad superficial del gas $u=0.5$ m/s y una altura de lecho en torno a $H\approx 2.64$ m. Con la porosidad adoptada $\epsilon=0.40$, el tiempo de residencia calculado fue de 5.28 segundos, debido a condiciones de diseño y reacción en la cual se estableció que el proceso es equimolar y se mantiene el volumen constante, a su vez, al no variar ni la altura ni la velocidad, tampoco varía el tiempo de residencia. Esto es relevante, ya que la elección del número de torres afecta el layout y los costos.

Implicancias operativas y de desempeño:

- Porosidad, ϵ : incrementa el volumen libre y, por ende, el tiempo de residencia. En la práctica, está limitada por el tamaño de partícula, la esfericidad y la relación D/d_p , además de la caída de presión descrita por la ecuación de Ergun. Aumentar ϵ sin penalizar el área de contacto suele requerir cambios en el tipo de empaque o formulación del pellet [25]; [32]. La literatura sobre la captura de CO_2 con Li_4SiO_4 a alta temperatura indica que los tiempos característicos para alcanzar conversiones elevadas suelen encontrarse en el rango de decenas de segundos a varios minutos, dependiendo del tamaño de partícula, la difusividad interna, la sinterización del sólido y la composición del gas [21]; [22]. Esto conlleva a dos consecuencias:

- Riesgo de breakthrough temprano. Con tiempos reducidos, el frente de reacción puede atravesar el lecho antes de que se alcance una conversión alta, disminuyendo la utilización efectiva del sólido [36]

- Mayor sensibilidad a mal distribución. Cualquier desbalance en el múltiple de cañerías (especialmente en configuraciones de muchas torres) genera ramas con menor caudal y otras con mayor caudal, modificando el tiempo de residencia efectivo y deteriorando la eficiencia global. En este contexto, el diseño de headers, la calibración de orificios y una puesta en marcha cuidadosa son críticos para minimizar by-pass y canalización [18]

El efecto del número de torres sobre el tiempo de residencia es nulo. Aunque el tiempo de residencia no cambia entre 40, 20 y 100 torres cuando H y u son constantes, sí varían aspectos que condicionan el tiempo efectivo de contacto:

- Distribución del caudal. Con 100 torres, la uniformidad de flujo es más difícil de asegurar debido al mayor número de derivaciones, lo que amplía la curva de distribución de tiempos y puede reducir la eficiencia global [24]. En 20 torres, este riesgo es menor; con 40 torres, intermedio.

En caso de requerir mayor tiempo de residencia, existen tres estrategias directas para incrementar el tiempo de contacto:

- Reducir la velocidad superficial, u : por ejemplo, de 0,5 a 0,25 m/s duplicaría el tiempo de residencia, a costa de aumentar el área transversal total necesaria para mantener el caudal constante ($A = F_{\text{más}} / (\rho u_s)$). Como efecto adicional, la caída de presión se reduce, lo que supone un beneficio energético [19]

- Aumentar la altura de lecho, H : duplicar la altura duplica el tiempo de residencia, aunque debe verificarse el criterio geométrico H/D , el espesor requerido por ASME y la estabilidad estructural frente a cargas externas [47]. Por otra parte, reduce a la mitad el número de columnas. El volumen por columna se duplica.

- Ajustar la porosidad ε : mediante selección de empaque o pellet, recordando que una mayor ε reduce la caída de presión, pero no necesariamente incrementa el área de contacto [31]

En la literatura especializada sobre reactores de lecho fijo para procesos gas-sólido, los tiempos de residencia del gas suelen situarse en un rango muy amplio, dependiendo del tipo de reacción, la temperatura y el tamaño de partícula. Por ejemplo, en procesos de adsorción de CO_2 en zeolitas o aminas soportadas, se reportan tiempos de contacto de entre

5 y 30 segundos, con óptimos que dependen de la cinética de adsorción y de la difusión interna en el sorbente [35]; [36]. En contraste, para sistemas de carbonatación–descarbonatación con óxidos alcalinos como el Li_4SiO_4 , algunos estudios experimentales describen que los tiempos característicos para alcanzar conversiones elevadas pueden extenderse a decenas de segundos o incluso minutos, especialmente cuando se utilizan partículas grandes o cuando la reacción está limitada por difusión sólida [21]; [22]. En el presente diseño, el tiempo de residencia calculado es de 5.28 segundos, valor que se encuentra en el extremo inferior de los tiempos reportados para sistemas de captura con sólidos reactivos a alta temperatura. Esto implica que, si bien desde un punto de vista el tiempo calculado es coherente con la velocidad y la altura de lecho seleccionadas, no puede asegurarse un 90 % de captura únicamente en base a balances de materia, sino que requiere ser contrastado con datos cinéticos específicos del sistema $\text{Li}_4\text{SiO}_4\text{--CO}_2$ a 550 °C. mantener un tiempo de residencia corto puede ser ventajoso desde la perspectiva de dimensionamiento del equipo y costos de instalación. Sin embargo, también puede limitar la utilización efectiva del sólido si la reacción no avanza a la velocidad suficiente dentro del intervalo disponible. De igual modo, valores de residencia más prolongados —obtenibles mediante menor velocidad superficial o mayor altura de lecho— mejorarían la probabilidad de conversión completa, pero incrementarían los costos de equipos. En consecuencia, el valor de 5.3 segundos calculado debe considerarse como un resultado intermedio de diseño, útil para establecer la escala del sistema y para comparar alternativas de número de torres y caídas de presión. Su validación dependerá del contraste con datos cinéticos experimentales posteriores a este trabajo.

3.2.2 Selección de cantidad de torres

A partir de la velocidad seleccionada (0.5 m/s), con una altura fija (2.63 m) y caída de presión fijada, la distribución del volumen total de lecho (797.27 m³) en distinto número de columnas (muchas columnas de diámetro pequeño o pocas columnas de diámetro grande) entrega los siguientes resultados de referencia por torre tabulados en la Tabla 3.12, los cuales evidencian que un aumento de torres implica torres de menor área transversal y un aumento en la relación de H/D (disminuye la sección por torre y con ello el diámetro de torre) como así también una disminución en la relación D/dp.

Tabla 3. 12 Dimensionamiento de columnas según la cantidad de torres

Cantidad de torres	Área transversal de cada torre (m ²)	Volumen por torre (m ³)	Diámetro de cada torre (m)	Espesor de cada torre (mm)	Relación H/D	Relación D/dp
20	15.109	39.86	4.386	14.8	0.602	109.65
40	7.55	19.93	3.101	10.5	0.851	77.54

100	3.022	7.977	1.962	6.6	1.345	49.04
-----	-------	-------	-------	-----	-------	-------

3.2.3 Instalación y montaje

- Muchos equipos pequeños (100 torres, $D \approx 1.96$ m, $H=2.63$ m). Exigen mayor cantidad de conexiones (headers, ramales, bridas, válvulas, instrumentación), soportes múltiples y más “interfaces” de obra. Esto incrementa mano de obra y materiales de piping (tuberías) y soporte. El izaje es relativamente sencillo (equipos livianos y compactos), y las cimentaciones pueden ser más simples por unidad, aunque el número total de fundaciones crece y complica la logística del sitio.

- Pocos equipos grandes (20 torres, $D \approx 4.39$ m, $H=2.63$ m). Reducen drásticamente la cantidad de líneas y conexiones, simplificando el montaje. No obstante, requieren equipos de elevación de mayor capacidad, más planificación de rigging, y cimentaciones más robustas por torre (mayor diámetro y carga).

- Alternativa intermedia (40 torres, $D \approx 3.10$ m, $H=2.63$ m). Balancea el conteo de conexiones y la complejidad de izaje. A menudo es una solución de compromiso en plantas donde el lay-out o la ventana de obra restringen el uso frecuente de grúas de gran porte.

3.2.4 Mantenimiento y confiabilidad

A continuación, se evalúa el impacto de la configuración de las torres sobre la carga de mantenimiento y la continuidad operativa del sistema

- 100 torres. Aumenta el número de puntos de mantenimiento (sellos, empaques, mirillas, válvulas, purgas). El costo operativo se eleva por frecuencia y cantidad de intervenciones. A favor: la redundancia es alta; la salida de servicio de una o varias unidades degrada parcialmente la capacidad, pero no detiene el proceso.

- 20 torres. Menos ítems para mantener y menos stock de repuestos, pero mayor criticidad unitaria: la falla de una torre impacta más en capacidad y, en casos extremos, puede condicionar el tren completo durante reparaciones mayores.

- 40 torres. Otorga redundancia moderada y un perfil de mantenimiento más llevadero que 100 torres, sin concentrar tanta criticidad como 20.

3.2.5 Distribución del flujo y operación del múltiple

- 100 torres. El desafío es asegurar distribución uniforme a través de un manifold con muchas derivaciones. Cualquier desbalance incrementa by-pass, afectando captura y ΔP .

Requiere diseño fino de headers (longitudes equivalentes, orificios calibrados, placas distributivas) y puesta en marcha cuidadoso.

- 20 torres. La distribución es más sencilla (menos ramales, menor asimetría), con menores pérdidas adicionales en el múltiple de cañerías y menor riesgo de mal distribución.
- 40 torres. Nivel de complejidad intermedio; suele ser manejable con un buen diseño de Headers.

3.2.6 Área disponible y lay-out

La superficie total del tren crece con el número de torres: $\approx 727 \text{ m}^2$ (20) $< \approx 1.028 \text{ m}^2$ (40) $< \approx 1.626 \text{ m}^2$ (100). Si el sitio es restringido o hay limitaciones de altura/mantenimiento, un número menor de torres favorece el lay-out (mayores módulos, menor cantidad de pasarelas y plataformas). Además, los pasillos de acceso seguro para mantenimiento deben reservarse alrededor de cada equipo; con 100 torres, el área de circulación y las protecciones crecen de forma notable.

3.2.7 Consideraciones mecánicas: diámetro, altura, espesor y estabilidad

- En todos los casos se verifica $H/D < 3$ (0.60–1.35), lo que mejora la estabilidad ante viento/sismo y reduce la esbeltez.
- El espesor de la pared calculado crece con el diámetro (por presión interna/cargas externas): 14,8 mm (20 torres) $>$ 10,5 mm (40 torres) $>$ 6,6 mm (100 torres).
- El volumen total de acero reportado se mantiene prácticamente constante ($\approx 10.82 \text{ m}^3$) porque, aunque el espesor de pared aumenta al reducir el número de torres (mayor diámetro \rightarrow mayor espesor), la cantidad total de cascos disminuye. A la inversa, cuando se incrementa el número de torres, cada casco es más delgado, pero hay muchos más. Este efecto se compensa porque el volumen total del lecho es fijo y la altura del relleno por torre permanece similar, de modo que la superficie externa total del conjunto no varía significativamente. En consecuencia, el incremento en espesor por torre se equilibra con la reducción en cantidad de torres, y viceversa.
- Las relaciones D/d_p son todas muy superiores a 15 (49–110), lo que minimiza efectos de pared y mantiene válidas las correlaciones para ΔP y transferencia.

3.2.8 Superficie externa

A medida que se incrementa la cantidad de unidades se observa un incremento de la superficie a aislar siendo 727, 1028 y 1625 m² para 20, 40 y 100 torres respectivamente, el incremento de la relación superficie a volumen puede traer inconvenientes a la hora de aislar térmicamente los equipos.

3.2.9 Costos y economía de escala

Por economía de escala, el costo por unidad de volumen suele disminuir con equipos más grandes (menos soldaduras, menos boquillas, menos accesorios por m³ útil). Esto se ve reflejado en:

- 20 torres: menor superficie externa y menor aislante → costos potencialmente más bajo en recipientes y aislamiento; menos piping y menos instrumentación por tren.
- 100 torres: mayor superficie/volumen y mayor número de líneas/soportes costos de piping e instrumentación más altos.
- 40 torres: intermedio; puede ser atractivo cuando el sitio no admite diámetros grandes o cuando se busca redundancia sin multiplicar en exceso las líneas.

3.2.10 Síntesis para toma de decisión

Para obtener rendimientos de 90% de captura con un efluente proveniente de central térmica de ciclo combinado durante una hora de operación se requiere un volumen total de 797 m³ y operar las columnas a 550°C y 10 atm de presión, adicionalmente para obtener caídas de presión aceptables se requieren porosidades de 0.4 y velocidades de flujo de 0.5 m/s. este volumen puede distribuirse en diferente cantidad de columnas de acuerdo con el siguiente detalle:

- 20 torres (diámetro mayor): minimiza superficie total y aislamiento, simplifica headers y reduce conexiones, con menos puntos de mantenimiento. A cambio, presenta mayor criticidad unitaria, requiere izajes y fundiciones más exigentes, y espesores mayores por torre.
- 40 torres (intermedio): balancea redundancia y complejidad de montaje, con diámetros moderados que suelen ser compatibles con talleres y logística. Costos también intermedios.

- 100 torres (diámetro menor): maximiza redundancia y modularidad, pero incrementa el número de conexiones, la complejidad del múltiple, la superficie a aislar, y el costo de mantenimiento asociado a muchos equipos.

CAPITULO 4: Conclusión

El presente trabajo permitió desarrollar un análisis integral del proceso de captura de dióxido de carbono mediante ortosilicato de litio (Li_4SiO_4), combinando herramientas de simulación y cálculos de ingeniería para la definición de una configuración de lechos fijos a alta temperatura. El enfoque aplicado integró el estudio del equilibrio químico, el comportamiento energético y el dimensionamiento preliminar de los equipos, permitiendo evaluar la influencia de los principales parámetros operativos: temperatura, presión, composición y flujo de gas sobre la eficiencia de captura y la viabilidad constructiva del sistema. Desde el punto de vista termodinámico, las simulaciones confirmaron el carácter exotérmico de la reacción de carbonatación del Li_4SiO_4 y su fuerte dependencia con la presión parcial de CO_2 . A medida que la presión aumenta, la conversión y el calor de reacción se incrementan. El análisis comparativo entre los modelos teóricos y el simulador de procesos mostró un comportamiento consistente, aunque con desviaciones apreciables en condiciones de baja presión y composiciones diluidas de CO_2 , donde el simulador tiende a subestimar el calor de reacción debido a simplificaciones en el tratamiento de las entalpías de formación y la no idealidad del sistema. En contrapartida, el modelo teórico reflejó una sensibilidad mayor a la presión parcial de CO_2 , lo que explica las diferencias observadas a presiones menores de 10 atm.

A nivel de diseño, se adoptaron como condiciones base una temperatura de operación de $550\text{ }^\circ\text{C}$, una presión de 10 atm y una eficiencia de captura del 90 %, en concordancia con valores reportados en la literatura para el sistema $\text{Li}_4\text{SiO}_4\text{-CO}_2$. A partir de dichas condiciones se estableció el dimensionamiento del lecho, considerando un tiempo de operación de una hora, una porosidad del 40 % y una masa total del sorbente de 3.55×10^6 kg. El cálculo del volumen total de lecho ($\approx 797\text{ m}^3$) permitió determinar las condiciones geométricas para diferentes configuraciones de torres. Se verificó que la elección de la velocidad superficial del gas de 0.5 m/s ofrece un equilibrio adecuado entre la eficiencia del proceso y las pérdidas de carga, resultando en una caída de presión de 1836 Pa/m para partículas de 10 mm de diámetro, dentro de los valores aceptables de diseño industrial para lechos empacados. El análisis de escalamiento permitió comparar alternativas con 20, 40 y 100 torres, todas manteniendo constante el volumen total de lecho. Los resultados mostraron que, aunque el número de torres no modifica el tiempo de residencia teórico del gas (≈ 5.28 s), sí condiciona la distribución del flujo, la estabilidad estructural, la superficie a aislar y los costos de instalación y mantenimiento. En particular:

100 torres: ofrecen alta redundancia operativa, pero incrementan considerablemente el número de conexiones, válvulas y puntos de mantenimiento, lo que eleva el costo y complica la puesta en marcha.

20 torres: simplifican la instalación y reducen la superficie total a aislar, pero aumentan la criticidad de cada equipo individual y requieren mayores espesores estructurales y equipos de izaje más complejos.

40 torres: resultan la alternativa más equilibrada, combinando redundancia suficiente con costos constructivos y operativos razonables. Esta configuración permite mantener una relación $H/D \approx 0.85$ y $D/d_p \approx 77$, dentro de los límites recomendados para lechos estables y correlaciones válidas de caída de presión.

En términos mecánicos, el diseño seleccionado ($u = 0,5$ m/s, $d_p = 10$ mm, 40 torres) cumple con los criterios de estabilidad ($H/D < 3$), caída de presión total inferior al 10 % de la presión de operación y relación $D/d_p > 15$, asegurando la validez de las correlaciones de Ergun y minimizando efectos de pared. No obstante, el tiempo de residencia obtenido (≈ 5 s) se encuentra en el extremo inferior del rango reportado para procesos de captura con sólidos reactivos, lo que sugiere que la eficiencia real de captura podría verse limitada si la cinética de carbonatación es lenta o difusionalmente controlada. En este sentido, se recomienda contrastar los resultados con estudios cinéticos específicos para el sistema $\text{Li}_4\text{SiO}_4\text{-CO}_2$ a 550°C , a fin de validar la suficiencia del tiempo de contacto o, en caso necesario, ajustar la velocidad del gas o la altura del lecho. Desde una perspectiva económica y operativa, el diseño adoptado representa un compromiso entre inversión inicial y costos de operación. Si bien velocidades más bajas reducirían el consumo energético asociado al bombeo, implicarían mayores áreas de sección y un número superior de torres, incrementando los costos estructurales y de aislamiento térmico. Por otro lado, velocidades mayores reducirían el número de equipos, pero elevarían la caída de presión y los requerimientos energéticos. La velocidad de $0,5$ m/s se presenta, por tanto, como una condición intermedia que asegura estabilidad operativa, factibilidad constructiva y pérdidas de carga razonables. El aislamiento térmico, cuyo costo escala directamente con la superficie externa total, se dejó sujeto a un análisis económico futuro, dado que constituye un componente de alto impacto en plantas de múltiples columnas.

En conclusión, el diseño resultante 40 torres, 3.10 m de diámetro, 2.64 m de altura de lecho, partículas de 10 mm y velocidad de 0.5 m/s se considera técnicamente viable y coherente con los fundamentos de la ingeniería de procesos gas-sólido, aunque su desempeño final dependerá de la validación cinética y económica. Más que una configuración

definitiva, este diseño constituye una base de referencia sólida para estudios posteriores de optimización, permitiendo proyectar el comportamiento del sistema en condiciones reales de operación y orientar futuras decisiones sobre escalado, aislamiento y eficiencia energética. Finalmente, los análisis realizados permitieron cumplir satisfactoriamente con los objetivos planteados: recopilación de información bibliográfica, simulación del proceso y validación mediante cálculos analíticos. La implementación del modelo matemático posibilitó la evaluación comparativa entre distintos modelos de reactor de conversión y de equilibrio, identificando sus limitaciones y alcances en la representación del fenómeno reactivo. Asimismo, el estudio de la influencia de variables operativas como temperatura, presión y caudal de alimentación brindó una comprensión más profunda del comportamiento de la columna bajo diferentes condiciones de operación. Este trabajo constituye un avance hacia la comprensión y diseño de sistemas de captura de CO₂ basados en absorbentes sólidos, aportando una herramienta metodológica útil para futuras investigaciones y optimizaciones de este tipo de tecnologías.

GLOSARIO

- C_p : Capacidad calorífica específica ($\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)
- ΔC_p : Delta capacidad calorífica ($\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)
- K_{eq} : Constante de equilibrio (adimensional)
- p_{CO_2} : Presión parcial de CO_2 (atm)
- $p_{\text{CO}_2,eq}$: Presión parcial de CO_2 en equilibrio (atm)
- Q o \dot{Q} : Flujo de calor (MW)
- Q_{Abs} : Calor removido en absorción para mantener isotermita (MW)
- Q_{Des} : Calor requerido para regeneración del sólido (MW)
- Q_{th} : Energía térmica específica (MJ/kgCO_2 capturado)
- T_i : Temperatura inicial ($^{\circ}\text{C}$)
- T_t : Temperatura objetivo ($^{\circ}\text{C}$)
- u : Velocidad superficial del gas ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)
- G : Densidad de flujo másico ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$)
- D : Diámetro de columna (m)
- d_p : Diámetro de partícula (m)
- H : Altura del lecho (m)
- τ o t_s : Tiempo de residencia (s)
- ΔP : Caída de presión (Pa/m o atm)
- V_{lecho} : Volumen total del lecho (m^3)
- \dot{m}_{CO_2} : Flujo másico total de CO_2 ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$)
- $\dot{m}_{\text{CO}_2,cap}$: Flujo másico de CO_2 capturado ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$)
- $\dot{m}_{flue\ gas}$: Flujo másico del gas de combustión ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$)

Letras griegas

- ε : Porosidad del lecho (fracción adimensional)
- η : Eficiencia neta de planta (%)
- λ : Fracción de gas comprimido usado para enfriamiento
- ρ : Densidad ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)
- Δ : Diferencia (entalpía, presión, etc.)

Abreviaciones y acrónimos técnicos

- CCUS: Carbon Capture, Utilization and Storage
- CCS: Carbon Capture and Storage
- NGCC: Natural Gas Combined Cycle
- MEA: Monoetanolamina
- MDEA: Metildietanolamina
- Aspen HYSYS: Software de simulación de procesos
- PR: Peng-Robinson (ecuación de estado)
- SRK: Soave-Redlich-Kwong (ecuación de estado)
- TSA / PSA / ESA: Procesos de separación por oscilación térmica/presión/energía
- OFC: Oxy-Fuel Combustion
- HRSG: Heat Recovery Steam Generator
- ASME: American Society of Mechanical Engineers
- SPECCA: Specific Primary Energy Consumption per CO₂ Avoided.
- SEW: Specific Equivalent Work
- LHV: Lower Heating Value
- MSHE: Multi Stream Heat Exchanger

BIBLIOGRAFIA

1. Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), *Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the IPCC*. Cambridge, U.K.: Cambridge Univ. Press, 2021.
2. P. Friedlingstein, M. O'Sullivan, M. W. Jones, R. M. Andrew, J. Hauck, P. Landschützer, C. Le Quéré, H. Li, I. T. Lujikx, A. Olsen, G. P. Peters, W. Peters, J. Pongratz, C. Schwingshackl, S. Sitch, J. G. Canadell, P. Ciais, R. B. Jackson, S. R. Alin, ..., J. Zeng, Global Carbon Budget, 2024, <https://doi.org/10.18160/GCP-2024>
3. ENARGAS, "Datos de consumo y producción de gas natural en Argentina," Ente Nacional Regulador del Gas, s.f. [En línea]. Disponible en: <https://www.enargas.gob.ar/>
4. CAMMESA, "Datos de generación y demanda del sistema eléctrico argentino," 2023. [En línea]. Disponible en: <https://www.cammesa.com>
5. U.S. EPA, "Power Sector Evolution," s.f. [En línea]. Disponible en: <https://www.epa.gov/power-sector/power-sector-evolution>
6. Nelson, T. O., Kataria, A., Mobley, P., Soukri, M., & Tanthana, J. (2017). Post-combustion CO₂ capture integration in natural gas combined cycle power plants: Technical and economic considerations. In Proceedings of the TPCC Conference. DOI: [10.6731/TPCC_proceedings.003b-001-R5-00009062](https://doi.org/10.6731/TPCC_proceedings.003b-001-R5-00009062).
7. International Energy Agency (IEA), "Natural Gas," 2023. [En línea]. Disponible en: <https://www.iea.org/energy-system/fossil-fuels/natural-gas>
8. International Energy Agency (IEA), *Energy Technology Perspectives 2020: CCUS in Clean Energy Transitions*. Paris, France: IEA, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://www.iea.org/reports/ccus-in-clean-energy-transitions>
9. International Energy Agency (IEA), "Tracking Carbon Capture Utilisation and Storage," 2023. [En línea]. Disponible en: <https://www.iea.org/energy-system/carbon-capture-utilisation-and-storage>
10. T. G. Zijlema, G. Witkamp, and G. M. van Rosmalen, "Specific heats and enthalpies of mixing of amine–H₂O and amine–H₂O–NaCl mixtures," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 44, no. 6, pp. 1335–1337, 1999, doi: 10.1021/je9900878.
11. S. K. Dhoke *et al.*, "Advances in CO₂ capture using solid adsorbents: A review," *Chem. Eng. J.*, 2021, doi: [10.1016/j.cej.2021.129613](https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.129613).
12. Q. Chen, A. Rao, and S. Samuelsen, "Solid sorbent post-combustion CO₂ capture in subcritical PC power plant," in *Proc. ASME 2015 9th Int. Conf. Energy Sustainability (ES2015-49483)*, San Diego, CA, USA, Jun.–Jul. 2015, doi: 10.1115/ES2015-49483.

13. R. Shaw and S. Mukherjee, "The development of carbon capture and storage (CCS) in India: A critical review," *Carbon Capture Sci. Technol.*, vol. 2, p. 100036, 2022, doi: 10.1016/j.ccst.2022.100036.
14. D. Berstad, R. Anantharaman, R. Blom, K. Jordal, and B. Arstad, "NGCC post-combustion CO₂ capture with Ca/carbonate looping: Efficiency dependency on sorbent properties, capture unit performance and process configuration," *Int. J. Greenhouse Gas Control*, vol. 24, pp. 43–53, 2014, doi: 10.1016/j.ijggc.2014.02.015.
15. C. da S. Cachola, M. Ciotta, A. A. dos Santos, and D. Peyerl, "Deploying of the carbon capture technologies for CO₂ emission mitigation in the industrial sectors," *Carbon Capture Sci. Technol.*, vol. 7, p. 100102, 2023, doi: 10.1016/j.ccst.2023.100102.
16. G. T. Rochelle, "Amine scrubbing for CO₂ capture," *Science*, vol. 325, no. 5948, pp. 1652–1654, 2009, doi: 10.1126/science.1176731.
17. R. S. Haszeldine, "Carbon capture and storage: How green can black be?," *Science*, vol. 325, no. 5948, pp. 1647–1652, 2009, doi: 10.1126/science.1172246.
18. J. R. Fernández and J. C. Abanades, "Reactor design for sorption-enhanced reforming using Ca–Cu chemical loops," in *Advances in Chemical Engineering*, vol. 51, E. G. Derouane, Ed. Elsevier, 2017, pp. 207–260, doi: 10.1016/bs.ache.2017.07.003.
19. M. L. Grasso, P. Arneodo Larochette, and F. C. Gennari, "CO₂ capture properties of Li₄SiO₄ after aging in air at room temperature," *J. CO₂ Util.*, vol. 38, pp. 232–240, 2020, doi: 10.1016/j.jcou.2020.02.002.
20. L. A. Salazar Hoyos, B. M. Faroldi, and L. M. Cornaglia, "K-doping effect in the kinetics of CO₂ capture at high temperature over lithium silicates obtained from rice husks: In situ/operando techniques," *Ceram. Int.*, vol. 47, no. 2, pp. 1558–1570, 2021, doi: 10.1016/j.ceramint.2020.08.269.
21. T. Tanaka, E. Tabata, T. Nakagaki, M. Mizunuma, and Y. Maruo, "Numerical analysis for CO₂ absorption and regeneration behavior in porous solid sorbent by modified unreacted-core model," *J. Chem. Eng. Japan*, vol. 47, no. 6, pp. 561–568, 2014, doi: 10.1252/jcej.13we310.
22. M. B. I. Chowdhury, M. R. Quddus, and H. I. de Lasa, "CO₂ capture with a novel solid fluidizable sorbent: Thermodynamics and temperature-programmed carbonation–decarbonation," *Chem. Eng. J.*, vol. 232, pp. 139–148, 2013, doi: 10.1016/j.cej.2013.07.044.
23. Sreenivasulu, D. V. Gayatri, I. Sreedhar, and K. V. Raghavan, "A journey into the process and engineering aspects of carbon capture technologies," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 41, pp. 1324–1350, 2015, doi: 10.1016/j.rser.2014.09.029.
24. R. H. Perry and D. W. Green (Eds.), *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, 8th ed. New York, NY, USA: McGraw-Hill, 2008.

25. J. M. Coulson, J. F. Richardson, and R. K. Sinnott, *Chemical Engineering, Vol. 6: Chemical Engineering Design*, 4th ed. Oxford, U.K.: Elsevier/Butterworth-Heinemann, 2005.
26. Saleh, E. Sanchez Fernandez, M. M. Maroto-Valer, and S. Garcia, "Conceptual design for integrating lithium-based carbon capture looping systems into natural gas combined cycle power plants," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 58, no. 32, pp. 14975–14990, 2019, doi: 10.1021/acs.iecr.9b00752
27. R. García, M. M. Maroto-Valer, and M. J. Fernández-Torres, "Comparative techno-economic analysis of chemical looping and amine-based post-combustion CO₂ capture systems in power plants," *Int. J. Greenhouse Gas Control*, vol. 63, pp. 148–161, 2017, doi: 10.1016/j.ijggc.2017.05.017.
28. E. F. Rincón Ocampo and R. J. Mejía Díaz, "Simulación en Aspen HYSYS del proceso de captura de CO₂ con mezclas de monoetanolamina (MEA) y líquidos iónicos," Trabajo de Grado, Univ. Industrial de Santander, 2022. [En línea]. Disponible en: <https://noesis.uis.edu.co/items/5e57e58f-0484-4b1b-a715-7db9015a7117>
29. NIST, "Lithium carbonate," *NIST Chemistry WebBook*, SRD-69. [En línea]. Disponible en: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C554132>
30. O. N. Koroleva, M. V. Shtenberg, V. A. Bychinsky, A. A. Tupitsyn, and K. V. Chudnenko, "Methods for calculating and matching thermodynamic properties of silicate and borate compounds," *Bull. South Ural State Univ., Ser. Chem.*, vol. 9, no. 1, pp. 39–48, 2017, doi: 10.14529/chem170105.
31. G. Dixon, "Ergun-type equations for fixed beds of spherical particles," *AIChE J.*, vol. 34, no. 9, pp. 1671–1673, 1988, doi: 10.1002/aic.690340921.
32. DOE/NETL, *Carbon Dioxide Capture Handbook*. Pittsburgh, PA, USA: National Energy Technology Laboratory, U.S. Dept. of Energy, 2015. Disponible en: <https://www.netl.doe.gov/>
33. P. S. Belzunce, J. Francesconi, F. Gennari, and M. L. Rodríguez, "Enhancing reactive absorption in lithium-based looping systems: Energy integration and compression strategies for efficient CO₂ capture," *Energy & Fuels*, **in press**, 2025, doi: 10.1021/acs.energyfuels.5c00883.
34. Y. Wen and Y. H. Yu, "A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity," *AIChE J.*, vol. 12, no. 3, pp. 610–612, 1966, doi: 10.1002/aic.690120343.
35. D. Kunii and O. Levenspiel, *Fluidization Engineering*, 2nd ed. Boston, MA, USA: Butterworth-Heinemann, 1991.
36. J. L. Bravo and J. R. Fair, "Generalized correlations for mass transfer and pressure drop in packed columns," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 31, no. 7, pp. 1624–1632, 1992, doi: 10.1021/ie00006a022.

37. López-Ortiz, A., & Pfeiffer, H. (2011). Experimental and modeling kinetic study of the CO₂ absorption by Industrial & Engineering Chemistry Research, 50(14), 8459–8467. doi.org