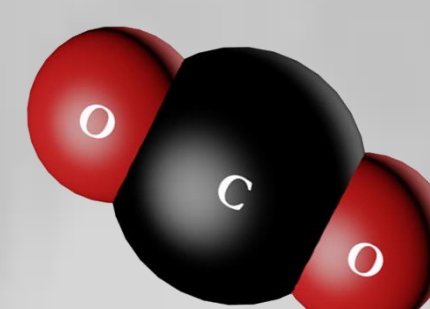
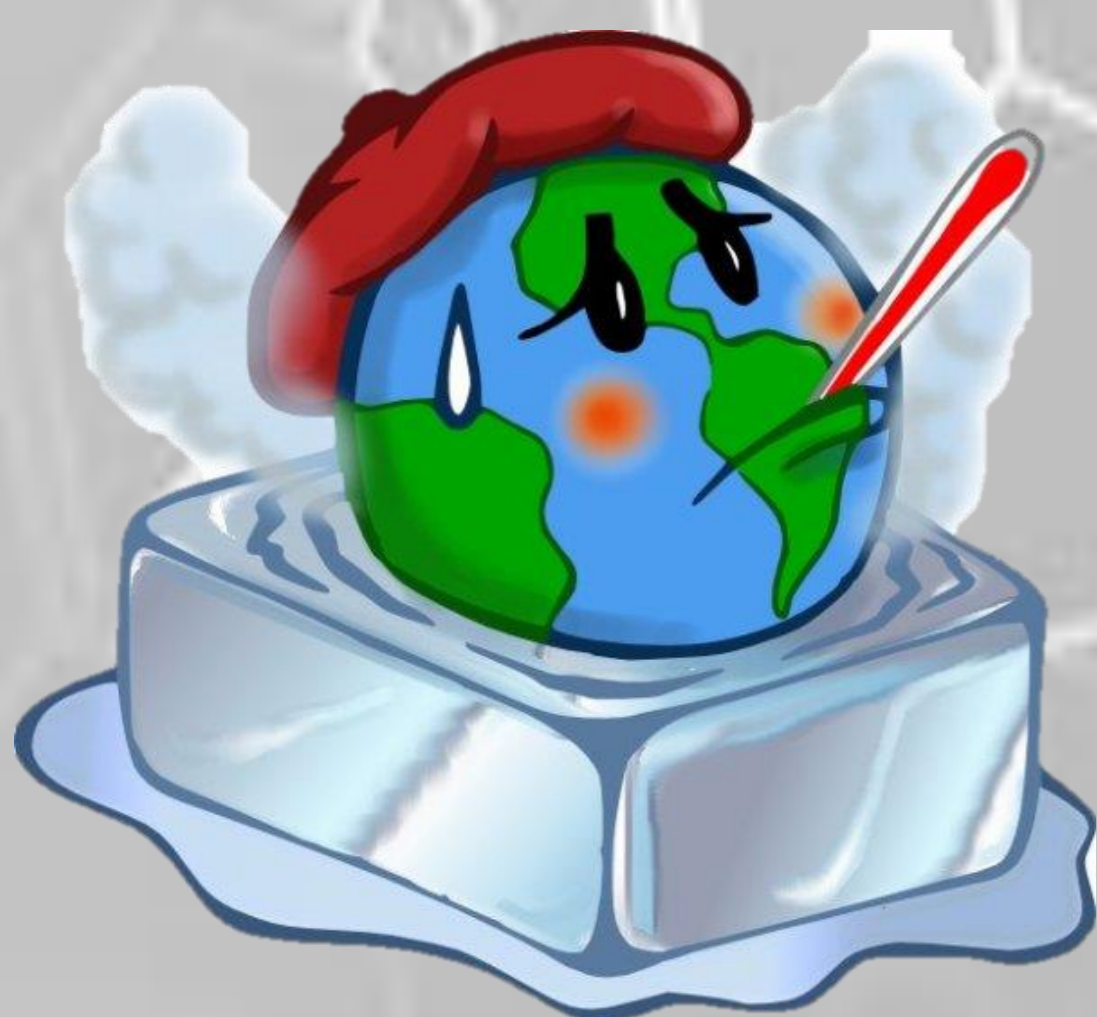


DIPA

AMP



DEA



INTRODUCCIÓ

La preocupació sobre l'escalfament global ha motivat extensa investigació i desenvolupament de la tecnologia adequada per capturar el CO₂ procedents de grans fonts d'emissió de CO₂ per mitigar el problema de l'escalfament global [1]. Dissolvents de CO₂ basats en amines són els més estudiats absorbents per a la captura de CO₂ per absorció [2]. Per calcular el procés de captura cal disposar d'un model fiable de l'equilibri del diòxid de carboni gas amb l'alcanolamina aquosa. En el present estudi es proposa un model simple que s'aplica a moltes de les alcanolamines conegudes.

OBJECTIUS

Els objectius d'aquest projecte són els següents

- Revisió bibliogràfica de les dades experimentals d'equilibri vapor-líquid de l'absorció de diòxid de carboni.
- Obtenció d'un model simple mitjançant regressió multilínia
- Validació del model proposat amb les dades de la literatura

MATERIALS I MÈTODES

Propietats físiques significatives de alcanolamines

Propietats	AMP	MAE	MDEA	DEA
Nom químic	2-Amino-2-metil-1-propanol	N-metil-2-etanolamina	Metil dietanolamina	Dietanolamina
Nº CAS	124-68-5	109-83-1	105-59-9	111-42-2
Fórmula molecular	C ₄ H ₁₁ NO	C ₃ H ₉ NO	C ₄ H ₁₁ NO ₂	C ₃ H ₉ NO ₂
Fórmula estructural	<chem>CC(C)(O)N</chem>	<chem>CNCCO</chem>	<chem>CNCCOCCO</chem>	<chem>CNCCOCCO</chem>
Propietats	TEA	PZ	DIPA	DGA
Nom químic	Trietanolamina	Piperazina	Diisopropanolamina	Diglicolamina
Nº CAS	102-71-6	110-85-0	110-97-4	929-06-6
Molecular formula	C ₆ H ₁₅ NO ₃	C ₄ H ₁₀ N ₂	C ₆ H ₁₅ NO ₂	C ₄ H ₁₁ NO ₂
Fórmula estructural	<chem>CN(CCO)CCO</chem>	<chem>C1CCNCC1</chem>	<chem>CN(C)CCO</chem>	<chem>CNCCOCCO</chem>

Font: Kumar and Kundu,, 2012

Paràmetres del model proposat

1. Carregant CO₂ / Alcanolamines (α):

$$\alpha = \frac{\text{mols CO}_2}{\text{mols alcanolamines}}$$

2. Pressió parcial de CO₂:

$$\text{Pressió parcial} = \frac{\text{CO}_2 \text{ vapor (mol)}}{\text{Vapor Total (mol)}} \times \text{Pressió general}$$

3. Regressió multilínia:

$$X = \alpha, T (K), \% w/w *$$

$$Y = \text{LN}(P)$$

* Percentatge en pes de la alcanolaminadica

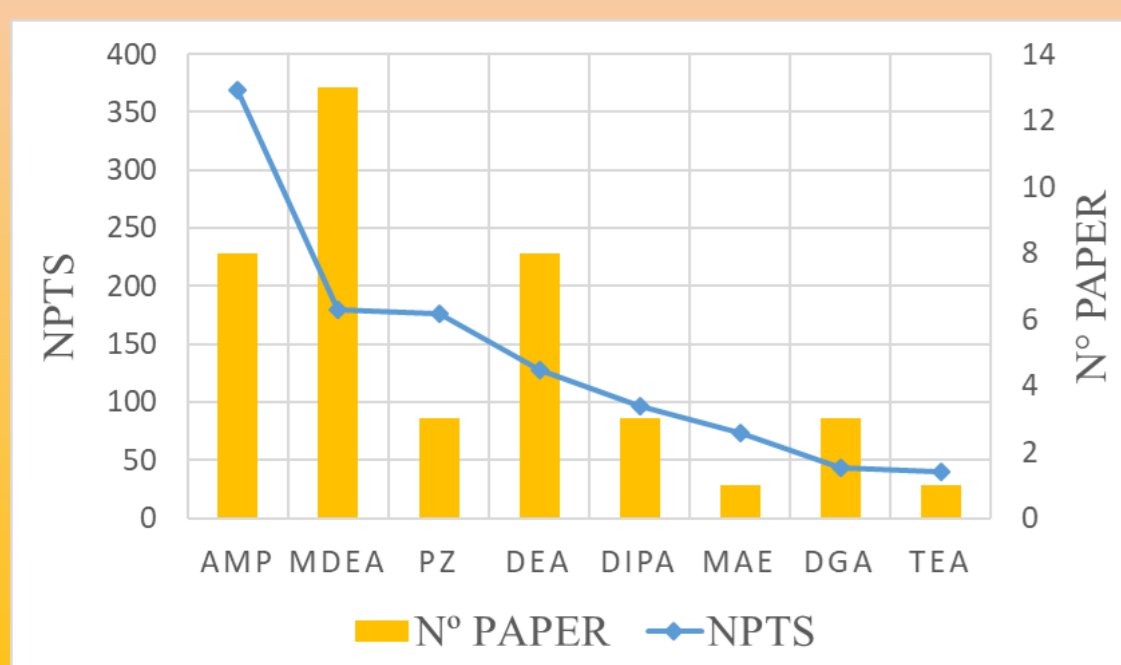
4. Proposta de l'equació del model matemàtic:

$$\text{LN PCO}_2 = \text{Intersection} + X_1(\alpha) + X_2\left(\frac{1}{RT}\right) + X_3(\%w/w)$$

Aquesta equació s'adapta a dades experimentals de la literatura

MATERIALS I MÈTODES

Revisió bibliogràfica



NPTS indica el nombre de punts

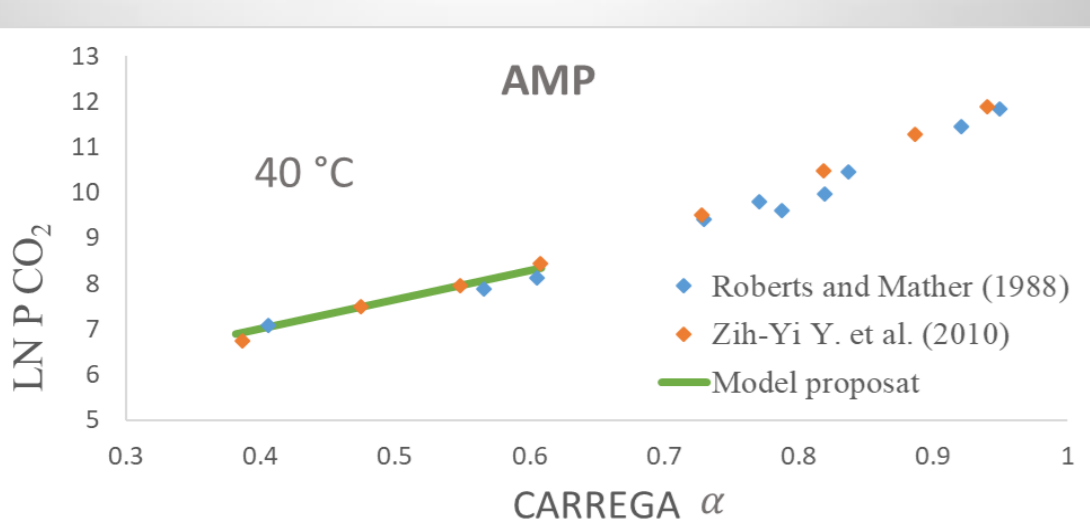
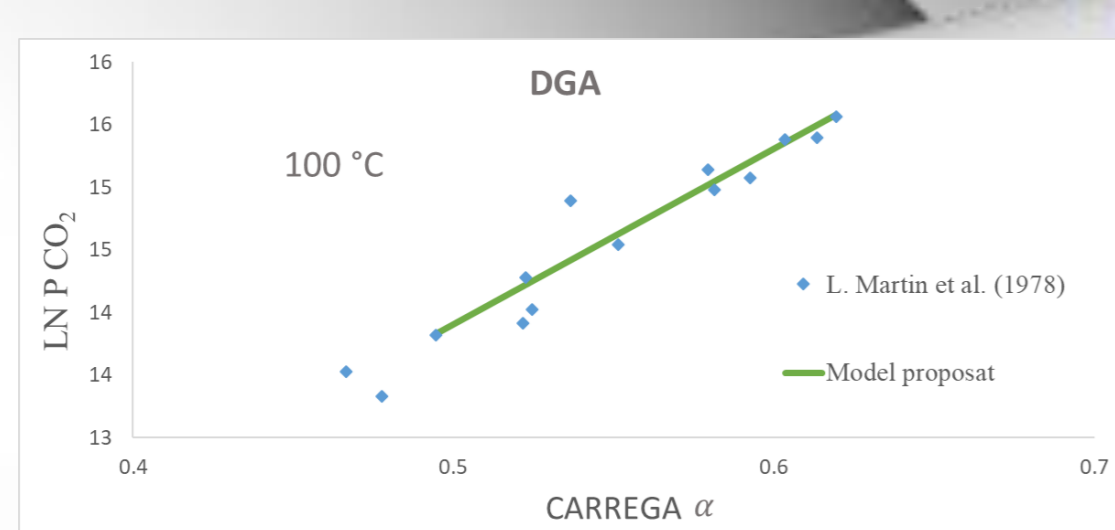
Les reaccions químiques més importants en l'equilibri d'absorció del diòxid de carboni

Procés	Equació
Reacció d'ionització d'aigua	$H_2O \rightarrow H^+ + OH^-$
Dissolució de CO ₂ a l'aigua	$CO_2 + H_2O \rightarrow HCO_3^- + H^+$
Protonació de l'amina	$RNH_2 + H^+ \rightarrow RNH_3^+$
Formació de carbamat	$RNH_2 + CO_2 \rightarrow RNHCOO^- + H^+$

RESULTATS I DISCUSSI

Regressió multilínia DGA

Descripció	Valor
Intercepció	22,31
Variable X 1	13,87
Variable X 2	-30789,91
Variable X 3	-0,10
Coefficient de correlació	0,94



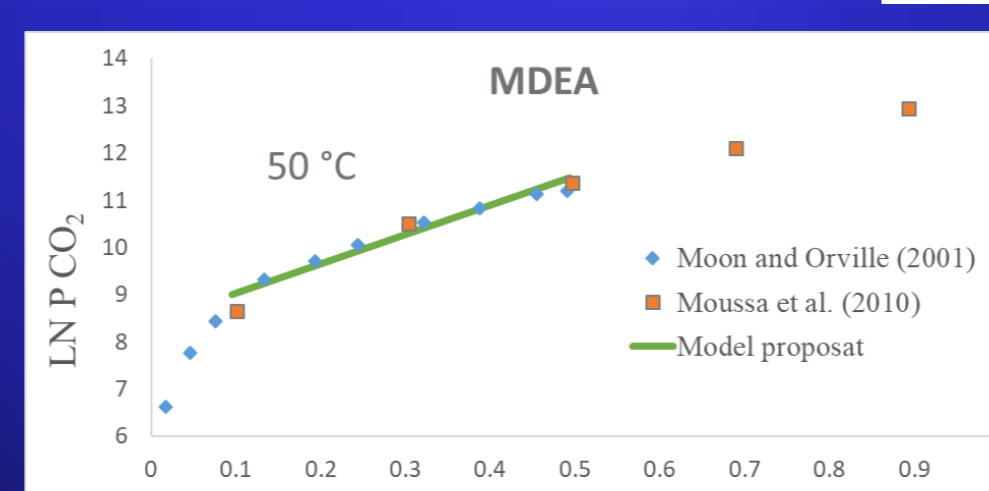
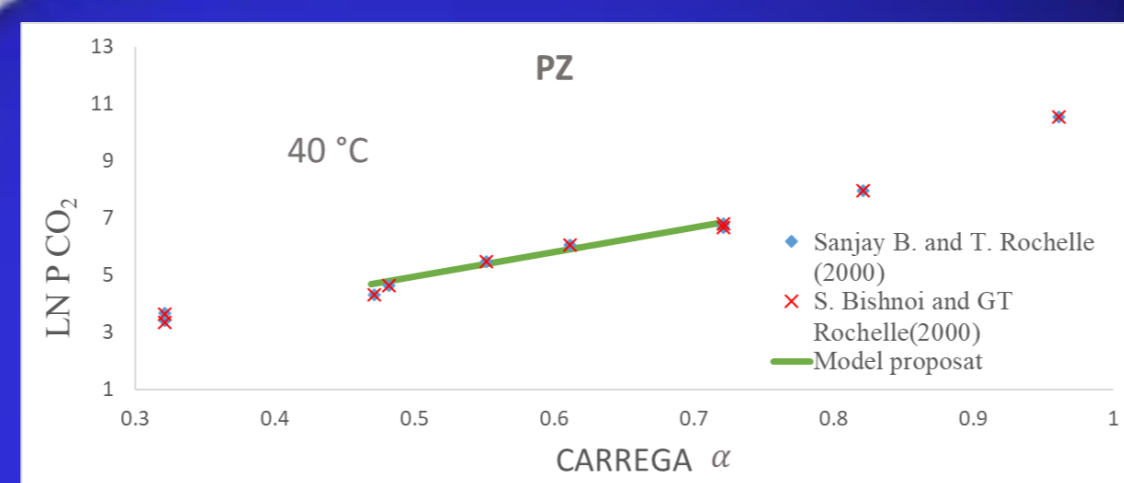
Regressió multilínia AMP

Descripció	Valor
Intercepció	32,01
Variable X 1	7,04
Variable X 2	-73908,58
Variable X 3	0,04
Coefficient de correlació	0,95

Regressió multilínia PZ

Regressió multilínia MDEA

Descripció	Valor
Intercepció	28,01
Variable X 1	6,46
Variable X 2	-56790,14
Variable X 3	0,03
Coefficient de correlació	0,89



Regressió multilínia MDEA

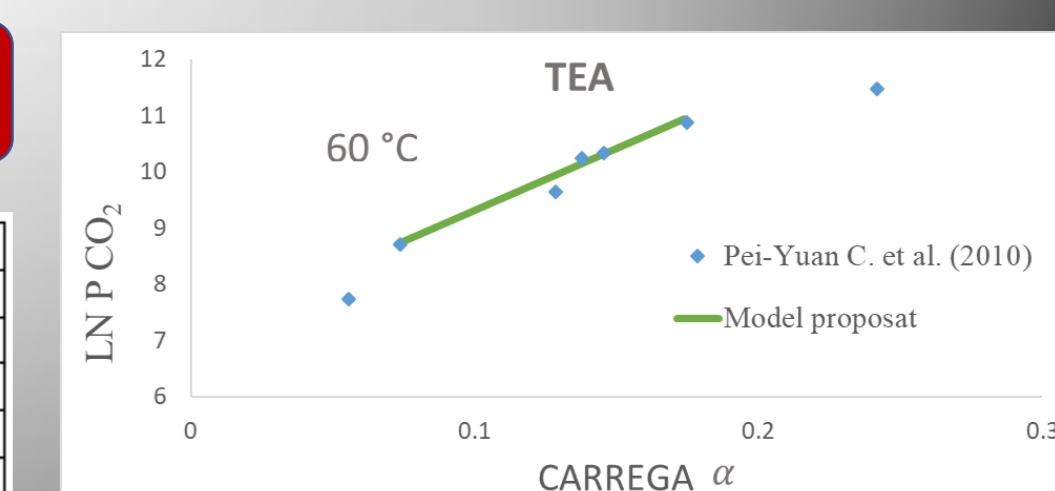
Descripció	Valor
Intercepció	28,01
Variable X 1	6,46
Variable X 2	-56790,14
Variable X 3	0,03
Coefficient de correlació	0,89

Regressió multilínia DEA

Regressió multilínia TEA

Regressió multilínia TEA

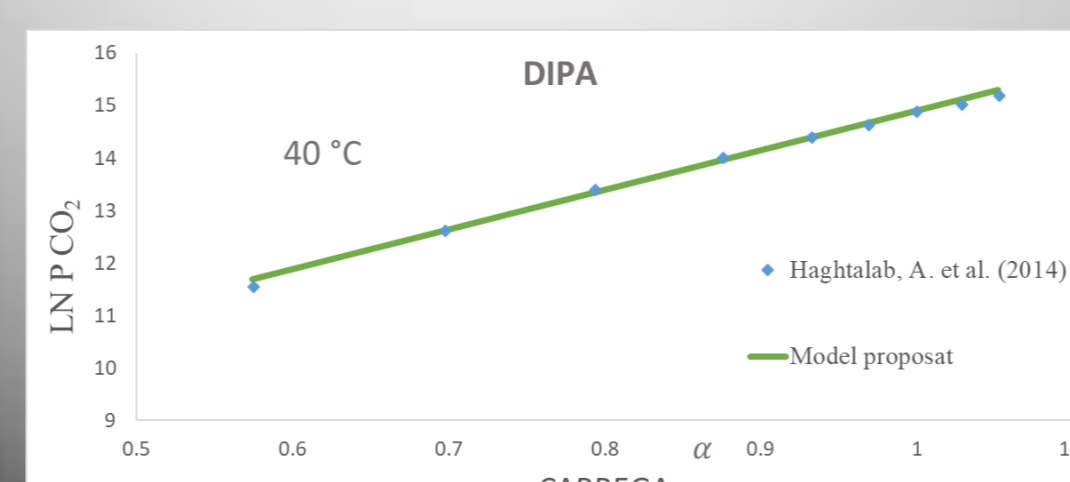
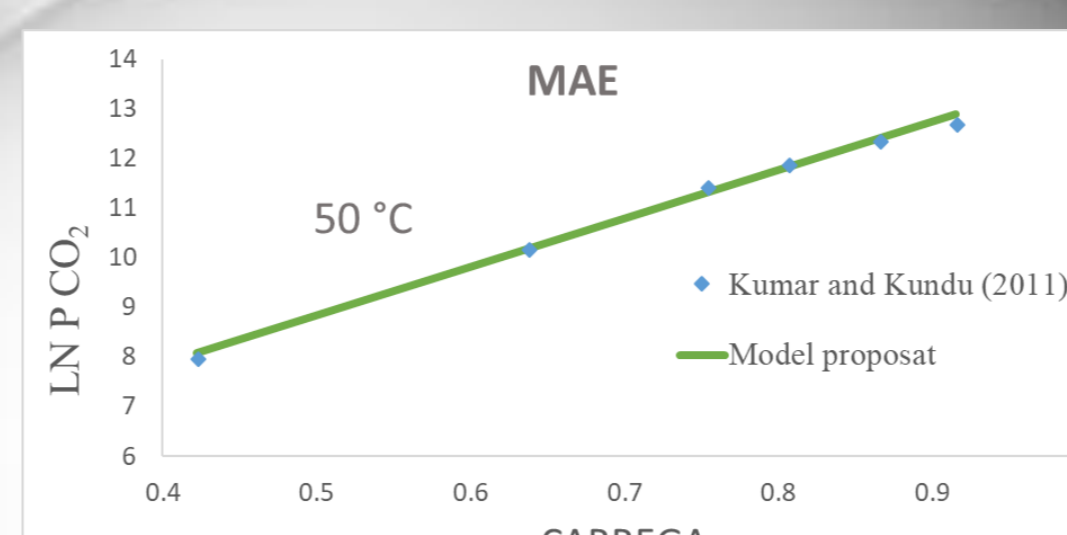
Descripció	Valor
Intercepció	20,01
Variable X 1	10,74
Variable X 2	-35969,63
Variable X 3	0,03
Coefficient de correlació	0,84



Regressió multilínia MAE

Regressió multilínia DIPA

Descripció	Valor
Intercepció	22,34
Variable X 1	8,23
Variable X 2	-46068,18
Variable X 3	0,05
Coefficient de correlació	0,98



CONCLUSIONS

- L'objectiu de l'estudi no és el disseny i optimització de la columna d'absorció, és generar un model simplificat i comparar les dades experimentals en diferents condicions d'operació.
- El model proposat proporciona una bona regressió de totes les dades experimentals.
- El CO₂ de càrrega es fa funcionar en intervals o rangs que presenten el pendent més baixa, si es vol treballar en càrregues superiors, es requereix un gran augment de la pressió per obtenir un petit augment de CO₂.
- La correlació exacta entre el comportament d'equilibri CO₂ en solucions aquoses de alcanolamines proporciona una eina per a millors simulacions de processos per reduir costos, millor disseny de la columna d'absorció, així com un millor rendiment de la planta.

REFERÈNCIES

- [1] International Energy Outlook. 2010. <<http://www.eia.doe.gov/oi/af/ieo/pdf/>>.
- [2] Aronu, E., Gondal, S., Hessen, E., Haug-Warberg, T., Hartono, A., Hoff, K., Svendsen, H. 2011, 66, 6393-6406.
- [3] Kumar, G., Kundu, M. 2012, 90 (3), 627-630.

