

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **3 008 575**

51 Int. Cl.:

C01B 3/12 (2006.01)

B01D 53/047 (2006.01)

C01B 3/56 (2006.01)

C01B 32/50 (2007.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **13.09.2021** **PCT/EP2021/075133**

87 Fecha y número de publicación internacional: **17.03.2022** **WO22053692**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **13.09.2021** **E 21770273 (7)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **06.11.2024** **EP 4211071**

54 Título: **Proceso de desplazamiento de gas de agua mejorado por sorción para la formación de una corriente de producto de CO₂ y una corriente de producto de H₂**

30 Prioridad:

11.09.2020 EP 20195765

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

24.03.2025

73 Titular/es:

**NEDERLANDSE ORGANISATIE VOOR
TOEGEPAST-NATUURWETENSCHAPPELIJK
ONDERZOEK TNO (100.00%)
Anna van Buerenplein 1
2595 DA 's-Gravenhage, NL**

72 Inventor/es:

**JAMES, JEBIN DUTHIE;
SEBASTIANI, FRANCESCO;
VAN DIJK, HENDRICUS ADRIANUS JOHANNES y
BOON, JURRIAN**

74 Agente/Representante:

TOMAS GIL, Tesifonte Enrique

ES 3 008 575 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Proceso de desplazamiento de gas de agua mejorado por sorción para la formación de una corriente de producto de CO₂ y una corriente de producto de H₂

Campo de la invención

[0001] La presente invención se encuentra en el campo del tratamiento de gas de síntesis y se refiere a un proceso de desplazamiento de gas de agua mejorado por sorción (SEWGS) para la formación de una corriente de producto de CO₂ y una corriente de producto de H₂ que requiere mucho menos vapor que los procesos convencionales.

Estado de la técnica

[0002] Los sectores de alto consumo de energía, como las industrias del acero, el refinado y químicas, siguen siendo dependientes en gran medida de los combustibles fósiles y las materias primas, de modo que sigue siendo importante capturar y reutilizar el CO₂ liberado. El CO₂ no utilizado puede almacenarse de manera segura, por ejemplo, en campos de gas natural agotados del Mar del Norte. A largo plazo, las emisiones negativas de CO₂ pueden convertirse en el objetivo, que puede obtenerse, por ejemplo, almacenando el CO₂ liberado en el uso de biomasa. La reducción global en el CO₂ emitido a la atmósfera es uno de los principales desafíos en la sociedad actual, especialmente para industrias donde grandes cantidades de átomos de carbono permanecen como productos secundarios, que se emiten normalmente como CO₂.

[0003] El desplazamiento de gas de agua mejorado por sorción (SEWGS) se ha desarrollado para la conversión de CO en H₂ y CO₂, permitiendo la formación de una corriente de producto de CO₂ y una corriente de producto de H₂, donde el CO₂ se captura por medio de adsorción, y luego puede almacenarse o reutilizarse. Este proceso puede emplearse para purificar el gas H₂ en una mezcla de gas de síntesis que contenga CO y/o CO₂, para obtener una corriente de producto de H₂ y una corriente de subproducto donde los átomos de carbono entrantes se capturan en una corriente de CO₂. La corriente de producto de CO₂ puede someterse entonces a almacenamiento de CO₂ y, como tal, eliminar las emisiones de CO₂ a la atmósfera.

[0004] En la técnica, el suministro de vapor a alta presión en los procesos de producción de hidrógeno se hace más eficiente mediante un proceso de desplazamiento de gas de agua que comprende (i) un paso de reacción donde un gas de alimentación que comprende CO y H₂O se introduce en una columna de reactor de desplazamiento de gas de agua que contiene un material sorbente capaz de adsorber CO₂ y donde se recoge un gas producto que sale del reactor, (ii) un paso de aclarado donde se introduce vapor de agua a alta presión en la columna, (iii) uno o más pasos de igualación de presión donde la columna de alta presión se conecta a una columna en otro paso del ciclo a menor presión y que requiere represurización, (iv) un paso de depuración donde la presión en la columna se reduce a la presión de regeneración, (v) un paso de regeneración donde se introduce H₂O (es decir, un paso de purga) y se retira CO₂ del reactor, (vi) uno o más pasos de igualación de presión en los que la columna se represuriza con gas procedente de una columna a una presión más alta en otro paso del ciclo y que requiere despresurización, y (vii) un paso de represurización final en el que la presión en la columna se eleva hasta la presión del paso de reacción.

[0005] Los procesos SEWGS existentes operan económicamente bajo limitaciones de consumo de vapor. Por lo tanto, el diseño del ciclo de SEWGS implica minimizar el consumo de vapor durante las etapas de aclarado y purga mientras se consiguen especificaciones deseables del producto en términos de, por ejemplo, relación de captura de carbono (CCR), pureza de dióxido de carbono (CP), recuperación de H₂ (HR) y/o pureza de hidrógeno (HP). Se puede conseguir un CCR alto y un CP alto, pero generalmente a expensas de un cierto CAPEX (número de columnas SEWGS) y OPEX (consumo de vapor).

[0006] Los procesos de desplazamiento de gas de agua mejorado por separación (SEWGS) se conocen a partir del documento EP 3 604 210 A1 y Rick Reijers *et al.* ("SEWGS process for cycle optimization, Energy Procedia, vol. 4, páginas 1155-1161).

[0007] El documento WO 2010/059055 (EP 2362848) describe un proceso de desplazamiento de gas de agua con un paso de reacción, donde el paso de reacción comprende (a) proporcionar una mezcla de gas que comprende CO, H₂O y un componente de gas ácido a un reactor que contiene un adsorbente, y (b) someter la mezcla de gas a condiciones de reacción de desplazamiento de gas de agua para realizar la reacción de desplazamiento de gas de agua. El adsorbente usado en el documento WO 2010/059055 comprende un material de hidrotalcita promovido por álcali, y el componente de gas ácido comprende H₂S.

[0008] El documento EP 2739373 describe un proceso de desplazamiento de gas de agua (WGS) para la eliminación de gases ácidos por adsorción, y se basa en la desorción selectiva de gases ácidos adsorbidos de adsorbentes que se usan adecuadamente en tales procesos. En tales procesos que usan adsorbentes básicos, los componentes gaseosos ácidos tales como dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno terminan en la misma

corriente del producto (o efluente), lo que hace difícil la reutilización o purificación de estas corrientes. El documento EP 2739373 introdujo una eliminación selectiva y por pasos de especies ácidas gaseosas para adsorbentes usados para producir mezclas de gases deseables especialmente que contienen hidrógeno llevando a cabo un paso de depuración en dos pasos, obteniendo de este modo dos gases del producto diferentes. De esta manera, se puede eliminar una impureza (H_2S), de manera que se aumente la pureza de CO_2 (CP) en el gas producto final.

[0009] El documento WO 2013/122467 describe que el suministro de vapor a alta presión en un proceso de producción de hidrógeno puede hacerse más eficiente mediante un proceso de desplazamiento de gas de agua que comprende, en secuencia alternante (i) un paso de reacción donde un gas de alimentación que comprende CO y H_2O se introduce en un reactor de desplazamiento de gas de agua que contiene un material sorbente capaz de adsorber H_2O y CO_2 y donde se recoge un gas producto que sale del reactor, (ii) un paso de regeneración donde se retira CO_2 del reactor, (iii) un paso de carga, donde H_2O se introduce en el reactor, donde dicha mezcla de gas de alimentación tiene una relación molar de H_2O a CO por debajo de 1,2, y la etapa de carga se realiza a una presión inferior a la presión de la etapa de reacción.

[0010] Boon *et al.* (Chemical Engineering Science 122, 2015, 219-231) publicaron un artículo de investigación sobre el diseño del ciclo de adsorción por cambio de presión a alta temperatura para el desplazamiento de gas de agua mejorado por absorción. El artículo describe un proceso SEWGS que combina la reacción de desplazamiento de gas de agua con la adsorción in situ de CO_2 en hidrotalcita promovida por potasio y permite de ese modo la producción de H_2 caliente a alta presión a partir de gas de síntesis en una operación de una sola unidad. En este estudio, SEWGS se ejecuta como un proceso cíclico que comprende etapas de adsorción y aclarado a alta presión, combinadas con pasos de igualación de presión y purga a baja presión. Los autores han demostrado que durante el ciclo, el vapor se adsorbe en el paso de aclarado y se desorbe durante la reducción posterior de la presión, mejorando de este modo la pureza de CO_2 en la columna y mejorando la eficacia de la etapa de aclarado. Las simulaciones numéricas mostraron que la relación de captura de carbono depende principalmente de la relación entre el vapor de purga y la alimentación de carbono, mientras que la pureza del producto de CO_2 depende principalmente de la relación entre el vapor de aclarado y la alimentación de carbono. La optimización de los parámetros del proceso proporcionó un ciclo de SEWGS que consume significativamente menos vapor que los diseños de ciclo conocidos hasta entonces, y significativamente menos energía que las tecnologías de separación de CO_2 conocidas hasta entonces. La presente invención se refiere a un ciclo de SEWGS con CAPEX y/u OPEX reducidos para un rendimiento dado en términos de CCR y CP.

[0011] Sin embargo, sigue existiendo una necesidad general de mejorar aún más los procesos SEWGS existentes en términos de economía operativa, uso sostenible de recursos y coste general. Por ejemplo, sigue existiendo un desafío específico para lograr simultáneamente tanto un alto CCR como un alto CP en los procesos SEWGS con un uso de vapor sustancialmente más bajo, mientras se proporciona una corriente del producto de H_2 que es adecuada para procesos químicos e industriales adicionales. El proceso según la invención satisface esta necesidad.

Sumario de la invención

[0012] Por consiguiente, la invención proporciona un proceso de desplazamiento de gas de agua mejorado por sorción (SEWGS) para la formación de una corriente de producto de CO_2 y una corriente de producto de H_2 , donde el proceso comprende:

- (a) un paso de reacción, donde un gas de alimentación que comprende CO_x , donde $x = 1-2$, y H_2O se introduce en un reactor de SEWGS que contiene un catalizador y material sorbente capaz de adsorber CO_2 , formando de ese modo la corriente del producto de H_2 y un material sorbente cargado con CO_2 ;
- (b) un paso de aclarado, donde se introduce vapor en el reactor de SEWGS, estableciendo de este modo una presión entre 5 y 50 bares;
- (c) un paso de pre-depuración, donde la presión en el reactor de SEWGS se reduce para establecer una presión de depuración en el intervalo de 0,5 a 1,5 veces la presión parcial de CO y CO_2 en el gas de alimentación del paso (a);
- (d) un paso de depuración, donde la presión en el reactor de SEWGS se reduce a la presión de regeneración en el intervalo de 1 a 5 bares, liberando de este modo al menos parte del CO_2 del material sorbente cargado, formando de este modo la corriente de producto de CO_2 ; y
- (e) un paso de purga, donde se introduce vapor en el reactor de SEWGS, liberando de ese modo moléculas de CO_2 adicionales del reactor de SEWGS.

[0013] Los presentes inventores han descubierto que tanto una alta relación de captura de carbono (CCR) como una pureza de dióxido de carbono (CP) en los procesos SEWGS se pueden lograr con una cantidad significativamente reducida de vapor que los procesos convencionales, mientras se proporciona una corriente de producto de H_2 de alta pureza que es adecuada para procesos químicos e industriales adicionales, empleando un paso de pre-depuración, que se emplea antes de un paso de depuración. Durante el paso de pre-depuración, la presión en el reactor de SEWGS se reduce a una presión total en el intervalo de 5 a 50 bares.

[0014] El procedimiento según la invención incorpora, por tanto, un paso de pre-depuración en un proceso SEWGS, que representa un paso intermedio que permite la recogida de impurezas. El paso de pre-depuración también permite una mejora simultánea de la relación de captura de carbono (CCR) y la pureza del dióxido de carbono (CP) en el proceso SEWGS global con uso de vapor reducido. El paso de pre-depuración difiere de un paso de igualación de presión en que el gas liberado no se mantiene en el ciclo de igualación de presión, sino que, en su lugar, el gas liberado se recoge por separado.

Breve descripción de los dibujos

[0015] La presente invención se describirá con más detalle a continuación, con referencia a los dibujos adjuntos, en los que:

La Figura 1 representa la relación de captura de carbono (CCR) y la pureza del dióxido de carbono (CP) en un ciclo de SEWGS según la invención dependiendo de la presión de depuración empleada al final del paso de pre-depuración, simulada a un caudal de alimentación total de 3,42 kmol/h.

La Figura 2 representa la relación de captura de carbono (CCR) y la pureza del dióxido de carbono (CP) en un ciclo de SEWGS según la invención dependiendo de la presión de depuración empleada al final del paso de pre-depuración, simulada a un caudal de alimentación total de 1,71 kmol/h.

La Figura 3 demuestra el efecto de aumentar la introducción de corriente durante el aclarado, representado como S/C total, en la relación de captura de carbono (CCR) y la pureza del dióxido de carbono (CP) en un proceso sin paso de pre-depuración (puntos sólidos), en comparación con el proceso según la invención que comprende un paso de pre-depuración (puntos abiertos).

Descripción de formas de realización

[0016] La invención proporciona un proceso de desplazamiento de gas de agua mejorado por sorción (SEWGS) para la formación de una corriente intermedia, una corriente de producto de CO_2 y una corriente de producto de H_2 . Los inventores han descubierto que una optimización de la regeneración del reactor de SEWGS, después de que se haya realizado la reacción de desplazamiento de gas de agua, permite la formación de una corriente de producto de CO_2 sustancialmente puro y una corriente de producto de H_2 sustancialmente puro. Este paso de optimización reside en un paso de pre-depuración, donde la presión se reduce hasta cerca de la presión de regeneración. El gas de escape liberado del reactor durante el paso de pre-depuración se recoge por separado de la corriente de producto de CO_2 liberada del reactor durante el paso de depuración.

[0017] La presión de reacción es la presión durante el paso (a); la presión de pre-depuración es la presión a la que comienza el paso de pre-depuración; la presión de depuración es la presión a la que termina el paso de pre-depuración y comienza el paso de depuración; y la presión de regeneración es la presión al final del paso de depuración.

[0018] Más específicamente, el proceso según la invención comprende:

(a) un paso de reacción, donde un gas de alimentación comprende CO_x , donde $x = 1-2$, y H_2O se introduce en un reactor de SEWGS que contiene un catalizador y material sorbente capaz de adsorber CO_2 , formando de ese modo la corriente de producto de H_2 y un material sorbente cargado con CO_2 ;

(b) un paso de aclarado, donde se introduce vapor al reactor de SEWGS, estableciendo de este modo una presión entre 5 y 50 bares;

(c) un paso de pre-depuración, donde la presión en el reactor de SEWGS se reduce para establecer una presión de depuración en el intervalo de 0,5 a 1,5 veces la presión parcial de CO_x en el gas de alimentación del paso (a);

(d) un paso de depuración, donde la presión en el reactor de SEWGS se reduce a la presión de regeneración en el intervalo de 1 a 5 bares, liberando de este modo al menos parte del CO_2 del material sorbente cargado, formando de este modo la corriente de producto de CO_2 ; y

(e) un paso de purga, donde se introduce vapor al reactor de SEWGS, liberando de ese modo moléculas de CO_2 adicionales del reactor de SEWGS.

[0019] Los presentes inventores han descubierto que se puede lograr tanto una alta relación de captura de carbono (CCR) como una pureza de dióxido de carbono (CP) en los procesos SEWGS, mientras se proporciona una corriente de producto de H_2 que es adecuada para procesos químicos e industriales adicionales, empleando un paso de pre-depuración, que se emplea antes de un paso de depuración. Durante el paso de pre-depuración, la presión en el reactor de SEWGS se reduce para establecer una presión de depuración en el intervalo de 0,5 a 1,5 veces la presión parcial de CO y CO_2 en el gas de alimentación del paso (a). Por lo tanto, el paso de pre-depuración se caracteriza por una presión de depuración inicial disminuida en comparación con la presión de depuración del paso de depuración real, donde la presión en el reactor de SEWGS se reduce a la presión de regeneración que está entre 1 y 5 bares.

Paso (a): Reacción

[0020] En el paso (a), tiene lugar la reacción de desplazamiento de gas de agua. Un gas de alimentación que comprende CO_x , donde $x = 1-2$, y H_2O se introduce en un reactor de SEWGS que contiene un catalizador y material sorbente capaz de adsorber CO_2 . Las moléculas de CO_2 formadas durante la reacción de desplazamiento de gas de agua y/o presentes en la alimentación se absorben sobre el material sorbente, formando de este modo un material sorbente cargado con CO_2 . Normalmente, al comienzo del paso (a), el material sorbente contiene moléculas de agua adsorbidas. Durante el paso (a) se desorben moléculas de agua y se adsorben moléculas de CO_2 . Como tal, se elimina CO_2 de la mezcla de productos de la reacción de desplazamiento de gas de agua, empujando así el equilibrio hacia el lado del producto. El gas de escape del reactor durante el paso (a) contendrá por tanto H_2 y moléculas desorbidas, normalmente vapor.

[0021] Tales reacciones de desplazamiento de gas de agua mejoradas por sorción son conocidas en la técnica. El paso (a) se puede realizar de cualquier manera conocida en la técnica. El experto en la materia es capaz de seleccionar un material sorbente y catalizador apropiados, así como condiciones apropiadas para realizar la reacción de desplazamiento de gas de agua. En una forma de realización preferida, la reacción del paso (a) se realiza a una presión de reacción en el intervalo de 15-50 bares, preferiblemente en el intervalo de 20-30 bares, de la manera más preferible en el intervalo de 22-25 bares.

[0022] La alimentación comprende CO_x , donde $x = 1-2$ y H_2O , y normalmente comprende además H_2 . CO_x denota CO , CO_2 o mezclas de los mismos, y también puede denominarse "óxido de carbono", siendo CO y CO_2 las dos especies de óxido de carbono, o " CO y/o CO_2 ". El valor de x denota el número de átomos de oxígeno presentes por átomo de carbono en la fracción de óxido de carbono (es decir, $\text{CO} + \text{CO}_2$) de la materia prima, independientemente de cualquier átomo de oxígeno y/o carbono adicional que pueda estar presente en la materia prima. Por lo tanto, x está en el intervalo de 1-2, donde $x = 1$ indica CO puro y $x = 2$ indica CO_2 puro. Un valor intermedio para x indica que una mezcla de CO y CO_2 está presente en la materia prima, que puede determinar fácilmente el experto. Por ejemplo, cuando $x = 1,9$, 1,9 átomos de oxígeno están presentes por átomo de carbono, lo que significa que la relación molar de $\text{CO}:\text{CO}_2$ es 1:9. Asimismo, cuando $x = 1,5$, el $\text{CO}:\text{CO}_2$ la relación molar es 1:1.

[0023] El proceso según la invención funciona eficazmente utilizando una materia prima donde x es cualquier valor en el intervalo 1-2. En una forma de realización, la materia prima contiene CO , o en otras palabras $x < 2$, es decir, $1 \leq x < 2$. En una forma de realización, CO_2 puede ser la principal especie de óxido de carbono y x está cerca de 2, por ejemplo, $x = 1,3-2$, preferiblemente $x = 1,4-1,8$. En una forma de realización alternativa, el CO puede ser la principal especie de óxido de carbono y x está cerca de 1, por ejemplo, $x = 1-1,8$, preferiblemente $x = 1-1,5$, más preferiblemente $x = 1-1,2$, o incluso $x \approx$ aproximadamente 1.

[0024] Expresado de forma alternativa, la materia prima contiene 0-10 % en moles de CO y 0-80 % en moles de CO_2 , donde el contenido total de CO_x en la materia prima es al menos 2 % en moles, preferiblemente en el intervalo de 2-80 % en moles, más preferiblemente 2-60 % en moles. Preferiblemente, la materia prima contiene 2-8 % en moles de CO y 0-30 % en moles de CO_2 , donde el contenido total de CO_x en la materia prima está preferiblemente en el intervalo de 2-20 % en moles, más preferiblemente 3-10 % en moles.

[0025] Por lo tanto, puede estar presente una cierta cantidad de CO_2 en la alimentación. El H_2 y CO_2 no se transforma en el proceso según la invención, sino que termina en la corriente de producto de H_2 o la corriente de producto de CO_2 . La alimentación puede contener también otros componentes gaseosos que son inertes en la reacción según la invención, tales como gases inertes (por ejemplo, N_2 , Ar , CH_4 e hidrocarburos más grandes, como hasta C_4) y contaminantes procedentes del proceso industrial, como el gas de síntesis procedente del reformado o la gasificación de materias primas fósiles o biogénicas, de las que procede la alimentación (por ejemplo, H_2S , NO_x , etc.). Para la operación del procedimiento, especialmente para el paso de pre-depuración (c), es importante la presión parcial de la suma de CO y CO_2 (es decir, de CO_x) en la alimentación. Dado que todo el CO se convertirá en CO_2 durante el paso (a), esto representa la cantidad de CO_2 presente en el sistema y que se recogerá durante los pasos de regeneración (b)-(e). Los inventores descubrieron que el rendimiento del proceso, en términos de CCR y CP, era óptimo cuando la presión de depuración se elegía para estar cerca de la cantidad de CO_2 presente en el sistema, es decir, cerca de la presión parcial de CO_x en la alimentación del paso (a). Normalmente, la presión parcial de CO_x en la alimentación está en el intervalo de 1-50 bares, preferiblemente 2-20 bares, más preferiblemente 5-15 bares, de la manera más preferible aproximadamente 10 bares. Como tal, la mayoría del CO_2 seguirá estando en el reactor al comienzo del paso de depuración (d) y se recogerá en la corriente de producto de CO_2 , mientras que otros componentes e impurezas se eliminan en gran medida del sistema, principalmente en el gas de escape de pre-depuración.

[0026] El gas de escape del paso de reacción (a) forma la corriente de producto de H_2 , y contiene H_2 y moléculas desorbidas, y opcionalmente cualquier gas inerte que esté presente en la alimentación y definido en otra parte. La corriente de producto de H_2 puede someterse a purificación adicional, como la eliminación de las moléculas desorbidas. Por ejemplo, un paso de condensación podría eliminar ventajosamente las moléculas de agua desorbidas.

[0027] En algún punto, preferiblemente antes de la rotura de CO₂, el reactor se somete a una secuencia de regeneración, donde se regenera para someterse de nuevo al paso (a). Por lo tanto, se prefiere que el proceso de acuerdo con la invención opere en modo cíclico. La secuencia de regeneración implica los pasos (b)-(e). La regeneración puede denominarse adsorción por cambio de presión (PSA).

Paso (b): Aclarado

[0028] El paso de aclarado (b) es el primer paso de la secuencia de regeneración, donde se introduce vapor al reactor de SEWGS para establecer una presión entre 5 y 50 bares. En estas condiciones, las moléculas de agua se adsorben sobre el sorbente, mientras que las moléculas de CO₂ se desorben, liberando CO₂ en la fase gaseosa del reactor. Al comienzo del paso (b), el volumen gaseoso del reactor contendrá principalmente H₂ y posibles moléculas de CO₂ no adsorbidas.

[0029] Al principio del paso (b), el gas de escape puede contener predominantemente H₂ y puede recogerse opcionalmente junto con la corriente de producto de H₂ obtenida durante el paso (a). El experto en la materia puede determinar cuándo detener la recogida de la corriente de producto de H₂, y cambiar a la recogida separada del gas de escape. En una forma de realización preferida, el cambio a la recogida separada de gases de escape se realiza al inicio del paso (b), lo que es particularmente ventajoso en caso de que el reactor se cambie del paso (a) al paso (b) cerca de la rotura de CO₂.

[0030] Preferiblemente, el aclarado del paso (b) se realiza sustancialmente a la misma presión que la reacción del paso (a), aunque puede producirse un ligero cambio de presión (normalmente un ligero aumento) en vista de la introducción de vapor. La presión durante el paso (b) está normalmente en el intervalo de 20-50 bares, preferiblemente en el intervalo de 22-28 bares, más preferiblemente en el intervalo de 24-26 bares. La cantidad de vapor que se introduce en el reactor de SEWGS durante el paso de aclarado (b) puede reducirse en comparación con los procesos convencionales que no incluyen un paso de pre-depuración. La cantidad de vapor puede estar en el intervalo de 0,01-0,5 % en moles, preferiblemente 0,02-0,2 % en moles o incluso tan baja como 0,02-0,1 % en moles, basado en la cantidad de alimentación de CO_x durante el paso (a). Los inventores han obtenido resultados óptimos en términos de pureza de CO₂ y tasa de captura de carbono con tales bajas cantidades de vapor.

Paso (c): Pre-depuración

[0031] El proceso según la invención incorpora un paso de pre-depuración en un proceso SEWGS, que representa un paso intermedio que permite la recogida de impurezas antes del paso de depuración real. El paso de pre-depuración permite también de este modo una mejora simultánea de la relación de captura de carbono (CCR; es decir, la extensión de los átomos de carbono entrantes que se capturan como CO₂ en la corriente de producto de CO₂) y la pureza del dióxido de carbono (CP) en la corriente de producto de CO₂.

[0032] Durante el paso de pre-depuración, la presión dentro del reactor se reduce para establecer una presión de depuración en el intervalo de 0,5 a 1,5 veces la presión parcial de CO_x en el gas de alimentación del paso (a). La reducción de presión real lograda en el paso de pre-depuración puede variar dependiendo de la presión de partida después de los pasos de aclarado y despresurización opcional, y la presión parcial de CO_x en el gas de alimentación. Por ejemplo, la presión puede reducirse en 1-25 bares, preferiblemente en 2-8 bares, más preferiblemente en 3-5 bares. En vista de esta reducción de presión, el paso de depuración real comienza a una presión más baja en comparación con las secuencias de regeneración convencionales de un reactor de desplazamiento de gas de agua. El paso de pre-depuración difiere de un paso de despresurización en el contexto de la igualación de presión en que el gas liberado no se mantiene en el ciclo de igualación de presión, sino que en su lugar se recoge por separado, como un gas de escape de pre-depuración. El gas de escape de pre-depuración puede contener una combinación de algunos H₂ restantes todavía presentes en el reactor, H₂O no adsorbido, CO₂ desorbido y cualquier componente adicional (por ejemplo, gases inertes) que pueda estar presente en la alimentación y/o el gas de aclarado con vapor del paso (b). Por lo tanto, el gas de escape de pre-depuración es pobre en CO₂, pero rico en energía.

[0033] Una ventaja adicional sobre los procesos SEWGS existentes es que la incorporación del paso de pre-depuración no requiere ningún vapor de aclarado adicional y tampoco requiere ningún paso de igualación de presión adicional, ya que el paso de depuración real comienza a una presión más baja. Por lo tanto, el paso de pre-depuración es similar al paso de depuración en que el gas en el reactor de SEWGS se libera reduciendo la presión, sin usar un gas de purga. Una diferencia importante es que el gas liberado en el paso de pre-depuración y el gas liberado en el paso de depuración se recogen por separado. El paso de pre-depuración tiene la ventaja de que el gas producto del paso de depuración es de mejor calidad, es decir, tiene un CP más alto, y proporciona adicionalmente un control aumentado de la presión exacta a la que se realiza el paso de depuración. En vista del paso de pre-depuración, el procedimiento de acuerdo con la invención no necesita emplear múltiples pasos de depuración, sino que en su lugar usa un paso de pre-depuración y el paso de depuración real, que es técnicamente más simple de realizar, y con la ventaja adicional de un mayor control de la presión de partida del

paso de depuración. En una forma de realización, los gases de escape de pre-depuración y depuración se recogen en el mismo lado de la columna, por ejemplo, en el lado superior. En otras palabras, los pasos de pre-depuración y depuración se realizan preferiblemente en paralelo, preferiblemente en la dirección de la alimentación. Como tal, la manipulación separada de ambos gases se realiza convenientemente mediante la simple conmutación de una válvula desde una primera posición configurada para recoger el gas de escape de pre-depuración a una segunda posición configurada para recoger el gas de escape de depuración. Como tal, ambos gases de escape pueden conducir eficientemente a su manipulación adicional apropiada, como se explica más adelante.

[0034] Normalmente, el paso de pre-depuración está precedido por uno o más pasos de despresurización. Estos se emparejan normalmente con pasos de presurización que pueden ocurrir después del paso de purga, como parte de uno o más pasos de igualación de presión. El experto en la materia está familiarizado con los pasos de igualación de presión en el contexto de una secuencia de regeneración de adsorción por oscilación de presión. Ventajosamente, la pureza del carbono puede mejorarse introduciendo pasos de igualación de la presión que efectúen la despresurización del reactor de SEWGS directamente después del paso de aclarado (b) que lleva a una presión de depuración inicial disminuida. Generalmente, una alta presión de depuración, es decir, la presión a la que comienza el paso de depuración y la recogida de la corriente de producto de CO₂, provoca una cantidad relativamente mayor de impurezas en la corriente de producto de CO₂, que dificulta la captura adecuada de CO₂. Además, cualquier molécula de H₂ que termine en la corriente de producto de CO₂ reduce el rendimiento de H₂ del proceso.

[0035] Durante el paso de pre-depuración, la presión dentro del reactor se reduce, normalmente en 2-8 bares, preferiblemente en 3-5 bares. El paso de pre-depuración comienza normalmente a una presión en el intervalo de 5-20 bares, preferiblemente en el intervalo de 8-16 bares, a la que se libera gas a presión del reactor y se recoge por separado como un gas de escape de pre-depuración. Durante la pre-depuración, no entra gas en el reactor y toda la liberación de gas está causada por la liberación de presión. A una cierta presión, la presión de depuración, la recogida de gases de escape se conmuta y se recoge la corriente de producto de CO₂. Este evento marca el cambio del paso de pre-depuración al paso de depuración. La presión de depuración está normalmente en el intervalo de 0,5-1,5 veces la presión parcial de CO_x en el gas de alimentación del paso (a), preferiblemente en el intervalo de 0,8-1,2 veces la presión parcial de CO_x en el gas de alimentación. Se prefiere especialmente que la presión de depuración sea aproximadamente igual a la presión parcial de CO_x en el gas de alimentación. Por lo tanto, en caso de que el gas de alimentación del paso (a) contenga 2 bares de CO y 2 bares de CO₂, se prefiere que la presión de depuración, es decir, la presión en el reactor a la que comienza la recogida de la corriente de producto de CO₂, sea de aproximadamente 4 bares. Adicional o alternativamente, la presión de depuración se define en términos absolutos. En una forma de realización, la presión de depuración está en el intervalo de 2-10 bares, preferiblemente 3-7 bares, de la manera más preferible aproximadamente 4 bares.

[0036] Las presiones de depuración más bajas conducen a una corriente de producto de CO₂ aún más puro, pero también a una mayor liberación de CO₂ en el gas de escape de pre-depuración y, por lo tanto, en una relación de captura de carbono reducida. Las presiones de depuración más altas conducen a menos CO₂ liberado en el gas de escape de pre-depuración y, por lo tanto, en una relación de captura de carbono aumentada, pero también a una pureza reducida de la corriente de producto de CO₂. Los inventores descubrieron que las presiones de depuración presentadas en este documento proporcionan el equilibrio óptimo, de manera que el proceso SEWGS según la invención proporciona una combinación sin precedentes de pureza de la corriente de producto de CO₂ y relaciones de captura de carbono a un uso de vapor dado.

[0037] El gas de escape del paso de pre-depuración puede usarse según se considere adecuado. Como este gas contiene una combinación de moléculas gaseosas que son útiles dentro del proceso, se prefiere que el gas de escape de pre-depuración se someta al paso de reacción (a). Esto puede efectuarse combinando el gas de escape de pre-depuración con la alimentación del paso (a), y sometiendo la mezcla combinada al reactor en el paso (a), o introduciendo por separado la alimentación del paso (a) y el gas de escape de pre-depuración al reactor del paso (a). Como tal, las moléculas de H₂ presentes en el gas de escape de pre-depuración terminarán en la corriente de producto de H₂ y las moléculas de CO₂ presentes en el gas de escape de pre-depuración terminarán en la corriente de producto de CO₂. Preferiblemente, las moléculas de H₂O se eliminan del gas de escape de pre-depuración antes de someterlo al paso (a), normalmente por condensación, para disminuir el volumen que se va a someter al paso (a). Puesto que el gas de salida de pre-depuración contiene gases de una caída de presión de 2-8 bares, de los cuales las moléculas de H₂O pueden haberse eliminado adicionalmente, es una corriente relativamente pequeña, que no reduce demasiado la capacidad del reactor en el paso (a).

[0038] En una forma de realización alternativa, el gas de escape de pre-depuración se recoge por separado como gas de cola, por ejemplo, como una corriente de producto del proceso, y se usa según se considere adecuado. Las opciones de integración del proceso pueden hacer uso preferiblemente de la composición particular de esta corriente. Por ejemplo, puede quemarse para generar el calor necesario para el proceso según la invención. La presencia de vapor en esta corriente puede ser beneficiosa para el control de las emisiones de NO_x, como se muestra en Chiesa P, Lozza G & Mazzocchi L (2005), Using hydrogen as gas turbine fuel, J. Eng. Gas Turbines Power 127(1), 73-80; and Göke S, Füre M, Bourque G, Bobusch B, Göckeler K, Krüger O *et al.*

(2013), Influence of steam dilution on the combustion of natural gas and hydrogen in premixed and rich-quench-lean combustors, Fuel processing technology 107, 14-22. Otra ventaja es que la dilución con vapor de H₂ también permite disminuir la reactividad del hidrógeno, ya que un contenido de vapor relativamente bajo evita el retroceso, y por lo tanto reduce el riesgo de explosión.

[0039] En caso de que el gas de escape de pre-depuración se recomprima y se recicle al paso (a), la presencia de CO₂ en el gas de escape de pre-depuración no conduce a una reducción en la relación de captura de carbono, ya que las moléculas de CO₂ no se recogen, sino que se reciclan y, por lo tanto, terminarán en gran medida en la corriente de producto de CO₂ de todos modos. Por lo tanto, se puede usar una presión de depuración ligeramente inferior, preferiblemente en el intervalo de 2-4 bares, preferiblemente unos 3 bares, para aumentar la pureza de la corriente del producto de CO₂. Por otro lado, en caso de que el gas de escape de pre-depuración se recoja como gas de cola, se prefiere que contenga tan poco CO₂ como sea posible y, por tanto, se prefiere una presión de depuración algo más alta, preferiblemente en el intervalo de 3-8 bares, preferiblemente unos 5 bares, con el fin de aumentar la relación de captura de carbono del proceso según la invención. Dicho de otra manera, la presión de depuración está en el intervalo de 0,5-1,25, preferiblemente 0,5-1, veces la presión parcial de CO y CO₂ en el gas de alimentación del paso (a) cuando el gas de escape de pre-depuración se vuelve a comprimir y se recicla al paso (a), y la presión de depuración está en el intervalo de 0,75-1,5, preferiblemente 1-1,5, veces la presión parcial de CO y CO₂ en el gas de alimentación del paso (a) cuando el gas de escape de pre-depuración se recoge como gas de cola.

Paso (d): Depuración

[0040] El paso (d) del proceso según la invención implica el paso de depuración real, donde se recoge la corriente de producto de CO₂. Para facilitar los procesos de captura de carbono, la pureza de esta corriente debe ser lo más alta posible, y el paso de pre-depuración intermedio permite purezas más altas de la corriente. El paso de depuración de la presente invención difiere de los pasos de depuración convencionales en que comienza a una presión algo reducida, en vista de la presión liberada del reactor durante el paso de pre-depuración (c).

[0041] Por lo tanto, la presión de depuración, a la que comienza el paso de depuración, está normalmente en el intervalo de 2-10 bares, preferiblemente 3-7 bares, de la manera más preferible aproximadamente 4 bares. Durante el paso de depuración, la presión se reduce adicionalmente a la presión de regeneración, que está en el intervalo de 1-5 bares, preferiblemente en el intervalo de 1,5-3 bares. La caída de presión durante el paso de depuración está preferiblemente en el intervalo de 0,2-7,5 bares, más preferiblemente en el intervalo de 0,5-5 bares, de la manera más preferible aproximadamente 1 bar. Durante la depuración, las moléculas de CO₂ gaseosas presentes en el reactor se liberan en la corriente de producto de CO₂. Además, la liberación de cualquier molécula de CO₂ adsorbida restante del sorbente se promueve en vista de la caída de la presión de CO₂ dentro del reactor. Como tal, el CO₂ se libera del reactor en gran medida, y la corriente de producto de CO₂ es sustancialmente pura. Cuando se desee, se puede emplear un paso de condensación de agua para aumentar la concentración de CO₂ de la corriente de producto de CO₂. Esta es una práctica común para los procesos de captura y almacenamiento de carbono.

Paso (e): Purga

[0042] El proceso continúa con un paso de purga, donde se introduce vapor en el reactor. La introducción de vapor conduce a una disminución de la presión parcial de CO₂ dentro del reactor y, por lo tanto, a la liberación de moléculas de CO₂ adicionales del sorbente. Durante el paso de purga, normalmente la presión no se acumula en el reactor, pero el reactor permanece a la presión de regeneración y se recoge un gas de escape. Normalmente, el gas de escape del paso de purga se recoge como parte de la corriente de producto de CO₂. Contiene principalmente CO₂ y algo de moléculas de H₂O no adsorbido (vapor).

[0043] Al final del paso de purga, el sorbente se carga con moléculas de H₂O, y está listo para otro paso de reacción. En una forma de realización preferida adicional, el proceso según la invención comprende además uno o más pasos de represurización, que se realizan después del paso de purga (e) y en los que la presión en el reactor se eleva a la presión del paso de reacción (a). Si es necesario, la presión de la alimentación o producto de alta presión asegura que el reactor se presurice a la presión deseada para realizar el paso (a). Tales pasos de represurización se acoplan preferiblemente a los pasos de despresurización realizados antes del paso de pre-depuración (c), como parte de uno o más pasos de igualación de presión.

[0044] En una forma de realización preferida, el proceso según la invención se ejecuta como un ciclo. Cuando se ejecuta como un ciclo, el reactor al final del paso de purga (e) y preferiblemente después de represurizarse, se usa en el paso de reacción (a), donde un gas de alimentación que comprende CO y H₂O se introduce en el reactor. En otra forma de realización, cuando el proceso según la invención se ejecuta como un ciclo, se acoplan al menos dos reactores SEWGS que experimentan cada uno el ciclo. Preferiblemente, se acoplan al menos 4 reactores SEWGS, como 2-20 reactores, preferiblemente 4-10 reactores. Como tal, se usa un reactor para el paso de reacción (a) mientras una segunda reacción se somete a la secuencia de regeneración, lo que permite

una alimentación continua de la alimentación que comprende CO y H₂. Se prefiere además que un reactor de SEWGS que requiera despresurización se acople a otro reactor de SEWGS que requiera represurización, permitiendo de ese modo uno o más pasos de igualación de presión que efectúan la despresurización del primer reactor de SEWGS después del paso de aclarado (b), y uno o más pasos de igualación de presión respectivos que efectúan la represurización del segundo reactor de SEWGS directamente después del paso de purga (e). En una forma de realización más preferida, cuando el proceso según la invención se ejecuta como un ciclo, se acopla una multitud de reactores de SEWGS cada uno de los cuales experimenta el ciclo, donde cada uno de los múltiples primeros reactores de SEWGS que requieren despresurización se acopla a uno de los múltiples segundos reactores de SEWGS en otro paso del ciclo que requiere represurización, permitiendo de ese modo uno o más pasos de igualación de presión que efectúan la despresurización de los múltiples primeros reactores de SEWGS después del paso de aclarado (b), y uno o más pasos de igualación de presión respectivos que efectúan la represurización de los múltiples segundos reactores de SEWGS directamente después del paso de purga (e).

[0045] En una forma de realización preferida del proceso según la invención, el reactor se somete al paso de reacción (a), al paso de aclarado (b), al paso de pre-depuración (c), al paso de depuración (d) y al paso de purga (e) y opcionalmente a uno o más pasos de igualación de presión intermedios, en orden secuencial, preferiblemente sin modificación sustancial del reactor por pasos intermedios.

[0046] Los reactores adecuados para realizar una reacción de SEWGS se conocen en la técnica, y se puede emplear cualquiera de tales reactores para el proceso según la invención. Normalmente, tal reactor está en la forma de una columna que contiene el material sorbente y el catalizador, que puede estar presente como lecho fijo o lecho fluidizado. Los materiales catalizadores y sorbentes adecuados también se conocen en la técnica, y cualquier material de este tipo puede usarse en el contexto de la presente invención.

Proceso para separar una corriente de producto de CO₂

[0047] La idea inventiva de la presente invención también se puede emplear en un proceso para la separación de una corriente de producto de CO₂ de una corriente de producto de gas inerte. Dado que la reactividad de desplazamiento de gas de agua no es esencial para el proceso según esta forma de realización, el proceso se lleva a cabo normalmente en un adsorbente (o columna de adsorción), que comprende un material sorbente capaz de adsorber CO₂. El paso (a) no implica una reacción sino solamente una adsorción y se denomina, por tanto, paso de adsorción. Todos los demás detalles, incluyendo las formas de realización preferidas, como se han definido anteriormente para el paso de reacción (a) se aplican igualmente al paso de adsorción (a). Asimismo, todas las especificaciones para los pasos (b)-(e), incluyendo formas de realización preferidas, como se ha definido anteriormente, se aplican igualmente a los respectivos pasos del proceso según la presente forma de realización.

[0048] El proceso según esta forma de realización comprende:

- (a) un paso de adsorción, donde un gas de alimentación que comprende CO₂ y uno o más gases inertes se introduce en un adsorbente que contiene un material sorbente capaz de adsorber CO₂, formando de este modo la corriente de producto de gas inerte y un material sorbente cargado con CO₂;
- (b) un paso de aclarado, donde se introduce vapor en el adsorbente, estableciendo de este modo una presión en el intervalo de 5-50 bares;
- (c) un paso de pre-depuración, donde la presión en el adsorbente se reduce para establecer una presión de depuración en el intervalo de 0,5-1,5 veces la presión parcial de CO y CO₂ en el gas de alimentación del paso (a);
- (d) un paso de depuración, donde la presión en el adsorbente se reduce a la presión de regeneración en el intervalo de 1-5 bares, liberando de ese modo al menos parte del CO₂ del material sorbente cargado, formando de ese modo la corriente de producto de CO₂; y
- (e) un paso de purga, donde se introduce vapor en el adsorbente, liberando de ese modo moléculas de CO₂ adicionales del adsorbente,

donde el gas de escape liberado del reactor durante el paso (c) se recoge por separado de la corriente de producto de CO₂ liberada del reactor durante el paso (d).

[0049] La adsorción según la presente forma de realización utiliza vapor como fluido de trabajo. La carga del proceso según esta forma de realización es una mezcla gaseosa que comprende CO₂ y uno o más gases inertes. En el presente documento, los gases inertes se refieren a gases que no son adsorbidos por el sorbente y, por tanto, excluyen CO₂ y H₂O. El CO puede ser parte de los gases inertes. Si este es el caso, tiene una influencia sobre la presión de depuración establecida en el paso (c), como se ha definido anteriormente. El uno o más gases inertes se seleccionan normalmente de CO, H₂, N₂, Ar, hidrocarburos C₁₋₄, H₂S y NO_x. De la manera más preferible, los gases inertes comprenden al menos H₂.

EJEMPLOS

Modelo de lecho empacado e intrapartículas

[0050] El modelo de isoterma SEWGS desarrollado por Boon *et al.* (Boon, J., Cobden, P. D., Van Dijk, H. A. J., Hoogland, C., van Selow, E. V., & van Sint Annaland, M. (2014), Isotherm model for high-temperature, high-pressure adsorption of CO₂ and H₂O on K-promoted hydrotalcite, Chemical Engineering Journal, 248, 406-414.) se usó para describir el fenómeno de transporte en la columna de empacado y la adsorción de CO₂ como H₂O (Tablas 1 y 2). Las isothermas de doble adsorción para CO₂ y H₂O en el modelo de Boon consistió en ambas superficies como contribuciones de nanoporos. Sin embargo, el mecanismo de sorción propuesto por Coenen *et al.* 2017 (Coenen, K., Gallucci, F., Pio, G., Cobden, P., van Dijk, E., Hensen, E. & van Sint Annaland, M. (2017), On the influence of steam on the CO₂ chemisorption capacity of a hydrotalcite-based adsorbent for SEWGS applications, Chemical Engineering Journal, 314, 554-569) también predice que un sitio competitivo contribuye a la adsorción de CO₂. En este estudio, el sitio competitivo se ha incorporado en las isothermas de adsorción tanto para CO₂ como para H₂O. Además, sólo se ha considerado la adsorción de CO₂ y H₂O en este trabajo. Cualquier otra especie de gas en la mezcla de gas de síntesis no se considera adsorbida por K-HTC.

Tabla 1: Columna de lecho empacado

Continuidad:	$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial p v}{\partial z} + \frac{1-\epsilon_b}{\epsilon_b} a_p \sum_i M_i N_i$
Momentum:	$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} - f \frac{\rho u u}{\rho_p}$
	$(\epsilon_b \rho C_p + (1-\epsilon_b) \rho_p C_{p,p}) \frac{\partial T}{\partial t} =$
Balance térmico:	$-\rho C_p u \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{4U(T_w - T)}{a_c} - (1-\epsilon_b) \rho_p \left((-\Delta H_r) \gamma_{WGS} + \sum_i (-\Delta H_{a,i} \frac{d(q_i)}{dt}) \right)$
Balance de masa:	$\frac{\partial(\epsilon_b n_i)}{\partial t} = \frac{\partial \rho v n_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \rho \frac{\partial n_i}{\partial z} \right) + \frac{1-\epsilon_b}{\epsilon_b} a_p M_i N_i$

Tabla 2: Modelo intra-partícula

Balance de masa:	$\frac{d\langle c_i \rangle}{dt} = k_{i,DF,i} (c_{i,ext,i} - \langle c_i \rangle)$
Coefficiente de transferencia de masa LDF:	$k_{i,DF,i} = \frac{15 D_{p,i}}{\tau_p^2 (\epsilon_p - \rho_p \beta c_i)}$
isoterma multicomponente:	$\langle q_i \rangle = f(\langle c_i, N \rangle)$

Estrategia de solución numérica

[0051] Condiciones límites: La presión se definió en la salida de la columna mientras que el caudal de alimentación se define en la entrada. Las ecuaciones se discretizaron en una cuadrícula uniforme en el término espacial. Para evitar problemas de choque numérico, se implementó en el código un esquema de Barton delimitado por flujo de segundo orden para los términos convectivos (Centrella, J. & Wilson, J. R. (1984), Planar numerical cosmology II-The difference equations and numerical tests, The Astrophysical Journal Supplement Series, 54, 229-249; Goldschmidt, M. J. V., Kuipers, J. A. M., & van Swaaij, W. P. M. (2001), Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds using the kinetic theory of granular flow: effect of coefficient of restitution on bed dynamics, Chemical Engineering Science, 56(2), 571-578; Boon, J., Cobden, P. D., Van Dijk, H. A. J., Hoogland, C., van Selow, E. V., & van Sint Annaland, M. (2014), Isotherm model for high-temperature, high-pressure adsorption of CO₂ and H₂O on K-promoted hydrotalcite, Chemical Engineering Journal, 248, 406-414.). Para los términos de dispersión se aplicó un esquema de diferenciación central implícita de segundo orden. Los términos fuente se linealizaron de forma semiimplícita. Las condiciones límite de Dankwert se aplicaron para el balance de masa y calor.

[0052] Esquema de integración: Las EDOs ahora dependientes del tiempo se resolvieron con un esquema explícito de Euler con adaptación del paso de tiempo. La adaptación del paso de tiempo se produce en tres casos. En primer lugar, cuando se produce el número máximo de iteraciones para obtener el error más bajo. En segundo lugar, si se producen grandes cambios entre la solución inicial en estado estacionario y la solución actual. Los cambios grandes se definen como las diferencias entre estos dos estados. En tercer lugar, si la condición de Courant-Friedrich-Lewy (CFL), C, se vuelve mayor que 0,5, el paso del tiempo se ajusta para cumplir C < 0,5. La condición CFL se calcula de acuerdo con C = u dt/dz en la que dt es el paso de tiempo, dz el tamaño del paso espacial y u la velocidad.

[0053] Simulaciones cíclicas: se simularon varios ciclos diferentes. En las secciones siguientes se dan los parámetros de procesamiento y las condiciones límite específicas. Todos los ciclos se simularon en el tiempo como una extensión del modelo de columna única. Cualquier paso de conexión en un ciclo se almacenó temporalmente en archivos. Como el proceso SEWGS es un proceso cíclico, las simulaciones continúan durante varios ciclos hasta que se alcanza un estado estacionario cíclico. Este estado se alcanza cuando los indicadores de rendimiento CCR y CP no cambian más del 5 %. El número de ciclos que es necesario simular depende de las condiciones aplicadas para la columna. Normalmente, se requería un mínimo de 15 ciclos.

[0054] Interpretación de los datos: Para todos los modelos se determinó un conjunto de indicadores de rendimiento. Para el proceso SEWGS en general estos indicadores son la relación de captura y recuperación de carbono y la pureza del CO₂. El rendimiento del ciclo indicado se indica mediante la productividad, el consumo de vapor, la conversión de CO y la relación de adsorción de CO₂. Para todos los casos y_i y F_{mol} son las integrales a lo largo del tiempo en un paso dado. Las integrales se aproximan mediante la regla trapezoidal.

$$CCR = \frac{(y_{CO_2} + y_{CO})F_{mol}}{(y_{CO_2} + y_{CO})F_{mol}} \frac{\text{producto de CO}_2}{\text{alimentación de gas de síntesis}} \quad (3.1)$$

$$CP = y_{CO_2} \text{ producto de CO}_2 \quad (3.2)$$

$$Prod. = \frac{(y_{CO_2}F_{mol})_{\text{producto de CO}_2}}{\text{adsorbente de masa} \cdot t_{\text{ciclo}}} \quad (3.3)$$

$$Conv. de CO = 1 - \frac{(y_{CO}F_{mol})_{\text{producto de CO}_2} + (y_{CO}F_{mol})_{\text{producto de H}_2}}{(y_{CO}F_{mol})_{\text{alimentación de gas de síntesis}}} \quad (3.4)$$

$$Relación de ads. de CO_2 = \frac{(y_{CO_2}F_{mol})_{\text{producto de H}_2}}{(y_{CO_2}F_{mol})_{\text{alimentación de gas de síntesis}}} \quad (3.5)$$

Ejemplo 1

[0055] Se simuló un proceso que consistía en adsorción, aclarado (con S/C = 0,05), 3 igualaciones de presión, pre-depuración, depuración, purga (con S/C = 1,25) y represurización en estado estacionario cíclico. El diseño de ciclo acompañante corresponde a un sistema de tren único de 7 columnas. La composición de alimentación se muestra en la tabla siguiente:

Componente	% en moles
H ₂ O	25,73 %
H ₂	54,69 %
CO	3,43 %
CO ₂	12,67 %
N ₂	3,48 %

[0056] El caudal de alimentación total es de 3,42 kmol/h. En las simulaciones, la presión de depuración, que se establece al final de la fase de pre-depuración, se establece en 6 bares (Ejemplo 1A), 4 bares (Ejemplo 1B) o 6 bares (Ejemplo 1C), con una presión de pre-depuración resultante de las igualaciones de presión a 7,8 bares. El resultado de esta variación y su efecto sobre la relación de captura de carbono (CCR) y la pureza de CO₂ (CP) se muestra en la Figura 1. El CCR, CP y S/C se definen como se muestra a continuación. Esta forma de definición considera que el producto de pre-depuración no se captura.

$$CCR = \frac{\left((y_{CO_2} + y_{CO}) F_{mot} \right)_{Depuración\ de\ CO_2} + \left((y_{CO_2} + y_{CO}) F_{mot} \right)_{Purga\ de\ CO_2}}{\left((y_{CO_2} + y_{CO}) F_{mot} \right)_{alimentación\ de\ gas\ de\ síntesis}}$$

$$CP = \left(\frac{y_{CO_2}}{1 - y_{H_2O}} \right)_{Producto\ de\ CO_2}$$

$$\frac{S}{C} = \frac{H_2O\ total\ alimentado\ durante\ la\ purga\ o\ el\ aclarado}{CO_x\ total\ alimentado\ durante\ la\ alimentación}$$

[0057] Las simulaciones confirmaron que se puede alcanzar el mismo rendimiento en términos de CCR y CP usando un diseño de ciclo sin un paso de pre-depuración, aunque con un consumo de vapor significativamente mayor (OpEx) y un mayor número de columnas y trenes (CapEx). En comparación con el ciclo de pre-depuración a una presión de pre-depuración de 4 bares (Ejemplo 1B), logrando una pureza de CO₂ del 97 % y una tasa de captura de carbono del 81 % con 7 columnas en un sistema de un solo tren y un consumo total de vapor de 1,25 S/C, un diseño de ciclo sin pre-depuración requeriría un consumo de vapor de 1,4 S/C y la doble cantidad de columnas. Por lo tanto, un rendimiento comparable requiere un consumo de vapor un 12 % más alto y un aumento del 100 % en CAPEX.

Ejemplo 2

[0058] Se simuló la misma composición que en el Ejemplo 1 pero introduciendo el paso de pre-depuración en un sistema que está procesando la mitad del caudal, es decir, 1,71 kmol/h. La presión de depuración se varió entre 2 y 8 bares. El resultado de esto se muestra en la Figura 2. A una presión de depuración de 4 bares se consigue un punto óptimo de 90 % de CCR y 96 % de pureza.

[0059] Se realizó una evaluación para ver a qué consumo de vapor, puede lograrse este punto óptimo mediante un diseño de proceso sin paso de pre-depuración y sin un aumento en CAPEX (es decir, la misma cantidad de columnas). Los resultados de esta evaluación se muestran en la Figura 3, donde el punto óptimo a una presión de pre-depuración de 4 bares se muestra con puntos abiertos. Aumentando el S/C total de 1,3 a 1,65, correspondiente al aumento de vapor durante el aclarado desde la forma S/C = 0,05 a S/C = 0,4 con una purga de vapor constante de S/C = 1,25, la pureza de CO₂ aumentó, pero la tasa de captura de carbono disminuyó. Incluso a una S/C total de 1,65, la CP no se acerca ni siquiera al 90 %. Al mismo tiempo, el CCR ha disminuido del 98 % al 92 %. Esta disminución se debe principalmente a un aumento del cruce de CO₂ como resultado de un mayor aclarado. El paso de pre-depuración es capaz de compensar la tasa de captura de carbono y la pureza del CO₂ de una manera significativamente más eficiente en comparación con el proceso sin el paso de pre-depuración.

REIVINDICACIONES

1. Proceso de desplazamiento de gas de agua mejorado por sorción (SEWGS) para la formación de una corriente de producto de CO_2 y una corriente de producto de H_2 , que comprende:

(a) un paso de reacción, donde un gas de alimentación comprende CO_x , donde $x = 1-2$, y H_2O se introduce en un reactor de SEWGS que contiene un catalizador y material sorbente capaz de adsorber CO_2 , formando de ese modo la corriente de producto de H_2 y un material sorbente cargado con CO_2 ;

(b) un paso de aclarado, donde se introduce vapor en el reactor de SEWGS, estableciendo de este modo una presión en el intervalo de 5-50 bares;

(c) un paso de pre-depuración, donde la presión en el reactor de SEWGS se reduce para establecer una presión de depuración en el intervalo de 0,5-1,5 veces la presión parcial de CO y CO_2 en el gas de alimentación del paso (a);

(d) un paso de depuración, donde la presión en el reactor de SEWGS se reduce a la presión de regeneración en el intervalo de 1-5 bares, liberando así al menos parte del CO_2 del material sorbente cargado, formando de este modo la corriente de producto de CO_2 ; y

(e) un paso de purga, donde se introduce vapor en el reactor de SEWGS, liberando de ese modo moléculas de CO_2 adicionales del reactor de SEWGS, donde el gas de escape liberado del reactor durante el paso (c) se recoge por separado de la corriente de producto de CO_2 liberada del reactor durante el paso (d).

2. Proceso según la reivindicación 1, donde la presión de alimentación está en el intervalo de 5-50 bares, y/o la presión de depuración está en el intervalo de 2-10 bares.

3. Proceso según la reivindicación 1 o 2, donde en el paso de pre-depuración la presión se reduce entre 1-25 bares, preferiblemente entre 2-8 bares.

4. Proceso según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, donde la materia prima contiene 0-10 % en moles de CO y 0-80 % en moles de CO_2 , donde el contenido total de CO_x en la materia prima es al menos 2 % en moles.

5. Proceso según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, que comprende además uno o más pasos de igualación de presión, donde el reactor de SEWGS se despresuriza directamente después del paso de aclarado (b) y el reactor de SEWGS se represuriza directamente después del paso de purga (e).

6. Proceso según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, donde el proceso se ejecuta como un ciclo, donde el reactor se somete al paso (a) después de ser purgado en el paso (e), opcionalmente después de volver a presurizarlo.

7. Proceso según la reivindicación 5, donde al menos dos, preferiblemente al menos cuatro reactores sometidos al proceso están acoplados, donde un reactor que requiere despresurización está acoplado a otro reactor que requiere de represurización.

8. Proceso según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, donde la presión de depuración está en el intervalo de 3-7 bares, preferiblemente la presión de depuración es de aproximadamente 4 bares.

9. Proceso según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, donde el gas de escape del paso de pre-depuración (c) se devuelve al paso de reacción (a) o se recoge como gas de cola.

10. Proceso según la reivindicación 9, donde el gas de escape del paso de pre-depuración (c) se devuelve al paso de reacción (a) y la presión de depuración está en el intervalo de 2-4 bares, preferiblemente donde la presión de depuración es de aproximadamente 3 bares.

11. Proceso según la reivindicación 9, donde el gas de escape del paso de pre-depuración (c) se recoge como gas de cola y la presión de depuración está en el intervalo de 3-8 bares, preferiblemente donde la presión de depuración es de aproximadamente 5 bares.

12. Proceso para la separación de una corriente de producto de CO_2 de una corriente de producto de gas inerte, que comprende:

(a) un paso de adsorción, donde un gas de alimentación que comprende CO_2 y uno o más gases inertes se introducen en un adsorbente que contiene un material sorbente capaz de adsorber CO_2 , formando de este modo la corriente de producto de gas inerte y un material sorbente cargado con CO_2 ;

(b) un paso de aclarado, donde se introduce vapor en el adsorbente, estableciendo de este modo una presión en el intervalo de 5-50 bares;

- (c) un paso de pre-depuración, donde la presión en el adsorbente se reduce para establecer una presión de depuración en el intervalo de 0,5-1,5 veces la presión parcial de CO y CO₂ en el gas de alimentación del paso (a);
- 5 (d) un paso de depuración, donde la presión en el adsorbente se reduce a la presión de regeneración en el intervalo de 1-5 bares, liberando así al menos parte del CO₂ del material sorbente cargado, formando de ese modo la corriente de producto de CO₂; y
- (e) un paso de purga, donde se introduce vapor en el adsorbente, liberando de ese modo moléculas de CO₂ adicionales del adsorbente,
- 10 donde el gas de escape liberado del reactor durante el paso (c) se recoge por separado de la corriente de producto de CO₂ liberada del reactor durante el paso (d).
13. Proceso según la reivindicación 11, donde el uno o más gases inertes se seleccionan de entre CO, H₂, N₂, Ar, hidrocarburos C₁₋₄, H₂S y NO_x.
- 15

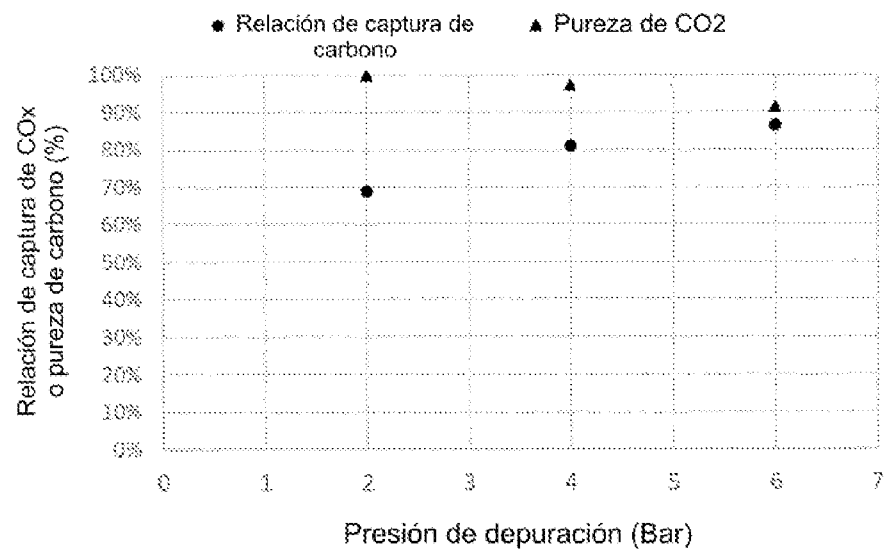
Fig. 1

Fig. 2

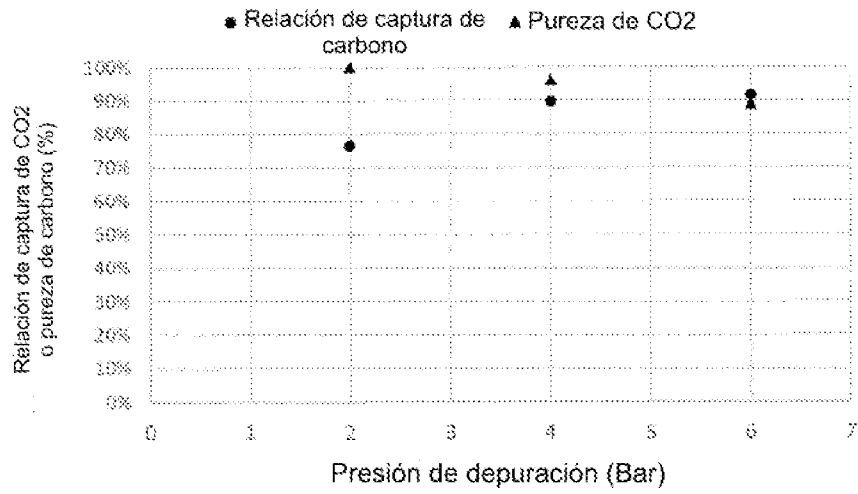


Fig. 3

