

**Tesis Doctoral**

**Mención Química**

Título:

*“Síntesis de Procesos Complejos minimizando el impacto ambiental. Aplicación a Procesos de cogeneración de vapor y energía eléctrica y sistemas de Desalación de aguas acoplados a uno de generación eléctrica.”*

Autor:

*Mgter. Néstor Hugo Rodríguez*

*Director: Dr. Nicolás J. Scenna*

*Codirector: Sergio F. Mussati*

*Universidad Tecnológica Nacional*

*Facultad Regional Córdoba*

MMXV



## **Agradecimientos:**

*A mis colegas y compañeros del CAIMI, UTN-FRRO, a mis directores Dr. Nicolás Scenna y Sergio Mussati por su permanente guía y enorme paciencia, a la Universidad Tecnológica Nacional por su sostén económico y académico, a mis padres Hugo Rodríguez y Josefa Voskerichian y a mi mujer Patricia Alvarenga por su apoyo incondicional, y en especial a mi hija Catalina por su amor que me da fuerzas para seguir.*

# INDICE GENERAL

CAPITULO I: La necesidad de desarrollar procesos sustentables para generar electricidad y obtener agua dulce en forma simultánea. Plantas Duales de desalinización de agua de mar	1
I INTRODUCCION	1
I.1 Generación de energía sustentable	2
I.2 Obtención de agua potable por desalación de agua de mar. Procesos duales sustentables	4
I.3 Objetivos de esta Tesis	7
I.4 Organización de la Tesis. Principales logros	8
 CAPITULO II: Modelado y optimización de Procesos duales de Producción de agua potable y energía utilizando un simulador modular, secuencial.	 12
II.1 Ciclos combinados de producción de energía sustentables. Introducción	12
II.2 Optimización del proceso de Producción de Energía Eléctrica	12
II.2.1 Modelado del Proceso de Generación de Energía eléctrica	16
II.2.2 Estimación de costos. Modelo de costos	22
II.2.3 Modelo de turbina de gas	26
II.2.4 Resultados numéricos. Discusión	31
II.3 Modelado de Sistemas de Desalación de Aguas de Mar por Métodos Térmicos incluyendo Plantas de Simples y Doble Propósito.	35
II.3.1 Desalinización por Evaporación Flash Múltiple Etapa (EFME)	37
II.3.1.1 Evaporador flash múltiple etapa “convencional” EFME-BR	37
II.3.1.2 Evaporador flash múltiple etapa–mixer (EFME-M)	42
II.3.1.3 Evaporador Flash Múltiple Etapa “Once Through” (EFME-“OT”)	43
II.3.2 Modelo simplificado para desaladores EFME-OT	44
II.3.3 Modelo de Costos	50
II.3.4 Casos de estudios	51
II.3.4.1 Caso de Estudio 1: Estimación de los principales parámetros para el diseño de un desalador EFME-OT.	51
II.3.4.2 Caso de estudio 2: Sistemas Duales	55
II.4 CONCLUSIONES	58
 CAPITULO III: Modelado riguroso de una planta de desalinización del Agua de mar (EFME)	 61
III.1 Implementación en Hysys® de un modelo Riguroso para un desalador (EFME)	61
III.1.1 Módulo de usuario selector de corrientes. Nomenclatura y funcionalidades del evaporador	61
III.1.2 Estimación de las propiedades del agua de mar: elevación del punto normal de ebullición (EPE)	71
III.1.2.1 Modelo NRTL-Extended	74



III.2 Cálculo de la geometría y perfil de niveles en el EFME	77
III.2.1 Longitud de la cámara	78
III.2.2 Altura del líquido en la cámara	79
III.2.3 Altura Total de las cámaras	81
III.2.4 Cálculo del número de tubos en el intercambiador/precalentador y diámetro del haz de tubos en cada etapa	82
III.2.4.1 Diámetro del haz de tubos	83
III.2.5 Cálculo del área total del desalador	90
III.3 Cálculo de Costos. Implementación en Hysys®	92
III.4 Casos de estudio: Comparación del modelo riguroso con modelos publicados en la bibliografía específica	94
III.4.1 Caso de estudio 1: EFME-OT	94
III.4.2 Caso de estudio 2: EFME-M	97
III.4.3 Caso de estudio 3: EFME-Convencional	100
III.4.4 Caso de estudio 4: Comparación del modelo riguroso con el simplificado y un modelo de optimización reportados previamente en la literatura	102
III.4.5 Caso de estudio 5: Comparación del modelo riguroso con uno desagregado publicado en la bibliografía (GAMS)	105
III.4.6 Caso de estudio 6: Comparación del modelo riguroso con otro similar de simulación implementado en Aspen® (y con datos reales de operación de plantas)	108
III.4.7 Caso de estudio 7: Acople de una planta de desalación con una de generación de electricidad. Plantas duales	113
III.4.8 Caso de estudio 8: Análisis de costos fijos y costos operativos. Estimación de la relación óptima	114
III.5 Conclusiones	116
 CAPITULO IV: Procesos de Captura de CO <sub>2</sub> y su aplicación a instalaciones de Generación de Energía Eléctrica Sustentables.	 118
IV. 1 Procesos para la captura del CO <sub>2</sub> presente en los gases de combustión	118
IV.1.1 Pre-combustión	119
IV.1.2 Post-combustión	119
IV.1.3 Combustión con aire enriquecido	120
IV.2 Procesos de Generación eléctrica por ciclos combinados	120
IV.3 Introducción a los Procesos alternativos de generación eléctrica	122
IV.4 Simulación y optimización de Plantas de captura de CO <sub>2</sub> del tipo post combustión.	122
IV.4.1 Circuito de absorción de CO <sub>2</sub> . Descripción del Proceso	123
IV.4.2 Modelos de costos	126
IV.4.3 Caso de estudio 1: Captura mediante solución acuosa de DEA	128
IV.4.4 Caso de estudio 2: Captura mediante solución acuosa de DEA/MDEA	132
IV.4.5 Caso de estudio 3: Captura mediante solución acuosa de	

MEA. Comparación con un modelo basado en ecuaciones	137
IV.4.6 Caso de estudio 4: Modelo Riguroso reducido	147
IV.5 Optimización de Plantas de Generación de Potencia por Ciclo Combinado simples Acopladas a Sistemas de recuperación de CO <sub>2</sub>	151
IV.5.1 Caso de estudio 5: Planta Dual	151
IV.5.2 Caso de estudio 6: Generación de potencia con captura de CO <sub>2</sub>	161
IV.5.3 Comparación de resultados con otros autores	168
IV.6 Conclusiones	170
Capítulo V: Modelado, simulación y optimización de procesos duales (generación de potencia y agua potable) acoplados a plantas de captura de CO <sub>2</sub>	172
V.1 Introducción	172
V.2 Modelado y Estrategia de Resolución.	173
V.2.1 Algoritmo de diseño optimo	181
V.3 Aplicación de la estrategia descrita. Caso de estudio. Diseño de un sistema Dual Sustentable.	182
V.3 Conclusiones	213
Capítulo VI:	214
VI.1 Conclusiones	214
VI.1.1 Capítulo II	214
VI.1.2 Capítulo III	215
VI.1.3 Capítulo IV	216
VI.1.4 Capítulo V	217
VI.2 Trabajos Futuros	217

# INDICE DE FIGURAS

## Capítulo 2:

<i>Figura II.1</i>	Circuito de potencia- ciclo combinado	15
<i>Figura II.2</i>	Curva de costo total en función de la potencia neta	32
<i>Figura II-3</i>	Evaporador flash múltiple etapa convencional” EFME	38
<i>Figura II-4</i>	Etapa de equilibrio individual	38
<i>Figura II.5</i>	Esquema de un EFME-M	43
<i>Figura II.6</i>	Esquema de un EFME-OT	43
<i>Figura II.7</i>	Perfil de temperaturas en el calentador externo	47
<i>Figura II.8</i>	Esquema de un EFME-OT del caso de estudio	52
<i>Figura II.9</i>	Área de transferencia en función del número de etapas	52
<i>Figura II.10</i>	Área de transferencia en función de la temperatura máxima de salmuera	54
<i>Figura II.11</i>	Flujo de alimentación en función de la temperatura máxima de la salmuera	54
<i>Figura II.12</i>	Área de transferencia en función del número de etapas	55
<i>Figura II.13</i>	Flowsheet del ciclo combinado acoplado a un EFME	56

## Capítulo 3:

<i>Figura III.1</i>	Modulo usuario Hysys®	62
<i>Figura III.2</i>	Flowsheet Hysys desalador OT	62
<i>Figura III.3</i>	Implementación "básica" en HYSYS de una solo una etapa	63
<i>Figura III.4</i>	Flowsheet en Hysys® con las 40 etapas (número máximo del modelo)	66
<i>Figura III.5</i>	Detalle de la etapa “final”	67
<i>Figura III.6</i>	Esquema de la primera etapa	67
<i>Figura III.7</i>	Entradas y salidas subflowsheet EFME	70
<i>Figura III.8</i>	elevación del punto de ebullición a 1 atm	71
<i>Figura III.9</i>	elevación del punto de ebullición a 0,5 atm	72
<i>Figura III.10</i>	elevación del punto de ebullición a 0,05 atm	72
<i>Figura III.11</i>	elevación del punto de ebullición a 0,005 atm	73
<i>Figura III.12</i>	comparación de puntos de ebullición a 1 atm	75
<i>Figura III.13</i>	comparación de puntos de ebullición a 0,5 atm	75
<i>Figura III.14</i>	comparación de puntos de ebullición a 0,1 atm	75
<i>Figura III.15</i>	comparación de puntos de ebullición a 0,05 atm	76
<i>Figura III.16</i>	comparación de puntos de ebullición a 0,01 atm	76
<i>Figura III.17</i>	Cámara de flasheo típica en corte	78
<i>Figura III.18</i>	Flujo de salmuera a través de las cámaras de flasheo	79
<i>Figura III.19</i>	Altura de la salmuera en las cámaras para apertura constante de las compuertas	80
<i>Figura III.20</i>	Perfil de altura de la compuerta en cada cámara para una nivel constante de salmuera	81
<i>Figura III.21</i>	Distanciamiento entre tubos	84
<i>Figura III.22</i>	Disposición de tubos en arreglo triangular	84
<i>Figura III.23</i>	Ordenamiento en hexágonos de los tubos	85
<i>Figura III.24</i>	Arreglo triangular de 3 tubos	86
<i>Figura III.25</i>	Área del triángulo entre centros de tubos y áreas de tubos	87
<i>Figura III.26</i>	Arreglo en cuadro	88

<i>Figura III.27</i>	Arreglo de tubos ejemplo 1	89
<i>Figura III.28</i>	Arreglo de tubos ejemplo 2	90
<i>Figura III.29</i>	Planilla Spreadsheet implementada en Hysys®	93
<i>Figura III.30</i>	Icono del módulo de transferencia de información	93
<i>Figura III.31</i>	Flowsheet de referencia	95
<i>Figura III.32</i>	Flowsheet resultante	95
<i>Figura III.33</i>	Perfil de temperatura	96
<i>Figura III.34</i>	Perfil de temperatura	97
<i>Figura III.35</i>	Flowsheet de referencia	98
<i>Figura III.36</i>	Flowsheet resultante	98
<i>Figura III.37</i>	Perfil de temperatura	99
<i>Figura III.38</i>	Perfil de temperatura	99
<i>Figura III.39</i>	Flowsheet de referencia	100
<i>Figura III.40</i>	Flowsheet resultante	101
<i>Figura III.41</i>	Perfil de temperatura	102
<i>Figura III.42</i>	Perfil de temperatura	102
<i>Figura III.43</i>	Flowsheet del caso	102
<i>Figura III.44</i>	Curva de área total vs ancho de cámara	104
<i>Figura III.45</i>	Flowsheet del caso	106
<i>Figura III.46</i>	Ancho óptimo= 10,265	107
<i>Figura III.47</i>	Flowsheet del caso	109
<i>Figura III.48</i>	Perfil de temperatura de ambas corrientes (vapor y agua de mar).	111
<i>Figura III.49</i>	perfil de temperatura	111
<i>Figura III.50</i>	Longitud de cámaras para velocidad de vapor de 2 m/s	112
<i>Figura III.51</i>	Longitud de cámaras para velocidad de vapor de 6 m/s	112
<i>Figura III.52</i>	Flujo de calor específico en función del área específica	114
<i>Figura III.53</i>	derivada de $Q^*$ respecto de $A^*$	115
<i>Figura III.54</i>	$dC_A/dC_H$ en la gráfica $dQ^*/dA^*$	115
<i>Figura III.55</i>	$dC_A/dC_H$ en la gráfica $dQ^*/dA^*$	116

#### Capítulo 4:

<i>Figura IV.1</i>	Caminos alternativos para la recuperación del CO <sub>2</sub> en los procesos de conversión de energía fósil	118
<i>Figura IV.2</i>	Proceso de Pre-combustión	119
<i>Figura IV.3</i>	Proceso de Post-combustión	120
<i>Figura IV.4</i>	Flowsheet de la planta de absorción	124
<i>Figura IV.5</i>	Diagrama de flujo indicando los reciclos	125
<i>Figura IV.6</i>	Curva de costo total en función del flujo de gases de combustión	130
<i>Figura IV.7</i>	Curva de costo total en función del porcentaje de CO <sub>2</sub> recuperado	131
<i>Figura IV.8</i>	costo total	132
<i>Figura IV.9</i>	Costo específico	133
<i>Figura IV.10</i>	costo unitario de recuperación de CO <sub>2</sub> .	133
<i>Figura IV.11</i>	costo específico	134
<i>Figura IV.12</i>	carga específica en el reboiler	134
<i>Figura IV.13</i>	flujo específico de amina	135
<i>Figura IV.14</i>	relación de flujo de amina/flue gas en absorbidora	135

<i>Figura IV.15</i>	carga de CO <sub>2</sub>	136
<i>Figura IV.16</i>	Comparación de perfiles de flujos de vapor	136
<i>Figura IV.17</i>	costo específico en función del porcentaje de CO <sub>2</sub> recuperado	138
<i>Figura IV.18</i>	Comparación de perfiles de flujos de líquido	138
<i>Figura IV.19</i>	Comparación de perfiles de temperatura	139
<i>Figura IV.20</i>	Diámetro de las columnas en función de flujo de gas y cantidad total de CO <sub>2</sub>	139
<i>Figura IV.21</i>	comparación de perfiles de flujo de vapor	140
<i>Figura IV.22</i>	comparación de perfiles de flujo de líquidos	140
<i>Figura IV.23</i>	comparación de perfiles de temperatura	141
<i>Figura IV.24</i>	comparación de perfiles de carga de CO <sub>2</sub> ( $\alpha$ )	141
<i>Figura IV.25</i>	distribución de costos de equipos en el caso GAMS	144
<i>Figura IV.26</i>	distribución de costos de equipos en el caso Hysys®	144
<i>Figura IV.27</i>	distribución de costos operativos en el caso GAMS	145
<i>Figura IV.28</i>	distribución de costos operativos en el caso Hysys®	146
<i>Figura IV.29</i>	Pasos en la derivación de modelo	147
<i>Figura IV.30</i>	Costo fijo total por equipo	148
<i>Figura IV.31</i>	Diámetro de las columnas en función de flujo de gas y cantidad total de CO <sub>2</sub>	148
<i>Figura IV.32</i>	Esquema del modelo reducido	150
<i>Figura IV.33</i>	Modelo reducido	151
<i>Figura IV.34</i>	Flowsheet de la planta de potencia acoplada a un circuito de absorción CO <sub>2</sub>	154
<i>Figura IV.35</i>	Aporte porcentual al costo de recuperación	157
<i>Figura IV.36</i>	Costo Unitario de la recuperación de CO <sub>2</sub>	158
<i>Figura IV.37</i>	Costo Recuperación de CO <sub>2</sub> en un flue gas concentrado	159
<i>Figura IV.38</i>	Aporte porcentual al costo en flue gas concentrado	160
<i>Figura IV.39</i>	Costo Unitario de Recuperación en flue gas concentrado	160
<i>Figura IV.40</i>	Comparación de costos unitario para flue gas concentrado y diluido	161
<i>Figura IV.41</i>	Perfil de temperaturas en Caldera y Precalentador	164
<i>Figura IV.42</i>	Perfil de Concentración de CO <sub>2</sub> en Columna Absorbedora	165
<i>Figura IV.43</i>	Perfil de Temperatura en Columna Absorbedora	165
<i>Figura IV.44</i>	Perfil de Concentración de CO <sub>2</sub> en Columna Recuperadora	166
<i>Figura IV.45</i>	Perfil de Temperatura en Columna Recuperadora	167

## Capítulo 5:

<i>Figura V.1</i>	Esquema de bloques de los procesos en estudio	185
<i>Figura V.2</i>	Corrientes calientes y frías del proceso	191
<i>Figura V.3</i>	Perfil de temperaturas supercorrientes (pinch utility)	191
<i>Figura V.4</i>	Sensibilidad respecto del DT <sub>mínimo</sub> .	192
<i>Figura V.5</i>	Estructura LNG aplicada al caso de estudio	192
<i>Figura V.6</i>	Perfil de temperaturas supercorrientes (LNG utility)	193
<i>Figura V.7</i>	Ingreso datos de corrientes	194
<i>Figura V.8</i>	Ingreso datos de corrientes auxiliares	194
<i>Figura V.9</i>	Ingreso parámetros económicos	195
<i>Figura V.10</i>	Perfil de temperaturas supercorrientes (Energy Analyzer)	195

<i>Figura V.11</i>	Resultados de cargas térmicas requeridas	195
<i>Figura V.12</i>	Resultados de cargas térmicas requeridas	196
<i>Figura V.13</i>	Costos fijos y operativos en función del área de intercambio	196
<i>Figura V.14</i>	Costo total en función del área de intercambio	197
<i>Figura V.15</i>	Red básica	197
<i>Figura V.16</i>	Intercambiadores de la red básica	197
<i>Figura V.17</i>	Red integrada	198
<i>Figura V.18</i>	Intercambiadores de la red integrada	198
<i>Figura V.19</i>	Red optimizada	198
<i>Figura V.20</i>	Intercambiadores de la red optimizada	199
<i>Figura V.21</i>	Red optimizada final	199
<i>Figura V.22</i>	Intercambiadores de la red final	199
<i>Figura V.23</i>	Costos comparativos según la integración energética	200
<i>Figura V.24</i>	Esquema de la red final y sus servicios	202
<i>Figura V.25</i>	Esquema completo (para los tres trenes de captura)	203
<i>Figura V.26</i>	Red aislada	206
<i>Figura V.27</i>	Acoplada a la planta	209
<i>Figura V.28</i>	Comparación de intercambiadores	210

# INDICE DE TABLAS

## Capítulo 2:

<i>Tabla II-1</i>	Componentes en ciclo de potencia	19
<i>Tabla II-2</i>	Condiciones del gas natural	19
<i>Tabla II-3</i>	Condiciones del aire	19
<i>Tabla II-4</i>	Condiciones del agua retorno a caldera	20
<i>Tabla II-5</i>	Condiciones del agua de enfriamiento	20
<i>Tabla II-6</i>	Composición adoptada para el gas natural	20
<i>Tabla II-7</i>	Eficiencias en el compresor de aire	20
<i>Tabla II-8</i>	Condiciones del precalentador de aire	20
<i>Tabla II-9</i>	Condiciones de la turbina de gas	21
<i>Tabla II-10</i>	Condiciones del recalentador	21
<i>Tabla II-11</i>	Condiciones de la caldera	21
<i>Tabla II-12</i>	Condiciones del economizador	21
<i>Tabla II-13</i>	Condiciones de la turbina de vapor	21
<i>Tabla II-14</i>	Condiciones del condensador	22
<i>Tabla II-15</i>	Condiciones de la bomba centrífuga	22
<i>Tabla II-16</i>	Condiciones del nodo divisor	22
<i>Tabla II-17</i>	Condiciones del nodo sumador	22
<i>Tabla II-18</i>	Costo de equipos	23
<i>Tabla II-19</i>	Costos operativos (agua de enfriamiento)	25
<i>Tabla II-20</i>	Costos operativos (vapor de calefacción)	26
<i>Tabla caso (1)</i>	Caso 1) Siemens] SGT-800	27
<i>Tabla caso (2)</i>	Caso 2) Siemens] SGT-700	28
<i>Tabla caso (3)</i>	Caso 3) General Electric] MS9001FA	29
<i>Tabla caso (4)</i>	Caso 4) General Electric] MS7001FA	30
<i>Tabla II-21</i>	Tabla de restricciones	31
<i>Tabla II-22</i>	Parámetros adoptados	51
<i>Tabla II-23</i>	Parámetros y resultados del problema	51
<i>Tabla II-24</i>	Resultados de caso de estudio	57
<i>Tabla II-25</i>	Ahorro en servicios auxiliares para el proceso acoplado	58

## Capítulo 3:

<i>Tabla III.1</i>	Coeficientes de interacción binaria	74
<i>Tabla III.2</i>	Diámetro del haz de tubo en función del nivel	85
<i>Tabla III.3</i>	Parámetros del caso de estudio	94
<i>Tabla III.4</i>	Resultados del caso de estudio	96
<i>Tabla III.5</i>	Parámetros del caso de estudio	97
<i>Tabla III.6</i>	Resultados del caso de estudio	98
<i>Tabla III.7</i>	Parámetros del caso de estudio	100
<i>Tabla III.8</i>	Resultados del caso de estudio	101
<i>Tabla III.9</i>	Parámetros del caso de estudio	103
<i>Tabla III.10</i>	Resultados del caso de estudio	104
<i>Tabla III.11</i>	Resultados del caso de estudio	105

<i>Tabla III.12</i>	Parámetros del caso de estudio	106
<i>Tabla III.13</i>	Resultados del caso de estudio	107
<i>Tabla III.14</i>	Resultados del caso de estudio	108
<i>Tabla III.15</i>	Corrientes del caso de estudio	108
<i>Tabla III.16</i>	Resultados reportados de la planta tomada como referencia	109
<i>Tabla III.17</i>	Datos de las corrientes	110
<i>Tabla III.18</i>	Resultados del modelo de la tesis	110
<i>Tabla III.19</i>	Resultados de la planta dual considerando las cámaras	113

#### **Capítulo 4:**

<i>Tabla IV-1</i>	resultados para las 4 alternativas de producción	128
<i>Tabla IV-2</i>	Composición de los gases de entrada	129
<i>Tabla IV-3</i>	valores para las restricciones	130
<i>Tabla IV-4</i>	Parámetros principales	137
<i>Tabla IV-5</i>	Perfiles	138
<i>Tabla IV-6</i>	Parámetros principales	139
<i>Tabla IV-7</i>	Intercambiador amina-amina	141
<i>Tabla IV-8</i>	Intercambiador amina-agua	142
<i>Tabla IV-9</i>	Condensador columna recuperadora	142
<i>Tabla IV-10</i>	Rehervidor columna recuperadora	143
<i>Tabla IV-11</i>	Bombas y compresores	143
<i>Tabla IV-12</i>	Costo fijo Total	143
<i>Tabla IV-13</i>	Comparación de costos fijos	143
<i>Tabla IV-14</i>	Costos operativos	145
<i>Tabla IV-15</i>	Costos operativos totales	145
<i>Tabla IV-16</i>	Comparación de servicios auxiliares	145
<i>Tabla IV-17</i>	Comparación de costos totales	146
<i>Tabla IV-18</i>	Caso de estudio, valores comparativos con la optimización rigurosa	150
<i>Tabla IV-19</i>	Datos de las Corrientes de entrada	162
<i>Tabla IV-20</i>	Composición de la corriente de DEA	162
<i>Tabla IV-21</i>	Costos de Capital (costos fijos)	162
<i>Tabla IV-22</i>	Contribución relativa al costo de ambas plantas	163
<i>Tabla IV-23</i>	Costos Operativos (costos variables)	163
<i>Tabla IV-24</i>	Costo de la captura del Dióxido de Carbono	163
<i>Tabla IV-25</i>	Costo de Generación de la Electricidad	163
<i>Tabla IV-26</i>	Valores de Potencia obtenida	164
<i>Tabla IV-27</i>	Caldera	164
<i>Tabla IV-28</i>	Columna Absorbedora	165
<i>Tabla IV-29</i>	Columna Recuperadora	166

#### **Capítulo 5:**

<i>Tabla V-1</i>	Corrientes calientes	189
<i>Tabla V-2</i>	Corrientes frías	190
<i>Tabla V-3</i>	Intercambiadores	190
<i>Tabla V-4</i>	Enfriadores	190
<i>Tabla V-5</i>	Calentadores	190



<i>Tabla V-6</i>	Costos comparativos según se integra o no el proceso	200
<i>Tabla V-7</i>	Intercambiadores de la red integrada	201
<i>Tabla V-8</i>	Caso sin integrar-Costos fijos	211
<i>Tabla V-9</i>	Caso sin integrar- Costos unitarios	211
<i>Tabla V-10</i>	Caso integrado- Costos fijos	211
<i>Tabla V-11</i>	Caso integrado- Costos unitarios	212
<i>Tabla V-12</i>	Intercambiadores de la red	212

## INDICE DE SÍMBOLOS (ecuaciones)

Símbolo	Descripción
$\Delta P_j$	Diferencia de presión en la etapa j
$\Delta t$	Diferencia de temperatura en el calentador externo
$\Delta t_e$	Diferencia de temperatura efectivo en condensador de la etapa
$\Delta t_f$	Diferencia de temperatura entre etapas
$\Delta TML$	Diferencia de temperatura media logarítmica
$\eta_{AC}$	Eficiencia del compresor de la turbina de gas
$\eta_{GT}$	Eficiencia del expansor de la turbina de gas
$\lambda$	Calor latente de vaporización del agua
$\rho^{\text{Brine}}_j$	Densidad de la salmuera en la etapa j
$\rho^F_j$	Densidad alimentación de agua de mar en los tubos de la etapa J
$\rho_j$	Densidad de la corriente J
$\rho^{\text{Vapor}}_j$	Densidad del vapor en la etapa J
$\phi$	Factor de mantenimiento
$\rho_{\text{DEA}}$	Densidad solución de amina
Símbolo	Descripción
$A_{\text{Cal xt}}$	Área de transferencia del calentador externo
$A_i$	Área
$a_j, b_j, c_j, A_j$	Coefficientes de la correlación de El-Dessouky
AS	Área de las cámaras
$A_t$	Área de transferencia de los tubos en el desalador
$A_{\text{TR}}$	Área del triángulo formado por 3 centros de tubos adyacentes (arreglo triangular)
$A_{\text{Transf}}$	Área de transferencia total en el desalador
B	Ancho de la cámara (sentido de los tubos)
B	Flujo de salmuera de deshecho
$B_i$	Coefficientes para el cálculo del factor $F_{\text{CM}}$
c	Distancia entre paredes de tubos
CA	Área lateral total del desalador
$CA_j$	Área lateral de la cámara J
$C_d$	Coefficiente de orificio
$C_{\text{DEA}}$	Costo de la solución de amina
CEQ <sup>o</sup>	Costo del equipo
$C_i$	Coefficientes para el cálculo del factor $F_p$
$C_{ij}$	Coefficientes para el cálculo de costo de la turbina de gas
$C_M$	Costo modular de un equipo
$C_p$	Capacidad calorífica a presión constante del agua potable
$C_{p_m}$	Capacidad calorífica a presión constante de la salmuera
CRF	Tasa intern de retorno
$D_{\text{ET}}$	Diámetro de la columna
DS	Diámetro del haz de tubos
Dt	Diámetro del tubo

Dte	Diámetro exterior de tubo
EPE	Elevación del punto normal de ebullición debido a la sal
F	Flujo de agua de mar que ingresa al recuperador de calor
F <sub>CM</sub>	Factor de corrección
fe	Relación entre diámetro externo e interno del tubo
F <sub>M</sub>	Factor de corrección por material
F <sub>P</sub>	Factor de corrección por presión
g	Aceleración de la gravedad
G	Densidad de flujo de vapor que abandona la pileta de salmuera
H	Altura de la cámara
H2	Distancia entre demister y techo de la cámara
HG	Altura de la compuerta de las cámaras
h <sub>j</sub>	entalpía de la corriente J
HP	Altura del pool de salmuera en las cámaras
K <sub>H</sub>	Variable auxiliar para el calculo de VH
K <sub>i</sub>	Coeficientes para el cálculo del factor C <sub>Eq²</sub>
L	Largo de la cámara (transversal a los tubos)
LD	Largo del desalador (L x NS)
LHV <sub>f</sub>	Calor de combustión inferior
L <sub>j</sub>	Nivel de salmuera en la etapa j
m, X, a <sub>j</sub>	Coeficientes de la correlación de Stoughton y Lieztke
m <sub>a</sub>	Flujo de aire en la turbina de gas
m <sub>g</sub>	Flujo de gas natural en la turbina de gas
m <sub>s</sub>	Flujo de vapor de calefacción
N	Número de horas de operación anuales
N	Número de tubos en la fila central del haz
n, N <sub>c</sub>	Variables auxiliares al cálculo de DS
N <sub>ET</sub>	Número de etapas de la columna
N <sub>diam</sub>	Número de diámetros
NS	Número de etapas del desalador
Nt	Número de tubos
P	Producción de agua potable
P <sub>j</sub>	Presión
Pt	Picht e los tubos (separación entre centros)
P <sub>j</sub> <sup>v</sup>	Presión en la cámara j
q	Flujo de agua de enfriamiento
Q <sub>Des</sub>	Calor del calentador externo
q <sub>F</sub>	Flujo de salmuera a través de los tubos
q <sub>J</sub>	Flujo de salmuera a través de la cámara J
qt <sub>J</sub>	Flujo de salmuera a través de un tubo calentador
SA	Área transversal total del haz de tubos
T <sub>0</sub>	Temperatura de entrada del agua de mar
T <sub>J</sub>	Temperatura
T <sub>Max</sub>	Temperatura máxima de la salmuera
T <sub>R</sub>	Temperatura de referencia
T <sub>Vap</sub>	Temperatura del vapor de calefacción

U	Coefficiente global de transferencia de calor
$V_{DC}$	Volúmen del downcomer de la columna
$V_{Etapas}$	Volumen de la etapa en la columna
VH	Distancia entre nivel de salmuera y demister en la cámara
$v_{liq}$	Velocidad de líquido en los tubos
$V_J^P$	Flujo de vapor que abandona la pileta de salmuera
$V_{total}$	
$v_{vapor}$	Velocidad del vapor que abandona la pileta de salmuera
W	Potencia
$w_j$	Flujo de salmuera de ingreso a la etapa j
$x_S^B$	Concentración de sal en la salmuera de deshecho
$x_S^F$	Concentración de sal en la alimentación
$Z_{AC}$	Costo del compresor como parte de la turbina de gas
$Z_{APH}$	Costo del precalentador de aire como parte de la turbina de gas
$Z_{CC}$	Costo de la cámara de combustión como parte de la turbina de gas
$Z_{GT}$	Costo del expansor como parte de la turbina de gas

# CAPITULO I

## *La necesidad de desarrollar procesos sustentables para generar electricidad y obtener agua dulce en forma simultánea. Plantas Duales de desalinización de agua de mar.*

### **I INTRODUCCION**

La síntesis de procesos de generación de vapor y energía eléctrica, al igual que los sistemas duales de obtención de agua potable a partir de aguas de mar o salobres son problemas de candente actualidad, debido fundamentalmente a la crisis energética recurrente y a la poca disponibilidad de agua dulce que requiere la población mundial la cual crece a pasos agigantados. Además, se le suma el aspecto ambiental; esto es, la necesidad imperiosa de minimizar las emisiones de gases con efecto invernadero, entre otros problemas acuciantes.

En general, el diseño de procesos sustentables, inherentemente seguros, contemplando el período de vida integral de la planta o complejo, cobra cada vez mayor actualidad y existen ingentes esfuerzos en el ámbito científico y académico a los efectos de lograr la complementación entre las herramientas disponibles y los nuevos conceptos de diseño, de tal forma de obtener procedimientos avanzados (síntesis, simulación, optimización) utilizables en la práctica ingenieril.

Cuando se requiere abordar la síntesis de nuevos flowsheets para procesos de alta complejidad, los cuales resultan sumamente difíciles de modelar y resolver con herramientas de programación matemática (salvo que se asuman ciertas simplificaciones). Por ejemplo el flowsheet final una planta productiva compleja como la que aquí se abordará; surge más como fruto del juicio creativo del diseñador que mediante la aplicación de un procedimiento conceptual y metodológico como el que se propondrá en el desarrollo de esta tesis.

En la actualidad existen, a escala global problemas resueltos que en el pasado eran solo abordables mediante planteos muy simples. La adversidad para el desarrollo de la vida en nuestro planeta se manifiesta más a menudo, a través de diversos fenómenos climáticos, y sus desastrosas consecuencias. A su vez, la escasez de energía para el desarrollo de la vida humana y la economía en general constituyen los nuevos problemas actuales que deben resolver en forma inmediata. Si se relaciona el costo de la

obtención de energía en cantidades suficientes para la demanda estimada en el futuro, con su impacto ambiental y la necesidad de minimizarlo, el problema se complica aún más.

En efecto, el marcado cambio climático originado por un aumento de la concentración de dióxido de carbono y otros gases generadores del efecto invernadero debido al uso irracional de combustibles fósiles durante los últimos dos siglos, ha provocado la necesidad de optimizar los procesos existentes con vistas a la minimización de las emisiones contaminantes, o bien desarrollar procesos basados en el uso de fuentes de energía alternativas, como por ejemplo la energía eólica, solar y/o biomasa, las cuales no producen gases de efecto invernadero.

El considerable aumento de las emisiones de gases de efecto invernadero se debe fundamentalmente a las actividades industriales y a una creciente demanda de energía y agua potable por parte de la población (esta última en zonas donde el agua dulce es escasa y debe producirse por métodos que consumen energía); situación que lleva a un incremento de la temperatura media global con desastrosas consecuencias climáticas que se pueden percibir en la actualidad.

## **1.1 Generación de energía sustentable**

Si bien existen alternativas tecnológicas limpias tales como las basadas en energías renovables (solar, eólica, geotérmica, mareomotriz) aún resultan atractivas las que emplean combustibles fósiles (sólidos, líquidos o gaseosos) por cuestiones de economía de escala y costos de disponibilidad. Esto implica que no obstante la variedad de fuentes renovables de energía, el uso de los combustibles fósiles no ha disminuido siendo aún una alternativa económica viable; solo amenazada por la necesidad de utilizar sistemas de reducción de emisiones para cumplir normativas específicas, incidiendo fuertemente en el precio final de la energía producida, según el tipo de combustible fósil empleado, la normativa vigente, y la tecnología utilizada. Es por ello que resulta interesante y necesario investigar modificaciones a los procesos existentes para minimizar la emisión de gases de invernadero, a un costo óptimo.

Algunas propuestas (individuales o combinadas) consisten en introducir eficientes ciclos combinados de generación o cogeneración que minimicen la emisión

de contaminantes (por ejemplo mediante el uso de oxígeno en lugar de aire) o procedan a la captura y disposición de dichos gases.

En la actualidad existen varias alternativas para la modificación de procesos térmicos de generación de energía eléctrica que tienden a minimizar las emisiones de gases de efecto invernadero. Las más simples son aquellas que utilizan sólo gas natural como combustible ya que el principal gas a tratar sería solo el CO<sub>2</sub>. En cambio, si el combustible es carbón, al CO<sub>2</sub> se le agregan otros gases productos de la combustión, como por ejemplo el SO<sub>2</sub> y óxidos de Nitrógeno (NO<sub>2</sub> y NO) genéricamente identificados como NO<sub>x</sub>, entre otros.

Además de los gases contaminantes que se producen al utilizar distintos combustibles debe analizarse el costo y la disponibilidad estratégica. Los combustibles gaseosos y líquidos se caracterizan por presentar precios inestables con aumentos sostenidos en los últimos tiempos (Gael D. Ulrich y Palligarnai T. Vasudevan 2006). Según el citado artículo, el carbón es el que mantiene más estable su precio en comparación con otros. Sin embargo, es el que más efecto contaminante provoca al utilizárselo en la generación de energía eléctrica.

En general, para el uso de combustibles sólidos se emplea la gasificación. Mientras que en la combustión se emplea aire en cantidad suficiente (en la práctica con un ligero exceso), en la gasificación se generan nuevos gases combustibles. Esta gasificación transforma entonces al combustible sólido en otro gaseoso.

Si bien la gasificación mejora la eficiencia y operatividad del proceso de generación de energía, no se resuelve el problema de la emisión de gases contaminantes, por lo que debe analizarse este problema para viabilizar estos procesos en función de las limitaciones importantes que imponen las normativas vigentes.

Dado que la integración de las distintas alternativas estructurales para la generación de potencia incorporando captura de gases de efecto invernadero genera un espacio enorme de posibilidades, se comprende que la incorporación a este problema de un sistema de desalación de agua de mar, incrementa considerablemente el espacio de alternativas hacia la búsqueda y el logro de un diseño óptimo.

Existen varios trabajos publicados que abordan el diseño de procesos de producción de energía eléctrica con captura de gases de efecto invernadero, en general basados mayormente en un análisis por simulación y eventual optimización de las variables operativas principales [Romeo y col. (2007); Bozzuto y col. (2001); Desideri and Paolucci (1999); Mimura y col. (1995); Feron P. (2006)]. En general, en estos trabajos no se utilizan métodos típicos aceptados hoy ampliamente por parte de la comunidad científico-tecnológica para lograr la síntesis del proceso, los cuales han probado ser sumamente eficientes para la obtención de nuevas estructuras óptimas en forma sistemática [Mussati y col. (2001 a,b, 2003, 2004 a,b,c, 2005, 2006 a,b, 2007)] ; [Shenoy (1995) ; Caballero and Grossman (2005, 2006) ; Chou C. and Shih Y, (1987,); Diwekar M, y col. (1992) ; Douglas J. M. (1988) ; Feng X and Zhu X. (1997) ; Franco A., and Giannini N, (2006), entre otros]. El diseño se obtiene entonces apelando al juicio creativo del diseñador, y no apelando a metodologías sistemáticas y probadas de diseño óptimo. Algunos trabajos publicados [Anna Korre et Al, (2009) ] [D.J. Sing, et Al] [Adirsorn Aroonwilas, et al, (2007)] se basan en procesos que operan con carbón sólido mientras que otros lo hace previa gasificación del mismo [G. Manfrida, (1999)][Luis M Romeo et al, (2008)] y con gas natural en ciclos combinados [P. Galindo et al, (2009)] [Etienne Bernier. Et al, (2009)]. Aunque en general se basan en estructuras fijas, otros autores hacen uso de superestructuras [Hongtao Li, et al, (2006)] a fin de hallar estructuras óptimas para diferentes costos de gas natural. En todos estos casos, la captura se implementó con una alternativa de postcombustión, a través de absorción con solución de aminas. Recientemente, en nuestro grupo de investigación se han elaborado propuestas de síntesis que optimizan globalmente el proceso.

## **I.2 Obtención de agua potable por desalación de agua de mar. Procesos duales sustentables.**

Existe en una gran cantidad de países (y también se da en el sur del nuestro), una carencia incipiente o muy importante de agua potable. En medio oriente y en muchas regiones del mundo, uno de los métodos más tradicionales para subsanar este problema de la disponibilidad de fuentes de agua dulce, si se cuenta con acceso al mar, es la desalinización de aguas de mar.

El problema radica en los grandes costos asociados a la obtención del agua dulce. Se ha investigado mucho para reducir el costo y maximizar la disponibilidad de



los procesos de obtención de agua potable. En la actualidad existen dos grandes grupos de tecnologías son ampliamente utilizadas: a) las basadas en energía térmica, como por ejemplo el proceso de evaporación múltiple efecto (EME) y b) las basadas en ósmosis inversa. Mientras que el proceso (EME) es más confiable e involucra un costo de inversión más bajo, los procesos basados en membranas tienen un costo operativo progresivamente decreciente. También se han intentado obtener ventajas de la integración de ambos procesos para potenciar las ventajas de cada método y minimizar sus desventajas, dando lugar así a los procesos híbridos de desalinización.

Una alternativa que ha ganado mercado por la reducción de costos que implica es la integración del proceso de desalación, ya sea por métodos térmicos o híbridos, a un sistema de generación de potencia. En este caso, el calor residual del sistema de producción de potencia se puede utilizar en el desalador como medio de calefacción, integrando así la producción de agua potable con la de energía eléctrica.

Uno de los inconvenientes, además del costo creciente, es el impacto ambiental. En efecto, en una planta convencional de obtención de agua potable a partir de agua de mar existen diversos impactos ambientales. La corriente de desecho es una salmuera muy concentrada, que se descarga al mar; además, de que su temperatura es alta. En el caso de plantas de doble propósito, se agrega, el impacto de la producción de energía eléctrica (emisiones).

Si bien al acoplar una planta de producción de energía eléctrica y agua potable se puede recuperar energía y se comparte cierto costo común, igualmente se emiten gases de efecto invernadero que pueden relacionarse con la unidad de potencia producida o bien de agua potable elaborada. Si se requiere la minimización de estas emisiones, el problema que se presenta es similar al caso anteriormente descrito; es decir, la obtención de un proceso de producción de energía eléctrica minimizando las emisiones, pero ahora mucho más complejo, ya que además, se debe acoplar la planta productora de agua potable a partir de agua de mar o salobres. Esto es, aumenta el costo de los productos que son indispensables para el desarrollo humano.

En síntesis, resulta imperiosa la producción de bienes y servicios para abastecer a una población creciente. Uno de los problemas más acuciantes es la producción de agua potable para abastecer amplias regiones del planeta, al igual que

energía suficiente y accesible. Una de las soluciones para minimizar el costo es la generación simultánea de agua y energía, en aquellos lugares en los cuales no existen fuentes de agua dulce disponible y se tiene acceso al mar. El problema ambiental resulta en las emisiones que se producen. Es entonces necesario encontrar procesos que minimicen dichas emisiones, y a la vez, resulten de mínimo costo.

No se han publicado aún trabajos que enfoquen la síntesis y diseño aplicada al proceso/complejo aquí descrito que contemplen tratamientos de emisiones gaseosas y que simultáneamente consideren un profundo nivel de detalle y además planteen la variable estructural (posibles alternativas tecnológicamente viables) no sólo para el proceso de tratamiento integrado (sistema dual de producción de energía por cogeneración y agua potable) sino también acoplado el proceso de captura de las emisiones.

### ***1.3 Objetivos de la Tesis***

El objetivo general que persigue esta tesis es contribuir en la búsqueda de soluciones tecnológicas conducentes a la disminución de emisiones gaseosas en plantas de generación de vapor y electricidad (cogeneración en el sentido amplio) duales o de propósito múltiple, para la producción simultánea de energía eléctrica por medios térmicos y de agua potable a partir de aguas salobres o agua de mar; de manera tal de minimizar el costo resultante, si se pretende minimizar la contaminación del medio ambiente por medio de la captura del CO<sub>2</sub> generado en el proceso.

Se propone el estudio de nuevos procesos alternativos teniendo como meta principal diseñar un sistema que además del cumplimiento de las demandas especificadas (en este caso de electricidad, vapor de proceso y/o agua potable a partir de aguas salobres) logre una producción limpia de manera tal de cumplir criterios especificados, con el costo mínimo.

Para ello será necesario generar una metodología y herramienta computacional para la tarea de síntesis y diseño de plantas de cogeneración de vapor y electricidad acopladas a sistemas de producción de agua potable, incluyendo el tratamiento de sus emisiones gaseosas (captura de CO<sub>2</sub>).

Por otra parte, será necesario investigar un procedimiento sistemático para la síntesis y diseño óptimo de tales plantas, pero a la vez, considerando un modelo riguroso que incluya gran detalle de los equipos a considerar, con lo cual se transforma en un modelo de muy elevada dimensión, y altamente no lineal.

En este trabajo, y basados en resultados preliminares previos para sistemas de cogeneración con captura de CO<sub>2</sub> [Rodríguez, (2008)], se propone una metodología eficiente de síntesis para la obtención de procesos de producción de agua potable y energía eléctrica por cogeneración (plantas duales), considerando además la captura del CO<sub>2</sub> emitido. Este tipo de procesos bajo este enfoque no ha sido aún tratado en la bibliografía.

#### ***1.4 Organización de la Tesis. Principales logros***

El problema aquí planteado es sumamente complejo, debido al gran número de alternativas posibles de ser analizadas. Si bien se han resuelto anteriormente en el grupo de trabajo que sustenta la presente tesis problemas parciales relacionados a esta problemática tales como la integración del proceso EFME al de generación de electricidad [Scenna N, P Aguirre (1991,1993,1999) ; Mussati y col. (2001 a,b, 2003, 2004 a,b,c, 2005, 2006 a,b, 2007) ; Marcovecchio y col. (2005)], optimización del proceso de captura de CO<sub>2</sub> integrado al proceso de cogeneración de energía eléctrica [Rodríguez (2008)], abarcan aquí la integración del proceso completo (Cogeneración/Captura de CO<sub>2</sub>/Proceso de desalación).

En esta tesis se denomina problema de “diseño óptimo” a aquél cuyo objetivo consiste en determinar para el desalador el diseño geométrico del sistema (diámetros de carcasa, número de tubos y área de transferencia de calor en los pre-calentadores, entre otras) y las condiciones operativas (gradientes de temperaturas y presiones, flujos, velocidad del líquido dentro de los tubos de pre-calentamiento, evaporación y sobrecalentamiento, entre otras) que minimicen el costo total anual. Esto es, se pretende un diseño completo como base sólida para la ingeniería de detalle asegurando así la factibilidad del proceso propuesto.

Igualmente, para la planta de captura, se determinan las condiciones de operación y el diseño geométrico del sistema, se consideran el número de etapas en la columna de absorción/desorción, y ciertas trayectorias posibles de las corrientes de proceso. Esto implica resolver un problema muy complejo, debido a las no linealidades introducidas para contemplar todos los parámetros intensivos y extensivos, funcionales, restricciones tecnológicas, descritas en el punto anterior.

En el Capítulo II, se estudian los procesos duales de generación de potencia y de desalación de aguas de mar. Se ha desarrollado un modelo para la optimización de sistemas de generación de potencia por cogeneración. En este contexto, mediante la combinación de módulos existentes en el simulador Hysys®, se pudo emular el comportamiento de turbinas de gas comerciales a fin de obtener resultados validados con sistemas reales.

Por otra, se ha analizado el proceso de desalación por métodos térmicos, en particular el basado en operaciones de múltiple flasheo. Se ha considerado en la simulación y optimización de los mismos, la geometría del equipo, el número de etapas, las operaciones de intercambio térmico, entre otras variables críticas. No ha sido publicada a la fecha una metodología de resolución del problema de optimización de tales procesos utilizando simuladores modulares secuenciales tales como Hysys® u otros y considerando las variables mencionadas.

Finalmente se han analizado distintas alternativas de acople entre el proceso de generación de potencia y el sistema de producción de agua potable. Estas plantas duales son muy importantes en regiones donde el agua potable es escasa.

En el Capítulo III se desarrolla y presenta un modelo riguroso considerando todas las variables geométricas y funcionales del desalador que contemple el de números etapas variable a fin de ser aplicado a casos de optimización más ajustados a la realidad.

Es de destacar la particular dificultad de realizar esto en simuladores de procesos modulares tales como lo es el Hysys®, se debió recurrir a un uso avanzado del mismo, lo cual implica la programación con visual basic de operaciones de usuario.

En el Capítulo IV se presenta el problema de diseño óptimo para el proceso de captura de CO<sub>2</sub> (postcombustión) utilizando aminas en particular, DEA, MDEA, y sus mezclas. Se presentaran modelos matemáticos y estrategias de resolución que permiten el análisis de tales procesos, y se discuten las familias de soluciones óptimas obtenidas para distintos escenarios de operación.

Por otra parte, se presenta una serie de modelos simplificados que reproducen los resultados obtenidos por el modelo riguroso con aceptable grado de aproximación y contemplando en forma implícita o explícita un número importante de variables de decisión que caracterizan el proceso. Estos modelos son útiles para aproximar costos de inversión o parámetros de operación en forma sencilla y rápida. Esto permite incorporar tales modelos en problemas de optimización de procesos complejos, facilitando o permitiendo obtener una solución que de otra manera resultaría harto difícil o bien imposible.

En el contexto de este capítulo, se han publicado los siguientes trabajos:

- “Optimization of post-combustion CO<sub>2</sub> process using DEA–MDEA mixture”, Néstor H. Rodríguez, Sergio F. Mussati y Nicolás J. Scenna *Chemical Engineering Research and Design*, vol 89, pag 1763–1773 del año 2011
- “CO<sub>2</sub> capture in power plants: Minimization of the investment and operating cost of the post-combustion process using MEA aqueous solution”, Néstor H. Rodríguez, Patricia Mores, Nicolás J. Scenna y Sergio F. Mussati, vol 10, pag 148–163, año 2012

En el Capítulo V se aborda la síntesis de procesos para la producción de energía y agua potable en forma sustentable. En este caso, existen dos problemas distintos. Uno es la producción de potencia eléctrica por ciclos combinados en forma sustentable, es decir, el acople óptimo entre el ciclo combinado y una planta de captura de CO<sub>2</sub> por postcombustión.

El otro problema, más complejo, es el acople simultáneo de una planta dual de producción de agua potable y energía eléctrica (que ya de por sí es una planta integrada entre dos procesos, descritos y analizados en los capítulos anteriores) con una planta de captura de CO<sub>2</sub> por postcombustión. Obviamente, este sistema es complejo ya que un diseño riguroso que contemple variables intensivas, funcionales y la geometría de los principales equipos es fuertemente no lineal; y de una dimensión elevada, que prácticamente anula la posibilidad de éxito si se utilizan las herramientas y metodologías de programación matemática convencionales de síntesis de proceso.

En el contexto de este capítulo, se ha publicado un estudio de alternativas de acople de sistemas de potencia y también de desalación presentado al congreso de Desalinización Jordania (2008) y como capítulo “Energy Usage and Greenhouse Gas Emissions in Desalination Plants: Simulation of dual purpose desalination plants including a CO<sub>2</sub> capture systems” en el libro “Desalination Research Progress”, 2008.

A su vez, se estudia la integración energética de los tres procesos a fin de minimizar el consumo de servicios auxiliares con el objetivo de reducir sus costos y

hacer más atractiva económicamente la captura de CO<sub>2</sub>, esto es minimizando los onerosos costos para lograr que sea una alternativa viable.

Por último, en el Capítulo VI se plantean las conclusiones obtenidas en el trabajo de tesis y las futuras líneas de investigación

## CAPITULO II

### ***Modelado y Optimización de Procesos Duales de Producción de agua dulce y electricidad utilizando un simulador modular, secuencial.***

#### **II.1 Ciclos combinados de producción de energía sustentables.**

##### **Introducción**

Si se pretende realizar el estudio de procesos de generación termoeléctrica y plantas duales de producción de agua y energía ecológicos, en el sentido de acoplarlos a procesos de captura de CO<sub>2</sub>; es necesario en principio obtener un modelo y un diseño óptimo para la generación dual convencional, a los efectos de tener una base de costos para una posterior comparación. Por otra parte, resulta más sencillo presentar en un comienzo los dos procesos en forma independiente, para luego acoplarlos conformando así el sistema dual.

#### **II.2 Optimización del proceso de Producción de Energía Eléctrica.**

Aquí el objetivo consiste en determinar, dada una estructura conocida el valor de las variables que minimizan el costo total anual, tales como diámetros de carcaza, número de tubos y área de transferencia de calor en los pre-calentadores, entre otras; y las condiciones operativas (gradientes de temperaturas y presiones, flujos, velocidad del líquido dentro de los tubos de pre-calentamiento, tasas de evaporación y sobrecalentamiento, entre otras).

La tarea de síntesis y diseño de cualquier proceso continuo exige, desde el punto de vista de la programación matemática, la formulación y resolución de un problema matemático mixto entero no lineal (MINLP) ó eventualmente un modelo matemático disyuntivo (GDP) involucrando decisiones discretas y continuas. Las decisiones discretas están relacionadas a las posibles unidades estructurales de la planta mientras que las decisiones continuas están relacionadas con las variables de operación del proceso (temperatura, presión, caudal, etc). El modelado de los equipos de potencia se aprecian en el anexo 2.

El problema de optimización de procesos se puede expresar de la siguiente forma:



$$\begin{aligned}
& \min f(x, y) \\
& s.t. \quad h_m(x, y) = 0, \quad m \in M, \quad M \quad \text{Restricciones de igualdad} \\
& \quad \quad g_k(x, y) \leq 0, \quad k \in K, \quad K \quad \text{Restricciones de desigualdad} \\
& \quad \quad x \in X \subseteq R^n, \\
& \quad \quad y \in Y = \{0,1\}^l
\end{aligned}$$

en donde,  $h_m(x,y)$  corresponden a las restricciones de igualdad e incluyen los balances de materia, energía y cantidad de movimiento (ecuaciones que describen cada uno de los equipos que forman parte de la planta, ver Anexo 2). Por su parte,  $g_k(x,y)$  corresponden a las restricciones de desigualdad que se utilizan para evitar cruces de temperaturas e imponer restricciones lógicas del proceso, según se describirá más adelante.

Las variables binarias aparecen cuando se pretende considerar ciertos parámetros en la estructura del proceso como variables. Generalmente, esta metodología de trabajo exige el planteo de una “superestructura” que incluya un conjunto de alternativas factibles de interés tanto para el proceso en sí mismo, como también para las posibles tecnologías de reducción de las emisiones. En general, la postulación de una superestructura asociada a un proceso no resulta una tarea sencilla, ya que son varios los factores que deben considerarse. Una vez formulada la superestructura que embeba no sólo las distintas alternativas para la producción de energía sino también el correspondiente tratamiento de las emisiones, se deberá proponer una metodología de resolución robusta y flexible ya que el número de variables involucradas en el modelo y el carácter combinatorio debido a la componente estructural del problema (topología de equipos) dificulta su resolución.

El empleo de modelos basados en “superestructura” permite encontrar estructuras novedosas y atractivas ya que éstas surgen como resultado de considerar configuraciones alternativas en forma simultánea, pero la contrapartida es que resulta harto difícil construir modelos rigurosos para procesos complejos, como los que nos ocupan en este caso; y además, lograr una solución en forma robusta, flexible, y aún lograr convergencia.

Dado que el objeto de esta tesis es la optimización de plantas duales de producción de agua potable a partir del agua de mar, acoplada a sistema de captura de CO<sub>2</sub> postcombustión, el complejo resultante es muy difícil de modelar.

Una simplificación importante es fijar la estructura del proceso, como en nuestro caso de análisis. Sin embargo, el problema que resulta no es tampoco de fácil resolución, ya que resulta un problema fuertemente no lineal (NLP) de elevada dimensión y con un número importante de restricciones, si se pretende describir a los intercambiadores, bombas, y demás equipos con cierta rigurosidad.

Dado que los resolvedores (software) para problemas de programación matemática del tipo no lineal (Non Linear Program NLP) no pueden garantizar optimalidad global y que los programas/modelos para optimización global no manejan problemas de gran tamaño, debemos asegurar la obtención una buena solución al problema. Además, es sabido que cuando en optimización se trabaja con restricciones altamente no-lineales y no-convexas, es posible encontrar múltiples soluciones y/o soluciones óptimas locales, dependiendo del punto inicial utilizado. Por lo tanto, es necesario lograr una adecuada inicialización para asegurar un óptimo local “aceptable”. Además, como se verá en el último capítulo, si se considera la síntesis del sistema de recuperación de calor del proceso global, el modelo se complica considerablemente, dificultando el problema si se pretende aplicar un enfoque orientado a ecuaciones para la optimización.

En este capítulo se comenzará progresivamente con el modelado del sistema de generación, luego el sistema de desalinización de doble propósito (plantas duales) y por último se procederá a la integración de la planta de captura de CO<sub>2</sub> (capítulos 4 y 5).

Se utilizarán los algoritmos de optimización incluidos en el simulador HYSYS® para este problema en particular. En el *Anexo I* se describen en forma sintética los distintos algoritmos existentes en el simulador. Dadas la características del problema a resolver, la herramienta (como se verá a continuación) resulta adecuada.

La parte primordial en la planta generadora de energía eléctrica es el ciclo de potencia. Una de las principales opciones es la selección del combustible, ya sea por su composición como por su estado de agregación. Cada una de las opciones presenta una serie de ventajas y desventajas. Como se mencionó en el capítulo I, aquí se optará por el

gas natural. Tiene éste la ventaja de utilizárselo fácilmente en estado gaseoso y disponerse a la presión que sea necesaria. Otra ventaja indiscutible es su bajo contenido de azufre por lo que no se requiere su remoción. En nuestro país además, la política de precios ha favorecido a este combustible.

Por otro lado, los combustibles líquidos o sólidos, aparte de su mayor contenido de S deben ser acondicionados llevándolos al estado gaseoso por lo que las conclusiones obtenidas en base al gas natural son una base útil para otros sistemas más complejos.

El proceso típico de generación de potencia por ciclo combinado (que habitualmente se utiliza como base para procesos duales) puede apreciarse en el flowsheet de la figura II.1:

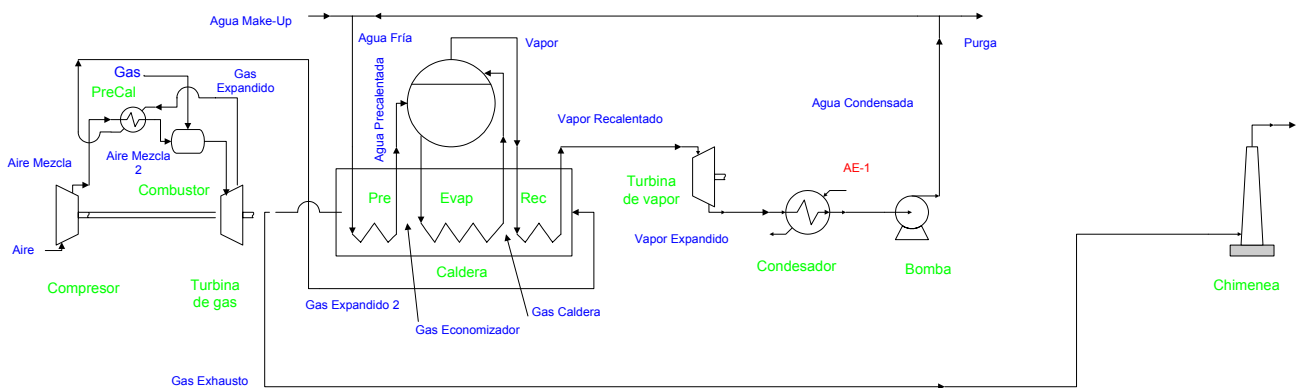


Figura II.1: Circuito de potencia- ciclo combinado

Nótese que se utiliza un solo nivel de presión para la generación de vapor y puede o no incorporarse la turbina de vapor. Además, esta deberá expandir el vapor a un nivel de presión que permita luego una potencial integración con otras corrientes de proceso en la planta de captura de CO<sub>2</sub> o bien de la planta de desalinización (es decir, una turbina de contrapresión y no de condensación). En casos especiales, según la relación de producción entre agua y energía en plantas duales, podría utilizarse una turbina de extracción de vapor.

Según la figura, el compresor aspira aire en sus condiciones normales y lo presuriza. El aire es precalentado antes de su mezclado con el gas con el cual reacciona en el combustor. Los gases de combustión egresan a alta temperatura y presión y al despresurizarse en el expansor que forma parte de la turbina de gas, entregan su potencia mecánica al mismo.

El eje del expansor es solidario con el del compresor de aire y al propio generador de energía eléctrica. De esta forma, una parte de la potencia cedida por los gases al expansor se consume en la compresión del aire y la otra se consume en forma irreversible (ineficiencia o pérdida). Del resto, una gran parte se convierte en energía eléctrica (eficiencia bastante cercana a la ideal).

Los gases que abandonan la turbina de gas están lo suficientemente calientes como para aprovecharlos en un segundo circuito de potencia a base de vapor. En este circuito el gas en su punto más caliente se introduce al recuperador de calor (HRSG) a través del recalentador, enfriándose parcialmente. Luego intercambian calor para la evaporación del agua. El evaporador está formado por tubos verticales inundados que al calentarse producen el ascenso del fluido por convección hasta un recipiente de forma cilíndrica llamada domo en donde se produce la evaporación súbita.

El gas que abandona la caldera se encuentra más frío pero cuenta con energía útil que puede ser aprovechado para precalentar la alimentación del agua de caldera. Los gases finalmente se expulsan a la atmósfera a través de la chimenea.

El vapor generado en el domo, previa separación de sus gotas dispersas de agua, se recalienta como fue mencionado y una vez lograda la temperatura y presión deseadas se envía hacia la turbina de vapor en donde se descomprime y entrega su potencia mecánica, que se transforma en eléctrica en el generador solidario al expansor de vapor.

El fluido circulante del ciclo de vapor (agua) es tratado químicamente por lo que se lo emplea en un circuito cerrado. De esta manera, una vez lograda su despresurización se condensa y bombea hacia la caldera de vapor mediante bomba centrífuga, la que le aporta la presión necesaria para que pueda ingresar a la misma a través del precalentador.

El circuito de vapor se completa con una purga con el objeto de mantener baja las concentraciones de sales y de un make-up para reponer dichas pérdidas conservando un inventario de agua constante.

### **II.2.1 Modelado del Proceso de Generación de Energía Eléctrica.**

La planta descrita en el apartado anterior es típica en cuanto a la cogeneración se refiere. El modelado de tales plantas ha sido ampliamente estudiado en la bibliografía,

desde distintos puntos de vista. Por ejemplo, algunos autores han realizado un análisis termodinámico de la eficiencia de tales procesos y definiendo un modelo básico llamado “CGAM problem: Definition and conventional Solution” [Valero Antonio et al (1994)] en el cual se estudia el caso de una planta de potencia con ciclo combinado. El mismo fue tomado como uno de los modelos y punto de comparación para validar resultados.

En vista de lograr un modelo riguroso del complejo productor de agua y energía eléctrica, acoplado a una planta de captura de CO<sub>2</sub>, como se mencionó en el capítulo I, se desarrollará en esta tesis un modelo en Hysys®, herramienta para la simulación y optimización de procesos químicos de uso convencional. Para la simulación se incorporan los módulos representativos de los diferentes equipos presentes en el proceso, cuando existen en la base de módulos en Hysys®, o mientras que se desarrollan aquellos que no se disponen en la misma.

Del punto precedente puede apreciarse que son muchas las variables de interés, sin embargo mencionaremos las de mayor importancia. De los trabajos reportados en la bibliografía, y del análisis del proceso se concluye que las variables más importantes para la optimización del proceso de generación de energía son las siguientes, fijada la potencia a entregar:

- 1- *Caudal de gas natural.*
- 2- *Caudal de aire.*
- 3- *Caudal del agua en el ciclo de vapor.*

Estas son las principales variables operativas una vez adoptadas las presiones de operación tanto en el circuito de gases como en el de vapor. En el proceso de combustión tradicional, el caudal de aire es importante ya que valores bajos del mismo dejarían una parte de combustible sin quemar en forma completa. Puesto que el mezclado alcanza en esta situación nunca es completo y que la eficiencia de combustión nunca llega a la unidad no se emplea en general la cantidad de aire estequiométrica que aseguraría la combustión total, sino que se entrega con un cierto exceso. Debemos notar que un importante exceso de aire aunque asegure una combustión completa, redundaría en una inferior temperatura de los gases de combustión. Finalmente, el exceso de aire implica un exceso de consumo de potencia en la compresión al aumentar el caudal de

gases. Además, como se verá más adelante, cambia drásticamente la composición y caudal de gases a tratar en la planta de captura de CO<sub>2</sub>.

El caudal de combustible es importante ya que fija la energía entregada al sistema y el caudal de gases de desecho de la turbina. Ambos circuitos de potencia están muy integrados uno al otro. En efecto, un mayor caudal de agua en el circuito de vapor origina una mayor potencia entregada a la turbina pero implica una importante reducción de la temperatura de los gases de combustión a la salida del precalentador economizador. Es práctica usual en el manejo de calderas que dichos gases no se enfríen por debajo de su punto de rocío para evitar la condensación de gotas de agua en chimeneas y economizador, que a la larga producen en fenómenos de corrosión en dichos equipos.

Otras variables de interés (que conviene mantener en niveles acotados) son las temperaturas de las corrientes que intercambian calor. En el párrafo anterior se mencionó la importancia de no permitir la condensación como limitante de la temperatura a la que se puede enfriar los gases de combustión. Otro punto importante es el de proveer una adecuada fuerza impulsora en cada equipo de intercambio calórico a fin de acotar el área de transmisión de energía y, por lo tanto, menores costos fijos correspondientes a dichos equipos; al igual que asegurar flexibilidad en la operación ante distintos regímenes de carga eléctrica, lo cual no se logra cuando las diferencias de temperaturas son muy pequeñas, dada la dificultad de transferencia de calor cuando los caudales se modifican sustancialmente.

Resumiendo, fijando los niveles de presión en el vapor, una potencia a entregar y el acercamiento térmico mínimo permitido entre las corrientes, se busca la relación de caudales de agua del circuito de vapor, de aire y de gas en el circuito de gas que cumpliendo las mencionadas restricciones minimice un criterio objetivo.

Para encontrar el diseño óptimo debemos adoptar una función objetivo. Para nuestro caso se desea seleccionar la mejor de todas las alternativas factibles adoptando como criterio de optimización el costo de producción.

En el Anexo II se detallan los modelos/módulos considerados para cada uno de los equipos en función de los módulos disponibles y seleccionados en Hysys®. A continuación las hipótesis que permiten resolverlos:

### II.2.1.1 Corrientes

La tabla II.1 lista los componentes que forman parte del sistema de cogeneración. Incluye al gas combustible (asumido como metano puro aunque se agrega además hidrógeno de manera tal que el mismo proceso pueda ser aplicado a este combustible o bien al carbón gasificado que lo contiene entre sus componentes), los componentes del aire (oxígeno y nitrógeno) y los productos finales e intermedios de la combustión (monóxido y dióxido de carbono y agua).

Ciclo de Potencia		
##	Compuesto	Formula
1	Oxígeno	O <sub>2</sub>
2	Monóxido de carbono	CO
3	Dióxido de carbono	CO <sub>2</sub>
4	Hidrógeno	H <sub>2</sub>
5	Agua	H <sub>2</sub> O
6	Metano	CH <sub>4</sub>
7	Nitrógeno	N <sub>2</sub>

*Tabla II-1: Componentes en ciclo de potencia*

En tabla II.2 se indican los valores asumidos para las corrientes de entrada a la planta, ya sea combustible, aire, o agua de enfriamiento.

#### *Corrientes de Entrada a la planta*

"Gas"		
Variable	Valor	Unidad
Temperatura	25	°C
Presión	8.5	Atm
Flujo másico	Valor	Kg/h
Metano	1.000	Fracción molar

*Tabla II-2: Condiciones del gas natural*

"Aire"		
Variable	Valor	Unidad
Temperatura	25	°C
Presión	1.000	Atm
Flujo másico	Valor	Kg/h
Oxígeno	0.210	Fracción molar
Nitrógeno	0.790	Fracción molar

*Tabla II-3: Condiciones del aire*

"Agua Fría"		
Variable	Valor	Unidad
Temperatura	100.321	°C
Presión	30.000	Atm
Flujo másico	Valor	Kg/h
Agua	1.000	Fracción molar

Tabla II-4: Condiciones del agua retorno a caldera

Agua de Enfriamiento		
Variable	Valor	Unidad
Temperatura	25	°C
Presión	1.000	Atm
Flujo másico	Valor	Kg/h
Agua	1.000	Fracción molar

Tabla II-5: Condiciones del agua de enfriamiento

Componente	Fracción molar
Metano	0.92
Etano	0.04
Propano	0.02
CO <sub>2</sub>	0.01
N <sub>2</sub>	0.01
<b>Total</b>	<b>1.000</b>

Tabla II-6: Composición adoptada para el gas natural

#### II.2.1.2 Compresor de Aire

Equipo	Eficiencia Politrópica	Eficiencia Adiabática
Compresor	0.8250	0.75191

Tabla II-7: Eficiencias en el compresor de aire

#### II.2.1.3 Cámara de Combustión

Se asume nula la caída de presión del equipo.

#### II.2.1.4 Pre calentador de Aire

Tiene por objeto precalentar el aire que ingresa a la cámara de combustión aprovechando parte del calor que portan los gases que escapan de la turbina de gas. Se asume nula la caída de presión del equipo.

Pre calentador de aire		
Variable	Valor	Unidad
Caída de presión "Aire Mezcla"	0	Atm
Caída de presión "Gas expandido"	0	Atm
Temperatura "Aire Mezcla 2"	563.40	°C

Tabla II-8: Condiciones del pre calentador de aire



### II.2.1.5 Turbina de gas

Equipo	Eficiencia Politrópica	Eficiencia Adiabática
Expansor	0.8900	0.92230

*Tabla II-9: Condiciones de la turbina de gas*

### II.2.1.6 Sistema generador de Vapor (recuperador de calor)

Recalentador		
Variable	Valor	Unidad
Caída de Presión "Vapor"	0	Atm
Caída de Presión "Gas Expandido 2"	0	Atm
Temperatura "Vapor recalentado"	305.000	°C
Corriente de "Gas Expandido 2"	Por Tubos	
Corriente de "Vapor"	Por Coraza	

*Tabla II-10: Condiciones del recalentador*

Caldera		
Variable	Valor	Unidad
Caída de Presión "Agua Precaentada"	0	Atm
Caída de Presión "Gas Caldera"	0	Atm
Fracción vaporizada de "Vapor"	1	Adim
Corriente de "Gas Caldera"	Por tubos	
Corriente de "Agua Precaentada"	Por Coraza	

*Tabla II-11: Condiciones de la caldera*

Economizador		
Variable	Valor	Unidad
Caída de Presión "Gas Economizador"	0	Atm
Caída de Presión "Agua Fría"	0	Atm
Fracción vaporizada de "Agua Precaentada"	0	Adim
Corriente de "Gas Economizador"	Por tubos	
Corriente de "Agua Precaentada"	Por coraza	

*Tabla II-12: Condiciones del economizador*

### II.2.1.7 Turbina de vapor

Turbina de Vapor		
Variable	Valor	Unidad
Eficiencia adiabática	75	%
Presión de descarga	1.00	Atm

*Tabla II-13: Condiciones de la turbina de vapor*

### II.2.1.8 Condensador

El vapor expandido, una vez que abandona la turbina de vapor, se condensa mediante el uso de agua de enfriamiento para poder ser recirculado a la caldera para cerrar el ciclo del agua.

La tabla II.14 indica los valores de los parámetros adoptados para el equipo.

Condensador		
Variable	Valor	Unidad
Caída de Presión “Vapor Expandido”	0	Atm
Caída de Presión “AE-1”	0	Atm
Fracción vaporizada de “Agua Condensada”	0	Adim
Temperatura salida de “AE-1” (“AS-1”)	40	°C
Corriente de “AE-1”	Por tubos	
Corriente de “Vapor”	Por Coraza	

Tabla II-14: Condiciones del condensador

### II.2.1.9 Bomba centrífuga

Bomba centrífuga		
Variable	Valor	Unidad
Eficiencia adiabática	75	%
Presión de descarga	30.00	Atm

Tabla II-15: Condiciones de la bomba centrífuga

### II.2.1.10 Nodo divisor

Nodo divisor		
Variable	Valor	Unidad
Corriente de “Purga”	1.00	Kg/h

Tabla II-16: Condiciones del nodo divisor

### II.2.1.11 Nodo sumador

Nodo Sumador		
Variable	Valor	Unidad
Corriente de “Agua Make-up”	1.00	Kg/h

Tabla II-17: Condiciones del nodo sumador

## II.2.2 Estimación de costos. Modelo de costos

En este trabajo se adoptan funciones/modelos de costos propuestos en la bibliografía, según lo indicado en la tabla II.18. En la misma se indican en cada caso la cita correspondiente para la obtención de los parámetros necesarios. [Valero Antonio, et al. 1994][ Henao Carlos]

Equipo	Ecuaciones	Parámetros			
Compresor	$Z_{AC} = \left( \frac{C_{11} m_a}{C_{12} - \eta_{AC}} \right) \left( \frac{P_2}{P_1} \right) \ln \left( \frac{P_2}{P_1} \right)$	$C_{11} = 39,5 \$/(\text{Kg} / \text{s})$ $C_{12} = 0,9$			
Cámara de Combustión	$Z_{CC} = \left( \frac{C_{21} m_a}{C_{22} - \frac{P_4}{P_3}} \right) [1 + \exp(C_{23} T_4 - C_{24})]$	$C_{21} = 25,6 \$/(\text{Kg} / \text{s})$ $C_{22} = 0,995$ $C_{23} = 0,018 \text{K}^{-1}$ $C_{24} = 26,4$			
Turbina de Gas	$Z_{GT} = \left( \frac{C_{31} m_g}{C_{32} - \eta_{GT}} \right) \ln \left( \frac{P_4}{P_5} \right) [1 + \exp(C_{33} T_4 - C_{34})]$	$C_{31} = 266,3 \$/(\text{Kg} / \text{s})$ $C_{22} = 0,92$ $C_{23} = 0,036 \text{K}^{-1}$ $C_{24} = 54,4$			
Pre calentador aire	$Z_{APH} = C_{41} \left( \frac{m_g (H_5 - H_6)}{(U)(\Delta TML)} \right)^{0,6}$	$C_{41} = 2990 \$/(\text{m}^{1,2})$ $U = 18 \text{KW}/(\text{m}^2 \text{K})$			
Pre calentador agua e intercambiadores de Calor	$C_M = C_{EQ} \cdot F_{CM}$ $F_{CM} = B_1 + B_2 \cdot F_M \cdot F_P$ $\text{Log}(F_P) = C_1 + C_2 \cdot \text{Log}(P) + C_3 \cdot (\text{Log}(P))^2$ $\text{Log}(C_{Eq} \text{ }^\circ) = K_1 + K_2 \cdot \text{Log}(A_K) + K_3 \cdot (\text{Log}(A_K))^2$ $A_K = \text{área del intercambiador, } A(\text{m}^2)$	$K_1 = 3,4338$ $K_2 = 0,14450$ $K_3 = 1,0790 \cdot 10^{-2}$ $C_1 = -6,4990 \cdot 10^{-2}$ $C_2 = 5,250 \cdot 10^{-2}$ $C_3 = 1,4740 \cdot 10^{-2}$ $B_1 = 1,8$ $B_2 = 1,5$			
Caldera de vapor con Recalentador	$C_M = C_{EQ} \cdot F_{CM} \cdot F_{SH}$ $F_{CM} = B_1 + B_2 \cdot F_M \cdot F_P$ $F_P = C_1 + C_2 \cdot P + C_3 \cdot P^2$ $\text{Log}(C_{Eq} \text{ }^\circ) = K_1 + K_2 \cdot \text{Log}(A_K) + K_3 \cdot (\text{Log}(A_K))^2$ $A_K = \text{Flujo de calor, } Q(\text{KW})$	$K_1 = 2,1903$ $K_2 = 0,7644$ $K_3 = 0,0000$ $C_1 = 1,10$ $C_2 = -2,500 \cdot 10^{-2}$ $C_3 = 1,000 \cdot 10^{-3}$			
	Factor $F_{SH}$ (sobrecalentamiento $^\circ\text{C}$ )				
	0	50	100	150	$B_1 = 0,0000$
	1,00	1,10	1,15	1,20	$B_2 = 1,800$

Equipo	Ecuaciones	Parámetros
Turbina de Vapor	$C_M = C_{EQ} \cdot F_{CM}$ $F_{CM} = B_1 + B_2 \cdot F_M \cdot F_P$ $\text{Log}(C_{Eq}^{\circ}) = K_1 + K_2 \cdot \text{Log}(A_K) + K_3 (\text{Log}(A_K))^2$ $A_K = \text{Potencia Hidráulica, } 8000(KW)$ $C_M^a = C_M \cdot \left(\frac{W}{8000}\right)^{0,6}$	$K_1=2,9945$ $K_2=0,9542$ $K_3=0,0000$ $B_1=0,0000$ $B_2=3,50$ $F_P=1,0$ $W_{Max}= 8000 KW$
Bombas Centrifugas	$C_M = C_{EQ} \cdot F_{CM}$ $F_{CM} = B_1 + B_2 \cdot F_M \cdot F_P$ $F_P = C_1 + C_2 \cdot \text{Log}(P) + C_3 \cdot (\text{Log}(P))^2$ $\text{Log}(C_{Eq}^{\circ}) = K_1 + K_2 \cdot \text{Log}(A_K) + K_3 (\text{Log}(A_K))^2$ $A_K = \text{Potencia en el eje, } W_s(KW)$	$K_1=3.57930$ $K_2=0.32080$ $K_3=2.8500 \cdot 10^{-2}$ $C_1=0.16820$ $C_2=0.34770$ $C_3=0.48410$ $B_1=1.8$ $B_2=1.51$

Tabla II-18: Costo de equipos

Para obtener el costo de inversión se anualizan los costos fijos a través del factor de recupero de capital afectado de un coeficiente de costo de mantenimiento. Los costos operativos consisten en el costo del gas natural y de los servicios auxiliares (vapor de calefacción y agua de enfriamiento). Una forma de combinar tanto los costos operativos como los fijos es llevarlos a la misma escala de tiempo, por ejemplo, 1 segundo.

La velocidad de costo será:

$$\dot{Z}_i = \frac{Z_i CRF \varphi}{N * 3600} \quad (1)$$

Donde:

$Z_i$ : costo de compra del i-ésimo componente (\$)

CRF: factor de recuperación anual de capital (18,2 %). Surge de considerar una vida útil de la planta de 25 años y una tasa de interés de 5.52 %.

N: número de horas anuales de operación de la planta (8000 hs)

$\phi$ : factor de mantenimiento (1,06)

La velocidad de costo asociada al combustible:

$$\overset{\circ}{C}_f = c_f * \overset{\circ}{m}_f * LHV_f \quad (2)$$

Donde el costo unitario en base al calor de combustión inferior (LHV) es:  $c_i = 0,004$  \$/MJ. La velocidad de costo es, entonces:

$$\overset{\circ}{C}_T = c_f * \overset{\circ}{m}_f * LHV_f \sum_{i=1}^{MC} \overset{\circ}{Z}_i \quad (3)$$

Para la estimación de los costos operativos se emplean las ecuaciones proporcionadas en (Chemical Engineering, 2006):

$$\overset{\circ}{CS}_U = a * (CEPCI) + b * (CS_F) \quad (4)$$

Donde:

$CS_F$ : precio de la utilidad

a y b: coeficientes asociados a dicha utilidad (vapor o agua de enfriamiento)

En las tablas II.19 y II.20 se indican los factores utilizados para el cálculo

Agua de enfriamiento	a	b	
Módulo de proceso	$0,0001 + 3,0 * 10^{-5} * q^{-1}$	0,003	$q > 0,01 \text{ m}^3/\text{s}$
Planta	$0,00007 + 2,5 * 10^{-5} * q^{-1}$	0,003	$q < 10 \text{ m}^3/\text{s}$

Tabla II-19: Costos operativos

Vapor de calefacción	a	b	
Módulo de proceso	$2,7 \cdot 10^{-5} \cdot m_s^{-0,9}$	$0,0034 \cdot p^{0,05}$	$1 < p < 46 \text{ barg}$
Planta	$2,3 \cdot 10^{-5} \cdot m_s^{-0,9}$	$0,0034 \cdot p^{0,05}$	$0,06 < m_s < 40 \text{ Kg/s}$

*Tabla II-20: Costos operativos*

### II.2.3 Modelo de turbina de gas

En general las turbinas de gas comerciales se proveen con ciertas potencias nominales (esto es, no son factibles en cualquier valor) por lo que se realizó una búsqueda de equipos de dos marcas dominantes en el mercado a los efectos de comparación y ajuste.

Esto es importante ya que el simulador Hysys® no dispone de un modelo específico de turbina de gas por lo que la misma debe “componerse” a partir de los módulos disponibles y además porque, en general, los valores/equipos provistos en el mercado se ajustan a producciones discretas y no continuas, como el modelo genérico aquí planteado.

A continuación se describen algunos parámetros de turbinas que fueron ajustados de este modo y según características asumidas, por ejemplo el combustible (gas natural). En las siguientes tablas se muestran valores característicos de varios modelos comerciales y los resultados del modelo implementado en Hysys®, según los parámetros ajustados. Debe tenerse en cuenta que el modelo se especifica con valores de eficiencia y parámetros en cada módulo de simulación que permiten aproximar apropiadamente el comportamiento de distintos sistemas comerciales, según lo indicado en la tablas de los casos 1 a 4. En general, se aprecia que las de mayor potencia son las que mejor aproximan al costo de catálogo.

Caso 1) Siemens] SGT-800



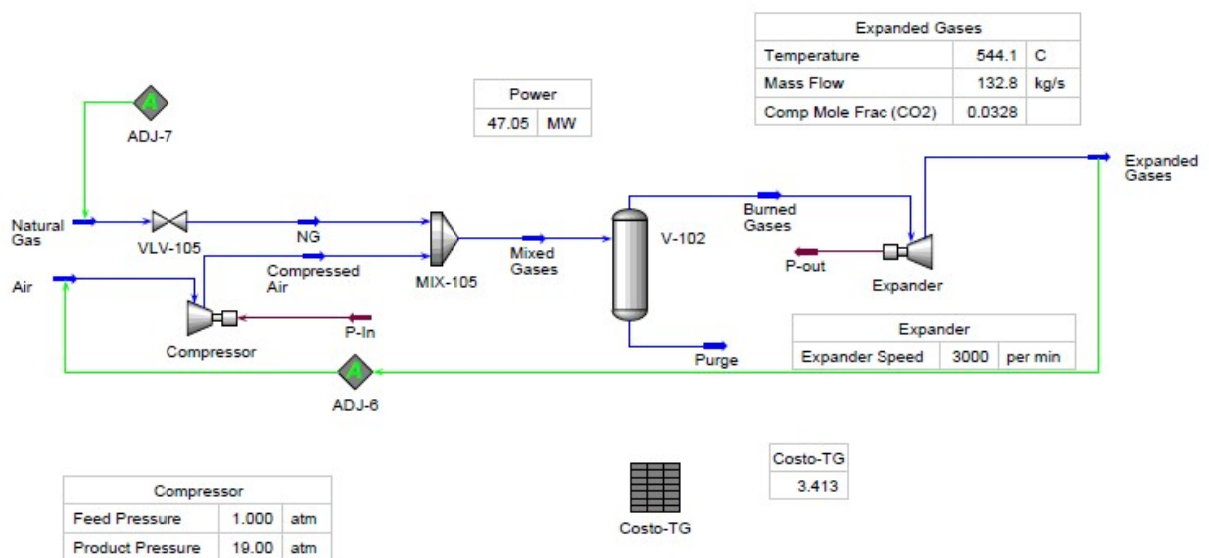
# SGT-800

## Generación de energía

**47,00 MW(e)**

- Combustible: gas natural\*
- Frecuencia: 50/60Hz
- Eficiencia eléctrica: 37,5%
- Consumo específico: 9.597 kJ/kWh (9.096 Btu/kWh)
- Velocidad de la turbina: 6.608 rpm
- Relación de compresión: 19:1
- Caudal de gases de escape: 131,5 kg/s (289,9 lb/s)
- Temperatura gases escape: 544 °C (1.011 °F)
- Emisiones de NO<sub>x</sub> (con DLE, corregidas al 15% de O<sub>2</sub> seco): ≤ 15 ppmV

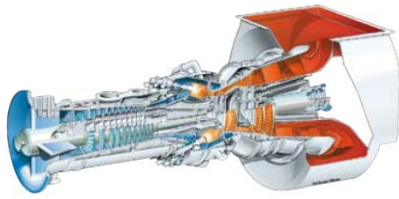
\*Otras opciones de combustibles gaseosos, líquidos o duales disponibles



Turbina		SGT-800	Modelo
Potencia	MW	47,00	47,05
Relación de presiones		19:1	19:1
Flujo de gases de escape	Kg/s	131,5	132,8
Temperatura gases de escape	°C	544	544,1
Precio	MM u\$s	12,17	3,413

Tabla caso (1)

Caso 2) Siemens] SGT-700



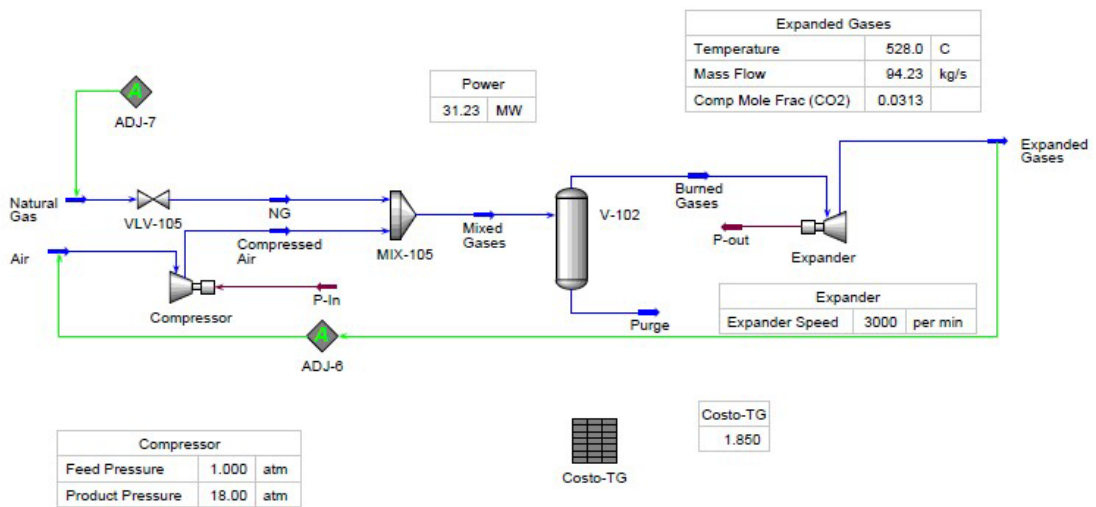
# SGT-700

## Generación de energía

**31,21 MW(e)**

- Combustible: gas natural\*
- Frecuencia: 50/60Hz
- Eficiencia eléctrica: 36,4 %
- Consumo específico: 9.882 kJ/kWh (9.367 Btu/kWh)
- Velocidad de la turbina: 6.500 rpm
- Relación de compresión: 18:1
- Caudal de gases de escape: 94 kg/s (208 lb/s)
- Temperatura gases escape: 528 °C (983 °F)
- Emisiones de NO<sub>x</sub> (con DLE, corregidas al 15 % de O<sub>2</sub> seco): ≤ 15 ppmV

\*Otras opciones de combustibles gaseosos, líquidos o duales disponibles



Turbina		SGT-700	Modelo
Potencia	MW	31,21	31,23
Relación de presiones		18:1	18:1
Flujo de gases de escape	Kg/s	94	94,23
Temperatura gases de escape	°C	528	528,0
Precio	MM u\$s	9,24	1,85

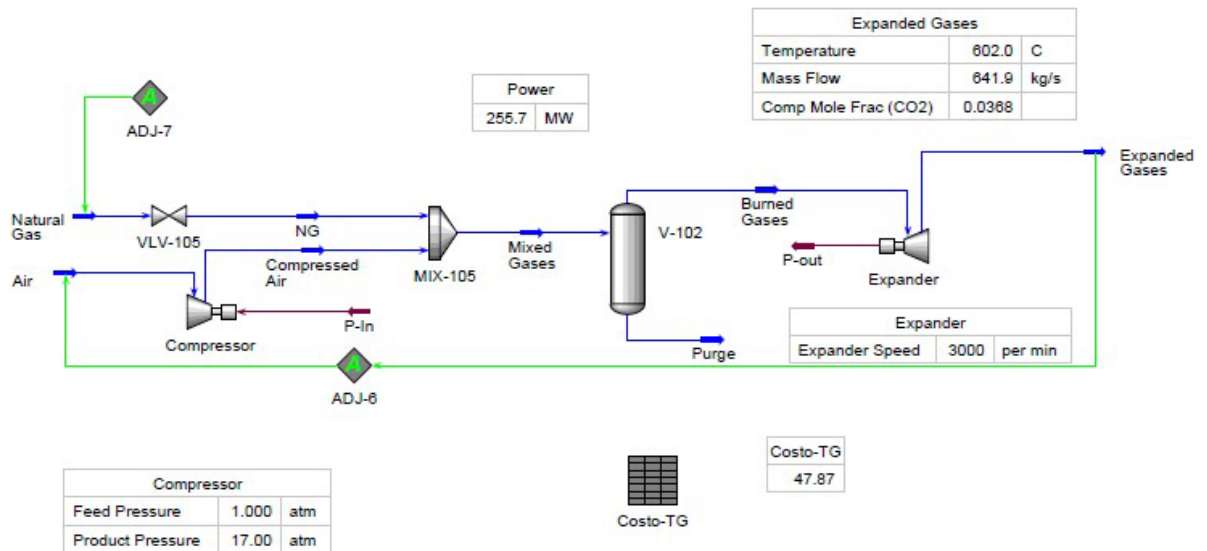
Tabla caso (2)



Caso 3) General Electric] MS9001FA



Simple Cycle Performance	50Hz
Output	255.6 MW
Heat Rate	9250 Btu/kWh (9757 kJ/kWh)
Pressure Ratio	17.0:1
Mass Flow	1,413 lb/sec (641 kg/sec)
Turbine Speed	3000 rpm
Exhaust Temperature	1,116°F (602°C)
Model Designation	PG9351FA



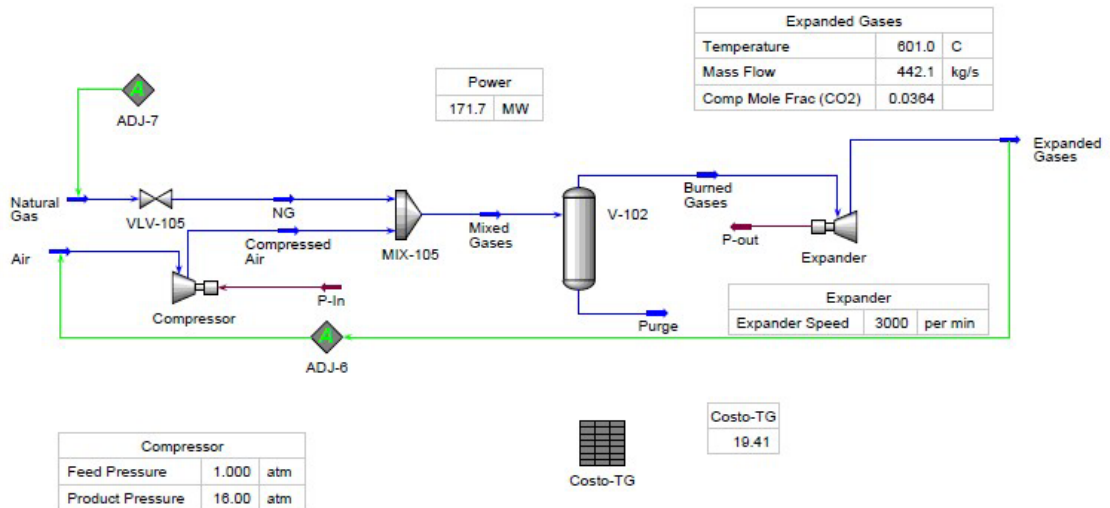
Turbina		MS9001FA	Modelo
Potencia	MW	255,6	255,7
Relación de presiones		17:1	17:1
Flujo de gases de escape	Kg/s	641	641,99
Temperatura gases de escape	°C	602	602,0
Precio	MM u\$s	50,86	47,87

Tabla caso (3)

Caso 4) General Electric] MS7001FA



Simple Cycle Performance	60Hz
Output	171.7 MW
Heat Rate	9,360 Btu/kWh (9,873 kJ/kWh)
Pressure Ratio	16.0:1
Mass Flow	981 lb/sec (445 kg/sec)
Turbine Speed	3600 rpm
Exhaust Temperature	1,114°F (601°C)
Model Designation	PG7241FA



Turbina		MS7001FA	Modelo
Potencia	MW	171.7	171,7
Relación de presiones		16:1	16:1
Flujo de gases de escape	Kg/s	445	442,1
Temperatura gases de escape	°C	601	601,0
Precio	MM u\$s	35,23	19,41

Tabla caso (4)

## II.2.4 Resultados numéricos. Discusión

Como ya fue mencionado anteriormente, la función objetivo en el presente caso de estudio es el costo total e incluye tanto los costos operativos como los de inversión de los equipos, según se detalla en la sección II.2.2.

La potencia neta será aquella que resulte de la suma de las potencias de ambas turbinas (gas y vapor) restando aquella consumida por el compresor de la turbina de gas y se expresa en MW ( $P_{Neta}$ ).

El costo unitario de la electricidad (u\$/KW) generado resulta ser:

$$C_{Unitario} \left[ \frac{u\$}{KW \times hora} \right] = \frac{C_{Total} \left[ \frac{u\$}{seg} \right] * 3600 \left[ \frac{seg}{hora} \right]}{P_{Neta} [MW] * 1000 \left[ \frac{KW}{MW} \right]} \quad (5)$$

Las restricciones incorporadas al modelo garantizan la producción de una potencia determinada, temperaturas mínimas y/o máximas en ciertos equipos, acercamientos mínimos de temperatura en los equipos de intercambio térmico y parámetros tecnológicos a cumplir debido a la operación de los equipos. En la tabla II-21 se indican todas las restricciones de desigualdad utilizadas en la optimización. Las restricciones de igualdad consisten en los parámetros adoptados para cada equipo y detallados en cada modelo en la sección II.2, al igual que en la determinación de los parámetros de las corrientes de entrada a la planta, descritos en la misma sección.

Restricción	Objeto	Operador	Valor	Unidad
Potencia Neta	$W_{TG} + W_{TV} - W_{AC}$	=	Parámetro especificado	
$T_{GEX} - T_{AF}$	Economizador	$\geq$	30	$^{\circ}C$
$T_{GEC} - T_{APC}$	Caldera	$\geq$	30	$^{\circ}C$
$T_{GC} - T_V$	Caldera	$\geq$	30	$^{\circ}C$
$T_{GE2} - T_{VR}$	Recalentador	$\geq$	30	$^{\circ}C$

Tabla II-21: Tabla de restricciones

Las *variables a optimizar* (recordar que se adoptaron las presiones de operación de las turbinas y de la de la caldera, tomándolas de procesos típicos para este tipo de plantas, y por lo tanto conforman restricciones de igualdad) en nuestro caso son los flujos de gas, de aire y de agua (en el circuito de vapor) que para cierta potencia implican un costo mínimo.

Adoptando la potencia como un parámetro del modelo y utilizando el método de optimización MIXED se obtiene la curva de puntos óptimos ilustrada en la Figura II.2. Esto es, cada punto de la curva corresponde a una optimización del proceso, tomando las variables de optimización y restricciones descritas en el modelo.

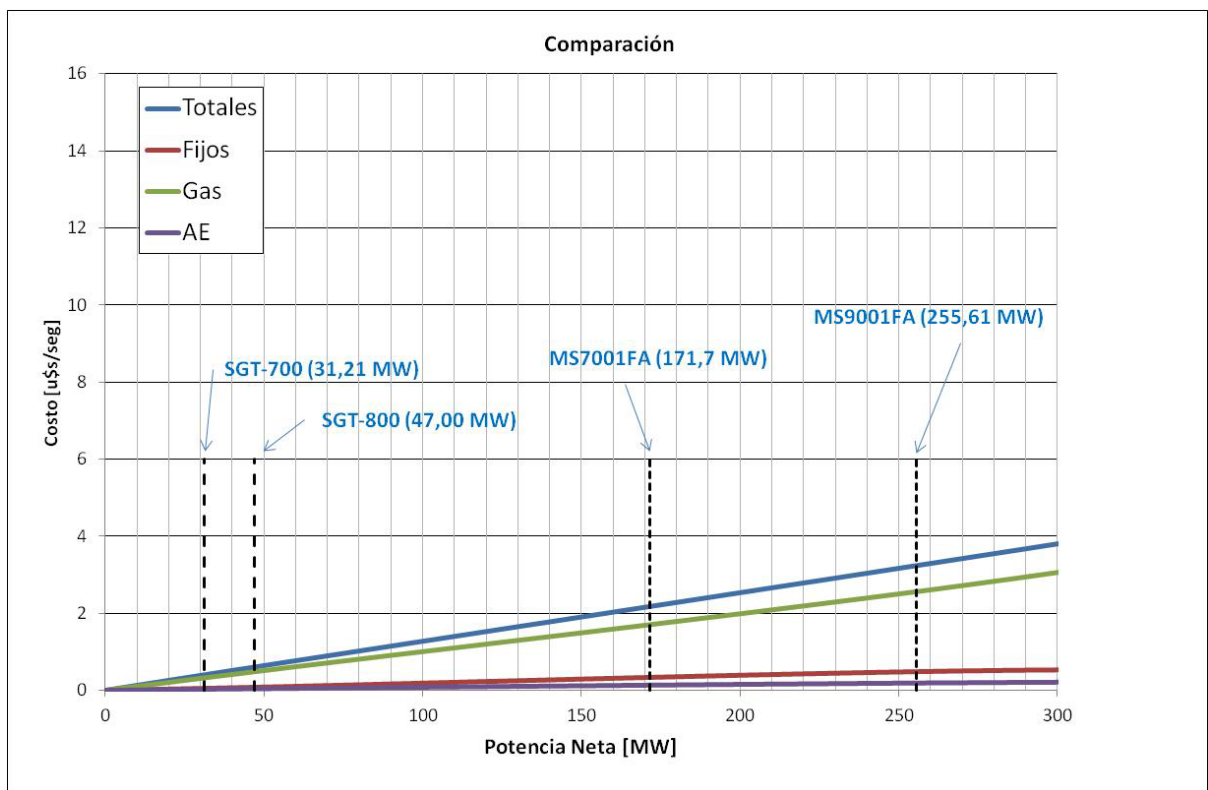


Figura II.2: Curva de costo total en función de la potencia neta

Si visualizamos el costo unitario tal como lo representa la ecuación (5), de la Figura II.2 se advierte que la curva tiene un crecimiento prácticamente lineal. Se concluye que el costo unitario promedio resulta de 0.0455 [u\$/KW h] con un desvío estándar de 0.0016 [u\$/KW h]. Si bien la función de costos utilizada es suficientemente rigurosa y contempla factores de escala en todos los equipos, el costo unitario de la potencia producida no depende del tamaño de la planta. Esto se explica debido al costo de energía dominante, según se aprecia en la figura, la cual discrimina entre todos los

costos considerados. Por lo tanto, podemos hablar de un costo unitario constante, si se diseña la planta en condiciones óptimas, para todo el rango de producción estudiado.

Las curvas mencionadas se obtuvieron aplicando la herramienta OPTIMIZER (Hysys®) para valores de potencia neta que van desde 50 MW hasta 300 MW; esto es, las variables operativas se determinaron para obtener la solución óptima correspondiente a cada valor de potencia neta. La convergencia exigió, por momentos, estrategias de inicialización específicas a fin de facilitar el proceso de optimización.

Se ha mostrado en esta sección que es posible crear modelos en general rigurosos y ajustados según sistemas reales, para representar el comportamiento de una planta simple de cogeneración por ciclo combinado utilizando el simulador HYSYS. Se realizaron optimizaciones de la planta de generación de potencia, establecido un valor de potencia neta entregada y asumiendo acercamientos mínimos de temperaturas en los diferentes equipos de intercambio térmico como restricciones.

Para la corriente de gas exhausto se ha fijado una presión tal que los gases de escape cuente con la fuerza impulsora suficiente para ingresar a una eventual planta de absorción. Con respecto a la descarga de vapor, se pretende conservar cierto nivel térmico para analizar una potencial integración energética con respecto a la planta de captura de CO<sub>2</sub> o su acoplamiento a plantas duales de desalinización. Así planteado el problema, las variables de optimización los acercamientos térmicos entre corrientes que intercambian calor y los flujos operativos de los fluidos principales, (gas, agua y aire). Los acercamientos térmicos en cada equipo de intercambio, como se ha visto, se restringen mediante restricciones de desigualdad que se incorporan al programa de optimización. Se adopta como acercamiento mínimo permitido, 30 grados para intercambios de calor donde participa una corriente líquida y una de gas y 10 grados para intercambios entre corrientes líquidas.

Se ha mencionado que el costo total está fuertemente asociado al costo del combustible, que es el dominante. El costo o precio unitario en la planta de generación es prácticamente constante, dado que el costo dominante es el costo del combustible en lugar de los costos de inversión por lo que el factor de escala no incide según los valores asumidos para el cálculo del factor de recupero de capital (tasa de interés y vida útil de la planta, en el modelo de costos adoptado). Si se realizan cambios en dichos valores,

tomando en cuenta valores típicos en proyectos de inversión, el comportamiento descrito se mantiene. Debe remarcarse en este punto, que si se consideran sistemas más complejos de cogeneración, con más niveles de presión, relativamente el costo de inversión se incrementa y los costos operativos se reducen. Por lo tanto, podría no ser válido en este caso el comportamiento prácticamente lineal del costo en función de la potencia, y por lo tanto podrían existir variaciones en el precio unitario de la energía, en función del factor de escala.

No obstante, a partir de las comparaciones realizadas con valores reportados en la bibliografía, de diversas fuentes y sistemas de generación, se concluye que de existir tal comportamiento, la variación aludida en el precio unitario es mínima, y en particular, no reviste demasiada importancia frente a la componente que agregaría el costo de la planta de desalinización y el costo extra que involucraría la captura del CO<sub>2</sub> generado. Esto se debe, entre otros factores, a que el costo de inversión y operación de tales plantas son considerables, y significativos en comparación con la planta de generación propiamente dicha, según se verá en el capítulo IV. Por otro lado, si bien un incremento en la eficiencia agregando mayor inversión en la planta de generación se traduce en un menor consumo de combustible por KW-h generado, y por ende en un menor caudal de gases a la planta de recuperación; este factor es de menor relevancia comparado con el incremento de costos que involucra la captura de una tonelada de CO<sub>2</sub> y la magnitud de gases producidos, aún a eficiencias muy significativas (debido a su comportamiento asintótico respecto de la inversión).

La potencia neta de la planta despreciando los pequeños consumos en las bombas es la suma de las aportadas por las turbinas y este valor puede obtenerse de diferentes maneras mostrando un alto nivel de acople que existe entre las variables. En otras palabras, una misma potencia neta se podría conseguir con un arreglo diferente de potencias aportadas por ambas turbinas. Esta característica dificulta la tarea de optimización. No obstante, debe remarcarse que las alternativas estructurales adecuadas para integrarse a planta de desalinización y captura de CO<sub>2</sub>, según la práctica industrial, y las restricciones que imponen dichos procesos, son acotadas.

Por otra parte, con respecto al exceso de aire, una operación de la turbina de gas en condiciones cercanas a la relación estequiométrica suministraría más potencia y

gases a altas temperaturas, pero desde el punto de vista técnico lleva a la posibilidad de dañar la turbina de gas, y en lo económico dispara los precios exponencialmente.

En cuanto a las restricciones a los acercamientos térmicos definidas, del análisis de las soluciones obtenidas se observa que, como se espera, la solución óptima lleva a las restricciones a ser activas. Los valores de acercamiento mínimo asumidos, en particular para intercambios líquido-líquido resultan conservativos, pero se asegura flexibilidad ante perturbaciones, en particular teniendo en cuenta que se integrarán tres plantas en el complejo final.

Resumiendo, se ha definido un esquema representativo y simple para una planta de generación termoeléctrica que nos permite relacionar las principales variables del sistema y obtener un costo óptimo por Kw-h de generación, con lo cual se tiene una base de comparación indispensable para avanzar en el estudio de la factibilidad técnica y económica de un proceso ecológico; en el cual se capture el CO<sub>2</sub> contenido en los gases de escape, según una restricción impuesta a la cantidad que pueda emitirse a la atmósfera; mientras que por otra parte, se podría cumplir simultáneamente con una producción de agua especificada, conformando un sistema dual con captura de CO<sub>2</sub>.

### **II.3 Modelado de Sistemas de Desalación de Aguas de Mar por Métodos Térmicos incluyendo Plantas de Simple y Doble Propósito.**

Existen numerosos procesos de desalación de aguas de mar, que van desde procesos basados en ósmosis inversa hasta procesos por evaporación flash múltiple etapas, incluyendo la compresión térmica del vapor mediante el uso de eyectores (“termo-compresión”) y/o compresión mecánica de vapor empleando compresores. Las plantas desalinizadoras de agua de mar por evaporación se utilizan para obtener grandes cantidades de agua potable. Existen también los procesos denominados “híbridos” que combinan distintos principios para explotar las ventajas de cada proceso, y minimizar las desventajas, a través del procedimiento sinérgico de la integración. Todos los procesos mencionados son objeto de constante investigación para, principalmente, reducir el costo de inversión y el consumo energético asociados. La tendencia mostrada durante los últimos años indica que por confiabilidad y costos, los procesos por Osmosis Inversa y por Evaporación, son los más utilizados. Entre los métodos de destilación por consumo de energía térmica, el más usado es el de Evaporación Flash en Múltiple Etapas (EFME), el cual será considerado para su estudio en esta tesis. En la

próxima sección se describen brevemente los principios básicos de funcionamiento incluyendo sus posibles modos de operación.

Una forma de aprovechar el calor excedente en plantas de generación de energía eléctrica es utilizarlo para desalinizar agua del mar para obtener agua potable, conformando las plantas duales. Dada la escases de agua dulce en el mundo y la disponibilidad de aguas salobres, esta alternativa es atractiva; en particular cuando las poblaciones carecen del recurso mencionado, a la vez que la provisión de energía es imprescindible y por lo tanto disponibles los calores de desecho en tal proceso.

Los procesos de desalinización basados en métodos térmicos son considerados de uso intensivo de energía, debiéndose optimizar el consumo energético y/o los costos de inversión. Para ello, estos procesos son integrados con los que generan energía eléctrica (procesos duales) a los efectos de minimizar el consumo energético, aunque a expensas de incrementar el costo de capital.

En general, los sistemas de desalinización se acoplan con plantas de cogeneración (ciclo combinado de gas natural), en las cuales ya existe un principio de integración entre la(s) turbina(s) de gas y la(s) turbina(s) de vapor. Es posible entonces aprovechar la energía calórica disponible en algunas de las corrientes de desecho (vapor exhausto por ejemplo) de las turbinas de vapor (extracción, condensación) para utilizarla como medio de calefacción en el proceso de evaporación flash por etapa (EFME). Si se pretende analizar las alternativas posibles en el sistema de evaporación múltiple etapas, según todas las alternativas de circulación de vapor y líquidos, al igual que los posibles reciclos, se debe analizar un espacio de alternativas importante, que debe resolverse utilizando métodos de programación matemática, o algoritmos apropiados de síntesis de procesos [Mussati y col. (2001 a,b, 2003, 2004 a,b,c, 2005, 2006 a,b, 2007) ; Shenoy (1995) ; Caballero y Grossmann (2005, 2006), entre otros].

Si bien la integración de estos procesos podría ser efectiva desde el punto de vista del consumo energético, no resuelve el problema asociado a las emisiones de los gases de combustión. Una forma de resolver este problema es minimizar el costo de captura de CO<sub>2</sub> utilizando adecuadas técnicas de síntesis de procesos, contemplando todas las combinaciones posibles entre el proceso de cogeneración, el de evaporación EFME y el de captura de CO<sub>2</sub>.



### **II.3.1. Desalinización por Evaporación Flash Múltiple Etapa (EFME).**

El proceso EFME es muy similar al proceso de Evaporización de Múltiple Efecto (EFME). La diferencia entre ellos radica en la manera en que se produce la evaporación. En los sistemas EFME la fuerza impulsora es el gradiente de temperatura entre el vapor que proviene del efecto previo y la salmuera; mientras que en el sistema EFME la fuerza impulsora para la evaporación es el gradiente de presión establecido en cada etapa, provocando un “flasheo” sucesivo del fluido circulante.

Los sistemas de evaporación flash múltiple etapa se clasifican en función de la manera en que se considera la corriente de reciclo. El evaporador EFME “Once Through” es el caso más simple ya que no considera el reciclo de parte de la corriente de desecho. Los sistemas que incorporan el reciclo son el EFME-Mixer y el “convencional” EFME-BR. En el primero, la corriente de reciclo se ubica en la última etapa, mientras que en EFME “convencional” se ubica aguas arriba. El reciclo permite reducir el costo de tratamiento del agua de mar, pero incrementa el valor de la salinidad promedio de los fluidos circulantes.

A continuación, se describen los fundamentos y las características más importantes a considerar en el diseño óptimo de este tipo de evaporadores. Se mencionan los más importantes utilizados en la práctica, aunque existen otras alternativas publicadas respecto de arreglos estructurales para dichos sistemas [Mussati y Col, (2003, 2004, 1,b,c, 2007)].

#### **II.3.1.1 Evaporador flash múltiple etapa “convencional” EFME-BR**

En la figura II.3 se muestra un diagrama de flujo del proceso Evaporador Flash Múltiple Etapa (EFME) o más bien de múltiples etapas de equilibrio. La figura II.4 representa dos tipos de etapas individuales de equilibrio, una con sus flujos perpendiculares y la otra con los flujos paralelos. Es de destacar que en el primer caso son necesarios codos que conecten los tubos desde una cámara a la siguiente no siendo necesario en el otro ya que son coaxiales. El flujo de agua salada que ingresa (en el esquema desde la izquierda y en la parte inferior), se descomprime y vaporiza parcialmente. La parte vaporizada atraviesa un demister que tiene por objeto retener las gotas de salmuera que pudieran haberse arrastrado. El vapor se condensa en la parte externa de los tubos y se recoge en una bandeja que separa el destilado y lo acumula con los obtenidos en las otras etapas.

El fluido que produce la condensación (absorbe calor) y al mismo tiempo se precalienta, es la propia alimentación de agua de mar. De este modo el agua de mar (salmuera) se va concentrando mientras que por otro lado el destilado suministra el agua dulce.

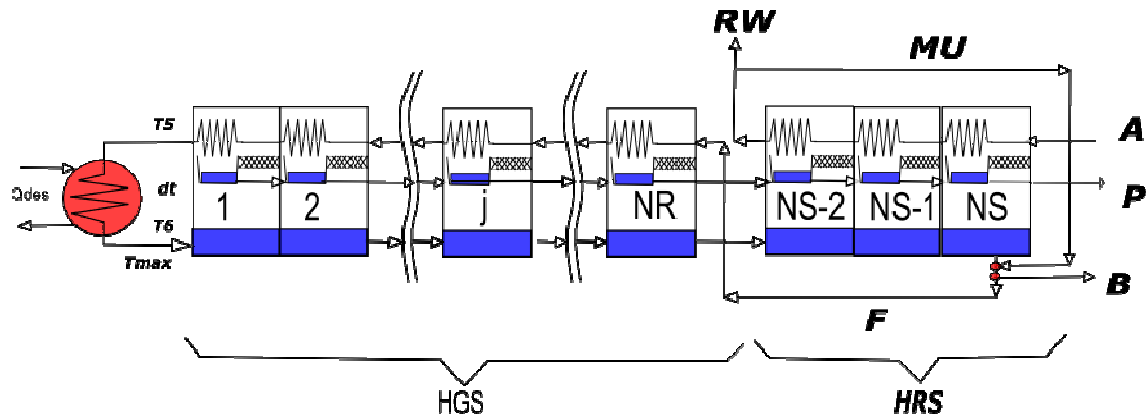


Figura II.3 Evaporador flash múltiple etapa convencional” EFME

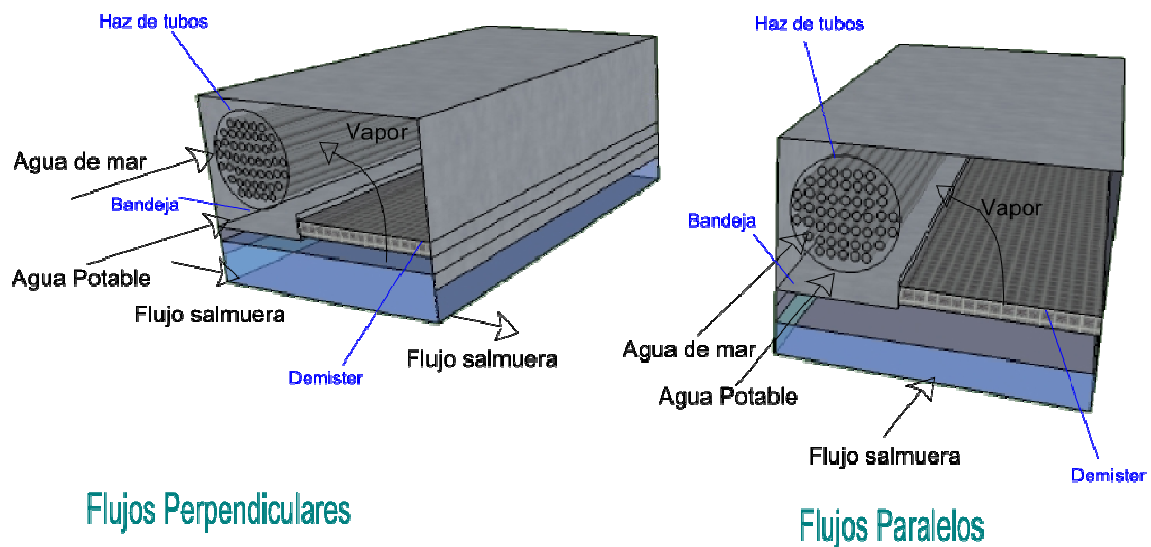


Figura II.4 Etapa de equilibrio individual

Por lo tanto se recupera el calor que de otro modo se degradaría en agua de enfriamiento (en los tubos condensadores) o en calor sensible del destilado. La energía externa a proveer es sólo la necesaria en el calentador principal (QDes) y para mantener el vacío en las cámaras.

Por lo tanto una planta desalinizadora (EFME) está compuesta por tres secciones principales: de “recuperación de calor”, de “eliminación de calor” y el calentador principal. Las secciones de recuperación y eliminación de calor se dividen en un número desigual de etapas.

La zona de “rechazo de calor” es llamada así porque en ella se necesita una corriente refrigerante adicional para lograr la condensación del vapor producido. Esto se debe a la presencia del reciclo.

En la zona de “recuperación o eliminación de calor” la alimentación que surge de mezclar la fracción de desecho reciclada y la alimentación externa propiamente dicha se precalientan con el vapor condensante producido en esta zona.

Por último, en el calentador principal, se aporta calor con vapor o bien con el calor que entrega alguna fuente de energía, por medio de integración a otros procesos. Por ejemplo, en las llamadas plantas duales, este equipo sustituye al condensador de una planta de generación de energía eléctrica, por caso de cogeneración, como la descrita en esta tesis.

Por lo tanto, en las plantas de doble propósito se acoplan una planta de generación de potencia con una de desalación de agua de mar, en este caso EFME; o sea, se produce energía eléctrica y agua potable para satisfacer a la población correspondiente. Si se piensa en la alternativa de generación limpia, es evidente que además, como se expuso, una de las alternativas es acoplar una planta de captura de  $\text{CO}_2$ . Por lo tanto, desde el punto de vista de la optimización o síntesis de procesos, ahora se tiene un complejo que simultáneamente produce energía eléctrica, agua potable y dióxido de carbono. Esto hace que el problema crezca en forma importante desde el punto de vista de todas las variantes estructurales, y define entonces no solo un problema de importancia tecnológica, sino académico; ya que los desafíos tanto en el modelado como en la metodología de resolución son muy importantes.

Según la nomenclatura de la Figura II.3, la alimentación (F) y el agua de enfriamiento que ingresan a la temperatura  $T_0$  son calentadas en los tubos de los precalentadores de la sección de eliminación de calor [Fig. II.3]. La circulación del agua de enfriamiento (RW) tiene por función la eliminación del calor “en exceso” suministrado en el calentador principal, lo cual es necesario debido al reciclo (MU), para mantener una distribución de temperatura uniforme en las últimas etapas y controlar las variaciones de temperatura entre invierno y verano.

Parte del agua de enfriamiento (RW) se desecha al mar al alcanzar la temperatura ( $T_{SR}$ ), mientras que la alimentación (F) pasa por la zona de pre-tratamiento

de la alimentación. Los tratamientos del agua de alimentación a la planta tienen como objeto eliminar los materiales en suspensión y microorganismos, controlar y limitar la formación de incrustaciones y corrosión. En general, los tratamientos llevados a cabo son: cloración, filtración, control de incrustaciones, desgasificación y neutralización, los que se encuentran suficientemente discutidos en la bibliografía específica (El Sayed, 1980).

La alimentación se bombea a través del banco de tubos de la sección de recuperación de calor donde se precalienta. Luego, se calienta en el precalentador principal hasta la temperatura máxima ( $T_{Max}$ ) por el suministro de calor ( $Q_{Des}$ ) mediante vapor directo de caldera, corrientes de desecho de otros procesos o vapor de baja presión de centrales térmicas, entre otras posibilidades.

La salmuera recirculada ingresa a la primera cámara de flasheo a la temperatura  $T_{Max}$ . El límite superior admisible para esta temperatura es aproximadamente  $110\text{ }^{\circ}\text{C}$ , dependiendo del tipo de tratamiento utilizado para el acondicionamiento de la alimentación. Esto se debe a que a altas temperaturas de operación las sales presentes en la corriente de alimentación o en la salmuera producen graves problemas de incrustaciones y corrosión.

En la primera cámara de evaporación se flashea o evapora una pequeña fracción de la corriente formándose vapor libre de sales, provocando una disminución de la temperatura de la salmuera. La temperatura de la salmuera no-evaporada que ingresa a la segunda cámara es mayor que la temperatura de saturación del vapor formado en la primera cámara debido a la elevación del punto de ebullición (EPE) y al desequilibrio térmico debido a irreversibilidades en la operación de flasheo (“non-equilibrium allowance” NEA). El vapor formado fluye a través de una malla (demister) con el fin de eliminar partículas sólidas retenidas y se condensa en los tubos de los precalentadores. El calor cedido por la condensación del vapor produce un calentamiento de la corriente recirculada.

Entre las innumerables consideraciones desde el punto de vista del diseño de estas unidades, las más importantes están relacionadas con el sistema de transferencia de calor entre el vapor y la salmuera, cuyo objetivo es mejorar el rendimiento para un menor consumo energético. Estas consideraciones son las que determinan las distintas

variantes tecnológicas referidas a las unidades de evaporación (tubos horizontales, verticales, etc). Estas deben ser diseñadas de tal forma que permitan eliminar los gases no-condensables por ejemplo aire, CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>, que se filtran en las unidades de intercambio de calor, pre-calentadores y calentador principal, disminuyendo no sólo el coeficiente de transferencia de calor del vapor sino también su temperatura de condensación, afectando la performance de la unidad.

Normalmente se utilizan eyectores para la eliminación de los gases no-condensables. La decisión generalmente depende de la capacidad de la instalación y el nivel de vacío deseado, o el nivel de pre-tratamiento practicado.

La corriente líquida formada por la condensación del vapor se recoge por una bandeja colectora situada por debajo de la carcasa de tubos e interconectada etapa a etapa por aberturas especiales. Tanto la corriente de salmuera (B) como el destilado (P) fluyen entre las etapas como consecuencia de la fuerza impulsora establecida por el gradiente de presión, compuesto por la presión hidrostática y la presión de vapor existente en la cámara. La distribución de presiones se mantiene por un sistema de vacío. Debido al bajo gradiente de presiones y las dimensiones de las cámaras de evaporación, el flujo se asemeja al típico en canales y no al flujo en cañerías con restricciones (válvulas, placas orificios, etc.).

Según se mencionó, el pasaje del líquido entre las etapas se realiza a través de orificios especiales y regulables de difícil diseño, debido a que operan con una caída de presión de unos pocos mmHg y generalmente deben contemplar variaciones del caudal de operación. Estos procesos (flasheo-condensación) continúan en serie hasta la última etapa de la sección de eliminación de calor, en donde una parte de la salmuera se desecha al mar (B) y el resto se mezcla con la alimentación formando la corriente de recirculación. Luego, el destilado (producto -P-) se bombea desde la última etapa hasta los tanques de almacenamiento.

Otro de los aspectos importantes que merece una explicación es la corriente de reciclo. Si bien reciclar parte de la corriente de desecho implica un aumento general en la concentración promedio de sales a lo largo del evaporador (demandando mayores exigencias en el tratamiento de la alimentación para prevenir incrustaciones y corrosión) generando un impacto ambiental al desecharlo al mar, disminuye el caudal total de agua

de mar tratada por unidad de destilado producido y, en consecuencia, minimiza los costos de tratamiento. La presencia de esta corriente obliga a considerar un punto de alimentación cuyo nivel térmico (temperatura de mezcla entre la corriente de desecho más caliente y la del agua de mar), debe acomodarse al perfil de temperaturas de la salmuera a lo largo del equipo. Este hecho origina, como se mencionó al comienzo, la necesidad de disponer de dos zonas de niveles térmicos:

- a) la zona de “rechazo de calor”, llamada así porque en ella se necesita una corriente refrigerante adicional para lograr la condensación del vapor producido y,
- b) la zona de “recuperación de calor”, en la cual la alimentación que surge de mezclar la fracción de desecho reciclada y la alimentación externa propiamente dicha se precalientan con el vapor condensante producido en esta zona.

Se debe resaltar que el área de intercambio para el precalentamiento de la alimentación es significativa y de materiales especiales, determinando, por lo tanto, que los costos de inversión del equipo sean considerables. Analizando el sistema a producción constante, es posible establecer que, a medida que crece el número de etapas, decrece el área necesaria para la zona de precalentamiento, lo cual implica que el número de etapas no es arbitrario, ya que éste debe surgir de un análisis económico que balancee las variables mencionadas y el consumo específico de energía. Además, el número de etapas no puede ser excesivo, ya que existen limitaciones en la caída mínima de la presión entre etapas sucesivas, dado que el flujo entre ellas responde a un patrón de “canal” abierto, como se mencionara.

Como conclusión, en este tipo de proceso se puede obtener una buena performance, no obstante implica una instalación relativamente compleja y una importante inversión. Su operabilidad puede considerarse de una flexibilidad relativa, lo cual implica la necesidad de un sistema de control importante.

### **II.3.1.2. Evaporador flash múltiple etapa–mixer (EFME-M)**

La Figura II.5 muestra esquemáticamente el sistema EFME- M. Básicamente, los procesos de evaporación y condensación que se producen en el evaporador flash múltiple etapa-mixer (y la manera en que los distintos flujos de las corrientes fluyen) ocurren de la misma forma explicada en la sección anterior.

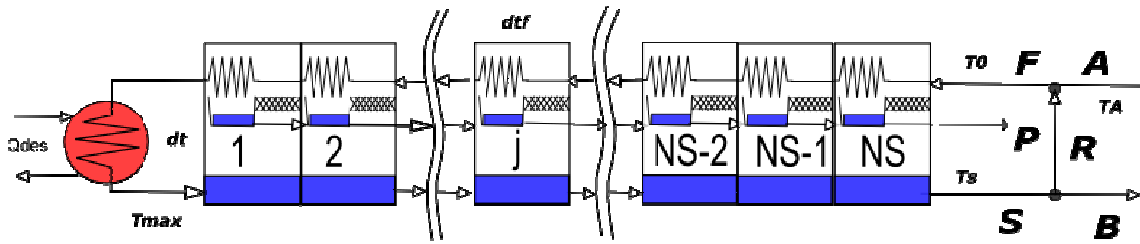


Figura II.5: Esquema de un EFME-M

Como se puede observar al comparar las Figuras II.5 y II.3, la única diferencia que existe entre ambos procesos es que aquí la corriente de reciclo se encuentra en la última etapa y no en etapas “aguas arriba”, no existiendo en este caso la división del desalador en las secciones de recuperación y de eliminación de calor. A pesar de introducir “irreversibilidades” desde el punto de vista termodinámico como consecuencia de mezclar dos corrientes a distintas temperatura y composición, esta manera de considerar la corriente de reciclo resulta atractiva desde el punto de vista del control, ya que la temperatura del agua de mar varía desde 15 C en invierno hasta 35 C en verano.

Es evidente que la introducción de la corriente de reciclo incrementa la concentración promedio, facilitando la corrosión e irreversibilidades, pero se minimiza el costo de pre-tratamiento de la alimentación “fresca”, igual que lo comentado para el proceso anterior.

### II.3.1.3 Evaporador Flash Múltiple Etapa “Once Through” (EFME-“OT”)

Como se observa en la Figura II.6, este sistema a diferencia de los dos anteriores; no considera el reciclo de parte de la corriente de desecho. Se utiliza en regiones donde el costo de pre-tratamiento de la alimentación (aditivos químicos) no tiene influencia en el costo total anual.

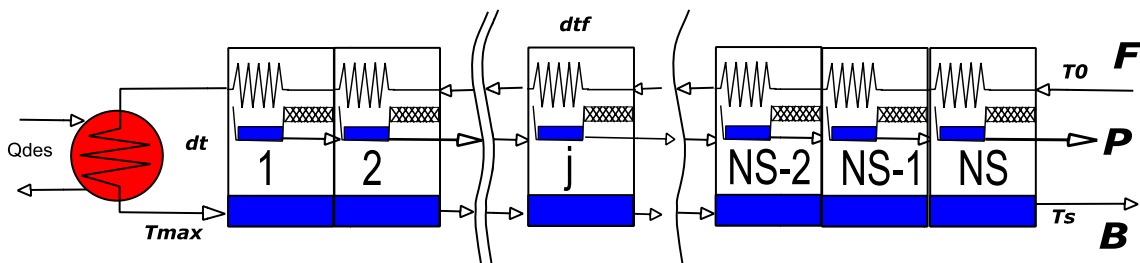


Figura II.6: Esquema de un EFME-OT

### II.3.2 Modelo simplificado para desaladores EFME-OT

A continuación, en base a previos modelos simplificados publicados en la bibliografía, se introduce un nuevo modelo para la estimación de los principales parámetros del proceso EFME. Si se analiza la figura II.6 que describe los fenómenos básicos que suceden en cada etapa “flash”, y el calentamiento en el calentador principal, siendo las variables las descritas en la misma figura, se puede escribir las siguientes ecuaciones para describir las relaciones entre las principales variables del proceso, y según las siguientes hipótesis [Aguirre, P., Scenna N (1989)].

Hipótesis:

- 1- Producción conocida (P)
- 2- Número de etapas, dato
- 3- Temperatura máxima de la salmuera conocida
- 4- Propiedades fisicoquímicas (promedio) conocidas
- 5- Se conoce el coeficiente global de transferencia de calor (U)
- 6- Velocidad de alimentación en los tubos, conocida
- 7- Rango de velocidad del vapor que abandona la cámara de flasheo, asumido
- 8- Calor aprovechado o suministrado ( $Q^{DES}$ ), conocido
- 9- Ancho de las cámaras de Flasheo, conocido

$$F1 \quad Q_{Des} = F Cp \Delta t \quad (6)$$

$$F2 \quad \Delta t = \Delta t_f + \Delta t_e + EPE \quad (7)$$

$$F3 \quad A_t = \left( \frac{F Cp}{U} \right) NS \ln \left( \frac{\Delta t - EPE}{\Delta t_e} \right) \quad (8)$$

$$F4 \quad NS \Delta t_f = T_{Max} - \Delta t - T_0 \quad (9)$$

$$F5 \quad P = F \left[ 1 - \left( 1 - \frac{Cp_m}{\lambda} \right)^{NS} \right] \quad (10)$$

Donde:

$Q_{Des}$ : Calor involucrado en el calentador externo

$Cp$ : Calor específico a presión constante del agua de mar



EPE: elevación del punto normal de ebullición de la salmuera  
 U: coeficiente global de transferencia de calor  
 NS: número de etapas ideales de Flasheo  
 $T_{Max}$ : Temperatura máxima a la que se calienta el agua de mar  
 $T_0$ : Temperatura de ingreso del agua de mar  
 P: Flujo de agua potable producido  
 $C_{p_m}$ : Calor específico a presión constante del agua potable  
 $\lambda$ : Calor latente de vaporización del agua de mar (promedio)  
 $\Delta t$ : Incremento de temperatura del agua de mar en el calentador externo  
 $\Delta t_e$ : Diferencia de temperatura efectivo en cada etapa para la recuperación de calor  
 $\Delta t_f$ : Diferencia de temperatura entre cada etapa (Flasheo)  
 F: Flujo de alimentación de agua de mar  
 $A_t$ : Área total de transferencia de calor de todo el desalador.

El modelo implica 15 variables y habiendo 5 ecuaciones independientes se requiere fijar el valor de 10 de ellas que pasarían a ser parámetros del modelo. Si se adopta/conocen ( $Q_{Des}$ ,  $C_p$ , EPE, U, NS,  $T_{Max}$ ,  $T_0$ , P,  $C_{p_m}$  y  $\lambda$ ) quedan como incógnitas ( $\Delta t$ ,  $\Delta t_e$ ,  $\Delta t_f$ , F y  $A_t$ ).

Con esto se asegura que el sistema pueda tener una solución única. En forma compacta el modelo queda expresado por:

$$F_1(F, \Delta t) = 0$$

$$F_2(\Delta t, \Delta t_f, \Delta t_e) = 0$$

$$F_3(A_t, F, \Delta t, \Delta t_e) = 0$$

$$F_4(\Delta t_f, \Delta t) = 0$$

$$F_5(F, \Delta t_f) = 0$$

Un algoritmo eficiente para la solución del sistema es el siguiente: se obtiene  $\Delta t$  de la ecuación  $F_1$  y  $\Delta t_f$  de la ecuación  $F_5$ . Aplicando a la  $F_4$  se obtiene una ecuación con una única variable: F

Algoritmo:

$$\begin{aligned} \Delta t &= F_1(F) \\ \Delta t_f &= F_5(F) > F_4(F_1(F), F_5(F)) = 0 \end{aligned}$$

- Se calcula F por métodos iterativos (Newton-Raphson)
- Conocida F se calcula  $\Delta t$  a partir de la ecuación F1
- Luego  $\Delta t_f$  se calcula a partir de la ecuación F5
- $\Delta t_e$  a partir de la F2
- Por último  $\Delta t$  de la F3.

En definitiva, el problema se limita a resolver una ecuación con una sola incógnita.

$$\Delta t = \frac{Q_{Des}}{F C_p} \quad (11)$$

$$\frac{P}{F} = \left[ 1 - \left( 1 - \frac{Cp_m \Delta t_f}{\lambda} \right)^{NS} \right] \quad (12)$$

$$1 - \frac{P}{F} = \left[ 1 - \frac{Cp_m \Delta t_f}{\lambda} \right]^{NS} \quad (13)$$

$$\left[ 1 - \frac{P}{F} \right]^{\frac{1}{NS}} = \left[ 1 - \frac{Cp_m \Delta t_f}{\lambda} \right] \quad (14)$$

$$\frac{Cp_m \Delta t_f}{\lambda} = 1 - \left[ 1 - \frac{P}{F} \right]^{\frac{1}{NS}} \quad (15)$$

$$\Delta t_f = \left\{ 1 - \left[ 1 - \frac{P}{F} \right]^{\frac{1}{NS}} \right\} \frac{\lambda}{Cp_m} \quad (16)$$

Reemplazando las variables explicitadas en (11) y (16) en la ecuación (9):

$$NS \left\{ 1 - \left[ 1 - \frac{P}{F} \right]^{\frac{1}{NS}} \right\} \frac{\lambda}{Cp_m} - T_{\max} + \frac{Q_{Des}}{F C_p} - T_0 = 0 \quad (17)$$

$$\Delta t_e = \Delta t_f - EPE - \Delta t \quad (18)$$

$$A_t = \left( \frac{F Cp}{U} \right) NS \ln \left( \frac{(\Delta t - EPE)}{\Delta t e} \right) \quad (19)$$

El área  $A_t$  solo es la correspondiente a las etapas; para calcular el área total debemos adicionar también el área del calentador exterior. De la figura II.7 se tiene:

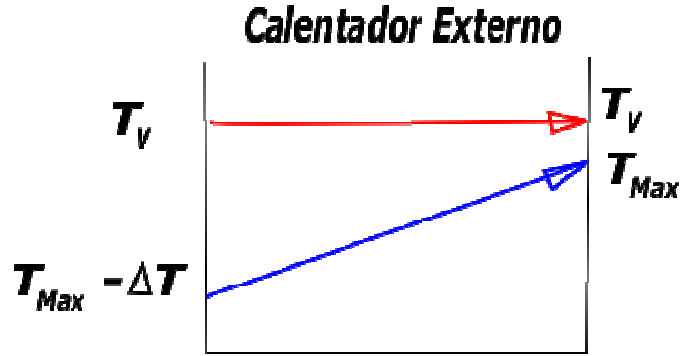


Figura II.7: Perfil de temperaturas en el calentador externo

$$\Delta TML = \frac{[T_v - (T_{Max} - \Delta t)] - [T_v - T_{Max}]}{\ln \frac{[T_v - (T_{Max} - \Delta t)]}{[T_v - T_{Max}]}} = \frac{T_v - T_{Max} + \Delta t - T_v + T_{Max}}{\ln \frac{[T_v - (T_{Max} - \Delta t)]}{[T_v - T_{Max}]}} \quad (20)$$

$$\Delta TML = \frac{\Delta t}{\ln \frac{[T_v - (T_{Max} - \Delta t)]}{[T_v - T_{Max}]}} \quad (21)$$

$$A_{Cal Ext} = \frac{Q_{Des}}{U \Delta TML} \quad (22)$$

$$A_{Transf} = A_t + A_{Cal Ext} \quad (23)$$

El modelo se completa incorporando los balances:

*Balance de masa en la corriente de agua de mar.*

$$F = P + B \quad (24)$$

luego

$$B = F - P \quad (25)$$

*Balance por componente:*

$$F x_S^F - B x_S^B = 0 \quad (26)$$

Donde  $x_S^F$  es la concentración de sal en el agua de mar y  $x_S^B$  es la concentración de la salmuera de deshecho.

$$x_S^B = \frac{F x_S^F}{B} \quad (27)$$

*Balance de energía:*

$$F H_F + Q_{Des} = P H_P + B H_B \quad (28)$$

$$F C_P (T_F - T_R) + Q_{Des} = P C_{Pm} (T_P - T_R) + B C_P (T_B - T_R) \quad (29)$$

$$F C_P (T_F - T_R) + Q_{Des} = P C_P (T_B - EPE - T_R) + B C_P (T_B - T_R) \quad (30)$$

Donde  $T_R$  es una temperatura de referencia. Si la tomamos igual a la de entrada del agua de mar,  $T_0$ .

$$Q_{Des} = P C_P (T_B - EPE - T_0) + B C_P (T_B - T_0) \quad (31)$$

$$Q_{Des} = P T_B - P(EPE + T_0) + B T_B - B T_0 \quad (32)$$

$$T_B C_P (P + B) = Q_{Des} + P C_P (EPE + T_0) + B C_P T_0 \quad (33)$$

$$T_B = \frac{Q_{Des} + P C_P (EPE + T_0) + B C_P T_0}{C_P F} \quad (34)$$

$$T_P = T_B - EPE \quad (35)$$

Dado que en el modelo presentado no es posible estimar el tamaño de las cámaras y por ende, el costo total, se proponen las siguientes ecuaciones para estimar ancho, alto y largo del desalador.

El flujo a través de los tubos ( $q_f$ ) en función del diámetro de los mismos ( $Dt$ ):

$$q_f = \frac{v_{liq} \pi Dt^2}{4} \quad (36)$$

Siendo  $v_{liq}$  una velocidad admisible para el líquido.

El flujo en función del número de tubos ( $Nt$ ):

$$qf = \frac{F}{\rho Nt} \quad (37)$$

El área de transferencia es a su vez:

$$At = \pi Dt B Nt NS \quad (38)$$

Se conforma un sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas. El número de tubos:

$$Nt = \frac{At}{\pi Dt B NS} \quad (39)$$

$$qf = \frac{F \pi Dt B NS}{\rho At} \quad (40)$$

$$Dt^2 = \frac{4 qf}{v_{liq} \pi} = \frac{4}{v_{liq} \pi} \frac{F \pi Dt B NS}{\rho At} = \frac{4 F Dt B NS}{v_{liq} \rho At} \quad (41)$$

Finalmente, el diámetro de los tubos resulta:

$$Dt = \frac{4 F B NS}{v_{liq} \rho At} \quad (42)$$

El número de tubos de la fila central (vertical) (N) se estima:

$$N = 4,481 \sqrt{Nt} \quad (43)$$

Y el de haz de tubos (DS):

$$DS = N Pt \sqrt{2} \quad (44)$$

Donde Pt es el pitch (separación entre centros de tubos)

La altura de la cámara a través del diámetro del haz de tubos y la altura del pool (LB)

$$H = 2 HP DS \quad (45)$$

La longitud total del desalador se estima a través de la evaporación del agua de mar para lograr el destilado, según la velocidad admisible y densidad de dicho vapor:

$$LD = \frac{P}{B v_{vap} \rho_{vap}} \quad (46)$$

Debe considerarse que LD debe ser mayor o igual que DS\*NS

El ancho de cámara (B) es dato inicial. Con estos valores se calcula el área total del desalador:

$$AS = 2 LD B + 2 LD H + B HS (NS + 1) \quad (47)$$

Con respecto a los alcances del modelo simplificado, es estrictamente aplicable a un desalador EFME-OT. Para el caso de un evaporador EFME-BR o convencional, que es mayormente utilizado, aproxima con similar performance sólo si se cumple que el punto de ingreso de la alimentación recirculada, en la zona de recuperación de calor, no produce discontinuidades importantes en el perfil de temperatura. De esta manera, todo el conjunto puede aproximarse como un único tren de evaporación.

Esta hipótesis se verifica generalmente, ya que es un objetivo de diseño

### II.3.3. Modelo de Costos

Cómo se mencionó en el capítulo anterior, el costo del desalador está afectado por diversos aspectos. Aquí, se considera el costo principalmente dependiente del consumo energético y del área (de intercambio y de las cámaras) valor de costo unitario  $C_A$  [u\$/m<sup>2</sup>]. El costo de las cámaras se afecta por un factor Ft, que se adopta para contemplar el espesor diferencial y el costo del maquinado del material de las cámaras, al igual que las restricciones y demás elementos que diferencia a la cámara del intercambiador que contiene. Puesto que las cámaras están en contacto con la salmuera caliente mientras que los tubos lo están con el vapor limpio, siendo este otro factor que contribuye a que el costo de las cámaras se encarece con respecto a los tubos.

$$C_{Desalador} = C_A \times (At + Ft \times AS) \quad (48)$$

Se asume para  $C_A$  un valor de 50 u\$/m<sup>2</sup>, y para el factor Ft de 20 en función de datos de costos existentes [Scenna, N , Mussati, S; (2008)]

### II.3.4 Casos de estudios.

A continuación se presentan dos casos de estudio, uno para modelar un evaporador simple y comparar los resultados obtenidos con otro publicado. El otro caso aborda un proceso dual.

#### II.3.4.1 Caso de Estudio 1: Estimación de los principales parámetros para el diseño de un desalador EFME-OT.

Para evaluar la performance del modelo desarrollado se toma un caso publicado en la bibliografía, (“Process synthesis: the multi-stage flash desalination system”, Hisham El-Dessouky, et al. 1998) respecto de un desalador del tipo once-through (figura II.8).

Se pretende calcular un desalador MSF-OT que procese un agua de mar con una salinidad de 42000 ppm y una temperatura de 30°C. La temperatura máxima de la salmuera es de 90°C y la del vapor de calefacción 10°C superior con un flujo de 0,156 [Kg/seg]. La producción deseada es de 1 [Kg/seg]. El desalador tendrá 23 etapas. El resto de los datos se presenta en la tabla II. 22.

Datos del problema:

Parámetros				
QDes	3,03E+05	<b>Kcal/h</b>		
Tmax	363	<b>°K</b>		
Cp	1,00	<b>Kcal/Kg °K</b>		
EPE	2	<b>°K</b>		
U	1719,69	<b>Kcal/Kg °K m2</b>		
NS	23			
T0	303	<b>°K</b>		
P	3,60E+03	<b>Kg/h</b>	1,00	<b>Kg/s</b>
CPm	1,00	<b>Kcal/Kg °K</b>		
Lamda ( $\lambda$ )	560,45	<b>Kcal/Kg</b>		

Tabla II-22: Parámetros adoptados

Incógnitas				
F	4.021E+04	<b>Kg/h</b>	10.81	<b>Kg/s</b>
$\Delta t$	7.542	<b>°K</b>		
$\Delta t_f$	2.28	<b>°K</b>		
$\Delta t_e$	3.261	<b>°K</b>		
At	<b>285.192</b>	<b>m<sup>2</sup></b>		
A <sub>cal ext</sub>	<b>13.14</b>	<b>m<sup>2</sup></b>		
A <sub>Transf</sub>	<b>298.33</b>	<b>m<sup>2</sup></b>		

Tabla II-23: Parámetros y resultados del problema

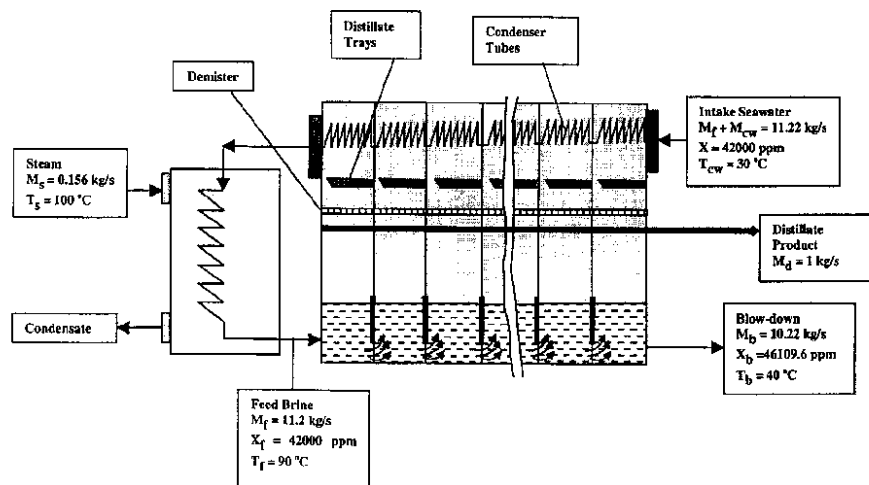


Fig. 4. Once-through multi-stage flash desalination process.

Figura II.8: Esquema de un EFME-OT del caso de estudio

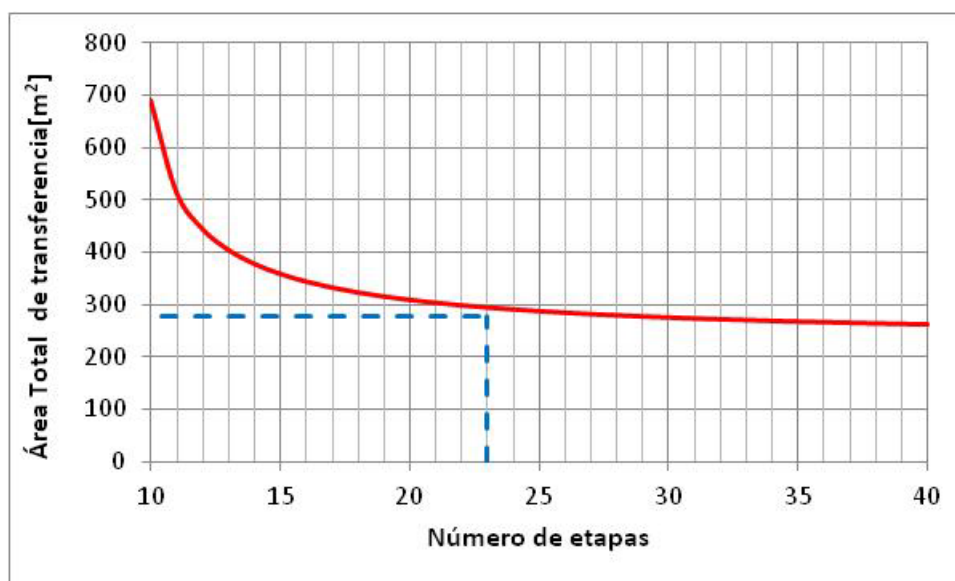


Figura II.9: Área de transferencia en función del número de etapas

Para comparar los resultados obtenidos por [El-Dessouky et al (1998)], se debe primero analizar el número de etapas adoptado en dicho trabajo. Para un análisis riguroso, tal variable resulta ser importante para la optimización. Según la figura II.9 (obtenida en función de corridas paramétricas de nuestro modelo), entre 20 y 25 etapas resultaría recomendable sin otros datos específicos para el diseño. Para 23 etapas, adoptadas en el trabajo de referencia, para este caso, el área total resulta 298,33 m<sup>2</sup> de



los cuales 285,192 corresponden a los tubos y 13,14 al calentador externo. La figura II.9, que como se ha expresado ha sido obtenida resolviendo el modelo simplificado paramétricamente en función del número de etapas, se ha presentado con el objetivo de justificar el número de etapas adoptado por los autores; y mostrar además su importancia como variable de optimización.

En dicha referencia, utilizando otro modelo simplificado se reportó un área total de 307.1 m<sup>2</sup> de los cuales 294,4 corresponden a los tubos y 12,7 al calentador externo. La diferencia es mínima y corresponde principalmente a que el modelo presentado aquí calcula el  $\Delta t_e$  mientras que en el trabajo de referencia se asume igual a 3. Otra diferencia se encuentra en la forma en que el  $\Delta t_f$  se calcula, en el presente caso, en función de la corriente que se precalienta o, como en el trabajo de referencia, de la salmuera.

Si bien ambos resultados se aproximan bastante es de destacar que los parámetros fisicoquímicos difieren ligeramente de aquellos adoptados por esta tesis. La importancia de dichos parámetros se verá reflejado en los próximos capítulos, al analizar un modelo riguroso implementado en Hysys®.

En efecto, si se desea obtener resultados más exactos se deberá recurrir a modelos más rigurosos tal como el que se presenta en el capítulo 3. En dicho modelo no solo se recurre a la rigurosidad desde el punto de vista de la fisicoquímica sino también en el cálculo de cada cámara de evaporación para la estimación del tamaño de las mismas, como a su vez de los costos totales. Además, el modelo presenta la posibilidad de variar el número de etapas, tomada como variable entera.

A continuación se presentan los resultados del modelo simplificado para un estudio paramétrico de la relación entre el área y la temperatura máxima a la cual se calienta la alimentación.

En la figura II.10 se observa una variación casi lineal del área de intercambio con la temperatura máxima adoptada y en la figura II.11 se muestra el flujo de alimentación necesario en función del mismo parámetro. Por último, en la figura II.12 se muestra para una temperatura máxima de 363 °K la variación del flujo de alimentación en función del número de etapas. Nuevamente puede verse que entre 20 y 25 etapas se encuentra el punto del comienzo del achatamiento asintótico respecto a la

variación positiva del flujo de alimentación y el área de intercambio en función del número de etapas.

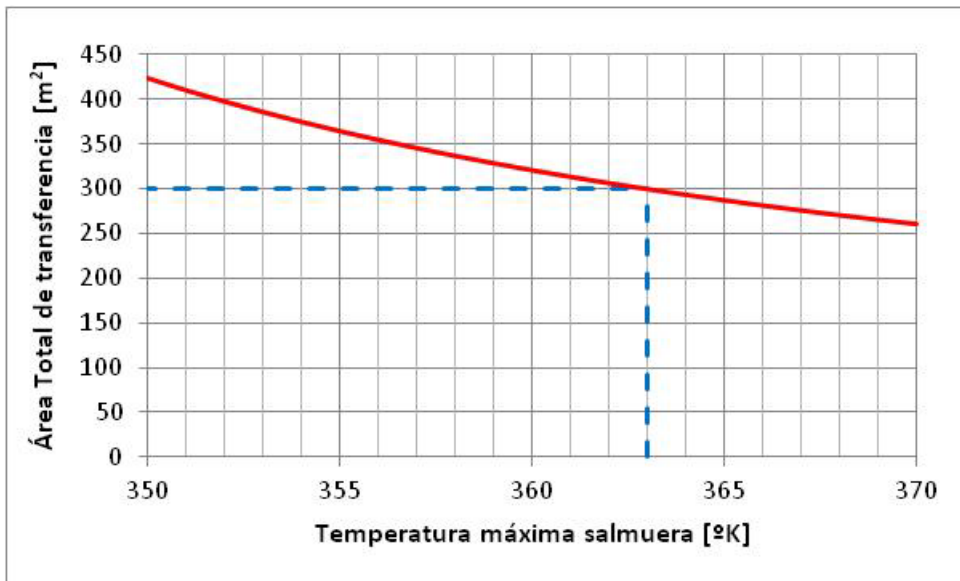


Figura II.10: Área de transferencia en función de la temperatura máxima de salmuera

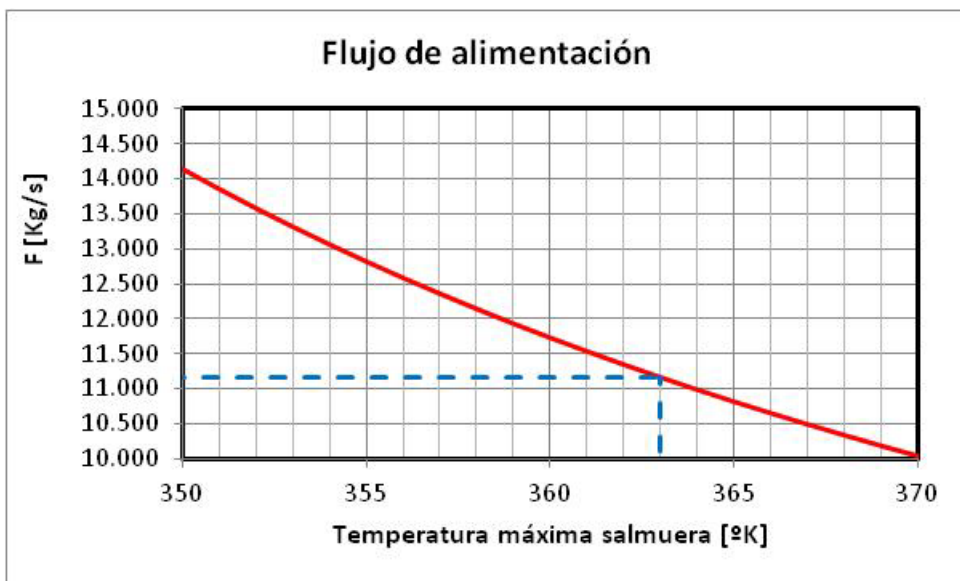


Figura II.11: Flujo de alimentación en función de la temperatura máxima de la salmuera

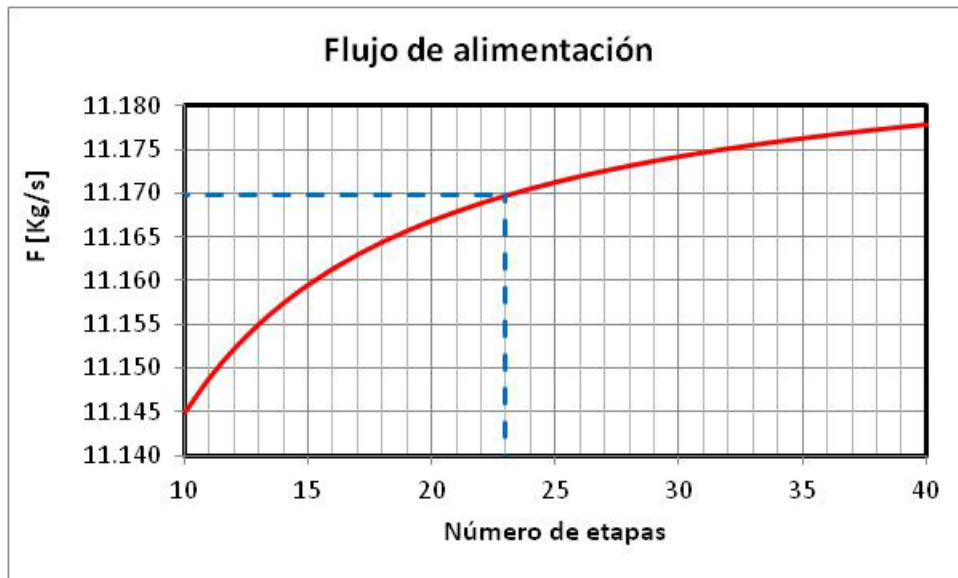


Figura II.12: Área de transferencia en función del número de etapas

Debe recordarse que, si bien un número de etapas mayor disminuye el área de intercambio como también lo hace la temperatura máxima necesaria de la salmuera, ésta tiene como limitante la temperatura máxima recomendada para evitar la corrosión o bien la temperatura disponible en la fuente de calefacción (el área del calefactor externo se haría infinita). Por otro lado, un número creciente de etapas implica un valor adicional creciente atribuible a un mayor número de cámaras de flasheo y por lo tanto de costo, y más importante, existe un límite debido al mínimo gradiente de presión admisible entre cámaras. El caudal de alimentación entonces, es función de la temperatura máxima adoptada ya que la presión en la primera cámara depende de ésta.

La estructura óptima debe lograrse considerando todas estas alternativas con los costos correspondientes.

#### II.3.4.2 Caso de estudio 2: Sistemas Duales

A continuación se modelará un proceso que acopla un sistema de generación de potencia por ciclo combinado con una planta de producción de agua potable (EFME) basado en el modelo simplificado ya presentado. Se pretende producir  $9,4 \times 10^4$  m<sup>3</sup>/día de agua potable y 330 MW de potencia.

Se propone acoplar una turbina de gas (ejemplo la MS9001FA de 255,6 MW) con un sistema e recuperación de calor (HRSG). Se adopta una turbina de vapor de un solo nivel de presión con descarga a la presión atmosférica (“back pressure”). Se calcula

el flujo de agua circulante tal que asegure una diferencia de temperatura mínima (que se da entre el agua fría que reingresa a la caldera y la salida de gases exhaustos) de 10 °C. De esta manera, la potencia obtenida a través del sistema de vapor es de 76 MW aproximadamente.

El calor que entrega al condensar (del vapor expandido) se integra con la demanda del calentador externo del desalador. Según el análisis de estos sistemas [Ali M. El-Nashar et al.; (2000)] la relación de potencia (en MW) a agua potable producida (MIGD: millones de galones imperiales por día) aconsejable (según diversos criterios operativos) resulta un rango característico según cada arreglo. Para el presente caso, y según los datos de producción requerida, el valor está incluido en el rango (9 a 18); el cual se corresponde con la adopción de una estructura como la propuesta (ciclo combinado-HRGS-turbina “back pressure”). La cantidad de agua entregada es de  $9.6192 \times 10^7$  litros/día, que para un consumo de 500 litros /persona.día da un estimado de 192.000 habitantes. El consumo per capita de energía estimado es 3000 kW.h con lo que la planta de energía, para el presente caso deja librado aproximadamente 165 MW para consumo industrial (no residencial).

En la figura siguiente se ilustra el flowsheet según el caso implementado en el simulador Hysys®. Se observa que el modelo simplificado del desalador ha sido incorporado al simulador como módulo de usuario.

En las tablas indicadas a continuación, se muestran los principales resultados obtenidos.

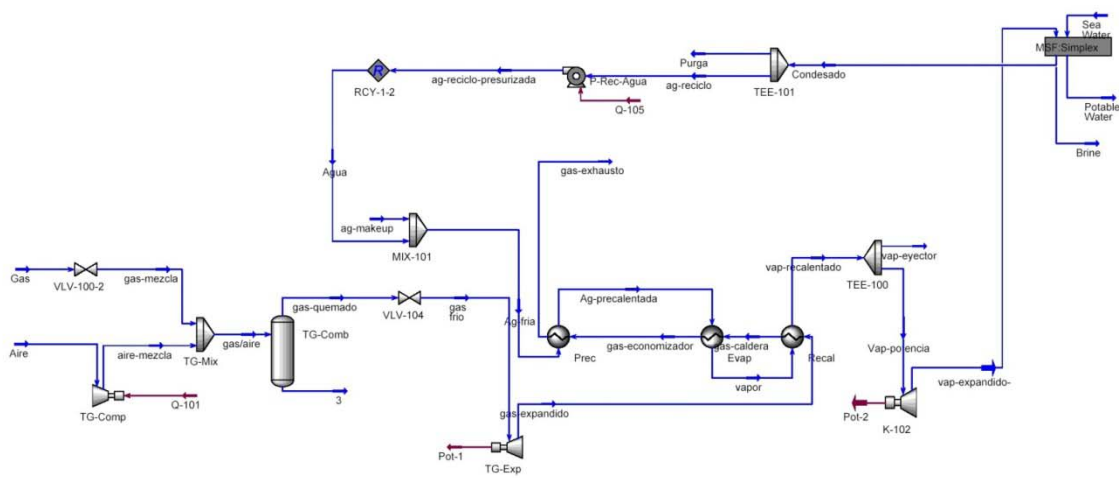


Figura II-13: Flowsheet del ciclo combinado acoplado a un EFME

Variable	Valor	Unidades
Potencia Turbina de gas	254,3	MW
Potencia Turbina de vapor	76,31	MW
Potencia Total	330,5	MW
Agua Potable generada	4008	m <sup>3</sup> /h
Calor generado en el condensador↔ calentador externo del desalador	2,343864x10 <sup>8</sup>	Kcal/h
Cantidad de vapor generado	4,80001x10 <sup>5</sup>	Kg/h
Agua Potable generada	21,12	migd
Relación potencia/agua	15,66	MW/migd
Consumo de gas natural	4,998x10 <sup>4</sup>	Kg/h
Consumo de agua de mar	4,09x10 <sup>4</sup>	m <sup>3</sup> /h
Costo unitario de energía	0,040342	Us\$/KWh
Número de etapas desalador	23	
Área de Intercambio desalador	4,57231x10 <sup>5</sup>	m <sup>2</sup>
Área de intercambio calentador	8351,19	m <sup>2</sup>
Área Total	4,65683x10 <sup>5</sup>	m <sup>2</sup>

Equipo	Costo [MM us\$]	
<i>Turbina de Gas</i>	<i>87,70</i>	
<i>Recuperador de Calor</i>	<i>4,918</i>	
<i>Turbina de Vapor</i>	<i>20,25</i>	
<i>Desalador</i>	<i>Área de Intercambio más cámaras</i>	<i>23,28</i>
	<i>Calentador externo</i>	<i>2,06</i>
	<i>Total</i>	<i>25,34</i>

Tabla II-24: Resultados de caso de estudio

El acoplamiento potencia/desalador permite ahorrar servicios auxiliares:

Planta	Servicio auxiliar	Flujo		Unidad
Generación de Potencia	Agua de enfriamiento del condensador	Calor	$2,343864 \times 10^8$	Kcal/h
		Agua	$1,5493 \times 10^4$	m <sup>3</sup> /h
Desalador	Vapor de calefacción del calentador externo	Vapor	$4,8000 \times 10^5$	Kg/h

Tabla II-25: Ahorro en servicios auxiliares para el proceso acoplado

#### II.4. CONCLUSIONES:

Se ha desarrollado un modelo simplificado que permite estimar el costo del agua producida y las principales variables de operación del proceso de desalación. Además, permite una aproximación al óptimo minimizando costos. No obstante, si bien se tiene la ventaja de estimar fácilmente las relaciones entre las principales variables de operación y/o inversión, el problema principal de estos modelos “agregados” es que no permiten calcular adecuadamente los perfiles de temperaturas (en cada etapa) y los flujos internos en cada cámara, al igual que los niveles de líquido, que son importantes para establecer dichos flujos. En efecto, el gradiente de presiones entre cámaras determina (dada un área de paso entre cámaras para el flujo) el caudal que circula. Existen otros problemas tales como considerar la elevación del punto de ebullición, que depende del perfil de temperaturas y composiciones, y las variaciones de los coeficientes de transferencia de calor en los intercambiadores asociados a cada etapa, entre otros factores.

En síntesis, para asegurar la factibilidad de un proceso de desalación, o uno dual, y más aún si se lo integra a una planta de captura; un modelo reducido como el explicado aquí, (aunque útil para estimar variables y relaciones críticas para el óptimo) resulta francamente inadecuado. Es importante destacar que además resulta útil para aproximar tendencias como consecuencia de variaciones en los principales parámetros, y además, estimar inicializaciones para modelos rigurosos, ya sea para simulación o para optimización.

En el próximo capítulo se derivará un modelo riguroso. Contempla los balances de materia y energía en cada cámara de evaporación flash, y la transferencia de calor en

cada intercambiador de calor asociado. De esta manera, se obtienen los perfiles de las variables más importantes (presión, temperatura, caudales de vapores y líquidos, concentraciones de salmuera). Asimismo, las irreversibilidades y la elevación del punto de ebullición se calculan en las condiciones de cada cámara, utilizando para ello las correlaciones fisicoquímicas que aproximan todas las variables de interés adecuadamente, en el rango de operación.

Al disponer de los datos mencionados, es posible plantear el balance de energía global y en cada cámara, en forma semejante al de materia global y por componente.

Al modelar a través de Hysys®, se representa cada cámara por medio de un conjunto de sumadores, divisores y equipos de separación flash, al igual que un intercambiador de calor para proveer el área necesaria para la transferencia de calor, según se indicará en detalle en el próximo capítulo.

No obstante, para asegurar un adecuado desempeño o factibilidad en el funcionamiento según diversas condiciones, es necesario contemplar el diseño de los internos y las condiciones hidrodinámicas del evaporador EFME. En efecto, el flujo de salmuera se origina entre cada cámara a partir de un gradiente muy bajo de presión, y un área de paso dispuesta en la base del equipo, a lo ancho del mismo y con una altura de la compuerta (gate) que puede regularse. Estas condiciones de flujo se asemejan a las de un canal abierto. Se introducen, por lo tanto, ecuaciones no lineales para el modelado de la hidrodinámica de la salmuera.

En otras palabras, se debe acoplar el balance de cantidad de movimiento. Esto exige un manejo “avanzado” en el uso del Hysys®. Este modelo riguroso incluyendo dicho balance, se detalla en el capítulo siguiente.

Con respecto al proceso dual de generación de potencia y agua potable, se **ha** logrado integrar modularmente ambos procesos por medio de su incorporación al simulador. Esto permite una gran flexibilidad; por ejemplo utilizando modelos con distintos grados de rigurosidad en ambos procesos, análisis preliminares de relaciones entre variables en cada uno de ellos o acoplado según distintos criterios de diseño, entre otros factores.

Cabe destacar que los modelos implementados para las turbinas de gas son “calibrados” según datos de catálogo de equipos reales según un rango de operación establecido.

Por último, el modelado de la turbina de vapor y la configuración del proceso global de cogeneración se describe adecuadamente según el estado del arte tecnológico para estos sistemas integrados a plantas duales de generación de agua y potencia.



## CAPITULO III

### *Modelado riguroso de una planta de desalinización del Agua de mar (EFME)*

#### **III.1 Implementación en Hysys® de un modelo Riguroso para un desalador (EFME)**

En este capítulo, el objetivo es desarrollar un modelo desagregado riguroso, que permita obtener los perfiles de las variables importantes para el diseño de evaporadores según cualquier arreglo estructural.

Un punto importante que exige un modelado riguroso es el desarrollo de modelos para la estimación de propiedades fisicoquímicas. En la siguiente sección, se explicita el que fue implementado en Hysys® para tal fin.

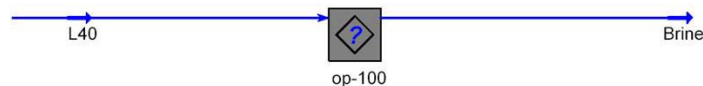
Se describen además, los módulos utilizados según la iconografía del Hysys®, para lograr un modelo riguroso para el proceso EFME. Se parte de la descomposición modular de cada etapa del evaporador.

#### *III.1.1 Módulo de usuario selector de corrientes. Nomenclatura y funcionalidades del evaporador*

De acuerdo a la Figura III.3, cada etapa de evaporación contiene tres corrientes de salida: 1) agua de mar precalentada (que además condensa el vapor), 2) agua dulce (dicho vapor condensado) y 3) salmuera (agua de mar de mayor salinidad). Así por ejemplo, en la etapa  $n$  el agua de mar se denomina  $F_{nn-1}$ , el agua dulce como  $AP_{nn}$  y la salmuera como  $L_{nn}$ . Por ejemplo, de la etapa 23 salen las corrientes  $F_{22}$ ,  $AP_{23}$  y  $L_{23}$ . El sub-flowsheet que representa a las cascadas múltiple etapas del desalador tiene como máximo 40 etapas denominando  $AP_{39}$  y  $L_{40}$  a las salidas de la última etapa. No obstante, estas corrientes no son en realidad las salidas de dicha cascada, sino representan dos corrientes que están ligadas al módulo de transferencia. Este módulo tiene por objetivo copiar en dichas corrientes de salida las propiedades de cualquier corriente intermedia. Dicho modulo contiene a su vez dos variables de usuario: una con un número entero y otra con una cadena de caracteres. La corriente a la que accederá (clonará) el modulo será aquella formada por la concatenación de ambas variables. Por ejemplo, si se desea simular 30 etapas ( $NET=30$  y  $Cte='L'$ ) la "L30" se copiará a la

corriente de salida de la salmuera y la AP30 a la de agua potable (NET=30 y Cte="AP"). El resto de las etapas se ignoran no alterando al funcionamiento del módulo. El número de etapas es manipulable desde el exterior del módulo. Esto implica muchas ventajas tanto para la simulación como para la optimización del equipo, siendo el número de etapas una variable entera.

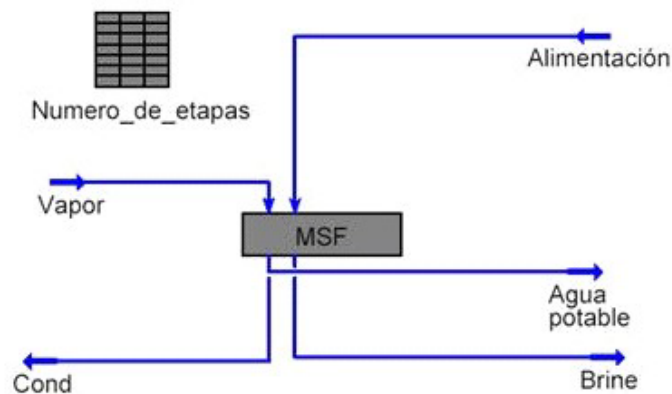
El módulo se grafica o indica de la siguiente forma:



*Figura III.1: Módulo usuario Hysys®*

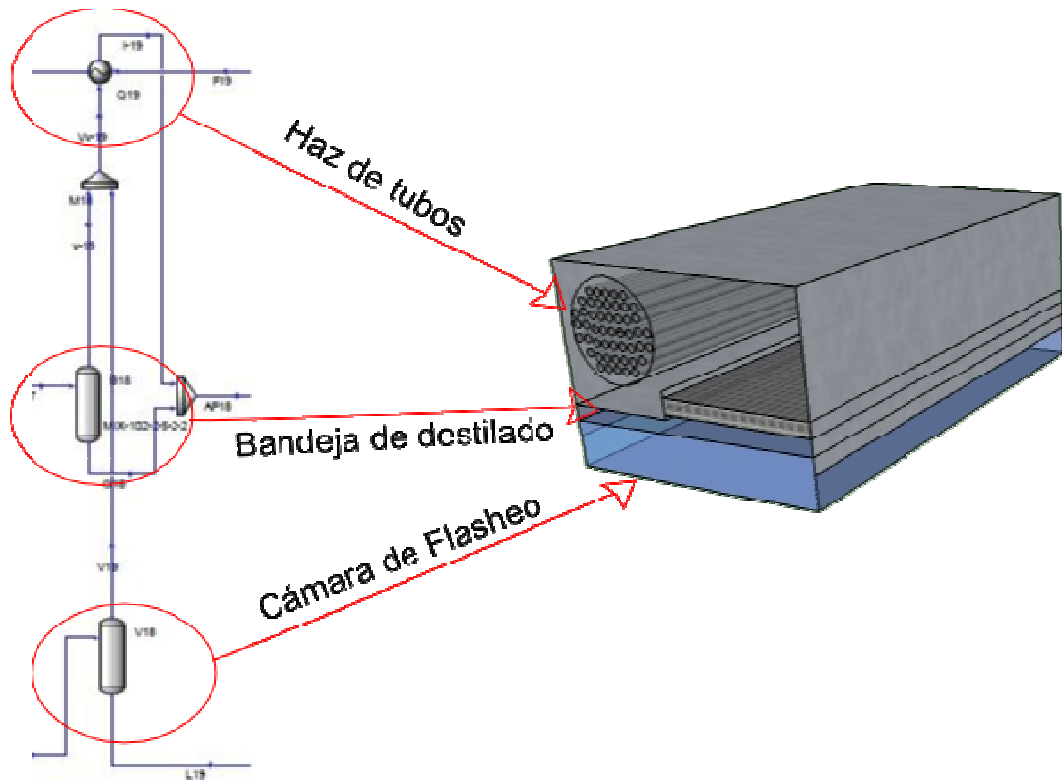
*Módulo de evaporación flash:*

En función de lo expresado anteriormente, una vez que el usuario especifica el número de etapas de evaporación, esta información debe trasladarse al módulo de evaporación. Para ello, la celda 'A2' de la Spreadsheet "Numero\_de\_etapas" exporta el valor del número de etapas deseados al módulo "MSF".



*Figura III.2: Flowsheet Hysys desalador OT*

El módulo del evaporador de agua mar incorpora así internamente un número determinado de etapas de equilibrio, las cuales deben modelarse. En la figura se muestran los módulos de HYSYS® utilizados para modelar cada etapa flash, que físicamente consiste en bloques como los mostrados a continuación:



*Figura III.3: Implementación “básica” en HYSYS de una sola una etapa*

En este modelo se representa la evaporación flash de la salmuera a través de un flash, al igual que la evaporación del destilado que atraviesa cada etapa, la condensación del vapor producido (que precalienta a su vez a la alimentación) en el intercambiador (haz de tubos) la unión de las corrientes en los sumadores y su partición en los divisores.

Debe tenerse en cuenta que la última cámara y la primera tienen características particulares. Además existe el intercambiador o calentador principal. Por último, según el arreglo MSF seleccionado, se interconectan las cámaras de acuerdo a un modelo específico (existencia o no, y tipo de reciclos)

Un flowsheet indicativo de un sistema EFME de 40 etapas es el que se aprecia en la figura III.4, según lo explicado anteriormente.

Hipótesis adoptadas.

- Las etapas se enumeran desde la etapa más cercana al calentador externo
- Las corrientes se denominan de tal forma que consignan al número de la etapa de la cual egresan
- El número de etapa de la zona de rechazo de calor se fijó en 3

- La diferencia de temperatura entre etapas es constante a lo largo del tren (y conocida)
- Se desprecian las pérdidas de calor al medio ambiente
- Se asumen conocidos el calor entregado al calentador principal, la temperatura máxima de la salmuera y la temperatura del agua de mar. Del mismo modo se asume la composición del agua de mar, y la producción deseada de destilado
- Se adopta el número de etapas y la estructura del evaporador
- Se dispone de modelos fisicoquímicos para el cálculo de los parámetros asociados a la corriente de salmuera, destilado y vapor.
- Al adoptar el perfil de temperatura, el perfil de presiones dependerá, además de éste, de la resolución de los balances de materia y energía correspondientes (resultado de cálculo). Un modelo más riguroso, incorporaría la geometría de las cámaras, y por ende, la altura de líquido en las mismas, para el cálculo del perfil de presiones. En otras palabras, se resolvería simultáneamente, a los balances planteados, el balance de cantidad de movimiento.
- En este modelo desarrollado, resueltos los balances de materia y energía, y obtenido el perfil de presiones, se dimensionan luego las cámaras y se calcula el perfil de niveles de salmuera correspondientes.
- El conjunto de hipótesis descrito implica que en el simulador todos los equipos flash deben calcularse a una temperatura especificada, y son adiabáticos. Los sumadores, divisores y equipos de intercambio térmico son convencionales.
- Los módulos de cálculo de entalpías y demás propiedades de transporte se basan en el mismo paquete (NRTL-extendend) como se mencionará en la sección III.1.1
- El coeficiente global de transferencia de calor en cada equipo de intercambio es fijado por el usuario ya sea en las cámaras en particular y/o en el calentador principal. En un principio se adoptan valores iguales, pero puede asignarse cualquier perfil conocido.
- Se supone que no existe filtración de aire en las cámaras.

- Se supone conocida la estrategia de flujo (axial o transversal) en los intercambiadores respecto del flujo de salmuera a lo largo del evaporador.

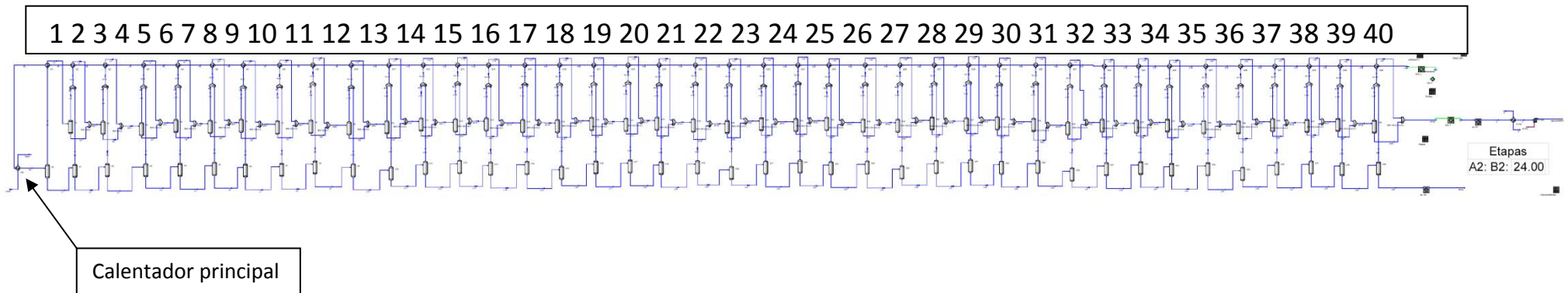


Figura III.4: Flowsheet en Hysys® con las 40 etapas (número máximo del modelo)



Las corrientes  $F_s$  y  $F_0$  tienen la misma composición, flujo y presión que la alimentación y sólo su temperatura es desconocida. Puesto que la temperatura máxima de la salmuera es un dato conocido y también lo es la carga del calentador ( $QV$ ), es posible calcular la temperatura de  $F_s$  (conociendo la diferencia de temperaturas en cada etapa).

En la spreadsheet “*Perfiles*” que se ilustra a continuación, los valores de las temperaturas de las corrientes de salmuera ( $F_0, L_1, L_2, \dots, L_{40}$ ) se importan en la columna B. El valor de la celda C1 es inicializada con cierto valor. La celda C2 se dedica a restar al valor de B2 dicha diferencia de temperatura. El valor resultante se exporta a la corriente de vapor V1. Asumido que el vapor condensa totalmente (punto de burbuja en la corriente AP1) y para caídas de presión nulas el sistema del intercambiador ( $Q_1$ ) queda totalmente definido y puede ya resolverse. En la celda B3, de la misma spreadsheet, se importa la temperatura de la corriente L1 (igual a V1 por estar en equilibrio) al cual se le resta la misma diferencia de temperatura y su valor se exporta a V2 con lo cual se calcula el intercambiador  $Q_2$  y así sucesivamente hasta la etapa 40.

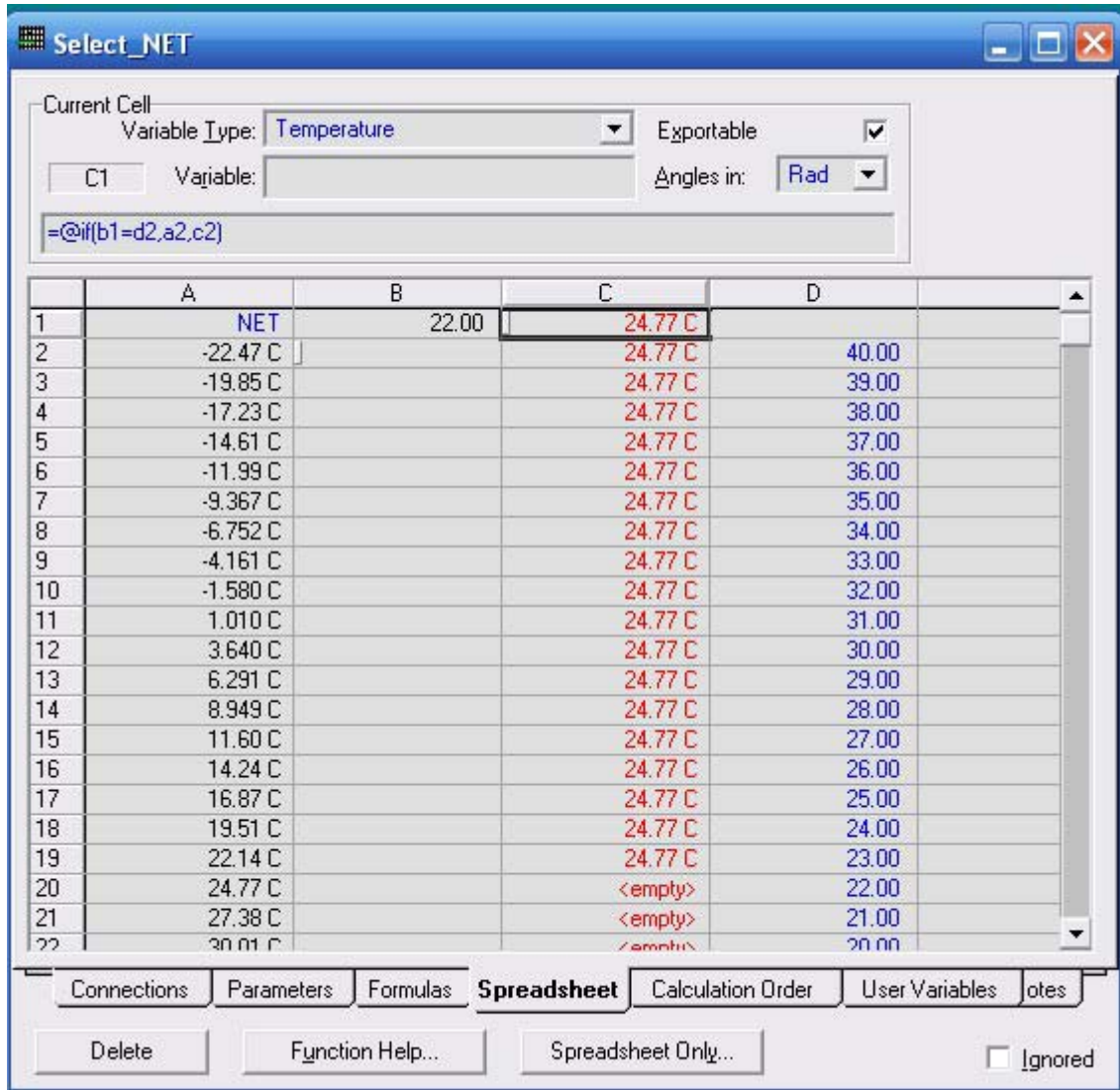
	A	B	C	D
1	Etapa	Dt	2.630	
2	1.000	90.00 C	87.37 C	
3	2.000	87.37 C	84.74 C	
4	3.000	84.74 C	82.11 C	
5	4.000	82.11 C	79.48 C	
6	5.000	79.48 C	76.85 C	
7	6.000	76.85 C	74.22 C	
8	7.000	74.22 C	71.59 C	
9	8.000	71.59 C	68.96 C	
10	9.000	68.96 C	66.33 C	
11	10.00	66.33 C	63.70 C	
12	11.00	63.70 C	61.07 C	
13	12.00	61.07 C	58.44 C	

Si el número de etapas fuera, por ejemplo, 22 la temperatura de ingreso a dicha etapa ( $F_{21}$ ) debería ser igual a la de la alimentación.

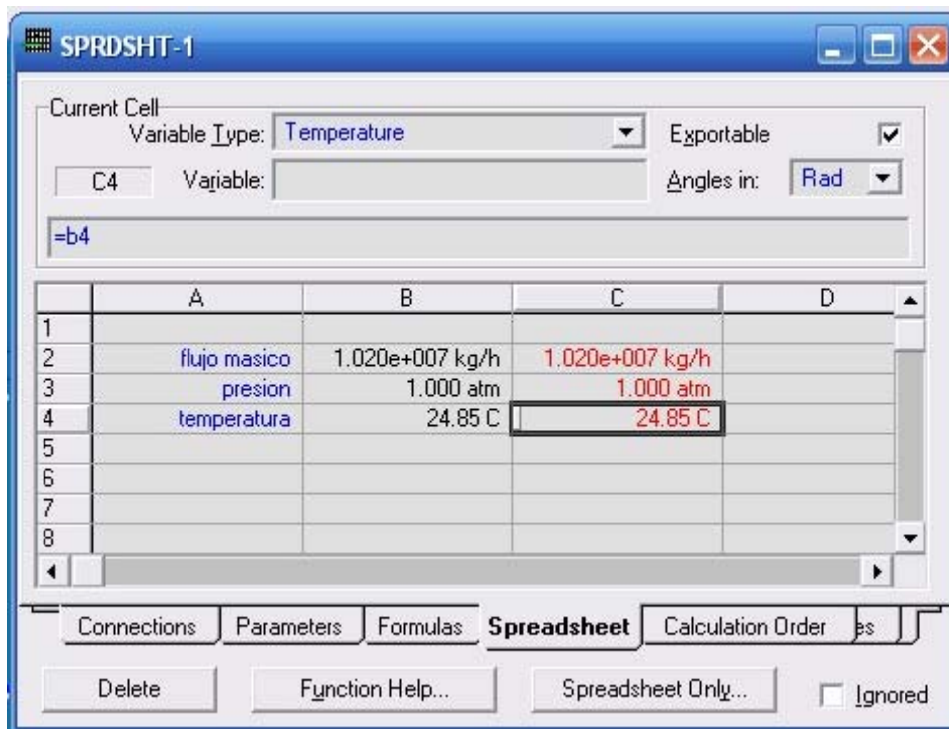
Por su parte, la spreadsheet “*Select\_NET*” es la encargada de calcular la temperatura de ingreso a la etapa 22. En la fila A se importa la temperatura de las 40 corrientes de ingreso de agua de mar pero en orden inverso ( $F_{40}, F_{39}, \dots, F_1$ ). En la columna C se decide si dicha fila



corresponde o no a dicha etapa mediante la comparación entre la celda B1 (número de etapa) y la celda D adyacente. Por ejemplo, en la celda C1 se compara el numero de etapas con el valor de la celda D2; si son iguales se toma el valor de la temperatura presente en la celda A2, de lo contrario en la celda inferior se repite la misma estrategia, hasta encontrar la fila correspondiente al dato de número de etapa (serie decreciente de la columna D).



La utilidad "ADJUST" es la encargada de comparar ambos valores presentes en una tercera spreadsheet denominada "SPRDSHT-1" (celda C4) con el de la celda C1 de la spreadsheet "Select\_NET". Cuando ambos valores se aproximan con cierto criterio de tolerancia el desalador MSF se asume resuelto, de lo contrario la función "ADJUST" modifica la diferencia de temperatura (celda C1 de la spreadsheet "Perfiles") y todo el ciclo se repite.



Lo explicado se aplica a un EFME-OT o para un proceso EFME-M. En un proceso EFME convencional, existe la zona de recuperación de calor y la zona de rechazo de calor. Este modulo, como se expuso, se limita a 3 etapas (que es lo habitual). A continuación, en forma breve, se explica el funcionamiento de dicho módulo.

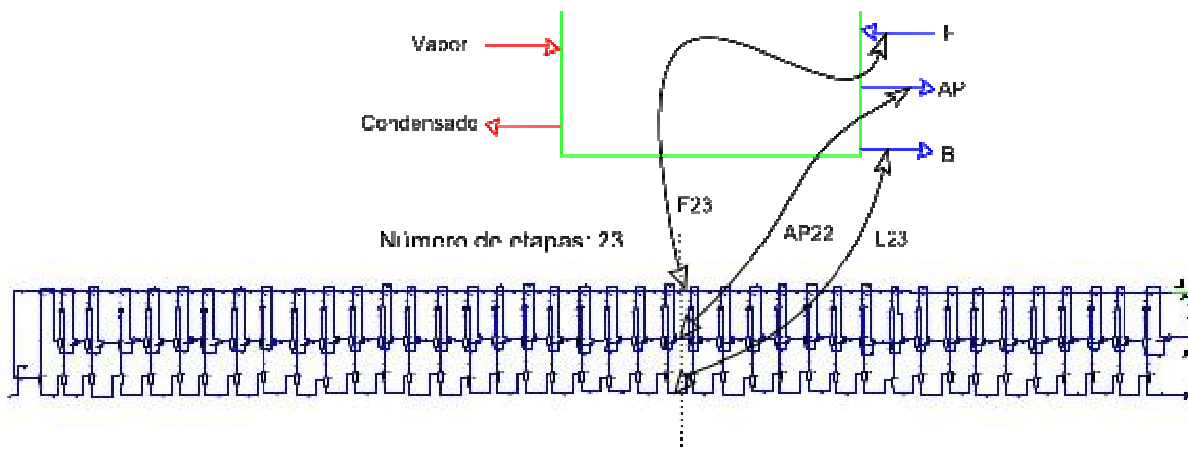


Figura III.7: Entradas y salidas subflowsheet EFME

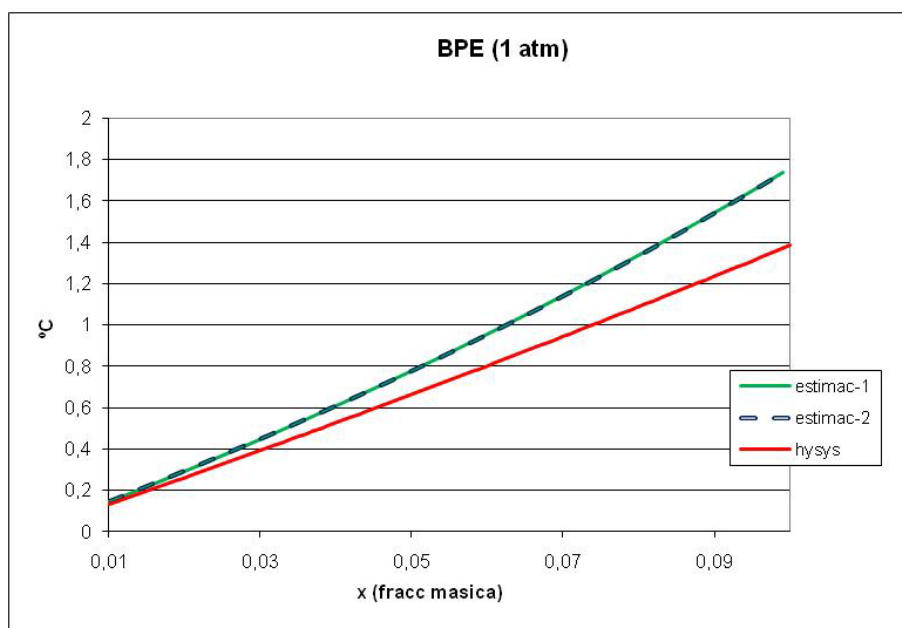
En la Figura III.7 se aprecia el diagrama de flujo de información (DFI) del proceso EFME y las corrientes que entran y salen del mismo. A fin de evitar la utilización de gran cantidad de reciclos, la temperatura de la alimentación (F) no es utilizada directamente; en su lugar, y una vez fijada la temperatura máxima de la salmuera y un  $\Delta t$  igual para cada flash, el DFI se converge de izquierda a derecha. Si el número de etapas deseado es, por ejemplo, 23, se verifica que la temperatura de entrada de dicha etapa (F23) sea igual que la de alimentación de lo contrario, dicho

salto de temperatura deberá modificarse hasta lograr dicho objetivo. La herramienta “ADJUST” de Hysys® se programa para realizar dicha tarea. Una vez logrado esto, la información (flujo, temperatura, presión y composición) de la corriente AP23 se copia en la corriente AP y la de L23 en la B. Las corrientes F## (desde 1 a 40) tienen las mismas propiedades que F excepto su temperatura. Las etapas restantes son ignoradas por el módulo. De este modo el subflowsheet se corresponde a un EFME de 23 etapas.

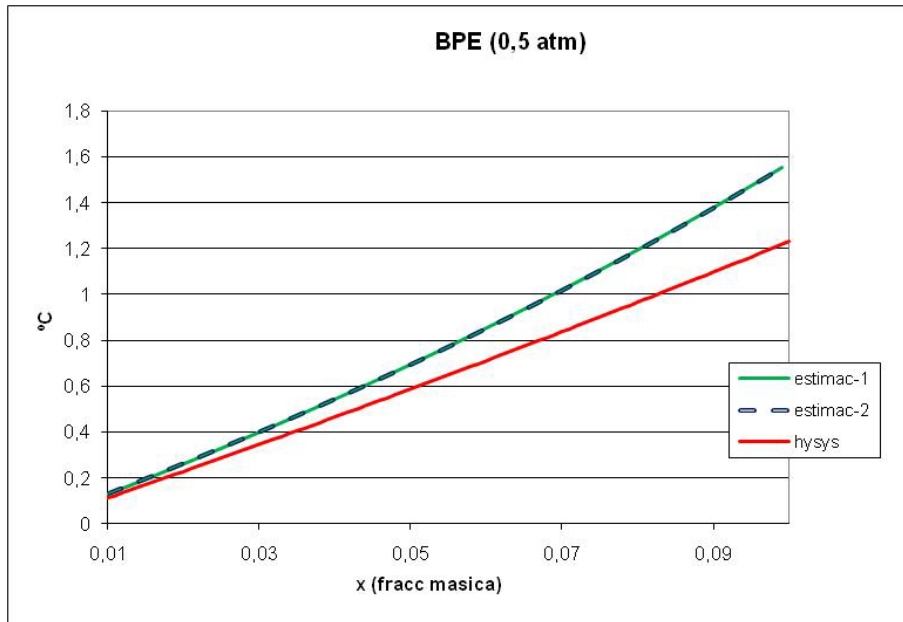
En resumen el DFI (diagrama de flujo de información) equivale a un modelo de un MSF al que se denominará “Riguroso” de X etapas de equilibrio para un valor de energía disponible y una determinada temperatura máxima de agua de mar (corriente “F0”) especificada.

### ***III.1.2 Estimación de las propiedades del agua de mar: elevación del punto normal de ebullición (EPE)***

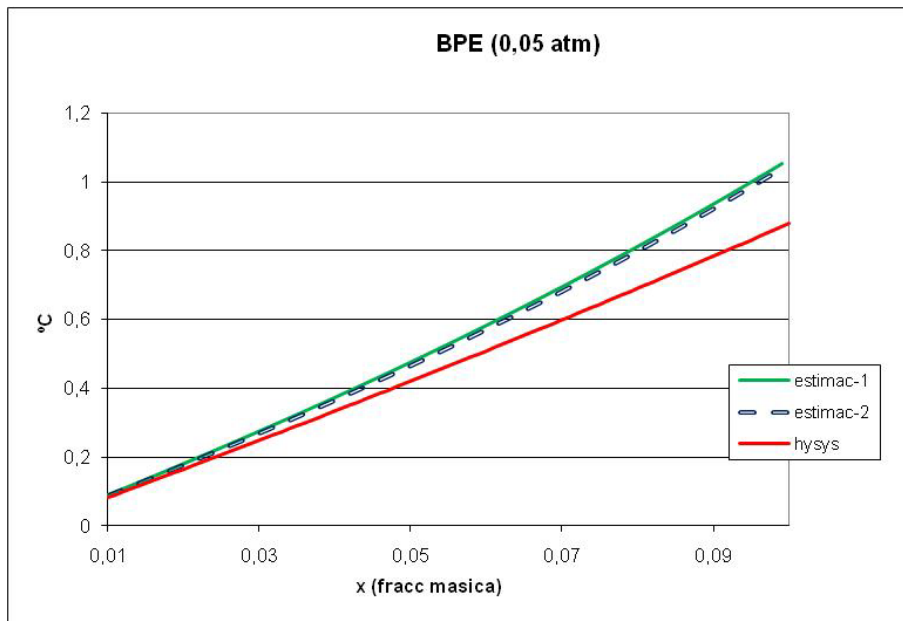
Una de las limitaciones que puede encontrarse en diferentes versiones del Hysys® es la posibilidad de utilizar o no electrolitos como componentes. En las versiones que no disponen dicho paquete puede reemplazarse la parte “no volátil” del agua de mar (por ejemplo por NaOH). No obstante, la elevación del punto de ebullición calculado es menor que el correspondiente al agua de mar; como se aprecia en las Figuras III.8, III.9, III.10 y III.11. A distintas presiones las curvas de comparación (estimación 1 y estimación 2) se corresponden a correlaciones de datos experimentales según (Friedrich y Hafford) y (El-Dessouky et al).



*Figura III.8: elevación del punto de ebullición a 1 atm*



*Figura III.9: elevación del punto de ebullición a 0,5 atm*



*Figura III.10: elevación del punto de ebullición a 0,05 atm*

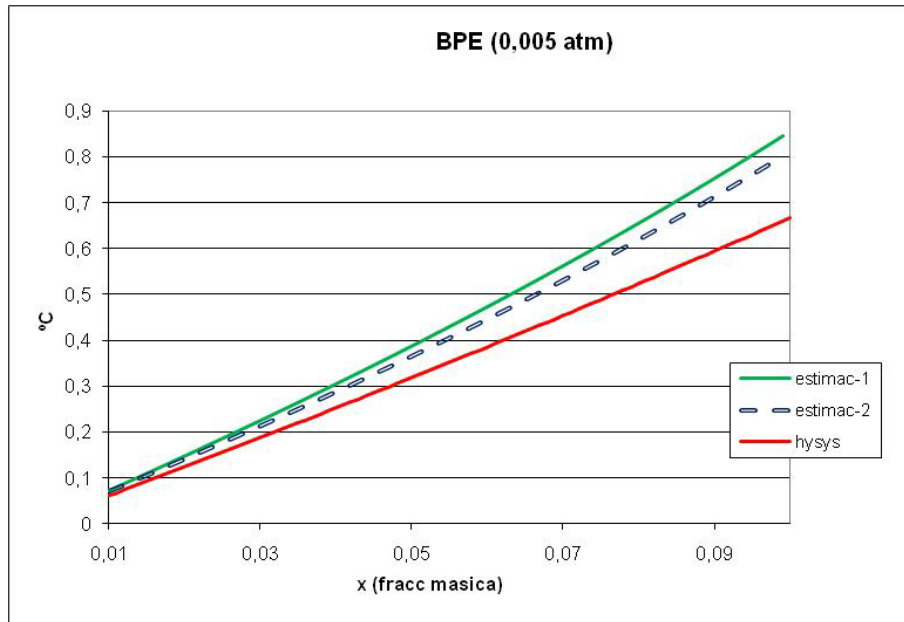


Figura III.11: elevación del punto de ebullición a 0,005 atm

A continuación se detallan los parámetros de ambas correlaciones

**Correlación 1:** basada en datos experimentales de Stoughton y Lieztko y correlacionados por (Friedrich y Hafford) en 1971:

$$EPE(^{\circ}K) = \left( \sum_{i=0}^2 a_i m^i \right) \frac{m}{a_3} \quad (1)$$

Donde:

$$a_0 = \frac{565,757}{T} - 9,81559 + 1,54739 \ln(T) \quad (2)$$

$$a_1 = -\frac{337,178}{T} + 6,41981 - 0,922753 \ln(T) \quad (3)$$

$$a_2 = \frac{32,681}{T} - 0,55368 + 0,079022 \ln(T) \quad (4)$$

$$a_3 = \frac{266919}{T^2} - \frac{379,669}{T} + 0,334169 \quad (5)$$

$$a_3 = \frac{266919}{T^2} - \frac{379,669}{T} + 0,334169 \quad (6)$$

$$m = 19,819 \frac{X}{1 - X} \quad (7)$$

**Correlación 2:** Correlación de datos experimentales publicados por El-Dessouky et al en “Fundamentals of Salt Water Desalination” en 2002.

$$EPE(^{\circ} K) = A_0 TDS + A_1 TDS^2 + A_2 TDS^3 \quad (8)$$

Donde:

$$\begin{aligned} A_0 &= a_0 + b_0 T + c_0 T^2 \\ A_1 &= a_1 + b_1 T + c_1 T^2 \\ A_2 &= a_2 + b_2 T + c_2 T^2 \end{aligned} \quad (9)(10)(11)$$

$$\begin{aligned} a_0 &= 82543,1 \times 10^{-6} & b_0 &= 188,3 \times 10^{-6} & c_0 &= 4,02 \times 10^{-6} \\ a_1 &= -762,5 \times 10^{-6} & b_1 &= 9,02 \times 10^{-6} & c_1 &= -0,52 \times 10^{-6} \\ a_2 &= 152,2 \times 10^{-6} & b_2 &= -3,0 \times 10^{-6} & c_2 &= 0,03 \times 10^{-6} \end{aligned}$$

Por otro parte, a continuación, se muestran los resultados al usar el modelo NRTL-extended de Hysys® para dichas estimaciones

### III.1.2.1 Modelo NRTL-Extended

Mediante un procedimiento de ajuste de parámetros, se obtuvieron los siguientes valores para los coeficientes de interacción binarios; suponiendo que el agua de mar es una solución de NaOH.

	NaOH	H <sub>2</sub> O
NaOH		-2000
H <sub>2</sub> O	-2000	

Tabla III.1: Coeficientes de interacción binaria

A continuación se muestran en las figuras III.12, III.13, III.14, III.15 y III.16 las curvas comparativas con respecto a las mismas correlaciones mencionadas, a diversas presiones.

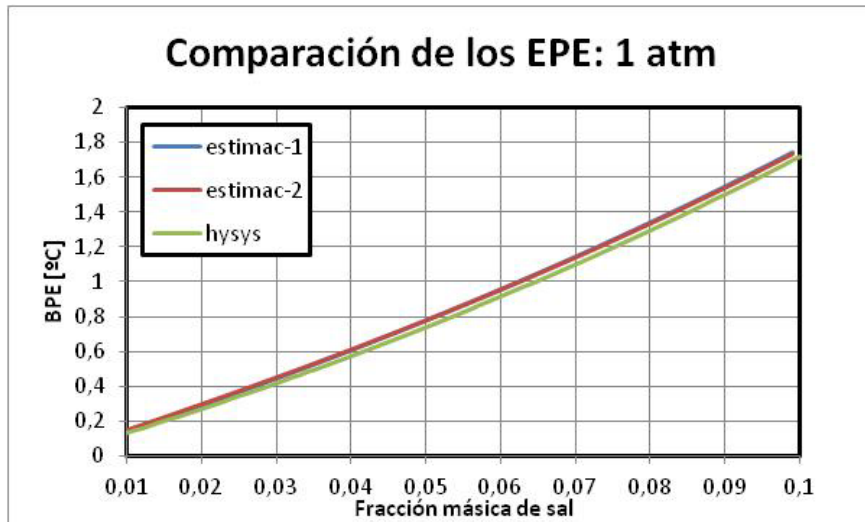


Figura III.12: comparación de puntos de ebullición a 1 atm

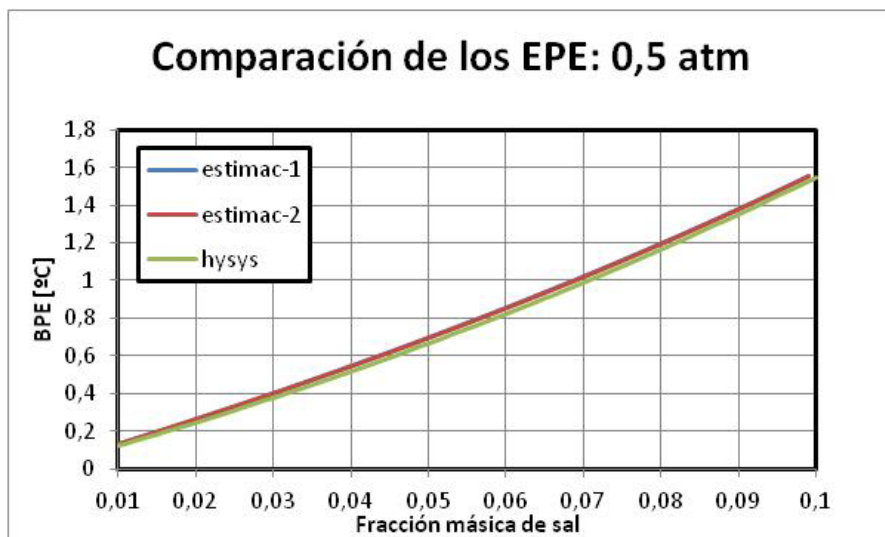


Figura III.13: comparación de puntos de ebullición a 0,5 atm

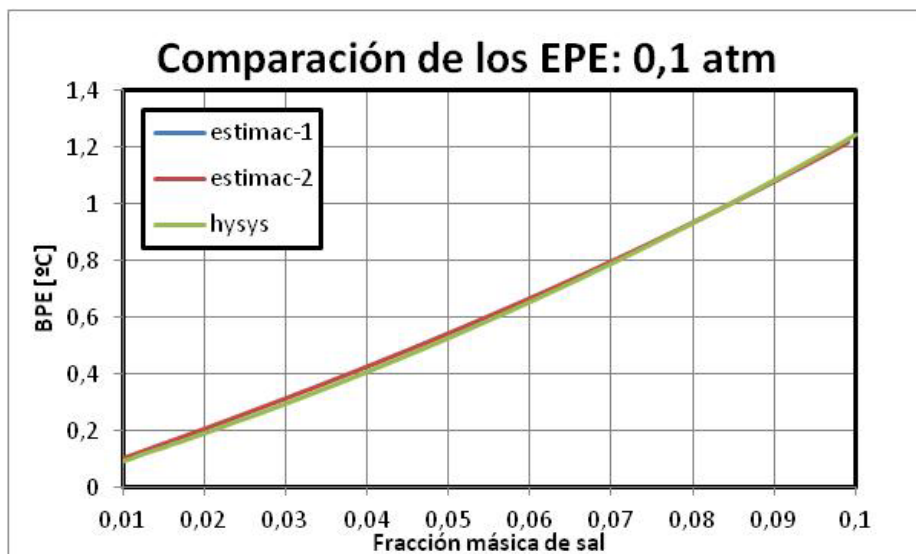


Figura III.14: comparación de puntos de ebullición a 0,1 atm

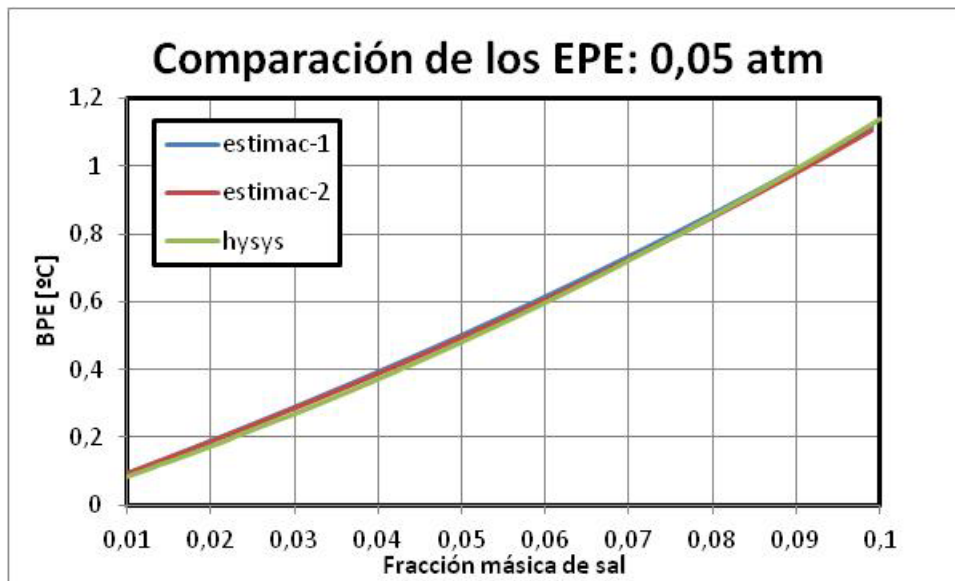


Figura III.15: comparación de puntos de ebullición a 0,05 atm

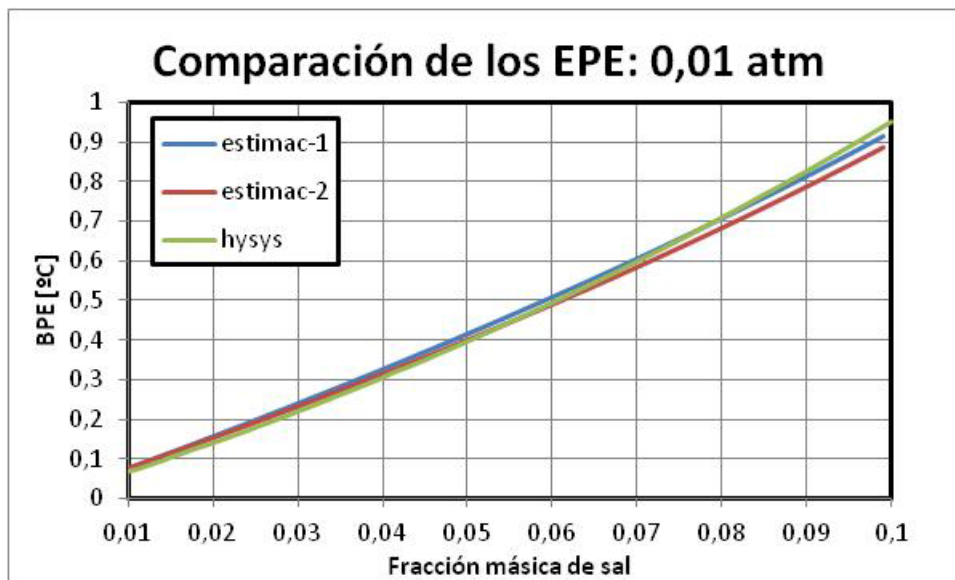


Figura III.16: comparación de puntos de ebullición a 0,01 atm

En las curvas anteriores se aprecia que el ajuste es más que satisfactorio a la hora de estimar los puntos de ebullición para el agua de mar a diferentes composiciones y presiones. En función de los resultados obtenidos, se ha creado un componente “hipotético” con las mismas características base del NaOH, ajustando parámetros de propiedades del componente puro (denominándolo sal).



### III.2 Cálculo de la geometría y perfil de niveles en el EFME

Como se ha expresado, resulta muy importante introducir al modelo las relaciones geométricas y el comportamiento hidrodinámico del flujo a lo largo de las etapas. En la Figura III.17 se muestra la geometría de cada etapa en un diseño habitual, donde H es la altura total de las cámaras de Flasheo (evaporación). Resulta evidente que para una adecuada estimación de costos, la geometría es relevante.

En este caso se adopta el sentido de flujos perpendiculares, por lo que el sentido de la salmuera (fluye de izquierda a derecha) en la figura, es perpendicular al de la alimentación que se precalienta (de frente hacia el fondo en el mismo dibujo), al igual que el flujo de destilado que se recoge en las bandejas y se acumula de etapa en etapa. Nótese que deben agregarse codos para permitir el ingreso/egreso por los laterales, y en cada etapa, al destilado y la alimentación que se precalienta con los intercambiadores. En la figura, por lo tanto, se pueden identificar:

- B: ancho de la cámara
- H: altura de la cámara
- L: longitud de la cámara
- HG: altura de la compuerta
- HP: altura de la pileta o holdup de salmuera
- DS: diámetro del haz de tubos

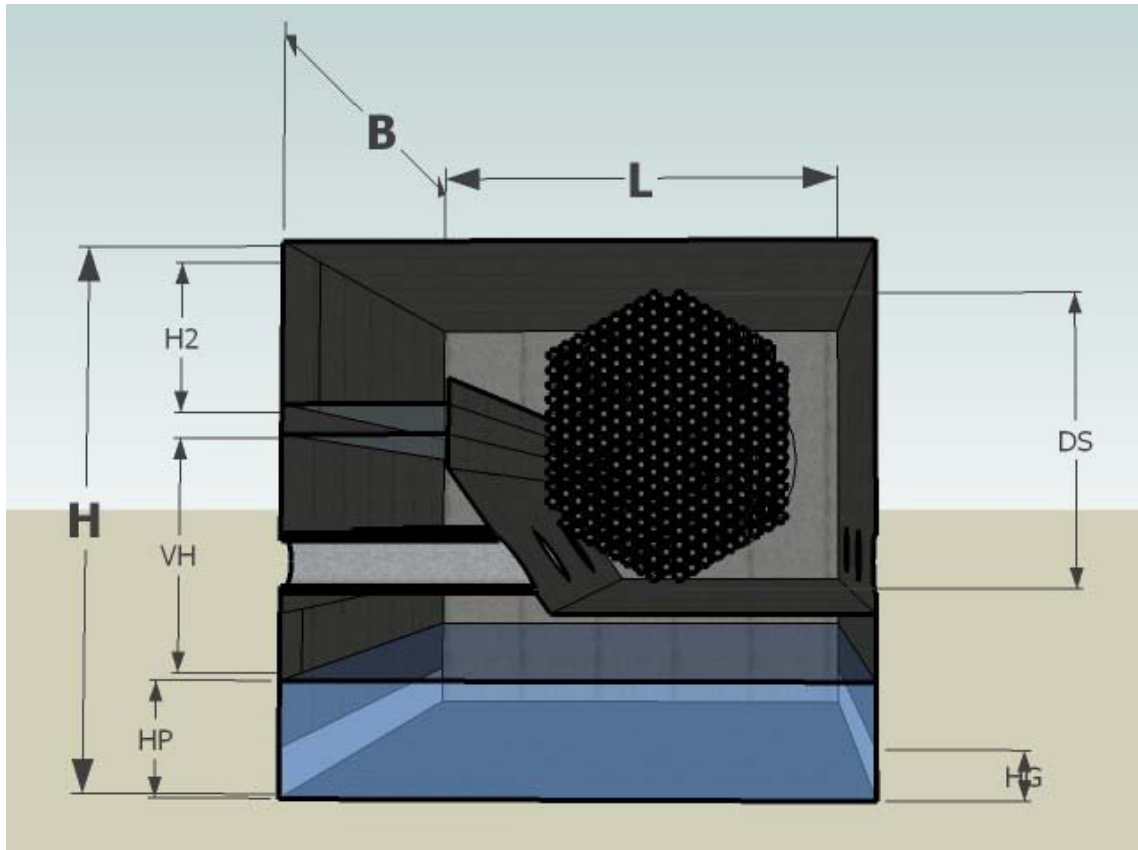


Figura III.17: Cámara de flasheo típica en corte

A continuación, se detallan las ecuaciones que relacionan dichos parámetros. El área transversal determina la velocidad de vapor ascendente.

### III.2.1 Longitud de la cámara

$$L_j B_j = \frac{V_j^P}{v_{Vapor} \rho_j^{Vapor}} \quad (12)$$

Donde j denota etapa (de 1 a NS),  $V_j^P$ ,  $Vel_j^{vap}$ , etc.

Asumiendo un ancho B, podemos calcular el largo:

$$L_j = \frac{V_j^P}{v_{Vapor} \rho_j^{Vapor} B_j} \quad (13)$$

Nótese que el flujo de salmuera responde a un patrón de canal abierto. Por otra parte, el área de paso viene dado por B y la altura de la compuerta HG. Dado que existen valores típicos de flujo para un buen diseño, esto permite un criterio para adoptar el valor del ancho de la cámara, en

función de la altura de la compuerta, que como se verá, también está limitado por factores estructurales y criterios operativos.

### III.2.2 Altura del líquido en la cámara:

A través de los gradientes hidráulicos y pérdidas de carga entre etapas, el flujo a través de la compuerta se calcula mediante las siguientes ecuaciones:

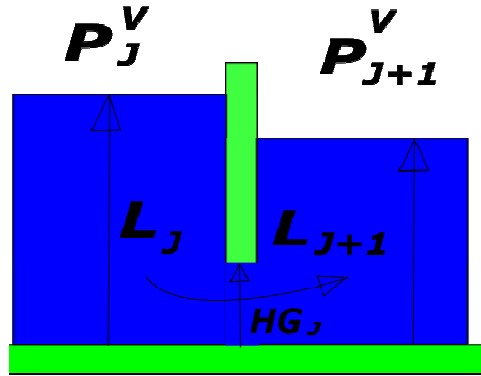


Figura III.18: Flujo de salmuera a través de las cámaras de flasheo

$$q_J = C_d B_j HG_j \sqrt{\frac{2 \Delta P_j}{\rho_j^{brine}}} \quad (14)$$

$$\Delta P_j = (P_J^v + g \rho_j^{brine} L_j) - (P_{J+1}^v + g \rho_j^{brine} L_{j+1}) \quad (15)$$

$$\Delta P_j = (P_J^v - P_{j+1}^v) + g \rho_j^{brine} (L_j - L_{j+1}) \quad (16)$$

$$q = \frac{W_j}{\rho_j^{brine}} = C_d B_j HG_j \sqrt{2 \frac{(P_J^v - P_{j+1}^v) + g \rho_j^{brine} (L_j - L_{j+1})}{\rho_j^{brine}}} \quad (17)$$

$$\frac{W_j}{\rho_j^{brine}} = C_d B_j HG_j \sqrt{2 g (L_j - L_{j+1}) + \frac{2 (P_j - P_{j+1})}{\rho_j^{brine}}} \quad (18)$$

Luego, la altura de líquido en la cámara j+1 se calcula con las eq.(19) y (20):

$$L_{j+1} = \frac{2 g L_j - \left( \frac{(W_j + S_j)}{C_d B_j HG_j \rho_j^{brine}} \right)^2 + \frac{2 (P_j - P_{j+1})}{\rho_j^{brine}}}{2 g} \quad (19)$$

$$L_{j+1} = \frac{2g L_j - \left( \frac{q_j}{C_d B_j H G_j} \right)^2 + \frac{2(P_j - P_{j+1})}{\rho_j^{brine}}}{2g} \quad (20)$$

Asumiendo una apertura de compuerta igual en todas las etapas, la altura del líquido en cada cámara se distribuye típicamente según el perfil indicado en la Figura III.18:

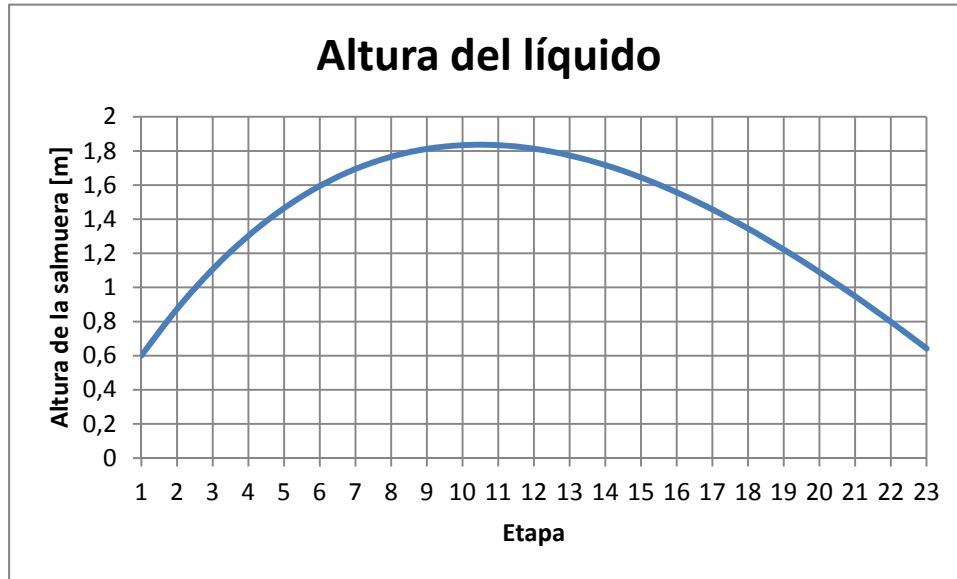


Figura III.19: Altura de la salmuera en las cámaras para apertura constante de las compuertas

Si en cambio se asume diferencias de altura de líquido entre etapas nulas y se calculan las aperturas de las compuertas en cada cámara a los efectos de lograr tal situación de diseño, se obtiene el perfil indicado en la Figura III.20.

$$HG_j = \frac{(W_j + S_j)}{C_d B_j \rho_j^{brine} \sqrt{2 \frac{(P_j^v - P_{j+1}^v)}{\rho_j^{brine}}}} \quad (21)$$

$$HG_j = \frac{q_j}{C_d B_j \sqrt{2 \frac{(P_j^v - P_{j+1}^v)}{\rho_j^{brine}}}} \quad (22)$$

$$\Delta H = L_j - L_{j+1} \quad (23)$$

$$HG_j = \frac{(W_j + S_j)}{C_d B_j \rho_j^{brine} \sqrt{2 \frac{(P_j^v - P_{j+1}^v) + g \rho_j^{brine} (L_j - L_{j+1})}{\rho_j^{brine}}}} \quad (24)$$

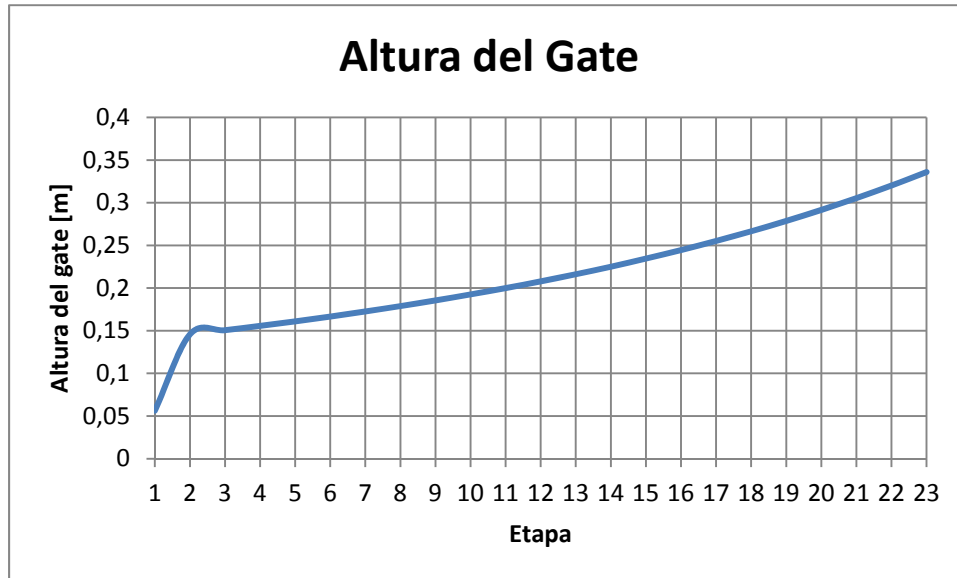


Figura III.20: Perfil de altura de la compuerta en cada cámara para una nivel constante de salmuera

Debe aclararse que las aperturas de las compuertas pueden ajustarse manualmente en cualquier momento durante la operación del equipo, por lo que es una variable manipulada por el operador.

Las etapas inicial y final difieren ligeramente ya que estructuralmente en la primera la presión de ingreso no depende de ningún nivel de líquido sino de la de entrada de agua de mar y en la etapa final, la presión del eyector presente en la misma asegura que el perfil de presiones impulse los fluidos en el sentido correcto.

### III.2.3 Altura Total de las cámaras:

La altura total de la cámara ( $H_j$ ), se calcula mediante la suma de tres términos: a) profundidad del pool, b) altura entre el nivel de salmuera y el demister y c) altura del propio demister ( $VH_j$ ). La profundidad del pool se debe mantener por debajo de 60 cm para evitar pérdidas por no-equilibrio en la evaporación y al mismo tiempo debe ser superior a la altura de la compuerta para evitar perder el sello líquido (entre 0,10 y 0,20 m por encima de la misma). La distancia desde el nivel de salmuera y el demister debe ser lo suficiente para evitar arrastre de líquido al mismo, pero en un valor mínimo para acotar la altura de la cámara de flasheo.

Una estimación aceptable para la altura del demister por encima del pool surge de la siguiente ecuación empírica, estimada a partir de la densidad de flujo del vapor.

$$VH_j = 0,1776 \times e^{0,0054 \times K_H} \quad [cm] \quad (25)$$

$$K_H = \frac{3,281 G}{\rho_J^{Vapor} \sqrt{\frac{\rho_J^{Brine}}{\rho_J^{Vapor}} - 1}} \frac{\left[ \frac{Kg}{h \times m^2} \right]}{\left[ \frac{Kg}{m^3} \right] \left\{ \left[ \frac{Kg}{m^3} \right] \left[ \frac{Kg}{m^3} \right] \right\}^{1/2}} = \left[ \frac{m}{h} \right] \quad (26)$$

$$H_j = HP_j + VH_j + DH_j + H2_j \quad (27)$$

Donde:

G: densidad de flujo

$\rho_V$ : densidad del vapor

$\rho_{brine}$ : densidad de la salmuera

H2<sub>j</sub>: es la distancia entre el demister y el techo de la cámara.

### **III.2.4 Cálculo del número de tubos en el intercambiador/precalentador y diámetro del haz de tubos en cada etapa:**

El flujo por tubo, diámetro y cantidad del mismo se calcula según lo expuesto en el capítulo II, se trata en este caso de un modelo desagregado, estos valores se calculan en cada etapa y de ahí el subíndice J:

$$\text{Flujo} = qf = \frac{v_{liq} \pi D t_J^2}{4} \quad (28)$$

$$\text{Diámetro de tubos en la etapa } j: \quad At_j = \pi Dt_j B Nt_j \quad (29)$$

$$\text{Y el número de tubos en la etapa } J: \quad Nt_j = \frac{At_j}{\pi Dt_j B} \quad (30)$$

Si se desea mayor rigurosidad debe considerarse el espesor de la tubería. Como el diámetro externo ( $Dte_j$ ) está dado por la norma adoptada y no depende del espesor del tubo  $e$ , se puede reemplazar:

$$Dt_j = Dte_j - 2 e \quad (31)$$

Si se define:

$$Dt_j = \frac{Dte_j}{fe} \quad (32)$$

Siendo  $fe$  un factor de espesor mayor que uno, y que se calcula según:

$$\frac{Dte_j}{fe} = Dte_j - 2 e \quad (33)$$

$$fe = \frac{Dte_j}{Dte_j - 2 e} \quad (34)$$

Esto es, una vez asumida la norma de la tubería (diámetro externo y espesor) se calcula  $fe$  y de ahí los diámetros exterior e interior de acuerdo a:

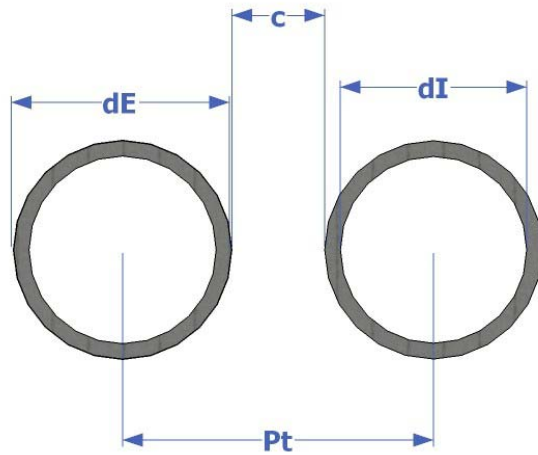
$$\left( \frac{Dte_j}{fe} \right)^2 = \frac{4 F d_t^E B}{\rho_j^{Liq} v_{liq} A_j^T} \quad (35)$$

$$Dte_j = \frac{4 F B fe^2}{\rho_j^{Liq} v_{liq} At_j} \quad (36)$$

$$Dt_j = \frac{Dte_j}{fe} \quad (37)$$

#### **II.2.4.1 Diámetro del haz de tubos:**

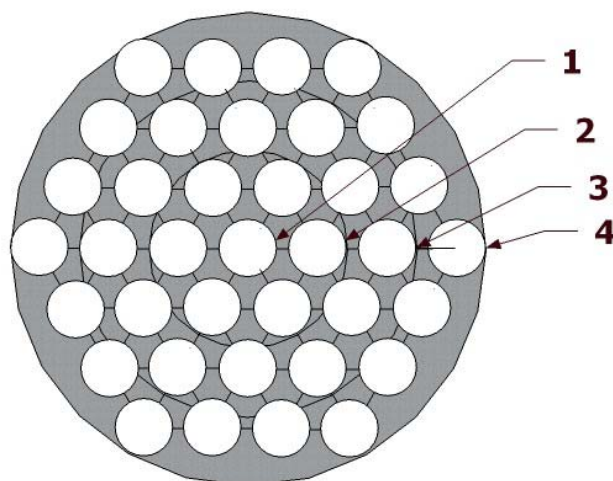
Para el cálculo del diámetro del haz de tubos se recurre a las tablas de intercambiadores para un solo paso con distintos arreglos. Para ello se recurre a ajuste mediante ecuaciones apropiadas de dichas tablas.



*Figura III.21: Distanciamiento entre tubos*

A continuación, en esta tesis se propone un método más sistemático para un arreglo hexagonal. Se adopta un tubo de diámetro exterior  $D_{te}$  con una separación entre las paredes ( $c$ ) en arreglo triangular.

Se divide el problema en niveles; así un nivel ( $n=1$ ) se considera una sola tubería en el centro y el diámetro de la coraza (DS) sería el propio del tubo. Para el nivel ( $n=2$ ), alrededor de la tubería central se agrupan otras 6, con lo que el total de tubos sería de 7 y el diámetro de la coraza igual a 3 diámetros más 2 veces el  $c$ . Con igual razonamiento por cada nivel tendremos, como se desprende de las Figuras (III.22) (III.23) y la Tabla III.2:



*Figura III.22: Disposición de tubos en arreglo triangular*



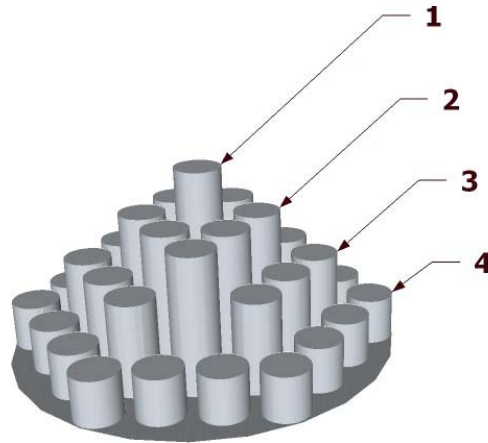


Figura III.23: Ordenamiento en hexágonos de los tubos

nivel	tubos	Número de diámetros	Número de c	Diámetro del haz de tubos: DS
1	1	1	0	$1x d_j^E + 0 x c$
2	7	3	2	$3x d_j^E + 2 x c$
3	19	5	4	$5x d_j^E + 4 x c$
4	37	7	6	$7x d_j^E + 6 x c$
5	61	9	8	$9x d_j^E + 8 x c$
6	91	11	10	$11x d_j^E + 10 x c$
7	127	13	12	$13x d_j^E + 12 x c$
8	169	15	14	$15x d_j^E + 14 x c$
9	217	17	16	$17x d_j^E + 16 x c$
10	271	19	18	$19x d_j^E + 18 x c$

Tabla III.2: Diámetro del haz de tubo en función del nivel

$$N_t = 3 \times n^2 - 3 \times n + 1 \quad (38)$$

$$N_{diam} = 2 \ n - 1 \quad (39)$$

$$N_c = 2 \ n - 2 \quad (40)$$

$$SD = N_{diam} \ Dte_J + N_c \ Pt \quad (41)$$

La ventaja del método es la posibilidad de su sistematización y su aplicabilidad a cualquier diámetro externo de tubo para diferentes valores de pitchs. Como en realidad lo que se obtiene es el número de tubos, se debe calcular el nivel inmediato superior para calcular el diámetro de coraza (o de haz de tubos) correspondiente.

Sea entonces conocido el número de tubos ( $N_T$ ), diámetro exterior de los mismos ( $d_j^E$ ) y asumido una distancia entre tubos ( $c$ ), aplicando la resolvente calculamos el nivel (o nº de hexágonos exterior):

$$n = \frac{3 + \sqrt{12 N_T - 3}}{6} \quad (42)$$

Por cuestiones prácticas, se desprecia la otra solución ya que es negativa. Luego se calcula el número de diámetros según ecuación 36:

$$N_{diam} = 2 n - 1 \quad (43)$$

$$N_c = 2 n - 2 \quad (44)$$

Cuando el diámetro es muy grande hay diferencia entre el número de tubos que caben en un hexágono asimilado por el método anterior y el que realmente podría caber en una carcasa circular.

Sea entonces un arreglo triangular como el que se indica de la figura:

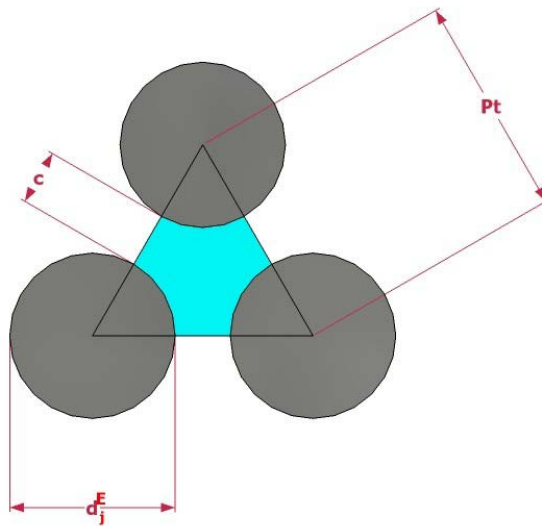


Figura III.24: Arreglo triangular de 3 tubos

El área del haz de tubos ( $SA$ ) se determina por la eq.(45):

$$SA = \frac{\pi DS^2}{4} \quad (45)$$

Escogiendo una unidad en forma de triángulo de la manera que indica la Figura III.25:

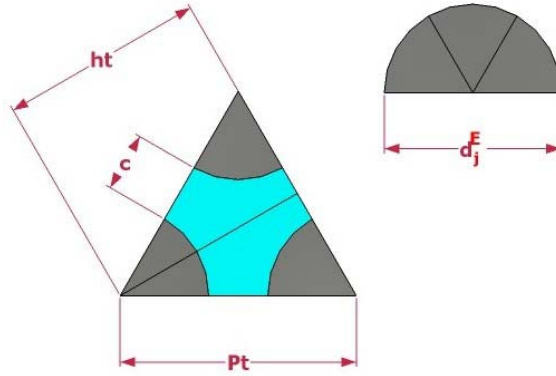


Figura III.25: Área del triángulo entre centros de tubos y áreas de tubos

El área del triángulo ( $A_{TR}$ ) resulta ser:

$$A_{TR} = \frac{Pt^2 \sqrt{3}}{4} \quad (46)$$

Se observa que a un triángulo le corresponde solamente medio tubo, por lo que dividiendo el área de la coraza por la del triángulo se obtiene el doble de tubos contenidos. Luego:

$$Nt = \frac{\pi DS^2}{2 \sqrt{3} Pt^2} \quad (47)$$

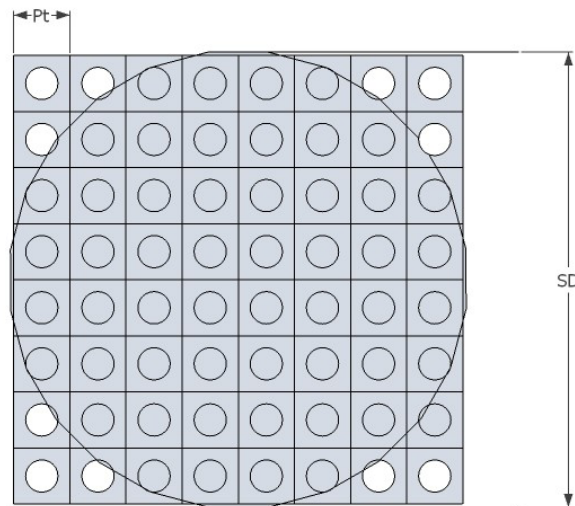
Por lo que el diámetro de la coraza para un arreglo triangular resulta:

$$DS = \sqrt{\frac{2\sqrt{3} Pt^2 Nt}{\pi}} \quad (48)$$

Para un arreglo en cuadro (Figura III.26), esquema más propicio a los efectos prácticos para poder realizar la limpieza exterior se debe notar que 4 tubos ocupan un área de  $(4 Pt^2)$  con lo que el número total de tubos resulta:

$$Nt = \frac{\pi DS^2}{4 Pt^2} \quad (49)$$

$$DS = \sqrt{\frac{4 Pt^2 Nt}{\pi}} \quad (50)$$



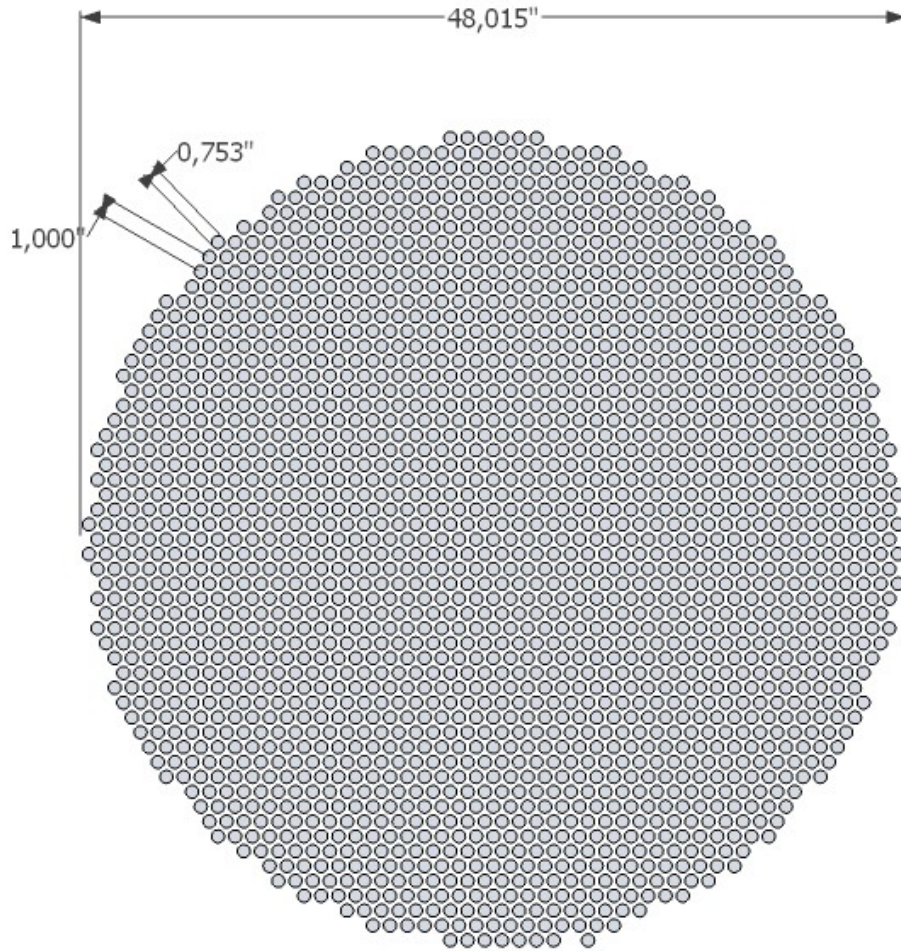
*Figura III.26: Arreglo en cuadro*

De esta manera se obtiene un valor consistente para el diámetro del haz de tubos. Puesto que algún tubo podría quedar “cortado” por la línea teórica de la coraza se puede agregar como margen de seguridad dos veces el pitch. El error no es importante dada las magnitudes involucradas.

A modo de ejemplo se escoge un caso en el que el pitch es 1” con 2036 tubos de 3/4” en arreglo triangular. A partir de la eq.(48) resulta:

$$DS = \sqrt{\frac{2 \sqrt{3} Pt^2 Nt}{\pi}} = \sqrt{\frac{2 \sqrt{3} 1^2 \times 2036}{\pi}} = 47,382" \quad (51)$$

Gráficamente se verifica que la coraza mide 48,015” valor muy aproximado al calculado (Figura III.27).



*Figura III.27: Arreglo de tubos ejemplo 1*

Por otra parte, para 1108 tubos de  $\frac{3}{4}$ " en arreglo triangular de pitch igual a 1" se obtiene un diámetro de haz de tubos de 90,152 cm (35,493") en forma gráfica (ver Figura III.28). Luego, aplicando la ecuación se obtiene 35,284" (88,90 cm).

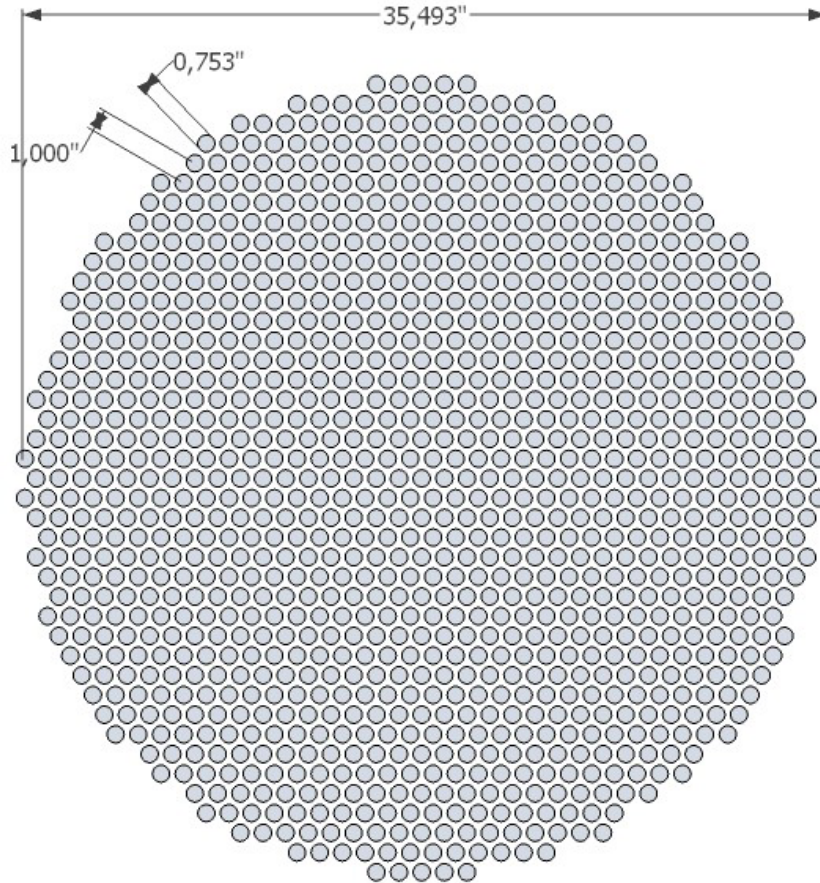


Figura III.28: Arreglo de tubos ejemplo 2

### III.2.5 Cálculo del área total del desalador:

Como se ha visto, se deben considerar dos contribuciones, la de intercambio térmico (de los tubos) y la de la cámara propiamente dicha (estructural).

El área de los tubos de intercambio ha sido ya analizado. El área de la cámara se calcula según:

$$CA = 2 B_j L_j + 2 B_j H_j + 2 L_j H_j \quad (52)$$

$$CA = \sum_{j=1}^{NS} CA_j \quad (53)$$

Si se asumen valores iguales para todas las cámaras/etapas y que una misma pared es compartida por dos etapas la ecuación puede simplificarse:

$$CA = 2 B L + 2 L H + B H (NS + 1) \quad (54)$$

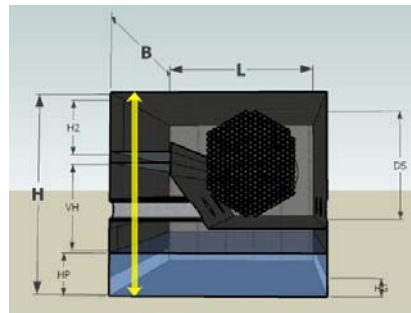


En la ecuación anterior no se descuenta el área faltante por las compuertas.

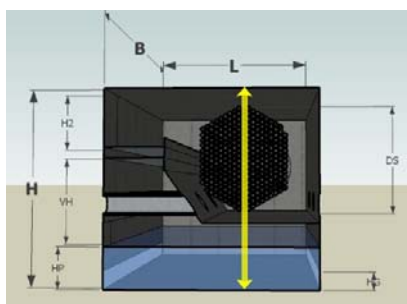
Para el cálculo del área de las cámaras se propone el siguiente algoritmo.

**Algoritmo:**

- 1- Se asume un ancho (B) de la cámara
- 2- Se asume una velocidad de diseño adecuada para el vapor
- 3- Mediante la ecuación (1) se calcula el largo de la cámara
- 4- Se asume un gradiente de altura por etapas (por ejemplo =0) para el perfil de alturas.
- 5- Mediante la ecuación (2) se calcula la altura de la compuerta para cada etapa
- 6- Mediante la ecuación (3) se calcula la altura desde el pool hasta el demister.
- 7- Se asume una altura para el pool HP.
- 8- Se asume una altura para el demister DH
- 9- Se asume un valor para la altura desde el demister hasta el techo de la cámara H2 (ejemplo 40 cm).
- 10- Mediante la ecuación 4 se calcula la cámara según el lado del Flasheo



- 11- Se asume una velocidad de diseño adecuada para la alimentación.
- 12- Mediante la ecuación (5) se calcula el diámetro de los tubos dt
- 13- Mediante la ecuación (6) se calcula el número de tubos NT
- 14- Se escoge un arreglo (en triangulo o en cuadro) –dato-
- 15- Se asume un pitch Pt –dato-
- 16- En función del esquema escogido se calcula el diámetro de la carcaza.
- 17- Se asume una altura desde el pool hasta la bandeja colectora de destilado.
- 18- Se asume un valor para la luz entre el haz de tubos y bandeja y coraza y techo
- 19- Se calcula la altura de la cámara del lado de los tubos mediante la suma de la altura del pool más el diámetro de la coraza más la altura entre pool y bandeja más el doble de la luz de la coraza.



- 20- Calculadas las alturas de la cámara según ambos lados, se adopta la mayor.
- 21- Mediante la ecuación (7) se calcula el área de la cámara.
- 22- Teniendo las áreas se calcula el costo aproximado para el equipo.

### Restricciones:

- A- En caso de tomar longitudes variables, ninguna cámara debe ser menor que  $f_c \cdot SD$  (siendo  $f_c$  un factor de seguridad mayor que 1). De considerarse todas iguales se escoge el mayor valor.
- B- Asumida la altura del pool, en ninguna cámara la altura del gate debe ser superior o se perdería el sello líquido.
- C- Habiendo calculado la altura desde el lado del flasheo y desde el lado de los tubos se escoge el mayor valor
- D- El pitch de los tubos debe ser superior al diámetro externo de los tubos

### III.3 Cálculo de Costos. Implementación en Hysys®.

Si bien el modelo riguroso sea ha implementado utilizando en general módulos en la biblioteca del simulador, aquí se recurre al uso de funciones avanzadas para introducir en el modelo los cálculos introducidos anteriormente. Esto es necesario, ya que como vimos, el costo del equipo es función del área total, que incluye el área de las cámaras de evaporación. Por lo tanto, una vez lograda la convergencia de los balances de materia y energía, debemos diseñar las cámaras en función de la metodología expuesta en la sección anterior, la cual debe incorporarse como una función de usuario en Hysys®. Para implementarlas se hace uso, nuevamente, de las spreadsheet:



	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V
1	Carga	UA	LMTD	Area intercambio	Diametro tubo	Numero de tubos	Altura Gate	Diam Coraza cuadr	Diam Coraza Tr	Largo Real	Altura T
2	KJ/s	KJ/s °C	°C	m <sup>2</sup>	m		m	m	m	m	m
3	1.237e+005	2.546e+004	4.850	1.273e+004	4.176e-002	4850		1.995	1.857	3.573	1.600
4	1.230e+005	2.531e+004	4.858	1.266e+004	4.204e-002	4791	0.3395	1.984	1.846	3.843	1.600
5	1.232e+005	2.827e+004	4.356	1.413e+004	3.764e-002	5977	0.3505	2.216	2.062	4.148	1.600
6	1.234e+005	2.542e+004	4.854	1.271e+004	4.185e-002	4833	0.3622	1.993	1.854	4.484	1.600
7	1.100e+005	2.321e+004	4.741	1.160e+004	4.584e-002	4023	0.3745	1.819	1.693	4.853	1.600
8	1.354e+005	2.845e+004	4.759	1.423e+004	3.740e-002	6054	0.3874	2.230	2.075	5.261	1.600
9	1.230e+005	2.549e+004	4.828	1.274e+004	4.176e-002	4854	0.4011	1.997	1.858	5.711	1.600
10	1.230e+005	2.556e+004	4.812	1.278e+004	4.162e-002	4887	0.4155	2.004	1.865	6.205	1.600
11	1.232e+005	2.565e+004	4.803	1.262e+004	4.149e-002	4920	0.4307	2.010	1.871	6.750	1.600
12	1.232e+005	2.569e+004	4.797	1.265e+004	4.141e-002	4936	0.4459	2.014	1.874	7.371	1.600
13	1.233e+005	2.576e+004	4.785	1.268e+004	4.130e-002	4965	0.4639	2.019	1.879	8.050	1.600
14	1.232e+005	2.574e+004	4.785	1.267e+004	4.134e-002	4954	0.4819	2.017	1.877	8.805	1.600
15	1.231e+005	2.583e+004	4.767	1.262e+004	4.119e-002	4991	0.5011	2.025	1.884	9.647	1.600
16	1.236e+005	2.602e+004	4.750	1.301e+004	4.089e-002	5065	0.5213	2.040	1.898	10.59	1.600
17	1.233e+005	2.594e+004	4.752	1.297e+004	4.102e-002	5032	0.5429	2.033	1.892	11.64	1.600
18	1.237e+005	2.618e+004	4.725	1.309e+004	4.063e-002	5129	0.5658	2.052	1.910	12.81	1.600
19	1.238e+005	2.612e+004	4.740	1.306e+004	4.074e-002	5101	0.5901	2.047	1.905	14.13	1.600
20	1.237e+005	2.613e+004	4.735	1.307e+004	4.072e-002	5107	0.6160	2.048	1.906	15.61	1.600
21	1.237e+005	2.614e+004	4.731	1.307e+004	4.071e-002	5110	0.6436	2.049	1.907	17.30	1.600
22	1.243e+005	2.649e+004	4.693	1.324e+004	4.017e-002	5247	0.6730	2.076	1.932	19.18	1.600
23											
24	1.262e+005	3.202e+004	3.942	1.601e+004	2.526e-002	1.009e+004		2.879	2.679	23.70	1.600
25	1.306e+005	2.861e+004	4.567	1.430e+004	2.827e-002	8052	0.7084	2.572	2.383	26.67	1.600
26	1.371e+005	2.562e+004	5.348	1.281e+004	3.157e-002	6480	0.7465	2.304	2.144	30.08	1.600

Connections Parameters Formulas Spreadsheet Calculation Order User Variables Notes

	W	X	Y	Z	AA	AB	AC	AD	AE	AF
1	Altura 2	Altura Camara	Area Cámara	Costo Camara	Costo Total	Costo Fijo	Costo Operativo	Costo Total		
2	m	m	m <sup>2</sup>	us\$	us\$	us\$	us\$	us\$		
3	3.257	3.257	231.3	8.101e+005	8.101e+005	2.465e+006	0.0000	2.465e+006		
4	3.246	3.246	243.6	8.154e+005	1.626e+006					
5	3.462	3.462	263.9	9.046e+005	2.930e+006					
6	3.254	3.254	273.6	8.407e+005	3.371e+006	Consumo Vapor				
7	3.093	3.093	286.0	7.948e+005	4.166e+006	Kg/h	5.274e+005 kg/h		Agua de mar	3.521e+004 m3/h
8	3.475	3.475	316.5	9.487e+005	5.114e+006	Kg/año	0.0000			
9	3.258	3.258	330.8	8.850e+005	5.939e+006	us\$/Kg	0.0000			
10	3.265	3.265	354.2	9.047e+005	6.304e+006					
11	3.271	3.271	380.0	9.262e+005	7.630e+006		1.595e+007	<- m3/h		
12	3.274	3.274	408.6	9.497e+005	8.779e+006	Agua Potable	4404 m3/h	3.523e+007	m3/año	
13	3.279	3.279	440.4	9.744e+005	9.753e+006		998.5 kg/m3	23.25	MIGD	
14	3.277	3.277	475.5	1.000e+006	1.075e+007	Costo Unitario	6.936e+002	us\$/m3		
15	3.284	3.284	514.9	1.032e+006	1.179e+007	Carga termica	2.844e+008 kcal/h	1.191e+006	MJ/h	
16	3.298	3.298	559.3	1.070e+006	1.286e+007	Carga especifica		270.4	MJ/m3	
17	3.292	3.292	607.9	1.104e+006	1.396e+007					
18	3.310	3.310	663.5	1.152e+006	1.511e+007			1191	GJ/h	
19	3.305	3.305	724.8	1.196e+006	1.631e+007			0.2388	us\$/GJ	
20	3.306	3.306	793.9	1.249e+006	1.756e+007		Operativo ver 2	9.402e+006	us\$/año	
21	3.307	3.307	872.6	1.308e+006	1.887e+007		Total ver 2	1.187e+007	us\$/año	
22	3.332	3.332	961.8	1.384e+006	2.025e+007			0.7485	us\$/m3	
23										
24	4.079	4.079	1223	1.718e+006	2.197e+007		Plant Performance	PR	8.338	
25	3.793	3.793	1345	1.724e+006	2.369e+007					
26	3.544	3.544	1487	1.756e+006	2.545e+007					

Connections Parameters Formulas Spreadsheet Calculation Order User Variables Notes

Figura III.29: Planilla Spreadsheet implementada en Hysys®

La Tabla indicada en la Figura III.29 es generada por una operación de usuario. Mediante la misma, y en código visual basic, se importan las variables de interés de cada etapa y aplicando las ecuaciones, definidas en la sección anterior, se relacionan las variables correspondientes de cada cámara y se obtienen los resultados deseados, según la metodología de cálculo descrita.

La operación de usuario se vinculó a la corriente que sale de la última etapa de tal manera que con cada cambio, el módulo se active y ejecute el código. En el diagrama de flujo de información (DFI), de Hysys®, el módulo de operación luce de la siguiente manera:

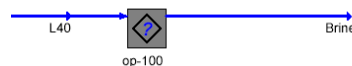


Figura III.30: Icono del módulo de transferencia de información

El código del módulo se encarga de limitar el número de etapas (de las 40 disponibles) al valor correspondiente al caso fijado por el usuario (ejemplo: 23) ignorando las etapas restantes.

Otra tarea importante del módulo es el cálculo del número de tubos, diámetros de los mismos, dimensiones de las cámaras (largo, ancho y alto), el diámetro del haz de tubos, y demás parámetros de diseño. Estos valores se utilizan como se mencionó, a fin de poder calcular el costo de inversión del equipo EFME.

Habiendo explicitado el módulo incorporado al simulador y los módulos de estimación de las propiedades fisicoquímicas a continuación se analizan los resultados de dicho modelo propuesto, a través de distintos casos de estudio, además de mostrar las prestaciones del modelo de diseño y de costos implementado asociado al módulo de resolución de balances de materia y energía.

Se intentará, en lo posible, comprar los resultados con datos publicados en la bibliografía, cuando estos estuvieran disponibles o puedan estimarse de alguna manera.

### **III.4. Casos de estudio: Comparación del modelo riguroso con modelos publicados en la bibliografía específica.**

#### **III.4.1. Caso de estudio 1: EFME-OT**

(Hisham El-Dessouky, et al) en el artículo “Process synthesis: the multi-stage flash desalination system”, publicaron resultados para diferentes estructuras de desaladores. En este caso se analizará el modelo propuesto por los autores para un proceso del tipo once-through y se lo comparará con el modelo simplificado, ya presentado en el capítulo II, caso de estudio 1, para este caso de estudio, y el riguroso aquí propuesto (Hysys®). Los datos del problema son:

Tvap	373	°K
Qdes	3,03264E+05	Kcal/h
Tmax	363	°K
Cp	1	Kcal/Kg °K
EPE	2	°K
U	1719,69	Kcal/Kg °K m2
NS	23	
T0	303	°K
P	3,60000E+03	Kg/h
CPm	1	Kcal/Kg °K
Lamda	560,45	Kcal/Kg

*Tabla III.3: Parámetros del caso de estudio*

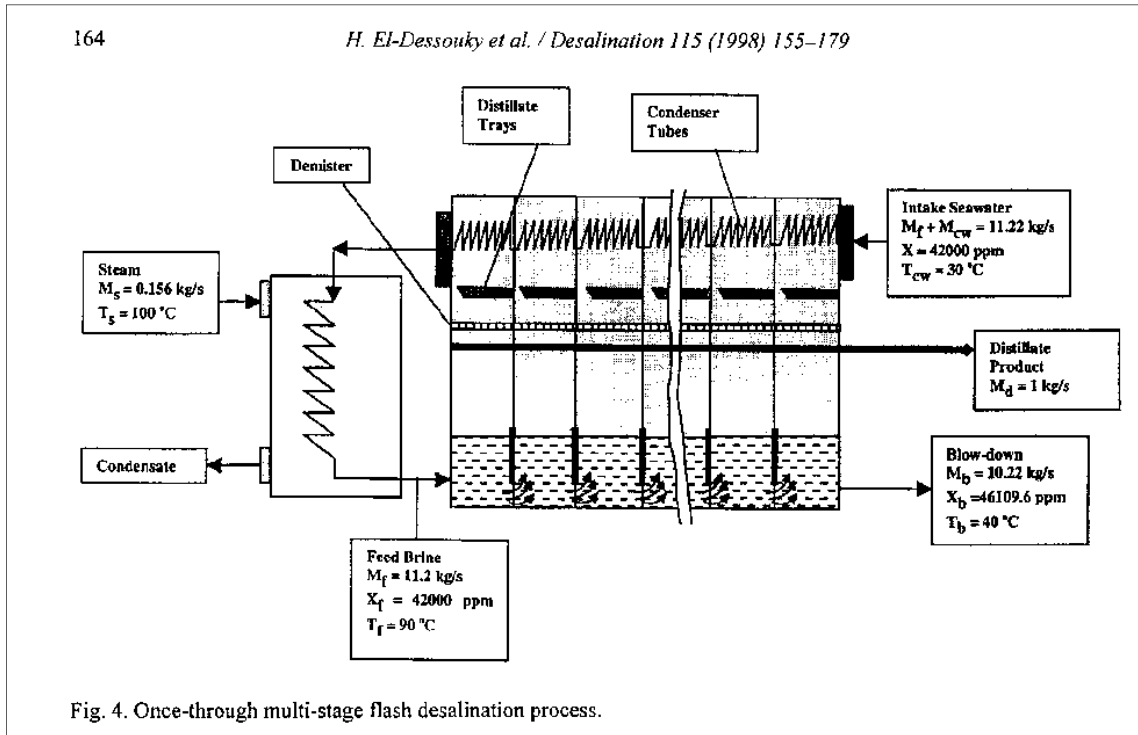


Fig. 4. Once-through multi-stage flash desalination process.

Figura III.31: Flowsheet de referencia

En la Figura III.30 se muestra en forma gráfica los principales parámetros asociados al desalador, tanto de la fuente de referencia como en el caso particular

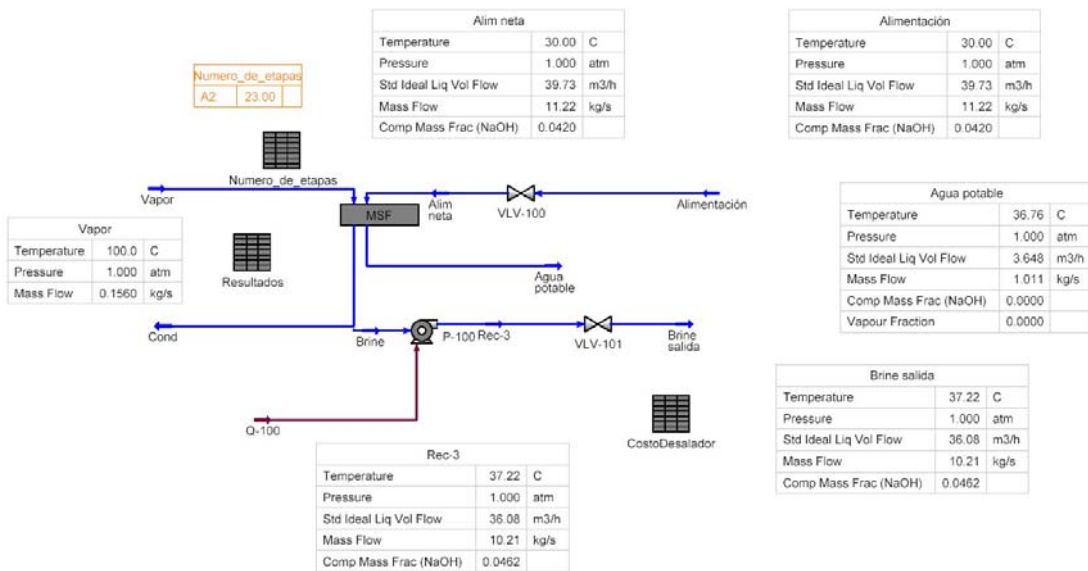


Figura III.32: Flowsheet resultante

En la siguiente tabla se muestran los resultados comparando el modelo de referencia, y los modelos simplificado y riguroso aquí implementado.

	Simplificado	Riguroso	Referencia	
F	11,170	11,220	11,220	Kg/s
$\Delta t$	7,542	7,495	7,508	°C
$\Delta t_f$	2,28	2.30	-----	°C
$\Delta t_e$	3,261	3.200	-----	°C
Área de Tubos	285,19	286.40	294.400	m <sup>2</sup>
Área Intercambiador	13.14	10.27	12.70	m <sup>2</sup>
Área total transferencia	298.33	296.66	307.10	m <sup>2</sup>

Tabla III.4: Resultados del caso de estudio

Si bien los resultados del modelo simplificado aquí implementado son muy buenos, debe recordarse que no permiten evaluar perfiles de flujo, temperatura, presiones y demás parámetros operativos a lo largo del evaporador.

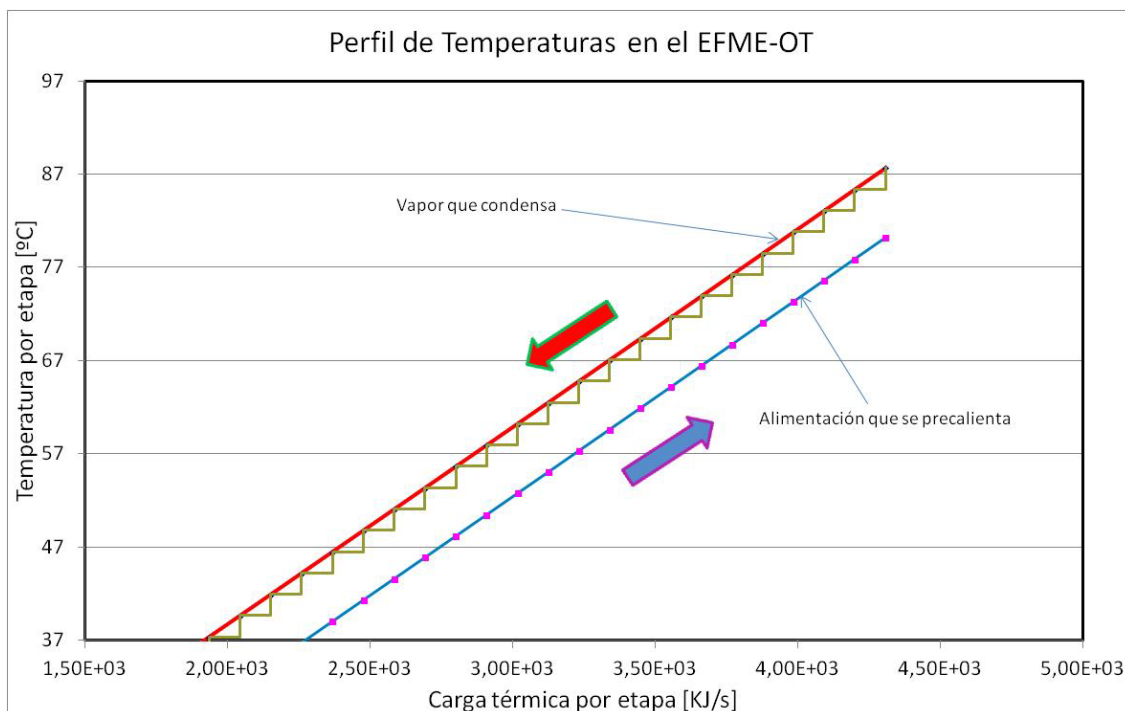


Figura III.33: Perfil de temperatura

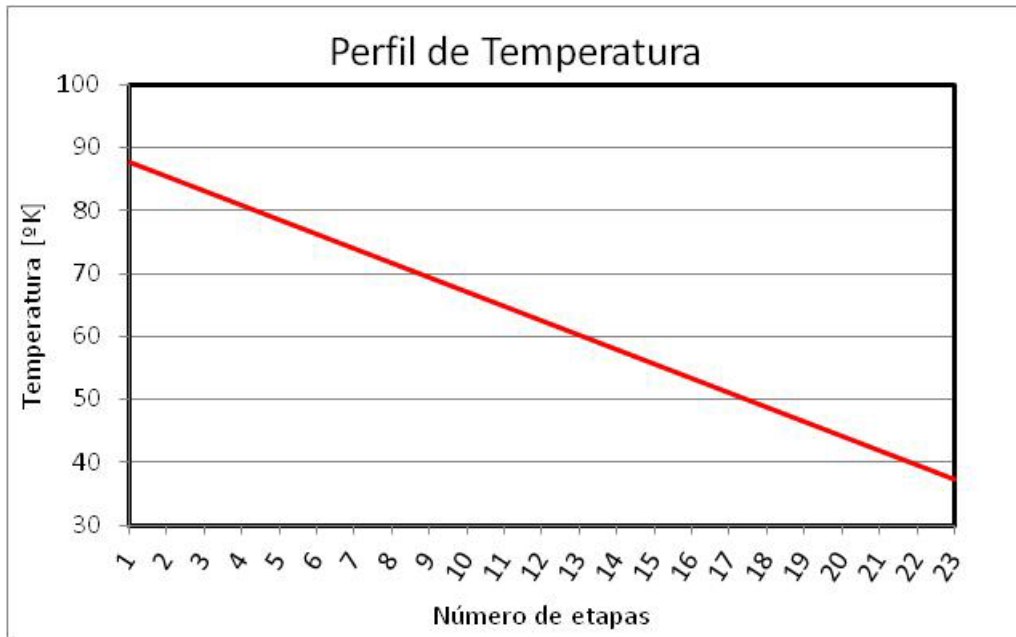


Figura III.34: Perfil de temperatura

### III.4.2. Caso de estudio 2: EFME-M

En este caso sólo se comparará el modelo riguroso con los resultados obtenidos en la referencia mencionada. Los datos del problema se aprecian en la tabla siguiente y en la Figura III.34. El desalador cuenta con un reciclo, una producción de 1 [Kg/seg], temperatura máxima de la salmuera de 90 °C con un vapor de calefacción 10 °C superior. El reciclo permite reducir el flujo de alimentación y mejora la eficiencia térmica del proceso.

En la tabla siguiente se presentan los datos del problema:

Tvap	373	°K
Qdes	2.427E+05	Kcal/h
Tmax	363	°K
Cp	1	Kcal/Kg °K
EPE	2	°K
U	1719.69	Kcal/Kg °K m2
NS	23	
T0	303	°K
P	3.60000E+03	Kg/h
CPm	1	Kcal/Kg °K
Lamda	560.45	Kcal/Kg

Tabla III.5: Parámetros del caso de estudio

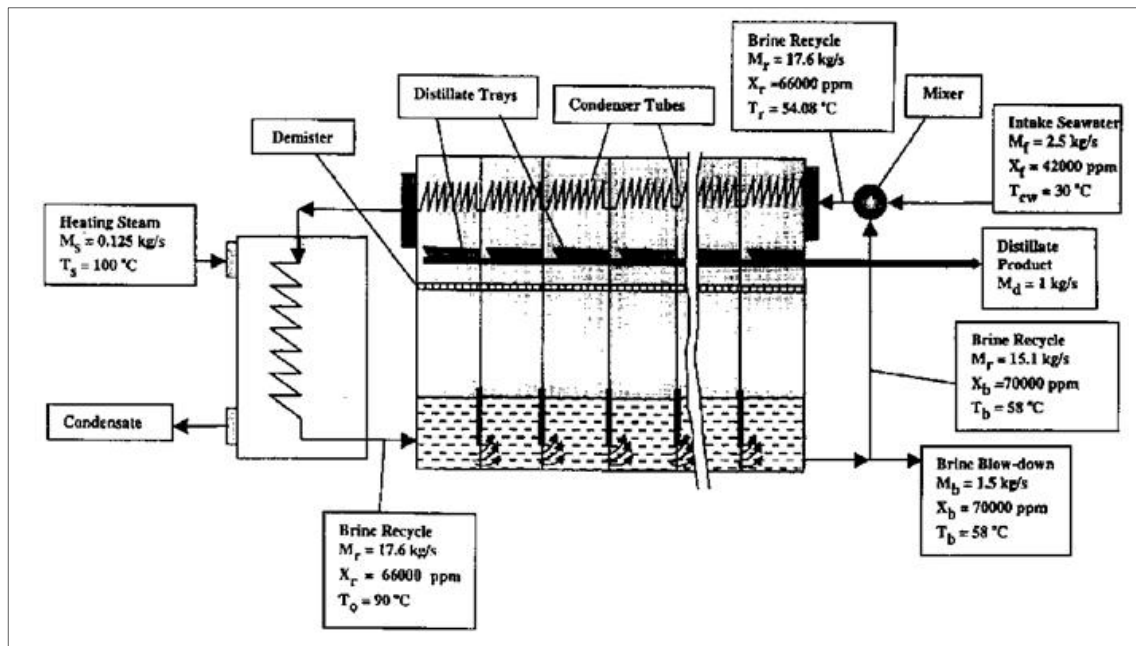


Figura III.35: Flowsheet de referencia

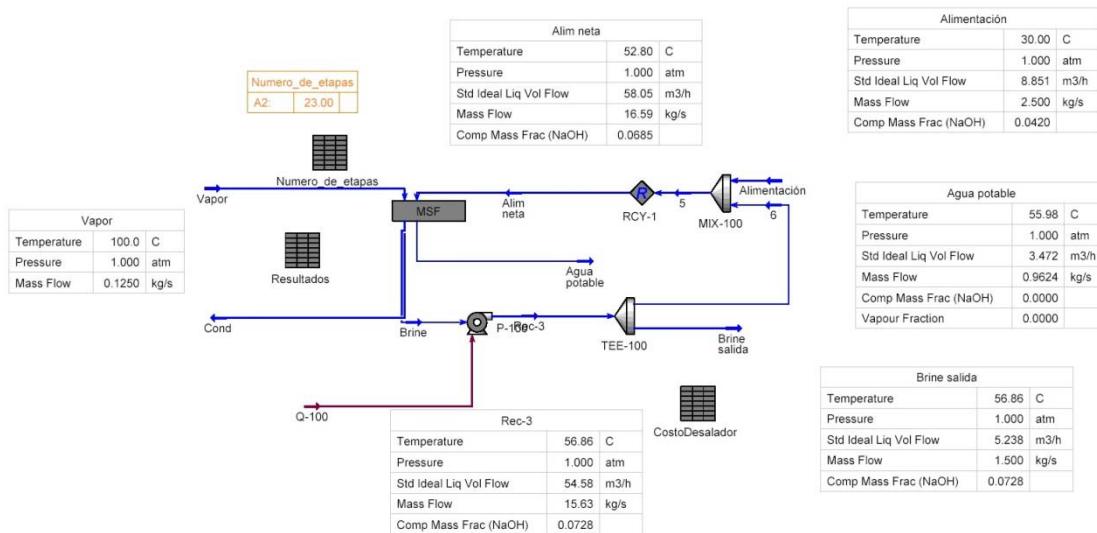
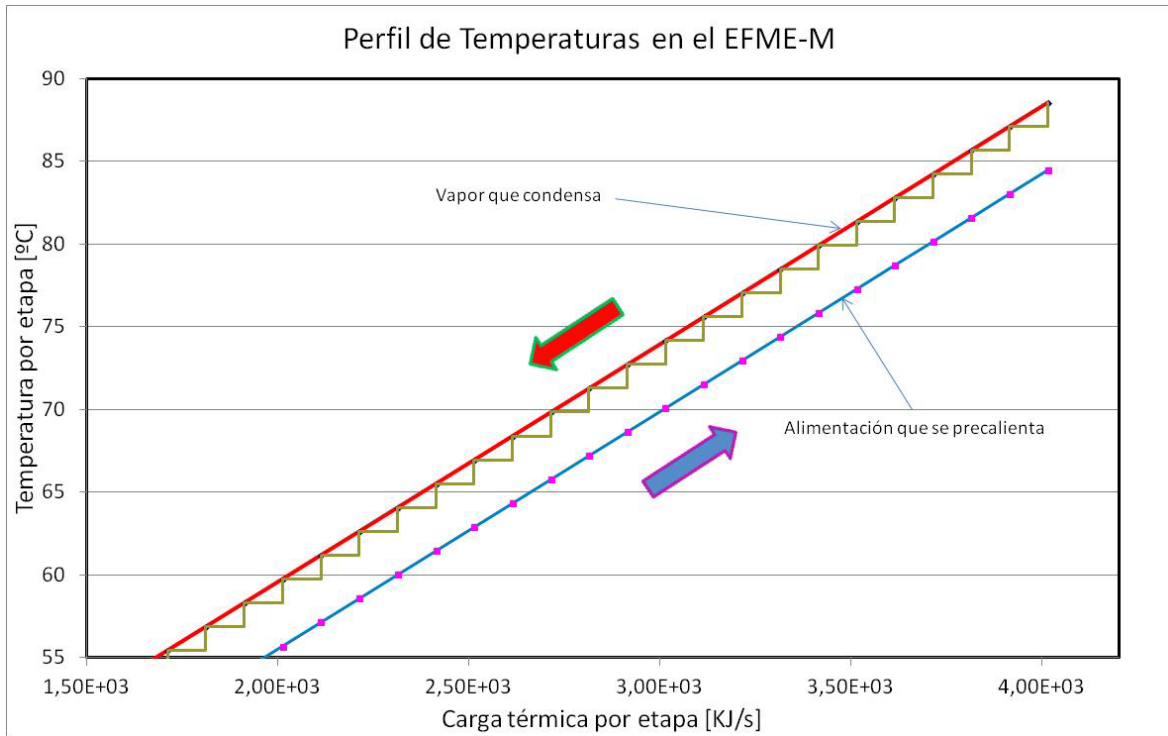


Figura III.36: Flowsheet resultante

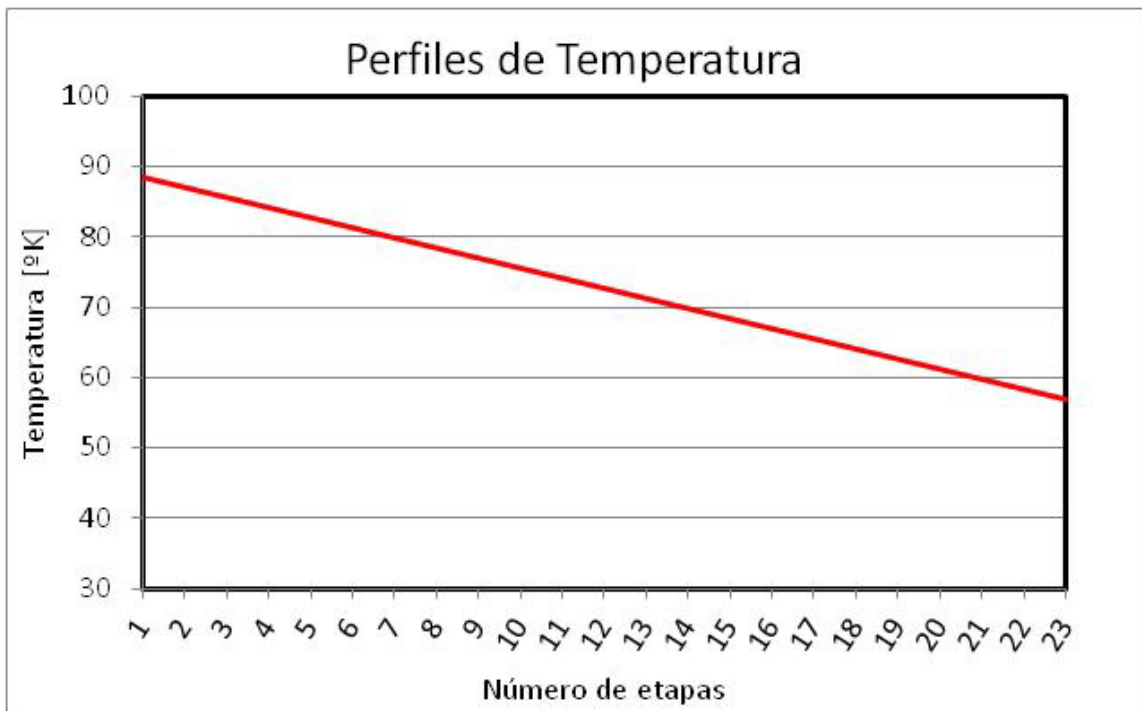
Los resultados obtenidos, comparando ambos modelos resultan:

	Riguroso	Referencia	
F	2.50	2.50	Kg/s
$\Delta t$	4.065	3.897	°C
$\Delta t_f$	1.44	-----	°C
$\Delta t_e$	0.625	-----	°C
Área de Tubos	418.30	321.310	m <sup>2</sup>
Área Intercambiador	11.83	10.90	m <sup>2</sup>
Área total transferencia	430.14	332.21	m <sup>2</sup>

Tabla III.6: Resultados del caso de estudio



*Figura III.37: Perfil de temperatura*



*Figura III.38: Perfil de temperatura*

### III.4.3. Caso de estudio 3: EFME-Convencional

Nuevamente se compara sólo el modelo riguroso con el modelo publicado en la referencia mencionada anteriormente. En la siguiente tabla se muestran los datos el caso de estudio.

Tvap	373	°K
Qdes	2.893E+05	Kcal/h
Tmax	363	°K
Cp	1	Kcal/Kg °K
EPE	2	°K
U	1719.69	Kcal/Kg °K m2
NS	23	
T0	303	°K
P	3.60000E+03	Kg/h
CPm	1	Kcal/Kg °K
Lamda	560.45	Kcal/Kg

Tabla III.7: Parámetros del caso de estudio

En la Figura III.39 se muestran los parámetros asociados al problema, descritos en la referencia, y en el presente caso. Nuevamente la producción esperada es de 1 [Kg/seg]. Las condiciones del agua de mar de ingreso es similar al primer caso. El número de etapas siguen siendo de 23, 20 en la sección de recuperación y 3 en la de rechazo.

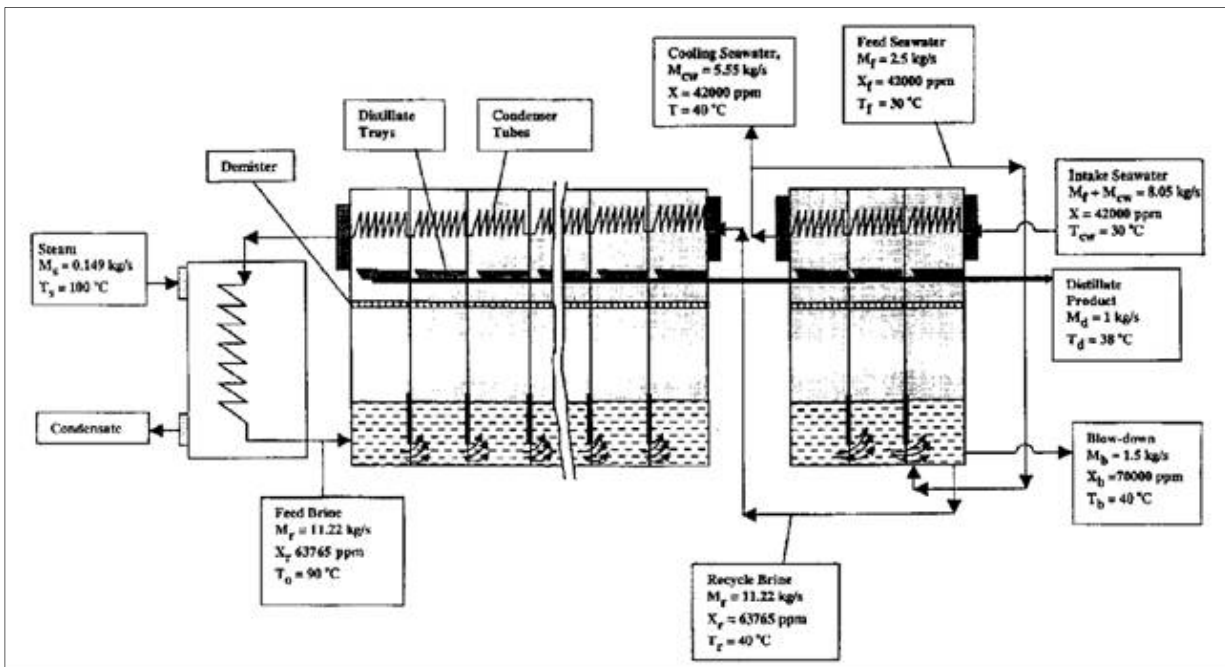


Figura III.39: Flowsheet de referencia



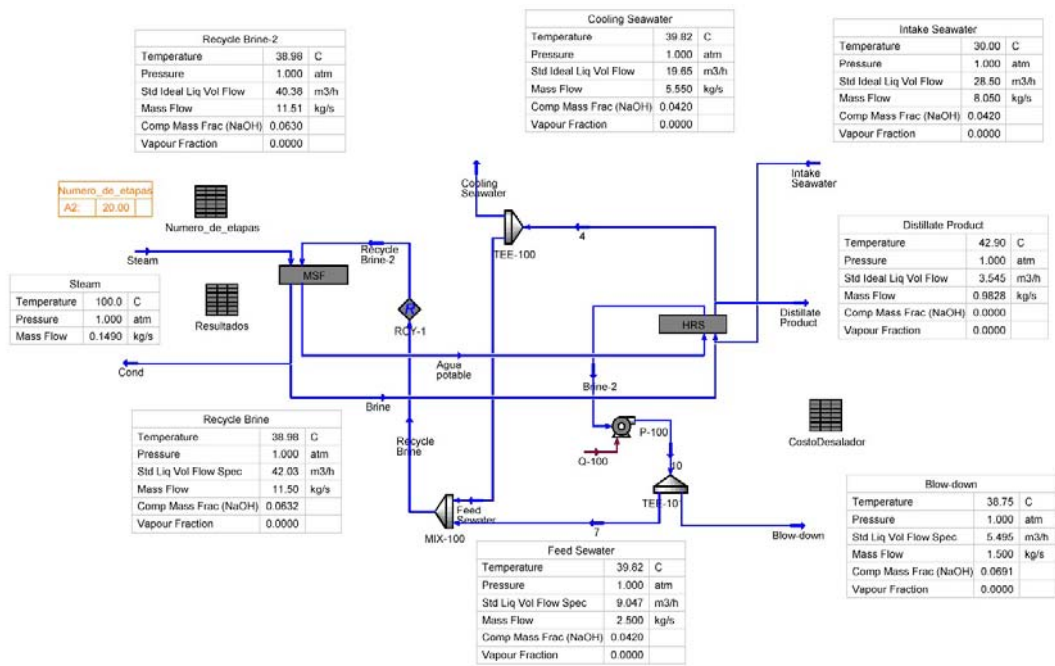


Figura III.40: Flowsheet resultante

A continuación se muestran los resultados comparativos para este caso de estudio.

	Riguroso	Referencia	
F	8,05	8.050	Kg/s
$\Delta t$	6.982	7.162	°C
$\Delta t_f$	2.213	-----	°C
$\Delta t_e$	2.769	-----	°C
Área de Tubos (recuperador)	258.77	255.600	m <sup>2</sup>
Área de Tubos (rechazo)	39.29	37.710	
Área Intercambiador	11.83	12.69	m <sup>2</sup>
Área total transferencia	309.89	306.00	m <sup>2</sup>

Tabla III.8: Resultados del caso de estudio

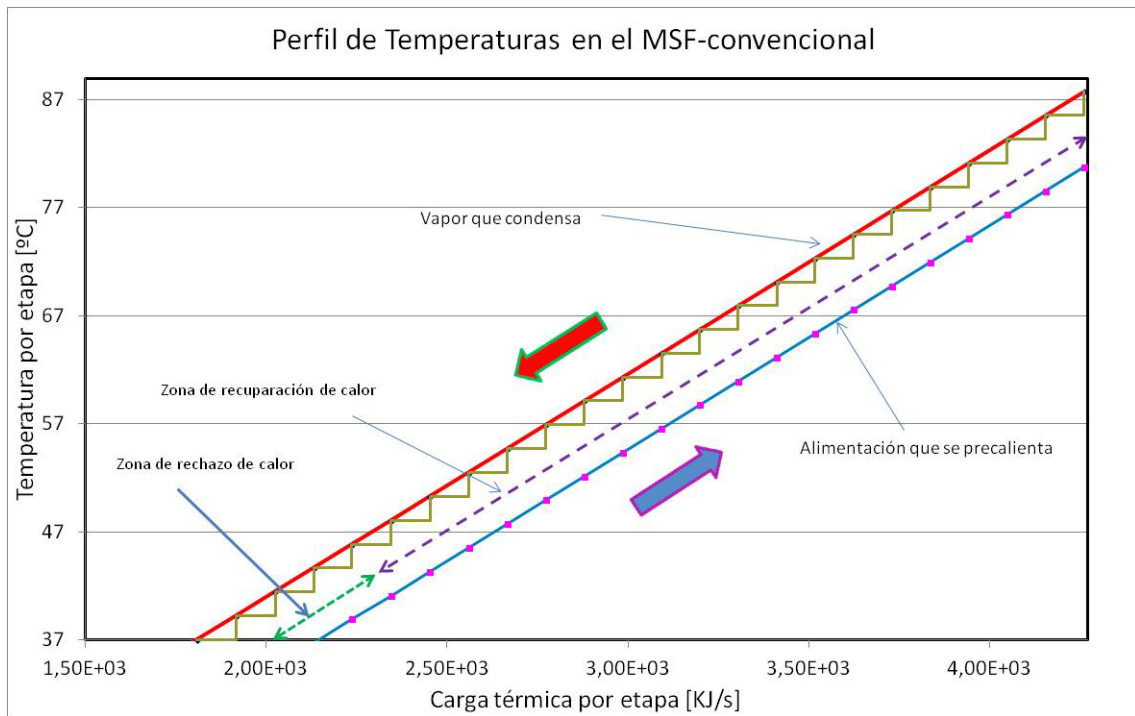


Figura III.41: Perfil de temperatura

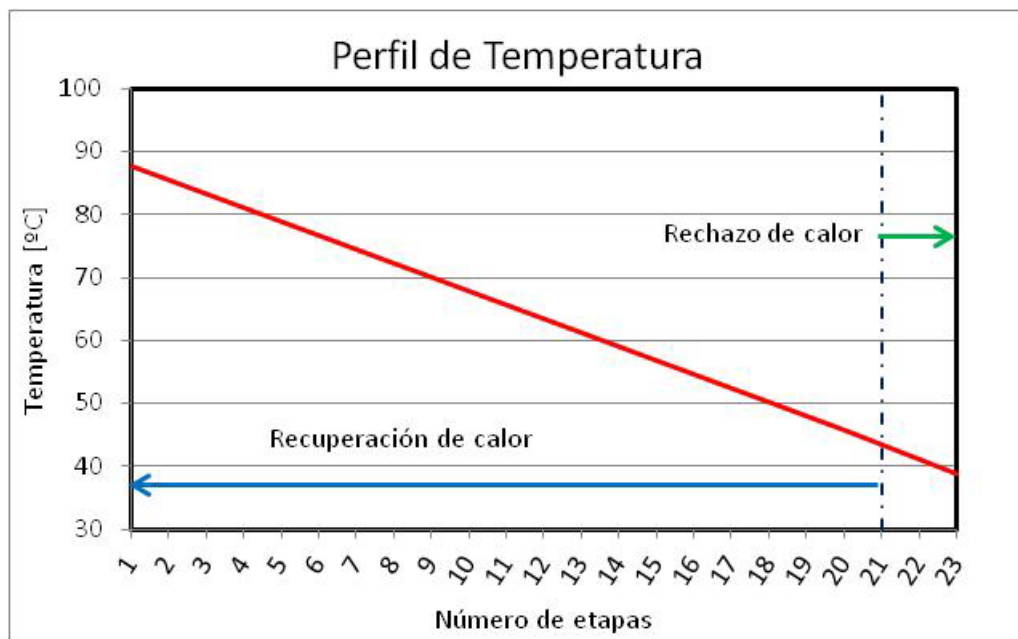


Figura III.42: Perfil de temperatura

#### III.4.4. Caso de estudio 4: Comparación del modelo riguroso con el simplificado y un modelo de optimización reportados previamente en la literatura.

(Mussati, Marchovecchio, Pio Aguirre, Scenna N 2004) en la publicación “A new global optimization algorithm for process design: its application to thermal desalination processes” publican un caso de estudio que a continuación se toma como base de comparación, tanto para el

modelo riguroso, como para el simplificado. Se trata de un EFME-OT con las siguientes características o especificaciones para el diseño.

Tvap	403	°K
QDes	7.90000E+07	Kcal/h
Tmax	393	°K
Cp	1	Kcal/Kg °K
EPE	1.3	°K
U	2100	Kcal/Kg °K m2
NS	22	
T0	298	°K
P	1.00000E+06	Kg/h
CPm	1	Kcal/Kg °K
Lamda	540	Kcal/Kg

Tabla III.9: Parámetros del caso de estudio

En la Figura III.43 se muestran los datos asociados al problema según el modelo riguroso desarrollado en ésta tesis.

Dado que en el presente caso el modelo planteado es básicamente de simulación, y el citado en la referencia tiene como objetivo la optimización, se desarrolla una estrategia en etapas para aproximar los resultados utilizando el modelo simplificado. En primer lugar, y utilizando el mismo procedimiento explicado en el caso de estudio (capítulo II) se estima el número mínimo de etapas. Cabe aclarar que en el caso del artículo de referencia, el número de etapas fue un resultado de la optimización y que la misma se realizó mediante un modelo implementado en GAMS.

El modelo simplificado desarrollado en esta tesis se empleó, luego para optimizar el ancho de la cámara, para minimizar el área total. Se obtuvo la curva que se muestra en la Figura III.44:

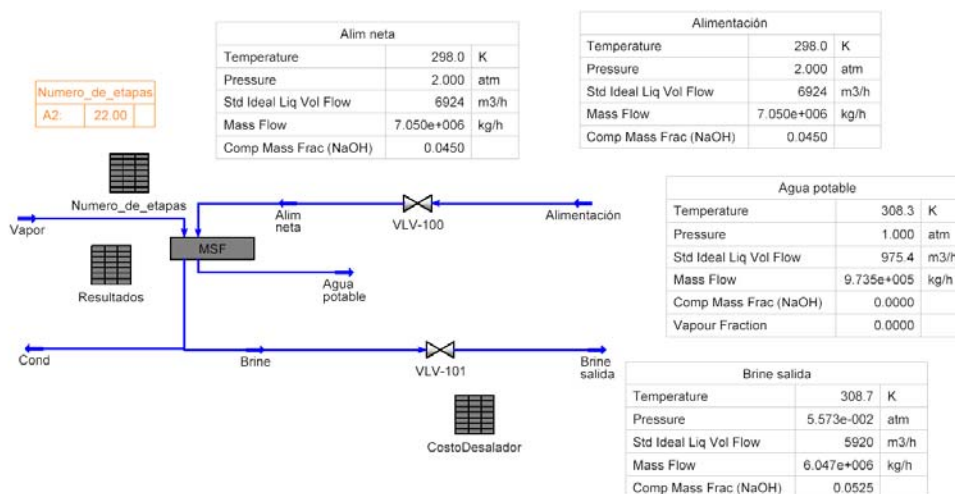


Figura III.42: Flowsheet del caso

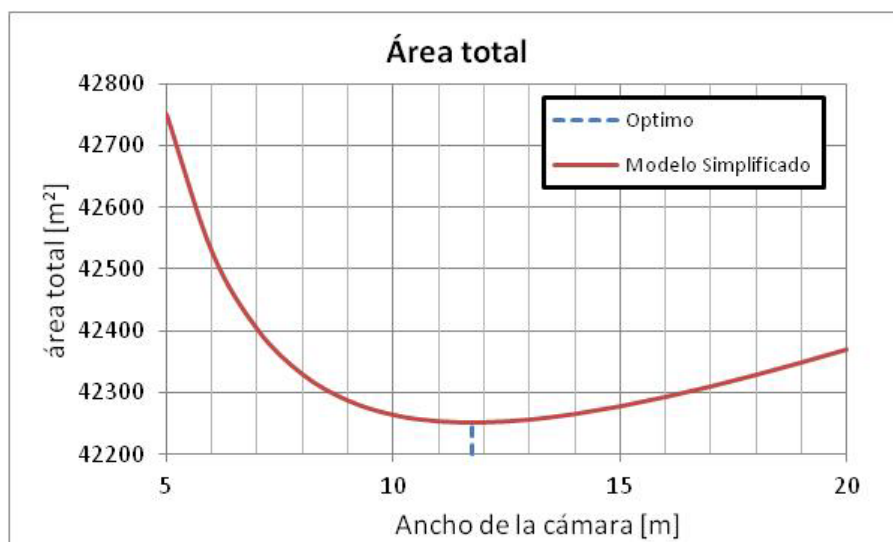


Figura III.44: Curva de área total vs ancho de cámara

Con el ancho (11,731 m) calculado de esta manera, y con el número de etapas previamente fijados se realiza la simulación correspondiente, adoptando los datos de entrada especificados en la tabla. Se obtuvieron los siguientes resultados:

	Simplificado	Riguroso	Artículo de Referencia	
F	6,94731E+06	7,05000E+06	7,05000E+06	Kg/h
$\Delta t$	11,371	11,190	11,510	°K
$\Delta t_f$	3,80	3,83	3,85	°K
$\Delta t_e$	6,270	6,056	7,380	°K
Número de tubos	1473	1796	1661	
Diámetro de tubos	28,9	26,55	35,48	mm
Área de Tubos	3,45E+04	3,86E+04	4,01E+04	m <sup>2</sup>
Área Intercambiador	2512,49	2532,86	2514,00	m <sup>2</sup>
Área total transferencia	37004,52	41154,13	42614,00	m <sup>2</sup>

B	11,731	11,731	12,060
H	4,119	2,530	2,420
LD	21,279	78,280	30,910

Área camaras	1785,81	3085,75	1558,00
Área de Tubos	3,45E+04	3,86E+04	4,01E+04
Área Intercambiador	2512,49	2532,86	2514,00
Área total	38790,33	44239,88	44172,00

Tabla III.10: Resultados del caso de estudio

Vale aclarar que en el modelo riguroso las áreas obtenidas se van incrementando a lo largo del equipo a fin de mantener una velocidad de vapor de 2 m/s (que ha sido fijada como criterio de diseño). Pero como dicha velocidad puede (según algunos criterios de diseño) llegar hasta 4 m/s, y a fin de que todas las cámaras sean iguales, se pueden agregar dos nuevas especificaciones (dimensiones iguales para todas las cámaras y velocidades de vapor comprendidas entre 2 y 4 m/s). Dado que en este caso particular, siempre puede lograrse velocidades en dicho rango, aún con el valor del área de la primera etapa, que es el área menor; de cumplir con los criterios de diseño ahora establecidos, el área total (número de etapas multiplicado por el área de la primera cámara) resulta, de 1939,80 m<sup>2</sup>, más cercano al óptimo global obtenido por [Mussati, Marchovecchio, Pio Aguirre, Scenna N (2004)], bajo las hipótesis del modelo utilizado

Esto implica que al adoptar un rango permitido de valores para la velocidad de operación, obviamente el modelo de optimización hará activa las cotas respectivas.

	Simplificado	Riguroso	Artículo Publicado
Área cámaras	1785,81	1939,81	1558,00
Área de Tubos	3,45E+04	3,86E+04	4,01E+04
Área Intercambiador	2512,49	2532,86	2514,00
Área total	38790,33	43093,93	44172,00

*Tabla III.11: Resultados del caso de estudio*

Debe entonces destacarse, que aún para el diseño de un sistema de desalinización dado, utilizando sistemáticamente los modelos planteados en esta tesis, puede obtenerse resultados de optimización equivalentes a aquellos que se obtienen mediante un modelo orientado a ecuaciones. Más aún, en este caso, utilizando un algoritmo de optimización global.

#### **III.4.5. Caso de estudio 5: Comparación del modelo riguroso con uno desagregado publicado en la bibliografía (GAMS).**

(Marchovecchio, Mussati, Pio Aguirre, Scenna N 2005) en la publicación “Optimization of Hybrid Desalination Processes including Multi Stage Flash Desalination and Reverse Osmosis Systems”, publican un caso que a continuación se toma como base, tanto para el modelo riguroso, como para el simplificado. Se trata de un EFME-OT con las siguientes características de diseño:

Tvap	400	°K
Qdes	1.13000E+08	Kcal/h
Tmax	390	°K
Cp	1	Kcal/Kg °K
EPE	2	°K
U	2100	Kcal/Kg °K m2
NS	29	
T0	298	°K
P	1.25000E+06	Kg/h
CPm	1	Kcal/Kg °K
Lamda	540	Kcal/Kg

Tabla III.12: Parámetros del caso de estudio

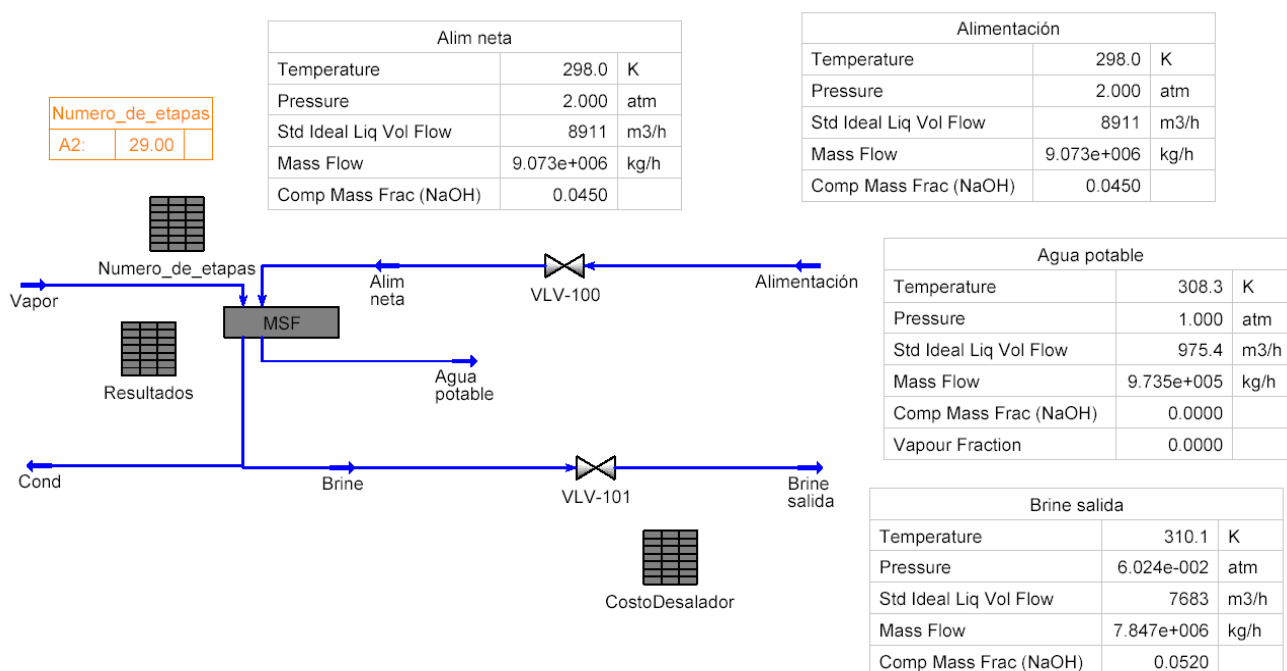


Figura III.45: Flowsheet del caso

En la Figura III.45 se muestran los parámetros asociados al problema según el modelo implementado en esta tesis (Hysys®). Si bien en el artículo mencionado el objetivo es analizar un sistema híbrido combinando un sistema de ósmosis inversa, y un evaporador EFME-OT; se obtienen en primera instancia, soluciones óptimas para cada proceso individual. En el presente caso, se referirá sólo al sistema EFME-OT. Utilizando el mismo procedimiento indicado en el caso de estudio anterior se obtienen los siguiente resultados. En primer lugar, en la Figura III.46 se muestra el valor del ancho óptimo, optimizando en forma paramétrica.

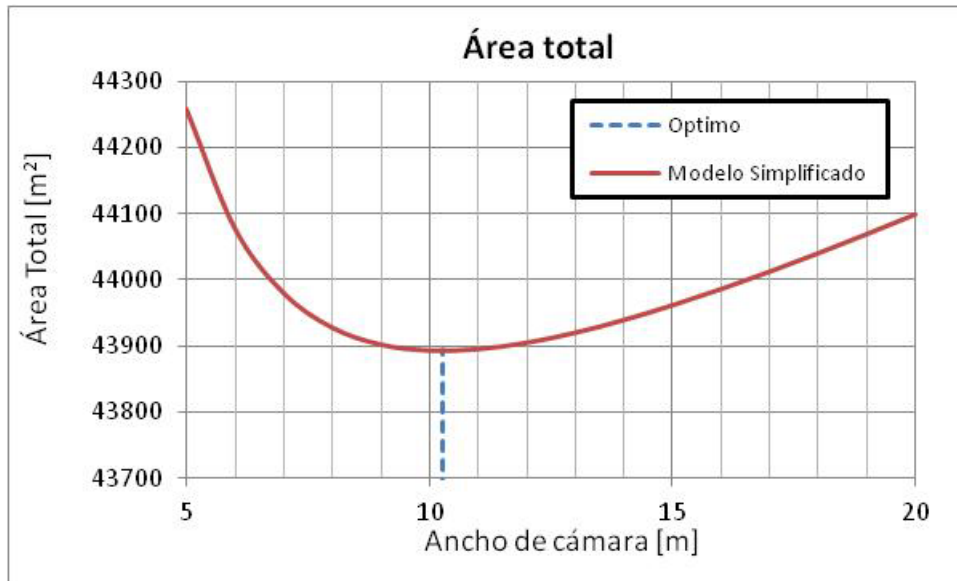


Figura III.46: Ancho óptimo= 10,265

En la siguiente tabla, se muestran las demás variables en función del modelo riguroso

	Simplificado	Riguroso	Artículo Publicado	
F	9,101E+06	9,073E+06	9,073E+06	Kg/h
$\Delta t$	12,417	12,400	12,455	°K
$\Delta t_f$	2,74	2,76	2,74	°K
$\Delta t_e$	7,673	7,644	7,712	°K
Diámetro de tubos	39,20	39,28	30,00	mm
Número de Tubos	1049	1055	1000	
Área de Tubos	3,84E+04	3,88E+04	3,80E+04	m <sup>2</sup>
Área Intercambiador	3498,19	3497,27	3494,87	m <sup>2</sup>
Área total transferencia	41925,14	42250,25	41494,87	m <sup>2</sup>

B	10,266	10,266	21,520
H	3,663	2,266	2,098
LD	30,164	37,658	21,750

Área camaras	1968,353054	3387,059898	2381,8518
Área de Tubos	3,84E+04	3,86E+04	3,80E+04
Área Intercambiador	3498,19	3497,27	3494,87
Área total	43893,49	45505,60	43876,72

Tabla III.13: Resultados del caso de estudio

Si se considera un rango de valores permitidos para la velocidad del vapor distinta de 2 m/s, como se explicó en el caso de estudio anterior, y tomando el área de la primer cámara,

multiplicado el número de etapas se obtiene: 1618,367 m<sup>2</sup>. Por lo tanto, el resultado final para el área total en forma comparativa es el siguiente:

	Simplificado	Riguroso	Artículo Publicado
Área cámaras	1968,353054	1618,36724	2381,8518
Área de Tubos	3,84E+04	3,86E+04	3,80E+04
Área Intercambiador	3498,19	3497,27	3494,87
Área total	43893,49	43736,90	43876,72

*Tabla III.14: Resultados del caso de estudio*

Nuevamente se obtienen resultados de igual orden que el modelo de optimización global registrado en la literatura tomada como caso de referencia.

#### **III.4.6. Caso de estudio 6: Comparación del modelo riguroso con otro similar de simulación implementado en Aspen® (y con datos reales de operación de plantas).**

En éste caso de estudio se comparan los resultados obtenidos en el modelo propuesto en el trabajo “Modeling, Simulation, and Optimization of large-scale commercial desalination plants”, (Khawla AbdulMohsen Al-Shayji) en el cual se ha implementado el modelo en el simulador Aspen para modelar un desalador EFME. Se utiliza el módulo para comparar los resultados con datos de la planta en funcionamiento AZ-ZOUR. Las condiciones operativas para el proceso se brindan en las siguientes tablas (III.15):

Variable de Proceso	Nombre de la corriente	Unidades	Especificación
Destilado producido	Distillate	Kg/min	1.8795x10 <sup>4</sup>
Vapor de baja presión	LP Steam	Kg/min	2.347x10 <sup>3</sup>
Reciclo de salmuera	Recycle Brine	Kg/min	2.381x10 <sup>5</sup>
Rechazo	Rejected Seawater	Kg/min	1.6048x10 <sup>5</sup>
Deshecho	Blow-down	Kg/min	2.996x10 <sup>4</sup>
Reposición	Make-up	Kg/min	4.8757x10 <sup>4</sup>
Temperatura máxima		°C	90
Entrada de agua de mar	Inlet Seawater	°C	32.22
Vapor de baja presión	LP Steam	°C	100

*Tabla III.15: Corrientes del caso de estudio*



Los parámetros de diseño de la planta de desalinización de AZ-AOUR se indican en la siguiente tabla:

Dimensión	Unidad	Calentador	Recuperador de calor	Rechazo de calor
Longitud cámara	M		3.998	3.998
Ancho cámara	M		17.66	17.66
Altura cámara	M		8.34	8.34
Ancho de orificio	M		16.92	16.92
Nº de tubos		1367	1451	1558
Longitud del tubos	M	18.99	18.41	18.45
Diámetro interior de tubos	M	0.04258	0.04258	0.03298
Espesor de tubos	Mm	1.219	1.219	1.219
Área de transferencia de calor	m <sup>2</sup>	3544	3676.47	3148

Tabla III.16: Resultados reportados de la planta tomada como referencia

En la Figura III.46 se indica el flowsheet correspondiente, el caso armado en Hysys®, según el modelo riguroso implementado en la tesis.

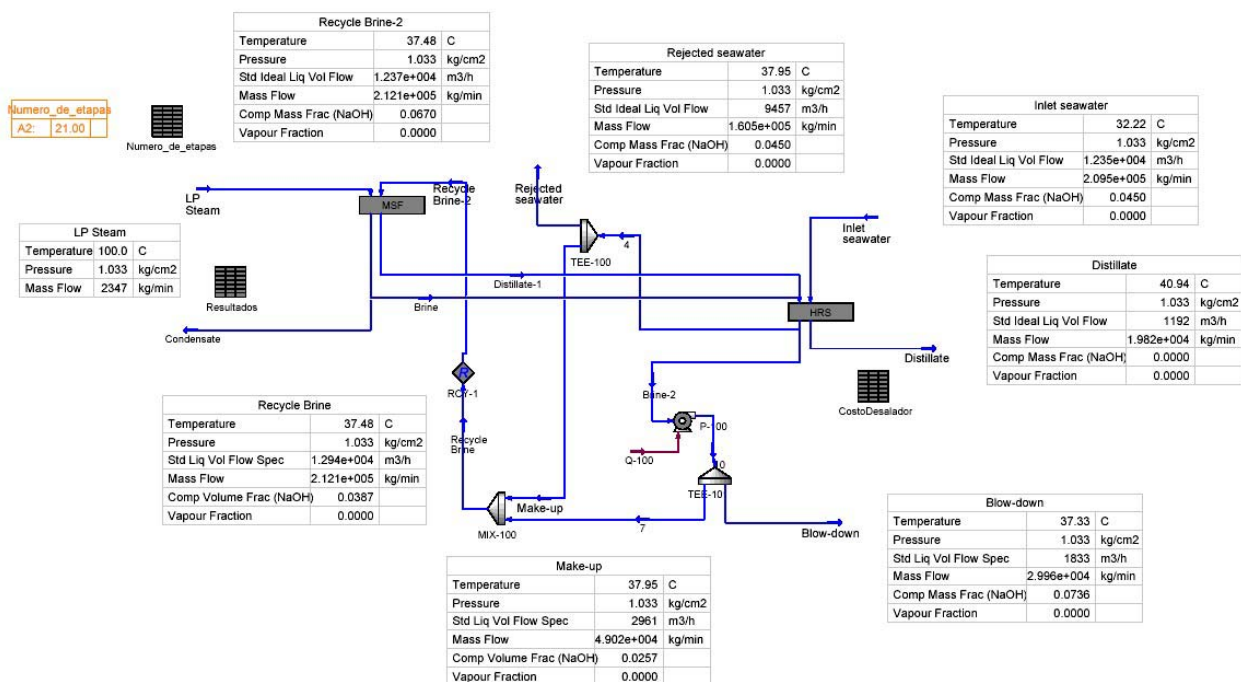


Figura III.47: Flowsheet del caso

Variable de Proceso	Nombre de la corriente	Unidades	Especificación
Destilado producido	Distillate	Kg/min	$1.9820 \times 10^4$
Vapor de baja presión	LP Steam	Kg/min	$2.3470 \times 10^3$
Reciclo de salmuera	Recycle Brine	Kg/min	$2.1208 \times 10^5$
Rechazo	Rejected Seawater	Kg/min	$1.6048 \times 10^5$
Deshecho	Blow-down	Kg/min	$2.9960 \times 10^4$
Reposición	Make-up	Kg/min	$4.9020 \times 10^4$
Temperatura máxima		°C	90
Entrada de agua de mar	Inlet Seawater	°C	32.22
Vapor de baja presión	LP Steam	°C	100

Tabla III.17: Datos de las corrientes

En la Tabla III.18 se indican los valores obtenidos y en la III.16 los valores considerados para las condiciones operativas reportadas por los citados autores. Aunque existen diferencias, están dentro del orden admisible, logrando una muy buena performance. Debe considerarse que en este trabajo se optimiza el valor del ancho de la cámara en una etapa previa, como se ha explicado, la cual no se realiza en el artículo citado, que se basa en criterios de simulación adoptando datos existentes. Luego, en la Tabla III.18 se reportan los parámetros estructurales de diseño aquí obtenidos, que deben compararse con los reportados por los autores implementada, puede observarse una buena concordancia en todos los resultados, salvo el ancho de la cámara (por lo ya explicado) y la altura de cámaras, cuya magnitud supera largamente la calculada según los criterios expuestos en esta tesis.

Se supone aquí que se han adoptado valores conservativos y criterios de diseño que no se explicitan, en el trabajo de referencia.

Dimensión	Unidad	Caso tesis (valores promedio)
Longitud cámara	m	2.59
Ancho cámara	m	20.000
Altura cámara	m	2.376
Ancho de orificio	m	20.000
Nº de tubos		1340
Longitud del tubos	m	20.000
Diámetro interior de tubos	m	0.042
Área de transferencia de calor (promedio)	m <sup>2</sup>	3672.223

Tabla III.18: Resultados del modelo de la tesis

En las figuras siguientes se presentan los perfiles de temperatura y las cargas térmicas obtenidos en ambos casos.

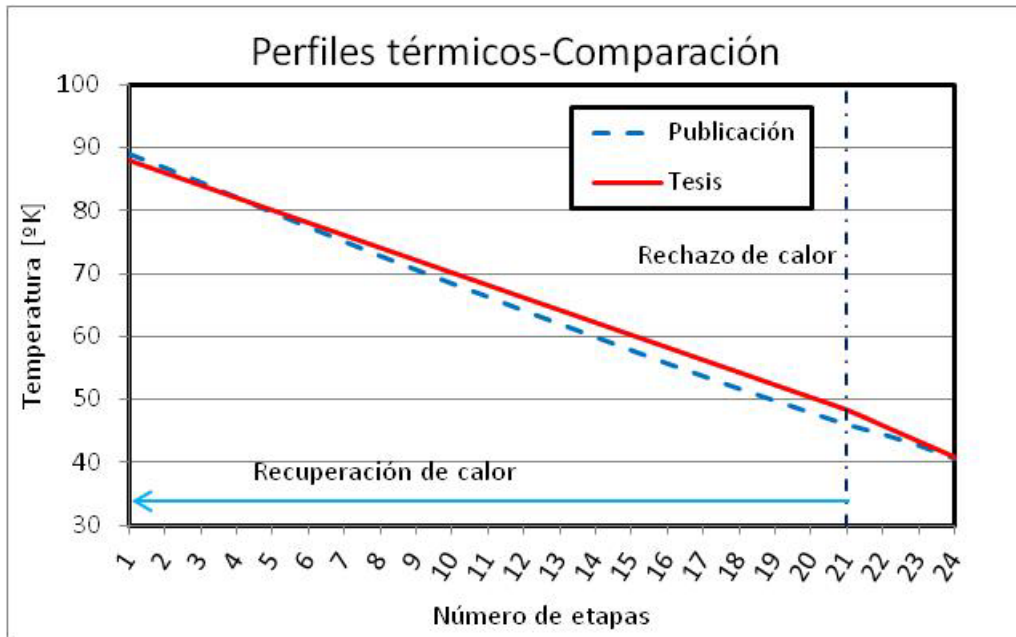


Figura III.48: Perfil de temperatura de ambas corrientes (vapor y agua de mar).

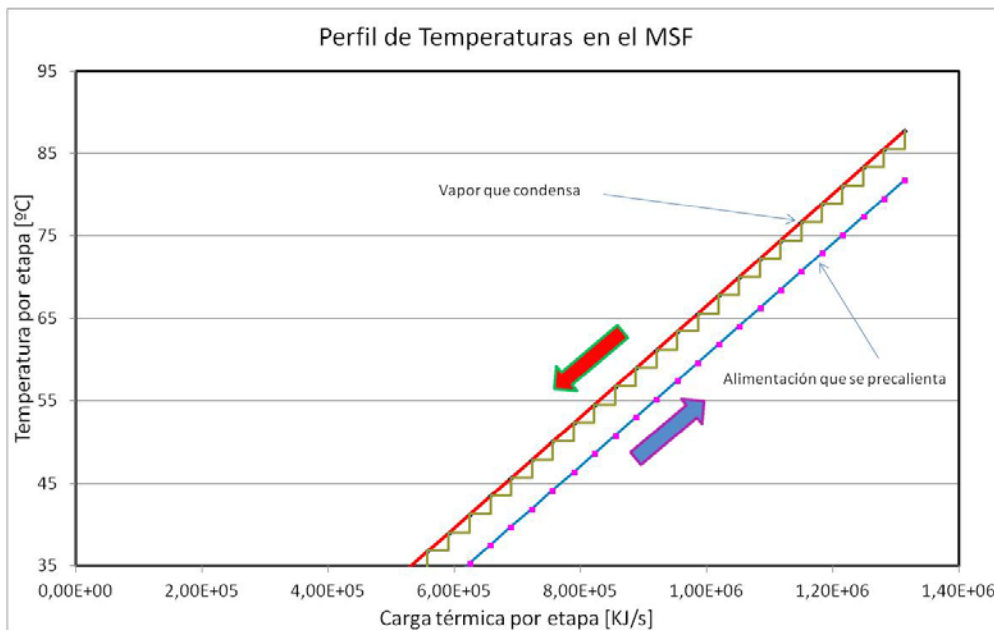


Figura III.49: perfil de temperatura

Cabe destacar que la velocidad de vapor se asumió al mínimo de su cota en el rango (2-6 m/s) y que para el cálculo del largo de la cámara se tiene en cuenta 3 resultados parciales. Por un lado el largo dado por la propia velocidad del vapor y el ancho asumido (B), que llamamos “Largo 1”. Luego se toma en cuenta el diámetro del haz de tubos (“diámetro haz”) y se lo multiplica por 1,5 (“Largo 2”). La longitud final será la mayor entre “Largo 1” y “Largo 2” a fin de asegurar velocidad de vapor admisible, y que el haz de tubos no sólo “encaje” sino que tenga cierta holgura a fin de permitir el pasaje del vapor por el ducto donde abandona la bandeja de destilado. En la figura se aprecian dichos perfiles:

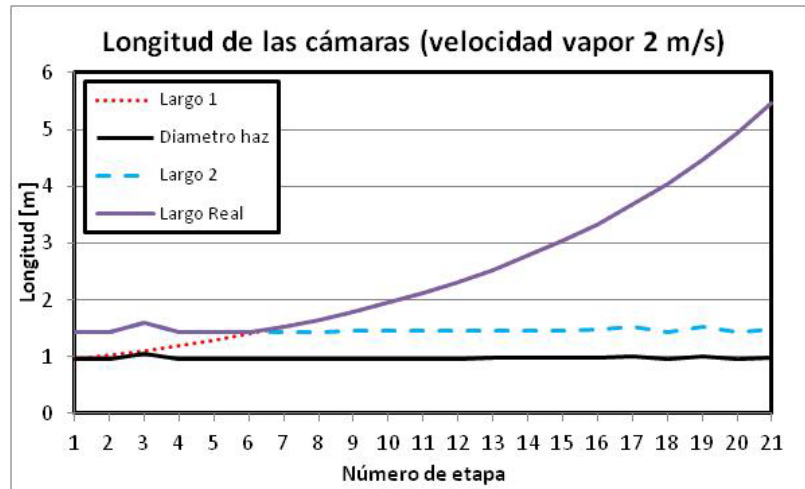


Figura III.50: Longitud de cámaras para velocidad de vapor de 2 m/s

Si se admitiera una velocidad de vapor de 6 m/s:

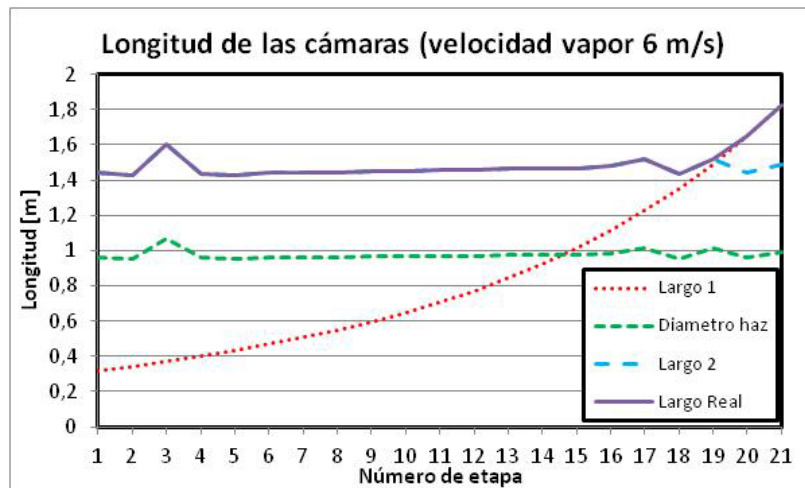


Figura III.51: Longitud de cámaras para velocidad de vapor de 6 m/s

Se concluye, que aunque se admita mayor velocidad de vapor, el limitante es el diámetro del haz de tubos.

Por último, con respecto a la diferencia en alturas calculadas, respecto del caso de referencia es importante aclarar que el demister en el trabajo de referencia cuenta con un pequeño enfriador de vapor (sin llegar a enfriarlo) mientras que dicho aditamento no ha sido tenido en cuenta en el presente trabajo. Por otro lado, en la publicación de referencia no se considera el flasheo debido a la caída de presión en las bandejas de agua destilada (sólo el de las cámaras). Lo importante a destacar aquí, independientemente de los potenciales diferencias entre modelos, es la coincidencia muy importante con las condiciones operativas y la mayoría de los parámetros de diseño de la planta real.

**III.4.7. Caso de estudio 7: Acople de una planta de desalación con una de generación de electricidad. Plantas duales.**

En este caso de estudio se complementa nuevamente el caso de estudio 2 presentado en el capítulo II. Aquí, y para los mismos parámetros de diseño utilizados en dicho caso de estudio, se muestran ahora los resultados utilizando el modelo riguroso para el desalador, presentado en este capítulo. En este caso, incorporan además del área de intercambio y del calentador externo se incorporan las cámaras:

Variable	Valor	Unidad
Ancho	12.060	M
Alto	15.910	M
Largo	76.475	M
Variable	Valor	Unidades
Potencia Turbina de gas	254.3	MW
Potencia Turbina de vapor	76.31	MW
Potencia Total	330.5	MW
Agua Potable generada	4008	m <sup>3</sup> /h
Calor generado en el condensador↔ calentador externo del desalador	2.343864x10 <sup>8</sup>	Kcal/h
Cantidad de vapor generado	4.80001x10 <sup>5</sup>	Kg/h
Agua Potable generada	21.12	Migd
Relación potencia/agua	15.66	MW/migd
Consumo de gas natural	4.998x10 <sup>4</sup>	Kg/h
Consumo de agua de mar	4.09x10 <sup>4</sup>	m <sup>3</sup> /h
Costo unitario de energía	0.04099	Us\$/KWh
Número de etapas desalador	23	
Área de Intercambio desalador	4.57231x10 <sup>5</sup>	m <sup>2</sup>
Área de intercambio calentador	8351.19	m <sup>2</sup>
Área de las cámaras	8883.19	m <sup>2</sup>
Área Total	4.74463x10 <sup>5</sup>	m <sup>2</sup>

Equipo	Costo [MM us\$]	
Turbina de Gas	87,70	
Recuperador de Calor	4,918	
Turbina de Vapor	20,25	
Desalador	Área de Intercambio	23,28
	Calentador externo	2,06
	Cámaras	8,88
	Total	34,22

Tabla III.19: Resultados de la planta dual considerando las cámaras

Si bien los resultados no difieren de los presentados en el capítulo II, aquí se disponen de los perfiles internos de caudales, temperatura, composiciones y además de todos los parámetros geométricos de diseño.

### III.4.8. Caso de estudio 8: Análisis de costos fijos y costos operativos. Estimación de la relación óptima.

Una curva que resulta útil para evaluar el comportamiento de un desalador es la variación del flujo de calor en función del área de transferencia. Para ellos se emplean valores por unidad de producción (valores específicos) designados  $Q^*$  y  $A^*$  respectivamente.

En la figura III.52 se muestra dicha curva utilizando el modelo tanto riguroso como el simplificado.

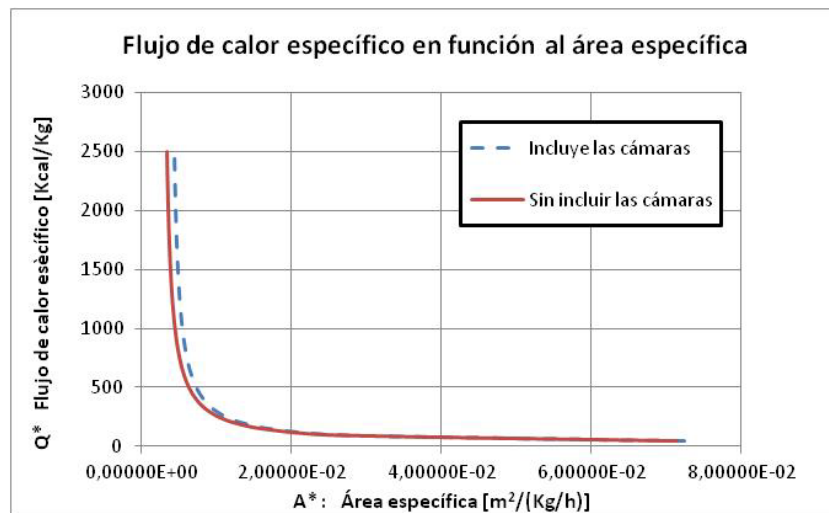


Figura III.52: Flujo de calor específico en función del área específica

Se aprecia un pequeño desplazamiento cuando se tiene en cuenta el valor del área de las cámaras.

El costo total del desalador asumiendo dominante el de la energía y el del área empleada es:

$$CT = C_A A + C_H Q \quad (55)$$

Por lo tanto:

$$dCT = C_A \times dA^* + C_H \times dQ^*$$

Para el óptimo  $dCT=0$  por lo que debe cumplirse:

$$-\frac{dQ^*}{dA^*} = \frac{C_A}{C_H} \quad (56)$$

En la figura III.52 se muestra la curva de la derivada indicada respecto del área:



Figura III.53: derivada de  $Q^*$  respecto de  $A^*$

Se verá una interesante aplicación de la gráfica III.52. Conocidos los costos  $C_A$  y  $C_H$ , puede calcularse la relación  $C_A/C_H$  en la cual al graficarse sobre la misma figura nos indica el valor del área y el calor consumido óptimos:

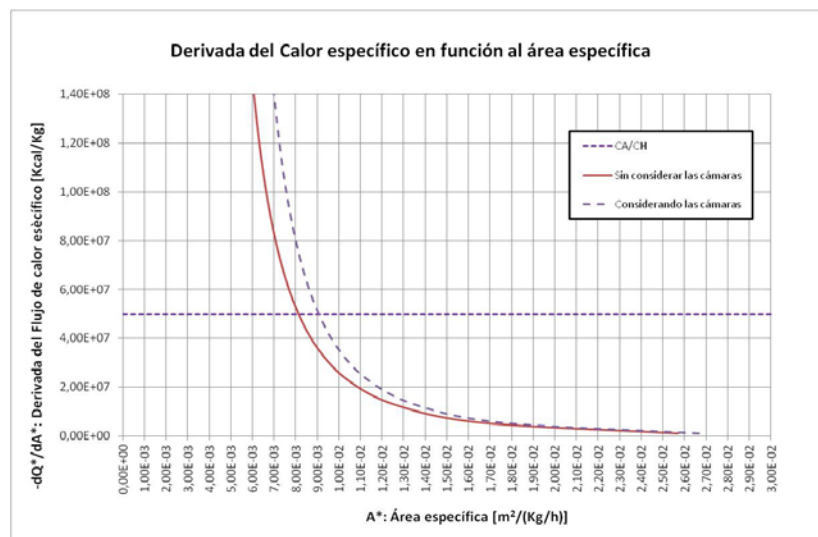


Figura III.54: gráfica  $dQ^*/dA^*$  en función del área  $A^*$

Se aprecia que la curva tiene dos asíntotas, una cuando  $dC_A/dC_H$  tiende a cero (alto costo de energía y/o bajo costo de área) en la cual  $dQ^*/dA^*$  tiende a cero. Por otro lado, en el caso contrario en el cual se aprecia que la derivada tiende a infinito (alto valor del área o valor de la

energía tendiendo a cero). En la figura III.55 se observa el valor asintótico de la derivada (a infinito) que indica el mínimo del área total específica para los parámetros considerados en el diseño.

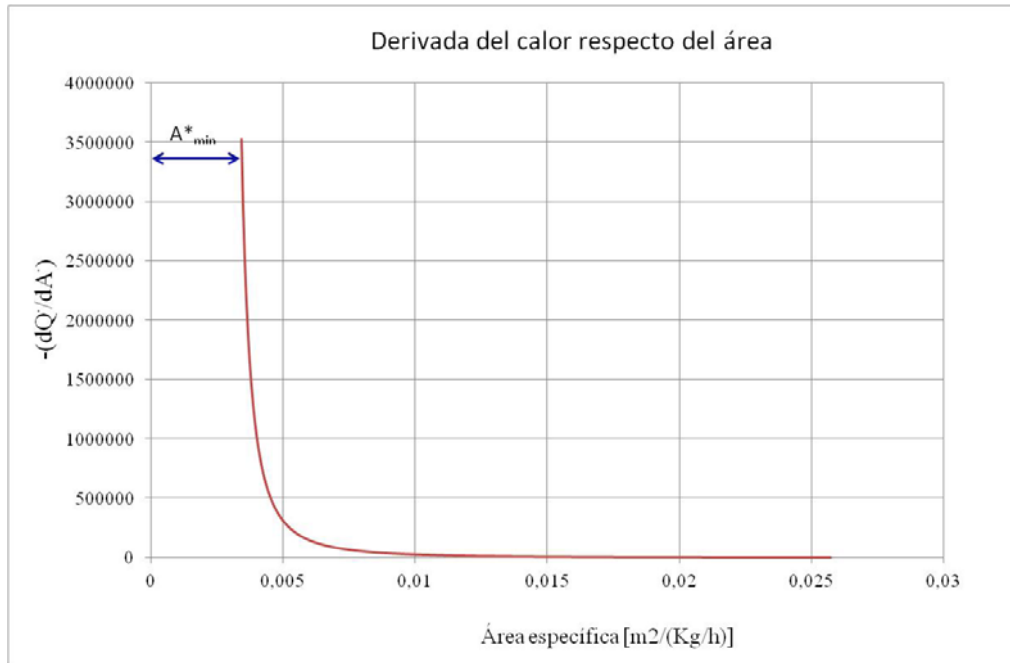


Figura III.55: gráfica  $dQ^*/dA^*$  en función del área  $A^*$

### III.5 Conclusiones

En los desaladores convencionales, los costos de energía y de área determinan el costo total.

Es por ello que ya sea con el modelo simplificado (pero que contempla la geometría de las cámaras y su área) al disponer de una muy buena aproximación en el cálculo de ambos valores, puede utilizarse según lo mostrado en el último ejemplo o caso de estudio (III.4.8) para estimar los valores óptimos del consumo energético y el área total para minimizar costo.

El uso del modelo riguroso permite además, después de todos los perfiles y parámetros geométricos de diseño, permitiendo encarar la ingeniería de detalle con mucha fidelidad.

El modelo riguroso introducido en este capítulo, y le estrategia para adoptar parámetros de diseño críticos, han demostrado su eficacia a partir de los resultados obtenidos y las comparaciones con datos de otros modelos, y de plantas reales, reportados en los múltiples casos de estudio presentados.



Se dispone entonces, de modelos suficientemente rigurosos y detallados para el diseño de desaladores funcionando en forma individual, o sistemas duales integrando plantas de plantas de cogeneración (energía eléctrica) con sistemas de desalación (agua potable).

En los próximos capítulos se abordará el problema del diseño de complejos que además integren una planta de captura de CO<sub>2</sub>.

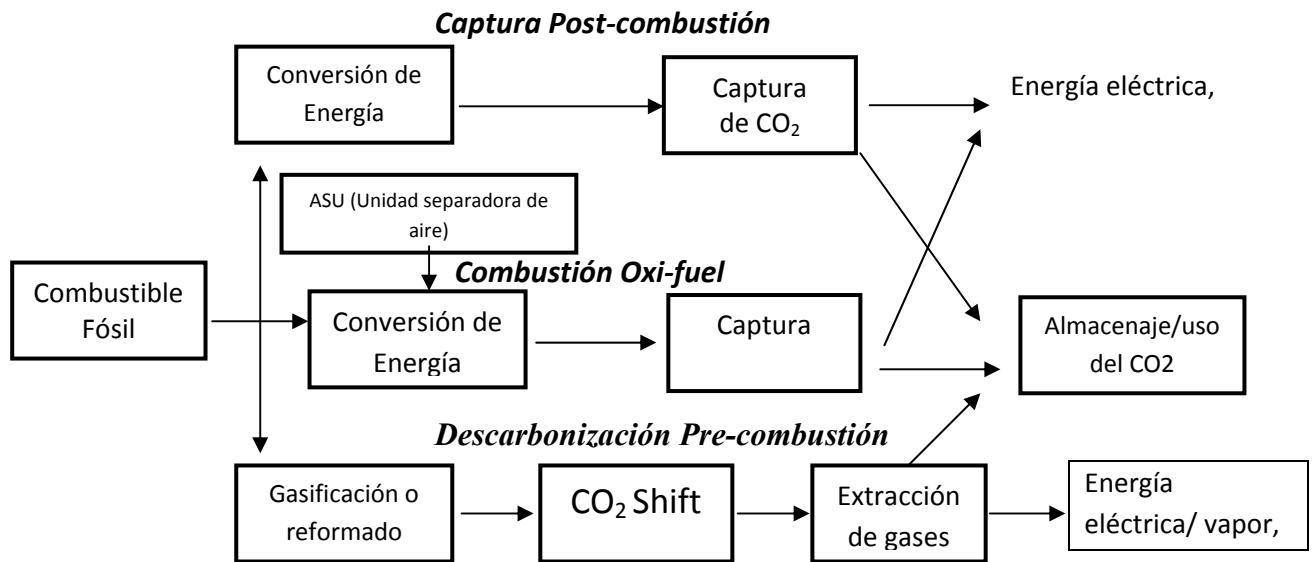
## CAPITULO IV

### **IV. PROCESOS DE CAPTURA DE CO<sub>2</sub> Y SU APLICACIÓN A INSTALACIONES DE GENERACIÓN DE ENERGÍA ELECTRICA SUSTENTABLES.**

#### **IV. 1 Introducción a los Procesos para la captura del CO<sub>2</sub> en los gases de combustión**

Existen numerosas tecnologías que pueden ser aplicadas para el tratamiento de los gases de escape generados en una planta de cogeneración de vapor y electricidad. Por ejemplo, existen tecnologías que permiten reducciones de emisiones durante las distintas etapas de combustión ó gasificación en una planta de generación de vapor y electricidad.

La Fig. IV-1 muestra en forma resumida las diferentes formas posibles de captura de CO<sub>2</sub> a partir de combustibles fosiles. En general, se pueden considerar tres tipos de capturas: 1) pre-combustion, 2) combustion con aire enriquecido (oxi-fuel) y, 3) post-combustión.



*Figura IV.1: Caminos alternativos para la recuperación del CO<sub>2</sub> en los procesos de conversión de energía fósil.*

A continuación se explica brevemente cada una de las opciones de tratamiento.

### IV. 1. 1 Pre-combustión

Una alternativa a la combustión de carbón es la gasificación de carbón lo que se conoce habitualmente como Ciclo Combinado con Gasificación Integrada (CCGI) [Fig. I-2]. Cuando el carbón entra en contacto con vapor y oxígeno, se producen reacciones termoquímicas que generan un gas combustible compuesto principalmente por monóxido de carbono e hidrógeno, el cual cuando es quemado puede ser usado para turbinas de gas. Los sistemas de generación de electricidad con ciclos combinados de gasificación integrada de carbón (CCGI) están actualmente en desarrollo y demostración. Estos sistemas permiten incrementar las eficiencias al usar el calor residual del gas para producir vapor para mover una turbina de vapor adicional a la turbina de gas. Los sistemas existentes en estado de demostración comercial buscan alcanzar eficiencias del 42% y se espera, cuando sean plenamente comerciales, que lleguen al 50%, con tecnologías y materiales actualmente en desarrollo. Los sistemas IGCC producen adicionalmente menos residuos sólidos y menos emisiones de SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub> y CO<sub>2</sub>. Hasta el 99% del azufre presente en el carbón puede ser recuperado para venderse como azufre químicamente puro.

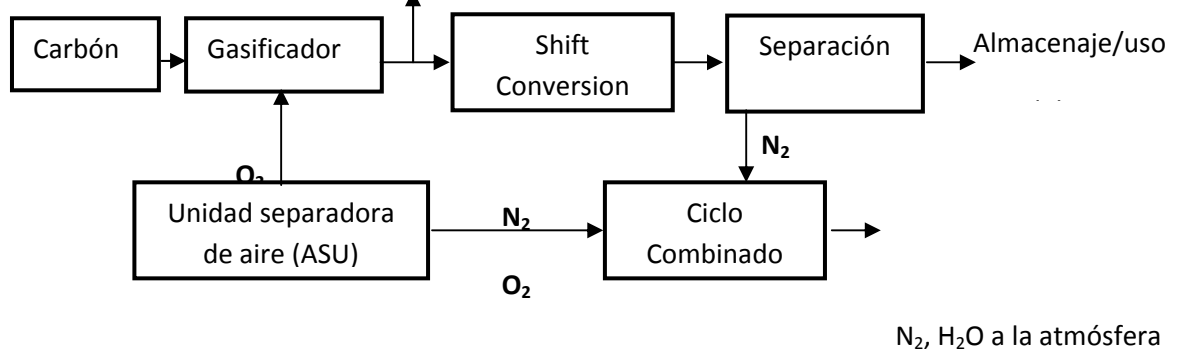
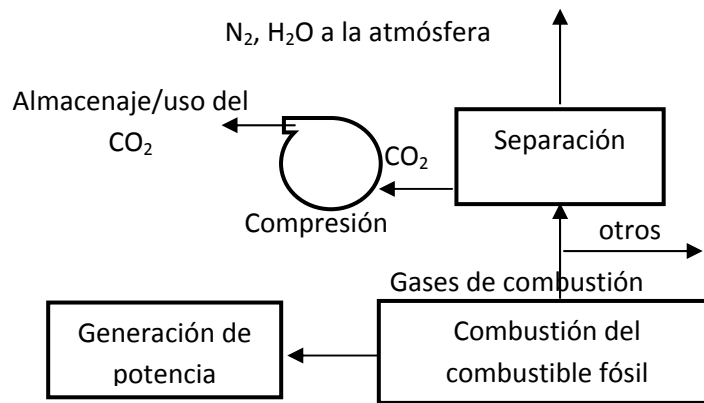


Figura IV.2: Proceso de Pre-combustión.

### IV. 1. 2 Post-combustión

La captura del CO<sub>2</sub> de las unidades que operan con combustibles derivados del petróleo se conoce como proceso de captura en la post-combustión (como por ej. calderas y calentadores industriales). En este proceso, la combustión se realiza con exceso de aire, resultando en corriente de gas que contiene baja concentración de CO<sub>2</sub> (5-20 % dependiendo del tipo de industria). El CO<sub>2</sub> procedente de la post-combustión puede ser capturado mediante diferentes técnicas, como la absorción con aminas, separación con membranas, separación criogénicas, entre otras (Fig. IV-3).



*Figura IV.3: Proceso de Post-combustión.*

### **IV. 1. 3 Combustión con aire enriquecido**

El método de captura del CO<sub>2</sub> mediante la combustión con aire enriquecido es una variante del anterior. Sin embargo, la eliminación del N<sub>2</sub> del aire en la corriente oxidante produce altas concentraciones de la corriente del gas que puede ser fácilmente concentrado mediante simples técnicas de purificación de gases, como la separación criogénica. Su aplicación en grandes industrias (calderas y turbinas en general) es aún un nuevo concepto, y requiere de sustancial integración y desarrollo.

## **IV.2 Procesos de Generación eléctrica por ciclos combinados**

En una planta convencional de generación termoeléctrica se quema normalmente un combustible fósil (carbón, gas natural, fuel-oil) para producir vapor a alta temperatura y presión, el cual se hace pasar por una turbina para generar energía eléctrica. Sin embargo, en este proceso, aún en las plantas más eficientes, se logra la conversión a electricidad de menos del 40% de la energía disponible como calor en el combustible; el resto se vierte a la atmósfera en los gases, productos de la combustión que salen por la chimenea de la caldera y en los sistemas de condensación y enfriamiento del vapor.

Aunque la cantidad de calor que se desecha a la atmósfera es elevada, la capacidad para realizar un trabajo útil dentro de las plantas generadoras de electricidad es muy baja. Sin embargo, la mayoría de los procesos industriales y aplicaciones comerciales requieren de vapor y calor a baja temperatura. Así, es posible combinar la producción de electricidad con la satisfacción de demanda de calor para otros procesos,

aprovechando la energía que de otra forma se desearía, como ocurre en las termoeléctricas convencionales.

La selección adecuada de un sistema de cogeneración de energía eléctrica y vapor depende fundamentalmente de las cargas eléctricas y térmicas que se deben satisfacer, de las necesidades operacionales de los usuarios, de la disponibilidad de equipos y de combustibles, así como de parámetros económicos.

Existe una gran variedad de equipos y tecnologías que pueden ser considerados para una aplicación específica de cogeneración. Cada tecnología tiene sus características propias, que deben ser consideradas en el contexto de los requerimientos específicos del lugar.

Una clasificación muy empleada para los sistemas de cogeneración, es la que se basa en el tipo de promotor empleado para generar la energía eléctrica:

- Cogeneración con turbina de vapor.
- Cogeneración con turbina de gas.
- Cogeneración con ciclo combinado.

El ciclo combinado se aplica en procesos donde la razón energía eléctrica/vapor es alta. La aplicación correcta de cada sistema de cogeneración dependerá principalmente de la relación de energía térmica/eléctrica, del tiempo de operación anual, de los procesos integrados y la variación de la demanda eléctrica, entre otras. Por otra parte, los sistemas de cogeneración se pueden diseñar para abastecer la totalidad de la demanda térmica, o la demanda eléctrica, o una combinación de las anteriores, con la posibilidad de exportar los excedentes a la red o a otras empresas asociadas/integradas.

A este sistema se le caracteriza por que emplea una turbina de gas y una turbina de vapor. Los gases producidos en la combustión de la turbina de gas, se emplean para producir vapor a alta presión a través de una caldera de recuperación, para posteriormente alimentar a la turbina de vapor, sea de contrapresión o extracción-condensación y producir energía eléctrica adicional, utilizando el vapor a la salida de la turbina o de las extracciones directamente en los procesos integrados, de existir (por ejemplo, un equipo desalador para la obtención de agua potable).

En general, las plantas duales más eficientes de desalación de aguas de mar, como se vió en el capítulo II utilizan cogeneración de ciclo combinado.

### **IV.3 Introducción a los Procesos alternativos de generación eléctrica**

Existe una gran variedad de plantas de generación de energía eléctrica. Por ejemplo, en industrias petroquímicas están generalmente acopladas con las necesidades de energía térmica del proceso, por lo que existe un sistema de generación de vapor que por lo general tiene tres niveles de presión. Además, existen necesidades de consumo de potencia, que entre otras alternativas, pueden satisfacerse por medio de turbinas de vapor. Esto hace que el sistema integre la generación de potencia mecánica y también eléctrica, por medio de turbinas de vapor, según las necesidades del complejo.

Considérese ahora la captura del CO<sub>2</sub> producido en el proceso. La integración de este nuevo subproceso, dentro de la estructura, agrega un grado de complejidad tal, que es de difícil abordaje.

En este capítulo se abordarán procesos de generación de energía basados en ciclos combinados, con captura simultánea de CO<sub>2</sub>, a los efectos de acotar el problema de diseño. De los ciclos combinados existentes, se enfatizará en aquellos que se utilizan acoplados a plantas de producción de agua potable, o plantas duales, ya que es el análisis de este proceso el objetivo último de la tesis.

### ***IV.4 Simulación y optimización de Plantas de captura de CO<sub>2</sub> del tipo post combustión.***

En este capítulo analizaremos el modelado y optimización del sistema de absorción de CO<sub>2</sub>. Al igual que en los capítulos anteriores se utilizará el simulador Hysys® empleando módulos rigurosos para modelar el sistema. Siguiendo los mismos lineamientos utilizados en capítulos anteriores, a continuación se indican las características del modelo de simulación, el problema de optimización y los resultados obtenidos para el subsistema de captura de CO<sub>2</sub> acoplado a procesos de cogeneración. Se supone en este caso una dada corriente representativa de gases provenientes de dicho subsistema como alimentación a la planta de captura, a los efectos de lograr conclusiones generales para este tipo de sistemas.

#### ***IV.4.1. Circuito de absorción de CO<sub>2</sub>. Descripción del Proceso***

Como fue expresado, con el fin de reducir las emisiones de gases responsables del efecto invernadero se propone la incorporación a plantas de cogeneración de un proceso de absorción del CO<sub>2</sub> contenido en los gases de escape.

Se selecciona, dentro de las alternativas existentes, la absorción por aminas; aún siendo numerosas las opciones dentro de estas alternativas, en nuestro caso se adopta la dietanolamina (DEA) por ser una de las más empleadas según la bibliografía, en particular en procesos de gran escala en la industria del gas y petroquímica en general, puesto que es una tecnología muy probada. Para este caso, Hysys® posee un paquete especial para la estimación de las propiedades fisicoquímicas y de equilibrio, que reviste gran rigurosidad.

Por otro lado, se estudiará además, una mezcla de aminas (MDEA-DEA) como alternativa para absorción. En la figura III.1. se aprecian el circuito de absorción de dióxido de carbono adoptado. El modelado matemático de los diferentes equipos que constituyen la planta se presenta en el Anexo III-A. Debe notarse que en principio la planta puede modelarse utilizando únicamente módulos disponibles en la biblioteca del simulador.

La entrada de gases se enfría para acondicionarla a la operación de la torre de contacto en donde se trata en contracorriente con una solución de etanolaminas. A medida que los gases suben, el gas carbónico abandona la corriente gaseosa enriqueciendo la solución que desciende por la misma.

Los gases ya libres de dióxido de carbono se eliminan a la atmósfera a través de una chimenea.

La solución de etanolamina enriquecida de CO<sub>2</sub> se precalienta y envía a una torre regeneradora que tiene como objeto separar los gases carbónicos por la parte superior y regenerar la amina libre de CO<sub>2</sub> para ser recirculada al regenerador previo enfriamiento.

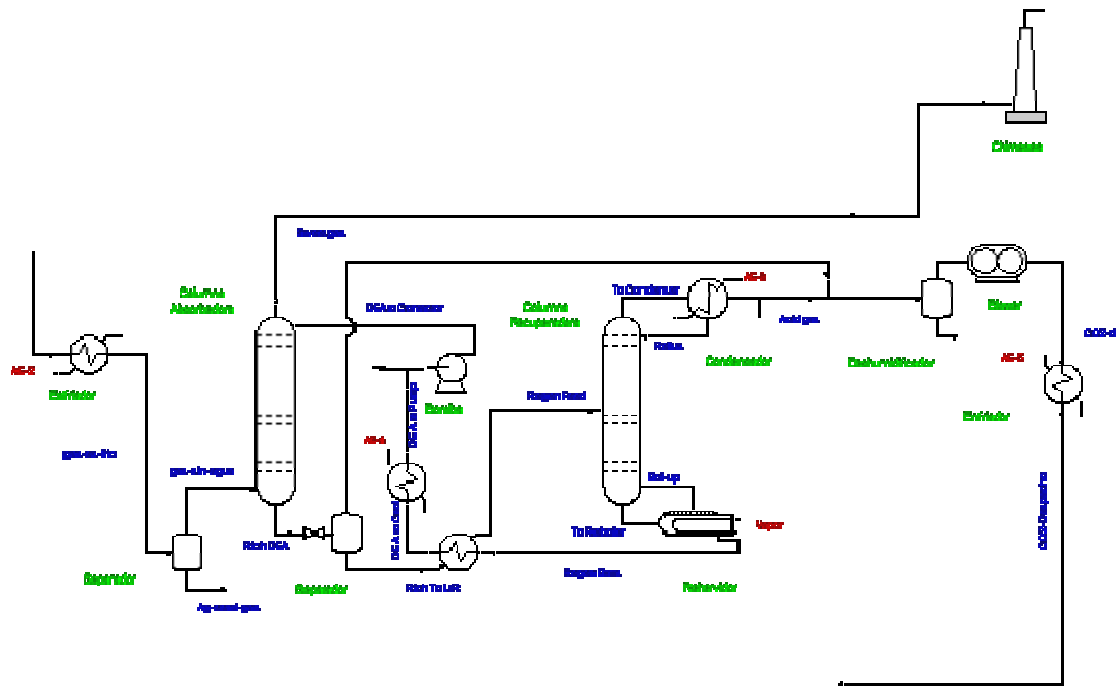


Figura IV.4: Flowsheet de la planta de absorción

Como la torre regeneradora opera a menor presión que la de contacto, a la salida de esta se produce una descompresión que libera algo del dióxido carbono disuelto. Esta corriente se suma a la del tope de la columna regeneradora y se envía a su disposición final, que puede ser comercialización o deposición geológica o submarina. En nuestro caso, no consideraremos el costo de tales operaciones. Se especifica el proceso de tal forma de entregar una corriente de CO<sub>2</sub> a las condiciones adecuadas para luego ser transportado al lugar de disposición.

En general, en la bibliografía existen diversas propuestas con respecto a este punto. Lo importante aquí es definir una condición tal que permita la comparación con otras propuestas publicadas. Un punto importante es que no se consideran los costos de disposición final en la mayoría de los trabajos publicados. Es por ello que se adopta aquí el mismo criterio, por razones de comparación de los resultados a obtener.

Analizando el proceso completo de la planta de generación de potencia y captura de CO<sub>2</sub> (figura IV-5), al utilizar una estrategia modular secuencial, dado que existen dos ciclos se necesitan dos corrientes de corte. Estos se generan ya que el condensado del vapor que sale de la turbina de vapor debe devolverse a la caldera debido a que es agua tratada. El otro reciclo es el de amina (ciclo de regeneración).



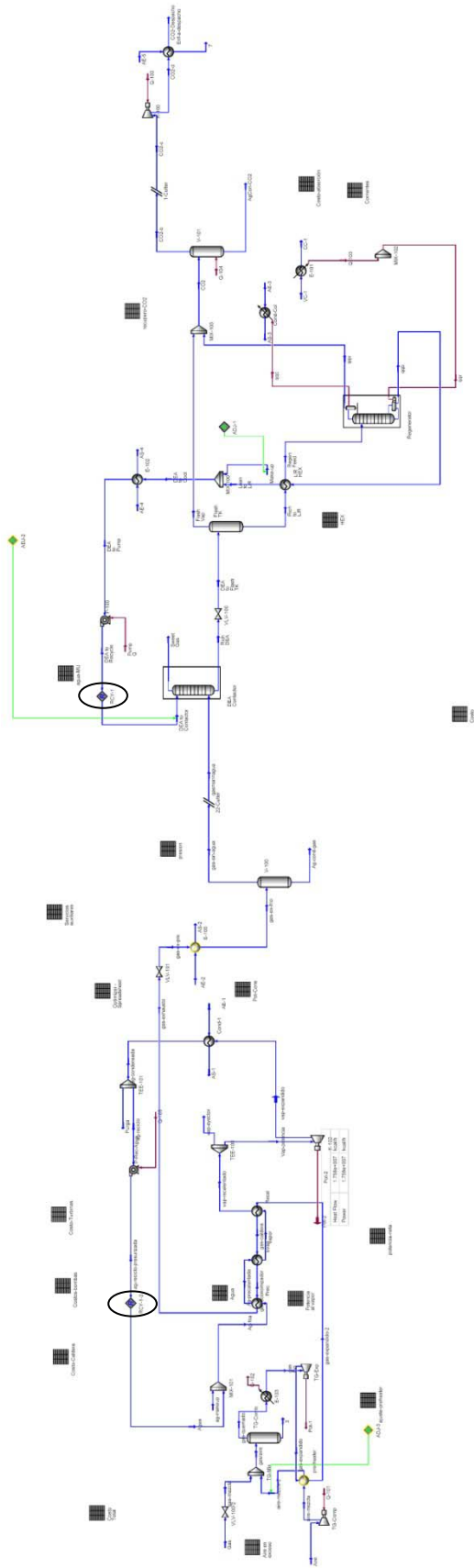


Figura IV.5: Diagrama de flujo indicando los ciclos.

Debido a la facilidad para la inicialización de los valores de tales corrientes, se adoptan como corriente de corte (iteradora).

#### ***VI.4.2 Modelos de costos***

Los costos correspondientes a la planta de absorción se calculan según las ecuaciones típicas publicadas en la bibliografía basadas en el Método de Guthrie y adaptadas por Turton [16].

Los modelos de costos de los equipos ya analizados no se describen ya que se han expuesto en el capítulo 2. Aquí se detalla el cálculo de las columnas: absorbedora y regeneradora.

El costo de las columnas se calcula según el siguiente esquema, que resulta riguroso, en comparación con la mayoría de trabajos reportados en la bibliografía. Para ello se calculan las partes que conforman ambas columnas. Se incluye también el costo que representa el inventario o carga inicial de dietanolamina para ambas columnas, dadas las magnitudes involucradas.

Debido a que la columna podría exceder el tamaño máximo (correlacionado en las ecuaciones de costo), se utiliza el escalado en función de la potencia 0,6. Esto es, sabiendo el costo para una columna de un área determinada, se extrapolará a un área mayor en función de la siguiente expresión:

$$C_{A2} = C_{A1} * \left( \frac{A_2}{A_1} \right)^{0,6}$$

Donde:

A1: área de columna (D= 4 m)

CA1: costo conocido de la columna de área A1

A2: área de la columna cuyo costo CA2 se desea calcular (se utiliza la utilidad tray sizing del Hysys®)

CA2: costo de la columna de área A2

Como mencionamos en el costo de la columna se incluye la carga inicial de etanolamina contemplando el hold-up de las columnas y equipos asociados. Los recambios posteriores pueden asimilarse como un costo operativo distribuido uniformemente a lo largo de la vida útil del solvente. Debe tenerse en cuenta que dada la magnitud de las columnas, el costo puede ser mayor si se consideran aspectos de basamento, fundaciones, estructura de sostén, entre otros aspectos que no son tenidos estrictamente en cuenta en las ecuaciones consideradas.

Siendo  $N_{ET}$  el número de etapas,  $AU$  el área útil de cada etapa,  $DET$  es el diámetro de la columna, 5 cm la altura del rebosadero, 50 cm la altura del downcommer (asumida igual a la separación entre etapas), y asumiendo la postura conservadora que todo el downcommer está lleno de líquido tenemos:

$$V_{Etapas} = \frac{\pi \times D_{ET}^2}{4} \times 0.05 \times N_{ET}$$

$$V_{DC} = \left( \frac{\pi \times D_{ET}^2}{4} - A_{IJ} \right) \times 0.5 \times (N_{ET} - 1)$$

$$V_{total} = V_{Etapas} + V_{DV}$$

Siendo  $\rho_{DEA}$  la densidad másica de la DEA y 30 % su concentración p/p, el costo correspondiente al solvente es:

$$C_{DEA} [u\$s] = V_{total} \times \rho_{DEA} \times 0.3 \times 1.300$$

En la ecuación anterior se asume 1.300 u\$s/Kg el costo de la etanolamina.

Por lo que el costo total de la columna es:

$$C_{A2} = C_{DEA} + C_{A1} * \left( \frac{A_2}{A_1} \right)^{0,6}$$

El mismo concepto se aplica a ambas columnas. El condensador y el rehervidor se calculan de acuerdo a equipos de intercambio convencionales: de tubo y coraza para el primero y tipo kettle para el rehervidor.

A continuación se presentarán tres casos de estudio para la optimización de diversas alternativas de procesos de captura de CO<sub>2</sub>.

1) empleando solamente DEA en solución acuosa, 2) mezcla variable de DEA y MDEA, y 3) con solución acuosa de MEA (y su comparación con resultados obtenidos con un modelo desarrollado en (GAMS) en el grupo de trabajo en el cual se desarrolla la presente tesis [Patricia Mores, et al (2012)].

#### IV.4.3 Caso de estudio 1: Captura mediante solución acuosa de DEA

A continuación se muestran algunos resultados obtenidos mediante simulación con Hysys ® para diferentes puntos de operación del sistema. Por ejemplo se adoptan valores típicos de los gases de escape correspondientes a una planta de generación para producciones de 45, 85, 335 y 495 MW como entrada a la planta de captura de CO<sub>2</sub>.

Flujo gas ex [Kg/h]	DEA [Kg/h]	fracción masica DEA	Presión [atm]	Carga rehervidor [MW]	Flujo de CO <sub>2</sub> [Kh/h]	Blower [MW]
4.00 10 <sup>5</sup>	1.377 10 <sup>7</sup>	0.301507	1.2036	224.651	18335.675	6.442
9.00 10 <sup>5</sup>	1.808 10 <sup>7</sup>	0.218971	5.9802	318.068	39548.097	13.644
4.00 10 <sup>6</sup>	2.029 10 <sup>8</sup>	0.206940	1.7990	3668.401	178279.850	64.975
6.00 10 <sup>6</sup>	3.496 10 <sup>8</sup>	0.211150	4.1250	6291.917	268786.109	99.037

*Tabla IV-1: resultados para las 4 alternativas de producción*

Una vez lograda la convergencia con el modelo de simulación y logrando resultados satisfactorios en distintos puntos operativos que cubren un amplio rango de operación, se procede a la optimización del proceso de captura de CO<sub>2</sub> en cada condición indicada en la tabla IV.1. Debe notarse que en este caso el modelo es fuertemente no lineal, en particular debido a las ecuaciones que modelan las dos columnas de destilación y las estimaciones de las propiedades fisicoquímicas correspondientes, al igual que los modelos de costos asociados.

En lo que sigue se estudiarán distintos casos paramétricos haciendo uso de la herramienta Hysys®, para luego mostrar gráficamente los valores óptimos parametrizados según las variables de operación correspondientes.

El proceso de captura del dióxido de carbono contiene un conjunto de variables susceptibles de ser optimizadas. En este caso se consideran solo dos: la presión de

operación de la columna absorbedora y el caudal de DEA (dietanolamina) al 30 % P/P, por ser las más importantes con respecto al resto.

Para los casos de estudio siguientes, se adopta una corriente cuya composición es representativa de las condiciones de operación de los gases provenientes de una planta de generación de potencia, según la siguiente tabla:

Componente	Fracción molar
O <sub>2</sub>	0.13961
CO	0.00000
CO <sub>2</sub>	0.03185
H <sub>2</sub>	0.00000
H <sub>2</sub> O	0.06370
CH <sub>4</sub>	0.00000
N <sub>2</sub>	0.76484

Tabla IV-2: Composición de los gases de entrada

A fin de cubrir los grados de libertad de la columna recuperadora se fijó la temperatura de tope y la carga de CO<sub>2</sub> en la corriente de fondo. La carga es la fracción de CO<sub>2</sub> que aún permanece en la corriente de DEA que se recircula a la torre absorbedora.

La siguiente tabla resume las restricciones impuestas al proceso e incorporadas al modelo de optimización. Vale aclarar que algunas son variables independientes (pudiéndose fijar por el usuario en las especificaciones de ciertos equipos) mientras que otras son dependientes de la simulación y, por lo tanto, se dejan a cargo del optimizador.

Restricción	Objeto	Operador	Valor	Unidad
$T_{DEACool} - T_{RL/R}$	Intercambiador Recuperador	$\geq$	30	° C
$T_{Re genB} - T_{Re genF}$	Intercambiador Recuperador	$\geq$	30	° C

Restricción	Objeto	Operador	Valor	Unidad
$\frac{(F_{CO_2}^{CO_2} + F_{CO_2}^{Agua})}{F_{CO_2}^{gas-ex-pre}} * 100$		$\geq$	valor	%
$\frac{(F_{CO_2}^{CO_2} + F_{CO_2}^{Agua})}{F_{CO_2}^{gas-ex-pre}} * 100$		$\leq$	Valor+0.5	%

Tabla IV-3: valores para las restricciones

En ello se expresa que, la diferencia de temperatura de entradas y salidas del intercambiador recuperador son inferiores o iguales a los 30 °C, y que el grado de recuperación de CO<sub>2</sub> se especifica o fija con una banda de tolerancia del 0.5 %, a fin de evitar restricciones de igualdad que el método BOX no admite.

En la figura IV.6 se presenta un conjunto de soluciones óptimas para una condición de operación que implique una recuperación del 90% del CO<sub>2</sub> que ingresa desde la planta de generación de potencia.

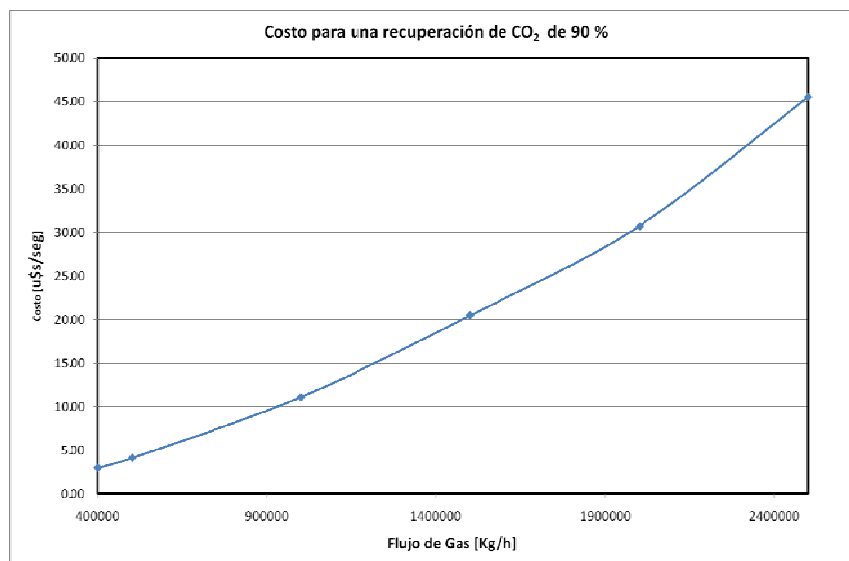


Figura IV.6: Curva de costo total en función del flujo de gases de combustión

Los problemas de convergencia surgen principalmente en la columna absorbidora a fin de que pueda cubrir una amplia gama de flujos a tratar. Para la especificación de la columna se fijaron los valores de temperatura del condensador en 323,1 °K y una carga de CO<sub>2</sub> en el fondo de 0,200 (valor típico adoptado de bibliografía y verificado mediante simulación).

Por otra parte el agua de enfriamiento del condensador tiene fijadas tanto su temperatura de entrada (25 °C) como la de salida (40 °C en donde es posible), en cambio la del vapor que calefacciona al rehervidor se ajusta para que siempre sea 15 °C más caliente que el líquido que calienta.

Como se aprecia en la figura, el costo es prácticamente lineal con el caudal de gases en el rango analizado. Esto es similar al comportamiento de la planta de generación de potencia. Esto es, pese a considerar costos con factores de escala en todos los equipos importantes del proceso, el costo por cada tonelada recuperada es independiente de la escala de la planta, cuando se fija un porcentaje de recuperación como parámetro de diseño. Esto implica que puede hablarse de un costo de recuperación por tonelada, independientemente del tamaño, al igual que un costo de generación, en las mismas condiciones, para el rango de operación aquí analizado.

La figura IV.7 representa los casos optimizados correspondientes a diversos porcentajes de recuperación de dióxido de carbono (fijando un caudal de gases que entra a la planta) que va desde el 50 al 99 %. Vemos como el mismo se “dispara” a partir del 95 %.

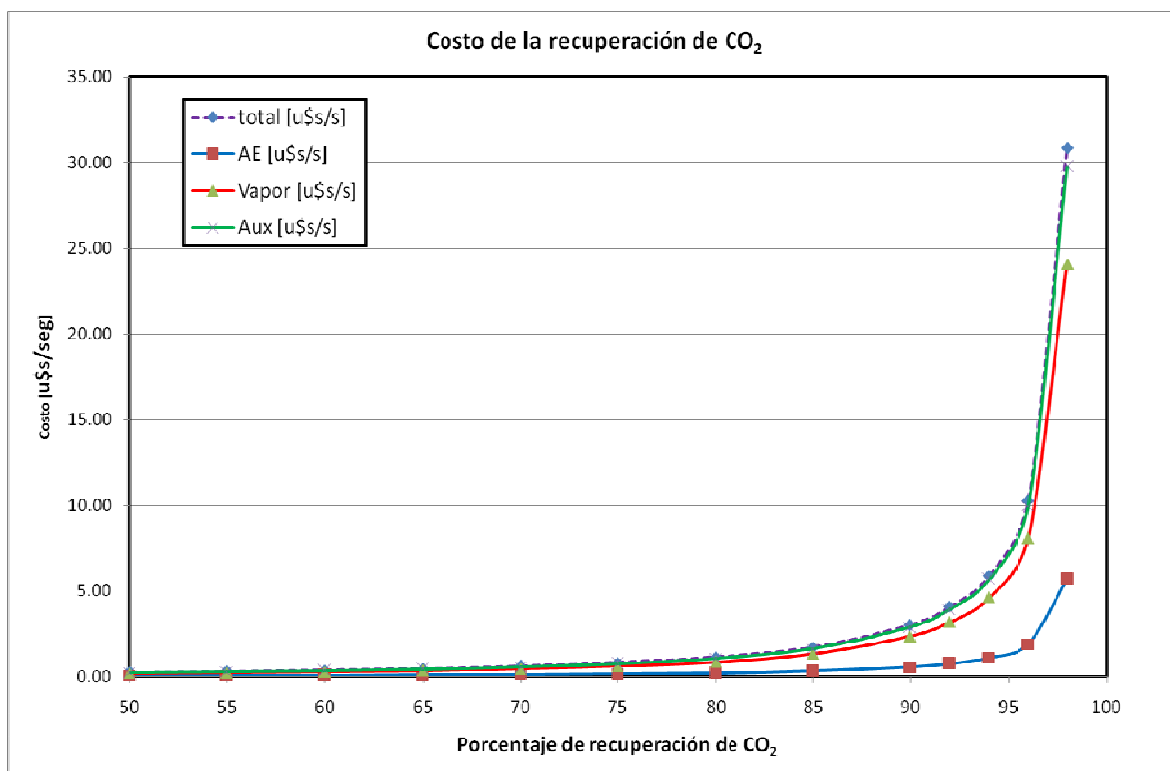


Figura IV.7: Curva de costo total en función del porcentaje de CO<sub>2</sub> recuperado

En otras palabras, si se pretenden recuperaciones por encima del 95%, el costo de la planta, y por ende, por tonelada recuperada, se dispara exponencialmente. Notar que aquí se considera una composición fija de la corriente de gases de salida de la planta de generación termoeléctrica. En este caso, corresponde a un punto de operación con un exceso holgado de aire para la combustión en la turbina de gas. Otras condiciones de operación, por ejemplo un exceso de oxígeno muy ajustado a las condiciones estequiométricas, produce una corriente de gas más concentrada en dióxido de carbono, lo cual beneficia sustancialmente los costos de captura.

#### II.4.4 Caso de estudio 2: Captura mediante solución acuosa de DEA/MDEA

Si bien es frecuente el uso de soluciones acuosas de DEA o MEA para la captura del CO<sub>2</sub>, se exploró la posibilidad de minimización de costos a través de otras soluciones alternativas, en especial la de DEA y MDEA. Puesto que dicha mezcla está disponible en el paquete de aminas de Hysys® se exploró la relación entre ambas que minimiza los costos a través de múltiples corridas paramétricas. Los resultados se aprecian en las figuras siguientes.

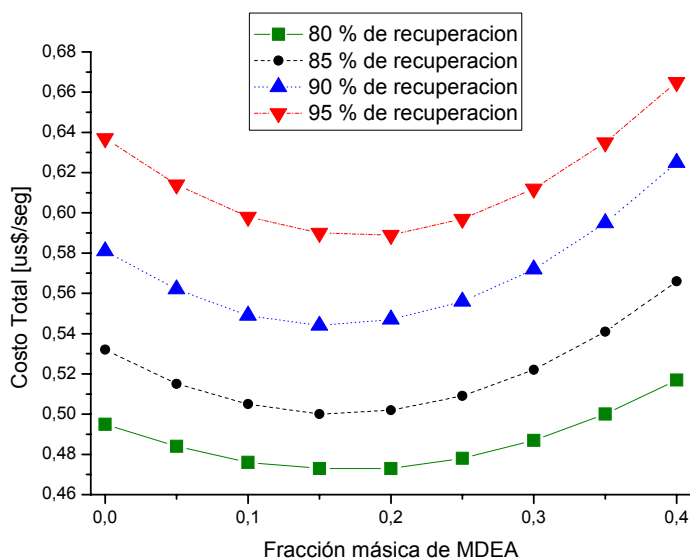


Figura IV.8: costo total

En la figura IV.8 se muestran los resultados para distintos porcentajes de recuperación en función de la concentración de MDEA-DEA para un valor total de 40



% . En particular, interesa la mezcla de 20 % de MDEA (por lo tanto 20 % DEA) con la cual se logra minimizar el costo total.

Como se sabe, otra forma de graficar el costo es indicar el costo por cantidad de gas tratado, o sea el costo específico. Se obtiene una gráfica que evidencia la misma tendencia:

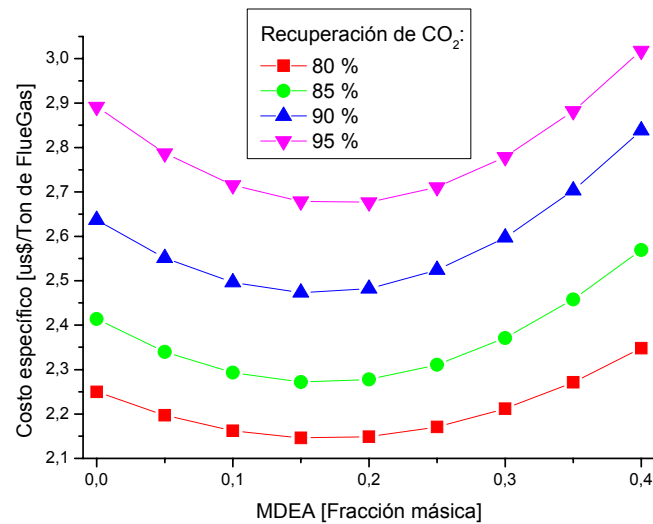


Figura IV.9: Costo específico

Si graficamos en función del  $\text{CO}_2$  recuperado se obtiene el costo específico lo que da un valor comparativo muy útil. Esto se aprecia en la figura:

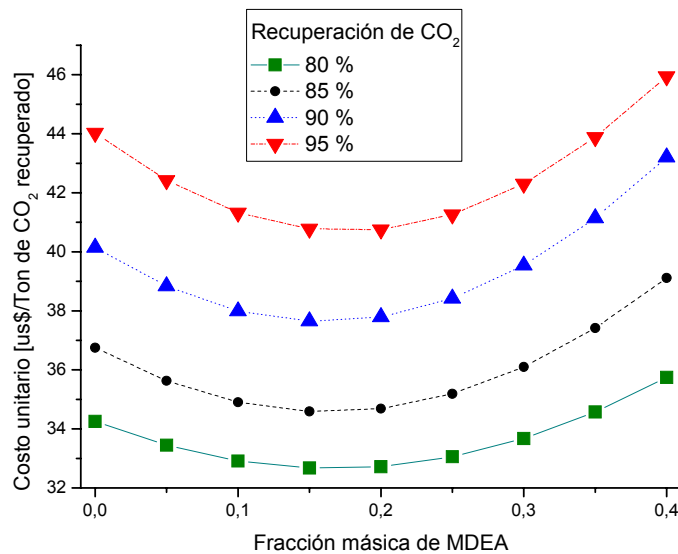


Figura IV.10: costo unitario de recuperación de  $\text{CO}_2$ .

Las curvas anteriores se lograron para una concentración de CO<sub>2</sub> en el fluegas de 4 % molar. En la figura siguiente se muestra cuando la concentración de gas se enriquece en CO<sub>2</sub>.

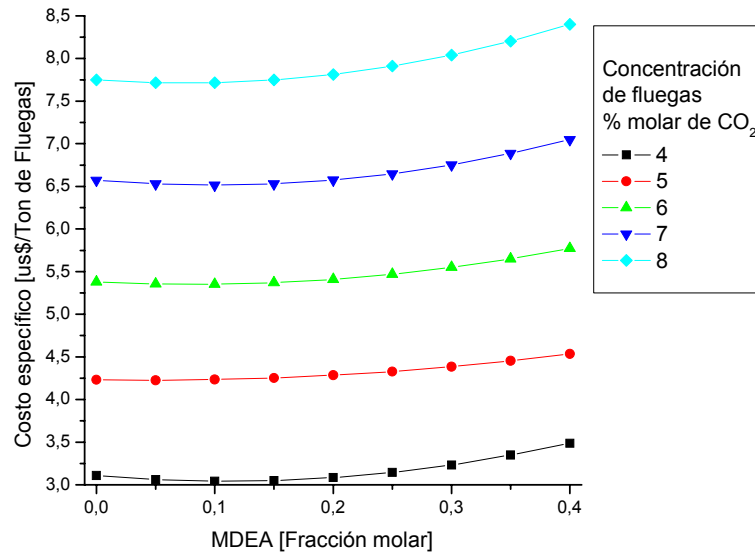


Figura IV.11: costo específico

Uno de los principales términos en la ecuación de costo lo da el consumo en el reboiler. La tendencia anterior se aprecia también en las curvas de carga por tonelada de CO<sub>2</sub> recuperado.

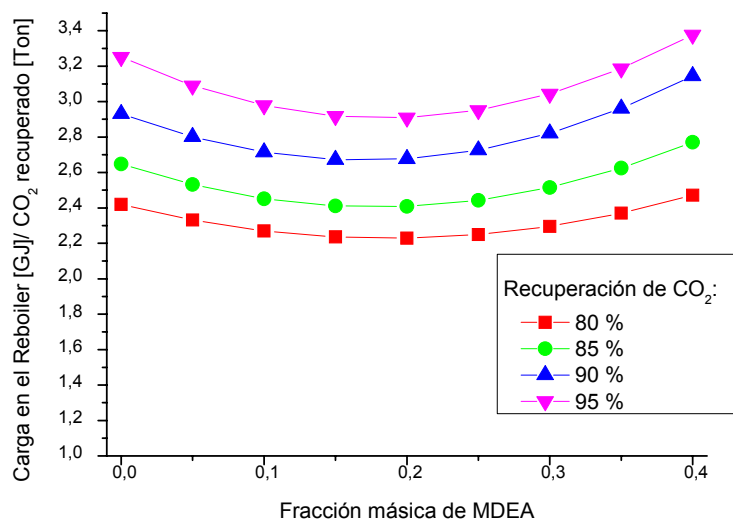


Figura IV.12: carga específica en el reboiler

Una mayor o menor capacidad en la captura de CO<sub>2</sub> para diferentes concentraciones del solvente (a demás condiciones iguales) se ve reflejada en la cantidad del mismo que es necesario emplear como se aprecia en la figura:

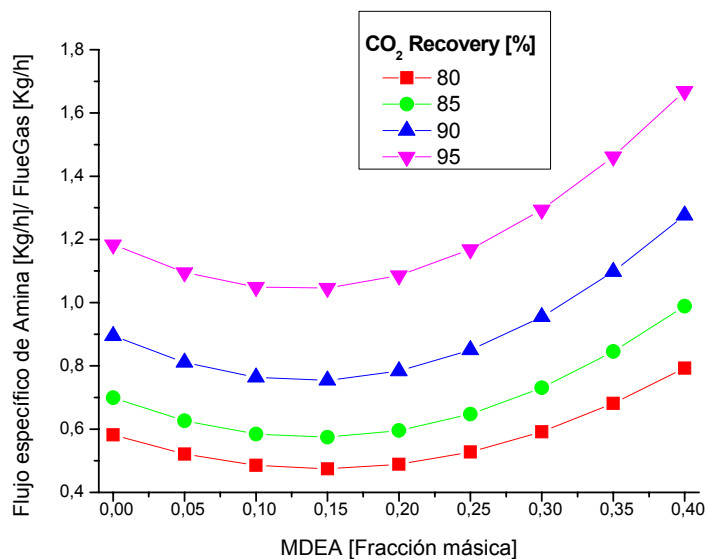


Figura IV.13: flujo específico de amina

Y puesto que la cantidad de gas a tratar es el mismo, la relación L/G también sigue la misma tendencia según figura:

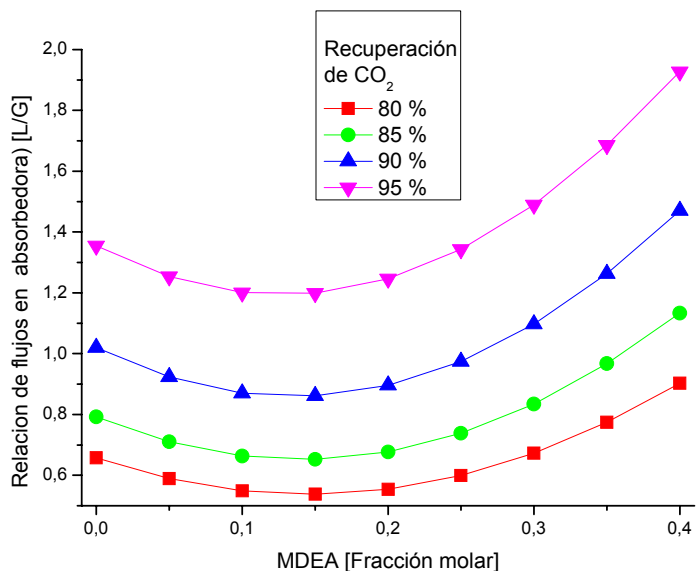


Figura IV.14: relación de flujo de amina/flue gas en absorbidora

El enriquecimiento o empobrecimiento de  $\text{CO}_2$  en la solución se define como carga de  $\text{CO}_2$  ( $\alpha$ ). La dependencia de la misma respecto a la concentración de MDEA se visualiza en la figura:

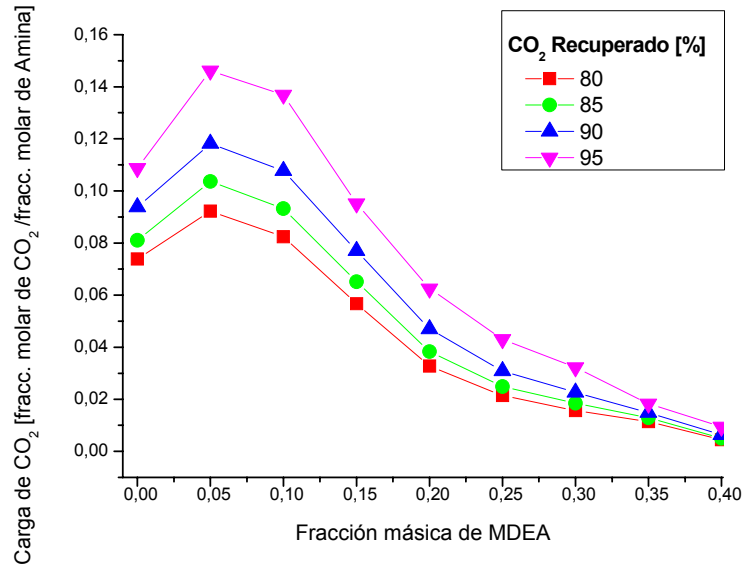


Figura IV.15: carga de  $\text{CO}_2$

Las mismas curvas pueden graficarse en función del porcentaje de  $\text{CO}_2$  recuperado para distintas concentraciones de aminas pero en general se obtienen curvas paralelas, crecientes en % de  $\text{CO}_2$  siendo la relación óptima de MDEA-DEA la inferior de todas.

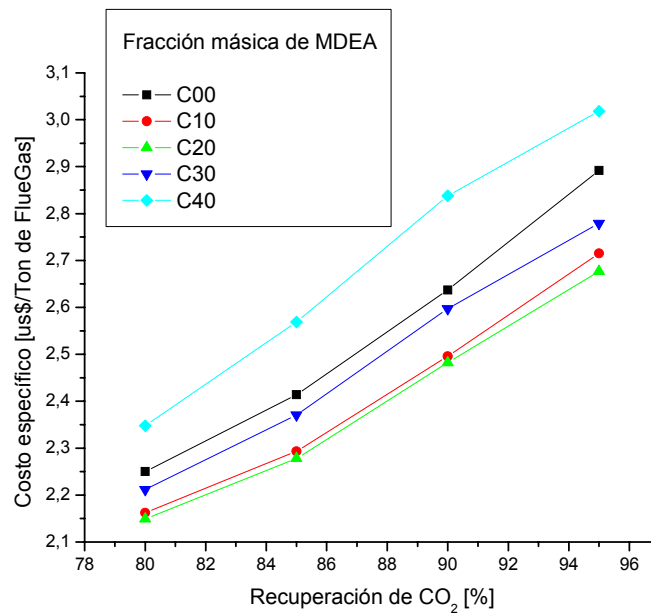


Figura IV.16: costo específico en función del porcentaje de  $\text{CO}_2$  recuperado

Puede concluirse que el modelo implementado en Hysys®, y el de costos asociados es robusto y permite la optimización de las principales variables operativas, al igual que distintos tipos de solventes (aminas), incluyendo mezclas binarias de las mismas y su optimización. Para este último caso, y a modo de ejemplo, se muestran la variación de las principales variables operativas en el óptimo, según distintos objetivos de diseño.

#### **IV.4.5 Caso de estudio 3: Captura mediante solución acuosa de MEA. Comparación con un modelo basado en ecuaciones.**

El uso de soluciones de MEA (monoetanolamina) es muy extendida y sus resultados publicados por varios autores. En el presente caso se comparan los resultados obtenidos mediante el Hysys ® con aquellos obtenidos por un optimizador (GAMS) para condiciones operativas semejantes. El modelo implementado es el mismo indicado en la figura IV.5, según los parámetros de diseño indicados a continuación.

El caso de estudio corresponde a una planta de captura de CO<sub>2</sub> originado en un proceso de combustión derivado de un ciclo combinado (postcombustión) del que se desea extraer el 95% del dióxido de carbono. El flujo de gas ácido es de  $6.2 \cdot 10^5$  [Kg/h].

A continuación se comparan los resultados obtenidos mediante el modelo implementado en Hysys® y el módulo de costos asociado al mismo, con los obtenidos utilizando el modelo descrito, implementado en GAMS. Adoptando los mismos parámetros de diseño y correlaciones fisicoquímicas al igual que las hipótesis en cada equipo y/o condición de diseño, en la medida de lo posible. En las siguientes tablas se comparan los resultados obtenidos para las columnas y principales equipos:

Costos fijos equipo por equipo:

##### 1) Columna absorbidora

Absorbidora		gams®	hysys®
D	M	12.1920	12.1920
H	M	10.5875	10.5875
ΔP	Kpa/m	NA	0.3825
inundación	%	NA	66.3197
<i>C unidad</i>	<i>MM\$</i>	<i>1.9641</i>	<i>1.9202</i>

*Tabla IV-4: Parámetros principales*

etapa	gams®	hysys®	gams®	hysys®	gams®	hysys®	gams®	hysys®
	flujo vapor		flujo líquido		temperatura		alfa	
	gmol/s		gmol/s		°K		°K	
0	-	-	40000.00	40000.00	308.15	308.15	0.14530	0.18576
1	7150.56	7224.25	40002.80	40024.64	308.21	308.62	0.14548	0.1879
2	7153.37	7248.89	40007.37	40053.94	308.30	309.19	0.14576	0.1908
3	7157.93	7278.19	40015.07	40089.60	308.44	309.87	0.14621	0.1942
4	7165.63	7313.84	40028.68	40132.99	308.70	310.69	0.14691	0.1982
5	7179.24	7357.24	40054.13	40185.03	309.16	311.66	0.14806	0.2029
6	7204.69	7409.28	40104.07	40244.64	310.04	312.77	0.14997	0.2084
7	7254.63	7468.89	40202.58	40305.39	311.71	313.93	0.15334	0.2150
8	7353.14	7529.64	40379.28	40349.95	314.67	314.89	0.15993	0.2227
9	7529.84	7574.19	40611.43	40340.01	318.89	315.09	0.17462	0.2317
10	7761.99	7564.26	40627.44	40553.53	322.49	313.22	0.20960	0.2421
11	7778.00	7778.00	-	-	-	-	-	-

Tabla IV-5: Perfiles

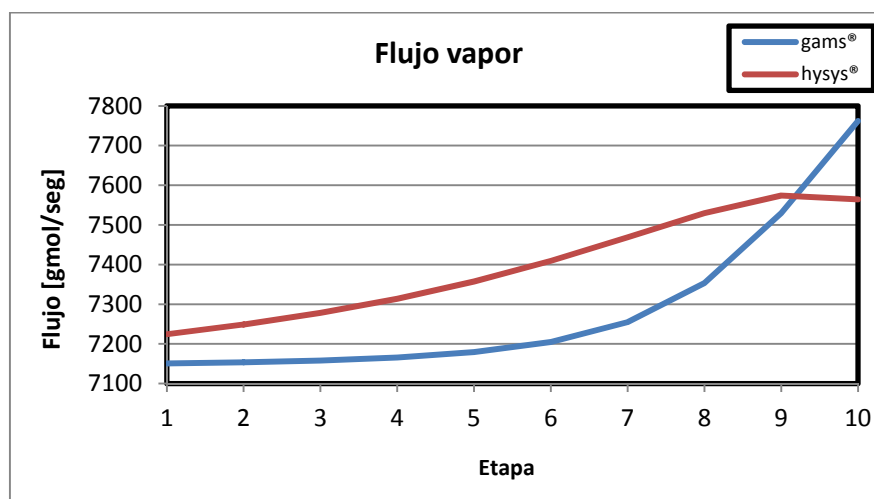


Figura IV.17: Comparación de perfiles de flujos de vapor

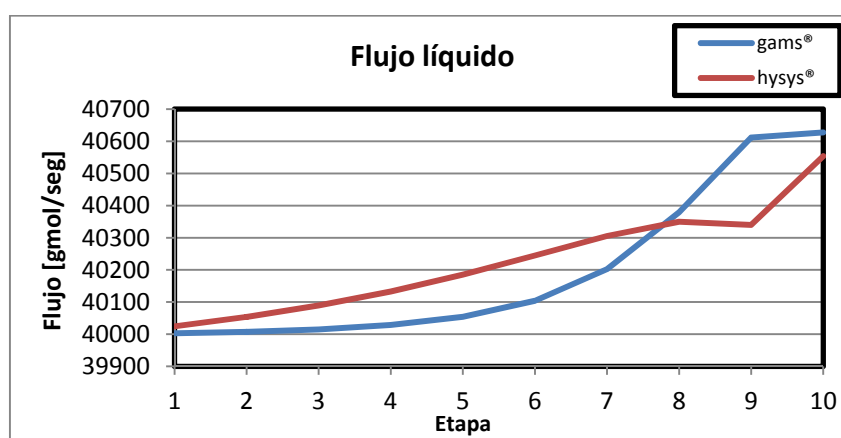


Figura IV.18: Comparación de perfiles de flujos de liquido

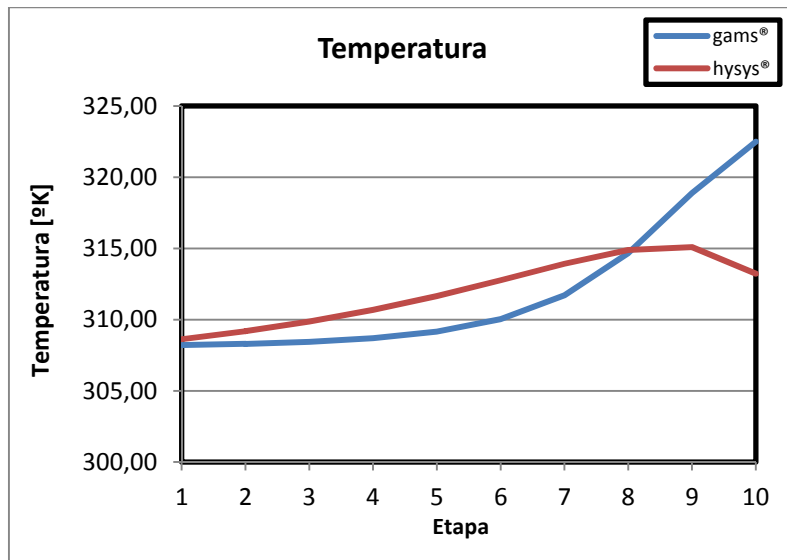


Figura IV.19: Comparación de perfiles de temperatura

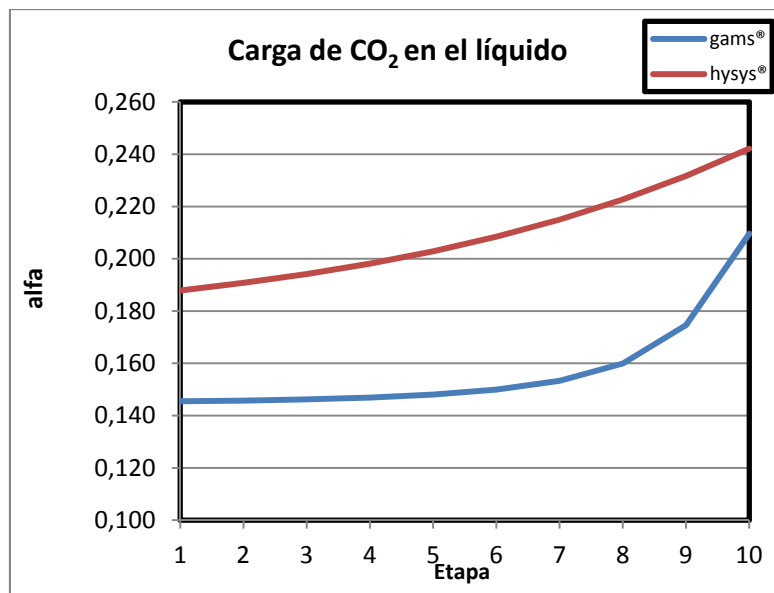


Figura IV.20: comparación de perfiles de carga de CO<sub>2</sub> (alfa)

2) Columna recuperadora

Recuperadora		gams®	hysys®
D	m	8.9916	8.9916
H	m	9.6632	9.6632
$\Delta P$	Kpa/m	NA	0.3677
Inundación	%	NA	65.3755
Costo de la unidad	MM\$	1.4230	1.3116

Tabla IV-6: Parámetros principales

Perfiles

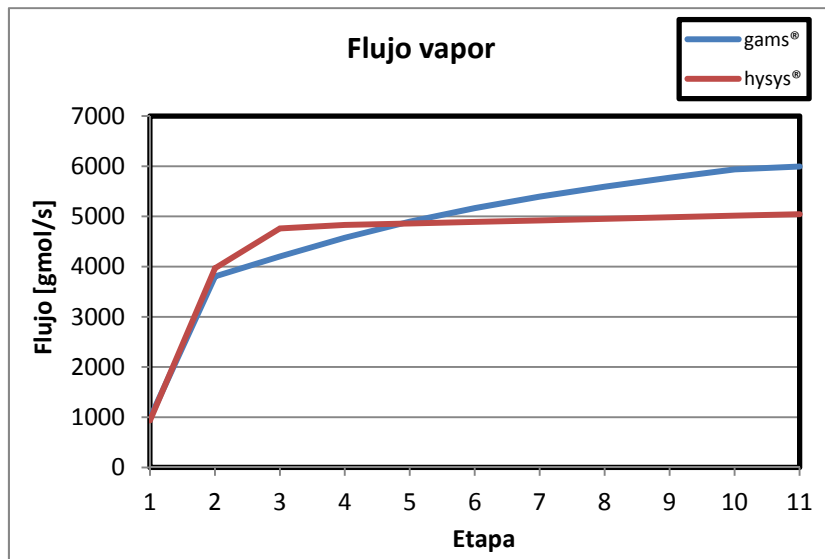


Figura IV.21: comparación de perfiles de flujo de vapor

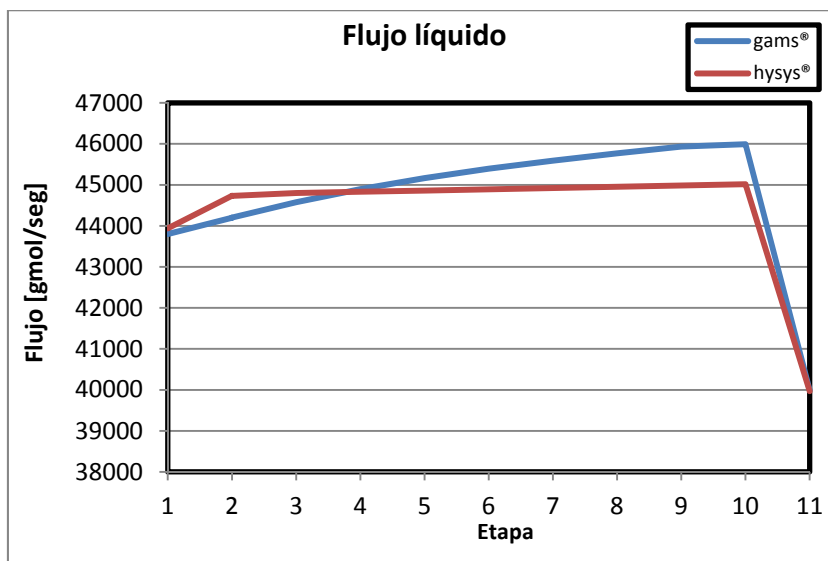


Figura IV.22: comparación de perfiles de flujo de líquidos



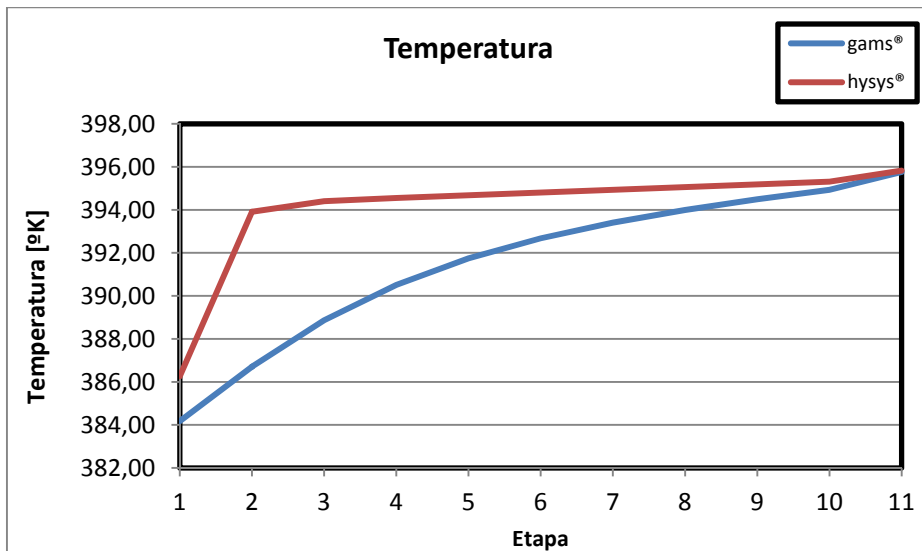


Figura IV.23: comparación de perfiles de temperatura

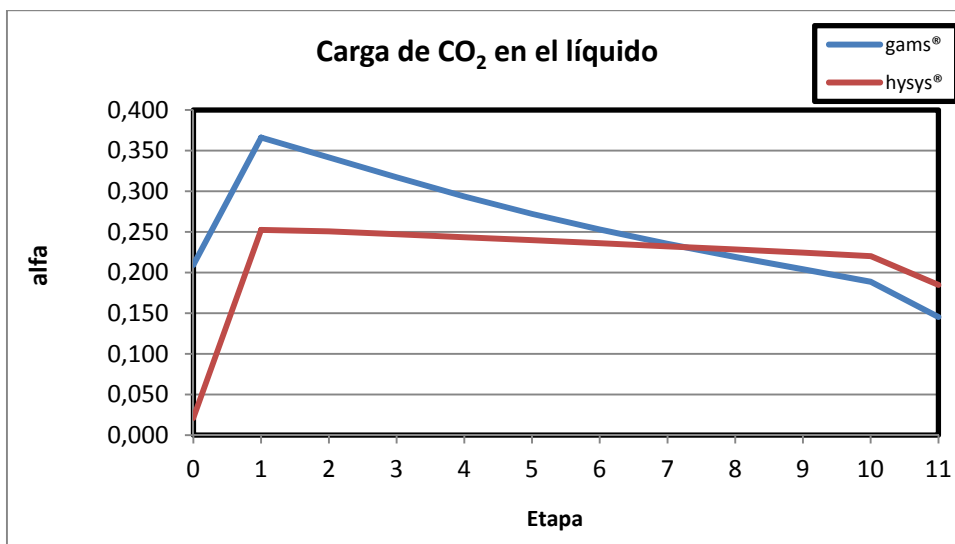


Figura IV.24: comparación de perfiles de carga de CO<sub>2</sub> ( $\alpha$ )

Intercambiador amina-amina		gams®	hysys®
Carga	KJ/s	1.166E+05	1.433E+05
U	Kj/s °K m2	0.7608	0.7608
A	m2	3425.060	5114.498
temp	°K		
amina-rica-IN	°K	322.493	313.259
amina-rica-OUT	°K	353.150	353.150
amina-pobre-IN	°K	395.762	395.826
amina-pobre-OUT	°K	369.428	357.585
DTLM	°K	44.738	43.496
$\Delta T$ amina rica	°K	30.657	39.891
$\Delta T$ amina pobre	°K	26.334	38.241
$\Delta T$ abs	°K	46.935	44.326

Intercambiador amina-amina		gams®	hysys®
ΔT rec	°K	42.612	42.676
DTLM calc	°K	44.739	43.496
Costo de la unidad	MM\$	0.943	0.893

Tabla IV-7: Intercambiador amina-amina

Intercambiador amina-agua		gams®	hysys®
Carga	KJ/s	2.108E+05	1.758E+05
U	Kj/s °K m2	1.005	1.005
A	m2	7019.027	6666.648
temp	°K		
agua-IN	°K	298.150	298.150
agua-OUT	°K	303.150	303.150
amina-pobre-IN	°K	369.427	357.585
amina-pobre-OUT	°K	308.150	308.150
DTLM	°K	29.877	26.240
ΔT amina agua	°K	5.000	5.000
ΔT amina pobre	°K	61.277	49.435
ΔT abs	°K	10.000	10.000
ΔT int am-am	°K	66.277	54.435
DTLM calc	°K	29.756	26.224
Costo de la unidad	MM\$	1.4537	1.241

Tabla IV-8: Intercambiador amina-agua

Cond-Col		gams®	hysys®
Carga	KJ/s	1.354E+04	1.544E+04
U	Kj/s °K m2	0.3202	0.3202
A	m2	564.222	695.22
temp	°K		
agua-IN	°K	298.150	298.150
agua-OUT	°K	308.150	308.150
to cond	°K	384.171	386.256
reflux	°K	372.060	359.550
DTLM	°K	74.960	69.418
ΔT agua	°K	10.000	10.000
ΔT gas	°K	12.111	26.706
ΔT rec	°K	73.910	61.400
ΔT int salida	°K	76.021	78.106
DTLM calc	°K	74.961	69.418
Costo de la unidad	MM\$	0.320	0.168

Tabla IV-9: Condensador columna recuperadora

Reb-Col		gams®	hysys®
Carga	KJ/s	2.259E+05	2.102E+05
U	Kj/s °K m2	1.3603	1.3603
A	m2	7949.585	7725.282
temp	°K		
Vap-IN	°K	415.826	415.826
Cond-OUT	°K	415.826	415.826
amina pobre	°K	395.762	395.827
to reb	°K	394.932	395.313
DTLM	°K	20.894	20.000
ΔT vap	°K	0.000	0.000
ΔT gas	°K	0.830	0.514
ΔT rec	°K	20.894	20.513
ΔT int salida	°K	20.064	19.999
DTLM calc	°K	20.476	20.255
Costo de la unidad	MM\$	1.706	1.331

Tabla IV-10: Rehervidor columna recuperadora

Bomba-AR		gams®	hysys®
Potencia	KW	119.005	125.696
Ef	%	75.000	75.000
flujo	gmol/s	4.063E+04	4.055E+04
ΔP	Kpa	101.300	101.325
Costo de la unidad		0.044	0.054

Tabla IV-11: Bombas y compresores

Costo fijo total [MM\$]	
gams®	hysys®
7,853	6,919

Tabla IV-12: Costo fijo Total

Costos fijos	gams®	hysys®
Absorbedora	1.964	1.920
Recuperadora	1.423	1.312
Intercambiador Amina-Amina	0.943	0.893
Intercambiador Amina-Agua	1.454	1.241
Condensador columna	0.320	0.168
Rehervidor columna	1.706	1.331
Bombas	0.044	0.054
	7.853	6.919

Tabla IV-13: Comparación de costos fijos

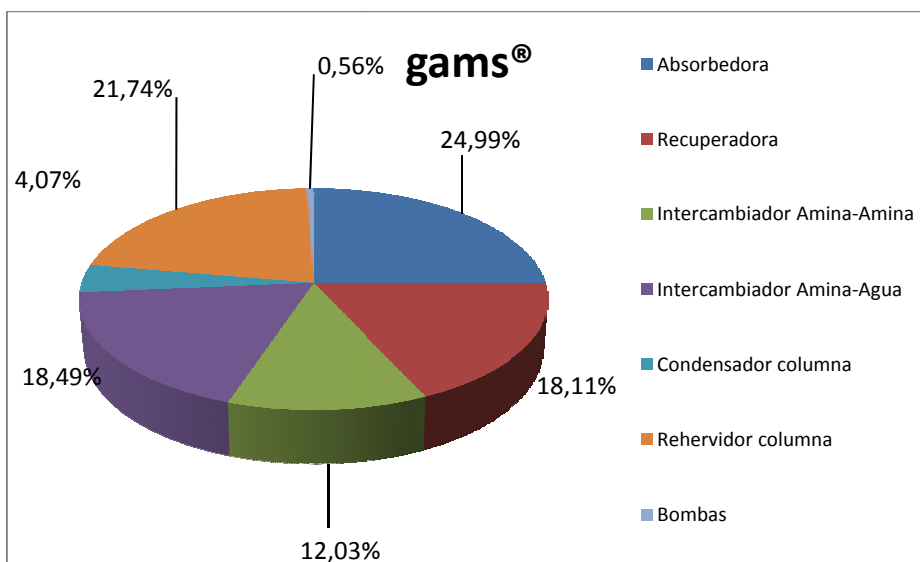


Figura IV.25: distribución de costos de equipos en el caso GAMS

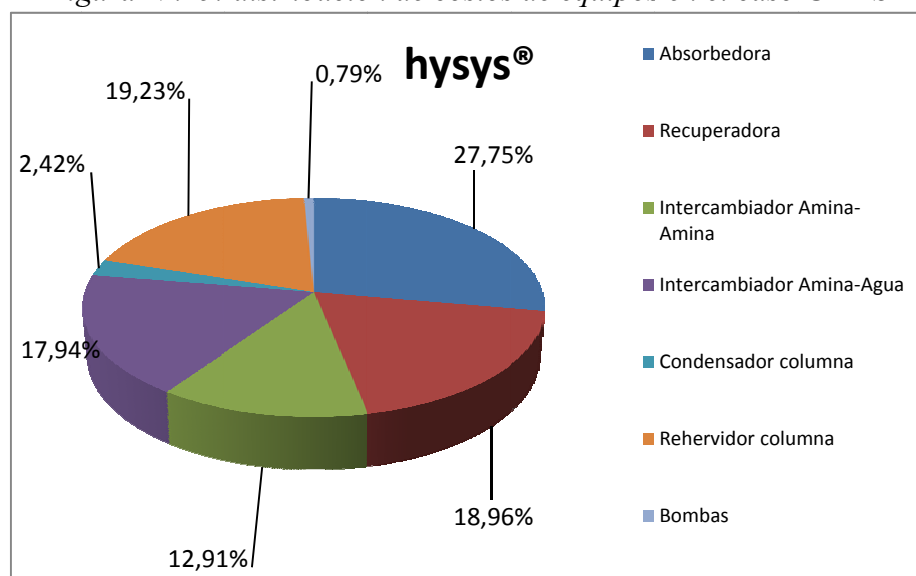


Figura IV.26: distribución de costos de equipos en el caso Hysys®

		gams®	hysys®
Horas de operación por año		8000	8000

AE-amina-agua		gams®	hysys®
flujo	gmol/s	5.596E+05	4.714E+05
costo	\$/año		8.351

AE-cond		gams®	hysys®
flujo	gmol/s	1.799E+04	2.063E+04
costo	\$/año		0.366

AP - Make up		gams®	hysys®
flujo	gmol/s	2.458E+00	0.000E+00
costo	\$/año	0.000	0.000

total	5.776E+05	4.921E+05
	11.581	8.717

Vap-calef		gams®	hysys®
flujo	gmol/s	-	5.418E+03
costo	\$/año	36.2539	46.010

Tabla IV-14: Costos operativos

gams®	hysys®
49.260	54.438

Tabla IV-15: Costos operativos totales

RESUMEN CONSUMO SERVICIOS AUXILIARES (M\$/año)		
	gams®	hysys®
Agua Proceso+Enfriamiento	11.58	8.43
Vapor Media Presión	36.25	46.01
Consumo energía	0.06	0.00
Reposición amina	1.14	0.00
<b>COSTO TOTAL SERV.AUX.</b>	<b>49.032</b>	<b>54.438</b>

Tabla IV-16: Comparación de servicios auxiliares

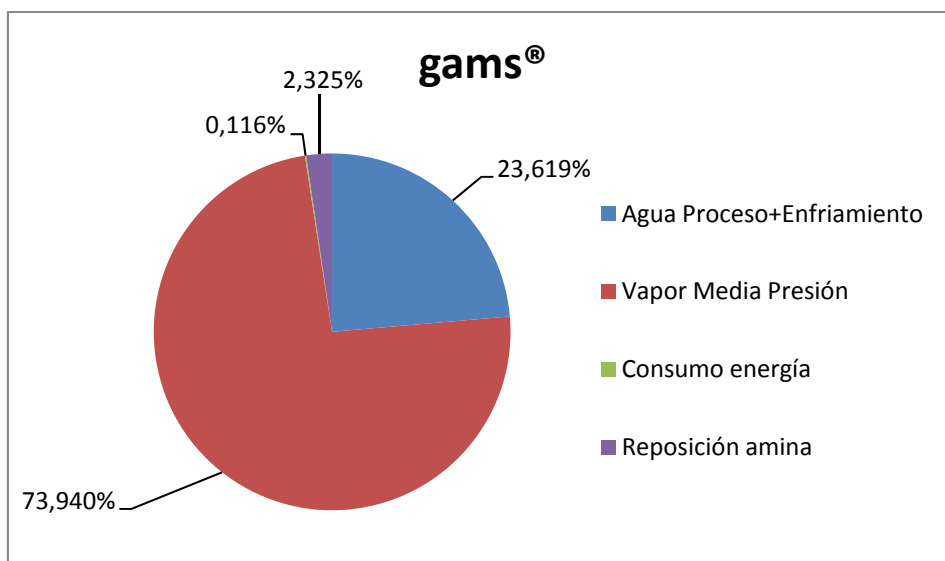


Figura IV.27: distribución de costos operativos en el caso GAMS

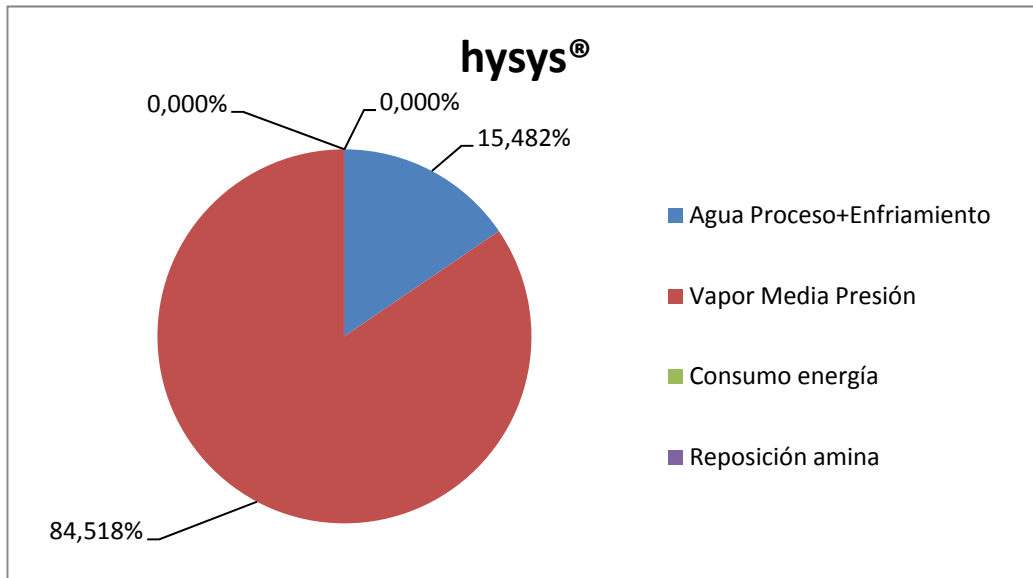


Figura IV.28: distribución de costos operativos en el caso Hysys®

		gams®	hysys®
Costos directos de fabricación	M\$	21.110	18.600
Costos indirectos de fabricación	M\$	7.920	6.974
Capital de inversión	M\$	39.180	34.520
Costo mano de obra operativa	M\$/año	0.103	-
Costos operativos	M\$/año	55.280	54.438
CRF	-	5.410	5.410
<b>COSTO TOTAL DE LA PLANTA</b>	<b>M\$/año</b>	<b>62.527</b>	<b>60.819</b>

Tabla IV-17: Comparación de costos totales

Para el cálculo del costo de la bomba de amina rica, se asume una caída de presión de 101.3 KPa ( Pdes-Pab).

Se concluye en función de los casos de estudio que la flexibilidad y la robustez del modelo de simulación implementada, y su uso para la optimización paramétrica utilizando las utilidades del Hysys® para tal fin; resulta muy adecuada. En efecto, se han resuelto distintos casos de estudio cubriendo un amplio rango operativo y condiciones de diseño, abarcando distintas aminas como agente de captura, incluyendo mezclas binarias típicas, y la optimización de su composición.

Además, se ha comparado el desempeño de la herramienta implementada frente a un modelo similar implementado en GAMS, el cual al ser orientado a ecuaciones tiene en problemas de optimización una ventaja apreciable.

Dentro de este contexto, las soluciones optimizadas según el simulador Hysys® son aceptables comparadas con las obtenidas en el modelo implementado en GAMS.

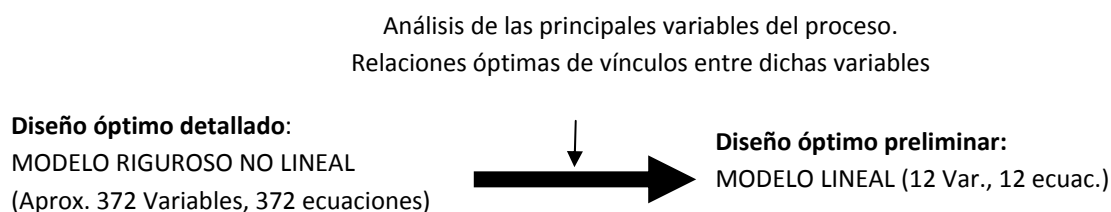
Por último, y para facilitar aún más el problema de optimización, en el siguiente punto se ejemplificará una estrategia para implementar modelos “reducidos” en cuanto a la facilidad de resolución, pero que conserva las relaciones entre variables en el óptimo, obtenidos mediante el modelo riguroso implementado en Hysys®.

#### IV.4.6 Caso de estudio 4: Modelo Riguroso reducido

De la exploración del comportamiento de los parámetros más importantes en el óptimo (recuperación de CO<sub>2</sub>, concentración de MDEA, flujo y concentración de fluegas) se elaboró un modelo reducido, tipo caja negra, que los relaciona.

La idea básica fue establecer un vínculo entre las principales variables del proceso con los parámetros más importantes del mismo de manera tal de poder conducir un diseño preliminar del proceso en forma sencilla. Así, según se describe en la Fig. IV-16 el desafío fue “condensar” en forma simple, a partir de soluciones óptimas rigurosas y detalladas, toda la información necesaria para estimar dimensiones y costos de equipos para aquellas condiciones especificadas por el usuario.

A continuación se presentan los principales resultados e hipótesis de trabajo utilizados para derivar el modelo matemático.



*Figura IV.29: Pasos en la derivación de modelo*

La figura IV.30 ilustra la distribución del costo total de inversión de los distintos equipos para el proceso correspondiente a la figura IV.5 y para un caso específico según las siguientes especificaciones:

Gas a tratar: caudal 28.0 [MMmol/h] composición, 74.26 % N<sub>2</sub>; 7.74 % O<sub>2</sub>; 12.00 % de H<sub>2</sub>O y 6.00 % de CO<sub>2</sub> (base molar)

Amina: Temperatura, 35 °C; caudal, 34,11 [MMmol/h], composición, 40 % [másico] de DEA en agua.

Se puede observar claramente que los equipos que mayor incidencia presentan en el costo total de inversión son: compresores, absorbedor, LR-HEX y la unidad regeneradora de amina. Similares distribuciones de costos se verificaron para otras especificaciones cubriendo un amplio rango operativo.

Por su parte, la Fig. IV-17 indica los diámetros óptimos que corresponden a las columnas de absorción y desorción para distintos flujos de gas y de CO<sub>2</sub> total a tratar, obtenidos a partir de simulaciones rigurosas. Según se puede observar claramente en dichas figuras, para un determinada cantidad total de CO<sub>2</sub> en el gas a tratar, el diámetro depende fuertemente del caudal de gas a tratar, mientras que permanece prácticamente invariante para distintas cantidades totales de CO<sub>2</sub> y manteniendo fijo el caudal de gas a tratar. Exactamente lo opuesto podemos concluir para la regeneradora.

Nuevamente, este comportamiento es similar a distintas condiciones operativas dentro de un rango amplio de interés práctico.

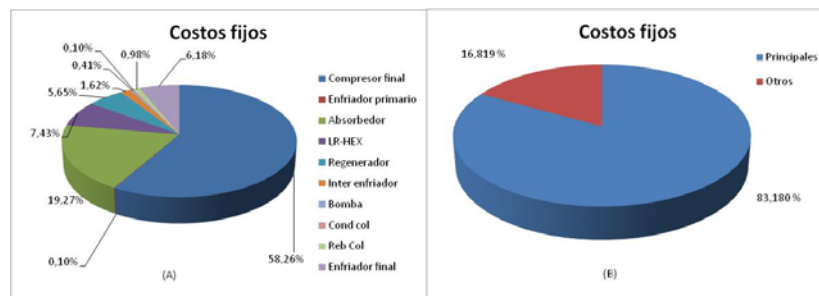


Figura IV.30: Costo fijo total por equipo

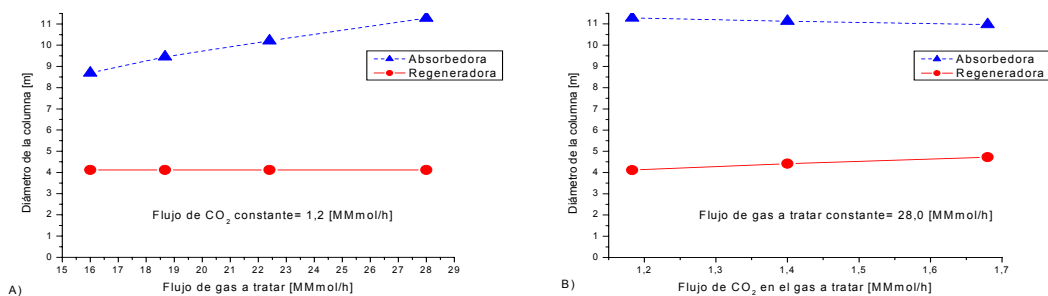


Figura IV.31: Diámetro de las columnas en función de flujo de gas y cantidad total de CO<sub>2</sub>

A partir de esto, es posible aproximar los diámetros de la absorbadora y regeneradora en función del caudal de gas a tratar y del flujo total de CO<sub>2</sub> respectivamente, según se indica a continuación:



$$D_{Columna\ Absorbedora} (m) = 0.2119 * F_{fluegas} (MMmol/h) + 5.3992$$

$$D_{Columna\ Recuperadora} (m) = 1.2202 * F_{CO_2} (MMmol/h) + 2.6856$$

Luego, se procedió del mismo modo con el resto de las variables más importantes del proceso, obteniéndose así, sus respectivas aproximaciones en función del caudal de gas a tratar ó caudal total de CO<sub>2</sub> según corresponda. Por ejemplo, las siguientes son las aproximaciones obtenidas para el consumo de servicios auxiliares de calefacción y de enfriamiento, electricidad demandada por los compresores, y algunos costos de inversión:

$$C_{Columna\ Absorbedora} (MM\$us / año) = 0.0478726 \times F_{fluegas} (MMmol/h) + 0.349322$$

$$C_{Columna\ Recuperadora} (MM\$us / año) = 0.136841 \times F_{CO_2} (MMmol/h) + 0.239478$$

$$C_{Compresor} (MM\$us / año) = 2.63719 \times F_{CO_2} (MMmol/h) + 0.463350$$

$$Q_{Condensador} [MW] = -0.00786 \times F_{fluegas} (MMmol/h) + 0.59130 \times F_{CO_2} (MMmol/h) - 0.04504$$

$$Q_{Reboiler} [MW] = -0.29631 \times F_{fluegas} (MMmol/h) + 40.85331 \times F_{CO_2} (MMmol/h) - 1.30053$$

$$Q_{Compresor} [MW] = -0.23980 \times F_{fluegas} (MMmol/h) + 15.87251 \times F_{CO_2} (MMmol/h) - 1.41595$$

En función de lo expuesto y constatado con las curvas se descubren las relaciones de las principales variables operativas y de diseño en el óptimo, al igual que sus costos específicos, logradas a partir de simulaciones/optimizaciones paramétricas, es posible contar con un modelo simplificado o reducido para estimar las misma fácilmente. Por otra parte, para distintas aminas, es posible realizar el mismo procedimiento.

### Resultados y validación

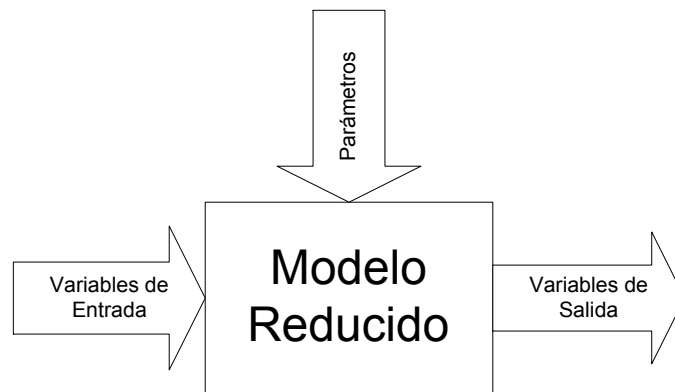
En esta sección se presentan los resultados obtenidos para un caso de aplicación específico. Para mitigar las emisiones gaseosas de una planta generadora de electricidad, se desea estimar el costo, los servicios auxiliares de calefacción y enfriamiento y las dimensiones de las columnas de absorción y desorción necesarios para absorber químicamente el 95 % de CO<sub>2</sub> presente en el gas de combustión cuyo caudal y composición (contenido de CO<sub>2</sub>) son, respectivamente, 25 106 [moles/h] y 4,8

% [molar]. Se dispone, para la absorción, de una solución acuosa de DEA al 40 % [peso] .

Variable de interés	Simulación Rigurosa	Modelo Simplificado
Costo total [MMus\$/año]	25,333	24,671
Costo Fijo [MMus\$/año]	3,642	3,700
Costo Operativo [MMus\$/año]	21,691	20,973
Costo de la Absorbidora [Mmus\$]	1,467	1,546
Diámetro de la Absorbidora [m]	10,363	10,697
Costo de la Regeneradora [Mmus\$]	0,364	0,404
Diámetro de la Regeneradora [m]	3,962	4,150
Costo de Compresores [Mmus\$]	3,701	3,628
Electricidad consumida por compresores [MW]	11,511	11,636
Energía consumida en el condensador, [MW]	0,463	0,468
Energía consumida en el reboiler [MW]	40,291	40,316

*Tabla IV-18: Caso de estudio, valores comparativos con la optimización rigurosa*

De los resultados presentados en la tabla IV-18, se puede concluir claramente que el diseño preliminar puede llevarse a cabo en forma sencilla y con bastante exactitud comparado al que se obtiene empleando un modelo detallado y riguroso del proceso completo.



*Figura IV.32: Esquema del modelo reducido*

Resumiendo, mediante el uso exhaustivo de un simulador comercial de procesos (Hysys®) se obtuvieron datos de diseños óptimos para distintas especificaciones de gas a tratar. Estos datos se emplearon para desarrollar un modelo simplificado o reducido que permita abordar el diseño preliminar óptimo del proceso de captura de CO<sub>2</sub> (post-combustión). El modelo desarrollado fue satisfactoriamente validado comparando los valores con aquéllos obtenidos en forma rigurosa; resultado aceptable la exactitud al

estimar las dimensiones de los distintos equipos y sus respectivos costos asociados; consumos de servicios auxiliares (calefacción y enfriamiento) como así también valores de flujos de las principales corrientes. Así, el modelo reducido permite rápida y sencillamente obtener valores preliminares sin la necesidad de cálculos complejos.

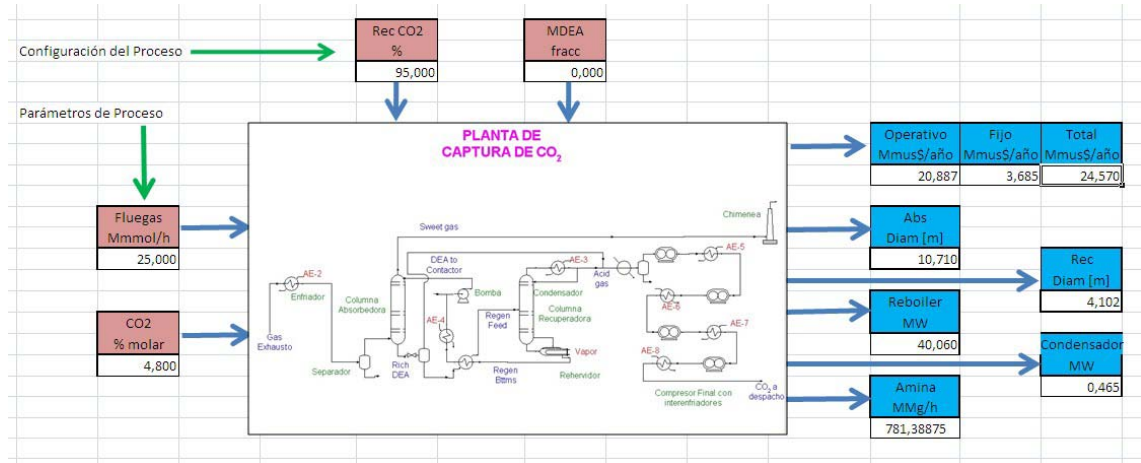


Figura IV.33: Modelo reducido

## IV.5 Optimización de Plantas de Generación de Potencia por Ciclo Combinado simples Acopladas a Sistemas de recuperación de CO<sub>2</sub>.

### IV.5.1 Caso de estudio 5: Planta Dual.

#### Descripción del Proceso. Modelado

En el presente capítulo se pretende analizar el complejo compuesto por ambos procesos involucrados en la planta de generación acoplada a un sistema de captura de dióxido de carbono post-combustión. En la primera parte de este capítulo se ha analiado el problema de la simulación y optimización de plantas de captura de CO<sub>2</sub> por postcombustión

Por un lado se ha optimizado una planta de generación de potencia mediante ciclo combinado (capítulo II) utilizando como combustible gas natural. En esta, los gases calientes se aprovechan para generar vapor que es empleado para generación adicional de potencia (con lo que se mejora el rendimiento de todo el proceso). Estos gases contienen: nitrógeno (casi inerte), el oxígeno de exceso, el vapor de agua (aportado por la combustión del hidrógeno del gas natural) y el dióxido de carbono proveniente de la

combustión del Carbono del metano. Como se verá más adelante en este capítulo, el exceso de aire utilizado en la combustión no solo tiene impacto en la planta de generación, ya que además incide fuertemente en la composición de los gases que entran a la planta de captura (dilución del dióxido de carbono), afectando al costo operativo y de inversión de la misma.

A fin de reducir el impacto ambiental de sistema de generación, como se vio es posible acoplar un proceso de tratamiento de efluentes gaseosos cuya finalidad es absorber/capturar parte del dióxido de carbono generado en la combustión según lo explicado en secciones anteriores del presente capítulo.

Se logra así un cierto nivel de recuperación introduciendo además algunas problemáticas importantes a tener en cuenta. Por un lado, la disposición final del CO<sub>2</sub> capturado. Si bien el dióxido de carbono es materia prima de numerosos procesos, el incremento de oferta al mercado implica una marcada reducción de su valor. También el mercado puede crecer si se lo utiliza en la recuperación secundaria de petróleo, de todas formas siempre la oferta tenderá a superar a la demanda.

Se han sugerido procesos de captura en minerales, minas subterráneas o su disolución en el mar. De todas estas, quizás la más prometedora sea la última en donde el gas carbónico puede ser retenido durante mucho tiempo y mediante la intervención de algas en su transformación en biomasa.

Como alternativa es interesante el fenómeno de hidratación que hace que el CO<sub>2</sub> en presencia de agua a alta presión se transforme en un hidrato sólido permaneciendo de esta manera encapsulado en el fondo del mar. Para que esto ocurra se requiere grandes presiones de compresión para poder llevar el gas a las condiciones necesarias para su hidratación.

En resumen, el CO<sub>2</sub> capturado puede ser concentrado en una corriente líquida o gaseosa que podría ser transportada e inyectada en el fondo del océano o en formaciones geológicas subterráneas como reservorios de petróleo y gas, yacimientos de carbón y acuíferos profundos. Si bien resulta costosa cualquier alternativa, la tecnología de secuestro de carbón es la opción que puede proveer la mitigación a largo plazo de los gases del efecto invernadero mientras se consuman los recursos de energía fósil disponibles. En nuestro caso, como se ha expresado, no tenemos en cuenta el costo

final de deposición, solo se calcula la energía necesaria para comprimirlo a una presión que permita su transporte a su destino final. Esto puede reducir bastante el costo calculado para la generación de energía, según donde se ubique la planta real a construir. Aunque resulta sencillo adicionar este costo, adoptando una alternativa final de disposición y una situación geográfica en particular.

No obstante, puesto que el proceso de absorción requiere grandes equipos y un importante consumo en servicios auxiliares se debe plantear cuál es el grado de recuperación óptimo. Si bien ecológicamente sería deseable un 100 % de recuperación esto haría oneroso al proceso e inviable al emprendimiento. Por otra parte, existen normativas que pueden imponer restricciones a las condiciones de los gases emitidos.

Una alternativa a tener en cuenta es el potencial beneficio a través de la operatoria de los bonos de carbono en función del grado de minimización de vertido a la atmósfera.

Si bien un mayor nivel de recuperación implica una reducción importante en el grado de vertido a la atmósfera, y un mayor ingreso en valores de bonos de carbono, los costos operativos y fijos serán mayores, según la variación de costo exponencial analizada en el caso de estudio 1 (sección IV.3.3).

Un típico proceso integrado puede apreciarse en la figura IV.34 donde queda claro que resulta del acoplamiento en serie de los dos procesos mencionados con antelación. Por lo tanto, el modelo resulta de integrar el conjunto de ecuaciones y parámetros ya vistos en cada caso, adicionando una ecuación que iguale el flujo de gas que sale de la planta de generación con el ingreso a la planta de captura de CO<sub>2</sub>

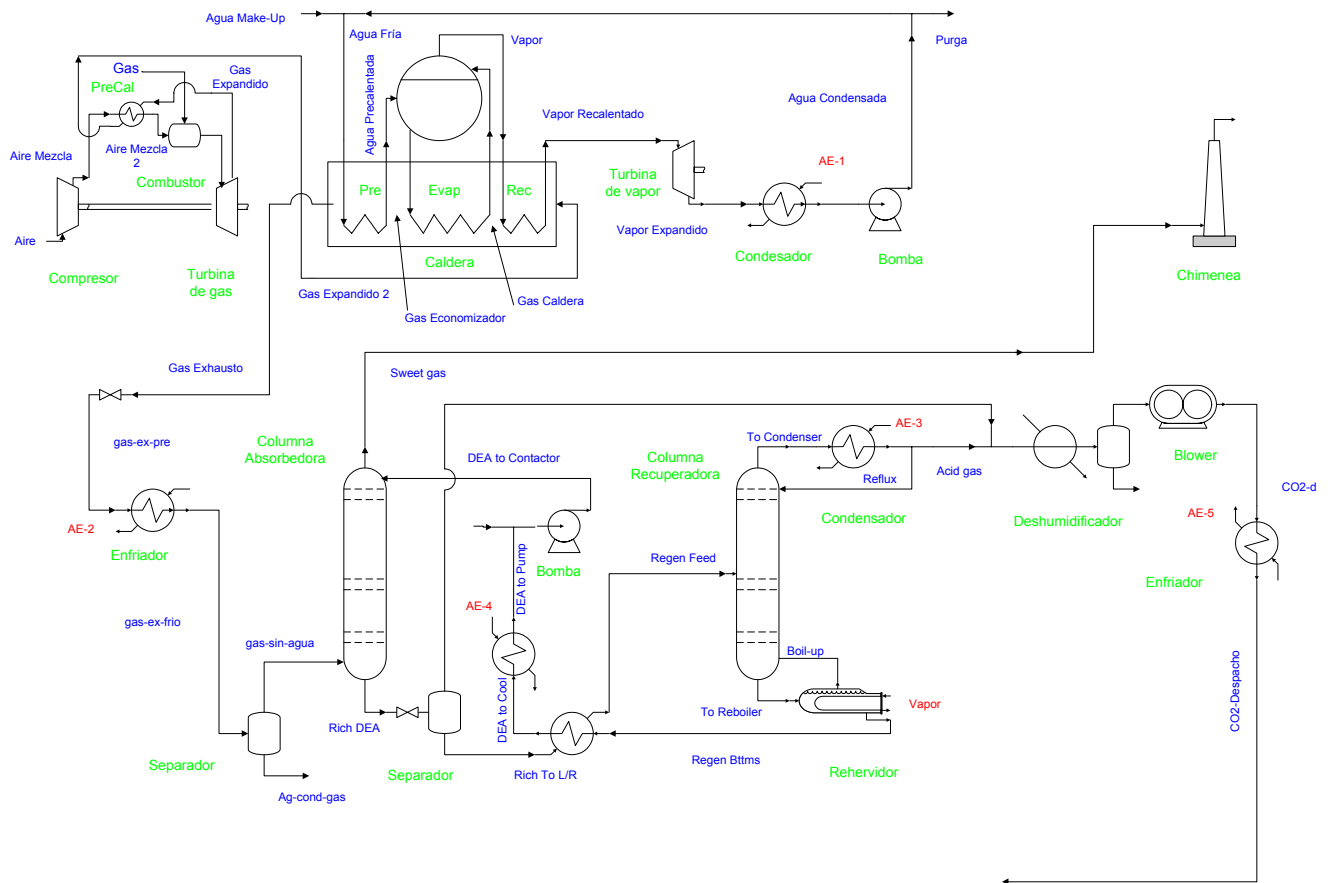


Figura IV.34: Flowsheet de la planta de potencia acoplada a un circuito de absorción CO<sub>2</sub>

Tanto los modelos como las ecuaciones de costo correspondientes al sistema de generación ya fueron explicadas y desarrolladas en el capítulo II. Lo mismo se ha realizado en este capítulo para la planta de captura de dióxido de carbono.

El problema de optimización resultante crece en magnitud y complejidad, con respecto al problema de ambas por separado, ya que se acoplan ecuaciones y modelos fuertemente no lineales; y además, las condiciones de operación reflejan diversos balanceos entre costos fijos y operativos según las condiciones de operación de ambas plantas, y las interacciones resultantes entre distintos sectores de las mismas.

Por lo tanto, para definir una estrategia de optimización, en primer lugar es interesante analizar los resultados obtenidos en forma parcial para cada planta, y luego realizar la optimización del sistema acoplado.

En el capítulo II se realizaron optimizaciones de la planta de generación de potencia, asumido un valor de potencia neta entregada y las diferencias de temperaturas en los diferentes equipos de intercambio térmico como restricciones. Así planteado el

problema, nos quedan como variables de optimización: las presiones de descarga de las turbinas, tanto la de gas como la de vapor, y los flujos operativos de los fluidos principales, gas, agua y aire.

Se debe contemplar para la turbina de gas una presión de descarga tal, que los gases de escapes tengan la suficiente fuerza impulsora para ingresar a la planta de absorción. En otras palabras, una menor presión de descarga en la turbina de gas también implicaría potencia generada adicional, pero cuando se la integra con la planta de absorción, de no tener la presión suficiente, se requeriría el uso de un compresor lo que implica mayores costos.

En principio nada impide que la turbina de vapor opere con descarga al vacío con lo que se obtendría una potencia adicional pero implicaría menor fuerza impulsora en el condensador y por lo tanto se encarecería dicho equipo aumentando también el flujo de agua de enfriamiento (por la misma disminución de la diferencia de temperaturas). Además, se pretende conservar cierto nivel térmico para poder analizar una potencial integración energética con respecto a la planta de captura de CO<sub>2</sub>. En este caso, puede optarse por generar vapor adicional para la planta de captura, o tomarlo de la generación de energía reduciendo entonces la potencia producida.

Por las consideraciones anteriores, fijadas las presiones de operación, resultan como variables de optimización los flujos anteriormente mencionados. Los acercamientos térmicos en cada equipo de intercambio se restringen mediante una ecuación que se incorpora al programa de optimización. En general, toman como acercamiento mínimo permitido 30 grados a un intercambio donde participa una corriente líquida y una de gas y 10 grados a una con intercambio entre corrientes líquidas. De esta manera se impone un criterio conservador a la integración energética, la cual permite agregar cierta flexibilidad operativa al integrar los tres procesos objeto de estudio en esta tesis en el capítulo V,

Se ha visto en el Capítulo II que el costo total está fuertemente asociado al costo del combustible, que es el dominante, por lo cual sigue su tendencia. Se demostró además que el valor del precio unitario de la potencia generada en la planta de generación es prácticamente constante en el intervalo considerado (por lo que el factor de escala no incide) según los valores asumidos para el cálculo del factor de recupero de capital (tasa

de interés y vida útil de la planta, en el modelo de costos adoptado). Si se realizan cambios en dichos valores, tomando en cuenta valores típicos en proyectos de inversión, el comportamiento descrito no varía apreciablemente.

La potencia neta de la turbina de gas es la diferencia entre la energía provista por el expansor y la consumida por el compresor. La turbina de vapor suministra una potencia proporcional al flujo de agua y al salto de presión (fijo).

Por otra parte, una operación de la turbina de gas en condiciones cercanas a la relación estequiométrica suministraría mayor potencia pero también gases a altas temperaturas, que desde el punto de vista técnico lleva a la posibilidad de destrucción de la turbinas de gas; y en lo económico dispara los precios exponencialmente. Un exceso de aire considerable mitiga este efecto pero encarece el costo operativo como se verá al tratar la planta de absorción.

En otras palabras, un cierto exceso de aire beneficia la operación del ciclo de potencia pero afecta negativamente a la planta de absorción ya que le impone mayor carga.

Del análisis de las soluciones obtenidas en el capítulo II se observa que en general, la solución óptima lleva a las restricciones a ser activas, es decir, la solución óptima fuerza a que se cumpla la mínima diferencia de temperatura para los intercambios térmicos en donde esta restricción es impuesta.

Para la planta de captura, a una mayor potencia instalada, le corresponde tratar un flujo de gas exhausto. Esto incide directamente en el costo de recuperación o captura del dióxido de carbono, en forma proporcional.

Además, como se ha visto en los casos de estudios 1 y 2 del presente capítulo, el costo (en función de la recuperación de CO<sub>2</sub> en todo el rango) está fuertemente influenciado por los costos operativos (vapor y agua de enfriamiento). En particular, el flujo de vapor, que aporta la energía para la evaporación en el rehervidor.

En la figura IV.35 se observa para un caso típico con mayor claridad la discriminación entre costos operativos, ya que se muestra el aporte del costo de agua de enfriamiento y del vapor como porcentaje del costo operativo total. Se aprecia que el vapor es el dominante (80 %) mientras que el agua de enfriamiento lo hace con el 20 %



restante. Por último, en la figura IV.36 se muestra la variación significativa del costo unitario del CO<sub>2</sub> recuperado en función del porcentaje de captura. Las curvas se obtuvieron para un caudal de gas exhausto de 400.000 [Kg/h] equivalente al producido por una planta de 30 [MW]. En la figura IV.36 se concluye que el costo de recuperación se dispara exponencialmente a partir del 85 % de recuperación. Esta funcionalidad es fuertemente dependiente de la dilución del dióxido de carbono en la corriente de gases a tratar, como se ha mencionado en las secciones anteriores.

Teniendo en cuenta esto, para la optimización de la planta integrada, en la planta de recuperación de dióxido de carbono se tomó como variables de optimización la presión de operación de la columna absorbidora y el caudal de amina. Las diferencias de temperatura en el intercambiador que calienta la alimentación de la columna recuperadora y la cantidad de CO<sub>2</sub> recuperada se restringen mediante desigualdades incorporadas al problema de optimización, según se explicó en la sección IV.3.

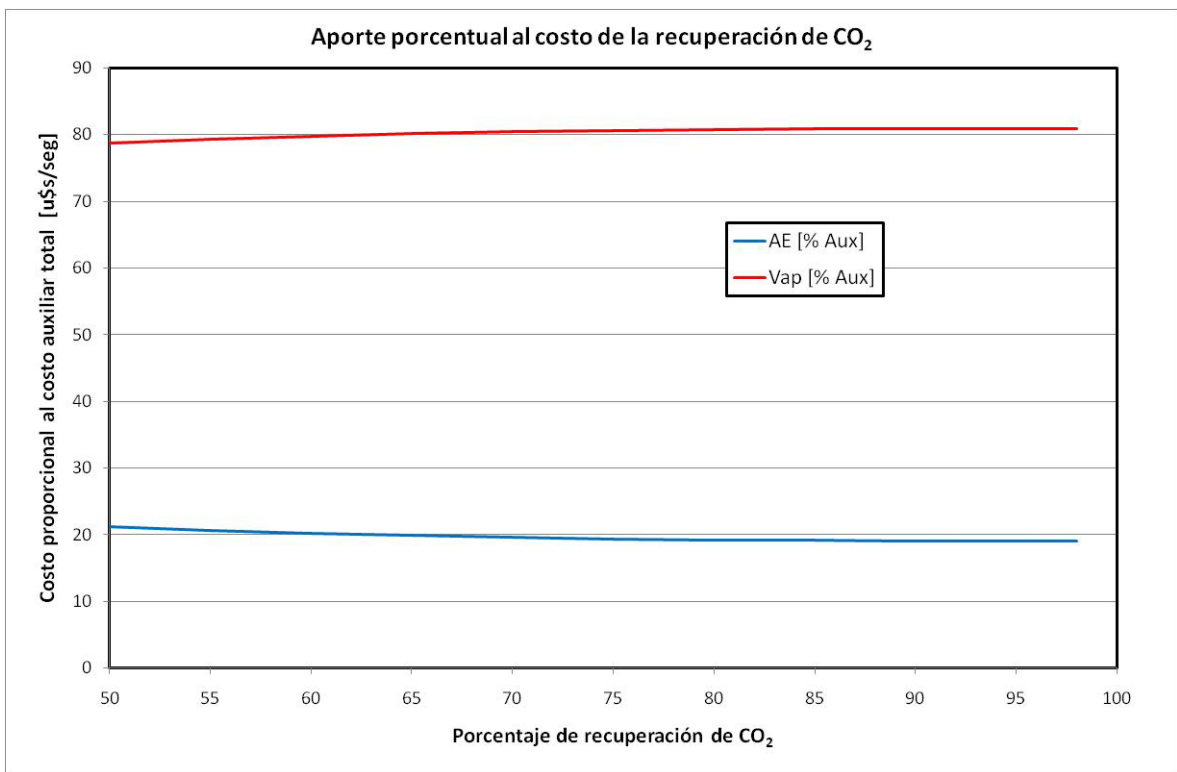
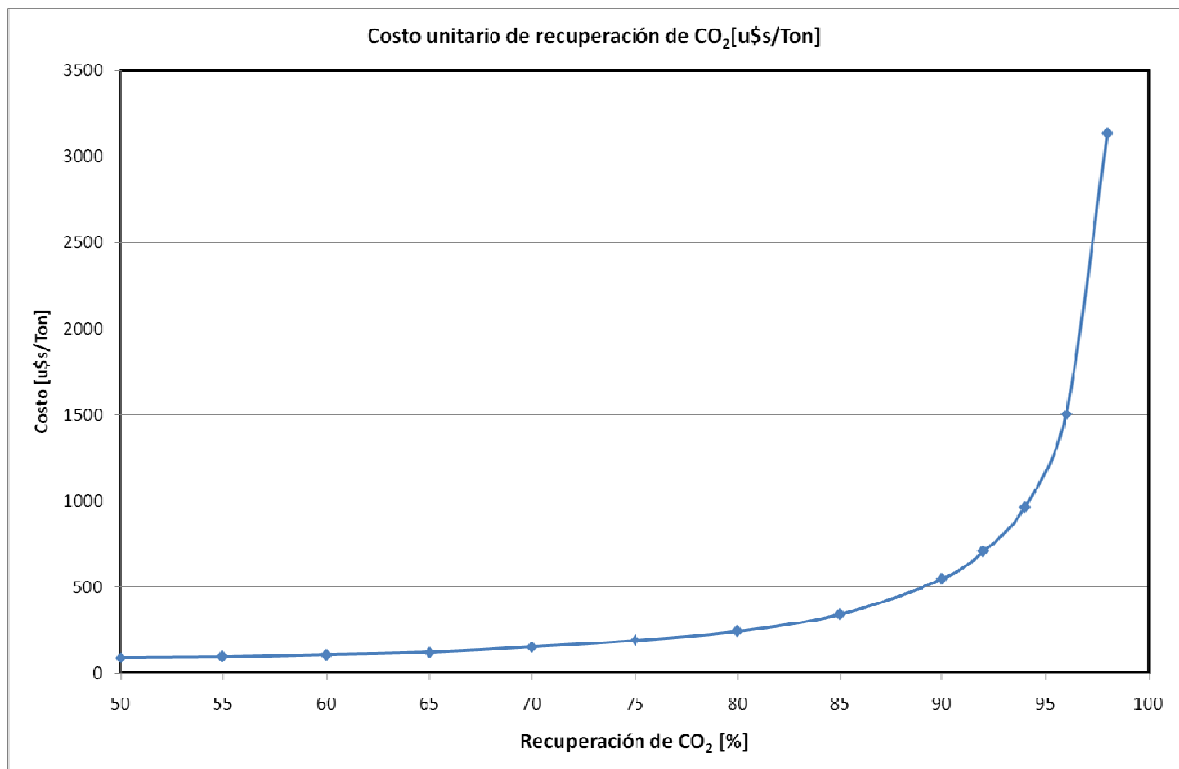


Figura IV.35: Aporte porcentual al costo de recuperación



*Figura IV.36: Costo Unitario de la recuperación de CO<sub>2</sub>*

Resumiendo, el análisis de las soluciones obtenidas previamente (sección IV.3) para la planta de recuperación de dióxido de carbono, asumen una condición de entrada de los gases provenientes de la planta de generación. Se concluye que el costo de la planta es proporcional al caudal de gases a tratar, para un dado porcentaje de recuperación del CO<sub>2</sub> que ingresa a la planta de captura. Más aún, el costo crece en forma exponencial si se pretenden recuperaciones mayores a un determinado valor. Este valor depende de la dilución del CO<sub>2</sub> en la corriente de gas exhausto. Esta dilución es función de la condición de operación, ya que un exceso de aire holgado en la combustión en la turbina de gas, genera una mayor dilución, y en el otro extremo, si se asume una corriente de gas típica correspondiente a una condición de operación con exceso de aire mínimo en la turbina de gas, es decir, cercano a las condiciones estequiométricas, se obtiene una mayor concentración de CO<sub>2</sub> en el gas exhausto.

Esta condición operativa, que puede considerarse en este sentido opuesta a la anterior, se caracteriza (ver Figuras IV.37 a IV.39) por una sustancial diferencia en el costo unitario de captura de CO<sub>2</sub>. Sin embargo, los porcentajes de costos relativos se mantienen aproximadamente iguales en las condiciones extremas analizadas (diluido vs concentrado).

La figura IV.40 muestra claramente la diferencia de costos entre ambas condiciones “extremas” de operación. Nuevamente conviene aclarar que dichas figuras se obtienen de optimizar la planta de captura de CO<sub>2</sub>, en forma aislada, asumiendo condiciones particulares de la corriente de gas que se alimenta a planta, mientras que las variables de optimización y restricciones utilizadas son las mismas descritas en cada caso, según lo explicado en la sección IV.3.

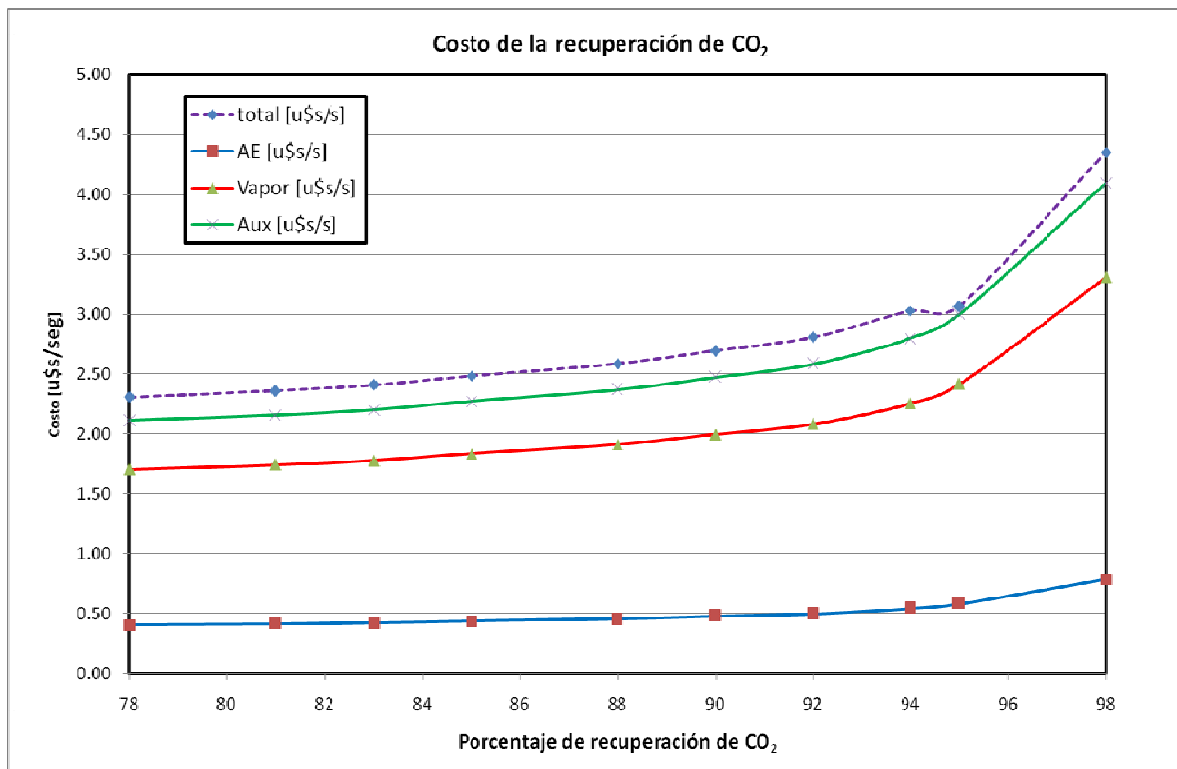


Figura IV.37: Costo Recuperación de CO<sub>2</sub> en un flue gas concentrado

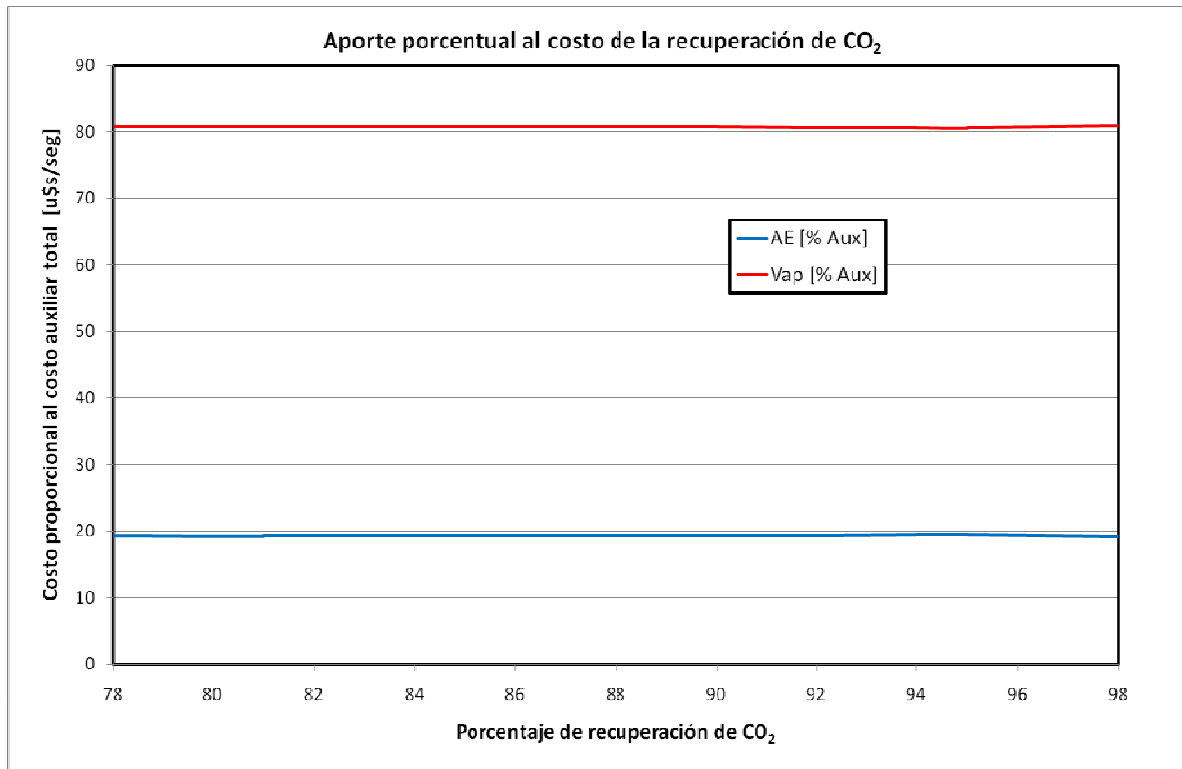


Figura IV.38: Aporte porcentual al costo en flue gas concentrado

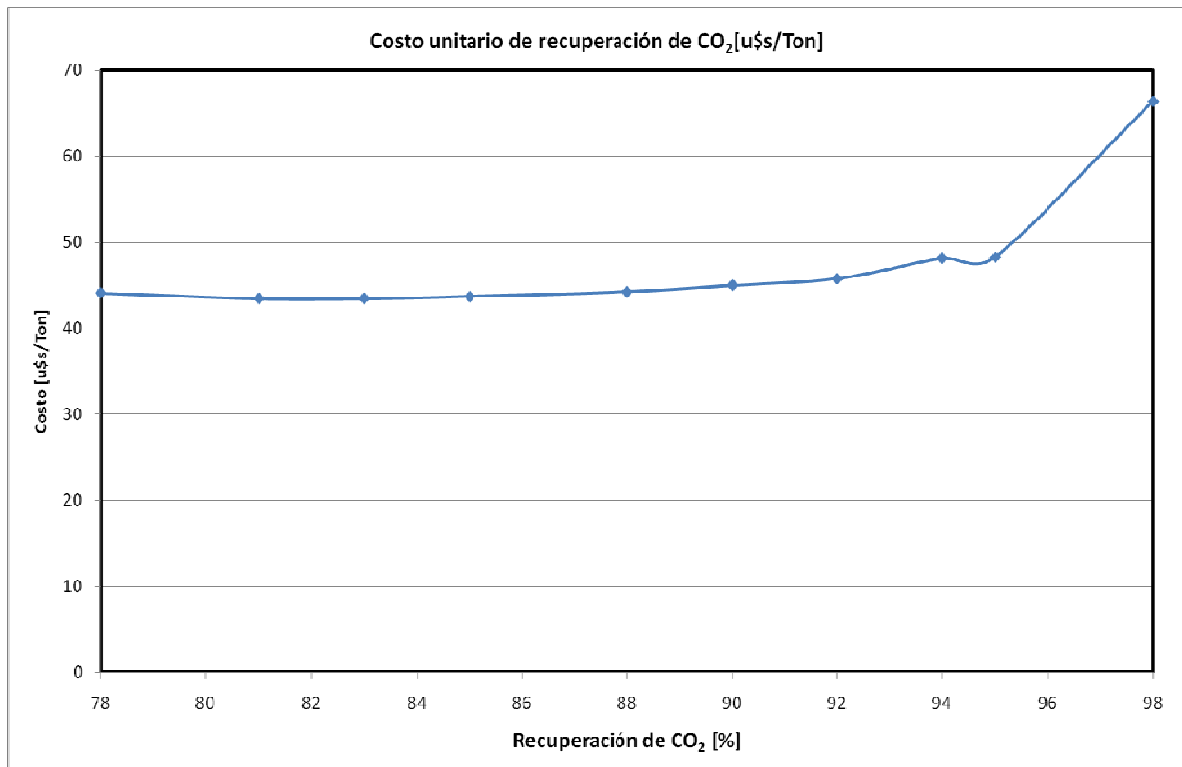


Figura IV.39: Costo Unitario de Recuperación en flue gas concentrado

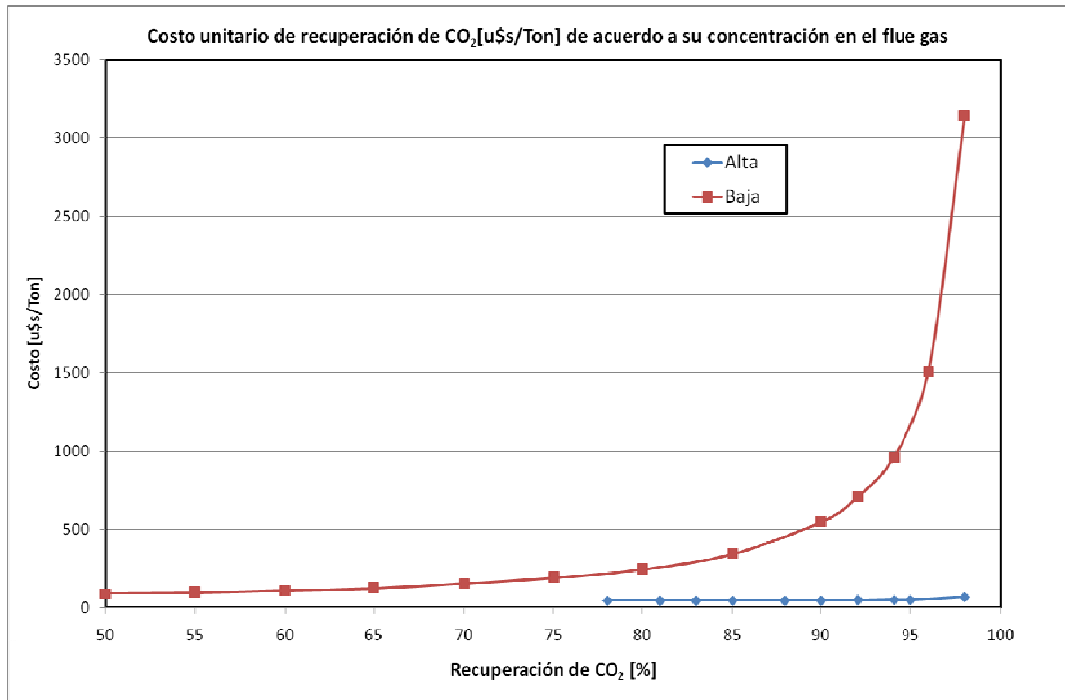


Figura IV.40: Comparación de costos unitario para flue gas concentrado y diluido

Si se pretende optimizar la planta completa, esto es la de generación de potencia acoplada a la de captura de dióxido de carbono, resulta claro que el exceso de aire utilizado en la turbina de gas resulta una variable crítica para la optimización del sistema. Basta con observar la fuerte diferencia de precios en la captura de una tonelada de CO<sub>2</sub> según las condiciones del gas de entrada a planta.

Como es de esperar, cuando se optimizan las plantas por separado, se obtienen soluciones específicas para cada una, ya que no existe el acople y los balanceos o contrapuntos entre los modos de operación y costos asociados, explicados más arriba.

En el caso de estudio presentado a continuación se analizan los resultados de la optimización de una planta completa acoplada.

#### IV.5.2 Caso de estudio 6: Generación de potencia con captura de CO<sub>2</sub>.

Se considera una planta que genera una potencia neta de 427 [MW] y captura el 98 % del dióxido de carbono que produce en la combustión del combustible. El combustible empleado es, como se ha venido estudiando a lo largo de este trabajo, gas natural y la absorción se realiza a través de un esquema post combustión con solución de Dietanolamina (DEA).

A continuación se muestran los resultados en forma de tabla incluyendo flujos, parámetros principales de los equipos más importantes, costos operativos, costos de generación de electricidad y de captura, perfiles de temperatura y composición de CO<sub>2</sub> entre otros.

En la tabla IV-19 y IV-20 se resumen las condiciones asumidas para las corrientes de entrada a la planta.

	Unidades	Gas	Aire	Agua	DEA
Fracción Vaporizada		1.000	1.000	0.000	0.000
Temperatura	[°K]	298.15	298.15	373.471	308.15
Presión	[atm]	8.5	1	30	1.000
Flujo Molar	[Kgmol/h]	5.443 10 <sup>3</sup>	1.241 10 <sup>5</sup>	5.754 10 <sup>4</sup>	8.837 10 <sup>5</sup>
Flujo Másico	[Kg/s]	24.256	994.976	288	5000

Tabla IV-19: Datos de las Corrientes de entrada

DEA	Fracción Másica
CO <sub>2</sub>	0.01100
H <sub>2</sub> O	0.85754
DEA	0.13146

Tabla IV-20: Composición de la corriente de DEA

En la tabla IV-21 se muestra un resumen de los costos de capital para los principales equipos de la planta en las condiciones óptimas, mientras que en la tabla IV-23 se muestran los costos operativos.

Operaciones Unitarias	Cost [u\$]	Operaciones Unitarias	Cost [u\$]
Compresor Turbina de Gas	1.34383 10 <sup>7</sup>	Blower	2.46675 10 <sup>7</sup>
Precalentador de Aire	2.67984 10 <sup>4</sup>	Enfriador primario	2.37196 10 <sup>6</sup>
Combustor Turbina de Gas	8.43105 10 <sup>7</sup>	Columna Absorbadora	1.69374 10 <sup>6</sup>
Expansor Turbina de gas	1.33752 10 <sup>7</sup>	Intercambiador LR-HEX	5.80014 10 <sup>6</sup>
Precalentador de agua	9.40148 10 <sup>4</sup>	Columna Recuperadora	1.86580 10 <sup>6</sup>
Caldera (incluye recalentador)	8.69879 10 <sup>6</sup>	Enfriador de gas	1.49592 10 <sup>6</sup>
Turbina de Vapor	2.87671 10 <sup>7</sup>	Bomba de reciclo de DEA	1.15577 10 <sup>4</sup>

Condensador	6.22102 10 <sup>4</sup>	Condensador de la Columna	7.81906 10 <sup>4</sup>
Bomba de reciclo de agua	8.46967 10 <sup>5</sup>	Rehervidor de la Columna	5.03094 10 <sup>5</sup>
		Enfriador final	8.30929 10 <sup>4</sup>
<u>Total</u>	<u>1.49620 10<sup>8</sup></u>	<u>Total</u>	<u>3.85710 10<sup>7</sup></u>

Tabla IV-21: Costos de Capital (costos fijos)

En la siguiente tabla se indican los porcentajes correspondientes a cada planta, respecto de la inversión total.

Potencia	Absorción	Total	
1.50 10 <sup>8</sup>	3.86 10 <sup>7</sup>	1.88 10 <sup>8</sup>	[u\$]
79.504	20.496	100.000	[%]

Tabla IV-22: Contribución relativa al costo de ambas plantas

Ciclo de Potencia	[u\$seg]	Planta de Absorción	[u\$seg]
Gas Natural	4.85136	Servicios Auxiliares	4.09301
Servicios Auxiliares	0.33712		

Tabla IV-23: Costos Operativos (costos variables)

En las tablas IV-24 y IV-25 se muestran el costo unitario de captura de dióxido de carbono (por tonelada capturada) y el costo de generación en la planta de potencia. Por último, en la tabla IV-26 se muestra la potencia neta obtenida por el sistema acoplado.

	98.46	[%]
Flujo Másico de CO <sub>2</sub>	2.35855 10 <sup>5</sup>	[Kg/h]
Costo Unitario	66.418	[u\$Ton]

Tabla IV-24: Costo de la captura del Dióxido de Carbono

	[u\$seg]	[u\$KW h]
Ciclo de Potencia	6.19072	0.05214
Planta de Absorción	4.35138	0.03665
Total	10.54211	0.08879

Tabla IV-25: Costo de Generación de la Electricidad

POTENCIA		
Parámetro	Valor	Unidades
Turbina de Gas – Compresor	344	[MW]
Turbina de Vapor	137	[MW]
Blower	54	[MW]
Potencia Neta	427	[MW]

Tabla IV-26: Valores de Potencia obtenida

Con respecto a las propiedades o características de la solución óptima encontrada, se indican en la tabla IV-27 las condiciones de operación y propiedades de la caldera, y en la Figura IV.41 un perfil de temperaturas en dicho equipo y el precalentador.

CALDERA		
Parámetro	V	Unid
Presión de Operación	30	[atm]
Mínimo $\Delta T$	30	[°K]
Temperatura del Vapor recalentado	578	[°K]

Tabla IV-27: Caldera

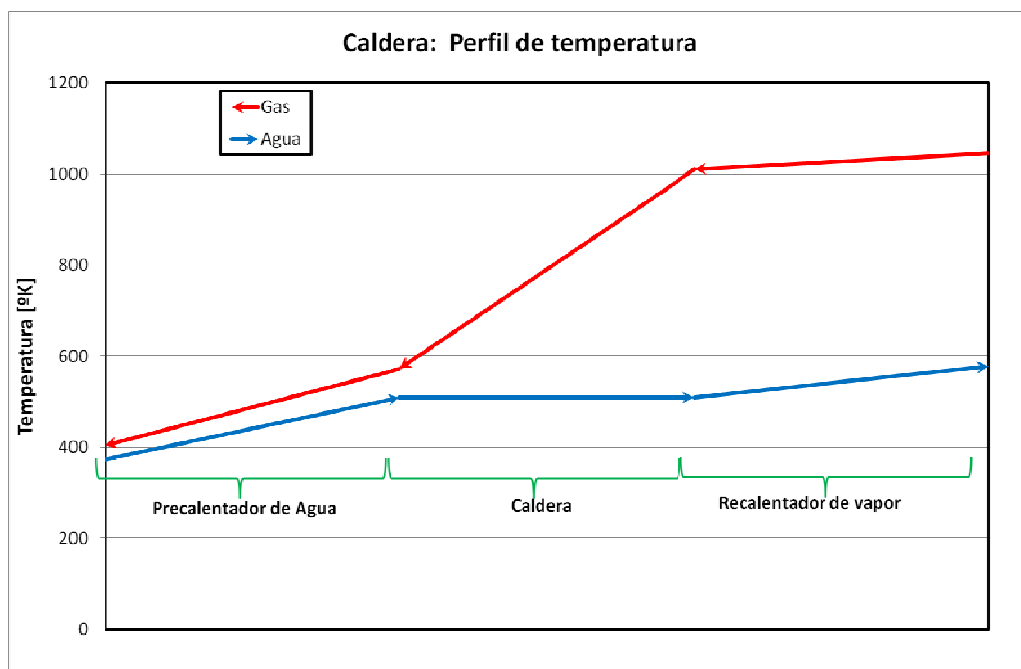


Figura IV.41: Perfil de temperaturas en Caldera y Precalentador

En la tabla IV-28 se muestran las características de la columna absorbidora, mientras que en la Figura IV.42 y IV.43 se muestran los perfiles internos de composición de dióxido de carbono y de temperaturas respectivamente, en dicha columna.



COLUMNA ABSORBEDORA		
Parámetro	Valor	Unidades
Numero of Etapas	10	[adim]
Presión de tope de Columna	1.000	[atm]
Presión en fondo de Columna	1.200	[atm]
Diámetro	19.66	[m]
Altura	6.096	[m]
Tipo de Internos	Campanas de burbujeo	

Tabla IV-28: Columna Absorbadora

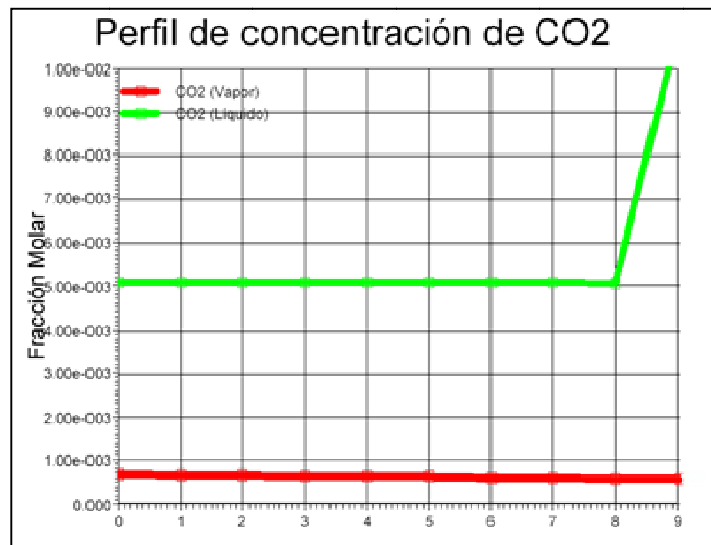


Figura IV.42: Perfil de Concentración de CO<sub>2</sub> en Columna Absorbadora

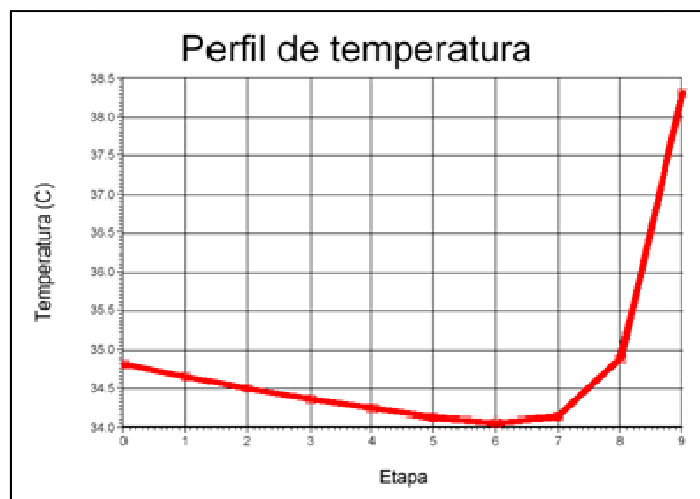


Figura IV.43: Perfil de Temperatura en Columna Absorbadora

Finalmente, En la tabla IV-29 se muestran las características de la columna recuperadora, mientras que en la figura IV.4 y IV.45 se muestran los perfiles internos de composición de dióxido de carbono y de temperaturas respectivamente, en dicha columna.

COLUMNA RECUPERADORA		
Parámetro	Valor	Unidades
Número de etapas	10	[adim]
Presión en Condensador	0.400	[atm]
Presión en Rehervidor	0.600	[atm]
Tipo de Condensador	Reflujo Total	
Tipo de Rehervidor	Kettle	
Carga en el Condensador	$2.42689 \cdot 10^8$	[KJ/h]
Carga en el Rehervidor	$1.76514 \cdot 10^9$	[KJ/h]
Diámetro	19.81	[m]
Altura	6.096	[m]
Tipo de Internos	Campanas de	
Relación de Reflujo	0.71083	[adim]

Tabla IV-29: Columna Recuperadora

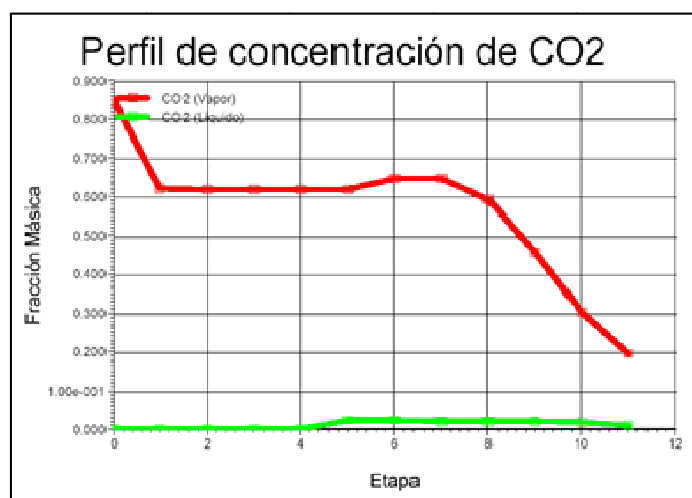
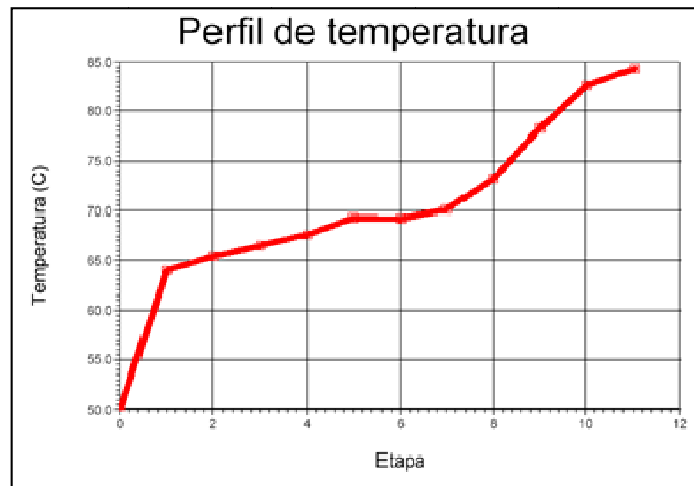


Figura IV.44: Perfil de Concentración de CO<sub>2</sub> en Columna Recuperadora



*Figura IV.45: Perfil de Temperatura en Columna Recuperadora*

Uno de los puntos esperados es el hecho que la solución de la planta de generación acoplada con la de captura es marcadamente diferente de ambas soluciones por separado. En efecto, si se considera fija la corriente de gas de la planta de generación de potencia que se alimenta a la planta de captura, y ésta se optimiza en forma independiente, los parámetros de operación no resultan los mismos; igualmente sucede con la optimización de la planta de generación de potencia, fijando la producción correspondiente, pero eliminando la planta de captura de dióxido de carbono.

Lo anterior es importante ya que, tal como describimos, condiciones operativas favorables del ciclo de potencia podrían hacer que la planta de absorción fuera excesivamente costosa dado que el caudal de flue gas resultaría con concentraciones de CO<sub>2</sub> muy bajas.

Los resultados obtenidos para este caso de estudio para una planta que genera 491 [MW] indican un costo de inversión de generación de  $1.50 \cdot 10^8$  [u\$s]; esto es un costo unitario de 5.21 centavos de dólar por cada kilowatio hora. Para obtener el requerimiento impuesto de captura de CO<sub>2</sub> en un valor importante (98 %) se requiere una inversión y un gasto de operación significativo, incidiendo fuertemente en el costo de generación. En efecto, el costo unitario de generación se eleva en un 70 % (8.879 centavos de dólar por cada KW h). Para hacer atractiva esta inversión adicional se deberá recurrir a un manejo más eficiente de la energía, servicios adicionales, al incentivo de mercado de bonos de carbono o a regulaciones gubernamentales que así lo exijan.

Debe tenerse en cuenta que se puede considerar capturas de dióxido de carbono menores al 98% (aquí impuesto en el caso de estudio), y por lo tanto lograr costos de operación e inversión menores, aunque debe compatibilizarse dicha situación con las emisiones potencialmente permitidas por la legislación de referencia a considerar.

#### **IV.5.3 Comparación de resultados con otros autores**

En el trabajo publicado por [Poggi, y col., (2004)] se analiza una planta de cogeneración quemando gas natural, de 600 MW. La planta de captura adoptada responde a una filosofía pre-combustión. En ese caso, el costo total estimado para los equipos de dicha planta resulta de  $u\$s 3.01 \cdot 10^8$ , que los autores mencionan de una magnitud significativa comparada con la inversión real que demandó la instalación de la central térmica de referencia  $-u\$s 5.90 \cdot 10^8-$  (planta perteneciente al sistema de generación nacional). Reportan además que el costo de la unidad de reformado ( $u\$s 2.29 \cdot 10^8$ ) equivale al 76% del costo total de compra e instalación del equipamiento mayoritario en la planta de tratamiento pre-combustión. Este resultado refleja que la producción de  $H_2$  en la unidad de reformado es el componente más demandante en los procesos de captura de  $CO_2$  previa a la combustión. El costo de todos los intercambiadores de calor ( $u\$s 6.9 \cdot 10^7$ ) es el segundo en importancia y representa casi el 23% del costo total calculado. Este costo está dominado por la batería de intercambiadores requerida para la recuperación de calor entre las corrientes de solvente en la unidad de remoción de  $CO_2$ . El costo del absorbedor y de la columna de destilación ( $u\$s 2 \cdot 10^6$ ) es relativamente bajo cuando se lo compara con el resto del equipamiento detallado. Los autores mencionan la baja incidencia de este costo con respecto al caso de la captura de  $CO_2$  posterior a la combustión (post combustión) reportado por Amadeo et al (2004), que considera el mismo caudal de gas natural alimentado a la central de referencia analizada en (Poggi, y col., 2004). Se concluye allí que en la opción de captura post-combustión el costo del equipamiento de separación representa la contribución mayoritaria. Esta tendencia también puede afirmarse al analizar los resultados obtenidos en esta tesis.

En primer lugar, de la cita se desprende que la central de referencia, para la producción de 600 MW, tiene un costo (año 2000) de  $5.9 \cdot 10^8$ . Para nuestro caso existe una discrepancia en el costo de inversión, que puede ser atribuido a costos no considerados en la función objetivo en el presente trabajo. Por otra parte, de los datos

extraídos de (Poggi, y col., 2004), se muestra que el costo de la planta de pre-combustión es de aproximadamente el 30% de la planta total (captura + generación). En nuestro caso, la planta de post combustión resulta de aproximadamente un 21% del costo de la planta total. Es decir, de los trabajos citados y del nuestro se concluye que la inversión relativa de una planta de pre-combustión o bien de post-combustión, respecto del total de la planta integrada resulta de entre un 20 al 30%, siendo menor para nuestros parámetros de costos utilizados, la inversión que corresponde a una planta de post-combustión.

Por último, el costo de las columnas de separación reportados por el estudio de [Amadeo et al (2004)], para la planta post-combustión es de u\$s  $5 \cdot 10^7$ . En nuestro caso y escalando a 600 MW, obtenemos un costo de u\$s  $1.8 \cdot 10^7$ , que resulta del mismo orden de magnitud. Esto coincide con la observación acerca que el costo dominante en las plantas post-combustión es el de separación del  $\text{CO}_2$ , mientras que en las plantas pre-combustión el costo dominante es el de los reactores respectivos para la obtención del  $\text{H}_2$  combustible.

En un reporte realizado para el Departamento de Energía, USA, Kevin S. Fisher y col (2005) reportan para una planta termoeléctrica alimentada a carbón, de 500 MW, y con una captura de 95% del  $\text{CO}_2$ , una producción neta de potencia de 260 MW, una recuperación de 430 toneladas de  $\text{CO}_2$  /hr (una emisión de 23 tn/hr de  $\text{CO}_2$ ), un costo anualizado de la planta de generación de u\$s  $8.4326 \cdot 10^7$  (para nuestro caso y escalado es de u\$s  $1.55 \cdot 10^8$ ), un costo para la planta de recuperación de  $\text{CO}_2$  de u\$s  $5.247 \cdot 10^7$  (en nuestro trabajo, y escalado es de u\$s  $4 \cdot 10^7$ ). El costo de la electricidad generada es de 0.07075 u\$s /Kw (nuestro caso de estudio y escalado 0.08879 u\$s /Kw). Se aprecia una coincidencia importante, aunque la planta de generación citada utiliza como combustible carbón bajo otra tecnología.

Esto implica un costo total de la planta con sistema de captura de u\$s  $1.368 \cdot 10^8$  (Fisher y col 2005), con un porcentaje respecto al total del costo, atribuible a la planta de captura de 38% aproximadamente, mayor a nuestro caso que representa el 21%. Aunque aquí el hecho de la quema de carbón como combustible tiene un impacto mayor sobre la inversión necesaria en la planta de captura.

## **IV.6 Conclusiones:**

Se ha presentado una serie de modelos para la simulación y optimización paramétrica de procesos de captura de CO<sub>2</sub> por postcombustión, utilizando diversas aminas, solas o conformando una mezcla binaria de las mismas. Se han obtenido resultados y comparados la performance del modelo con otros publicados, resultando tanto la flexibilidad y la robustez, como los resultados obtenidos, muy aceptables.

Se ha también propuesto un modelo “reducido” en cuanto a la estimación de las principales variables óptimas para un objetivo de diseño especificado. Aunque simple de utilizar, este modelo aproxima muy bien los resultados obtenidos con el modelo de proceso de captura riguroso.

Por otra parte, se ha abordado, a partir de los modelos desarrollados para la simulación y optimización de procesos de cogeneración de potencia en el capítulo II (típicas para su utilización en plantas duales); la simulación y optimización de procesos de cogeneración acoplados a sistemas de captura de CO<sub>2</sub> por postcombustión, descrito en este capítulo.

Para este último caso, se ha logrado una herramienta robusta, flexible y capaz de abordar distintos problemas de diseño, combinando diversas alternativas, tanto para el sistema de cogeneración como para el sistema de captura, al integrarlos en un complejo específico según objetivos especificados.

Puede además optarse por estrategias de resolución tanto de problemas de simulación u optimización que aborden el mismo en etapas sucesivas, cada una resolviendo un problema de complejidad creciente, utilizando los resultados obtenidos de la etapa anterior.

Por ejemplo, pueden utilizarse modelos simplificados y posteriormente rigurosos, utilizar los resultados previos para inicializaciones o bien para fijar parámetros en valores estimativos del óptimo de diseño según se ha mostrado a lo largo de la resolución de los diversos casos de estudio, tanto en este como en los anteriores capítulos.

Por último, es interesante mencionar que la flexibilidad y versatilidad de la herramienta generada es producto de un direccionamiento o planificación en función de

los tres objetivos principales propuestos para esta tesis, la formulación y diseño óptimo de sistemas duales (producción de agua y energía eléctrica) sustentables (o sea en este caso acoplados a una planta de captura de CO<sub>2</sub> por postcombustión).

Dado que tanto para el proceso de generación de potencia como para el desalador y la planta de captura se disponen de diversos grados de rigurosidad que pueden combinarse fácilmente según se verá en el próximo capítulo para definir una metodología de diseño e tales sistemas.

## Capítulo V

### *Modelado, simulación y optimización de procesos duales (generación de potencia y agua potable) acoplados a plantas de captura de CO<sub>2</sub>*

#### *V.1 Introducción*

El diseño de Procesos Químicos es una tarea altamente compleja, ya que debe obtenerse una solución técnica y económicamente satisfactoria. Los simuladores de procesos permiten agilizar esta tarea a través del modelado, simulación y optimización. En los capítulos anteriores se ha mostrado cómo una herramienta de este tipo (Hysys®), puede utilizarse para modelar, simular y optimizar plantas de generación de potencia, plantas de desalinización de aguas de mar, y los sistemas duales que integran ambas tecnologías con el propósito de minimizar el consumo energético y producir agua potable y energía para poblaciones asentadas en áreas geográficas carentes de agua dulce, y linderas al mar, por ejemplo.

Por otra parte, se ha utilizado la herramienta para simular y optimizar una planta de captura de CO<sub>2</sub> para minimizar la emisión de gases de efecto invernadero a la atmósfera, en procesos de generación de energía en los cuales se queman combustibles fósiles, por ejemplo gas natural. La sustentabilidad a largo plazo de la producción de energía, exige la minimización de gases de efecto invernadero; pero por otro lado, vimos que la integración de plantas de captura a plantas de generación de energía exige inversiones importantes y consumos energéticos elevados, lo que implica una elevación de magnitud del costo de la energía producida. Es por ello que la optimización y el diseño de alternativas que minimicen costos resulta importante social y económicamente.

Es necesario destacar que este problema del costo elevado lo comparten las plantas duales de generación de energía eléctrica y agua potable. En efecto, si bien la integración logra reducir el costo de generación de ambos productos, al compartir la energía de desecho del ciclo de potencia como fuente de calentamiento en el evaporador para producir agua potable; lo cierto es que la emisión de gases de efecto invernadero no se reduce, y por lo tanto, el proceso no es sustentable desde este punto de vista. Para resolver este inconveniente, una alternativa válida consiste en acoplar a la planta dual (ciclo de potencia, planta de desalación) una planta de captura de CO<sub>2</sub>, incrementando sustancialmente el costo.



En este capítulo se estudiará el diseño de tales sistemas, partiendo de las herramientas desarrolladas y las conclusiones obtenidas en los capítulos anteriores, en los cuales se ha estudiado las propiedades de cada subsistema por separado, o bien ciertas integraciones promisorias, tales como el acoplamiento de plantas de cogeneración con desaladores para producir agua potable a partir de agua de mar, o plantas de capturas de CO<sub>2</sub> a las plantas de cogeneración, para lograr sustentabilidad. Si bien ha sido factible el modelado y la optimización de tales sistemas, se ha encontrado que la resolución computacional rigurosa resulta costosa. También se ha comprobado que las características de los óptimos que describen cada planta por separado, como era de esperarse, son solo una guía; importante, pero no suficiente, para describir el óptimo de los sistemas acopados o integrados, ya que las interacciones de ligadura imponen un nuevo problema, muy diferente al que surge de optimizar cada subsistema por separado.

Dentro de este contexto, dadas las características de los tres procesos a integrar, y las múltiples posibilidades estructurales posibles, el problema resulta aún más complejo. Las soluciones óptimas que describen cada sistema por separado, y aún aquellas que caracterizan los subsistemas acoplados individualmente (plantas duales y plantas de captura acopladas a la planta de cogeneración), son suficientes para describir el óptimo de una planta que integre los tres procesos aludidos.

En este capítulo, a partir del análisis de las soluciones obtenidas para los subsistemas analizados en el capítulo II y III (plantas de desalación y duales) y el capítulo IV (plantas de captura acopladas a ciclos de cogeneración), se propondrá una estrategia de optimización de la planta o complejo integrado (planta de captura acoplada a una planta dual de producción de agua potable (cogeneración – EFME).

## ***V.2 Modelado y Estrategia de Resolución***

En el problema a abordar, podemos diferenciar dos grandes tipos de variables a los efectos de conformar el modelo del proceso integrado que cumpla con las necesidades requeridas.

Por una parte, debemos seleccionar una estructura considerando diferentes alternativas dentro de una superestructura (el espacio de todas las alternativas posibles), para lograr los objetivos deseados de una manera eficaz. Por otra, dada cada alternativa

estructural, debemos optimizar las variables intensivas / extensivas asociadas según un objetivo de diseño.

En lo que sigue, se desarrollará paso a paso la estrategia de modelado y resolución del problema de diseño óptimo de una planta dual, acoplada a un sistema de captura postcombustión mediante absorción con aminas, objetivo principal de la tesis, tomado como punto de partida de los modelos y estrategias ya descritas en los capítulos anteriores.

Como se ha mencionado, al acoplar una planta de producción de energía eléctrica y agua potable se comparten el consumo de energía y cierto costo común, pero se sigue emitiendo la misma cantidad de gases de efecto invernadero por unidad de potencia producida o bien de agua potable elaborada. Si se requiere además la minimización de estas emisiones, el problema que se presenta es similar al caso descrito en el capítulo anterior, es decir, la obtención de un proceso de producción de energía eléctrica minimizando las emisiones, pero ahora mucho más complejo, ya que además, se debe acoplar la planta productora de agua potable a partir de agua de mar o salobres. Esto es, aumenta el costo de los productos que son indispensables para el desarrollo humano.

En la actualidad existen trabajos publicados para el diseño y análisis de procesos de producción de energía eléctrica con captura de gases de efecto invernadero, en general basados mayormente en un análisis por simulación y eventual optimización de las variables operativas principales [Romeo y col. (2007)], [Bozzuto y col. (2001)], [Desideri and Paolucci (1999)], [Mimura y col. (1995)], [Feron P. (2006)]. El diseño se obtiene en principio en los casos publicados apelando al juicio creativo del diseñador, y no apelando a metodologías sistemáticas y probadas de diseño óptimo. Recientemente, en nuestro grupo de trabajo, se han realizado contribuciones a la síntesis estructural de tales procesos, resolviendo los problemas de optimización mediante programación matemática utilizando por ejemplo GAMS [Patricia Mores, Juan Ignacio Manassaldi y Nicolás Scenna (2014)].

No se han publicado aún trabajos que enfoquen, sin embargo, la síntesis y diseño del proceso objeto de estudio aquí descrito que contemple tratamientos de emisiones gaseosas y que simultáneamente considere un profundo nivel de detalle e involucre una “superestructura” que incluya las potenciales configuraciones no sólo para el proceso de

tratamiento integrado (sistema dual de producción de energía por cogeneración y agua potable) sino también para el proceso de captura de CO<sub>2</sub>.

En general, según se expuso, la síntesis del flowsheet implica la toma de decisiones en el espacio de todas las estructuras posibles, y en el espacio de todas las variables de operación asociadas a cada una de las estructuras. Las “variables estructurales” especifican la presencia de equipos y las vinculaciones entre ellos. Las “variables de operación” representan las condiciones de operación del sistema, como por ejemplo temperatura, presión y caudal, entre otras.

En esta tesis se pretende obtener el diseño geométrico (diámetros de carcaza, número de tubos y área de transferencia de calor en los pre-calentadores, por ejemplo) y las condiciones operativas (gradientes de temperaturas y presiones, flujos, velocidad del líquido dentro de los tubos de pre-calentamiento, evaporación y sobrecalentamiento, entre otras) que minimicen el costo total anual, acercándonos más a la ingeniería de detalle y alejándonos de la ingeniería conceptual “clásica”. Si además de estos parámetros en el desalador se pretende determinar similarmente condiciones de operación y el diseño geométrico del proceso de captura, involucrando a la estructura como una variable del problema (número de etapas en la columna de absorción/desorción, trayectorias posibles de las corrientes de proceso), entre otras variables estructurales, el problema crece en complejidad. Más aún si se pretende que el sistema de cogeneración sea compatible con las turbinas existentes en la realidad.

La tarea de síntesis y diseño de cualquier proceso continuo o discontinuo exige, como hemos remarcado, desde el punto de vista de la programación matemática, la formulación y resolución de un problema matemático mixto entero no lineal (MINLP) o eventualmente un modelo matemático disyuntivo (GDP) involucrando decisiones discretas y continuas. Las decisiones discretas están relacionadas a las posibles unidades estructurales de la planta mientras que las decisiones continuas están relacionadas con las variables de operación (temperatura, presión, caudal, etc.).

En nuestro problema, esta metodología de trabajo exige el planteo de una “superestructura de configuraciones” que incluya un conjunto de alternativas de interés tanto para el proceso de generación dual, como también para las posibles alternativas de captura de CO<sub>2</sub>. En general, la postulación de una superestructura asociada a un proceso no resulta una tarea sencilla, ya que son varios los factores que deben considerarse. Una vez formulada la superestructura que embeba no sólo las distintas

alternativas para la producción de energía sino también su correspondiente tratamiento de las emisiones, se deberá proponer una metodología de resolución robusta y flexible ya que el número de variables involucradas en el modelo y el carácter combinatorio debido a la componente estructural del problema (topología de equipos) dificulta su resolución. El empleo de modelos basados en “superestructura” permite encontrar estructuras novedosas y atractivas ya que éstas surgen como resultado de considerar configuraciones alternativas en forma simultánea, pero la contrapartida es que resulta harto difícil construir modelos rigurosos para procesos complejos, y además, lograr una solución en forma robusta, flexible, y aún lograr convergencia, para ciertos casos.

Resulta claro que el problema que nos ocupa impone la consideración de un número grande de alternativas estructurales y la necesidad de contemplar detalles de las operaciones difícilmente incorporables a programas matemáticos. Esto sucede a menudo cuando se pretende resolver problemas tecnológicos de mediano a gran tamaño.

Otro camino interesante de resolución para un problema complejo como el propuesto en esta tesis, es recurrir a la metodología desarrollada en el campo de la teoría general de sistemas. Los postulados de la teoría general de sistemas aconsejan una división del problema en sub-problemas más sencillos, con una determinada estrategia, para luego componer la solución a partir de las soluciones parciales. Dentro de este contexto, el núcleo central de la tarea de diseño en la ingeniería de procesos, de acuerdo a la visión de descomposición del problema global en subproblemas, está constituido por el lazo iterativo síntesis/análisis/evaluación-optimización.

Ahora bien, existen varias alternativas de descomposición, tales como la estrategia de la cebolla [Linnhoff y Townsed (1982)], [Shenoy (1995)] y el enfoque jerárquico de [Douglas (1988)], entre otras. El modelo de la cebolla provee un cuadro esquemático de la jerarquía adoptada para la partición, que comienza con la síntesis de los caminos de reacción química, el corazón de la cebolla, evolucionando hacia la síntesis de la red de reactores, considerando la selectividad y capacidad. El diseño del reactor y las especificaciones de los productos determinarán el diseño del sistema de separación (y reciclos). Las tareas de reacción y separación definen en gran parte los requerimientos de energía, por lo que la cuarta capa involucra la síntesis de la red de intercambio energético. Dado que la recuperación de energía entre corrientes es generalmente insuficiente para encontrar las necesidades de energía total, se requieren servicios auxiliares externos, por lo cual, la quinta etapa es el diseño del sistema del

servicio auxiliar. Para considerar cuestiones de operabilidad, la capa posterior involucra el diseño del sistema de control.

Ninguna capa de la cebolla puede diseñarse antes de especificar las capas internas, y simultáneamente, las capas internas no pueden lograrse sin diseñar la cebolla completa y considerar las interacciones. La estrategia propuesta por Douglas propone que el problema de síntesis y análisis para el problema completo sea descompuesto según un enfoque jerárquico, en el cual a partir de una solución inicial aproximada y a través de distintos refinamientos de la misma, se evolucione hacia la solución final del problema. En otras palabras, el enfoque jerárquico de Douglas descompone al problema completo en una serie de sub-problemas proponiendo una jerarquía de decisiones.

En cualquier estrategia, el espacio de alternativas a analizar, si el proceso es complejo, crece exponencialmente, lo cual implica que deben adoptarse hipótesis para lograr soluciones factibles. Se han intentado y publicado en la bibliografía estrategias para lograr un método de resolución que combine las ventajas que ofrecen la programación matemática y la síntesis heurística. En otras palabras, una metodología para sintetizar un proceso complejo, evitando las limitaciones que impone la resolución de problemas MINLP de alta dimensión y complejidad. Para ello, se ha propuesto utilizar simuladores comerciales en el problema de optimización o síntesis de procesos, de tal forma de lograr utilizar una herramienta existente. Por ejemplo [Caballero et al, (2005)] presentaron un método para la síntesis de columnas de destilación y secuencias de las mismas utilizando simuladores de procesos comerciales. [Caballero y Grossman (2006)] proponen la integración de un programa de optimización MINLP con un simulador modular secuencial para la síntesis de procesos, mientras que [Diwekar M et al (1992)] y [Renuame K and Julia J. (1995)], proponen otras variantes híbridas para el mismo problema.

[Francesconi y col., (2005)] enfocan la optimización de un proceso para la integración energética del sistema de reformado a partir de bioetanol para celdas de combustibles, utilizando el simulador HYSYS® y la técnica del pinch para el cálculo de mínimo consumo energético. Por otra parte, [Glavic y col. (2006)], [Howe y col. (2005)], han propuesto procedimientos de síntesis en etapas, utilizando herramientas de simulación e integración energética. [Pelster y col. (2001)] aplican un algoritmo genético para la resolución del MINLP asociado a la síntesis de un sistema de generación de potencia, considerando en forma paramétrica el sistema de tratamiento de

gases (costos), argumentado la dificultad extrema para la resolución del MINLP asociado si se pretendiera utilizar programación matemática. En el trabajo de [Martínez y col. (2006)] se plantea la simulación de un sistema de generación de potencia utilizando carbón gasificado como combustible. El análisis y la optimización se realizan mediante simulaciones paramétricas, dada la dificultad de modelado del proceso completo.

[Rodríguez, (2008)] propone una metodología para la optimización de sistema de cogeneración y captura de CO<sub>2</sub> (post-combustión), contemplando el diseño riguroso de todos los equipos, y del proceso completo, utilizando el simulador de procesos (HYSYS®). Se propone además, una estrategia para la síntesis del proceso, combinando el uso del simulador y utilitarios para el diseño de redes de intercambio óptimas; aunque no se presentan resultados para la integración estructural del proceso de cogeneración y captura de CO<sub>2</sub>.

La idea principal en la metodología en los trabajos anteriormente citados, es lograr una estrategia de síntesis que sea rigurosa (empleo de simuladores con sus modelos rigurosos), menos costosa en desarrollo (las herramientas existentes son utilizadas) y además, que abarque todo el proceso, en forma detallada, evitando programar y resolver una superestructura de alternativas.

Si bien en los trabajos mencionados se logran avances, puede afirmarse que todavía no se ha alcanzado la flexibilidad suficiente para utilizar en forma sencilla las herramientas existentes para lograr el diseño óptimo de procesos complejos como el que se aborda en la presente tesis. En particular, la síntesis de los algoritmos estratificados en jerarquías por niveles de decisión, como los mencionados más arriba, complementados con metodologías o estrategias de decisión que permitan maximizar la utilización de herramientas existentes a los efectos de minimizar el esfuerzo de programación y cálculo, ante cualquier problema de diseño óptimo de procesos, luce atractiva y prometedora, pese al sacrificio que se realiza respecto a la “calidad” del “óptimo” que resulte de tal metodología.

Con respecto a este punto, huelga comentar que ni siquiera se puede ponderar tal brecha, debido a que para ello debería primero definirse cuál es la métrica o parámetro respecto del óptimo a calcular; habida cuenta que basta con modificar la función objetivo o las restricciones, para modificar drásticamente las conclusiones que se obtengan. Además, para cualquier métrica de evaluación debe contemplarse si la

función objetivo es única o con múltiples objetivos, o incorporar parámetros como flexibilidad, controlabilidad, seguridad, entre otros. Esto permite visualizar el problema que enfrentamos cuando pretendemos fijar criterios reales de comparación entre óptimos para un diseño dado. Más aun considerando que para comparar primero debemos asegurar el óptimo global como referencia, aún para un problema sencillo, con un solo objetivo.

Básicamente, como se expuso, el proceso será modelado en forma detallada considerando los balances rigurosos de materia, energía y cantidad de movimiento para cada una de las partes integrantes u operaciones involucradas (platos o altura de relleno en columna de destilación, geometría de los precalentadores, o de las cámaras flash), entre otros aspectos. El procedimiento permitirá obtener el número de etapas de evaporación, las dimensiones de las etapas de flasheo (longitud, ancho, altura) y las condiciones operativas (perfiles de presión, temperatura, composición, caudales, distribuciones de áreas, entre otras). La introducción de la geometría de las etapas es muy importante ya que permite computar el volumen de material asociado a la construcción del evaporador y así calcular en forma rigurosa el costo de inversión asociado; de manera tal de obtener un diseño óptimo a nivel de ingeniería cercana a la de detalle.

Un nivel de complejidad se caracteriza por optimizar un proceso cuya estructura fija, surja del acoplamiento directo de los procesos estudiados en los capítulos anteriores, según las conclusiones parciales obtenidas en cada caso particular. Esta estrategia puede denominarse integración en serie o lineal, ya que estructuralmente no se recurre a una integración energética, pero se logra una mayor robustez y flexibilidad en los procesos, ya que no existen ciclos importantes entre los sistemas integrados. Aquí debe optimizarse las variables intensivas del proceso, de tal forma de minimizar el costo total de operación. Otra cuestión importante es la complejidad del modelo resultante, ya que un modelado riguroso del desalador, la planta de captura y el sistema de cogeneración, hace muy difícil cualquier intento de optimización si se requiere considerar todas las variables del proceso que puedan considerarse relevantes; aun cuando las variables estructurales, por ejemplo integración energética, variación del número de etapas en las columnas o el desalador, entre otras, no se consideren y se fijen en valores previamente adoptados.

Una alternativa es utilizar modelos simplificados de alguna de las plantas, que como hemos visto en los capítulos anteriores, aproximan con precisión ciertas variables óptimas, según sea el grado de complejidad del mismo. Por lo tanto, además del modelo riguroso, pueden existir una variedad de modelos, en los cuales se mantiene una descripción rigurosa en alguno de los subsistemas, y se simplifican otros. Cuanto más detallado el modelo, más difícil resultará su solución, pero la desagregación de los resultados permite luego abordar la síntesis estructural considerando integración energética. En el otro extremo, los modelos simplificados, que agregan o concentran variables, permiten lograr soluciones más fácilmente, pero se dificulta la integración energética posterior, ya que se pierde referencia a las variables o corrientes internas, por ejemplo flujos entre etapas, áreas en cada etapa, flujos en las columnas de destilación, entre otras.

Resulta claro, que al introducir para la integración tres procesos en lugar de dos (como en los casos discutidos en capítulos anteriores), el espacio estructural crece, y por lo tanto, también lo hace la posibilidad de integración energética para recuperar calor de las corrientes calientes, en forma exitosa. Si bien en el caso del desalador, dado su única fuente de calor necesaria a una temperatura acotada, y en el caso del sistema de captura, similar en cuanto a la demanda de la columna de destilación; relativizaban la potencialidad de una integración a través de una red de intercambiadores que redujera el consumo recuperando calor de las corrientes calientes o en este caso esta opción no puede descartarse del análisis. Esto obviamente introduce la necesidad de optimizar la variable estructural simultáneamente a la optimización de las variables intensivas y extensivas del proceso.

Si se pretende recurrir a un programa matemático resuelto en forma global (por ejemplo implementándolo en GAMS), se debe realizar un esfuerzo muy importante, y aún logrado la escritura del modelo, la solución aparenta prácticamente imposible si se pretende cierto grado de detalle para el diseño del sistema.

Se adoptará en lo que sigue, una estrategia híbrida que en sucesivas iteraciones permita la selección de la estructura óptima. Se propone la toma de una serie de decisiones en un procedimiento iterativo. A continuación, en el marco de lo expuesto en los párrafos anteriores, se presenta la estrategia adoptada en la presente tesis, que si bien se plantea para este caso particular, puede extenderse como metodología a problemas de diseño óptimo similares.



### V.2.1 *Algoritmo de diseño óptimo*

Se propone una metodología de síntesis heurística para el proceso que nos ocupa, que involucra el siguiente orden jerárquico en las decisiones secuenciales:

Nivel 1 –

Paso 1) Adoptar la estructura de entrada-salida del proceso.

Paso 2) Adoptar la estructura de reciclos del proceso.

Nivel 2–

Paso 3) Adoptar la estructura general del sistema de separación (en este caso incluye la separación reactiva con aminas y regeneración).

Paso 4) Generar el flowsheet del proceso y optimizarlo (mínimo costo).

Nivel 3 –

Paso 5) Calcular la demanda mínima de servicios auxiliares mediante la integración energética óptima.

Paso 6) Determinar la estructura de la red de intercambio integrada correspondiente a solución del paso 5). Optimizar el costo total de la misma. En esta etapa podrán surgir más de una alternativa con similar costo, las cuales pueden pasar a la etapa siguiente.

Nivel 4-

Paso 7) Analizar cada flowsheet disponible identificando los puntos críticos para la integración energética. Contemplar perturbaciones en las variables de operación que influyen en la integración energética; en particular presiones, temperaturas y caudales, según los resultados obtenidos en la etapa anterior. Verificar si ante tales perturbaciones existe factibilidad de lograr una mayor integración energética. Si el costo obtenido resulta menor al disponible al momento, tomarlo como costo y flowsheet óptimos.

Paso 8) Verificar si se ha cubierto el análisis de todas las alternativas estructurales disponibles. Si no es así, ir al paso 7), de lo contrario, seleccionar las alternativas estructurales factibles de menor costo para decidir un diseño final contemplando aspectos no tenidos en cuenta hasta este punto.

La metodología, y las jerarquías de decisiones adoptadas son de naturaleza heurística, por lo que es posible incorporar un nuevo orden o nuevos pasos, luego de acumular experiencias-conocimientos. Al fijar las secuencias de sub-problemas a resolverse, se decide un orden de prioridades. No obstante, cada solución parcial obtenida es verificada a través del lazo iterativo o de retroalimentación especificado. Si los costos son similares, pueden ser retenidas dando como resultado final un conjunto de diseños que contemplando nuevos requerimientos, permitan decidir el diseño final. Por ejemplo, es posible que existan al finalizar el procedimiento, distintas alternativas que compartan costos similares, pero con estructura y condiciones operativas diferentes. Se deberá seleccionar aquella que sea promisoria desde el punto de vista de la controlabilidad, seguridad, flexibilidad operativa, entre otros criterios no tenidos en cuenta directamente por el modelo utilizado.

A continuación, se desarrolla en forma general, la metodología y su implementación para el diseño óptimo. Se analizará un caso de estudio, que ejemplifican situaciones o variantes específicas en el marco de la metodología general propuesta.

### ***V.3 Aplicación de la estrategia descrita. Caso de estudio. Diseño de un sistema Dual Sustentable.***

Para explicitar el método propuesto, a continuación se presenta paso a paso la metodología propuesta y la resolución del caso de estudio.

En primer lugar se especifican las hipótesis o definiciones que se asumen para el caso de estudio propuesto.

Potencia neta:	250	MW
Agua Potable:	15,8	MIGD
Recuperación de CO <sub>2</sub> :	95 %	

MIGD: “millones de galones imperiales por día”

## Nivel 1 –

### *Paso 1) Adoptar la estructura de entrada-salida del proceso.*

Se desea diseñar una planta dual con un sistema de captura de CO<sub>2</sub>. El ciclo combinado debe entregar una potencia neta de 250 MW para la turbina de gas y 73 MW para la turbina de vapor. Se especifica una recuperación del 95% del CO<sub>2</sub> emitido y una producción de 3.000 m<sup>3</sup>/h de agua potable a partir del agua de mar, el cual puede, en función de los casos de estudios de capítulos anteriores, asimilarse a 3 plantas de 1000 m<sup>3</sup>/h.

Las corrientes de entrada al proceso, al igual que las salidas, en este caso se definen en función de lo expuesto en capítulos anteriores. Se adopta gas natural como combustible, un proceso poscombustión para la estructura del sistema de captura de CO<sub>2</sub>, que se basa en aminas. Se conoce una producción de energía y agua potable deseada, y se asumen conocidas las condiciones de agua de mar y las características ambientales que condicionan el ciclo de potencia y el proceso en general. Se adoptan además, las variables necesarias para la lograr la factibilidad del proceso, de acuerdo al estado del arte tecnológico, en los casos donde sea necesario, según se realiza en los capítulos precedentes.

### *Paso (2) – Adoptar la estructura de reciclos del proceso.*

Como se ha mencionado en los capítulos anteriores, el modelado tanto de la planta de cogeneración, como del Evaporador Flash múltiple Efecto, y su integración en plantas duales, se ha abordado en los capítulos anteriores, asumiendo estructuras que son usuales y factibles para este tipo de procesos en la práctica habitual. Por ejemplo, en la bibliografía se ha estudiado, para una dada relación W/D (potencia / agua dulce demandada), las estructuras de las plantas duales convenientes, principalmente desde el punto de vista operativo.

Por otra parte, como se ha mencionado en el capítulo anterior, el acoplamiento de plantas de cogeneración a plantas de captura de CO<sub>2</sub>, si bien puede realizarse considerando o no integración energética, en la mayoría de las propuestas estructurales conocidas, o al menos las que han sido diseñadas e implementadas a nivel de planta piloto o a escala industrial; recurren a un acople específico entre las dos plantas, según lo asumido en dicho capítulo.

Para plantas de desalación de agua de mar se han publicado en la bibliografía varios trabajos que analizan la síntesis estructural de un sistema de desalación por evaporación múltiple etapas. Por ejemplo en [Scenna N. y P. Aguirre (1991,1993,1999)], [Mussati y col. (2001 a,b, 2003, 2004 a,b,c, 2005, 2006 a,b, 2007)], [Marcovecchio y col. (2005)], entre otros. De todas formas, las implementaciones industriales, que son numerosas, son en una abrumadora proporción coincidentes con las principales estructuras analizadas en el capítulo III y en particular, el sistema EFME, luego el problema del acople de los tres procesos en un complejo debe respetar las condiciones tecnológicas mínimas (estructurales) específicas de cada de cada par de procesos integrados según el estado del arte actual.

## **Nivel 2–**

*Paso 3) Adoptar la estructura general del sistema de separación (en este caso incluye la separación reactiva con aminas y regeneración).*

En la figura V.1 se indican los procesos en forma desacoplada energéticamente. La planta dual está conformada por un ciclo combinado integrado a un desalador EFME. El gas natural alimenta una turbina de gas. Los gases de escape están aún lo suficientemente calientes para producir vapor y por su intermedio generar una cantidad adicional en una turbina de vapor, según se analizó en detalle en el capítulo II. Para el equipo desalador (evaporación múltiple etapa en cascada EFME) el calentador externo es la única fuente de energía térmica requerida. En estos equipos el agua pierde presión etapa a etapa mientras flashea. Este vapor condensa entregando calor al agua de mar a la vez que la precalienta (a través de una serie de intercambiadores en contracorriente con la salmuera que al perder parte de su masa por evaporación, va concentrándose etapa a etapa, hasta ser descargada nuevamente al mar). El condensado de cada corriente de evaporación, es agua pura que se recoge en una bandeja, que colecta en cada etapa. La sumatoria de cada corriente de agua “destilada” que se acumula etapa a etapa, al pasar de una cámara a otra, evapora una parte de su masa por el efecto flash al existir una caída de presión entre etapas. La corriente final en la última etapa conforma el producto o agua destilada, la cual luego se potabiliza al agregarle sales y demás tratamientos necesarios para consumo, según lo indicado en los capítulos II y III.

En el ciclo de generación de potencia, se genera CO<sub>2</sub> el cual será absorbido por el proceso de captura. En esta tesis se escogió un proceso postcombustión, basado en absorción química reversible mediante solución de aminas. En este caso específico en la columna absorbidora el gas de combustión es despojado del CO<sub>2</sub> y emitido

directamente a la atmósfera, mientras que la solución de amina rica en gas es enviada a una columna regeneradora en donde se obtiene el CO<sub>2</sub> puro y la solución de amina pobre que se recircula. El CO<sub>2</sub> es luego acondicionado apropiadamente para su disposición final (ejemplo encapsulamiento en el fondo del mar), según lo explicado en el capítulo anterior.

En función de lo expuesto, y adoptando el esquema general de acoplamiento entre los procesos de generación y captura de CO<sub>2</sub> se indican en la Figura V.1.

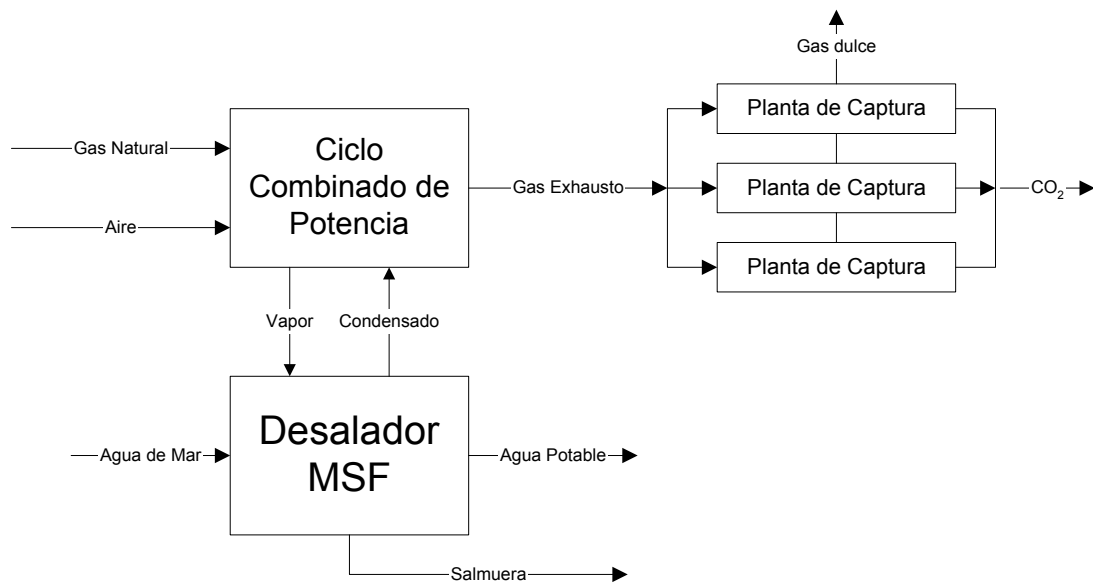


Figura V.1: Esquema de bloques de los procesos en estudio

**Paso 4) Generar el flowsheet del proceso y optimizarlo (mínimo costo).**

El proceso a optimizar que surge de acoplar directamente los subsistemas mencionados en el párrafo anterior. En lo siguiente, se discuten los aspectos fundamentales para los criterios de optimización. Si bien como se ha comentado previamente existen posibilidades de integración energética, en esta etapa se adopta un proceso básico, factible, y dicha integración será analizada en etapas posteriores de diseño .

*Objetivo de Diseño. Función Objetivo*

Como objetivo de diseño cabe mencionar que en general, las plantas duales son atractivas no solo porque se aprovechan los calores residuales de los ciclos de potencia para reducir el costo de generación de agua potable a partir de agua de mar, sino que

esto es factible debido a que en las poblaciones en general, la demanda de agua potable siempre se acompaña a la de energía eléctrica. Más aún, existe una relación que resulta acotada a un rango característico, que surge de la demanda típica de agua y energía para consumo familiar, según diversas regiones geográficas. Como se vió esto impone a la razón entre potencia demandada (W) y agua demandada (D) cierto rango característico. Si fuera una planta local dedicada, solo a satisfacer dicha demanda, estos valores serían los fijados para el diseño. Dado que el agua se consume localmente y es caro transportarla, pero la electricidad puede transportarse y distribuirse por redes integradas, el problema de la demanda W puede abrirse a otras opciones, por ejemplo la demandada por un sistema integrado nacional de energía, que puede absorber o entregar energía según la situación específica, lo cual “desacopla” la demanda W de la demanda de agua potable (D) de dicho rango de valores característicos.

En este caso, como en los anteriores capítulos, minimizaremos el costo. Para esto, a la hora de asignar costos de producción en plantas que generan dos productos principales, y que comparten recursos, tanto de inversión como operativos y/o funcionales, existen diversos criterios para asignar el costo a cada uno de ellos, en relación al costo total. No obstante, dado que en principio el objetivo principal de esta tesis es el diseño óptimo del complejo, sin pretender individualizar el costo de la energía y el del agua producida en forma independiente; solo se considerará el costo total, dado un nivel de recuperación de CO<sub>2</sub> establecido.

Por otra parte, en un problema de optimización son importantes las cotas o regiones de factibilidad que se imponen a las variables de optimización, o parámetros de operación del proceso. Por ejemplo, muchas de las variables de optimización determinantes a la hora de evaluar el consumo energético tienen que ver con el valor de los acercamientos de temperatura mínimos permitidos. Para los distintos procesos analizados en esta tesis en los capítulos anteriores, esto lleva, ya que las restricciones por lo general resultan activas, a obtener soluciones publicadas en la bibliografía que se caracterizan por acercamientos térmicos para intercambios gas-líquido menores a 25 – 30 grados centígrados; que para la operación de ciertos ciclos de cogeneración, resulta limitante, considerando parámetros de flexibilidad según características generalmente variables de operación, degradación en el tiempo según factores de ensuciamiento, entre otros. Para intercambio líquido – líquido, se han observado valores óptimos reportados cuyo acercamiento resulta menor a tres grados centígrados. En plantas de desalación, donde el vacío puede perderse fácilmente en ciertas condiciones de operación, y el

ensuciamiento es habitual y creciente con las horas operadas, dadas las características de los fluidos que intercambian calor, debe analizarse cuidadosamente los acercamientos de temperatura mínimos permitidos entre corrientes.

Habida cuenta que en la práctica industrial la integración de la planta dual cogeneración – desalador, es un sistema conocido, pero que las integraciones entre ciclos de potencia y plantas de captura solo han sido experimentadas a nivel planta piloto y existen pocas plantas industriales operando; la experiencia en la flexibilidad operacional de las mismas, en condiciones cambiantes, son pocas, y los resultados de tales experiencias son de difícil acceso en la literatura abierta. Por último, no conocemos alternativas estudiadas y reportadas para la integración de las tres plantas aludidas, y menos aún datos publicados acerca de su operabilidad. Ello impone la adopción de ciertos márgenes operacionales en todos los procesos estudiados; por ejemplo en todos los acercamientos de temperatura mínimos permitidos, con cierto grado de seguridad, o en otras palabras, valores conservativos. Esto puede redundar en valores óptimos conservadores respecto de otras propuestas, pero en nuestro caso, útiles para el objetivo central de nuestra tesis, el obtener soluciones reales o factibles para proceso estudiado en este capítulo.

Al igual que lo explicado en los capítulos anteriores, se utilizan los algoritmos de optimización existentes en Hysys® (ver Anexo I) para lograr la optimización del proceso dada la estructura y los parámetros operacionales del mismo.

A partir de la optimización del sistema, en función de los parámetros especificados para el proceso, y las restricciones (que resultan similares a las descritas en los capítulos precedentes).

Para la turbina de gas se fijó una descarga de 1 atm (el rango de trabajo se encuentra validado según lo indicado en el capítulo I). Como ya se ha mencionado, una presión de descarga baja por un lado permite mayor potencia pero por otro exige el empleo de otro compresor al ingreso de la planta de absorción. Al igual que lo explicado en el capítulo IV debe considerarse además, que menor presión implica menor temperatura y gases de mayor concentración de CO<sub>2</sub>, hecho que facilita su remoción en la planta de captura.

-Distribución de producción de potencia

Turbina de gas:	+ 255 MW
Turbina de Vapor:	+ 74,06 MW
Bomba de circulación:	- 0,5295 MW

### -Captura de CO<sub>2</sub>

El CO<sub>2</sub> ingresa a la planta de captura con una concentración de 5%; mientras que para el caudal de gas obtenido se requiere un máximo diámetro de columna (fijado en 10 m para la absorbidora y 5 m para la recuperadora); tomando un tercio del caudal total. Esto es, se deben utilizar tres líneas de procesamiento de gas en paralelo.

### -Potencias Calculadas

Compresor de entrada:	- 65,763	MW
Bomba de amina:	- 0,01070	MW
Blower (4 etapas):	- 0,950	MW
	- 3,468	MW
	- 3,742	MW
	- 3,891	M

### -Sistema Desalador

El intercambiador principal del sistema EFME está asociado al condensador del ciclo de potencia, con una temperatura de vapor de 100 °C. Se obtienen 3000 m<sup>3</sup>/h de agua potable (con una relación de potencia a agua de: 15,826). Debe considerarse que los valores típicos de diseño para turbina de gas, del tipo recuperación de calor sin fuego, con turbina de vapor a contrapresión, están incluidos en la práctica en el rango entre 9 y 18, según se explicó anteriormente; y se verifica en los resultados obtenidos:

Potencia neta:	250	MW
Agua Potable:	15,8	MIGD

Si bien se disponen de todos los perfiles internos de los equipos, y detalles de todos los elementos constitutivos, por razones de espacio no se muestran aquí. Además, este no es la solución definitiva al diseño.

Nivel 3 –

Paso 5) Diseñar la estructura que permita la integración energética óptima minimizando el consumo energético.

Dada la solución obtenida en el paso anterior, se necesita ahora explorar nuevas estructuras que logren la integración energética de las corrientes, incorporando una red de intercambiadores que maximice la recuperación energética y minimice por lo tanto el consumo de energía (servicios de vapor y agua de enfriamiento). Para esto se emplearon las aplicaciones “Pinch utility” y “LNG” para evaluar las alternativas de integración energética a fin de minimizar los costos totales, integradas al simulador Hysys®.



Para cumplimentar esta tarea en primer lugar se listan las corrientes calientes (que pueden ceder calor) y las frías (que lo requieren). Las mismas se presentan en las tablas V.1 y V.2.

Para el presente trabajo se emplearon las aplicaciones “Pinch utility” y “LNG” para evaluar las alternativas de integración energética a fin de minimizar los costos totales. Dichas herramientas, al ser compatibles con el simulador Hysys®, son utilizables directamente, siguiendo los procedimientos o protocolos de comunicación establecidos para el usuario. Mediante el uso del método pinch disponible en Hysys® se concluye que para esta integración, no se requiere calefacción siendo solo necesaria refrigeración con agua de enfriamiento. El valor resulta de 72.21 [Mcal/h] (figura V-3)

### *Corrientes Calientes*

En la tabla V.1 se muestra el listado de todas las corrientes calientes consideradas en el sistema de integración energética.

##	nombre	Te [°C]	Ts [°C]	$\Delta H$ [Kcal/h]	Planta	Cantidad	$\Delta H$ [Kcal/h]
1	gas-expandido	602.09	575.89	1.7013E+07	Potencia	1	1.7013E+07
2	gas-caldera	575.89	256.17	1.9936E+08	Potencia	1	1.9936E+08
3	gas-economizador	256.17	135.52	7.1530E+07	Potencia	1	7.1530E+07
4	gas-ex-pre	231.29	30.00	5.3760E+07	Captura	3	1.6128E+08
5	Regen Bott	100.05	35.00	6.6669E+07	Captura	3	2.0001E+08
6	vap-expandido	100.00	100.00	2.2463E+08	Potencia	1	2.2463E+08
7	to condenser	78.42	78.04	3.9373E+05	Captura	3	1.1812E+06
9	CO2-1	121.78	88.19	7.8561E+05	Compresión	3	2.3568E+06
10	CO2-2	242.50	125.60	2.8780E+06	Compresión	3	8.6341E+06
11	CO2-3	291.42	172.08	3.1139E+06	Compresión	3	9.3418E+06
12	CO2-4	347.12	30.00	2.1911E+07	Compresión	3	6.5732E+07
Total							9.6106E+08

Tabla V-1: Corrientes calientes

Estas corrientes que resultan aptas para la integración, tomando como premisa lo expresado anteriormente, esto es, asegurar en principio la integración específica o inherente en los subprocesos que ya tecnológicamente la incorporan de tal manera de minimizar los cambios estructurales que impliquen modificaciones significativas en la operación de las subunidades ya establecidas tecnológicamente.

### *Corrientes Frías*

Igualmente, en la siguiente tabla se indican las corrientes frías que se asumen potencialmente para la integración.

##	Nombre	Te [°C]	Ts [°C]	$\Delta H$ [Kcal/h]	Planta	Cantidad	$\Delta H$ [Kcal/h]
1	Ag-fria	100.321371	236.172913	7.1530E+07	Potencia	1	7.1530E+07
2	Ag-precalentada	236.172913	236.174203	1.9936E+08	Potencia	1	1.9936E+08
3	Vapor	236.174203	305	1.7013E+07	Potencia	1	1.7013E+07
4	Rich to L/R	48.7250347	80	4.0932E+07	Captura	3	1.2280E+08
5	to reboiler	94.0860827	100.052375	4.1842E+07	Captura	3	1.2553E+08
6	Agua de mar-E	82.9786791	90	2.2463E+08	Captura	1	2.2463E+08
Total							7.6085E+08

Tabla V-2: Corrientes frías

### Intercambiadores

Intercambiadores		Fluido caliente	Fluido frio	Planta	Cantidad
I	Prec	gas-economizador	Ag-fria	Potencia	1
II	Evap	gas-caldera	Ag-precalentada	Potencia	1
III	Recal	gas-expandido	vapor	Potencia	1

Tabla V-3: Intercambiadores

### Enfriadores

Coolers		Fluido	Planta	Cantidad
a	Condenser@Column	to condenser	Captura	3
b	Enf-Gas-In	gas-ex-pre	Captura	3
c	Enf-Amina	DEA to Cool	Captura	3
d	Enf-GO-12	CO2-1	Compresión	3
e	Enf-GO-23	CO2-2	Compresión	3
f	Enf-GO-34	CO2-3	Compresión	3
g	Enf-GO-45	CO2-4	Compresión	3
h	Condensador	Vapor expandido	Potencia	1

Tabla V-4: Enfriadores

### Calentadores

Heaters		Fluido	Planta	Cantidad
$\alpha$	Reboiler@Column	to reboiler	Captura	3
$\beta$	Cal-amina	Rich to L/R	Captura	3
$\gamma$	Cal-Desal	Agua de mar-1	Agua de mar-2	1

Tabla V-5: Calentadores

En el siguiente esquema (figura V.2) se indican los datos ingresados al Hysys® para el problema planteado.

En las siguientes figuras se presentan los resultados más importantes.

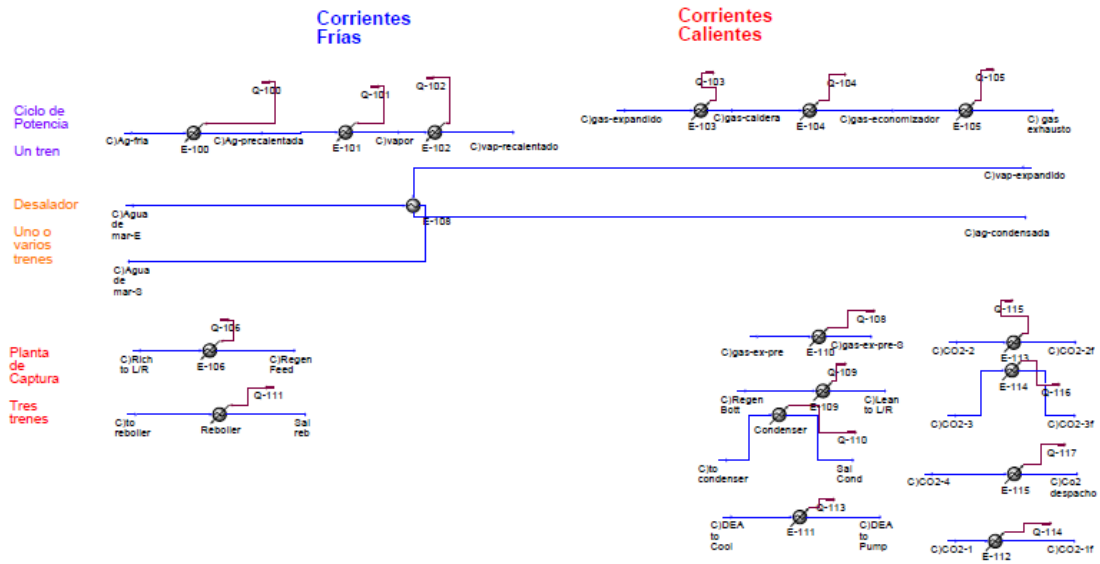


Figura V.2: Corrientes calientes y frias del proceso

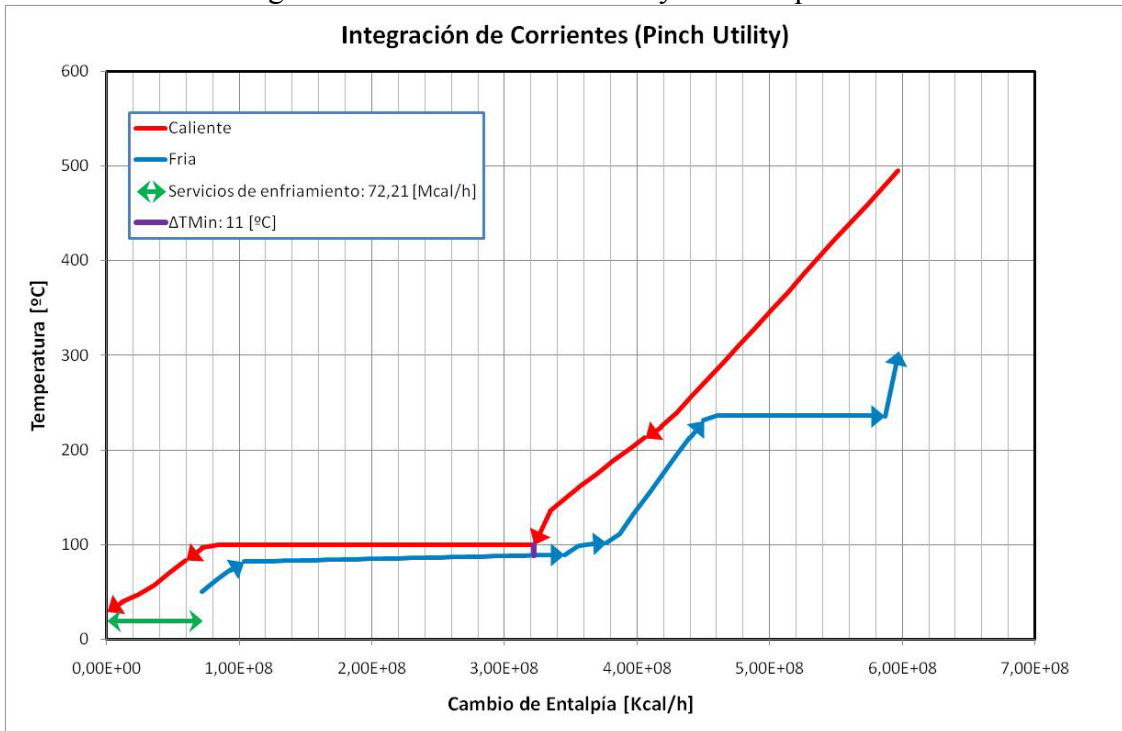


Figura V.3: Perfil de temperaturas supercorrientes (pinch utility)

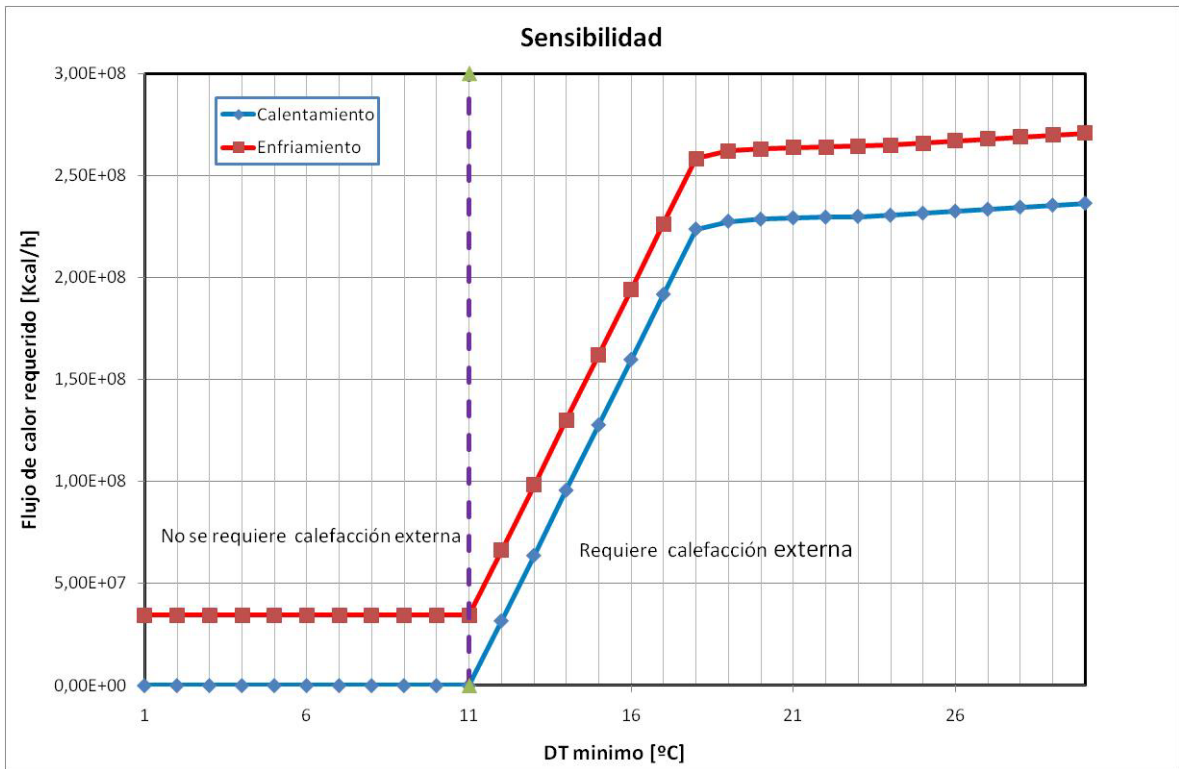


Figura V.4: Sensibilidad respecto del DT mínimo.

Si reemplazamos los enfriadores, calentadores e intercambiadores por un módulo LNG se obtiene un diagrama como el siguiente.

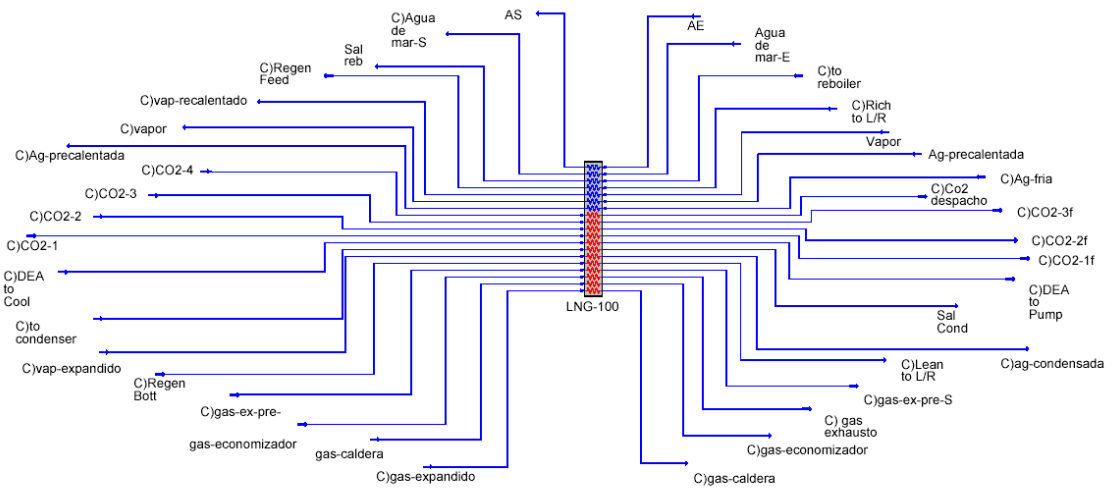


Figura V.5: Estructura LNG aplicada al caso de estudio

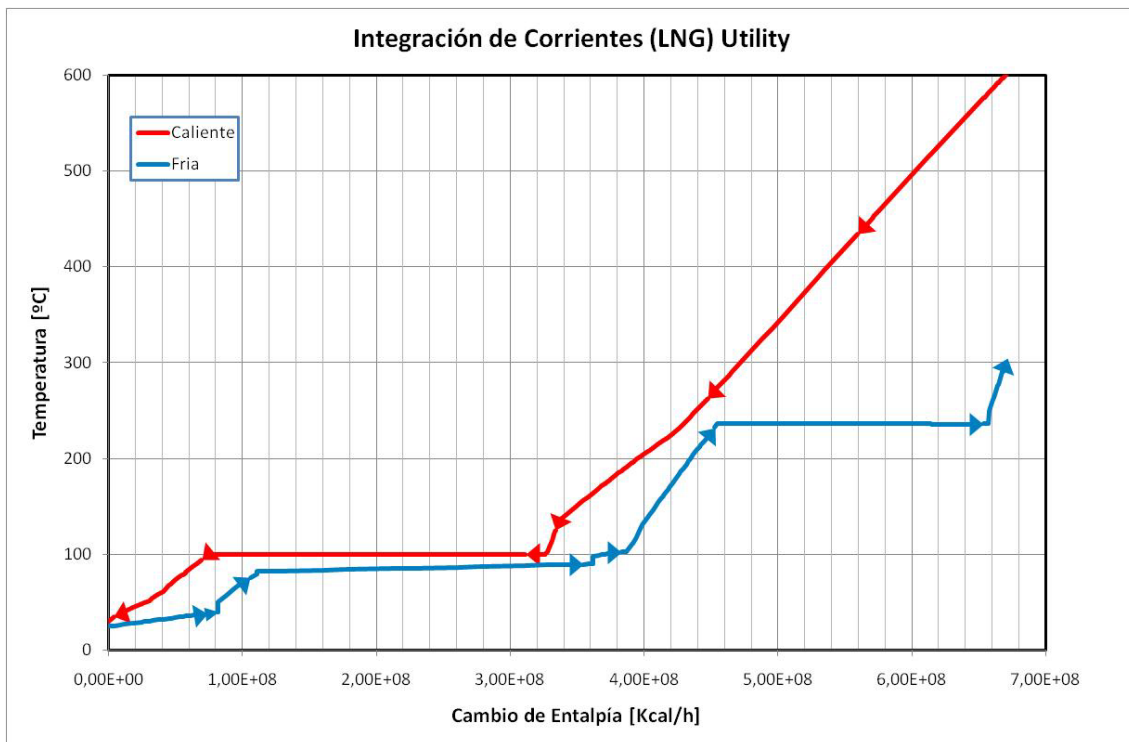


Figura V.6: Perfil de temperaturas supercorrientes (LNG utility)

*Paso 6) Minimizar el costo de la estructura integrada de recuperación de calor, proveniente de la solución que surge de aplicar el paso 5). En esta etapa posiblemente existirán varias alternativas que con distintas características estructurales y con similar costo, pueden pasar a la etapa siguiente.*

En este punto se ha utilizado la herramienta “Energy Analyzer®”. Con ella se obtienen estructuras o redes de intercambio óptimas para los objetivos establecidos de integración energética. Esta herramienta permite no solo calcular los servicios mínimos sino lograr estructuras alternativas para lograr dicho objetivo a fin de reducir el costo total (fijos + operativos) o el área total según se elija. Es decir, se obtiene el diseño óptimo de la red de intercambiadores del sistema de recuperación de calor.

Como se puede deducir, de una planta de potencia, uno o más de desalación y varias de captura surge una gran cantidad de alternativas. Con el objeto de reducir dicho número y hacer posible el uso de la herramienta Energy Analyzer ® se asumieron las siguientes:

La corriente de gas de la turbina se mantiene acoplada a la del recuperador de calor como es usual. Con esto se reduce el número de alternativas posibles.

Por otro lado y debido a que el software asume la existencia de utilidades de calefacción y refrigeración aún cuando el proceso sea excedente en uno de ellos (por

ejemplo, de calor) se adoptó como fuente externa para el Energy Analyzer® el vapor de condensación de la turbina de vapor, se la incorporó como utilidad con las mismas condiciones de presión y temperatura existentes en el proceso. De este modo, cuando se efectúe la integración, todo consumo de vapor de utilidad en realidad sería de dicha corriente de proceso a condición de que su carga sea la suficiente.

Para utilizar el software como primera tarea se deben ingresar las corrientes frías y calientes a integrar, incluyendo valores apropiados para sus coeficientes peliculares. Incorporados dichos valores, los datos se conforman según la tabla que se indica a continuación:

Data	Name	Inlet T [C]	Outlet T [C]	MCp [kJ/C-h]	Enthalpy [kcal/h]	Segm.	HTC [kJ/h-m2-C]	Flowrate [kg/h]	Effective Cp [kJ/kg-C]	DT Cont. [C]
Process Streams	gas-expre	231,3	30,0	1,117e+00E	5,376e+007		540,00	----	----	Global
Utility Streams	Regen Bott	100,1	35,0	4,268e+00E	6,667e+007		28800,00	----	----	Global
Economics	to condenser	78,4	78,0	4,335e+00E	3,937e+005		43200,00	----	----	Global
	CO2-1	121,8	88,2	9,786e+004	7,856e+005		540,00	----	----	Global
	CO2-2	242,5	125,6	1,030e+00E	2,878e+006		540,00	----	----	Global
	CO2-3	291,4	172,1	1,092e+00E	3,114e+006		540,00	----	----	Global
	CO2-4	347,1	30,0	2,891e+00E	2,191e+007		540,00	----	----	Global
	Rich to L/R	48,7	80,0	5,476e+00E	4,093e+007		28800,00	----	----	Global
	to reboiler	94,1	100,1	2,934e+007	4,184e+007		32400,00	----	----	Global
	Agua de mar-E	83,0	90,0	4,475e+007	7,488e+007		28800,00	----	----	Global
	***New**									

Figura V.7: Ingreso datos de corrientes

Al definir las corrientes de utilities (una corriente más caliente que la más caliente de las frías y una más fría que las más frías de las calientes) se deben incorporarles coeficientes peliculares como así el costo unitario de los mismos. Estos datos deben ser compatibles con los utilizados en el caso de simulación y optimización con Hysys® previamente.

Data	Name	Inlet T [C]	Outlet T [C]	Cost Index [Cost/kJ]	Segm.	HTC [kJ/h-m2-C]	Target Load [kcal/h]	Effective Cp [kJ/kg-C]	Target FlowRate [kg/h]	DT Cont. [C]
Process Streams	Cooling Water	20,00	40,00	2,125e-007		13500,00	3,328e+007	4,183	1664333,20	Global
Utility Streams	LP Steam	105,0	105,0	1,900e-006		21600,00	4,142e+007	2196	78897582,30	Global
Economics	<empty>									

Figura V.8: Ingreso datos de corrientes auxiliares

Finalmente se necesitan cargar los valores para el cálculo económico, como ser, tasa de interés y años de vida útil del emprendimiento, las horas anuales de operación y los coeficientes para el cálculo de los intercambiadores. Esta función aunque diferente

de la empleada en el Hysys® da valores similares luego de ajustar los parámetros (a y b) de la funcionalidad del costo de los equipos vs el área de intercambio. Esto permite compatibilizar los resultados de costos obtenidos aquí con el modelo general.

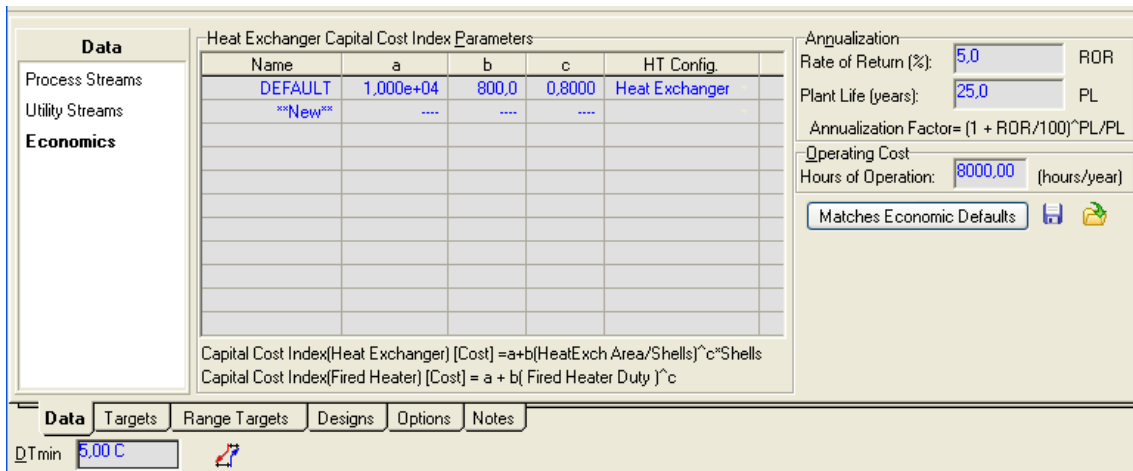


Figura V.9: Ingreso parámetros económicos

Una vez resuelto el problema, tanto la supercorriente caliente como la supercorriente fría se muestran en un diagrama TH, que en este caso se ilustra en la figura V.10.

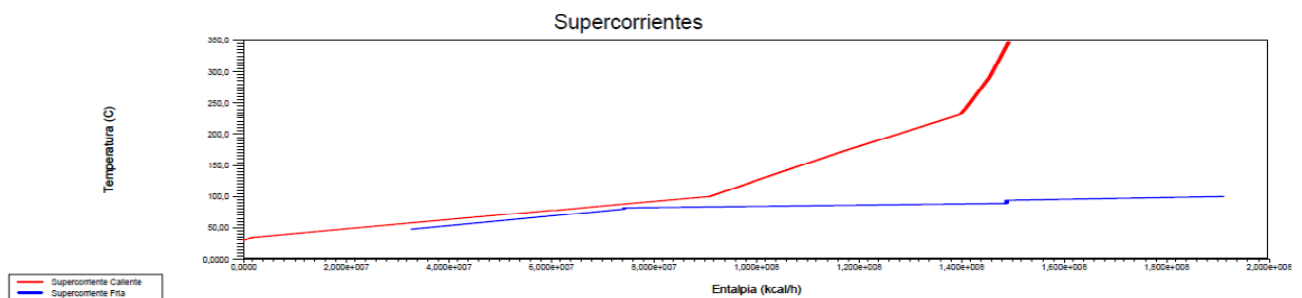


Figura V.10: Perfil de temperaturas supercorrientes (Energy Analyzer)

A modo de ejemplo se presentan algunos resultados específicos. Por ejemplo los requerimientos de calentamiento/enfriamiento, costos operativos, de capital y totales, para el caso, según lo indicado en la figura V-11.

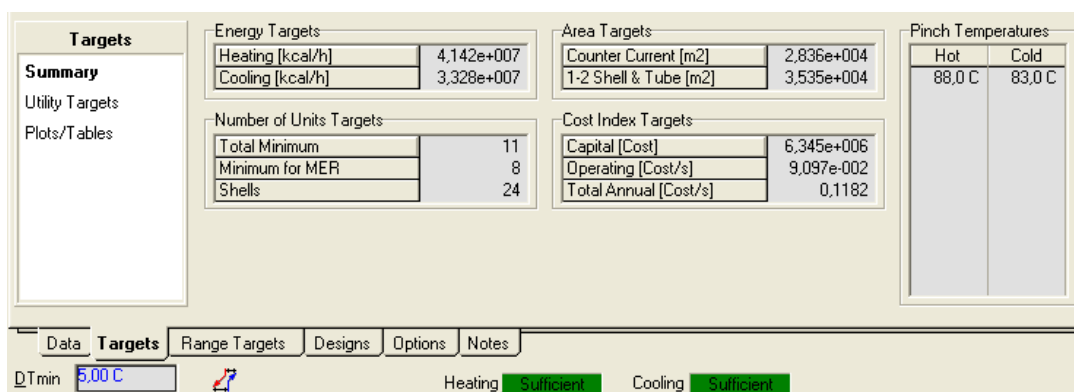


Figura V.11: Resultados de cargas térmicas requeridas

Cabe recordar que en este caso la corriente servicio auxiliar “LP-Steam” corresponde en realidad a la corriente de proceso “vap-expandido” cuyo nivel térmico es de 100 °C y su carga de  $2,2463 \times 10^8$  [Kcal/h]. Considerando 3 trenes de captura, da una disponibilidad de  $7,4876 \times 10^7$  [Kcal/h] para cada uno, valor que supera al requerido según la solución de integración obtenida, que es de  $7,142 \times 10^7$  [Kcal/h].

Luego, si asignamos un costo “0” a “LP-Steam” puede procederse a la minimización de costos para dicha red:

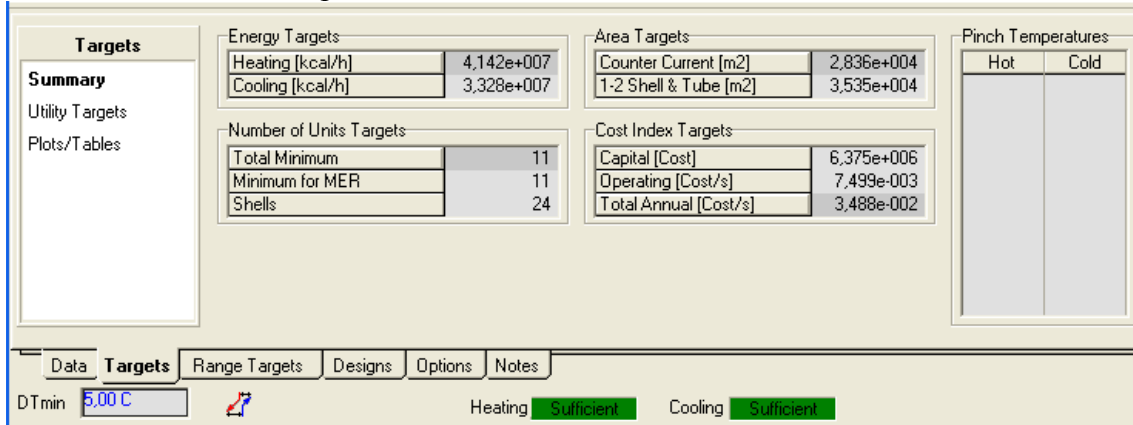


Figura V.12: Resultados de cargas térmicas requeridas

Las figuras V.13 y V.14 muestran la relación entre el área y los costos operativos y fijos.

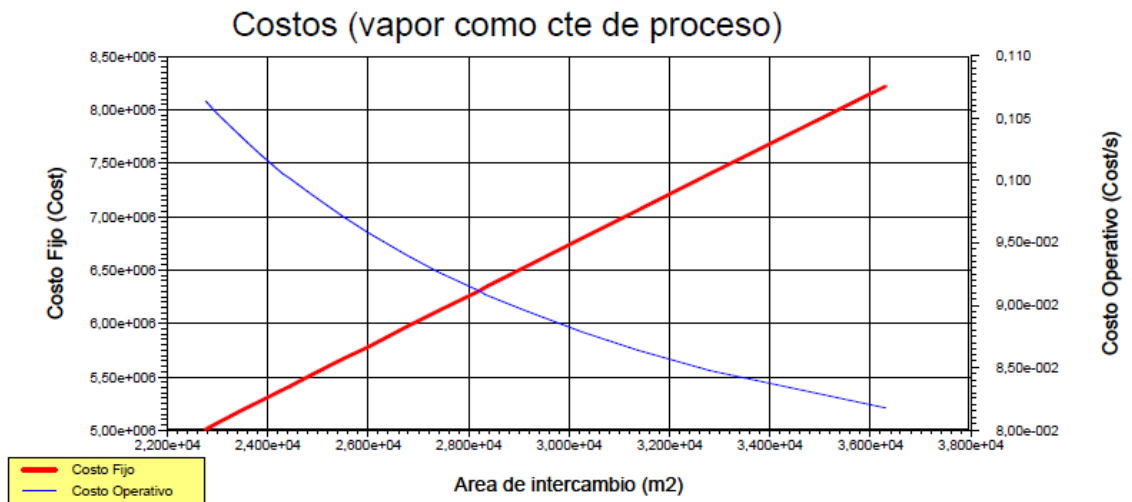


Figura V.13: Costos fijos y operativos en función del área de intercambio



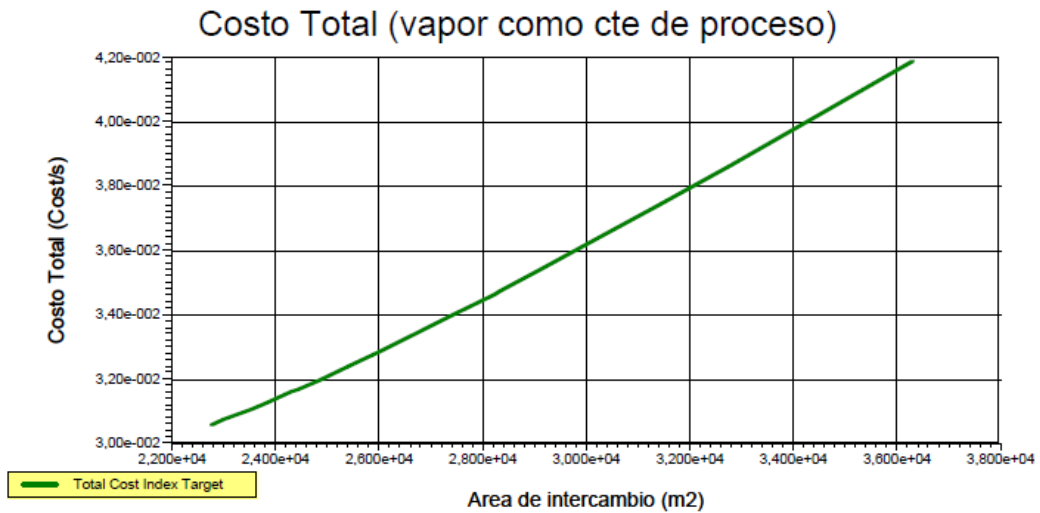


Figura V.14: Costo total en función del área de intercambio

El esquema básico en que la alimentación de la columna recuperadora se precalienta con el fondo de la misma (un esquema empleado por muchos autores), queda:

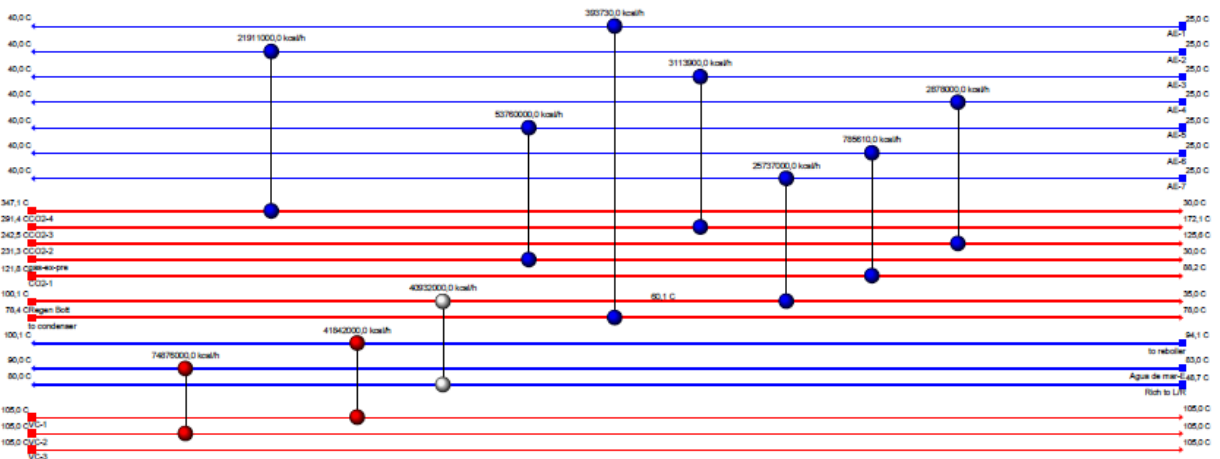


Figura V.15: Red básica

Los intercambiadores, en este caso se muestran en la tabla V-6

Heat Exchanger	Load [kcal/h]	Cost Index [Cost]	Area [m2]	Shells	LMTD [C]	Overall U [kJ/h-m2-C]	FFactor	Fouling [C-h-m2/kJ]	Hot Stream	Hot T in [C]	Hot T out [C]	Cold Stream	Cold T in [C]	Cold T out [C]	dT Min Hot [C]	dT Min Cold [C]
E-114	7.488e+007	3.355e+005	1389	3	18.28	1,234e+00	1.0000	0.0000	VC-2	105.0	105.0	Agua de mar-E	83.0	90.0	15.00	22.00
E-111	2.191e+007	6.136e+005	2527	6	73.37	519.2	0.9524	0.0000	CO-2-4	347.1	30.0	AE-2	25.0	40.0	307.1	5,000
E-113	4.184e+007	4.327e+005	1791	4	7.542	1,296e+00	1.0000	0.0000	VC-1	105.0	105.0	to reboiler	94.1	100.1	4,949	10,91
E-105	4.093e+007	2.341e+005	870.9	3	15.31	1,440e+00	0.8918	0.0000	Regen Bott	100.1	60.1	Rich to L/R	48.7	80.0	20,05	11,39
E-108	5.376e+007	2.135e+006	9017	20	51.12	519.2	0.9399	0.0000	gas-ex-pre	231.3	30.0	AE-5	25.0	40.0	191.3	5,000
E-112	3.937e+005	1.220e+004	3.534	1	45.34	1,029e+00	0.9995	0.0000	to condense	78.4	78.0	AE-1	25.0	40.0	38,42	53,04
E-110	3.114e+006	4.928e+004	130.0	1	194.6	519.2	0.9920	0.0000	CO-2-3	291.4	172.1	AE-3	25.0	40.0	251,4	147,1
E-106	2.574e+007	2.185e+005	880.5	2	14.47	9191	0.9194	0.0000	Regen Bott	60.1	35.0	AE-7	25.0	40.0	20,11	10,00
E-107	7.856e+005	3.909e+004	89.29	1	72.09	519.2	0.9836	0.0000	CO-2-1	121.8	88.2	AE-6	25.0	40.0	81,78	63,19
E-109	2.878e+006	5.674e+004	161.5	1	145.7	519.2	0.9857	0.0000	CO-2-2	242.5	125.6	AE-4	25.0	40.0	202,5	100,6

Figura V.16: Intercambiadores de la red básica

Una vez aplicado el Energy Analyzer, surge la siguiente estructura:

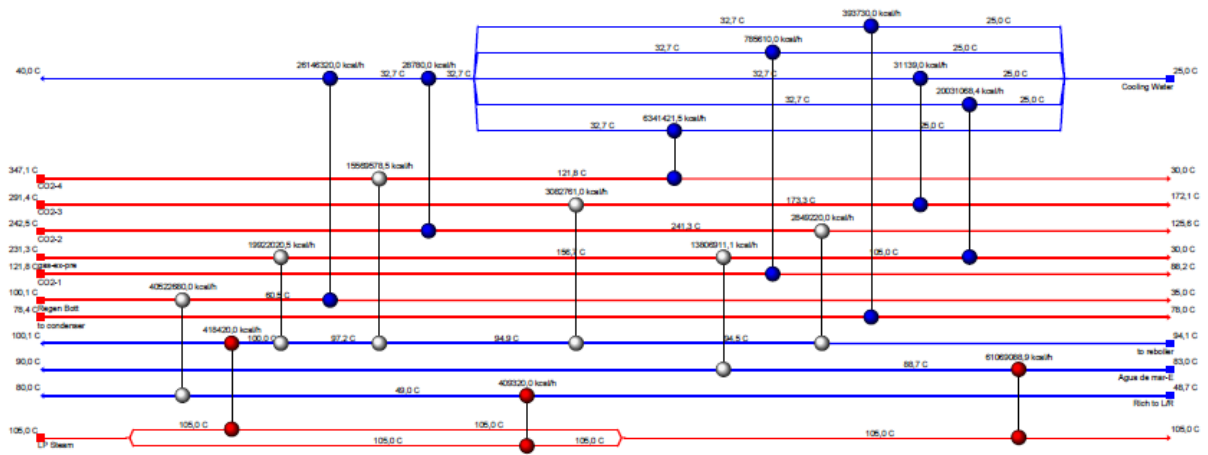


Figura V.17: Red integrada

Empleando los siguientes intercambiadores:

Heat Exchanger	Load [kcal/h]	Cost Index [Cost]	Area [m <sup>2</sup> ]	Shells	LMTD [C]	Overall U [kJ/h·m <sup>2</sup> ·C]	FFactor	Fouling [C·h·m <sup>2</sup> /kJ]	Hot Stream	Hot T in [C]	Hot T out [C]	Cold Stream	Cold T in [C]	Cold T out [C]	dT Min Hot [C]	dT Min Cold [C]
E-115	7.856e+005	3.786e+004	84,61	1	75,40	519,2	0,9923	0,0000	CO2-1	121,8	88,2	Cooling Water	25,0	32,7	89,08	63,19
E-105	2.615e+007	4.063e+005	1652	4	8,318	9191	0,8660	0,0000	Regen Bolt	60,5	35,0	Cooling Water	32,7	40,0	20,51	2,296
E-109	1.557e+007	3.073e+005	1240	3	100,0	531,1	0,9892	0,0000	CO2-4	347,1	121,8	to reboiler	94,9	97,2	250,0	26,85
E-113	2.849e+006	8.669e+004	300,0	1	74,94	531,1	0,9984	0,0000	CO2-2	241,3	125,6	to reboiler	94,1	94,5	146,8	31,51
E-114	3.937e+005	1.205e+004	3,250	1	49,29	1,029e+00	0,9998	0,0000	to condenser	78,4	78,0	Cooling Water	25,0	32,7	45,72	53,04
E-116	3.114e+004	1.125e+004	1,745	1	143,8	519,2	0,9999	0,0000	CO2-3	173,3	172,1	Cooling Water	25,0	32,7	140,6	147,1
E-110	2.878e+004	1.087e+004	1,108	1	209,2	519,2	1,0000	0,0000	CO2-2	242,5	241,3	Cooling Water	32,7	32,7	209,8	208,6
E-117	2.003e+007	1.569e+006	6695	14	25,19	519,2	0,9570	0,0000	gas-ex-pre	105,0	30,0	Cooling Water	25,0	32,7	72,30	5,000
E-119	6.107e+007	2.781e+005	1089	3	19,00	1,234e+00	1,0000	0,0000	LP Steam	105,0	105,0	Agua de mar-E	83,0	88,7	16,29	22,00
E-107	4.093e+005	0,0000	2,472	0	56,12	1,234e+00	1,0000	0,0000	LP Steam	105,0	105,0	Rich to L/R	48,7	49,0	55,96	56,28
E-111	3.083e+006	6.252e+004	188,7	1	128,8	531,1	0,9995	0,0000	CO2-3	291,4	173,3	to reboiler	94,5	94,9	196,5	78,78
E-118	6.341e+006	4.386e+005	1823	4	29,19	519,2	0,9603	0,0000	CO2-4	121,8	30,0	Cooling Water	25,0	32,7	89,08	5,000
E-104	4.052e+007	2.311e+005	856,2	3	15,36	1,440e+00	0,8950	0,0000	Regen Bolt	100,1	60,5	Rich to L/R	49,0	80,0	20,05	11,47
E-106	4.184e+005	0,0000	27,13	0	4,978	1,296e+00	1,0000	0,0000	LP Steam	105,0	105,0	to reboiler	100,0	100,1	4,949	5,008
E-108	1.992e+007	4.224e+005	1737	4	90,74	531,1	0,9956	0,0000	gas-ex-pre	231,3	156,7	to reboiler	97,2	100,0	131,3	59,55
E-112	1.381e+007	7.389e+005	3077	7	35,76	530,1	0,9903	0,0000	gas-ex-pre	156,7	105,0	Agua de mar-E	88,7	90,0	66,70	16,29

Figura V.18: Intercambiadores de la red integrada

Resumiendo, con la aplicación del optimizador del Energy Analyzer® se logra la red de recuperación de calor. Cabe mencionar que este optimizador no modifica la estructura, solo los valores de flujos en los divisores y las cargas en los intercambiadores sobre el diseño previamente escogido.

Finalmente comparamos el diseño aplicado hasta el momento:

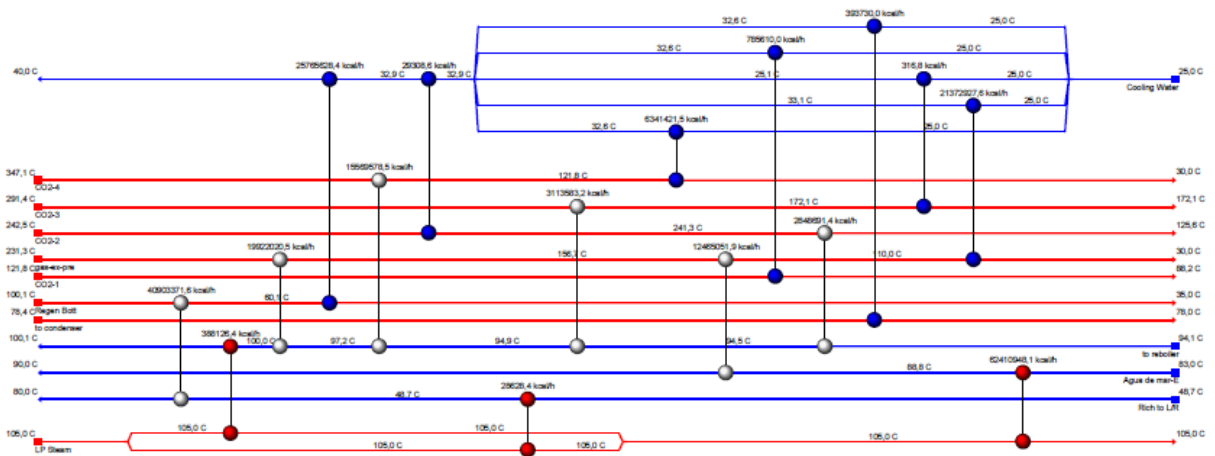


Figura V.19: Red optimizada



Caso	Calent	Enfriam	Operativos	Capital	Total	Calent	Enfriam	Nº de unidades	Area total
	u\$/s	u\$/s	u\$/s	u\$	u\$/s	Kcal/h	Kcal/h		m2
Caso Sin Integrar	0	0.036917	0.036917	4.080E+06	0.054441	1.577E+08	1.495E+08	10	1.662E+04
Caso Base	0	0.026810	0.026810	3.634E+06	0.042419	1.167E+08	1.086E+08	10	1.472E+04
Caso Integrado	0	0.013274	0.013274	4.614E+06	0.033090	6.190E+07	5.376E+07	16	1.878E+04
Caso Optimizado	0	0.013504	0.013504	4.510E+06	0.032874	6.283E+07	5.469E+07	16	1.845E+04
Caso Retocado	0	0.013497	0.013497	4.489E+06	0.032776	6.280E+07	5.466E+07	13	1.845E+04

Tabla V-6: Costos comparativos según se integra o no el proceso

La cantidad de calor requerido resulta ser de  $6.283 \times 10^7$  por cada tren de captura por lo que el total requerido será de  $1.885 \times 10^8$  y dado que el disponible por la corriente de vapor de la turbina al condensar es de  $2.2463 \times 10^8$  se aprecia que no sólo es suficiente sino que además queda remanente por lo que se debe condensar con alguna corriente de agua de enfriamiento. Esto introduce una pequeña discrepancia con respecto a la red obtenida ya que usará algo más de utility (enfriamiento) requiriendo además de un equipo adicional con lo que los costos fijos se incrementan. De todo ello se infiere que el resultado de la herramienta de integración es el mínimo posible y que el costo final será ligeramente superior al óptimo.

En la tabla se indica la evolución del costo total de la red obtenida mediante la aplicación de la metodología propuesta.

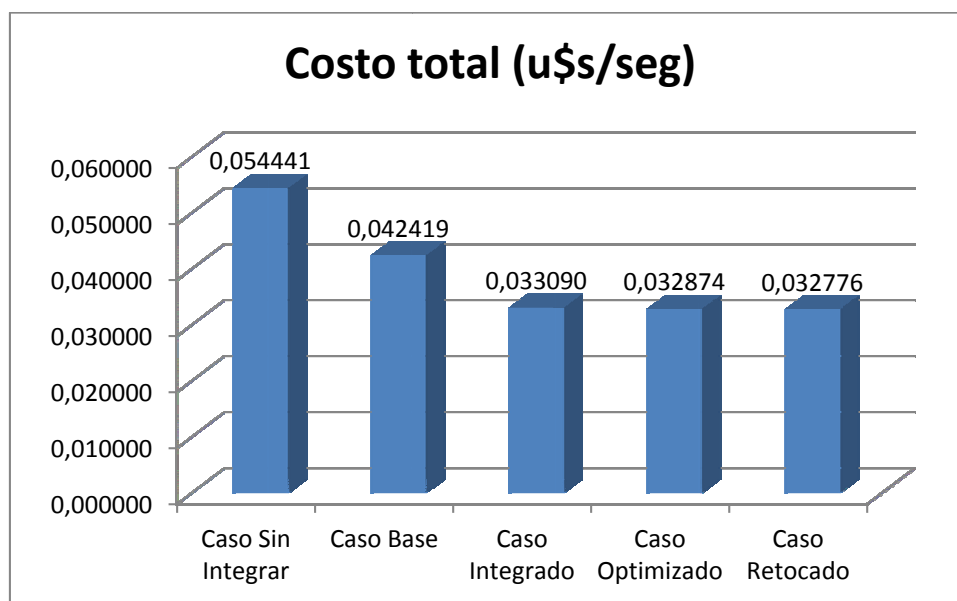


Figura V.23: Costos comparativos según la integración energética

Implementación en Hysys®.

La red obtenida con el Energy Analyzer debe luego, ser “incorporada” al procesos, o modelo del mismo para lo cual debe ser implementada en Hysys® modificando el caso resuelto en el paso previo. No es de extrañar que los resultados puedan diferir ligeramente debido a que en el diseño de la red se utiliza corrientes calientes y frías de las cuales sólo se conocen sus temperaturas de entrada/ salida y el cambio de entalpía de cada una. En el caso de simulación, estos datos se calculan por una (o varias) fisicoquímicas rigurosas lo que puede dar temperaturas o flujos distintos. Ello implica un primer paso de verificación de la solución obtenida

Luego de verificada la convergencia y que los perfiles de temperatura se logren adecuadamente, es posible reemplazar los calentadores, enfriadores e intercambiadores por los surgidos de esta integración térmica. Para ello debe tenerse consideración que, los equipos HX04, HX06, HX08, HX05, HX09, HX11, HX15, HX13, HX17 y HX18 forman parte de uno de los 3 trenes de absorción por lo que su número y costo deben triplicarse. En cambio, el desalador se adoptó como un solo tren por lo que para su calefacción se requieren los HX12 y HX19 tres veces. Esto es importante a la hora de incorporar la red aislada al proceso. Además, dado que se ha considerado al vapor de la turbina como corriente de utilidades en el proceso de integración energética, debe tenerse cuidado que el calor demandado por la red no supere al disponible en dicha corriente. En este caso hay vapor excedente lo que lleva a que se deba incorporar un intercambiador adicional; equipo que debe agregarse a los costos fijos, y el agua de enfriamiento a los operativos.

En la tabla V.7 se indican los intercambiadores

	Corriente	Te	HX	Ts/Te	HX	Ts/Te	HX	Ts/Te				
Calientes	gas-ex-pre	234,04	HX08	156,70	HX12	110,00	HX17	30,00				
	CO2-4	347,13	HX09	209,20	HX18	30,00						
	CO2-3	291,43	HX11	172,08								
	CO2-2	242,50	HX13	125,60								
	CO2-1	121,79	HX15	88,19								
	Regen Bott to condenser	100,05 78,51	HX04 HX14	60,81 78,00	HX05	35,00						
Frías	Rich to L/R	48,73	HX04	80,00								
	to boiler	94,08	HX13	94,98	HX11	95,85	HX09	97,44	HX08	100,00	HX06	100,10
	Agua de mar-E(1/3)	82,98	HX19	88,80	HX12	89,63						

Tabla V-7: Intercambiadores de la red integrada

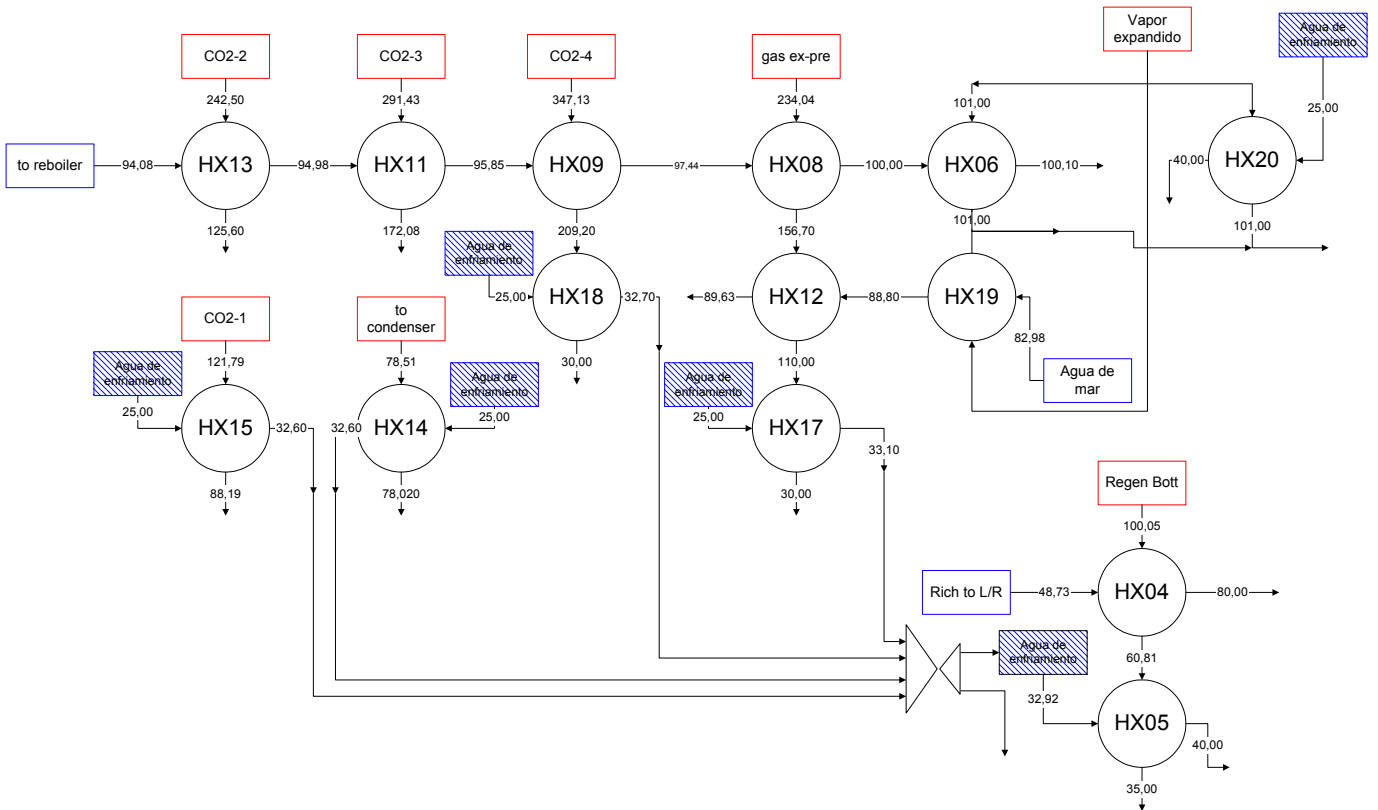


Figura V.24: Esquema de la red final y sus servicios

En la figura V.24 se aprecia la red definitiva propuesta tal que minimiza su costo total. En ella se aprecia que el único servicio auxiliar requerido es el de agua de enfriamiento el cual se encuentra en dos niveles de temperatura.

Vale aclarar que al haber tres trenes de capturas, 3 desaladores y un ciclo de potencia, los equipos representados en dicha figura sólo representan una parte de los necesarios. Así por ejemplo, el vapor que se expande en la turbina de vapor debe dividirse en 4 ramas. Tres corresponden a los trenes mencionados, necesarios para satisfacer requisitos de calefacción mientras que el resto se condensa en un equipo único (HX-20). Luego, todo el condensado se puede renviar a la caldera para completar el circuito de agua. Lo mencionado se aprecia en la figura V.25:

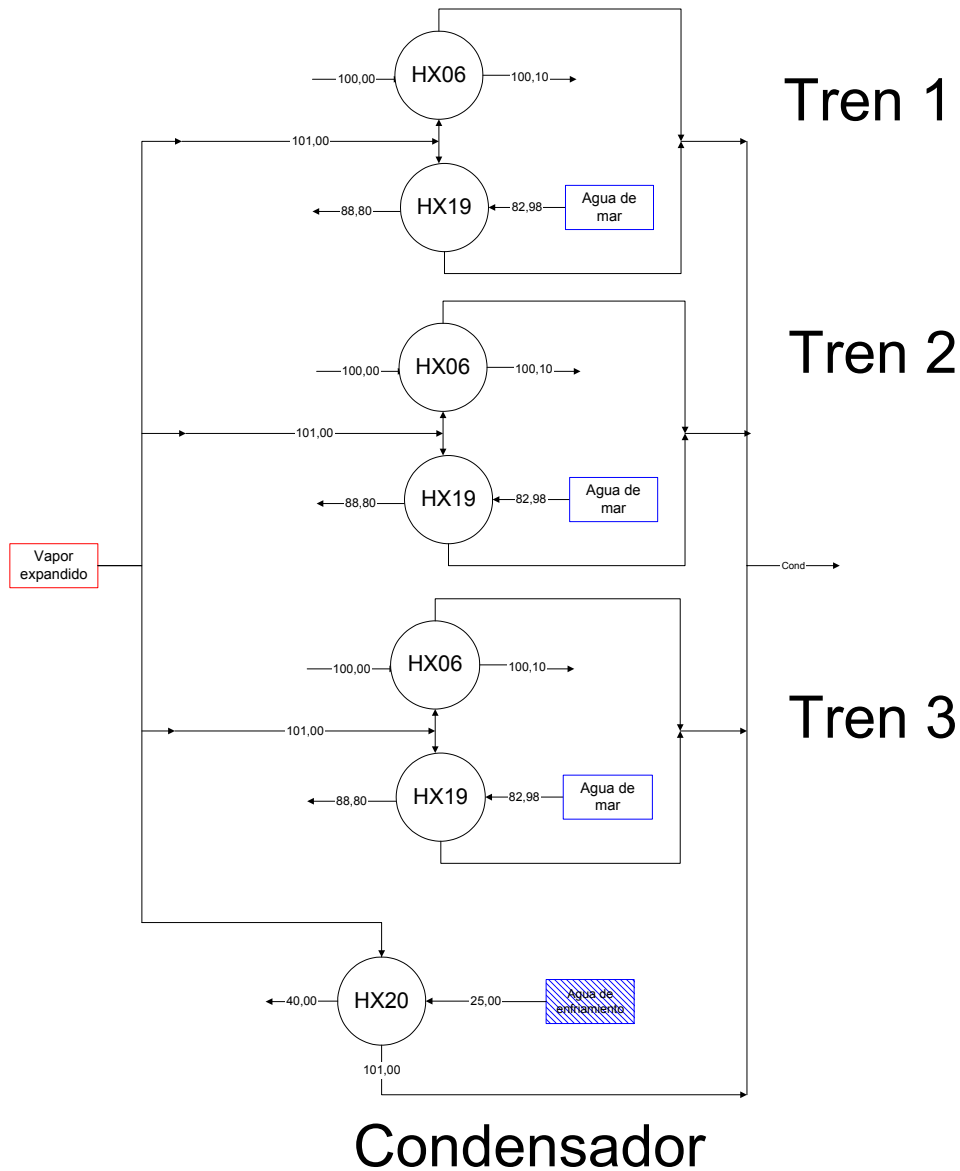


Figura V.25: Esquema completo (para los tres trenes de captura)

Nivel 4-

*Paso 7) Analizar cada flowsheet disponible identificando los puntos críticos para la integración energética. Contemplar perturbaciones en las variables de operación que influyen en la integración energética; en particular presiones, temperaturas y caudales, según los resultados obtenidos en la etapa anterior. Verificar si ante tales perturbaciones existe factibilidad de integración energética y minimizar el costo del proceso. Si el costo obtenido resulta menor al disponible al momento, tomarlo como costo y flowsheet óptimos.*

En este caso se ha seleccionado sólo una alternativa para la red de recuperación calórica debido a la rigidez de los otros subsistemas que como se ha expresado tecnológicamente incorpora cierta integración entre corrientes que se desea mantener.

Esto facilita la operabilidad y flexibilidad del proceso al evitar introducir nuevos equipos y reciclos. Existen ya tres trenes de procesamiento en la planta de captura lo cual impone ciertas restricciones adicionales de redes alternativas para la recuperación de calor.

Nivel 5.

*Paso 8) Verificar si se ha completado el análisis de todas las alternativas estructurales disponibles. Si no es así, ir al paso 7). De lo contrario, seleccionar las alternativas estructurales factibles de menor costo para decidir un diseño final contemplando aspectos no tenidos en cuenta hasta este punto.*

A continuación, se analizan diversos casos de estudio, en los cuales se emplean modelos con diferentes grados de simplificación, diversos análisis paramétricos, entre otras opciones de interés.

Siguiendo las metodologías y estrategias delineadas en los capítulos precedentes, aquí se presentan los datos específicos para este problema o caso de estudio en particular.

En principio, como se ha mencionado, el sistema dual consiste en la integración de una turbina de gas, un sistema de recuperación de calor acoplado a una turbina de vapor; cuyo vapor exhausto luego de pasar por la turbina (contrapresión) se utiliza como fuente energética del calentador principal del proceso de desalación EFME. Como se ha expresado anteriormente, la relación entre potencia y agua a producir se incluye en un rango que aconseja (por heurística de diseño) utilizar turbina de contrapresión y no de condensación.

El proceso de captura (postcombustión) utiliza en este caso al % de concentración. La función objetivo es la minimización de costos. En este sentido, se utiliza los modelos explicados previamente, para cada subsistema en particular, tanto para estimar los costos de inversión como los operativos.

Las variables de optimización y las restricciones asumidas, para este caso particular, se presentan a continuación:

Para este caso de estudio, se propone un modelo riguroso para el modelo del sistema de cogeneración, y captura de CO<sub>2</sub> y uno simplificado para el sistema de



desalación. Si bien esto entrega soluciones agregadas, por lo que no todas las variables del proceso se encuentran a disposición, facilita la resolución del problema en la etapa inicial. Cuando se requieran los perfiles internos del desalador, podrán realizarse simulaciones con los modelos rigurosos, a fin de verificar la factibilidad del proceso global, y además obtener los valores de todas las corrientes y variables del mismo.

Se utilizará el simulador Hysys® y el método de optimización MIIXED (ver Anexo I) para minimizar costos. Dicha función resulta de la sumatoria de los costos de cada uno de los procesos considerados, y ha sido detallada en cada uno de los respectivos capítulos de la tesis.

El esquema representativo de la planta completa se aprecia en la figura V.1. Se aprecia que por cuestiones de tamaño, en lugar de una planta de captura, se adoptan tres módulos equivalentes, con el fin de lograr que las columnas absorbedoras no superen el máximo de 10 m. de diámetro. Conviene aclarar que también la planta desalinizadora podría estar conformada por varios trenes en paralelo. No están incluidos los servicios auxiliares.

Cabe aclarar que en este caso fue necesario agregar la corriente de servicios auxiliares requeridos (sólo agua de enfriamiento).

En la figura V.26 se muestra la red de recuperación de calor implementada como un caso de Hysys®. En la figura V.27 se indica el proceso global con la red integrada, como caso de Hysys®. Para mejorar la claridad la figura V.27 se dividió en 3. La primera figura muestra la sección de generación de potencia y el desalador, la segunda la planta de captura y la última la red integrada de intercambio de calor.

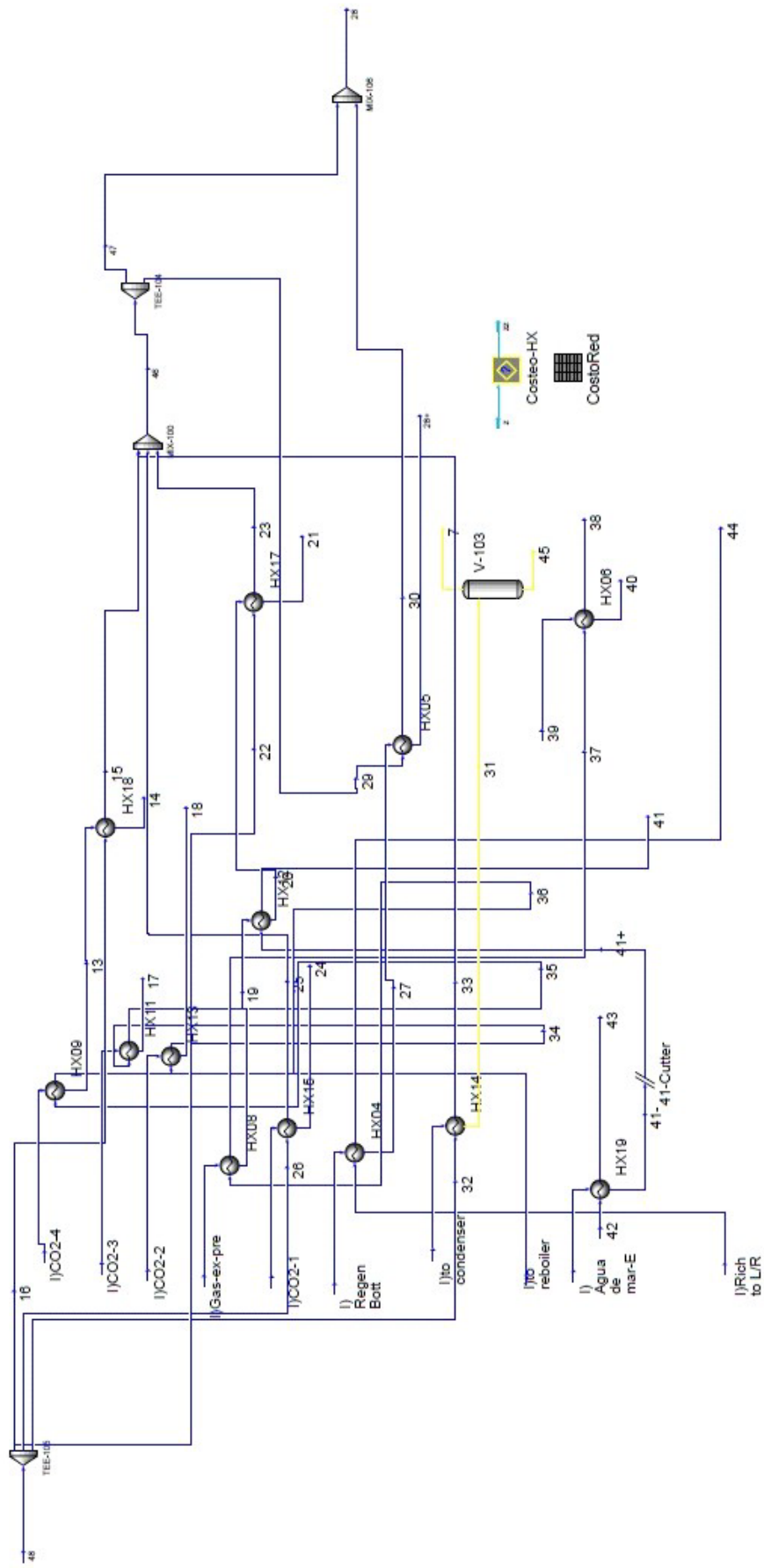


Figura V.26: Red aislada





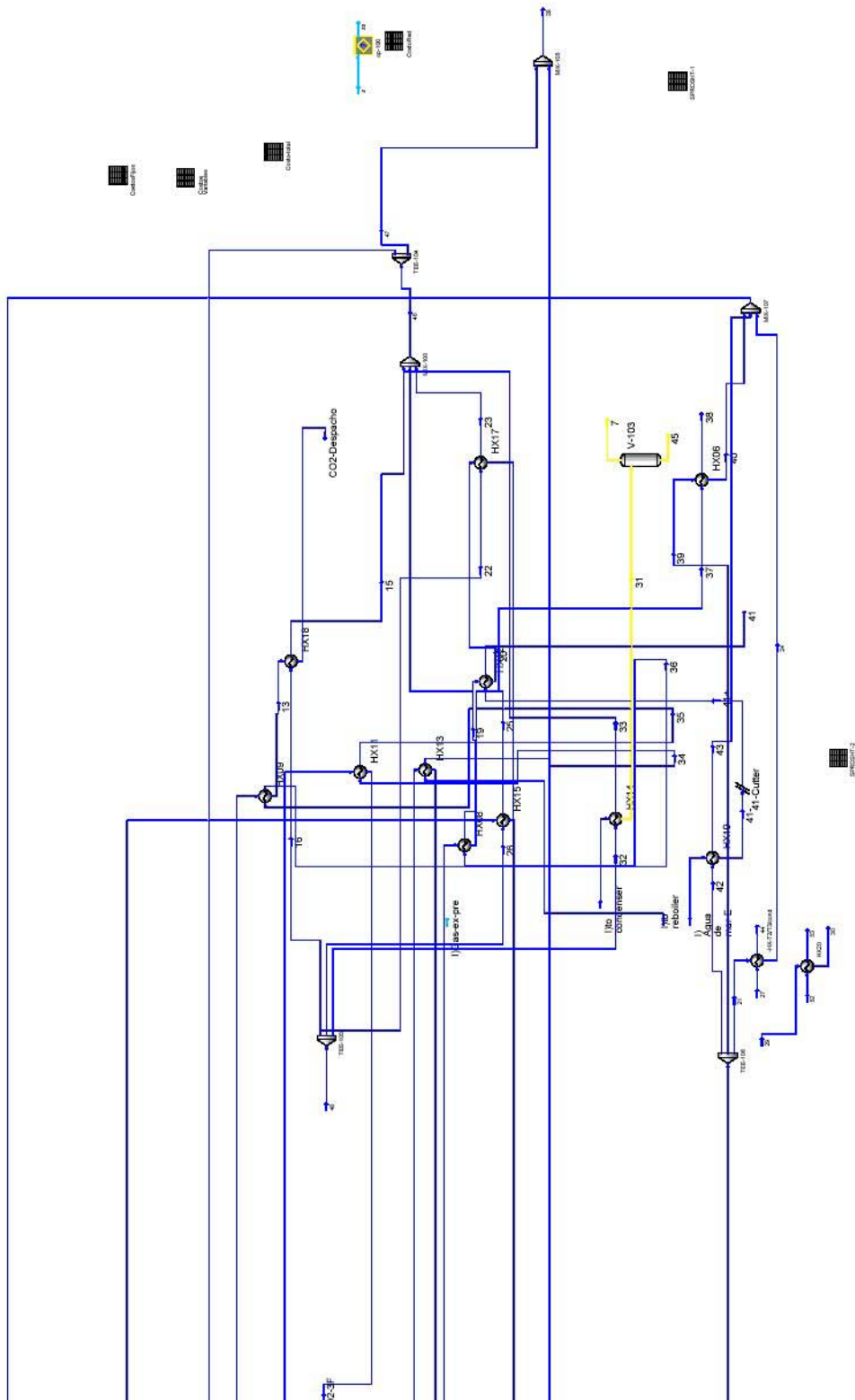


Figura V.27: Acoplada a la planta

Una vez implementado en Hysys® y recalculado los intercambiadores queda:

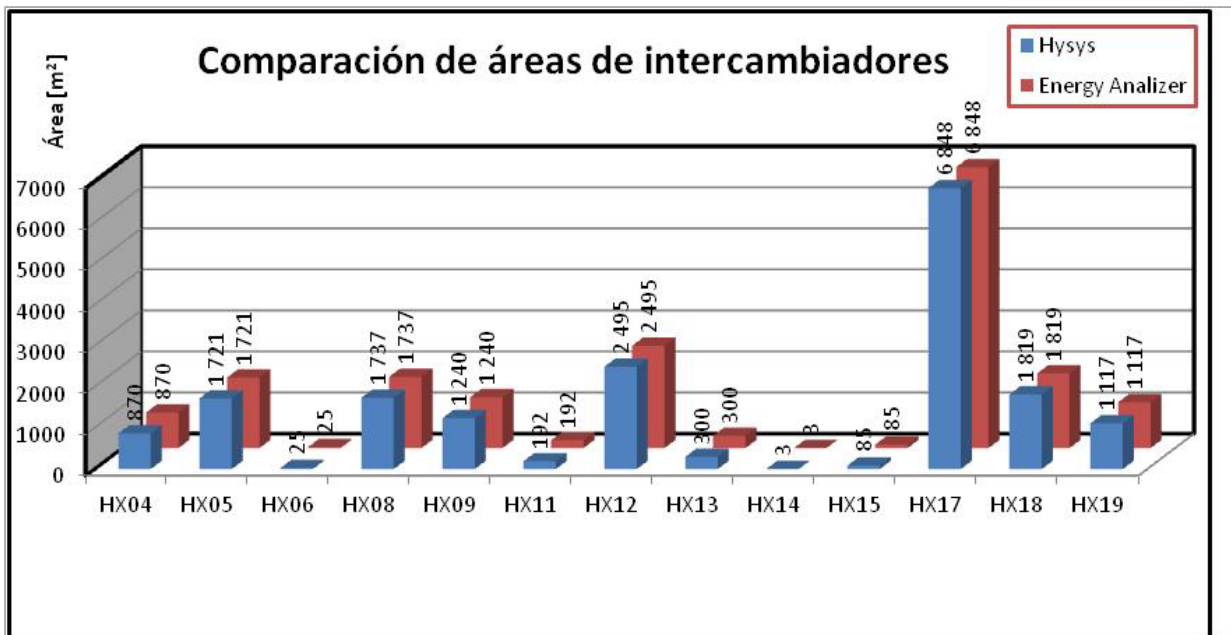


Figura V.28: Comparación de intercambiadores

### **Resultados comparativos del caso integrado y el sin integrar.**

Para concluir, el resultado obtenido para la planta sin integrar es:

<<<<<<< Potencia >>>>>>>	Costo Individual	Trenes	Costo Parcial	Subtotales
Compresor	8,156E+06	1	8,156E+06	
Combustor	1,273E+06	1	1,273E+06	
Expansor (TG)	1,664E+07	1	1,664E+07	
Expansor (TV)	1,989E+07	1	1,989E+07	
Precalentador	5,921E+04	1	5,921E+04	
Evaporador/Recalentador	4,684E+06	1	4,684E+06	
Bomba Reciclo agua	5,714E+05	1	5,714E+05	
Condensador	5,078E+04	1	5,078E+04	5,133E+07
<<<<<<< Captura >>>>>>>	Costo Individual	Trenes	Costo Parcial	Subtotales
Compresor Gas ácido	5,868E+06	1	5,868E+06	
Enfriador 1º	8,509E+03	3	2,553E+04	
DEA-Contactor	1,292E+06	3	3,875E+06	
Precalentador columna	4,074E+05	3	1,222E+06	
Enfriador amina	1,675E+05	3	5,025E+05	
Regenerator	4,949E+05	3	1,485E+06	
Bomba circulacion amina	4,248E+03	3	1,274E+04	
Condensador columna	8,521E+03	3	2,556E+04	
Rehervidor columna	1,112E+05	3	3,336E+05	
Compresor CO <sub>2</sub>	4,684E+06	3	1,405E+07	2,740E+07

<<<<<<< Desalador >>>>>>>	Costo Individual	Trenes	Costo Parcial	Subtotales
Camaras y calentador	2,063E+06	3	6,188E+06	6,188E+06

Total fijos	8,492E+07
-------------	-----------

Tabla V-8: Caso sin integrar-Costos fijos

Cuyos costos resultan:

Costos fijos	8,492E+07	U\$s
Costos variables	9,521	u\$s/seg
Costo total	10,090	u\$s/seg
Potencia	248	MW
Agua	3,00E+06	litros/h

Tabla V-9: Caso sin integrar- Costos unitarios

Ahora bien, si todo el costo fuera adjudicado sólo a la potencia nos daría que cada Kwh costaría 0,14646 u\$s mientras que si se lo hiciera para el agua, cada metro cúbico costaría 12,108 u\$s. El tema de distribución de costos es un problema cuyo análisis excede los límites de esta tesis. Existen trabajos como el de Al-Sofi, et al en “Fuel allocation in Dual Purpose Plant”, entre otros, que lo estudian en detalle. En cierto modo, se carga a potencia todo el costo referente a su generación y al agua lo de su producción (equipos y servicios exclusivos a cada uno de ellos), mientras que aquellos costos compartidos por ambos se distribuyen con al algún criterio (energía o exergía de cada uno de los procesos duales).

Para la planta integrada se obtienen los siguientes resultados:

<<<<<<< Potencia >>>>>>>	Costo Individual	Trenes	Costo Parcial	Subtotales
Compresor	8,156E+06	1	8,156E+06	
Combustor	1,273E+06	1	1,273E+06	
Expansor (TG)	1,664E+07	1	1,664E+07	
Expansor (TV)	1,962E+07	1	1,962E+07	
Pre calentador	5,904E+04	1	5,904E+04	
Evaporador/Recalentador	4,684E+06	1	4,684E+06	
Bomba Reciclo agua	5,711E+05	1	5,711E+05	5,100E+07

<<<<<<<<< Captura >>>>>>>>>	Costo Individual	Trenes	Costo Parcial	Subtotales
DEA-Contactor	1,292E+06	3	3,875E+06	
Regenerator	4,949E+05	3	1,485E+06	
Bomba circulacion amina	4,248E+03	3	1,274E+04	
Compresor CO <sub>2</sub>	4,282E+06	3	1,285E+07	
Compresor Gas acido	5,631E+06	1	5,631E+06	1,822E+07

<<<<<<<<< Desalador >>>>>>>>	8,990E+05	3	2,697E+06	2,697E+06
------------------------------	-----------	---	-----------	-----------

<<<<<< Red de Intercambio >>>>>>>>	Costo Individual	Trenes	Costo Parcial	Subtotales
Integracion	4,504E+05	3	1,351E+06	
Condensador vapor	2,359E+04	1	2,359E+04	1,375E+06

Total fijos

7,329E+07

Tabla V-10: Caso integrado- Costos fijos

Costos fijos	7,892E+07	U\$
Costos variables	2,809	u\$
Costo total	3,337	u\$
Potencia	245,93	MW
Agua	3,00E+06	litros/h

Tabla V-11: Caso integrado- Costos unitarios

En este caso, los costos unitarios (con el mismo criterio que el mencionado antes) serían de 0,048851 u\$

Como detalle cabe apreciar que los intercambiadores de la red resultan más económicos que los requeridos en la planta sin integrar, pero las mayores reducciones se aprecian en los costos operativos

A continuación un detalle de los resultados de dicha red, equipo por equipo:

Equipo	Carga	Área	Costo
	KJ/s	m <sup>2</sup>	u\$
HX01	8,702E+04	942	3,224E+04
HX09	8,415E+03	326	3,112E+04
HX18	1,705E+04	2513	4,762E+04
HX11	3,619E+03	192	2,617E+04
HX13	3,345E+03	300	2,698E+04
HX08	1,777E+04	3047	4,216E+04
HX12	1,061E+04	2495	4,035E+04
HX17	3,474E+04	6848	5,052E+04
HX15	9,133E+02	85	2,026E+04
HX14	4,953E+02	3	1,148E+04
HX06	8,491E+02	47	1,805E+04
HX19	7,215E+04	1274	3,504E+04
HX04	4,757E+04	823	3,150E+04
HX05	2,991E+04	1735	3,686E+04
HX20	4,695E+04	197	2,359E+04

Tabla V-12: Intercambiadores de la red



## ***V.X Conclusiones:***

En el presente capítulo se ha presentado una metodología de trabajo para un sistema dual (agua y energía eléctrica) sustentable (captura de CO<sub>2</sub>). Para ello se ha hecho uso de los modelos rigurosos presentados, ajustados y verificados en los capítulos precedentes para su aplicación.

Además, se ha estudiado, mediante el mismo caso, cómo encarar la integrar energética mediante una herramienta ad-hoc pudiéndose apreciar de que manera una alternativa demasiado costosa (la captura) puede hacerse atractiva mediante la integración energética obteniéndose, a su vez, agua potable para su uso humano en lugar de resultar en costosos servicios auxiliares (agua de enfriamiento).

## Capítulo VI

### ***VI.1 Conclusiones***

En esta tesis se desarrollaron modelos simplificados y rigurosos para el sistema de desalinización de agua de mar por simple propósito (sólo producción de agua dulce) y para procesos por doble propósito (producción de agua y generación de potencia), al igual que para el proceso de captura de CO<sub>2</sub> generados en la planta de generación de potencia. A continuación se resumen las principales conclusiones obtenidas en cada capítulo. Finalmente, en la última sección se detallan las principales líneas de investigación que surgen a partir del desarrollo de la presente tesis.

#### **VI.1.1 Capítulo II**

Se ha desarrollado un modelo simplificado que permite estimar el costo del agua dulce producido y determinar las principales variables de operación del desalador. Además, permite una aproximación al óptimo minimizando costos. No obstante, si bien se tiene la ventaja de estimar fácilmente las relaciones entre las principales variables de operación y/o inversión, el problema principal de estos modelos “agregados” es que no permiten calcular adecuadamente los perfiles de temperaturas (en cada etapa) y los flujos internos en cada cámara, al igual que los niveles de líquido, que son importantes para establecer dichos flujos. En efecto, el gradiente de presiones entre cámaras determina (dada un área de paso entre cámaras para el flujo) el caudal que circula. Existen otros problemas tales como considerar la elevación del punto de ebullición, que depende del perfil de temperaturas y composiciones, y las variaciones de los coeficientes de transferencia de calor en los intercambiadores asociados a cada etapa, entre otros factores.

En síntesis, para asegurar la factibilidad de un proceso de desalación, o uno dual, y más aún si se lo integra a una planta de captura; un modelo reducido como el explicado aquí, puede resultar limitado. No obstante, el mismo resulta sumamente útil para aproximar tendencias como consecuencia de variaciones en los principales parámetros, y además, estimar inicializaciones para modelos rigurosos y garantizar su convergencia, ya sea con el propósito de simular y/o optimizar.

Las limitaciones del modelo simplificado fueron superadas con el desarrollo de un nuevo modelo, llamado modelo riguroso el cual contempla los balances de materia y energía en cada cámara de evaporación flash, y la transferencia de calor en cada

intercambiador de calor asociado. De esta manera, se obtienen los perfiles de las variables más importantes (presión, temperatura, caudales de vapores y líquidos, concentraciones de salmuera). Asimismo, las irreversibilidades y la elevación del punto de ebullición se calculan en las condiciones de cada cámara, utilizando para ello las correlaciones fisicoquímicas que aproximan todas las variables de interés adecuadamente, en el rango de operación.

Al disponer de los datos mencionados, es posible plantear el balance de energía global y en cada cámara, en forma semejante al de materia global y por componente.

Al modelar a través de Hysys®, se representa cada cámara por medio de un conjunto de sumadores, divisores y equipos de separación flash al igual que un intercambiador de calor para proveer el área necesaria para la transferencia de calor, según lo indicado en detalle en el próximo capítulo.

No obstante, para asegurar un adecuado desempeño o factibilidad en el funcionamiento según diversas condiciones, es necesario contemplar el diseño de los internos y las condiciones hidrodinámicas del evaporador EFME. En efecto, el flujo de salmuera se origina entre cada cámara, a partir de un gradiente muy bajo de presión, y un área de paso generada en la base del equipo, a lo ancho del mismo y con una altura del gate (o compuerta) que puede regularse. Estas condiciones de flujo se asemejan a las de un canal abierto. Se introducen, por lo tanto, ecuaciones no lineales para el modelado de la hidrodinámica.

En otras palabras, se debe acoplar el balance de cantidad de movimiento. Esto exige un manejo “avanzado” en el uso del Hysys®. Este modelo riguroso, se detalla en el capítulo siguiente.

### **VI.1.2 Capítulo III**

En este capítulo se presentó una estrategia de modelo rigurosa de un desalador EFME. El mismo implicó de una modificación de la fisicoquímica disponible en Hysys® y del empleo de las operaciones de usuarios programables a fin de hacer que el modelo del desalador opere como un procesos de etapa variable. En el mismo no solo fueron considerados los balances de materias y energía de rigor sino también que la hidráulica fue tomada en cuenta para modelar el proceso de manera más rigurosa.

El modelo riguroso fue comparado con otros publicados por autores reconocidos con resultados satisfactorios.

### VI.1.3 Capítulo IV

El proceso de captura de CO<sub>2</sub> por absorción utilizando soluciones de aminas ha sido estudiado en su conformación estructural y de costos a fin de lograr un diseño óptimo dados diferentes requerimientos de potencia, de gas quemado (composición y flujo), de recuperación de dióxido de carbono o de concentración de aminas.

Basados en los datos obtenidos de numerosas optimizaciones se diseñó un modelo paramétrico reducido a fin de ser empleado como inicialización al modelo riguroso sin los problemas de convergencia que éste implica y con un reducido margen de error.

El modelo, luego fue exitosamente confrontado frente a un optimizador como el GAMS (The General Algebraic Modeling System). Los resultados resultaron ser bastantes consistentes aún tratándose de filosofías conceptuales de modelado y utilizando algoritmos de optimización muy diferentes.

Los resultados obtenidos correspondientes al presente capítulo dieron lugar a las siguientes publicaciones:

- Optimization of CO<sub>2</sub> Post-combustion Process using DEA-MDEA mixtures. (2011). Nestor Rodriguez, Nicolás Scenna, Sergio Mussati. (2011). *Chemical Engineering Research And Design*. Vol. 89 (9), pp. 1763-1773. ISSN: 0263-8762. Elsevier Science B.V. Ltd. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2010.11.009>
- CO<sub>2</sub> capture in power plants: Minimization of the investment and operating cost of the postcombustion process using MEA aqueous solution. (2012). Patricia Mores, Néstor Rodríguez, Nicolás Scenna, Sergio Mussati. *International Journal of Greenhouse Gas Control*. Vol. 10, pp. 148-163. Elsevier B.V. Ltd. ISSN: 1750-5836. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2012.06.002>
- “Desarrollo de un modelo matemático simple para el diseño de una planta de captura de dióxido de carbono” Nestor Rodriguez, Nicolas Scenna, Sergio Mussati. Tercer Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial, III MACI 2011, Bahía Blanca, 9, 10 y 11 de mayo de 2011 organizado por el Departamento de Matemática de la Universidad Nacional del Sur, la Sección Argentina de SIAM-Society for Industrial and Applied Mathematics - USA, y la

Asociación Argentina de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial, ASAMACI.

#### **VI.1.4 Capítulo V:**

El acople final de todos los modelos para representar el proceso completo esto es, desalinización de agua de mar, generación de electricidad y captura de CO<sub>2</sub>, se presentó y discutió en este capítulo. Para ello se propuso una estrategia de resolución y optimización apropiada para abordar el diseño óptimo que implique la máxima integración energética posible entre los procesos. En otras palabras, las optimizaciones se realizaron considerando como función objetivo la eficiencia total del sistema la cual es definida en términos de disminución de costos totales.

La estrategia aquí presentada en este capítulo puede ser extendida al caso de considerar como función objetivo el costo total anual (costo total de inversión más costo total de operación). Más aun, las soluciones optimas obtenidas por la metodología propuesta representan excelentes valores iniciales para resolver el problema de optimización basado en costos ya que al satisfacerse la totalidad de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento restricciones dichas soluciones son realmente soluciones factibles de cualquier problema de optimización independientemente de la función objetivo considerada. El hecho de contar con una excelente fase de inicialización asegura la convergencia del modelo aunque no su optimalidad global.

#### ***VI.2 Trabajos Futuros.***

Son varias las alternativas factibles de explotarse en mayor dimensión que debido a su extensión quedaron fuera de los límites de este trabajo. Los mismos se mencionan brevemente a continuación.

- **Distribución de costos para definir los precios de venta de la electricidad y agua dulce.**

En el capítulo V se mencionó el tema de la distribución de costos cuando coexisten 2 o más productos en una misma planta. Y si esto de por sí es complicado más aún en la planta integrada en la que los límites de cada proceso se pierden por completo.

- **Aspectos de modelado matemático**

El número de etapas en la columnas de destilación y absorción en el proceso de captura se debieron fijar debido a que el Hysys® no permite optimizar sobre ellas. No obstante existen alternativas para ello como se demostró en el MSF que, mediante una codificación apropiada, sin modificar la topología, la misma funcionó como si realmente se hubiera hecho.

El punto quizás más desafiante es la posibilidad de considerar las presiones intermedias en la turbina de vapor como variables de optimización. Con esta opción, a pesar que la cantidad de variantes posibles de integración desde el punto de vista energético se incrementa considerablemente, permitirá identificar configuraciones más eficientes. Sin embargo, dicha consideración implicará modificar ligeramente el procedimiento de optimización propuesto en el Capítulo V. Tal vez resulte necesario recurrir al desarrollo de una metodología que combine tanto a HYSYS como a GAMS. HYSYS podría ser utilizado para realizar simulación y/o optimizaciones rigurosas para configuraciones fijas y GAMS para determinar, mediante modelos simplificados, las configuraciones que deben ser simuladas y/o optimizadas en HYSYS. De esta manera con el uso de GAMS se explotará la ventaja de resolver el espacio de las variables discretas relacionadas con la configuración del proceso mientras que el uso de HYSYS explotara la ventaja de simular y/o optimizar configuraciones fijas utilizando modelos rigurosos para la estimación de las propiedades físico químicas de los gases de combustión, combustible, agua y vapor de agua como así también las correspondientes a la solución de amina.

## ***ANEXO I: Algunas características del simulador Hysys®***

### ***1 Introducción.***

El Hysys® es un simulador de procesos comercial basado principalmente en la filosofía modular. Esto significa que los diferentes equipos de procesos están representados por módulos, subrutinas de resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas que tratan de emular los fenómenos que ocurren en dicha operación o equipo.

En general, cada módulo resuelve un modelo que se obtiene a partir del planteo de balances de materia, energía y en algunos casos de cantidad de movimiento. Cuando corresponde deben expresarse relaciones de equilibrio químico o de fases, al igual que todas las expresiones algebraicas que deban plantearse para la estimación de las propiedades fisicoquímicas y de transporte. Estas relaciones expresadas en forma matemática implican a menudo complejos sistemas de ecuaciones no lineales que deben ser resueltos a través de métodos numéricos apropiados.

Esto conforma el banco de módulos de equipos y módulos de estimaciones de propiedades de transporte y fisicoquímicas del simulador.

En la concepción modular secuencial, los módulos se resuelven en el sentido de las corrientes materiales, esto es, dado como datos sus corrientes de entrada y parámetros del equipo (que cierran los grados de libertad del sistema) se calculan todas sus salidas. En estos casos no es posible calcular una entrada conociendo las salidas y el resto de las entradas aunque el sistema tenga una solución real. Esto es debido a la forma en que se adopta la filosofía modular secuencial.

En el caso particular del Hysys®, su filosofía híbrida le permite en ciertos casos orientar el sentido de cálculo, esto es, calcular algunas entradas a la planta o módulo de equipo en función de sus salidas y determinados parámetros del equipo, en función de las combinaciones posibles que están disponibles en la biblioteca de módulos de equipos.

Por otra parte, existen simuladores globales u orientados a ecuaciones en los cuales todos los equipos y las ecuaciones que los representan se calculan en forma

simultánea. Este tipo de simuladores implica desventajas como las que el sistema a resolver se torna muy complejo, perdiéndose la relación entre variable y equipo asociado y siendo además necesaria, una buena inicialización de las variables a iterar. Por el contrario, facilita el problema de optimización al emplear un modelo global del problema.

Los simuladores modulares solo se preocupan de resolver un modulo a la vez y por el método más eficiente. Esto implica que al agregar una función objetivo, solo algunos métodos pueden utilizarse eficientemente ya que los gradientes son difícilmente calculables, al estar las ecuaciones agrupadas implícitamente en los distintos módulos seleccionados para representar el proceso. También es dificultoso incorporar y tratar restricciones al problema de optimización, ya que las variables restringidas pueden pertenecer a distintos módulos en la biblioteca de módulos del simulador.

En general, no todos los equipos u operaciones se encuentran en la biblioteca de módulos de un simulador, siendo en ocasiones necesario para simular un proceso la asociación de varios módulos a fin de representar a un equipo determinado. En casos extremos se debe recurrir a la programación de módulos propios los que se agregan al simulador para ser conectados con aquellos existentes en la biblioteca de módulos o equipos.

En nuestro caso, un ejemplo de lo expuesto es la turbina de gas. Se sabe que está conformada de un compresor de aire, un precalentador, un combustor (en donde se quema el combustible) y de un expansor en donde los gases pierden presión y entregan su potencia mecánica a los álabes de la misma cuyo eje es solidario a un generador de energía eléctrica que entrega la potencia. Un modelo para el sistema, utilizando los módulos disponibles en Hysys ® es el que indica la figura AI.1:





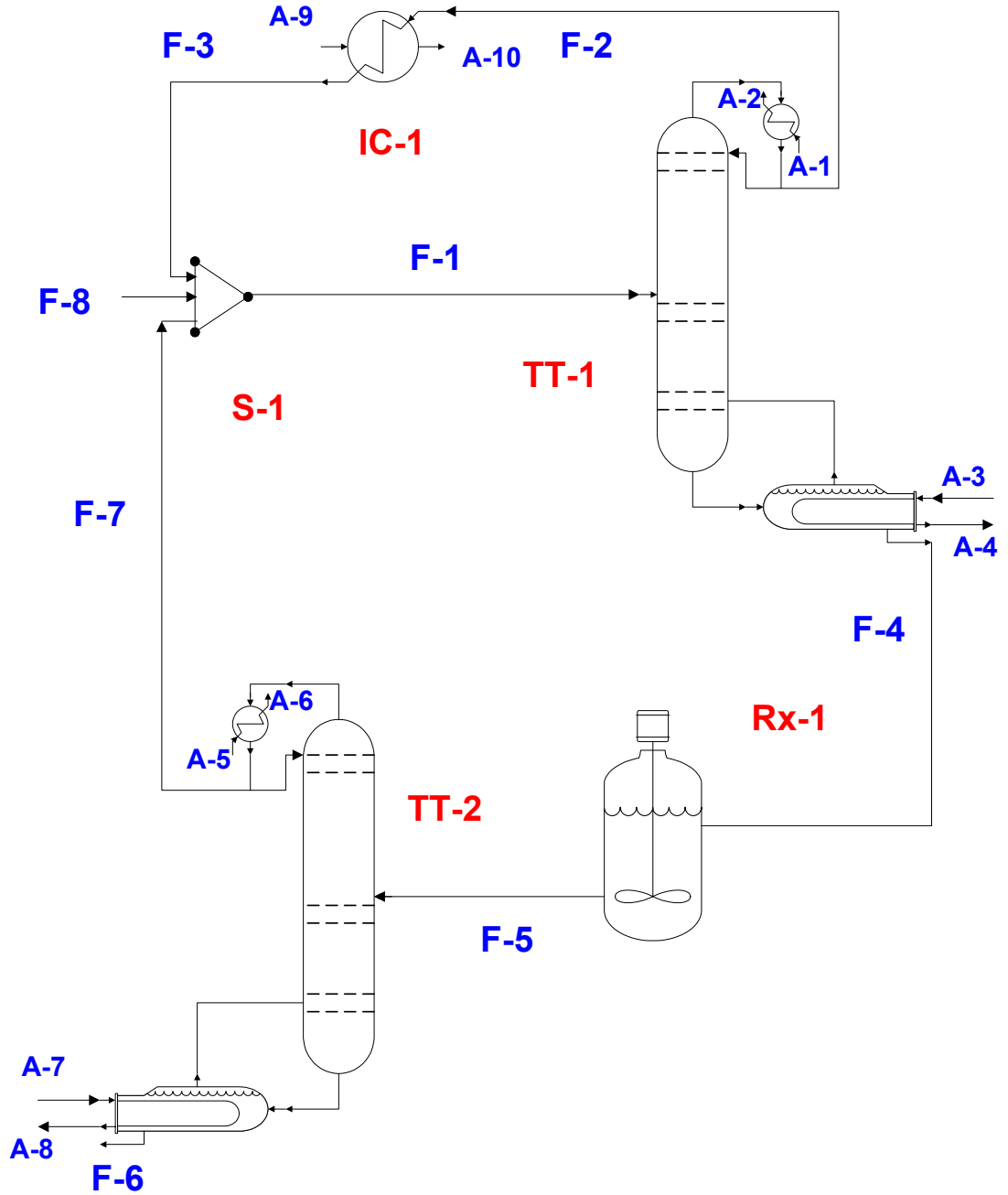


Figura AI-2 Flowsheet del sistema de recuperación de CO<sub>2</sub>

Si bien las columnas están contenidos en ciclos, pueden considerarse como un único módulo (sub-flowsheet) y de este modo podemos reducir el flowsheet anterior en uno más sencillo:

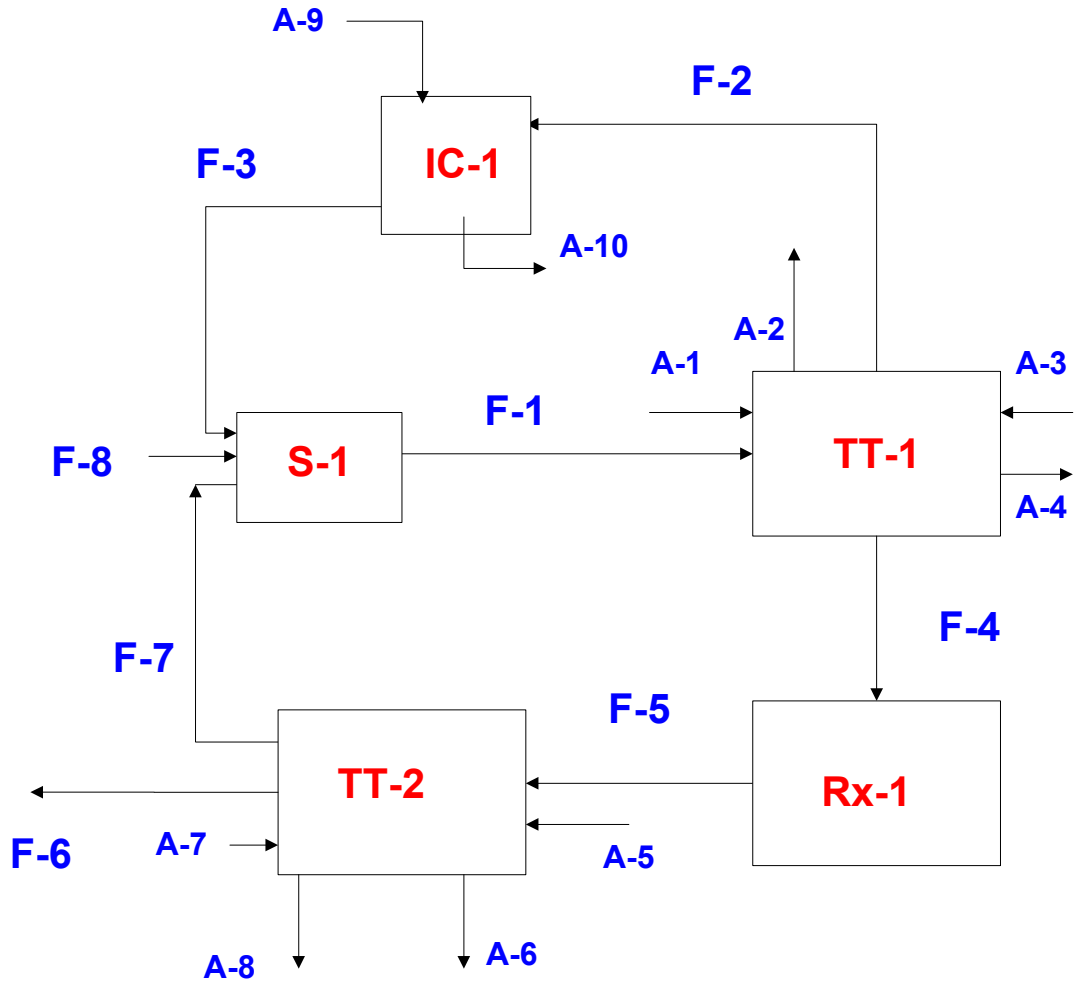


Figura AI-3: Grafo genérico representando el flowsheet anterior

El rasgado es la operación que permite determinar el número de ciclos presentes en el flowsheet. En el caso de ejemplo hay 2. Uno de 3 caminos de distancia y que lo forman los equipos S-1, TT-1 y el IC-1. Hay otro ciclo de 4 que lo forman S-1, TT-1, Rx-1 y TT-2.

Puesto que en una estrategia secuencial para resolver cada módulo en forma individual se necesita conocer todas sus entradas y algunas de esas entradas procede de equipos que aun no están resueltos, el problema no puede resolverse en primera instancia sin iterar

En efecto, si asumimos (rasgamos) algunas de las corrientes asignando valores a las variables (flujo, presión, temperatura y composición) podríamos resolver la

secuencia uno de los equipos y de este modo resolver el proceso completo. El algoritmo equivale a la transformación de un proceso cíclico en uno abierto o lineal.

Los métodos de particionado permiten determinar el conjunto mínimo de corrientes de corte. A priori podría suponerse que se necesitarían tantas corrientes de corte como ciclos haya, pero no es así.

En nuestro ejemplo, de la aplicación de dicho método, se encuentra que para cortar los dos ciclos presentes se requiere solo una corriente de corte convenientemente seleccionada, esta es, la corriente F-1.

Asumida la/s corriente/s de corte queda determinada una cierta secuencia de resolución de módulos, es el llamado ordenamiento.

Volviendo al ejemplo: una vez definida la corriente F-1, y conocidas todas las entradas (F-8, A-1, A-3, A-5, A7 y A-9) se puede resolver el módulo TT-1 y sus corrientes de salida (A-2, A4 y F-4). Luego el módulo IC-1 (salidas A-10 y F3), el modulo Rx-1 (salida F-5). El modulo TT-2 (salidas A-6, A8, F-6 y F7) y por último el módulo S-1 (salida F-1). Aquí se ve que la salida del último módulo es la misma corriente que supusimos al comienzo. Si sus variables (flujo, presión, temperatura y composición) coinciden (con cierto margen de error) decimos que el problema está resuelto.

En caso contrario, los valores obtenidos en F-1 se emplean nuevamente para recomenzar la secuencia de cálculo ya expuesta (método de sustitución directa). Si el problema converge los valores de cada iteración se aproximarán tanto como se desee. En cambio si el problema tiende a divergir en un número máximo de iteraciones permitido (esto puede deberse a una mala inicialización de F-1, la naturaleza del problema en alguno de los módulos que no converge, o a que el problema no presenta ninguna solución factible), será necesario suponer un nuevo valor para cada una de las corrientes de iteración.

Dentro de este contexto, dicha operación trabaja asignando valores a la corriente de corte (salida del RECYCLE) permitiendo de esta forma resolver todo el ciclo. Una vez resuelta la corriente a la que está conectado el RECYCLE (su entrada) esta operación compara los valores estimados con aquellos calculados. Si el error satisface

cierto criterio de tolerancia dada se considera resuelto el ciclo, de lo contrario usa los valores recién calculados para reiniciar todo el cálculo. Repite esto hasta la convergencia teniendo en cuenta el máximo número de iteraciones permitido.

Debe destacarse que el análisis anterior supone módulos estructurados según la filosofía modular secuencial pura. Si se utilizan módulos híbridos, es decir, que pueden ser resueltos según cierta combinación de corrientes de entrada y/o salida conocidas (y no sólo aquellas en las cuales solo se suponen conocidas las entradas), no significa el que no existe la necesidad de corrientes de corte, es decir, la existencia de ciclos. No obstante, se logra una relajación en cuanto a las alternativas de los sentidos de resolución de corrientes y su orientación en el grafo o diagrama de flujo, por lo que el número de corrientes iteradoras necesarias en un simulador híbrido es menor o igual al que resulta si los módulos fueran orientados según la filosofía secuencial pura.

Otra operación lógica de gran importancia en nuestro caso es la SPREADSHEET. Mediante la misma podemos introducir las ecuaciones de costo o relacionar corrientes y valores entre las mismas. De esta manera a cada solución de la simulación se le asocia un costo total calculado según expresiones que se introducen como usuario. Este será función entre otras, de ciertas variables que consideramos optimizables (variables de optimización) y de ciertas relaciones de restricción que deberán ser satisfechas para que la solución sea aceptable (conjunto de soluciones factibles).

### **3 Métodos de optimización disponibles en HYSYS (OPTIMIZER)**

En la tabla siguiente se resumen los mismos, con sus características principales:

Método	Problemas sin restricciones	Problemas con restricciones		Cálculo de las Derivadas
		Desigualdades	Igualdades	
BOX	X	X		
MIXED	X	X		X
SQP	X	X	X	X
FLETCHER REEVES	X			X
QUASI-NEWTON	X			X

*Tabla AI-1: Métodos de Optimización implementados en Hysys®*

El simulador comercial Hysys® incluye un optimizador multivariable de estado estacionario. Una vez lograda la convergencia del flowsheet, se pueden definir las variables de optimización para encontrar una solución óptima ya sea maximizando o minimizando una función objetivo determinada. Al igual que en el esquema general, Hysys® permite el armado de una función objetivo que se define en una hoja de cálculos ad-hoc (spreadsheet) que permite relacionarla con las variables del modelo (proceso) a optimizar.

Una vez definida la función objetivo (a ser maximizada o minimizada) se deben definir las relaciones de restricción, esto es, límites para ciertas variables de operación o expresiones basadas en las mismas.

Para facilitar el tratamiento numérico, es conveniente normalizar todas las variables, por ejemplo según la siguiente definición para las variables de optimización:

$$x_{norm} = \frac{x - x_{inferior}}{x_{superior} - x_{inferior}} \quad (68)$$

Los valores del intervalo deberá considerar que el flowsheet tenga valores razonables, ejemplo, en un intercambiador de calor evitar la posibilidad de cruce de temperaturas.

Se define como el número *máximo de evaluaciones* de la función como el mayor número de veces que será calculada una porción relevante del flowsheet en cada interacción. No debe confundirse con el número de iteraciones. Se asocia con que en una cierta iteración cierta parte del flow debe recalcularse varias veces.

La *tolerancia* aplicada a la función objetivo o a las variables primarias es un criterio de convergencia mientras que el *número máximo de iteraciones* detiene el cálculo independientemente de si dicha convergencia fue lograda o no.

A fin de suavizar la variabilidad de las variables primarias, Hysys® define un *máximo cambio por iteración*.

Como ciertos métodos de optimización utilizan derivadas de la función objetivo y puesto que ésta se realiza en forma numérica se impone la definición de un cierto incremento en las variables, que facilite la convergencia y permita en lo posible cierto grado de aceleración del proceso. Para lograr este trade-off se asigna valor a los parámetros ShiftA y ShiftB de tal modo que afecte a la variable primaria  $x$  según:

$$x_{SHIFT} = ShiftA * x + ShiftB \quad (69)$$

Que aplicada a la ecuación siguiente permite evaluar la tasa de cambio de la función evaluada (derivada):

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{y_2 - y_1}{x_{SHIFT}} \quad (70)$$

$y_2 =$  valor de la variable afectada correspondiente a  $x + x_{SHIFT}$

$y_1 =$  valor de la variable afectada correspondiente a  $x$

### **Método BOX**

Vagamente basado en el método de “caja negra”, este método resuelve problemas con funciones objetivo no lineales sujetos a restricciones de desigualdades no lineales. No requiere el cálculo de derivadas ni soporta restricciones de igualdad.

No es un método eficiente ya que requiere gran cantidad de evaluaciones, pero en los casos en que es aplicable resulta ser muy robusto. El mismo opera de la siguiente manera:

1. Dado un punto de arranque factible, el programa genera un complejo de  $n+1$  puntos alrededor de ese punto tomado como centro dentro de la región factible ( $n$  es el número de variables).
2. Se evalúa la función objetivo en cada punto. El punto con el valor más alto se reemplaza por el obtenido por extrapolación a través de la cara de dicho complejo cruzándolo desde el punto de valor alto (reflexión).

3. Si el nuevo punto reduce la función objetivo Hysys® intenta una nueva extrapolación. De otro modo, si el nuevo punto es peor que el segundo punto más alto, hysys® realiza una contracción unidimensional.
4. Si un punto mantiene un cierto valor alto, todos los puntos son contraídos alrededor del punto más bajo.
5. El nuevo punto debe satisfacer tanto los límites de las variables como las restricciones de desigualdad. Si se viola un límite, el punto se traslada hasta dicho límite. Si se viola una restricción, el punto se mueve a lo largo de la centroide de los puntos remanentes hasta que dicha restricción se satisfaga.
6. Repetir los pasos 2 hasta 5 hasta lograr el criterio de convergencia esperado.

#### *Método SQP*

El método de programación cuadrática secuencial (SQP) maneja restricciones tanto de igualdades como de desigualdades. Es considerado por muchos como el más eficiente cuando sus variables primarias son provistas de una razonable iniciación y el número de las mismas es reducido.

Lo hace minimizando una aproximación cuadrática de la función Lagrangiana sujeta a aproximaciones lineales de las restricciones. La matriz de la derivada segunda se estima automáticamente. La convergencia se fuerza empleando la técnica “watchdog”.

#### *Método MIXTO*

Este método toma las ventajas de las características de convergencia global del método BOX con la eficiencia del método SQP. Se inicia la minimización con el método BOX usando una tolerancia relajada (50 veces la tolerancia deseada). Después de la convergencia se aplica el método SQP para hallar la solución final con la tolerancia deseada.

#### *Método FLETCHER REEVES*



El procedimiento implementado es la modificación de Polak-Ribiere del esquema de gradiente conjugado de Fletcher-Reeves. Este método es eficiente para la minimización de problemas sin restricciones.

Procedimiento:

- 1 Dado un punto de inicio se evalúa la derivada en la función objetivo con respecto a las variables primarias.
- 2 Evalúa la nueva dirección de búsqueda como la conjugada al viejo gradiente.
- 3 Mejora la búsqueda unidimensional a lo largo de la nueva dirección hasta que se alcance el mínimo local.
- 4 Si cualquier variable excede sus límites se retrocede hasta dicha frontera
- 5 Se repite los pasos 1 al 4 hasta lograr la convergencia

#### *Método QUASI-NEWTON*

El simulador Hysys® implementa el método Quasi-Newton de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS). Este método comparte la aplicabilidad y limitaciones del Método FLETCHER REEVES.

Este método calcula la nueva dirección de búsqueda a partir de aproximaciones de la inversa de la matriz Hessiana.

## ANEXO 2: Modelado de equipos asociados al ciclo de Potencia

A continuación se describen las ecuaciones que conforman los modelos asociados a los módulos seleccionados en Hysys® para modelar el sistema de generación de potencia.

### 1 Modelo del Compresor de Aire

El compresor eleva la presión del aire para introducirlo en la cámara de combustión y su esquema se muestra en la figura siguiente. Las ecuaciones que modelan al sistema son:

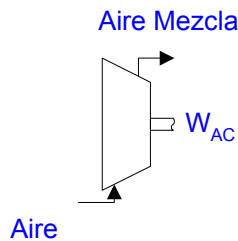


Figura A2.1: Esquema del compresor de aire

$$T_{AM} - T_A \left\{ 1 + \frac{1}{\eta_{AC}} \left[ \frac{P_{AM}}{P_A} \right]^{\frac{\gamma_a - 1}{\gamma_a}} - 1 \right\} = 0 \quad [1]$$

$$\dot{W}_{AC} - \dot{m}_a * C_{p_a} (T_{AM} - T_A) = 0 \quad [2]$$

$$F_{AM} - F_A = 0 \quad [3]$$

$$P_A + \Delta P_{AC} - P_{AM} = 0 \quad [4]$$

Donde:

$T_A$  y  $P_A$ : temperatura y presión de entrada (“Aire”)

$T_{AM}$  y  $P_{AM}$ : temperatura y presión de salida (“Aire Mezcla”)

$\eta_{AC}$ : eficiencia del compresor

$\dot{m}_a$ : flujo de “Aire”

$W_{AC}$ : Potencia del compresor

$\gamma_a$ :  $C_p/C_v$  del aire

$C_{p_a}$ : capacidad calorífica a presión constante del aire

$F_A, F_{AM}$ : los flujos másicos de entrada y salida

$P_{AM}, P_A, \Delta P_{AC}$ : presión de entrada, salida y elevación de presión del compresor

La composición de la corriente de salida es igual a la de entrada.

## 2 Modelo de Cámara de combustión

Se modela el proceso de combustión del combustible. Se considera la posibilidad de emplear1 aire en exceso. Para el caso del gas natural (tomado como metano) con aire (tomado como Nitrógeno y Oxígeno), las ecuaciones resultantes son:

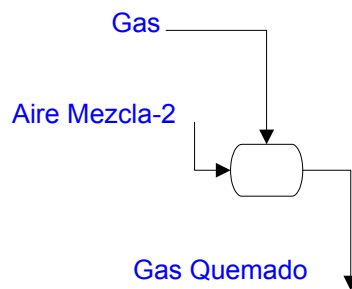
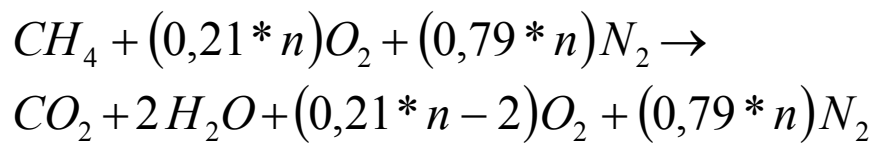


Figura A2.2: Esquema de la cámara de combustión

Relaciones estequiométricas y balances:



Donde n es la cantidad de moles de aire aspirado por mol de metano.

*Balance de energía:*

$$M_{AM2} * H_{AM2} + M_{Gas} * H_{Gas} + M_{Gas} * LHV - M_{GQ} * H_{GQ} = 0 \quad [5]$$

$$F_{AM2} + F_G - F_{GQ} = 0 \quad [6]$$

$$P_{AM2} - P_G = 0 \quad [7]$$

$$P_{AM2} - P_{GQ} = 0 \quad [8]$$

Donde:

PAM2, PG y PGQ: presión de “Aire Mezcla-2”, de “Gas” y de “Gas Quemado”.

Se asume nula la caída de presión en el equipo.

FAM2, FG y FGQ: flujos máxicos de “Aire Mezcla-2”, de “Gas” y de “Gas Quemado”.

En este caso no hay variación en el número de moles. La entalpía de salida se evalúa a la temperatura adiabática (T4) de llama, con la composición estequeometrica.

### 3 Modelo de Precalentador de aire

El esquema se muestra en la figura A2.3 .Las ecuaciones correspondientes a los modelos existentes en Hysys® y adoptadas para este caso son:

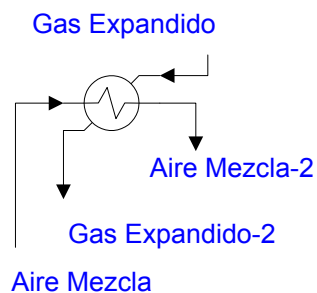


Figura A2.3: Esquema del precalentador de aire

$$Q - m_a * C_{p_a} * (T_{AM2} - T_{AM}) = 0 \quad [9]$$

$$Q - m_g * C_{p_g} * (T_{GE} - T_{GE2}) = 0 \quad [10]$$

$$Q - (UA)_{PA} \frac{(T_{GE} - T_{AM2}) - (T_{GE2} - T_{AM})}{Ln \left( \frac{T_{GE} - T_{AM2}}{T_{GE2} - T_{AM}} \right)} = 0 \quad [11]$$

$$F_{AM2} - F_{AM} = 0 \quad [12]$$

$$F_{GE2} - F_{GE} = 0 \quad [13]$$

$$P_{AM2} - P_{AM} = 0 \quad [14]$$

$$P_{GE2} - P_{GE} = 0 \quad [15]$$

Donde:

$P_{AM2}$ ,  $P_{AM}$ : presión de “Aire Mezcla-2” y del “Aire Mezcla”, se asume nula la caída de presión en el equipo.

$F_{AM2}$ ,  $F_{AM}$ : flujos máxicos de “Aire Mezcla-2” y del “Aire Mezcla2”.

$F_{GE2}$ ,  $F_{GE}$ : flujos máxicos de “Gas Expandido-2” y del “Gas Expandido”  $P_{GE2}$ ,  $P_{GE}$ : presión de “Gas Expandido-2” y del “Gas Expandido”.

En la figura A2.4 muestra el diagrama indicativo de la evolución de temperaturas, y la nomenclatura adoptada.

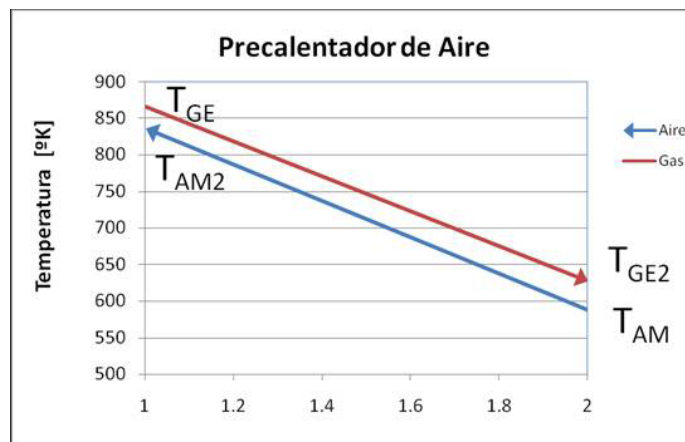


Figura A2.4: Esquema de un perfil de temperaturas en el precalentador

#### 4 Modelo de Turbina de Gas

En este equipo se produce la transformación de la energía mecánica del trabajo de expansión de los gases provenientes del combustor en energía mecánica en el eje de la turbina. El eje de la misma es solidario de un generador eléctrico que provee una parte de la generación de potencia del sistema. La figura A2.5 representa esquemáticamente el proceso y las ecuaciones del modelo son:

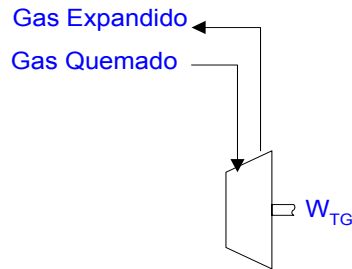


Figura A2.5: Esquema de la turbina de gas

$$T_{GE} - T_{GQ} \left\{ 1 + \frac{1}{\eta_{TG}} \left[ \frac{P_{GQ}}{P_{GE}} \right]^{\frac{1-\gamma_g}{\gamma_g}} - 1 \right\} = 0 \quad [16]$$

$$\dot{W}_{TG} - \dot{m}_g * C_{p_g} (T_{GQ} - T_{GE}) = 0 \quad [17]$$

$$F_{GQ} - F_{GE} = 0 \quad [18]$$

$$P_{GQ} - P_{GE} - \Delta_{TG} = 0 \quad [19]$$

Donde:

$T_{GQ}$  y  $P_{GQ}$ : temperatura y presión de entrada (“Gas quemado”).

$T_{GE}$  y  $P_{GE}$ : temperatura y presión de salida (“Gas expandido”).

$\eta_{TG}$ : eficiencia del compresor.

$\dot{m}_g$ : flujo de gases provenientes del combustor.

$\dot{W}_{TG}$ : Potencia de la turbina de gas.

$\gamma_g$ :  $C_p/C_v$  del gas.

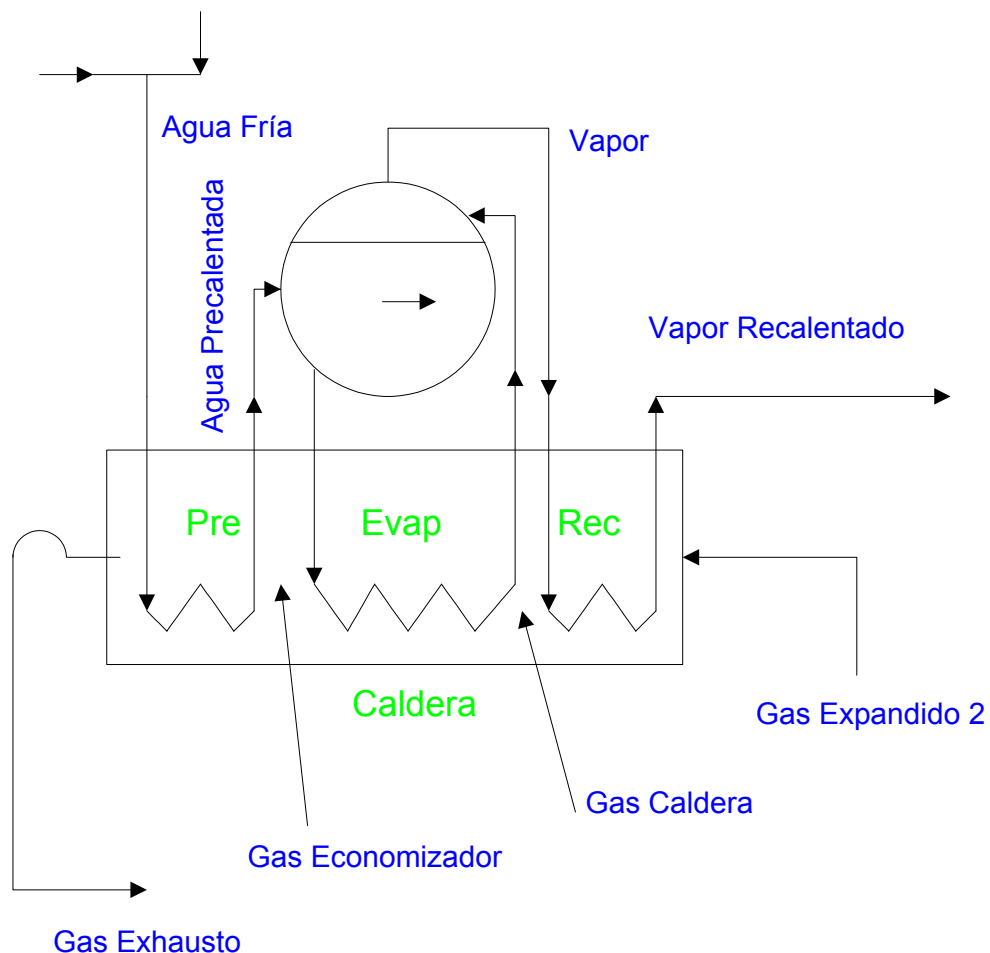
$C_{p_g}$ : capacidad calorífica a presión constante del gas.

$P_{GQ}$ ,  $P_{GE}$ ,  $\Delta P_{TG}$ : presión de “Gas Quemado”, “Gas Expandido” y pérdida de carga de la turbina.

$F_{GQ}$ ,  $F_{GE}$ : flujos másicos de “Gas Quemado” y “Gas Expandido”.

### 5 Modelo del Sistema generador de Vapor (recuperador de calor)

Este sistema, según el proceso que se adoptó en esta tesis, está formado por un precalentador del agua que ingresa a la caldera, la caldera generadora de vapor propiamente dicha y el recalentador de vapor. Esto se aprecia en la figura A2.6. La figura A2.7 ilustra el perfil de temperatura en los tres equipos que conforman el sistema. En todos ellos la composición de las corrientes permanece constante (por lo que las composiciones de salida se igualan a las de entrada).



AII.6 Sistema Recuperador de calor-Generador de vapor

### 5.1 Modelo del Recalentador

Las ecuaciones que representan el comportamiento de este equipo, al ser trivial el balance de materia, resultan del balance de energía y las relaciones de transferencia calórica, según:

$$Q - m_g * Cp_g * (T_{GE2} - T_{GC}) = 0 \quad [20]$$

$$Q - m_v * Cp_v * (T_{VR} - T_V) = 0 \quad [21]$$

$$Q - (UA)_{Rec} \frac{(T_{GC} - T_V) - (T_{GE} - T_{VR})}{Ln \frac{(T_{GC} - T_V)}{(T_{GE} - T_{VR})}} = 0 \quad [22]$$

$$F_{GE2} - F_{GC} = 0 \quad [23]$$

$$F_{VR} - F_V = 0 \quad [24]$$

$$P_{GE2} - P_{GC} = 0 \quad [25]$$

$$P_{VR} - P_V = 0 \quad [26]$$

Donde:

$P_{GE2}$ ,  $P_{GC}$ : presión de “Gas Expandido-2” y de “Gas Caldera”.

$P_{VR}$ ,  $P_V$ : presión de “Vapor Recalentado” y del “Vapor”. Se asume nulas las caídas de presión en el equipo.

$F_{GE2}$ ,  $F_{GC}$ : flujos máxicos de “Gas Expandido-2” y de “Gas Caldera”.

$F_{VR}$ ,  $F_V$ : flujos máxicos de “Vapor Recalentado” y del “Vapor”.

### 5.2 Modelo del generador de vapor.

Las ecuaciones correspondientes resultan:



$$Q - m_g * C_{p_g} * (T_{GC} - T_{GEC}) = 0 \quad [27]$$

$$Q - m_v * \lambda_{vap} = 0 \quad [28]$$

$$Q - (UA)_{Rec} \frac{(T_{GC} - T_V) - (T_{GEC} - T_V)}{\text{Ln} \frac{(T_{GC} - T_V)}{(T_{GEC} - T_V)}} = 0 \quad [29]$$

$$F_{GC} - F_{GEC} = 0 \quad [30]$$

$$F_{APC} - F_V = 0 \quad [31]$$

$$P_{GC} - P_{GEC} = 0 \quad [32]$$

$$P_{APC} - P_V = 0 \quad [33]$$

Donde:

$P_{GEC}$ ,  $P_{GC}$ : presión de “Gas Economizador” y de “Gas Caldera”.

$P_{APC}$ ,  $P_V$ : presión de “Agua Precaentada” y del “Vapor”. Se asumen nulas las caídas de presión en el equipo.

$F_{GEC}$ ,  $F_{GC}$ : flujos másicos de “Gas Economizador” y de “Gas Caldera”.

$F_{APC}$ ,  $F_V$ : flujos másicos de “Agua Precaentada” y del “Vapor”.

### **5.3 Modelo del Economizador**

Las ecuaciones que constituye el modelo/módulo seleccionado en Hysys® para representar el comportamiento de este equipo, surgen del planteo de los balances de materia y energía, según:

$$Q - m_g * Cp_g * (T_{GEC} - T_{GEX}) = 0 \quad [34]$$

$$Q - m_v * Cp_{aq} * (T_{APC} - T_{AF}) = 0 \quad [35]$$

$$Q - (UA)_{Rec} \frac{(T_{GEC} - T_{APC}) - (T_{GEX} - T_{AF})}{Ln \frac{(T_{GEC} - T_{APC})}{(T_{GEX} - T_{AF})}} = 0 \quad [36]$$

$$F_{GEC} - F_{GEX} = 0 \quad [37]$$

$$F_{APC} - F_{AF} = 0 \quad [38]$$

$$P_{GEC} - P_{GEX} = 0 \quad [39]$$

$$P_{APC} - P_{AF} = 0 \quad [40]$$

Donde:

$P_{GEC}$ ,  $P_{GEX}$ : presión de “Gas Economizador” y de “Gas Expandido”.

$P_{APC}$ ,  $P_{AF}$ : presión de “Agua Precaentada” y “Agua Fría”. Se asumen nulas las caídas de presión en el equipo.

$F_{GEC}$ ,  $F_{EX}$ : flujos máxicos de “Gas Economizador” y de “Gas Expandido”.

$F_{APC}$ ,  $F_{AF}$ : flujos máxicos de “Agua Precaentada” y “Agua Fría”.

El perfil típico de temperaturas en el sistema de vapor se puede apreciar en la figura A2.7

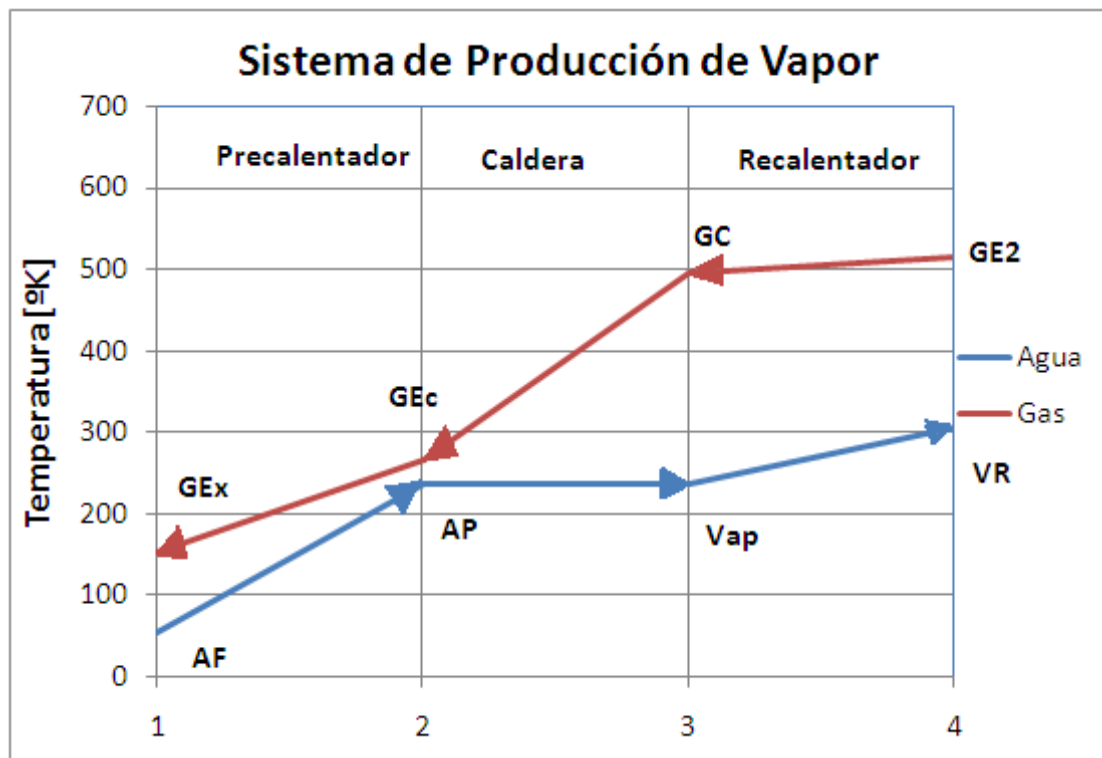


Figura A2.7 Esquema representativo del perfil de temperatura y la nomenclatura adoptada

### 6 Modelo de la Turbina de Vapor

Solidario al eje de la turbina hay un generador adicional de electricidad que aprovecha la energía mecánica producida por la expansión del vapor generado por la caldera. La expresión es análoga a la turbina de gas por basarse en el mismo principio. En la figura A2.8 se aprecia el esquema del sistema bajo análisis.

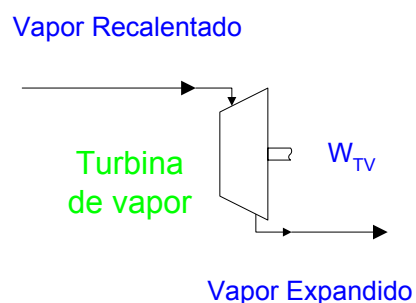


Figura A2.8: Esquema indicativo de la Turbina de vapor

Las ecuaciones que conforman el modelo/módulo seleccionado en Hysys® y que representan el comportamiento del equipo, surgen de considerar los balances de materia y energía:

$$T_{VE} - T_{VR} \left\{ 1 + \frac{1}{\eta_{TV}} \left[ \frac{P_{VR}}{P_{VE}} \right]^{\frac{1-\gamma_w}{\gamma_w}} - 1 \right\} = 0 \quad [41]$$

$$\dot{W}_{TV} - [\dot{m}_v * (H_v(T_{VR}, P_{VR}) - H(T_{VE}, P_{VE}))] = 0 \quad [42]$$

$$F_{VR} - F_{VE} = 0 \quad [43]$$

$$P_{VR} + \Delta P_{TV} - P_{VE} = 0 \quad [44]$$

Donde:

$P_{VR}$ ,  $P_{VE}$ : presión de “Vapor Recalentado” y del “Vapor Expandido”. Se asumen nulas las caídas de presión en el equipo.

$F_{VR}$ ,  $F_{VE}$ : flujos máxicos de “Vapor Recalentado” y del “Vapor Expandido”.

## 7 Modelo del Condensador

El esquema de este equipo se muestra en la figura A2.9:

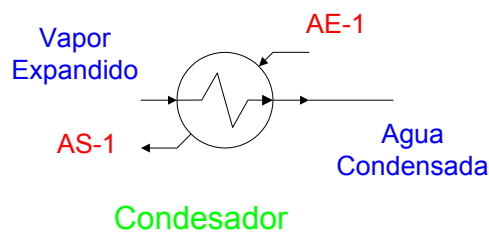


Figura A2.9: Esquema representativo del condensador

Las ecuaciones que conforman el modelo/módulo seleccionado en Hysys® para simular el equipo surgen de los balances de materia y energía, según:

$$Q - [m_v * (H_V(T_{VE}) - H_L(T_{VE}))] = Q - m_v * \lambda(T_{VE}) = 0 \quad [45]$$

$$Q - m_{AE} * C_{p_{AE}} * (T_{AS} - T_{AE}) = 0 \quad [46]$$

$$Q - (UA)_{Rec} \frac{(T_{VE} - T_{AS}) - (T_{VE} - T_{AE})}{Ln \frac{(T_{VE} - T_{AS})}{(T_{VE} - T_{AE})}} = 0 \quad [47]$$

$$F_{VE} - F_{AC} = 0 \quad [48]$$

$$F_{AE-1} - F_{AS-1} = 0 \quad [49]$$

$$P_{VE} - P_{AC} = 0 \quad [50]$$

$$F_{AE-1} - F_{AS-1} = 0 \quad [51]$$

Donde:

$P_{AE-1}$ ,  $P_{AS-1}$ : presión del Agua de Enfriamiento a entrada y salida.

$P_{AC}$ ,  $P_{VE}$ : presión del “Agua Condensada” y del “Vapor Expandido”. Se asumen nulas las caídas de presión en el equipo.

$F_{AE-1}$ ,  $F_{AS-1}$ : flujos máxicos del Agua de Enfriamiento a entrada y salida.

$F_{VR}$ ,  $F_{VE}$ : flujos máxicos de “Vapor Recalentado” y del “Vapor Expandido”.

El perfil típico de temperaturas en el equipo y la nomenclatura adoptada se puede apreciar en la figura A2.10:

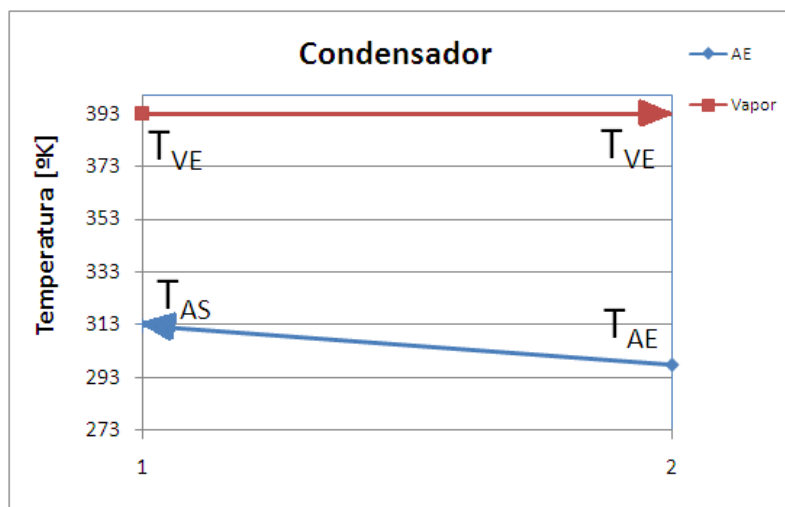


Figura A2.10: Perfil de temperaturas en el condensador

## 8 Modelo de Bomba centrífuga

En la figura A2.11 se aprecia un esquema del equipo.

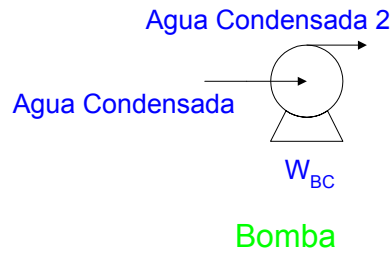


Figura A2.11: Esquema de la bomba centrífuga

Las ecuaciones que conforman el modelo/módulo adoptado en Hysys® para representar el equipo resulta:

$$W_{BC} - \frac{1}{\eta_{BC}} * q * (P_{AC2} - P_{AC}) = 0 \quad [52]$$

$$P_{AC2} - P_{AC} - \Delta P_{BC} = 0 \quad [53]$$

$$F_{AC2} - F_{AC} = 0 \quad [54]$$

Donde:

$W_{BC}$ : potencia de la bomba centrífuga.

$\eta_{BC}$ : eficiencia adiabática.

$q$ : caudal.

$P_{AC}$ ,  $P_{AC2}$ ,  $\Delta P_{BC}$ : presión en “Agua Condensada”, “Agua Condensada 2” y elevación de presión de la bomba.

$F_{AC}$ ,  $F_{AC2}$ : flujos másicos en “Agua Condensada” y “Agua Condensada 2”.

El comportamiento de una bomba centrífuga se puede asociar a una curva operativa del tipo del de la figura A2.12, adoptando un modelo simplificado. Aquí se expresa una relación entre la caída de presión y el caudal. En principio, se puede optar por dos modelos, uno tiene en cuenta esta relación, y el otro la ignora, adoptando una caída de presión especificada, independiente del caudal.

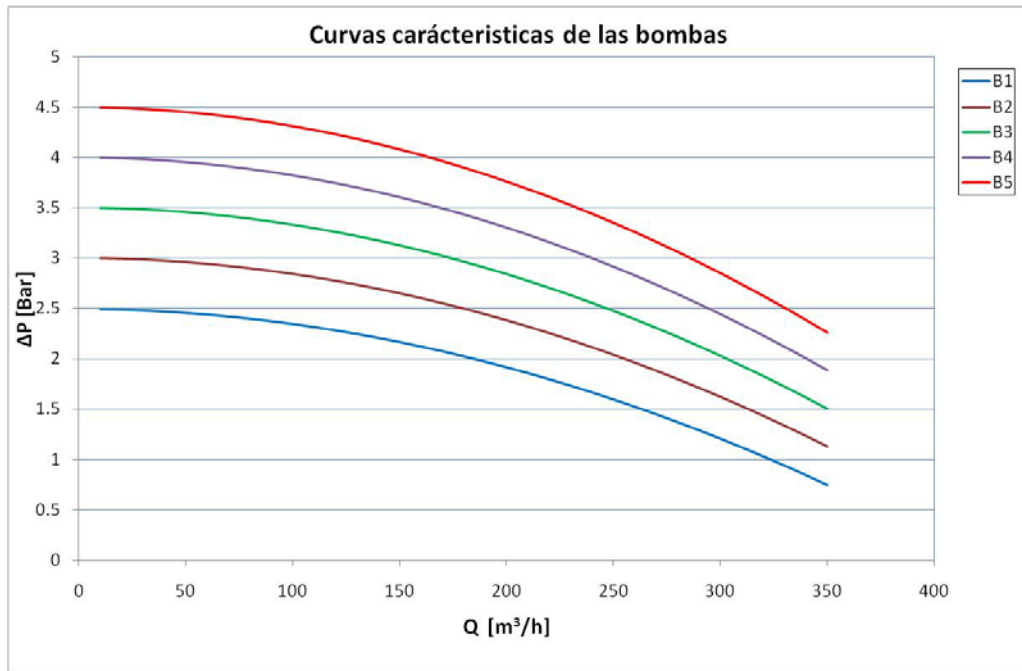


Figura A2.12: Curva de operación característica de una bomba centrífuga

### 9. Modelo de Nodo Divisor:

La corriente de agua una vez condensada y antes de enviarse nuevamente a la caldera se purga a fin de mantener acotados los niveles de sales que de otro modo se concentrarían. En la figura A2.13 se muestra el esquema correspondiente. Las ecuaciones derivadas del balance de materia, se indican a continuación, asumiendo que las composiciones a la salida son iguales que a la entrada.

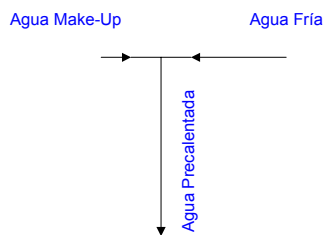


Figura A2.13: Esquema del nodo divisor

$$F_{AC} - F_{AF} - F_{Pu} = 0 \quad [55]$$

$$P_{AC} - P_{AF} = 0 \quad [56]$$

$$P_{AC} - P_{Pu} = 0 \quad [57]$$

Donde:

$P_{AC}$ ,  $P_{AF}$  y  $P_{Pu}$ : presión del Agua Condensada, Agua Fría y Purga. Se asume nulas las caídas de presión en el equipo.

$F_{AC}$ ,  $F_{AF}$  y  $F_{Pu}$ : flujos másicos del “Agua Condensada”, “Agua Fría” y “Purga”.

### 10 Modelo de Nodo Sumador:

A la corriente de agua una vez purgada se la adiciona el make-up de agua suficiente para mantener el inventario en el circuito de vapor. En la figura A2.14 se muestra el esquema correspondiente- Las ecuaciones derivadas del balance de materia y energía se indican a continuación. Se asume que no hay cambios de fase y que no existe caída de presión. Se considera agua pura, y por lo tanto puede desdeñarse el balance por componentes.

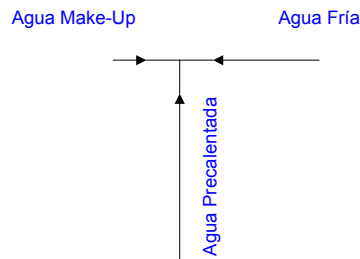


Figura A2.14: Esquema del nodo sumador

$$F_{AMK} + F_{AF} - F_{APC} = 0 \quad [58]$$

$$F_{AMK} \times H_{AMK}(T_{AMK}) + F_{AF} \times H_{AF}(T_{AF}) - F_{APC} \times H_{APC}(T_{APC}) = 0 \quad [59]$$

$$P_{APC} - P_{AMK} = 0 \quad [60]$$

$$P_{APC} - P_{AF} = 0 \quad [61]$$



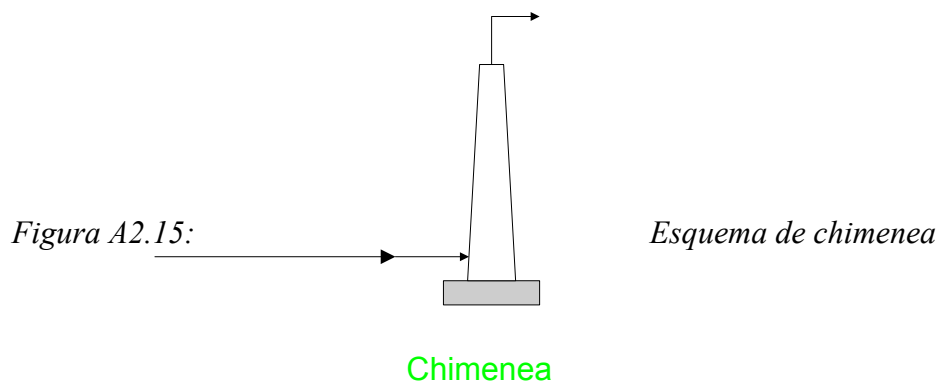
Donde:

$P_{AC}$ ,  $P_{AF}$  y  $P_{Pu}$ : presión del “Agua Condensada”, “Agua Fría” y “Purga”. Se asume nulas las caídas de presión en el equipo.

$F_{AC}$ ,  $F_{AF}$  y  $F_{Pu}$ : flujos máxicos del “Agua Condensada”, “Agua Fría” y “Purga”.

## 11 Modelo de Chimenea

El tiro de la chimenea se produce principalmente por la diferencia de peso de la columna de gas de la chimenea y una columna igual de aire a la presión barométrica y temperatura del exterior. En la figura A2.15 se aprecia un esquema del mismo.



La ecuación simplificada que describe el comportamiento es

$$Z - H_{CH} * (\rho_l - \rho_m) = 0 \quad [62]$$

Donde:

$H_{CH}$ : altura de la chimenea [m].

$\rho_l$ : peso específico del aire exterior [ $\text{Kg/m}^3$ ].

$\rho_m$ : peso específico del gas a la mitad de la altura de la chimenea [ $\text{Kg/m}^3$ ].

La acción del viento influye sobre el tiro aunque su influencia es poco apreciable y de un cálculo más complejo [12].

### ***ANEXO 3: Modelo del Sistema de Captura de CO<sub>2</sub> por absorción-regeneración de aminas .***

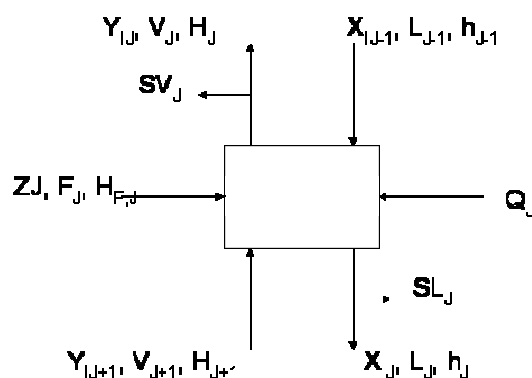
El paquete de propiedades adoptado hace uso de un modelo de no-equilibrio desarrollado al efecto. El concepto fundamental usado es que la velocidad de absorción/desorción de los gases ácidos desde y hacia la solución de amina se considera como un fenómeno de transferencia de masa entre fases.

El modelo incorpora una modificación de la eficiencia de Murphree para tener en cuenta la variabilidad de velocidad de transferencia de los componentes del gas ácido. Las eficiencias de cada etapa son funciones de los coeficientes de transferencia de masa y del diseño mecánico del plato. A continuación se muestra el esquema general para una etapa genérica en un equilibrio múltiple etapa. El resultado de las ecuaciones de balances que caracterizan estos fenómenos se detallan luego; para su resolución se usa un método modificado de Newton-Raphson para la resolución simultánea de las ecuaciones para la temperatura, composición y flujos de vapor y líquido en cada etapa de la columna.

El concepto básico de modelado de separación múltiple etapa se detalla a continuación. Para el caso particular de paquete de aminas, el simulador Hysys® presenta una serie de opciones que el usuario debe escoger: para la solubilidad el modelo Kent-Eisenberg o el de Li-Mather, mientras que para la fase vapor se puede asumir comportamiento ideal o no ideal.

#### ***1 Modelo de cascada múltiple etapa de múltiples componentes***

En la figura siguiente se indica una etapa de equilibrio



*Figura A3.1: Una etapa elemental de equilibrio*

En función de la nomenclatura introducida y el conjunto de hipótesis que se detalla, a continuación se describe el sistema de ecuaciones principales incluidas en los módulos de Hysys® y utilizados en esta tesis para el modelado de la planta de captura de CO<sub>2</sub>.

**Hipótesis:**

A partir de los balances de materia y energía, y la definición de eficiencia de Murphree se tienen las siguientes ecuaciones (modelo) programado en el módulo de absorbedor de Hysys® específico para el sistema CO<sub>2</sub>-aminas (“Amine Package”):

$$\eta = \frac{(V_J + SV_J) * Y_J - V_{J+1} * Y_{J+1}}{(V_J + SV_J) * K_{IJ} * X_{IJ} - V_{J+1} * Y_{J+1}} \quad (1)$$

Donde:

$\eta$ : eficiencia de la etapa

I: número de componente

J: número de etapa

K: constante de equilibrio

V: Flujo molar de vapor

X: Fracción molar en la fase líquida

Y: Fracción molar en la fase vapor

*Balance global de materia:*

$$F_J + L_{J-1} + V_{J+1} - (L_J + SL_J) - (V_J + SV_J) = 0 \quad (2)$$

*Balance de materia por componente:*

$$F_J * z_{I,J} + L_{J-1} * x_{I,J-1} + V_{J+1} * y_{I,J+1} - (L_J + SL_J) * x_{I,J} - (V_J + SV_J) * y_{I,J} = 0$$

**(3-11)**

*Balance de energía:*

$$F_J * H_{FJ} + L_{J-1} * h_{J-1} + V_{J+1} * H_{J+1} + Q_J - (L_J + SL_J) * -(V_J + SV_J) = 0$$

**(12)**

*Relaciones de equilibrio:*

$$\eta_{IJ} * K_{IJ} * x_{IJ} * (V_J + SV_J) - (V_J + SV_J) * y_{IJ} + (1 - \eta_{IJ}) * V_{J+1} * y_{I,J+1} = 0$$

**(13-21)**

*Restricciones de suma*

$$\sum y_{I,J} - 1,0 = 0$$

**(22)**

## **2 Modelo para estimación de parámetros fisicoquímicos.**

### **2.1 Solubilidad de equilibrio- Modelo de Kent y Eisenberg**

El presente modelo ha sido validado mediante datos experimentales. Las composiciones de los componentes considerados inertes tales como los hidrocarburos se calculan mediante las constantes de Henry ajustadas para estimar su fuerza iónica.

En las siguientes tablas se indican las reacciones químicas consideradas en el modelo, al igual que la definición de las relaciones de equilibrio químico correspondientes, las ecuaciones de equilibrio de fase, los balances de materia por componente y los balances de carga iónica correspondientes.

Reacciones químicas	
$R_1R_2NH + H_2O \Leftrightarrow R_1R_2NH_2^+ + OH^-$	<b>(31)</b>
$R_1R_2R_3N + H_2O \Leftrightarrow R_1R_2R_3NH^+ + OH^-$	<b>(32)</b>
$R_1R_2NH + CO_2 \Leftrightarrow R_1R_2NCOO^- + H^+$	<b>(33)</b>
$H_2O \Leftrightarrow H^+ + OH^-$	<b>(34)</b>
$H_2S \Leftrightarrow H^+ + SH^-$	<b>(35)</b>
$CO_2 + H_2O \Leftrightarrow H^+ + HCO_3^-$	<b>(36)</b>

$HS^- \Leftrightarrow H^+ + S^{--}$	(37)
$HCO_3^- \Leftrightarrow H^+ + CO_3^{--}$	(38)

Relaciones de equilibrio	
$K_1 = \frac{[H^+][R_1R_2NH]}{[R_1R_2NH_2^+]}$	(39)
$K_2 = \frac{[H^+][R_1R_2R_3N]}{[R_1R_2R_3NH^+]}$	(40)
$K_3 = \frac{[HCO_3^+][R_1R_2NH]}{R_1R_2NCOO^-}$	(41)
$K_4 = \frac{[H^+][OH^-]}{[H_2O]}$	(42)
$K_5 = \frac{[H^+][SH^-]}{[H_2S]}$	(43)
$K_6 = \frac{[H^+][HCO_3^-]}{[CO_2][H_2O]}$	(44)
$K_7 = \frac{[H^+][S^{--}]}{[HS^-]}$	(45)
$K_8 = \frac{[H^+][CO_3^{--}]}{[HCO_3^-]}$	(46)

Equilibrios de fase	
$y_{H_2S} \phi_{H_2S}^V P = H_{H_2S} [H_2S]$	(47)
$y_{CO_2} \phi_{CO_2}^V P = H_{CO_2} [CO_2]$	(48)

Balance de Carga		
$[H^+] + [R_1R_2NH_2^+] + [R_1R_2R_3NH^+]$	+	(49)
$[OH^-] + [R_1R_2NCOO^-] + [HCO_3^-] + [HS^-] + 2[CO_3^{--}] + 2[S^{--}]$	-	

Balance de masa		
$C_{\text{Aminas } 1^\circ \text{ y } 2^\circ} = [R_1R_2NH] + [R_1R_2NH_2^+] + [R_1R_2NCOO^-]$		(50)
$C_{\text{Amina } 3^\circ} = [R_1R_2R_3N] + [R_1R_2R_3NH^+]$		(51)
$C_{CO_2} = (C_{\text{Aminas } 1^\circ \text{ y } 2^\circ} + C_{\text{Amina } 3^\circ})\alpha_{CO_2} =$ $[CO_2] + [R_1R_2NCOO^-] + [HCO_3^-] + [CO_3^{--}]$		(52)
$C_{H_2S} = (C_{\text{Aminas } 1^\circ \text{ y } 2^\circ} + C_{\text{Amina } 3^\circ})\alpha_{H_2S} =$ $[H_2S] + [HS^-] + [S^{--}]$		(53)

Donde los  $\alpha_{CO_2}$  y  $\alpha_{H_2S}$  son las “cargas” de dióxido de carbono y de sulfuro de hidrógeno definidas como la relación de concentración de dichos gases con respecto a la concentración de las aminas. Las concentraciones son molares y  $H$  es la constante de Henry.

Los coeficientes de fugacidad de las especies moleculares se calculan a partir de la ecuación de Peng-Robinson:

$$p = \frac{R \times T}{v - b} - \frac{a \times (T)}{v \times (v + b) + b \times (v - b)} \quad (54)$$

Donde a y b para los componentes puros:

$$a = \frac{\alpha \times (0,45724) \times R^2 \times T_C^2}{P_C} \quad (55)$$

$$b = \frac{(0,07780) \times R \times T_C}{P_C} \quad (56)$$

Y el parámetro dependiente de la temperatura resulta:

$$\alpha^{1/2} = 1 + \alpha_1 \times (1 - \sqrt{T_r}) + \alpha_2 \times (1 - T_r) \times (0,7 - T_r) \quad (57)$$

Los parámetros  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  son dependientes de las sustancias y se determinan a través de regresiones rigurosas de datos experimentales. Para mezclas, los parámetros a y b se estiman mediante las siguientes reglas de mezclado.

$$a = \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} x_i \times x_j \times (a_i \times a_j)^{0,5} \times (1 - k_{ij}) \quad (58)$$

$$b = \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} x_i \times x_j \times \left( \frac{b_i + b_j}{2} \right) \times (1 - k_{ij}) \quad (59)$$

## 2.2 Modelo electrolítico Li-Mather:

Tiene excelentes propiedades predictivas para un amplio rango de temperaturas, presiones y cargas de gases y de concentraciones de amina. Se basa en dos tipos de equilibrio: líquido-vapor y químico en fase líquida.

### 2.2.1 Equilibrio de fase:

El equilibrio líquido-vapor para las diferentes especies moleculares se plantea según:

$$y_i \times \phi_i^V \times P = H_i \times x_i \times \gamma_i^L$$

Donde:

$H_i$ : constante de Henry

$P$  : presión del sistema

$x_i, y_i$ : fracciones molares de la especie  $i$  en el líquido y vapor

$\Phi_i^V$ : fugacidad de la especie  $i$  en la fase vapor

$\gamma_i^L$ : coeficiente de actividad de la especie  $i$  en la fase líquida

Los coeficientes de fugacidad se calculan de la ya mencionada ecuación de estado de Peng Robinson.

Los coeficientes de actividad se calculan a partir de la ecuación de Clegg-Pitzer que se describirá posteriormente.

### 2.2.2 Equilibrio químico

Para el simple caso de los sistemas amina-H<sub>2</sub>S-CO<sub>2</sub>-agua las reacciones químicas de disociación más importantes son:

Reacciones de disociación química
$\text{Amina}^+ \Leftrightarrow \text{Amina} + \text{H}^+$
$\text{H}_2\text{S} \Leftrightarrow \text{HS}^- + \text{H}^+$
$\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{HCO}_3^- + \text{H}^+$
$\text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{OH}^- + \text{H}^+$
$\text{HCO}_3^- \Leftrightarrow \text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+$
$\text{HS}^- \Leftrightarrow \text{S}^{2-} + \text{H}^+$



Las constantes del equilibrio químico en sistemas gas ácido-amina juegan un papel importante en la predicción de las solubilidades de equilibrio de dichos gases en soluciones acuosas de aminas. La constante K puede ser expresada:

$$K = \prod_{i=1}^{NC} (x_i \times y_i)^{\beta_i}$$

Que, en función de la temperatura, se puede expresar:

$$\ln K = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 \times \ln T + C_4 \times T$$

La constante de Henry tiene una funcionalidad parecida a la anterior. En la fase líquida hay 4 especies moleculares: amina, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>S y CO<sub>2</sub> y siete especies iónicas: Amina<sup>+</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>, HS<sup>-</sup>, H<sup>+</sup>, OH<sup>-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>-2</sup>, S<sup>-2</sup>. En la fase gaseosa hay 4 especies: Amina, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S.

La determinación de la composición de todas las especies moleculares e iónicas tanto en la fase líquida como en la gaseosa involucra la resolución simultánea de un sistema de ecuaciones no lineales que describen tanto el equilibrio de fases como el equilibrio químico, la electroneutralidad (balance de cargas) y el balance de masa de los electrolitos en la fase acuosa.

### **2.3 La ecuación de Clegg-Pitzer:**

En este modelo todas las especies presentes en el sistema se consideran partículas que interactúan entre sí. La discrepancia de energía libre de Gibbs consiste en un término de interacción electrostática de Debye-Huckel y una expansión de Margules con 2 y 3 sufijos:

$$g^{ex} = g^{DH} + g^S$$

$$\frac{g^{DH}}{R \times T} = \frac{4 \times A_x \times I_x}{\rho} \ln(1 + \rho \times I_x^{1/2}) + \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} x_c \times x_a \times B_{ac} \times g \times (\alpha \times I_x^{1/2})$$

$$\frac{g^S}{R \times T} = \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} a_{ij} \times x_i \times x_j + \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \sum_{k=1}^{NC} a_{ijk} \times x_i \times x_j \times x_k$$

$$\frac{g^S}{R \times T} = x_l \sum_{n=1}^{NC} x_n \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} F_c \times F_a \times W_{nca} + \sum_{n=1}^{NC} \sum_{n'=1}^{NC} x_n \times x_{n'} \times (A_{nn'} \times x_{n'} + A_{n'n} \times x_n)$$

Donde:

$$A_{nn'} = 2 \times a_{nn'} + 3 \times a_{n'n}$$

$$A_{n'n} = 2 \times a_{nn'} + 3 \times a_{nn'n''}$$

$$W_{nca} = \frac{(2 \times w_{nc} + 2 \times w_{na} - w_{ca} + 2 \times u_{nc} + 2 \times u_{na})}{4}$$

$$w_{ij} = 2 \times \alpha_{ij} + \frac{3}{2 \times (a_{ijj} + a_{ijj})}$$

$$u_{ij} = \frac{3}{2 \times (a_{ijj} - a_{ijj})}$$

Los coeficientes de actividad para el solvente N y el ion M<sup>+</sup> son los siguientes:

$$\begin{aligned} \ln \gamma_N &= \frac{2 \times A_x \times I_x^{3/2}}{1 + \rho \times I_x^{1/2}} - \sum \sum x_c \times x_a \times B_{ca} \times e^{(-\alpha \times I_x^{1/2})} \\ &+ x_l \times (1 - x_N) \sum \sum F_c \times F_a \times W_{Nca} - x_l \times \sum_{n=1}^{NC} x_n \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} F_c \times F_a \times W_{nca} \\ &+ \sum_{n=1}^{NC} x_n [A_{Nn} \times x_n \times (1 - 2 \times x_N) + 2 \times A_{nN} \times x_N \times (1 - x_N)] \\ &- 2 \times \sum_{n=1}^{NC} \sum_{n'=1}^{NC} x_n \times x_{n'} \times (A_{nn'} \times x_{n'} + A_{n'n} \times x_n) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\ln \gamma_{M^+} = & -z_M^2 \times A_x \left[ \frac{2}{\rho} \ln(1 + \rho \times I_x^{1/2}) + \frac{I_x^{1/2} \times (1 - 2 \times I_x / z_M^2)}{1 + \rho \times I_x^{1/2}} \right] \\
& + \sum_{a=1}^{NC} B_{na} \times g(\alpha \times I_x^{1/2}) \\
& - \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} x_c \times x_a \times B_{ca} \times \left[ \frac{z_M^2 \times g(\alpha \times I_x^{1/2})}{2 \times I_x} + \left( 1 - \frac{z_M^2}{2 \times I_x} \right) \times e^{(-\alpha \times I_x^{1/2})} \right] \\
& + 2 \times \sum_{n=1}^{NC} x_n \sum_{a=1}^{NC} F_a \times W_{nMa} - \sum_{n=1}^{NC} x_n \times (1 + x_j) \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} F_c \times F_a \times W_{nca} \\
& - 2 \times \sum_{a=1}^{NC} F_a \times W_{2Ma} + \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} F_c \times F_a \times W_{2ca} \\
& - 2 \times \sum_{n=1}^{NC} \sum_{n'=1}^{NC} x_n \times x_{n'} \times (A_{nn'} \times x_{n'} + A_{n'n} \times x_n)
\end{aligned}$$

Donde los subíndices c, a, n y n' representan a los cationes, aniones y especies moleculares. El subíndice 2 representa al agua. La fracción molar total de iones es:

$$x_l = 1 - \sum_{n=1}^{NC} x_n$$

Las fracciones de cationes y aniones Fc y Fa están definidas para sistemas electrolíticos totalmente simétricos:

$$\begin{aligned}
F_c &= \frac{2 \times x_c}{x_l} \\
F_a &= \frac{2 \times x_a}{x_l}
\end{aligned}$$

La fuerza iónica se define como:

$$I_x = \frac{1}{2 \sum_{i=1}^{NC} z_i^2 \times x_i}$$

La función  $g(x)$  se expresa como:

$$g(x) = \frac{2 \times [1 - (1+x) \times e^{(-x)}]}{x^2}$$

Donde:

$$x = \alpha \times I_x^{1/2} = 2 \times I^{1/2}$$

$$I = \frac{1}{2 \times \sum_{i=1}^{NC} z_i^2 \times C_i}$$

$A_x$  es el parámetro de Debye-Huckel de fracción molar

$$A_x = A_\phi \times \left( \sum_{n=1}^{NC} C_n \right)^{1/2}$$

$C_j$  y  $C_n$  son las concentraciones molares del ión  $i$  y del solvente  $n$  respectivamente.  $I$  es la fuerza iónica en concentraciones molares.  $A_\phi$  es el parámetro de Debye-Huckel, que es función de la temperatura, densidad y constante dieléctrica de los solventes en la mezcla. El parámetro  $\rho$  está relacionado al diámetro de colisión de la esfera rígida o la mínima distancia a la que pueden acercarse los iones en solución.  $A_{n'n}$  y  $A_{nn'}$  son los parámetros de interacción entre las especies moleculares, respectivamente.

$B_{ca}$  es el parámetro de repulsión de la esfera rígida entre los iones y  $W_{nca}$  es el parámetro de interacción entre iones y entre el ión y el solvente.

Los parámetros  $A_{n'n}$ ,  $A_{nn}$ ,  $B_{ca}$  y  $W_{nca}$  tienen la misma funcionalidad con respecto a la temperatura:

$$Y = a + \frac{b}{T}$$

Estos son los parámetros ajustables del modelo. Por otro lado, tanto el agua como la amina se consideran como solventes, el estado estándar de cada uno de ellos se adopta como líquido puro a la temperatura y presión del sistema. El estado de referencia adoptado para las especies iónicas y las moleculares es el ideal y la de su solución acuosa a dilución infinita.

## **2.4 Entalpía de fases**

La entalpía de la fase vapor se calcula a través de la ecuación de estado de Peng Robinson la cual integra datos de capacidad calorífica del gas ideal a su temperatura de referencia. La entalpía de la fase líquida también incluye el efecto del calor latente de vaporización y el calor de reacción.

La absorción y desorción de  $H_2S$  y de  $CO_2$  en soluciones acuosas involucran los efectos debidos a las reacciones químicas. Este efecto térmico depende del tipo de amina y la carga molar de los gases ácidos. El calor de disolución de los gases ácidos se obtiene por diferenciación de datos experimentales de solubilidad mediante una forma de la ecuación de Gibbs-Helmholtz.

Los efectos resultantes de la evaporación y condensación de la amina y el agua tanto en la columna absorbidora como en la regeneradora se consideran en los términos de calor latente que aparecen en el cálculo de la entalpía de la fase líquida.

## **3 Modelo de Absorbedor**

En la presente tesis se adoptó el modelo Kent-Eisenberg (descrito en la sección anterior) para el cálculo de la solubilidad y un comportamiento no ideal en fase vapor para poder contemplar presiones de operación en las cuales los gases dejan de ser ideales.

En la figura se muestra un esquema de la columna absorbidora, la encargada de extraer los gases ácidos de la corriente de gases de combustión.

En el apartado anterior se enumeraron las ecuaciones intervinientes en cada etapa de equilibrio. El modelado de la columna absorbedora implica la incorporación del sistema de ecuaciones (2 a 59) para cada una de las etapas de equilibrio. En nuestro caso, luego de realizar un número importante de simulaciones se adoptaron 10 etapas ya que resultan adecuadas para la separación deseada para diversos tipos de carga. Este número de etapas es similar también a las utilizadas en la mayoría de los trabajos publicados.

En nuestro caso son 9 los componentes como se muestra en la tabla III-1. Puesto que cada etapa recibe y entrega flujo y por ende, información de otras etapas, es que para lograr convergencia global deben resolverse todas simultáneamente. El método de resolución adoptado es el Hysym® Inside-Out. Es esta una metodología de doble lazo; primero se realiza un cálculo simplificado que sirve para la inicialización de las variables y luego se procede a la solución rigurosa del sistema de ecuaciones considerado en el modelo.

Tomando como referencia la figura AIII.2 se asumen las siguientes hipótesis:

$I=1$  a 9

$J=1$  a 10

$Q_J = 0$  para todo  $J=1$  a 10 (adiabático en toda su extensión)

$F_J = 0$  para todo  $J=1$  a 10 (no hay alimentaciones laterales)

$SV_J = 0$  para todo  $J=1$  a 10 (no hay extracciones laterales de vapor)

$SL_J = 0$  para todo  $J=1$  a 10 (no hay extracciones laterales de líquido).

*Las corrientes de entrada que definen al sistema:*

Corriente líquida  $L_0$ , de composición  $X_0$ , totalmente definida por la corriente “DEA to Contactor” de la “Bomba de Reciclo”.

La corriente gaseosa  $V_{11}$ , de composición  $Y_{11}$ , totalmente definida por la corriente “gas-sin-agua” del “Enfriador Primario”.

*Las corrientes de salida son resultado de la simulación del equipo*

La corriente líquida  $L_{10}$  de composición  $X_{10}$ , define completamente a la corriente “Rich DEA” que es entrada del “Separador”.

La corriente gaseosa  $V_1$  de composición  $Y_1$ , define completamente a la corriente “Sweet gas” que se envía a la atmósfera a través de la “Chimenea”.

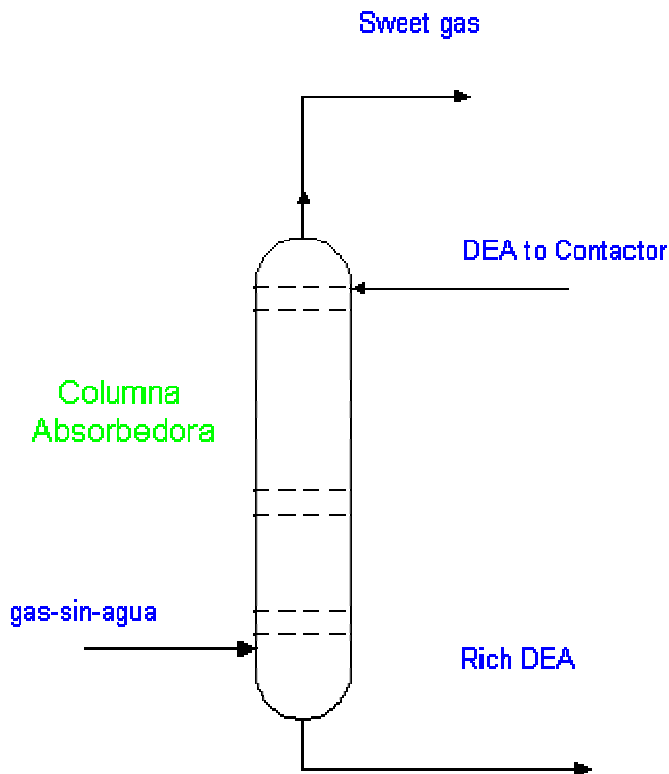


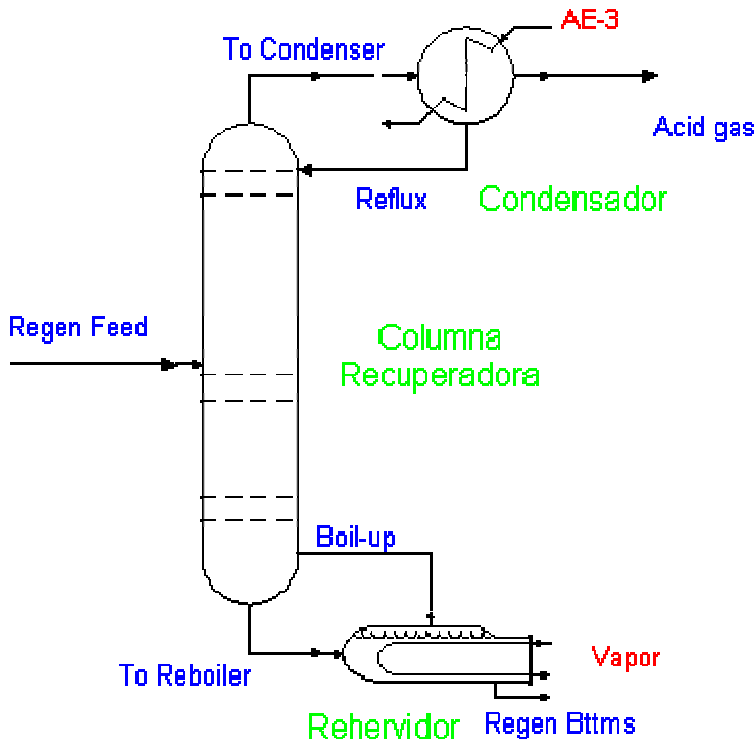
Figura AIII.2: Esquema Columna absorbedora

#### 4 Modelo del Regenerador

En la figura siguiente se muestra un esquema de la columna regeneradora, la encargada de recuperar el solvente (DEA u otra amina) y separar el  $\text{CO}_2$  para su acondicionamiento y disposición final.

Con respecto al modelado de la columna propiamente dicha, la metodología es similar a la expuesta para la columna absorbedora. A diferencia de la otra, la regeneradora, cuenta con algunos equipos auxiliares los cuales tienen la misión de proveer la corriente líquida descendente (condensador) y la corriente ascendente de vapor (rehervidor) entre los que se redistribuyen los componentes de acuerdo a su diferente volatilidad relativa.

Como se aprecia el rehervidor es total mientras que el condensador es a reflujo total, y son etapas de equilibrio. Realizando varias simulaciones como en el caso de la columna absorbedora, se adoptaron 12 etapas para la columna regeneradora, incluyendo condensador y rehervidor, como el mínimo número de etapas que logra el rango de separación deseado en diversas condiciones de carga.



*Figura AIII.3: Esquema Columna Regeneradora*

Tomando como referencia la figura AIII.3 se asumen las siguientes hipótesis:

$I=1$  a  $9$

$J=0$  a  $11$  ( $0$  para el condensador y  $11$  para el rehervidor)

$Q_J=0$  para todo  $J=1$  a  $10$  (adiabático en toda su extensión)

$Q_0=Q_{\text{Cond}}$

$Q_{11}=Q_{\text{Reb}}$

$F_J=0$  para todo  $J=0$  a  $4$  y de  $6$  a  $11$  (hay una única alimentación en la etapa  $5$ )

$SV_J=0$  para todo  $J=1$  a  $10$  (no hay extracciones laterales de vapor)



$SL_J = 0$  para todo  $J=1$  a  $10$  (no hay extracciones laterales de líquido).

$L_{-1} = 0$  (el condensador no recibe corrientes líquidas)

$V_{12} = 0$  (el rehervidor no recibe una corriente de vapor)

***Las corrientes de entrada que definen al sistema:***

Corriente líquida  $F_5$ , de composición  $Z_5$ , totalmente definida por la corriente “Regen Feed” del equipo “Intercambiador Recuperador”.

La corriente líquida  $L_1$ , de composición  $X_1$ , corresponde al reflujo del condensador (etapa 0).

La corriente gaseosa  $V_{11}$ , de composición  $Y_{11}$  corresponde al Boil-up del rehervidor (etapa 11)

***Las corrientes de salida resultado de la simulación del equipo***

La corriente líquida  $L_{11}$  de composición  $X_{11}$ , define completamente a la corriente “Regen Btms” que es entrada del “Intercambiador Recuperador”.

La corriente gaseosa  $V_0$  de composición  $Y_0$ , define completamente a la corriente “Acid gas” que es entrada del sumador que forma parte del “Deshumidificador”.

***Servicios auxiliares y balances entálpicos (módulos adoptados)***

Si bien la columna es adiabática, no lo son sus equipos auxiliares. El condensador se enfría con agua de enfriamiento mientras que el rehervidor se calefacciona con vapor saturado de agua. En la figura AIII.4 se indica la nomenclatura adoptada y valores típicos para la evolución de las temperaturas. Las ecuaciones (balance) en los módulos correspondientes adoptados de Hysys® son:

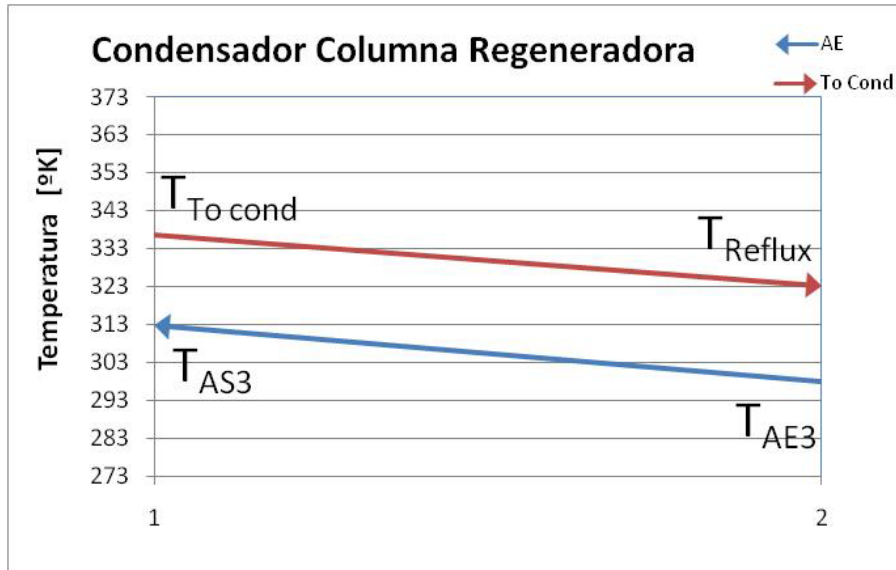


Figura AIII.4: Perfil de temperaturas- Condensador Columna

$$F_{AE3} - F_{AS3} = 0$$

$$Q_{Cond} - F_{AE3} \times Cp_{AE3} \times (T_{AS3} - T_{AE3}) = 0$$

$$Q_{Cond} - (UA)_{CondCol} \times \frac{(T_{ToCond} - T_{AS3}) - (T_{Reflux} - T_{AE3})}{Ln \frac{(T_{ToCond} - T_{AS3})}{(T_{Reflux} - T_{AE3})}} = 0$$

Los balances respectivos al vapor que condensa ya se detallaron en el modelo de etapas múltiples. En la figura III-6 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura. Se define a la relación de reflujo como:

$$\text{Reflux Ratio} = \frac{F_{Reflux}}{F_{Acid Gas}}$$

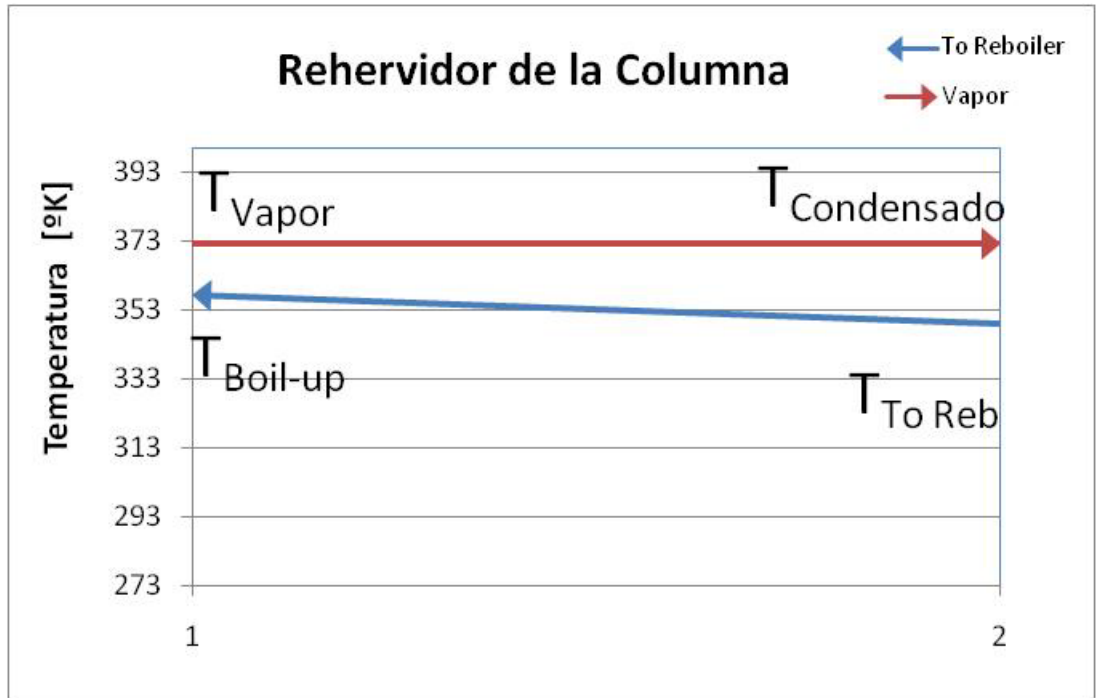


Figura AIII.5: Perfil de temperaturas- Rehervidor Columna

$$F_{Vapor} - F_{Condesado} = 0$$

$$Q_{Reb} - F_{AE3} \times \lambda_{vapor} (P_{vapor}) = 0$$

$$Q_{Reb} - (UA)_{RebCol} \times \frac{(T_{Vapor} - T_{Boil-up}) - (T_{Vapor} - T_{ToReb})}{Ln \frac{(T_{Vapor} - T_{Boil-up})}{(T_{Vapor} - T_{ToReb})}}$$

Los balances correspondientes al líquido de fondo de columna que se evapora se consideraron oportunamente cuando se describieron las etapas de equilibrio en forma individual. Se define como carga de dióxido de carbono a la relación de fracción molar del mismo en función a la correspondiente a la amina:

$$\alpha_{CO_2} = \frac{x_{CO_2}}{x_{Amina}}$$

Y si lo hubiera, para el sulfuro de hidrógeno se define en forma equivalente:

$$\alpha_{H_2S} = \frac{x_{H_2S}}{x_{Amina}}$$

Para el caso de la columna recuperadora, una vez planteadas las ecuaciones precedentes hay 2 grados de libertad, esto implica que dos de sus parámetros deben ser fijados a fin de garantizar que el sistema pueda resolverse. Algunas de las variables más importantes pueden ser: relación de reflujo, temperatura en el condensador o rehervidor y carga de CO<sub>2</sub> en el fondo de la columna. De la bibliografía y simulaciones propias, a fin de asegurar una mejor convergencia para un amplio rango de condiciones de operación a cubrir durante cada corrida de optimización, se optó por fijar la temperatura del condensador y la carga de CO<sub>2</sub> en el fondo de la columna.

Un detalle a considerar es el número de etapas adoptado. Del estudio bibliográfico oscilan entre 6 y 10 el número de etapas teóricas. Debido a que en Hysys® la topología no puede ser modificada durante la optimización se adoptó un valor tal que garantice separación y convergencia para un amplio espectro de condiciones de entrada. Con respecto a la carga de dióxido de carbono se adoptó un valor típico (0,2) y 50 °C para la temperatura del condensador.

Para la estimación del diámetro de la columna se empleó una de las utilidades del Hysys® (Tray Sizing). Para el detalle de los internos se adoptaron platos con campanas de burbujeo o rellenos (según el caso de estudio) y para el cálculo del área el método *Minimum C<sub>sb</sub>* basado en velocidades de inundación. Esto tanto para la columna absorbedora como para la regeneradora.

### ***Corriente de entrada a la planta de recuperación***

"gas-ex-pre"		
Variable	Valor	Unidad
Temperatura	149.468	°C
Presión	8.5	atm
Flujo másico	Valor	Kg/h
Oxígeno	0.13960	Fracción molar
Dióxido de Carbono	0.0318519	Fracción molar
Agua	0.0637038	Fracción molar
Metano	0.000000	Fracción molar
Nitrógeno	0.764836	Fracción molar

## 5 Modelo de Enfriador primario

Los gases provenientes de la caldera deben enfriarse antes de ser enviados al sistema de absorción, según lo indicado en el esquema del proceso ( figura IV.4 del capítulo 4). Esto se consigue mediante agua de enfriamiento. Al mismo tiempo que el enfriamiento de los gases, se produce la condensación parcial del vapor de agua, que arrastra además disuelto, en especial CO<sub>2</sub>.

Este equipo puede modelarse como una etapa de equilibrio (flash) o bien sólo considerar al agua adoptando al resto de los componentes como incondensables y establecer su equilibrio a través de las constantes de Henry.

El equipo se representa en la figura en la cual se indica la nomenclatura adoptada por las temperaturas.

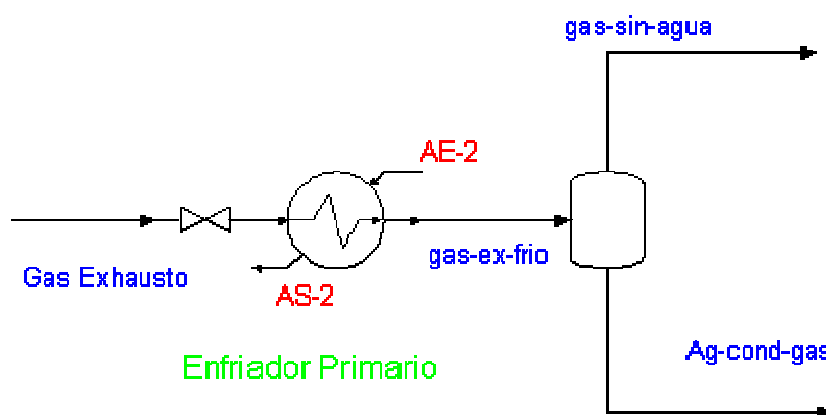


Figura AIII.6: Esquema del Enfriador Primario

### Hipótesis

El gas se enfría hasta su temperatura de operación (30 °C) con agua de enfriamiento a contracorriente que ingresa a 25 °C y sale a 60 °C. Con estas temperaturas queda definido el valor (UA) del equipo. El recipiente solo tiene la función de la separación de ambas fases y de dar tiempo suficiente a que las burbujas de gas y las gotas de líquido se separen. El conjunto es equivalente a un modelo de flash con

calor definido (en este caso el cedido al agua de enfriamiento). Del balance se deduce el consumo de agua necesario. En la figura III-8 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura.

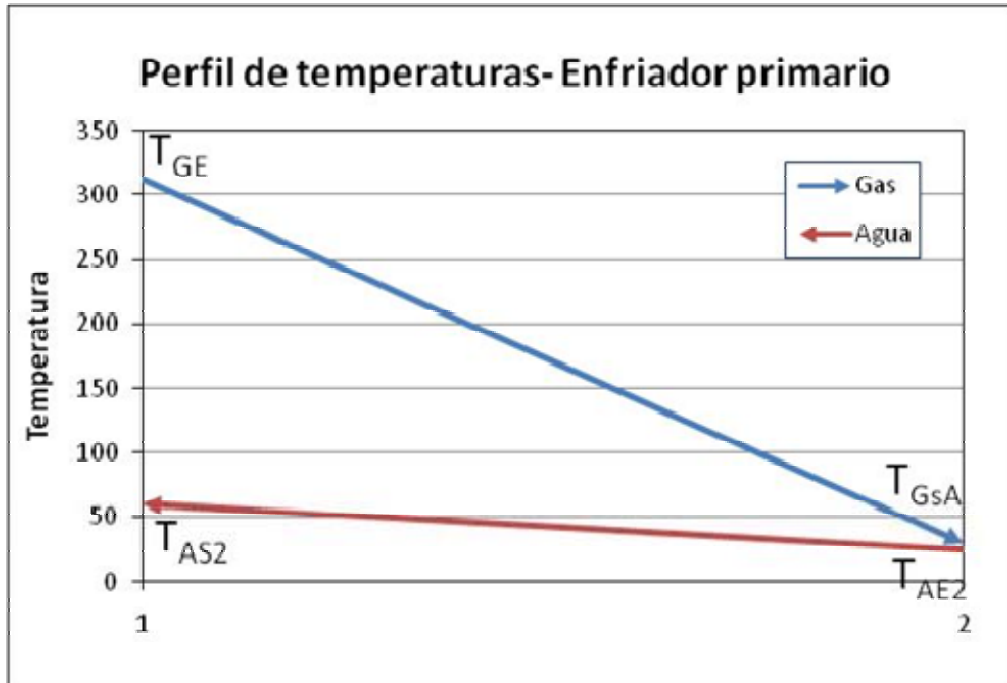


Figura AIII.7: Perfil Indicativo de Temperaturas en Enfriador Primario

Los balances de materia y energía, como así las relaciones de equilibrio que definen este modelo son las siguientes:

### Separador Flash

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_{i,EP} - 1) \times x_{i,GE}}{\theta_{EP} \times (k_{i,EP} - 1) + 1} = 0$$

$$F_{ACG} - (1 - \theta_{EP}) \times F_{GE} = 0$$

$$F_{GsA} - \theta_{EP} \times F_{GE} = 0$$

$$x_{i,ACG} - \frac{x_{i,GE}}{\theta_{EP} \times (k_{i,EP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para } i = 1 \text{ a } NC$$

$$x_{i,GsA} - \frac{x_{i,GE} \times k_{i,EP}}{\theta_{EP} \times (k_{i,EP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para } i = 1 \text{ a } NC$$

## Intercambiador

$$H_{GE} * F_{AG} - H_{GSA} \times F_{GSA} - H_{ACG} \times F_{ACG} - Q_{EP} = 0$$

$$Q_{EP} - (UA)_{EP} \frac{(T_{GE} - T_{AS2}) - (T_{GSA} - T_{AE2})}{Ln \frac{(T_{GE} - T_{AS2})}{(T_{GSA} - T_{AE2})}} = 0$$

$$Q_{EP} - ma_{AE2} \times Cp_{AE2} \times (T_{AS2} - T_{AE2}) = 0$$

Siendo además:

$$k_{i,EP} = f(P_{EP}, T_{GSA}) \quad \text{para } i = 1 \text{ a NC}$$

$$T_{GSA} = T_{ACG} \quad \text{por condición de equilibrio}$$

$$H_{GE} = H(x_{GE}, T_{GE})$$

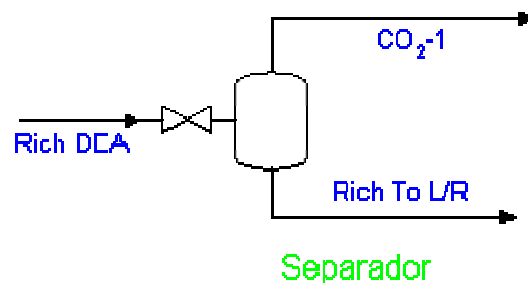
$$H_{GSA} = H(x_{GSA}, T_{GSA}, P_{GSA})$$

$$H_{ACG} = H(x_{ACG}, T_{ACG})$$

El modelo para el cálculo de tales propiedades se trató en secciones anterior (secciones 2.1 y 2.2).

## 6 Modelo de Separador

En este equipo se produce la despresurización que existe entre las columnas absorbidora y recuperadora. En la despresurización, una fracción de CO<sub>2</sub> se vaporiza súbitamente. Para el modelado se asume un flash adiabático. Los balances de materia y energía, como así las relaciones de equilibrio que los definen se describen a continuación.



*Figura AIII.8: Esquema del Separador*

*Hipótesis:*

La presión de operación de la columna absorbedora es una variable optimizable (etapa 1), la etapa 10 se estima como 0,2 atm mayor (se asume una pérdida de carga en el equipo). Desde esa presión hasta la atmosférica se produce la descompresión inicial (la segunda en el ingreso a la columna recuperadora). El modelo corresponde al de un flash adiabático que opera a presión atmosférica. Las ecuaciones son similares al casp anterior según se indica a continuación:

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_{i,SEP} - 1) \times x_{i,RDEA}}{\theta_{SEP} \times (k_{i,SEP} - 1) + 1} = 0$$

$$F_{RL/R} - (1 - \theta_{SEP}) \times F_{RDEA} = 0$$

$$F_{CO2-1} - \theta_{SEP} \times F_{RDEA} = 0$$

$$x_{i,RL/R} - \frac{x_{i,RDEA}}{\theta_{SEP} \times (k_{i,SEP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para } i = 1 \text{ a } NC$$

$$x_{i,CO2-1} - \frac{x_{i,RDEA} \times k_{i,SEP}}{\theta_{SEP} \times (k_{i,SEP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para } i = 1 \text{ a } NC$$

$$H_{RDEA} * F_{RDEA} - H_{RL/R} \times F_{RL/R} - H_{CO2-1} \times F_{CO2-1} = 0$$

Siendo además:

$$k_{i,SEP} = f(P_{SEP}, T_{RL/R}) \quad \text{para } i = 1 \text{ a } NC$$

$$T_{RL/R} = T_{CO2-1} \quad \text{por condición de equilibrio}$$

$$H_{RDEA} = H(x_{RDEA}, T_{RDEA})$$

$$H_{RL/R} = H(x_{RL/R}, T_{RL/R})$$

$$H_{CO2-1} = H(x_{CO2-1}, T_{CO2-1}, P_{CO2-1})$$



El modelo para el cálculo de tales propiedades se trató en secciones anterior (secciones 2.1 y 2.2).

### 7 Modelo de Intercambiador recuperador

La etanolamina proveniente de la columna recuperadora se debe recircular a la columna absorbedora. Previamente, se debe enfriar, primero, por lo que se recupera calor precalentando la alimentación de la columna regeneradora. Esta operación se realiza en este equipo. Se asume que no hay cambio de estado.

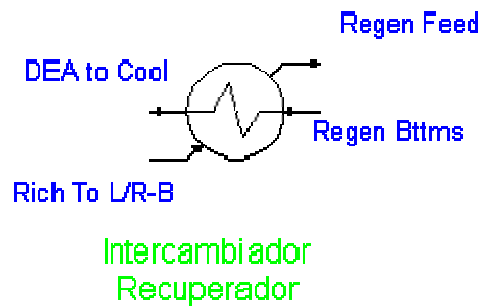


Figura III-10: Esquema Intercambiador Recuperador

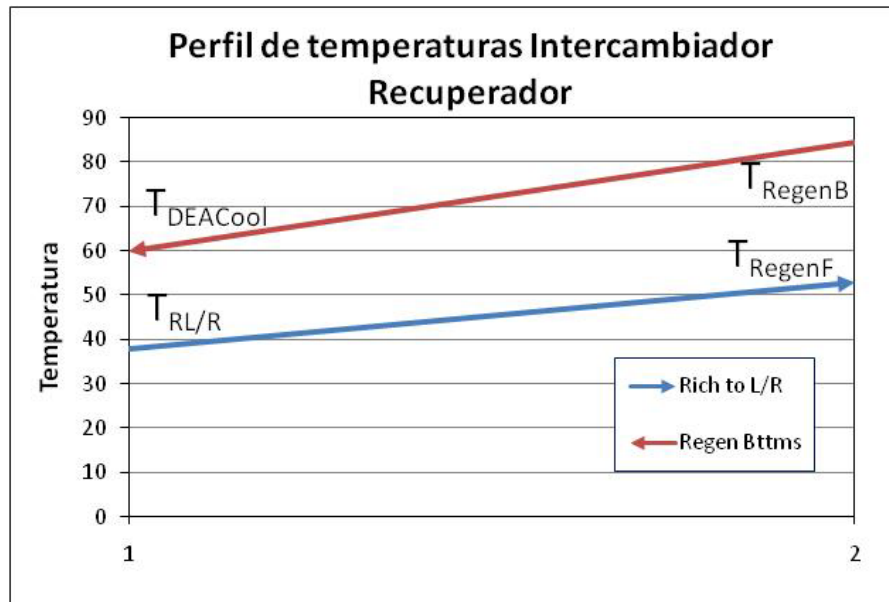


Figura AIII.11: Perfil Indicativo de Temperaturas Intercambiador Recuperador

*Hipótesis:*

Los caudales de ambas corrientes ya están determinados por equipos aguas arriba, fijándose la temperatura de entrada de la columna recuperadora (Regen Feed) en 70 °C. La otra temperatura de salida y el UA quedan así definidos. En la figura III-11 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura.

Los balances de materia y energía así como la ecuación de transferencia de calor resultan:

$$\begin{aligned}
 F_{DEACool} - F_{RegnB} &= 0 \\
 F_{RegenF} - F_{RL/R} &= 0 \\
 [H_{RegenB} - H_{DEACool}] \times F_{RegenB} - Q_{IR} &= 0 \\
 [H_{RL/R} - H_{RegenF}] \times F_{RL/R} + Q_{IR} &= 0 \\
 Q_{IR} - (UA)_{IR} \times \frac{(T_{DEACool} - T_{RL/R}) - (T_{RegenB} - T_{RegenF})}{\ln \left( \frac{T_{DEACool} - T_{RL/R}}{T_{RegenB} - T_{RegenF}} \right)} &= 0
 \end{aligned}$$

*Donde*

$$\begin{aligned}
 H_{RegenB} &= H(x_{RegenB}, T_{RegenB}) \\
 H_{DEACool} &= H(x_{DEACool}, T_{DEACool}) \\
 H_{RL/R} &= H(x_{RL/R}, T_{RL/R}) \\
 H_{RegenF} &= H(x_{RegenF}, T_{RegenF})
 \end{aligned}$$

### **8 Modelo de Inter enfriador**

La corriente de reciclo de etanolamina una vez enfriada parcialmente en el equipo anterior se acondiciona mediante agua de enfriamiento antes de su ingreso a la columna absorbidora. A modo de simplificación se estimará el cambio entálpico del agua de enfriamiento través de su Cp. En la figura se muestra un esquema del equipo. Los balances de materia y energía que lo representan se describen a continuación.

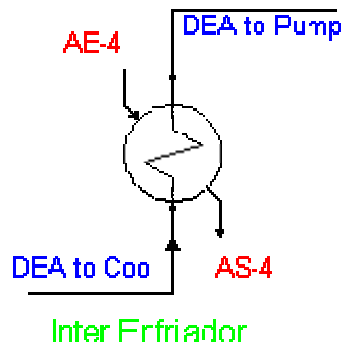


Figura AIII.12: Esquema del Inter Enfriador

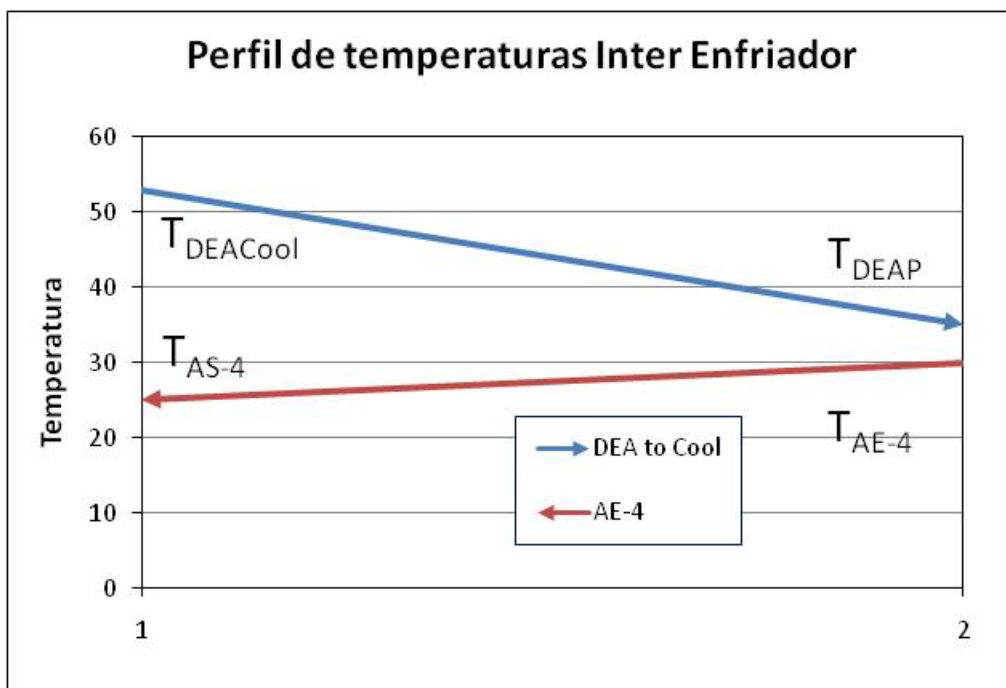


Figura AIII.13: Perfil de Temperaturas Inter Enfriador

*Hipótesis:*

La corriente de reciclo de amina se acondiciona a su temperatura de entrada a la columna regeneradora llevándola a 35 °C con agua de enfriamiento que ingresa a 25 °C y sale a 30 °C a fin de proveer una moderada diferencia de temperatura. De este modo tanto el UA como el caudal de agua quedan definidos. En la figura III-13 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura. A continuación las ecuaciones correspondientes al modelo adoptado en Hysys®:

$$\begin{aligned}
F_{DEACool} - F_{DEAP} &= 0 \\
F_{AE-4} - F_{AS-4} &= 0 \\
[H_{DEAP} - H_{DEACool}] \times F_{DEACool} - Q_{IE} &= 0 \\
Q_{IR} - ma_{AE4} \times Cp_{AE4} \times (T_{AS-4} - T_{AE-4}) &= 0 \\
Q_{IE} - (UA)_{IE} \times \frac{(T_{DEACool} - T_{AS-4}) - (T_{DEAP} - T_{AE-4})}{\ln \frac{(T_{DEACool} - T_{AS-4})}{(T_{DEAP} - T_{AE-4})}} &= 0
\end{aligned}$$

Donde

$$H_{DEAP} = H(x_{DEAP}, T_{DEAP})$$

$$H_{DEACool} = H(x_{DEACool}, T_{DEACool})$$

## 9 Modelo de Bomba de refluj

La función de esta bomba es la de proveer la recirculación de la etanolamina ya que la misma forma parte de un circuito cerrado. La figura ilustra el diagrama del mismo mientras que las ecuaciones que lo representan son:

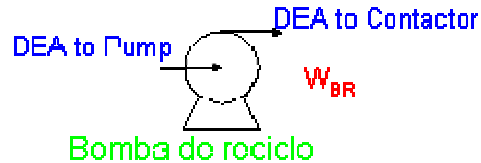


Figura AIII-14: Esquema Bomba de Reciclo

Hipótesis:

Con una eficiencia adiabática asumida de 75 %, caudal definido y diferencia de presión conocida, la potencia queda definida, según:

$$W_{BR} - \frac{1}{\eta_{BR}} * q * (P_{DEAC} - P_{DEAP}) = 0$$

$$P_{DEAC} - P_{DEAP} - \Delta P_{BR} = 0$$

$$F_{DEAC} - F_{DEAP} = 0$$

### 10 Modelo de Deshumidificador (incluye sumador y knockout pot)

Las corrientes de CO<sub>2</sub> provenientes del separador y de la columna regeneradora se unen en un sumador. Esta nueva corriente contiene agua que debe separarse en este equipo antes de enviarse al blower (compresor) a fin de evitar líquido en la corriente gaseosa.

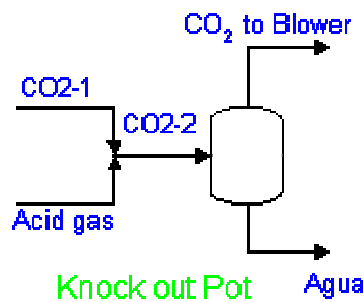


Figura AIII.15: Esquema Deshumidificador

*Hipótesis:*

La corriente gaseosa “CO2-1” está más fría que la proveniente del condensador de la columna regeneradora por lo que puede producir algo de condensación del vapor de agua. A fin de evitar enviar líquido al compresor se intercala este equipo que tiene por misión separar dicha agua condensada. Se modela como un simple flash adiabático unido a la salida de un sumador de corrientes. El único parámetro definido es, entonces, que el calor intercambiado es nulo siendo el resto de las variables definidas por el sistema de ecuaciones que surgen de los balances de materia y energía que se indican a continuación. En la figura III.15 se visualiza el esquema del equipo.

$$F_{CO_2-2} - F_{CO_2-1} - F_{AG} = 0$$

$$F_{CO_2-2} \times x_{i,CO_2-2} - F_{CO_2-1} \times x_{i,CO_2-1} - F_{AG} \times x_{i,AG} = 0$$

$$F_{CO_2-2} \times H_{CO_2-2} - F_{CO_2-1} \times H_{CO_2-1} - F_{AG} \times H_{AG} = 0$$

*Donde*

$$H_{CO_2-2} = H(x_{CO_2-2}, T_{CO_2-2}, P_{CO_2-1})$$

$$H_{CO_2-1} = H(x_{CO_2-1}, T_{CO_2-1}, P_{CO_2-1})$$

$$H_{AG} = H(x_{AG}, T_{AG})$$

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_{i,KOP} - 1) \times x_{i,CO_2-2}}{\theta_{KOP} \times (k_{i,KOP} - 1) + 1} = 0$$

$$F_{Agua} - (1 - \theta_{KOP}) \times F_{CO_2-2} = 0$$

$$F_{CO_2B} - \theta_{KOP} \times F_{CO_2-2} = 0$$

$$x_{i,RL/R} - \frac{x_{i,CO_2-2}}{\theta_{KOP} \times (k_{i,KOP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para } i = 1 \text{ a } NC$$

$$x_{i,CO_2-1} - \frac{x_{i,CO_2-2} \times k_{i,KOP}}{\theta_{KOP} \times (k_{i,KOP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para } i = 1 \text{ a } NC$$

$$H(x_{CO_2-2}, T_{CO_2-2}) \times F_{CO_2-2} - H(x_{Agua}, T_{Agua}) \times F_{Agua} - H(x_{CO_2B}, T_{CO_2B}) \times F_{CO_2B} = 0$$

Siendo además:

$$k_{i,KOP} = f(P_{KOP}, T_{Agua}) \quad \text{para } i = 1 \text{ a } NC$$

$$T_{Agua} = T_{CO_2-2} \quad \text{por condición de equilibrio}$$

### **11 Modelo de Blower (compresor, enfriador)**

Para disponer el CO<sub>2</sub> para su despacho (por ejemplo para ser bombeado a la profundidad del mar) se debe aumentar la presión del mismo. Al mismo tiempo, puesto que la alta compresión implica altas temperaturas se dispone de equipos refrigeradores. Ambos se presentan en la figura siguiente que representa al esquema del equipo. En la figura III-17 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura. De los balances de materia y energía se simula el comportamiento del mismo:

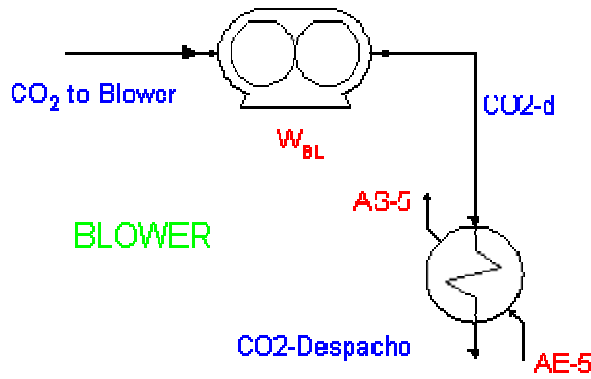


Figura AIII.16: Esquema Blower

*Hipótesis:*

El compresor (eficiencia adiabática de 75 % y politrópica de 83 %) eleva la presión hasta unas 100 atm, adecuadas tanto para su transporte a larga distancia como para su inyección profunda en el mar para su disposición final en forma de hidratos estables. Esta fuerte compresión se ve acompañada por un elevado aumento de temperatura. Para acondicionar la temperatura y proteger al blower se lo enfría con agua de enfriamiento que ingresa a 25 °C.

$$T_{CO2d} - T_{CO2B} \left\{ 1 + \frac{1}{\eta_{Bl}} \left[ \frac{P_{CO2d}}{P_{CO2B}} \right]^{\frac{\gamma_a - 1}{\gamma_a}} - 1 \right\} = 0$$

$$\dot{W}_{Bl} - \dot{m}_{CO2B} * C_{p_a} (T_{CO2d} - T_{CO2B}) = 0$$

$$F_{CO2d} - F_{CO2B} = 0$$

$$P_{CO2d} + \Delta P_{Bl} - P_{CO2B} = 0$$

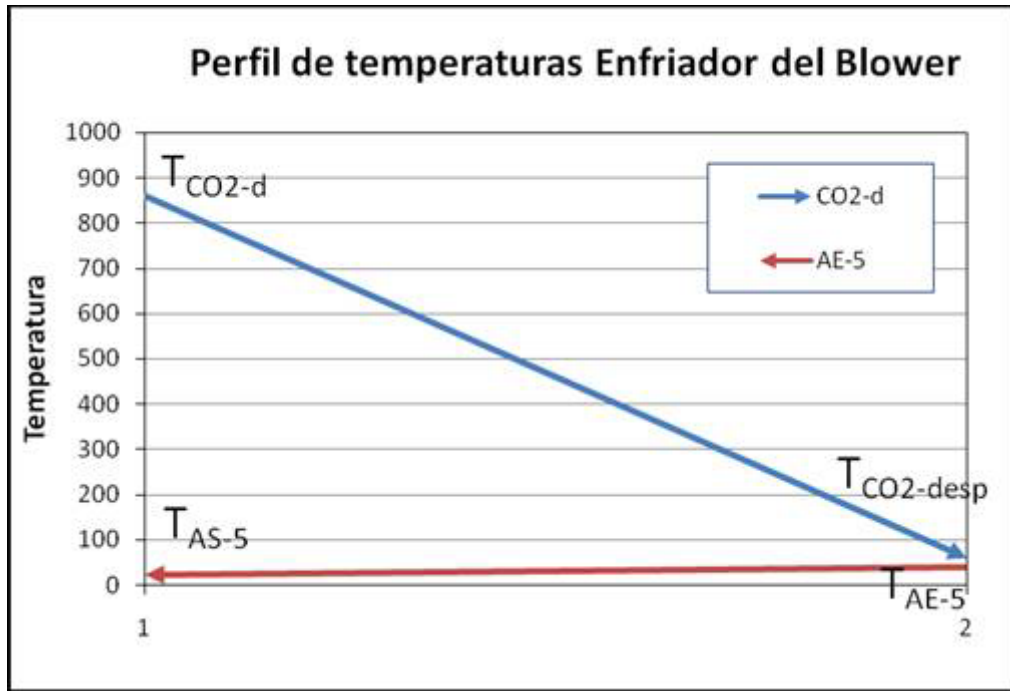


Figura AIII.17: Perfil de Temperaturas Enfriador Blower

$$F_{CO2-d} - F_{CO2-desp} = 0$$

$$F_{AE-5} - F_{AS-5} = 0$$

$$\left[ H(x_{CO2-d}, T_{CO2-d}, P_{CO2-d}) - H(x_{CO2-desp}, T_{CO2-desp}, P_{CO2-desp}) \right] \times F_{CO2-d} - Q_{EB} = 0$$

$$Q_{EB} - m_{a_{AE5}} \times C_{p_{AE5}} \times (T_{AS-5} - T_{AE-5}) = 0$$

$$Q_{Bl} - (UA)_{Bl} \times \frac{(T_{CO2-d} - T_{AS-5}) - (T_{CO2-desp} - T_{AE-5})}{\ln \left( \frac{T_{CO2-d} - T_{AS-5}}{T_{CO2-desp} - T_{AE-5}} \right)} = 0$$

### III.2.11 Componentes químicos

La siguiente tabla lista los componentes que forman parte del sistema de absorción. Incluye al gas combustible (asumido como metano puro pero se agrega además hidrógeno y sulfuro de hidrógeno), los componentes del aire (oxígeno y nitrógeno), y los productos finales e intermedios de la combustión (monóxido y bióxido de carbono y agua) y la solución absorbente (dietanolamina):

Sistema de absorción
----------------------



##	Compuesto	Formula
1	Nitrógeno	N <sub>2</sub>
2	Sulfuro de Hidrógeno	H <sub>2</sub> S
3	Dióxido de carbono	CO <sub>2</sub>
4	Metano	CH <sub>4</sub>
5	Agua	H <sub>2</sub> O
6	Dietanolamina	DEA
7	Oxígeno	O <sub>2</sub>
8	Monóxido de Carbono	CO
9	Hidrógeno	H <sub>2</sub>

*Tabla III-1*

## **REFERENCIAS. LITERATURA CONSULTADA**

- Aguirre, P., Scenna N. Optimal Thermodynamic Synthesis of Dual Purpose Desalination Plants, Chemical Engineering Science, v.44, n.2, 1989, ISSN/ISBN: 00092509.
- Aguirre, P., Scenna N. A thermodynamic approach to the synthesis of thermal desalination processes” ISBN: 978-1-84826-890-6
- Bozzuto C., Nsakala N, Liljedahl G, Palkes M., Marion L., Engineering Feasibility of CO<sub>2</sub> capture of an existing coal-fired power plant, Final Report, Vol I, ALSTOM, Power Inc, 2001.
- Caballero J. And Grossman I, “ Rigoorous design of distillation columns. Integration of disjunctive program and process simulators”, Ind Chem Eng Res., 2005, 44, 2760-75.
- Caballero J, Odjo A and Grossman I, “Flowsheet optimization with implicit models and complex models and size cost functions using process modular simulators”, Department of Chem Engng, Universidad de Alicante, España, dic. 2006.
- Cenusă V and Badea A, Exergetic Optimization of the heat recovery steam generators by imposing the total heat transfer area, Int J thermodynamics, vol 7, nro 3, pp 149-156, 2004.
- Chou C. and Shih Yen, A thermodynamic approach to the design and synthesis of plant utility systems, Ind Engn Chem Res, 1987, 26, 1100-1108.
- Desideri U, Paolucci A, Perfomance modeling of a carbon dioxide removal system of power plants, Energy Conversion Management, 40 (1999) 1899-1915.
- Diwekar M, Grosman I and Rubin F, An MINLP process synthetizer for modular secuential simulators, Ind Chem Eng Res, 1992,31,313-328.
- Douglas J. M. “Conceptual design of chemical processes”. New York: *McGraw-Hill* (1988).
- Feng X and Zhu X., Combining pinch and exergy analysis for process modifications, App Ther Engng, vol 17, nro 3, pp 249-261, 1997.
- Feron P., Post- Combustion capture. Presentation at joint ENCAP/CASTOR seminar, 2006 (www.encapco2.org).
- Franco A., Giannini N. “A General Method for the Optimal design of Heat Recovery Steam Generators”, Energy, (31) 2006, 3342-3361.

- J.A. Francesconi, M.C. Mussati, R.O. Mato, P. A. Aguirre, “ Energy Integration of the Steam Reforming Process of Bioethanol and Fuel Cells”, II Congreso de Ing Qca, IV Congreso Process System Engineering, Empromer, 2005, Rio de Janeiro, Brasil.
- Glavic P., Gorsek A., Bogataj M. “Design of the optimal total site heat recovery system using SSSP approach”. *Chemical Engineering and Processing*, **45**, 372–382 (2006).
- Godat j. and Marechall F., Combining Optimization and process integration techniques for the synthesis of fuel system, Laboratory of energy systems, Lausanne, Instituto Federal de Tecnología, Suiza.
- Hashim, H., Douglas P, Elkamel A, Croistet E., Optimization Model for Energy Planning CO<sub>2</sub> Emission Considerations, *Ind Eng Chem Resources*, 44, 879-890.
- Hena Carlos, Simulación y Evaluación de Procesos Químicos, 2005]
- Hongtao Li, Franc-ois Marechal, Meinrad Burer, Daniel Favrat, « Multi-objective Optimization of an Advanced Combined Cycle Power Plant including CO<sub>2</sub> Separation Options”, *Energy*, (31), 2006, 3117-3134
- Howe L. K. , Dennis N.V.S.N., Konda M. and Rangaiah G. P. “Synthesis and Design of Chemical Processes”. *Journal of The Institution of Engineers*, **45**, Issue 6 (2005).
- “How to estimate utility costs”. *Chemical Engineering*, Engineering Practice, April (2006).
- *Institution of Chemical Engineers. IchemE*, Rugby-UK (1982).
- Lazzaretto A and Segato F, Thermodynamic Optimization of the HAT cycle plant structure, Part I, optimization of the basic plant configuration, *J of Engng for gas turbines and Power*, jan 2001, vol 123, 1-7.
- Lazzaretto A and Segato F, Thermodynamic Optimization of the HAT cycle plant structure, Part II, Structure of the heat exchange network, *J of Engng for gas turbines and Power*, jan 2001, vol 123, 8-16.
- Linnhoff, B., Townsend, D.W., Boland, D., Hewitt, D.F., Thomas, B.E.A., Guy, A.R. y Marsland, R.H. “User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy”.
- Manninen J and Zhu X., Level by Level Flowsheet synthesis methodology for thermal system design, *AICHE j*, Jan 2001, 142-158.
- Manninen J and Zhu X, Optimal Gas turbine integration to the Process

- Industries, *Ind Engn Chem Res*, 1999, 38, 4317-4329.
- Marcovecchio M., Mussati S., Aguirre P., Scenna N, Optimization of Hybrid Desalination Processes including Multi Stage Flash Desalination and Reverse Osmosis Systems, *Desalination*, v.182, p.111 - 122, ISSN/ISBN: 00119164, 2005.
  - Mark M. Daichendt, Ignacio E. Grossmann, “Integration of hierarchical decomposition and mathematical programming for the synthesis of process flowsheets”, *Comp Chem Engng*, vol 22, nro 1-2, pp 147-175, 1997
  - Marechal, F. Palazzi, J. Godat, D. Favrat, “Thermo-economic modelling and optimization of fuel cell systems”, *Fuel Cell*, 2005, Nro 1, 5-23
  - Manual del Usuario del HYSYS; apendice C, “Amines Property package”.
  - Martinez, P. E., Análisis de Ciclo de Vida Medioambiental como Herramienta en la Optimización de Procesos. Tesis doctoral de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca.
  - Martínez, E, William Vicente y Martín Salinas-Vázquez, Simulación de un Sistema de Gasificación Integrado a un Ciclo Combinado, Instituto de Ingeniería, Información Tecnológica-Vol. 17 N°6-2006, pág.: 141-146
  - Mimura T, Shimojo S, Suda T, Iijima M, Mitsuoka S, Research and development on energy saving technology for flue gas carbon dioxide recovery and steam system in power plant, *Energy Conversion and Management*, 36 (6-9) (1995), (397-400).
  - Mussati S., Aguirre P., Scenna, N., Optimal Multi Stage Flash Plant Design, *Desalination*, v.138, p.341 - 347, 2001 a, ISSN/ISBN: 00119164.
  - Mussati S., Aguirre P., Scenna N, Optimal Synthesis of Multistage Flash Evaporation, *Latin American Applied Research*, v.31, n.4, p.293 - 300, 2001 b, ISSN/ISBN: 03270793.
  - Mussati S., Aguirre P., Scenna N., Novel Configuration for Multi Stage Flash - Mixer Desalination System, *Industrial & Engineering Chemical Research*, v.42, p.4828 - 4839, (2003), ISSN/ISBN: 08885885.
  - Mussati S, P. Aguirre, Scenna N, M Marcovecchio, A new global optimization algorithm for process design: its application to thermal desalination processes, *Desalination* , v.166, p.129 - 140, (2004 a), ISBN: 00119164.
  - Mussati S, P Aguirre, Scenna N, “A rigorous mixed-integer, no lineal programming model (MINLP) for synthesis and optimal operation of

- cogeneration seawater desalination plants”, *Desalination*, v.166, p.339 - 345, (2004 b), ISSN/ISBN: 00119164.
- Mussati S., Scenna N., Aguirre P., Improving the efficiency of the Multi Stage Flash Once Through (MSF - OT) and Multi Stage Flash-Mixer (MSF-M) evaporators, *Desalination* , v.166, p.141 - 151, ISSN/ISBN: 0011916, (2004 c).
  - Mussati S, Aguirre P., Scenna N, Optimization of Alternative Structures of Integrated Power and Desalination Plants, *Desalination*, v.182, p.123 - 129, ISSN/ISBN: 00119164, 2005.
  - Mussati S, Aguirre P, Scenna N, “Superstructure of Alternative Configurations of the Multi Stage Flash Desalination Process”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(21); 7190-7203 (2006 a), ISSN/ISBN: 08885885.
  - Mussati P, Aguirre P and Scenna N., “Thermodynamic Approach for Optimal Design of Heat and Power Plants, Relationships between thermodynamic and economic solutions”, *Latin American Applied Research*. 36, pp. 329-335 (2006 b).
  - Mussati S, M. Bartffeld P. Aguirre and N. Scenna, “Disjunctive Model for Superstructure Optimization of Power and Desalting Plants”, *Desalination*, in press, (2007).
  - Pelster S, Favrat D., Von Spakovsky MR, The thermoeconomic and Environomic Modeling and optimization of the synthesis, design, and operation of combined cycles with advances options, *Jr of engineering for gas turbines and Power*, oct 2001, vol 123, 717-726.
  - Renuame K and Julia J., Optimal process design in a modular simulation environment. New formulation of de Mixer integer non linear problem, *Ind Chem Engn Res*, 1995, 34, 4378-95.
  - Romeo L., Bolea I., Escosa J., “Integration of Power Plant and amine scrubbing to reduce CO<sub>2</sub> capture costs”, *Applied Thermal Engineering* (2007), doi:10.1016/j.applthermaleng., 2007.06.036
  - Rodriguez Nestor, Informe Interno, CAIMI – GAIQ, Intregración de un proceso de cogeneración con un proceso de captura de CO<sub>2</sub>. Optimización utilizando simuladores convencionales. Posibles alternativas de síntesis, 2008.
  - Shenoy, U.V. "Heat Exchanger Network Synthesis: Process Optimization by Energy and Resource Analysis", *Gulf Publishing Company*, Houston, TX, USA (1995).

- Scenna N. J. "Synthesis of Thermal Desalination Processes, Part I. Multistage Flash Distillation System (MSF)", *Desalination*, v.64, p.111 - 122, 1987, ISSN/ISBN: 00119164.
- Scenna N, P Aguirre, Optimal Thermodynamic Synthesis of Dual Purpose Desalination Plants. Extraction vs. Back-Pressure Turbines, *Desalination*, v.81, p.419 - 436, 1991, ISSN/ISBN: 00119164.
  - Scenna N, P Aguirre, A Thermodynamic Methodology for Process Synthesis and Its Application to Dual-Purpose Desalination Plants. Extraction vs. Back Pressure Turbines, *Transaction of the Institute of Chemical Engineers. Part A*, v.71, 1993, ISSN/ISBN: 00469858.
  - Scenna, N P Aguirre, "Thermodynamic Synthesis of Cogeneration Systems in Thermal Desalination Plants, Including Gas Turbines", *Latin American Applied Research* , v.28, n.4, p.243 - 246, 1998, ISSN/ISBN: 03270793.
  - N. SCENNA, S. MUSSATI "MSF Design taken into account Availability", *Desalination*, (2008).
  - UN (2001) Report of the United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation to the General Assembly, N Y
  - Valero Antonio, Lozano Miguel, Serra Luis CGAM problem: Definition and conventional Solution 1994.