

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL

Facultad Regional Córdoba - Facultad Regional Rosario

Tesis presentada como parte de los requisitos de la Universidad Tecnológica Nacional para la  
obtención del Grado Académico de Doctor en Ingeniería

OPTIMIZACIÓN DE PLANTAS DE GENERACIÓN DE ENERGÍA  
ELÉCTRICA INCLUYENDO SISTEMAS DE CAPTURA DE  $CO_2$ .

Doctorando: Ing. Patricia Liliana Mores

Directores: Dr. Sergio F. Mussati, Dr. Nicolás J. Scenna

Rosario, Argentina - 20 de Marzo de 2015



*A mis padres, Norma y Antonio*



## Agradecimientos

A mis directores de tesis, Dr. Sergio F. Mussati y Dr. Nicolás J. Scenna, quienes con su constante estímulo y confianza, se transformaron en pilares fundamentales para el desarrollo de esta tesis. Quiero expresarles mi gratitud por su invariable apoyo, tanto desde lo académico como lo personal, pues en ambos aspectos estuvieron acompañándome durante este camino.

A todos mis compañeros y amigos de CAIMI por los momentos compartidos y en especial a la Dra. Sandra M. Godoy, quien con esmero y paciencia estuvo a mi lado en cada paso, desde el día en que la puerta del Centro se abrió para mí.

A mi familia, por su amor, su constante apoyo y entendimiento no solo durante esta etapa sino durante toda mi vida.

A “mis pequeños”, Delfina, Lautaro, Ornella, Liz, Manuel, Lourdes, Victoria, Octavio y Sara quienes con sus risas, llantos y juegos me brindan las fuerzas para seguir adelante.

Al CAIMI (Centro de Aplicaciones Informáticas y Modelado en Ingeniería) y a su Director, el Dr. Nicolás Scenna, por brindarme mucho más que un lugar de trabajo.

A la Universidad Tecnológica Nacional y a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica por el apoyo económico brindado como beca de estudios para la realización de esta tesis.

---



## Prefacio

La demanda de energía eléctrica se encuentra en constante crecimiento en el mundo actual, lo que exige la concreción de nuevas opciones de generación que resulten competitivas, en vista del amplio abanico de tecnologías que se encuentran disponibles para tal fin. Por otra parte, la reducción de emisiones de sustancias contaminantes (material particulado, gases con efecto de invernadero) constituye un aspecto clave en la aprobación de nuevos proyectos, debido a la sanción de tratados internacionales y regulaciones ambientales progresivamente más restrictivas.

Debido a la necesidad de satisfacer tanto la creciente demanda de energía como la reducción de las emisiones de  $CO_2$  a la atmósfera, se están realizando enormes esfuerzos para mejorar la performance de los sistemas de captura y compresión de  $CO_2$  acoplados a sistemas de generación de energía eléctrica. Específicamente, la integración de estos procesos es objeto de estudio en diferentes áreas de investigación.

El presente trabajo de tesis propone modelar y optimizar procesos de captura de  $CO_2$  para el tratamiento de gases de combustión generados en plantas de producción de energía alimentadas por combustibles fósiles. Mediante el empleo de técnicas basadas en programación matemática, se pretende realizar el estudio del proceso global, considerando en la etapa de diseño preliminar tanto las variables operativas como las de dimensionamiento de cada uno de los equipos presentes. En función de lo expresado, se plantean los siguientes objetivos:

### *Objetivo General*

Contribuir en la búsqueda de soluciones tecnológicas conducentes a la disminución de emisiones gaseosas generadas en plantas de producción de vapor y electricidad, teniendo como meta principal una producción de energía eléctrica más limpia, de manera tal de no alterar el medio ambiente.

---

### ***Objetivos Específicos***

- Generar un modelo matemático de optimización que permita abordar la síntesis y el diseño de plantas nuevas de cogeneración de vapor y electricidad incluyendo el tratamiento de sus emisiones gaseosas.
- Proponer una estrategia de solución para el modelo resultante, que garantice la obtención de soluciones óptimas al variar los principales parámetros del proceso. Se pondrá especial énfasis en la convergencia del modelo, evitando en lo posible soluciones óptimas locales, definiendo un procedimiento eficiente de inicialización de las variables.
- Estudiar y comparar, desde un punto de vista energético, económico y ambiental, la integración de la planta de producción de energía eléctrica con la planta de captura de  $CO_2$ . El consumo de servicios auxiliares de ambos procesos es significativo, lo que implica elevados costos de operación. En consecuencia, es indispensable proponer un proceso integrado eficiente con el fin de disminuir el costo total anual, teniendo en cuenta los niveles umbrales permitidos de emisión de gases de efecto invernadero.

Finalmente, a partir del planteo de diferentes casos de estudio y distintas funciones objetivo, se evaluará la performance del sistema captura de  $CO_2$  y del sistema “captura de  $CO_2$ +generación” desde un punto de vista termodinámico y también económico.

---

# Índice General

Índice de Figuras	XII
Índice de Tablas	XVIII
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Captura y almacenamiento de $CO_2$ . Generalidades . . . . .	1
1.1.1. Demanda energética versus cambio climático . . . . .	1
1.1.2. Tecnologías de captura de $CO_2$ . . . . .	2
1.1.3. Captura de $CO_2$ en plantas de generación de energía . . . . .	4
1.1.4. Criterios de selección del proceso de captura de $CO_2$ en plantas de generación de energía . . . . .	6
1.2. Absorción química con aminas . . . . .	7
1.2.1. Descripción del proceso . . . . .	7
1.2.2. Líneas de investigación actuales . . . . .	10
1.3. Estructura de la tesis . . . . .	21
<b>2. Proceso de absorción de <math>CO_2</math> en solución acuosa de monoetanolamina</b>	<b>27</b>
2.1. Introducción . . . . .	27
2.2. Desarrollo del modelo matemático. Columna de absorción . . . . .	30
2.2.1. Modelo simplificado (equilibrio) versus modelo riguroso (rate-based) .	54
2.2.2. Implementación. Características matemáticas del modelo . . . . .	55
2.3. Verificación del modelo vía simulación. Comparación con datos publicados .	57
2.3.1. Verificación del modelo de equilibrio líquido vapor (ELV) . . . . .	57
2.3.2. Verificación del modelo de la columna de absorción . . . . .	59

---

2.4.	Diseño óptimo de la columna de absorción . . . . .	68
2.4.1.	Formulación del problema de optimización . . . . .	68
2.4.2.	Diseño óptimo. Análisis y discusión de resultados . . . . .	70
2.5.	Resumen . . . . .	80
<b>3.</b>	<b>Proceso de regeneración del solvente, desorción y compresión de <math>CO_2</math></b>	<b>83</b>
3.1.	Introducción . . . . .	83
3.2.	Desarrollo del modelo matemático . . . . .	87
3.2.1.	Consideraciones generales . . . . .	89
3.2.2.	Columna regeneradora . . . . .	89
3.2.3.	Bombas de solvente . . . . .	91
3.2.4.	Unidades de transferencia de energía . . . . .	91
3.2.5.	Compresores y sopladores . . . . .	94
3.3.	Verificación del modelo de la etapa de regeneración vía simulación . . . . .	96
3.4.	Diseño óptimo de las etapas de regeneración del solvente y compresión de $CO_2$	106
3.4.1.	Formulación del problema de optimización . . . . .	106
3.4.2.	Diseño óptimo. Análisis y discusión de resultados . . . . .	108
3.5.	Resumen . . . . .	127
<b>4.</b>	<b>Proceso de captura de <math>CO_2</math> mediante absorción química con MEA</b>	<b>130</b>
4.1.	Introducción . . . . .	130
4.2.	Desarrollo del modelo matemático . . . . .	133
4.2.1.	Pre-tratamiento de los gases de combustión . . . . .	134
4.2.2.	Reposición de agua y solvente . . . . .	136
4.2.3.	Estimación de los costos de captura de $CO_2$ . . . . .	136
4.2.4.	Características del modelo. Esquema de resolución . . . . .	145
4.3.	Diseño tecno-económico óptimo. . . . .	146
4.3.1.	Formulación del problema de optimización . . . . .	146
4.3.2.	Diseño óptimo. Análisis y discusión de resultados . . . . .	148
4.4.	Resumen . . . . .	178

---

---

<b>5. Proceso de generación de energía: NGCC+Captura y compresión de <math>CO_2</math></b>	<b>182</b>
5.1. Introducción . . . . .	182
5.2. Indicadores económicos y de eficiencia . . . . .	184
5.3. Modelo tecno-económico del sistema acoplado . . . . .	186
5.3.1. Descripción del sistema integrado . . . . .	186
5.3.2. Descripción del modelo matemático . . . . .	187
5.3.3. Características del modelo. Esquema de resolución . . . . .	190
5.4. Diseño óptimo del sistema NGCC+captura . . . . .	191
5.4.1. Formulación del problema de optimización . . . . .	191
5.4.2. Diseño óptimo. Análisis y discusión de resultados . . . . .	193
5.4.3. Resumen . . . . .	209
<b>6. Conclusiones y trabajos futuros</b>	<b>212</b>
6.1. Conclusiones . . . . .	212
6.2. Alcances y limitaciones. Trabajos futuros . . . . .	225
<b>A. Nomenclatura</b>	<b>230</b>
<b>B. Estimación de los costos de captura de <math>CO_2</math></b>	<b>240</b>
B.3. Costo total de adquisición de equipos . . . . .	241
B.1. Comparación de costos de adquisición de equipos . . . . .	242
B.2. Distribución de costos de materias primas y servicios auxiliares . . . . .	243
B.4. Variables de diseño de equipos . . . . .	246
<b>C. Descripción del ciclo combinado de gas natural NGCC.</b>	<b>254</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>257</b>

---

# Índice de Figuras

1.1. Opciones de captura de $CO_2$ en plantas de generación de energía. Esquemas. . . . .	5
1.2. Proceso de captura de $CO_2$ mediante absorción química. . . . .	8
2.1. Esquema de una etapa genérica de absorción. . . . .	31
2.2. Teoría de la doble película. Esquema general. . . . .	46
2.3. Teoría de la doble película. Perfiles de concentración (MEA y $CO_2$ ). . . . .	48
2.4. Verificación del modelo de ELV por comparación con datos experimentales (Aboudheir et al., 2003): concentración de las especies en una solución 2.5 M de MEA en función de la carga de $CO_2$ para 313 K y 373 K. . . . .	58
2.5. Verificación del modelo de ELV por comparación con datos experimentales (Aboudheir et al., 2003; Austgen et al., 1989): presión parcial de $CO_2$ en solución 2.5 M de MEA, a 313 K. . . . .	59
2.6. Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Tontiwachwuthikul et al. (1992): perfil de temperatura. . . . .	61
2.7. Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Tontiwachwuthikul et al. (1992): perfil de composición de $CO_2$ en el gas. . . . .	61
2.8. Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Tontiwachwuthikul et al. (1992): perfil de composición de $CO_2$ en el líquido. . . . .	62
2.9. Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Alatiqi et al. (1994), KNPC: perfil de temperatura. . . . .	65

2.10. Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Alatiqi et al. (1994), KNPC: perfil de composición de $CO_2$ en el líquido. . . . .	65
2.11. Diseño óptimo. Caso 1: función objetivo, cantidad de $CO_2$ capturada y volumen de empaque. . . . .	72
2.12. Diseño óptimo. Caso 1: diámetro de la columna en función de la carga de $CO_2$ ( $\alpha_L$ ). . . . .	73
2.13. Diseño óptimo. Caso 1: caída de presión en función de la carga de $CO_2$ ( $\alpha_L$ ). . . . .	73
2.14. Diseño óptimo. Caso 1: temperatura y composición en el fondo de la columna de absorción. . . . .	75
2.15. Diseño óptimo. Caso 1: perfiles internos de flujo y composición de la corriente gaseosa. . . . .	76
2.16. Diseño óptimo. Caso 1: perfiles internos de temperatura y composición en el líquido. . . . .	77
2.17. Diseño óptimo. Caso 2. . . . .	79
3.1. Esquema de la etapa de regeneración del solvente y compresión de $CO_2$ . . . . .	88
3.2. Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): flujo másico de $CO_2$ . . . . .	99
3.3. Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): composición del líquido [mol $CO_2$ /mol MEA]. . . . .	100
3.4. Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): condiciones operativas en el hervidor. . . . .	102
3.5. Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): perfil de temperatura. . . . .	104
3.6. Diseño óptimo. Caso 1a: $FO_1$ y sus componentes en función de la carga de amina rica ( $\alpha_R$ ). . . . .	109
3.7. Diseño óptimo. Caso 1a: requerimiento térmico en el condensador. . . . .	110

---

3.8. Diseño óptimo. Caso 1a: etapa de enfriamiento de la corriente de amina pobre.	110
3.9. Diseño óptimo. Caso 1a: dimensiones óptimas de la columna de regeneración.	112
3.10. Diseño óptimo. Caso 1a: caída de presión y relaciones de tamaño óptimas (H/D).	113
3.11. Diseño óptimo. Caso 1a: trabajo óptimo de bombeo y compresión.	113
3.12. Diseño óptimo. Caso 1a: recirculación óptima de líquido y vapor.	114
3.13. Diseño óptimo. Caso 1a: requerimiento total de agua de enfriamiento.	114
3.14. Diseño óptimo. Caso 1a: área de intercambio térmico requerida en el rehervidor y en el economizador.	116
3.15. Diseño óptimo. Caso 1a: área de intercambio térmico requerida en los equipos de enfriamiento.	117
3.16. Diseño óptimo. Caso 1b: volumen específico de la columna regeneradora.	119
3.17. Diseño óptimo. Caso 1b: trabajo de compresión específico.	119
3.18. Diseño óptimo. Caso 1b: área específica de intercambio térmico requerida en el rehervidor.	119
3.19. Diseño óptimo. Caso 1b: área específica de intercambio térmico requerida en el economizador.	120
3.20. Diseño óptimo. Caso 1b: área específica de intercambio térmico requerida en el intercambiador amina - agua.	120
3.21. Diseño óptimo. Caso 1b: consumo específico de agua de enfriamiento en el intercambiador amina - agua.	120
3.22. Diseño óptimo. Caso 1b: perfil de temperatura en la fase líquida.	123
3.23. Diseño óptimo. Caso 1b: perfil de composición en la fase líquida.	123
3.24. Diseño óptimo. Caso 2: funciones objetivo (FO1 y FO2).	124
3.25. Diseño óptimo. Caso 2: servicios auxiliares de calefacción.	124
3.26. Diseño óptimo. Caso 2: servicios auxiliares de enfriamiento.	124
3.27. Diseño óptimo. Caso 2: trabajo total (bombeo y compresión).	125
3.28. Diseño óptimo. Caso 2: cantidad de $CO_2$ desorbida.	125

---

---

3.29. Diseño óptimo. Caso 2: diferencias porcentuales en el volumen, la caída de presión y la carga térmica en el condensador al emplear la $FO_1$ y la $FO_2$ . . .	125
4.1. Esquema de la etapa de pre-tratamiento de los gases de combustión. . . . .	134
4.2. Estrategia de resolución del modelo correspondiente al sistema de captura de $CO_2$ . . . . .	147
4.3. Diseño óptimo. Caso 1: costo anual total en función del nivel de captura de $CO_2$ . . . . .	152
4.4. Diseño óptimo. Caso 1: costo de operación y mantenimiento en función del nivel de captura de $CO_2$ . . . . .	153
4.5. Diseño óptimo. Caso 1: capital de inversión anual en función del nivel de captura de $CO_2$ . . . . .	154
4.6. Diseño óptimo. Caso 1: costo total de servicios auxiliares. . . . .	155
4.7. Diseño óptimo. Caso 1: penalidad eléctrica. . . . .	157
4.8. Diseño óptimo. Caso 1: distribución de trabajo mecánico. . . . .	157
4.9. Diseño óptimo. Caso 1: penalidad térmica. . . . .	158
4.10. Diseño óptimo. Caso 1: consumo de vapor de calefacción. . . . .	158
4.11. Diseño óptimo. Caso 1: consumo de agua de enfriamiento. . . . .	159
4.12. Diseño óptimo. Caso 1: consumo de agua de enfriamiento, distribución por equipos. . . . .	159
4.13. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de las columnas de absorción. .	162
4.14. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de compresores. . . . .	162
4.15. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de rehervidores. . . . .	163
4.16. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de columnas de regeneración. . .	163
4.17. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de economizadores. . . . .	164
4.18. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de sopladores. . . . .	164
4.19. Diseño óptimo. Caso 1: carga de $CO_2$ en el solvente pobre. . . . .	167
4.20. Diseño óptimo. Caso 1: flujo de solvente. . . . .	169
4.21. Diseño óptimo. Caso 1: temperaturas. . . . .	170

---

---

4.22. Diseño óptimo. Caso 2: trabajo equivalente específico en función del factor de equivalencia. . . . .	174
4.23. Diseño óptimo. Caso 2: capital de inversión y costo de operación y mantenimiento.	174
5.1. Vista esquemática de la integración de la planta de generación y la planta de captura. . . . .	186
5.2. Ciclo combinado de gas natural. Configuración. . . . .	187
5.3. Estrategia de resolución del sistema captura+generación. . . . .	191
5.4. Diseño óptimo. Caso 1: capital de inversión en función de la eficiencia de captura global y el número de trenes en paralelo. . . . .	195
5.5. Diseño óptimo. Caso 1: costo de operación y mantenimiento en función de la eficiencia de captura global y el número de trenes de captura en paralelo. . .	196
5.6. Diseño óptimo. Caso 1: indicadores económicos en función de la eficiencia de captura global y el número de trenes de captura en paralelo. . . . .	197
5.7. Diseño óptimo. Caso 1: by-pass y número mínimo de trenes de absorción en función de la eficiencia de captura global. . . . .	199
5.8. Diseño óptimo. Caso 2: penalidades térmicas y eléctricas como función de la eficiencia de captura de cada tren de absorción. . . . .	201
5.9. Diseño óptimo. Caso 2: capital de inversión y costo de operación y mantenimiento como función de la eficiencia de captura de cada tren de absorción. . . . .	203
5.10. Diseño óptimo. Caso 2: costos de adquisición de equipos, materias primas y servicios auxiliares como función de la eficiencia de captura de cada tren de absorción. . . . .	204
5.11. Diseño óptimo. Caso 2: costo de electricidad y costo de mitigación como función de la eficiencia de captura de cada tren de absorción. . . . .	205
5.12. Diseño óptimo. Caso 2: costo de la electricidad en función del costo por derechos de emisión (90 % recuperación). . . . .	205
5.13. Diseño óptimo. Comparación del costo total anual del sistema de captura (Cap. 4 versus Cap. 5). . . . .	209

---

---

B.1. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de condensadores [CND]. . . . .	241
B.2. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de enfriadores de MEA [E2]. . .	241
B.3. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de interenfriadores [E3]. . . . .	245
B.4. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de bombas de solvente [B1]. . .	245
B.5. Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de bombas de $CO_2$ [BCO2], tanques de agua de proceso [T1] y de solvente [T2]. . . . .	245

---

# Índice de Tablas

2.1. Coeficientes para la estimación de las constantes de equilibrio químico y las solubilidades. . . . .	34
2.2. Propiedades críticas. . . . .	36
2.3. Coeficientes de interacción binaria. . . . .	36
2.4. Caudal mínimo de humedecimiento. Valor de referencia (Kister, 1992). . . .	42
2.5. Coeficientes para el cálculo de la difusividad de los componentes en la fase gaseosa (Reid et al., 1987). . . . .	50
2.6. Coeficientes para el cálculo de la viscosidad de los componentes en la fase gaseosa. . . . .	51
2.7. Coeficientes para el cálculo del calor de vaporización. . . . .	52
2.8. Coeficientes para el cálculo de las capacidades caloríficas (Greer, 2008; Reid et al., 1987). . . . .	53
2.9. Condiciones operativas adoptadas de Tontiwachwuthikul et al. (1992) para la verificación del modelo de la columna de absorción. . . . .	60
2.10. Especificaciones de diseño adoptadas de Tontiwachwuthikul et al. (1992) para la verificación del modelo de la columna de absorción. . . . .	60
2.11. Comparación de los resultados del modelo de la columna de absorción con datos experimentales (Tontiwachwuthikul et al., 1992). . . . .	63
2.12. Condiciones operativas adoptadas de Alatiqi et al. (1994) para la verificación del modelo de la columna de absorción. . . . .	64
2.13. Variables de diseño y especificaciones adoptadas de Alatiqi et al. (1994) para la verificación del modelo de la columna de absorción. . . . .	64

---

2.14. Comparación de los resultados del modelo de la columna de absorción con datos experimentales (KNPC, Alatiqi et al. (1994)). . . . .	66
2.15. Comparación de los resultados del modelo de la columna de absorción con datos experimentales (PIC, Alatiqi et al. (1994)). . . . .	67
2.16. Diseño óptimo. Especificaciones de entrada al modelo. . . . .	69
2.17. Diseño óptimo. Caso 2: comparación de valores óptimos empleando diferentes funciones objetivo. . . . .	78
3.1. Coeficientes globales de transferencia de energía [ $W/m^2K$ ]. . . . .	94
3.2. Datos experimentales (Dugas, 2006). . . . .	98
3.3. Características de la columna Dugas (2006). . . . .	98
3.4. Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): desvío entre los datos estimados y los datos experimentales. . . . .	103
3.5. Diseño óptimo: parámetros del modelo, características del empaque. . . . .	107
3.6. Diseño óptimo: Parámetros del modelo, condiciones de operación. . . . .	107
3.7. Diseño óptimo. Caso 1a: Agua de enfriamiento, porcentaje del requerimiento total. . . . .	115
3.8. Diseño óptimo. Caso 2: empleo de diferentes funciones objetivo, comparación de variables. . . . .	126
4.1. Coeficientes empleados para la determinación del capital de inversión total. . . . .	138
4.2. Coeficientes empleados para la determinación del costo total de operación y mantenimiento. . . . .	139
4.3. Equipos. Características constructivas. . . . .	141
4.4. Coeficientes para el cálculo del costo unitario de servicios auxiliares (Ulrich y Vasudevan, 2006). . . . .	144
4.5. Número de operadores por equipo (Henao, 2005). . . . .	145
4.6. Diseño óptimo: parámetros del modelo. . . . .	150

---

---

4.7. Diseño óptimo. Caso 1: costos de materias primas y servicios auxiliares, distribución porcentual. . . . .	156
4.8. Diseño óptimo. Caso 1: costos de adquisición de equipos, distribución porcentual. . . . .	160
4.9. Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de absorción. . .	165
4.10. Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de regeneración.	166
4.11. Diseño óptimo. Caso 1: área requerida en los equipos de intercambio de calor.	167
4.12. Diseño óptimo. Caso 1: trabajo de bombeo y compresión por tren de captura.	168
4.13. Diseño óptimo. Caso 1: comparación de los costos óptimos obtenidos con datos reportados en la bibliografía. . . . .	171
4.14. Diseño óptimo. Caso 2: distribución de costos de adquisición de equipos. . .	176
4.15. Diseño óptimo. Caso 2: tamaño de equipos, diferencia porcentual entre los distintos casos bajo análisis (2a y 2b). . . . .	177
4.16. Diseño óptimo. Caso 2: consumo de agua de enfriamiento. . . . .	177
5.1. Variables óptimas de diseño y operación. Sistema integrado con 90 % de eficiencia de captura. . . . .	207
5.2. Variables óptimas de diseño y operación. Sistema integrado con 90 % de eficiencia de captura (continuación de la Tabla 5.1). . . . .	208
B.1. Comparación de costos unitarios de adquisición de equipos a partir de diversas fuentes. . . . .	242
B.2. Diseño óptimo. Caso 1: distribución de costos de servicios auxiliares (200 kPa).	243
B.3. Diseño óptimo. Caso 1: distribución de costos de materias primas y servicios auxiliares (165 kPa). . . . .	243
B.4. Diseño óptimo. Caso 1: distribución de costos de materias primas y servicios auxiliares (130 kPa). . . . .	244
B.5. Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de absorción (165 kPa). . . . .	246

---

---

B.6. Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de absorción (130 kPa). . . . .	247
B.7. Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de regeneración (165 kPa). . . . .	248
B.8. Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de regeneración (130 kPa). . . . .	249
B.9. Diseño óptimo. Caso 1: área requerida en los equipos de intercambio de calor (165 kPa). . . . .	250
B.10. Diseño óptimo. Caso 1: área requerida en los equipos de intercambio de calor (130 kPa). . . . .	251
B.11. Diseño óptimo. Caso 1: trabajo de bombeo y compresión por tren de captura (165 kPa). . . . .	252
B.12. Diseño óptimo. Caso 1: trabajo de bombeo y compresión por tren de captura (130 kPa). . . . .	253

---

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Captura y almacenamiento de $CO_2$ . Generalidades

#### 1.1.1. Demanda energética versus cambio climático

A nivel mundial, las principales acciones que se están desarrollando en materia de política ambiental son el estudio de la diversificación de las fuentes de energía y la reducción de la dependencia de los combustibles fósiles, con el fin de hacer frente a las crecientes necesidades energéticas en forma sustentable con el medio ambiente. En este aspecto, la incorporación de energías renovables no hidráulicas (solar, eólica, geotérmica, bioenergía) en la matriz energética ha adquirido mayor relevancia en los últimos años. Sin embargo, se estima que en las próximas décadas, el carbón y el gas natural seguirán siendo, debido a su alta disponibilidad y a su economía de escala, los combustibles fundamentales tanto para la generación de energía eléctrica como para la generación de vapor de proceso. En particular, el consumo total de energía primaria en el año 2009 ha duplicado su valor respecto al año 1971, evidenciando claramente el incremento de la demanda energética mundial. A pesar del fuerte crecimiento de las energías renovables en la última década, datos estadísticos correspondientes al año 2009 revelan que solo el 16 % del consumo final de energía se generó mediante el uso de fuentes de energías renovables (hidráulicas y no hidráulicas), mientras que el 81 % se generó a partir de combustibles fósiles, y el 4 % mediante energía nuclear (IEA, 2011; REN21, 2011).

El uso de combustibles fósiles para la generación de energía es la causa principal de las emisiones de uno de los principales gases de efecto invernadero, el  $CO_2$ . De acuerdo a las estadísticas presentadas por la Agencia Internacional de Energía (*IEA*), el sector de producción de energía representa aproximadamente el 83 % de las emisiones totales de gases efecto invernadero provenientes de fuentes antropogénicas, contabilizando el aporte de la producción, transformación, manejo y consumo de todas las fuentes energéticas. De ese 83 %, el 92 % corresponde a  $CO_2$ , 7 % a  $CH_4$  y 1 % a  $N_2O$  (*IEA*, 2011). Considerando que las emisiones de  $CO_2$  producidas por centrales termoeléctricas representan el 78.25 % de las emisiones totales de  $CO_2$  a nivel mundial (*IPCC*, 2005), las acciones de mitigación deben indudablemente concentrarse en este sector, siendo el principal desafío estabilizar su concentración en la atmósfera y en consecuencia la temperatura global del planeta.

### **1.1.2. Tecnologías de captura de $CO_2$**

La captura y almacenamiento de  $CO_2$  (*CAC*) es ampliamente reconocida como una opción tecnológica viable para la mitigación de emisiones provenientes de los procesos industriales que constituyen importantes fuentes puntuales de emisión. Básicamente, el  $CO_2$  generado por la combustión de carbón, gas natural (combustibles fósiles primarios) o biomasa, es separado de la corriente gaseosa; luego la corriente concentrada en  $CO_2$  es comprimida a una presión adecuada para su transporte (líquido o fluido supercrítico) hasta su lugar de almacenamiento.

Los principales procesos para la captura de  $CO_2$  actualmente disponibles, los cuales se encuentran en distintas fases de desarrollo tecnológico son: absorción química, adsorción con cambio de presión (*PSA*) y temperatura (*TSA*), separación por membranas y criogenación, entre otros. Las opciones que se encuentran bajo desarrollo para la disposición final del  $CO_2$  son el almacenamiento geológico, el almacenamiento oceánico y la mineralización (*Olajire*, 2010; *Pires et al.*, 2011; *Wang et al.*, 2011).

Las opciones tecnológicas disponibles para la captura implican procesos basados en transformaciones físicas o químicas. En la absorción química, el  $CO_2$  reacciona con el solvente (aminas, óxido de calcio) que luego es regenerado, al mismo tiempo que el  $CO_2$

---

es liberado de la solución. En particular, la absorción química con aminas permite tratar corrientes con bajas concentraciones de  $CO_2$ , que es una característica típica de la corriente de gases exhaustos generada en las plantas de potencia basadas en la combustión de combustibles fósiles (3.2-4.2% de  $CO_2$  en plantas de generación que utilizan gas natural y 12-14% en plantas de generación que utilizan carbón). La principal desventaja asociada a esta tecnología es el alto consumo de energía requerido fundamentalmente en la etapa de regeneración del solvente.

La absorción química con óxidos alcalinos (óxido de calcio) se realiza mediante dos procesos básicos: la carbonatación en la que se produce la absorción por la reacción exotérmica entre  $CO_2$  y  $CaO$ , y la calcinación, en la que se liberan estos dos compuestos del  $CaCO_3$  formado en la etapa previa. Es una tecnología que requiere altas temperaturas de operación (973 - 1150 K) y utiliza aire enriquecido para la calcinación, características que dificultan su inmediata adaptación a plantas de generación en operación.

En la adsorción física, se utilizan materiales sólidos capaces de adsorber el  $CO_2$  tales como carbón activado, zeolitas, materiales mesoporosos, alúminas e hidrocalcitas. El proceso de adsorción se realiza generalmente a altas temperaturas, y la recuperación del adsorbente se efectúa mediante procesos de cambio de temperatura (*TSA*) o presión (*PSA*).

Las membranas se usan como medio de contacto entre las fases gaseosa y líquida y, mediante la aplicación de presión, se efectúa el transporte selectivo de  $CO_2$  a través de las mismas. Esta tecnología es aplicable a corrientes gaseosas concentradas de  $CO_2$  (alrededor de 20% en volumen). Aunque se requieren presiones de operación muy elevadas, es un sistema con un gran potencial de aplicación.

La destilación criogénica consiste en una serie de etapas de compresión, enfriamiento y expansión. Esta tecnología es apta para corrientes altamente concentradas en  $CO_2$  en las que el objetivo fundamental es la separación de impurezas.

En todos los sistemas mencionados, la eficiencia de separación depende de la presión parcial de  $CO_2$ . La absorción química con aminas es el único proceso aplicable para tratar corrientes gaseosas con bajas presiones parciales de  $CO_2$ , mientras que los procesos de separación con membranas, la criogenación, la adsorción física y la absorción química con

---

carbonato de potasio se prefieren para tratar corrientes gaseosas en las cuales la presión parcial de  $CO_2$  es elevada.

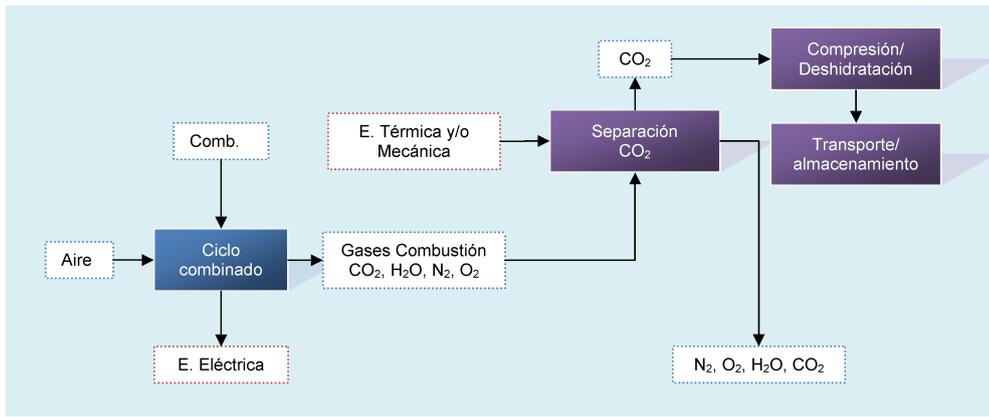
### 1.1.3. Captura de $CO_2$ en plantas de generación de energía

Dependiendo de la etapa del proceso de generación en la que se efectúe el tratamiento para la reducción de emisiones, se presentan tres opciones principales: post-combustión, pre-combustión y combustión con aire enriquecido y, al igual que las tecnologías de captura, se encuentran en diferentes etapas de desarrollo tecnológico y fases de demostración. La representación esquemática de dichos procesos se muestra en la Figura 1.1.

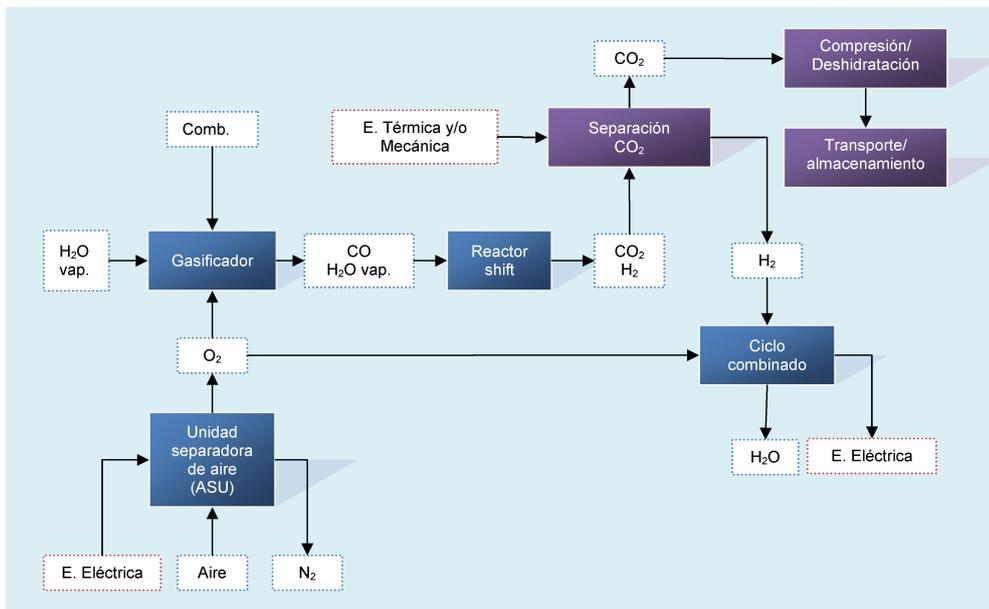
En la post-combustión (Figura 1.1a) se aplican técnicas de tratamiento a la corriente de gases exhaustos (humos) resultantes de la combustión, compuesta básicamente por nitrógeno, oxígeno, agua y dióxido de carbono. La ventaja principal reside en que esta tecnología puede acoplarse a la mayoría de las plantas de generación existentes sin modificaciones estructurales importantes, pues se incorpora al final de la línea de producción de energía. Entre los diferentes procesos de separación de  $CO_2$ , la absorción química utilizando monoetanolamina como solvente es la más prometedora, aun considerando la penalización energética asociada a la recuperación del solvente y la compresión del  $CO_2$  capturado.

En la Figura 1.1b se presenta un esquema del proceso de pre-combustión, el cual está basado en la descarbonización del combustible antes de la combustión mediante técnicas de gasificación del carbón o reformado del gas natural. Luego, el dióxido de carbono y el hidrógeno se separan mediante una técnica de tratamiento adecuada. Específicamente, la elevada presión parcial de  $CO_2$  en la mezcla  $H_2-CO_2$ , permite la separación del mismo por medio de absorción química, adsorción o utilizando membranas. Por otro lado, esta característica reduce el requerimiento energético en la etapa de compresión. Luego, la corriente enriquecida en  $H_2$  se mezcla con  $O_2$  proveniente de la unidad separadora de aire y se expande en una turbina de gas de hidrógeno, mientras que el  $CO_2$  se comprime para su transporte. En particular, los sistemas de generación de electricidad con ciclos combinados de gasificación integrada de carbón (*CCGI*) se encuentran actualmente en desarrollo.

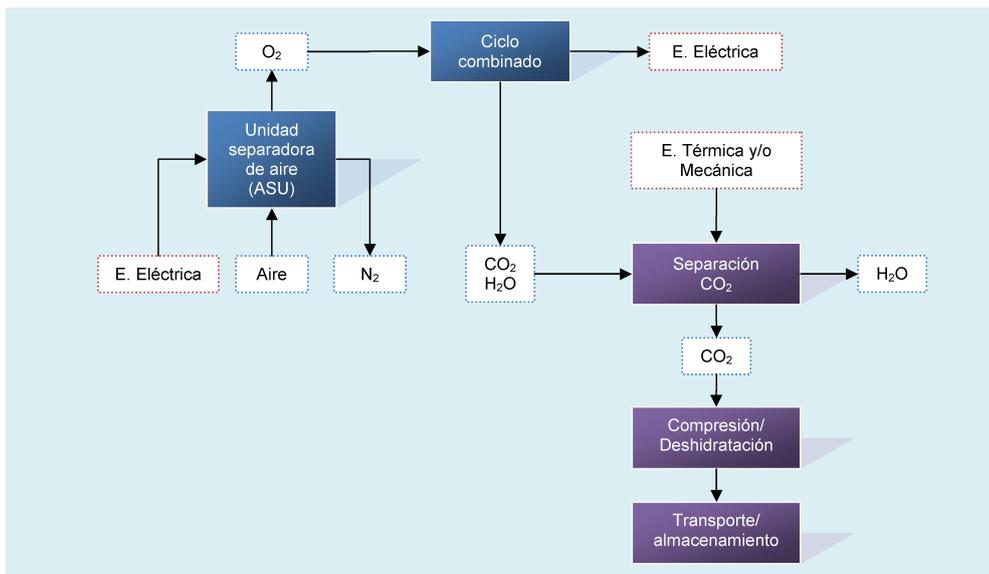
---



(a) Post-combustión



(b) Pre-combustión



(c) Combustión con aire enriquecido

Figura 1.1 – Opciones de captura de CO<sub>2</sub> en plantas de generación de energía. Esquemas.

En el proceso de combustión con aire enriquecido (Figura 1.1c) se utiliza oxígeno puro como comburente, produciendo humos compuestos principalmente por  $CO_2$  (aprox. 80 %  $v/v$ ) y  $H_2O$ . Luego, el vapor de agua se separa fácilmente por condensación y el  $CO_2$  se comprime para su transporte. Este proceso, al igual que la pre-combustión, requiere disposiciones especiales del proceso de combustión y la producción de  $O_2$  puro, que es un proceso muy caro y con un elevado requerimiento energético. Si bien constituye una tecnología altamente prometedora, su aplicación en grandes industrias es aún un nuevo concepto.

#### **1.1.4. Criterios de selección del proceso de captura de $CO_2$ en plantas de generación de energía**

Específicamente en el sector energético, la selección adecuada de un sistema de captura de  $CO_2$  depende, desde el punto de vista técnico, del tipo de combustible utilizado (sólido, líquido o gas) y de las condiciones del gas a ser tratado (concentración de  $CO_2$  y volumen de gas). También deben tenerse en cuenta, la calidad de la corriente concentrada de  $CO_2$  en vista a sus aplicaciones (transporte, almacenamiento, producto con valor agregado, etc.), el tamaño de la planta, la complejidad del sistema que afecta directamente su disponibilidad, la conveniencia de implementación en las plantas existentes, etc. Desde el punto de vista económico, se debe mencionar que el precio del combustible tiene una influencia significativa en el costo de mitigación, el cual representa una medida normalizada del costo de generación con respecto a la cantidad de dióxido capturada. En particular, Fisher et al. (2005) reportaron que el costo de la electricidad es 63.24 usd/MWh (2005) para un costo del combustible (carbón) de 25 usd/MWh y asciende a 95.52 usd/MWh (51 %) si el costo del carbón se incrementa en un 80 %. Para la misma variación del costo del combustible, el costo de mitigación asciende desde 44.89 usd/tn hasta 59.3 usd/tn (32.1 %). En este aspecto y de acuerdo a la “European Technology Platform for Zero Emission Fossil Fuel Power Plants (*ETP – ZET*)”, las decisiones sobre las configuraciones de las futuras plantas de captura dependerán principalmente de la elección del combustible (y su costo), y en segundo lugar tipo de proceso de captura a emplear.

---

Por otro lado, la absorción química con aminas es la tecnología con mayor desarrollo y aplicabilidad a corrientes gaseosas diluidas de  $CO_2$  (que son características de los gases de combustión exhaustos) en un horizonte de tiempo cercano. Sin embargo, la absorción química y posterior compresión de  $CO_2$  requieren altos consumos de energía térmica (vapor necesario para la regeneración del solvente) y electricidad (funcionamiento de compresores, bombas, sopladores), así como acoplar (integrar) un sistema de captura a una planta existente de generación de energía, lo cual implica la modificación estructural y operativa de esta última.

Ahora bien, si el requerimiento de energía térmica y/o mecánica es provisto por la planta de generación, su eficiencia disminuirá mientras que los costos operativos y de inversión se incrementarán. En este aspecto, si bien las tecnologías de captura son relativamente compatibles con las infraestructuras energéticas existentes, su investigación y desarrollo tienen como objetivos fundamentales la reducción de los costos de captura y la mejora de la eficiencia global del proceso (generación de electricidad + captura de  $CO_2$ ).

De esta manera se puede concluir que, acoplar el sistema de captura por absorción química al final de la línea de producción de energía (post-combustión) resulta ser la configuración más “atractiva” desde el punto de vista económico (en determinadas condiciones) y actualmente, es aplicable a las tecnologías más extendidas de generación de energía eléctrica a partir de combustibles fósiles, en particular a centrales térmicas de carbón y ciclos combinados de gas. Por este motivo y dada la importancia de la investigación y desarrollo en este campo, se ha seleccionado a dicho proceso para su estudio particular.

## 1.2. Absorción química con aminas

### 1.2.1. Descripción del proceso

La Figura 1.2 presenta un esquema del proceso de captura de  $CO_2$  mediante absorción química con aminas. El mismo está constituido por cuatro etapas fundamentales: el pre-tratamiento de los gases exhaustos, la absorción, la regeneración del solvente y la compresión. La torre de absorción [ABS] y la de regeneración del solvente [REG], son

---

los equipos principales. En general se utilizan torres empacadas para aumentar el área de contacto entre fases.

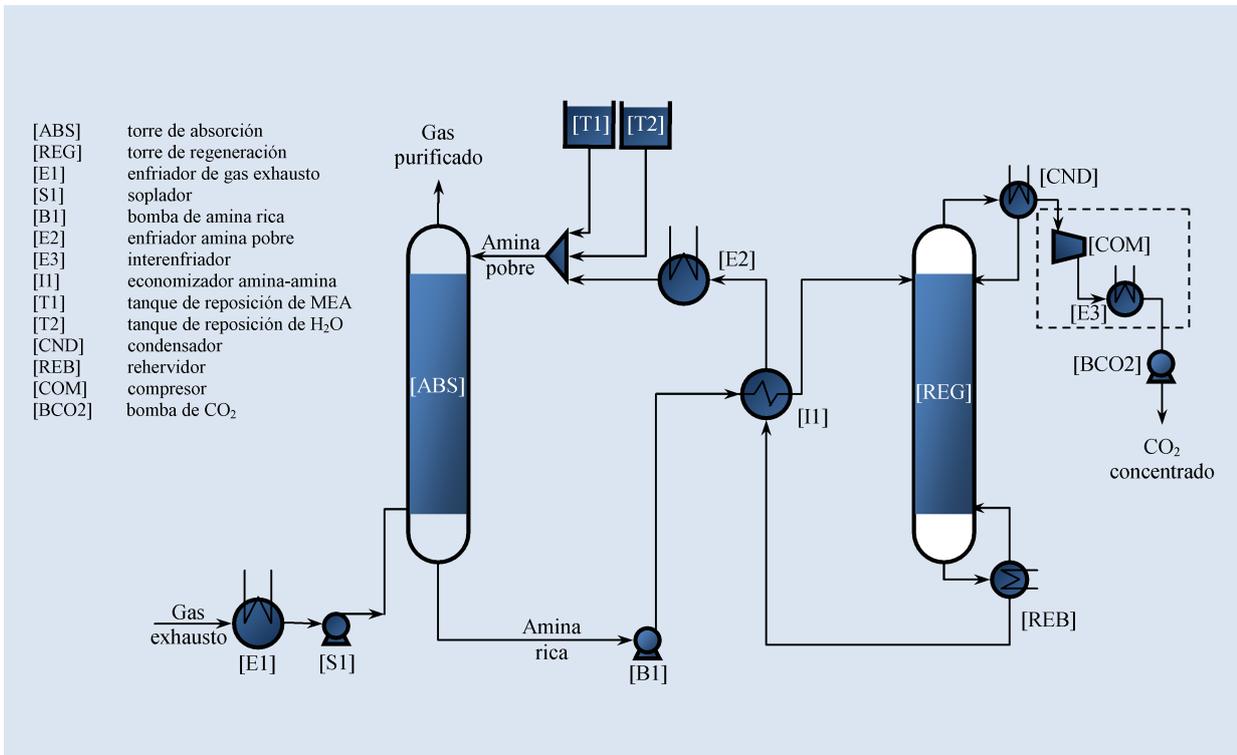


Figura 1.2 – Proceso de captura de  $CO_2$  mediante absorción química.

**Pre-tratamiento de los gases exhaustos.** La presencia de ciertas sustancias en la corriente gaseosa, tales como gases ácidos, oxígeno y cenizas, interfieren en la performance del proceso, por lo que necesariamente deben eliminarse antes de ingresar al sistema de captura. En particular:

- Algunos gases ácidos, como  $SO_2$  y  $NO_2$ , reaccionan con la monoetanolamina para formar sales estables al calor.
- El material particulado, especialmente las cenizas, favorecen la formación de espuma.
- La presencia de  $O_2$  incrementa la probabilidad de corrosión a la vez que favorece la degradación de la monoetanolamina.

Por otro lado, la temperatura de salida de los gases de combustión es elevada; considerando que el proceso de absorción se ve favorecido a niveles térmicos menores,

la temperatura de la corriente se reduce a valores comprendidos entre 313.15 y 323.15  $K$  en una torre de enfriamiento [E1]. Además, se debe incorporar al sistema un soplador [S1], que permita vencer la caída de presión en la columna absorbedora [ABS].

**Absorción.** La corriente gaseosa alimenta la columna de absorción [ABS] por el fondo, mientras que la solución de amina pobre ingresa por el tope de la misma. El  $CO_2$  contenido en la corriente de gases exhaustos, es absorbido químicamente por el solvente. Durante la absorción, el  $CO_2$  reacciona rápidamente para formar sales estables (carbamatos). La amina rica en  $CO_2$  se extrae por el fondo, mientras que la corriente gaseosa purificada se libera a la atmósfera.

**Recuperación del solvente.** En esta etapa, además de la columna de regeneración [REG], el rehervidor [REB] y el condensador [CND], se incluyen los intercambiadores de calor ([I1] y [E2]), necesarios para lograr la integración energética de la corriente fría (amina rica) con la corriente caliente (amina pobre) y un enfriamiento adicional de esta última. Específicamente, la corriente de amina rica que se extrae del fondo de la columna de absorción [ABS], se calienta en el intercambiador amina-amina [I1] para alimentar la columna regeneradora [REG] en donde, mediante la aplicación de energía térmica en el hervidor [REB], el  $CO_2$  es transferido nuevamente a la corriente gaseosa, compuesta principalmente por agua y  $CO_2$ . El vapor de  $H_2O$  que sale por el tope se condensa [CND] y se recircula a la columna regeneradora, mientras que la solución de amina pobre que sale del reboiler se enfría [I1, E2] para alimentar a la absorbedora en condiciones tales que se favorezca la eficiencia de absorción.

El aporte energético en el reboiler [REB] es fuertemente influenciado por las condiciones operativas, el tipo de amina y su concentración. Por ejemplo, mayores presiones en el reboiler disminuyen el aporte térmico necesario para la regeneración del solvente, mientras que se incrementa su velocidad de degradación. Por otro lado, la energía requerida se incrementa a medida que aumenta la recuperación deseada debido al necesario incremento de flujo de solvente. Además, cuanto más elevada sea

---

la carga de  $CO_2$  y/o la temperatura de entrada del solvente [ $T_{RH}$ ] que alimenta el stripper [REG], disminuye la cantidad de vapor necesaria para regenerar la amina (para una recuperación definida en este equipo).

**Compresión.** La corriente concentrada de  $CO_2$  que sale del condensador [CND], se somete a sucesivas etapas de compresión e inter-enfriamiento con el fin de llevarla hasta 14 MPa, que es la presión necesaria para su transporte por tuberías (Rao y Rubin, 2002).

### 1.2.2. Líneas de investigación actuales

El proceso de absorción química con aminas se ha implementado en diversas aplicaciones industriales, sin embargo las características de los gases de combustión de las plantas de generación que manejan combustibles fósiles (baja concentración de  $CO_2$ ; elevado contenido de  $O_2$  - aire en exceso - y altos volúmenes de gas a tratar), definen un desafío importante. La implementación a gran escala requiere mayores desarrollos, tanto desde el punto de vista de diseño y construcción como en la operación de la planta, con el fin de disminuir la penalidad energética, mejorar la eficiencia global del proceso y cumplir con las regulaciones medioambientales. Durante los últimos años, se han realizado diversas actividades de investigación relacionadas a la captura de dióxido de carbono, abarcando diferentes áreas fuertemente interrelacionadas, que incluyen tanto estudios en laboratorio y planta piloto como el desarrollo e implementación de modelos matemáticos en computadoras. A continuación se describen algunos de los trabajos desarrollados, referidos en particular a la selección del solvente, el trabajo experimental y el empleo de modelos matemáticos para la simulación y optimización del proceso en estudio.

#### Selección del solvente

La selección del solvente depende de varios criterios. Algunos de ellos son: su capacidad cíclica, la energía requerida para su recuperación, la velocidad de reacción y consecuentemente de transferencia de masa, el peso molecular y sus propiedades derivadas (transporte), corrosión, presión de vapor (volatilidad), propiedades tensioactivas,

---

estabilidad química, toxicidad, solubilidad en agua, coste y disponibilidad.

Actualmente se está trabajando exhaustivamente en el desarrollo de nuevos solventes y el uso de otros tipos de aminas y sus mezclas. Algunos de los trabajos publicados corresponden a Bedell (2011); Bello y Idem (2006); Kim y Svendsen (2011); Lepaumier et al. (2010, 2009a,b,c); Pellegrini et al. (2010); Puxty et al. (2009b). En el proceso de absorción química se emplean usualmente diferentes tipos de aminas (primarias, secundarias, terciarias y aminas formuladas) y sus mezclas. En particular, la monoetanolamina (*MEA*) es la más utilizada como solvente (IPCC, 2005; Wang et al., 2011).

Esta amina (*MEA*) se caracteriza por su alta capacidad de absorción, bajo peso molecular y alta alcalinidad, mientras que las desventajas en su utilización, están fundamentalmente relacionadas a los siguientes aspectos:

- La estabilidad del carbamato producido al reaccionar reversiblemente con el ácido, conduce al consumo de enormes cantidades de energía para su recuperación.
  - Su elevada presión de vapor respecto a otras alcanolaminas, provoca grandes pérdidas por evaporación. Sin embargo, este inconveniente puede reducirse mediante la incorporación de secciones de lavado de gases en las unidades de absorción.
  - Su degradación es un aspecto sumamente importante debido a su impacto medioambiental y, al mismo tiempo, su impacto en la economía del proceso. En particular, la reposición del solvente incrementa el costo operativo, mientras que sus propiedades corrosivas exigen aumentar los factores de seguridad para el dimensionamiento de equipos, lo que implica un mayor costo de inversión de capital.
  - Tendencia a la formación de espuma en presencia de impurezas. La formación de espuma en la torre de absorción está acompañada de un incremento repentino de la caída de presión y arrastre del solvente, entre otros fenómenos. El uso de agentes anti-espumantes corrige este efecto indeseable; sin embargo, se trata de una solución temporal, ya que es indispensable el pre-tratamiento de los gases de combustión con el fin de disminuir el contenido de impurezas.
-

- Su fuerte acción corrosiva en relación con otros tipos de aminas. Esta desventaja podría salvarse con el uso de inhibidores de corrosión.

En particular, en las centrales térmicas con ciclos combinados de gas, que producen altos volúmenes de gas con bajas presiones parciales de  $CO_2$  y grandes cantidades de  $O_2$ , las aminas primarias como la MEA son la mejor opción desde el punto de vista de la capacidad de absorción ya que:

- Si bien son altamente corrosivas en presencia de oxígeno y otras impurezas, esta característica se puede reducir mediante el empleo de inhibidores.
- Las soluciones de MEA se encuentran ampliamente difundidas en el mercado.
- El tamaño de los equipos respecto a otras aminas, es comparativamente menor debido a su alta reactividad.
- En su mayoría, las aminas formuladas para bajas presiones parciales de  $CO_2$  tienen como componente base a la MEA.

En lo que respecta a la degradación de amina, Lepaumier et al. (2011); Moser et al. (2011); Sexton y Rochelle (2009) y Zhou et al. (2012), entre otros, analizaron diferentes aspectos de este fenómeno en el proceso de absorción/desorción de  $CO_2$ . Específicamente, Lepaumier et al. (2011) y Moser et al. (2011), analizaron la estabilidad del solvente y la formación de productos de degradación en condiciones reales de operación. La degradación del solvente se debe a un proceso oxidativo en las condiciones operativas de la absorbedora y a la degradación térmica (polimerización del carbamato) en las condiciones operativas del stripper. Lepaumier et al. (2011), de acuerdo a los resultados obtenidos, sugirieron que la degradación oxidativa predominó sobre la degradación térmica. Por otro lado, Moser et al. (2011) describieron la dependencia de la degradación de monoetanolamina y la formación de ácidos orgánicos con el tiempo de operación. Observaron una tendencia creciente de la degradación con el tiempo; sin embargo, no les fue posible discernir si este aumento es causado por un proceso de degradación discontinua desencadenado por un evento único, o si se trata de un mecanismo de degradación autoacelerado que se hace más lento con

---

el tiempo debido a efectos de saturación y equilibrio. Por otro lado, concluyeron que ni las discontinuidades en el régimen operativo ni los cambios en las propiedades del flujo, actuaron como disparadores del incremento de la velocidad de degradación observada. Solo en un corto período, el aumento de la concentración de polvo en los gases de combustión y pequeños cambios en la estrategia operativa del pre-lavador provocaron un incremento en la velocidad de degradación. Zhou et al. (2012) concluyeron de sus resultados experimentales que la presencia de impurezas ácidas ( $SO_2$  y  $NO_x$ ) en los gases de combustión no mostraron efectos considerables en la velocidad de degradación térmica de monoetanolamina. Finalmente, Sexton y Rochelle (2009) experimentaron con diferentes inhibidores que redujeron efectivamente la degradación del solvente en estudio (MEA).

Aboudheir et al. (2003); Aronu et al. (2011); Austgen et al. (1989); Faramarzi et al. (2009); Liu et al. (1999), entre otros, analizaron aspectos como la influencia de la temperatura en la absorción, la distribución de las concentraciones de las especies (tanto iónicas como moleculares) en la fase líquida, la capacidad de absorción y los mecanismos de reacción. Los resultados obtenidos en este área, no solo mejoran el entendimiento del comportamiento de la solución asociado a la absorción y a la regeneración del solvente, sino que también proveen la información necesaria para desarrollar modelos capaces de describir el equilibrio líquido vapor, siendo este un paso fundamental para la simulación y optimización de procesos de captura de  $CO_2$  usando aminas como solvente. En particular, la presencia de electrolitos en la solución acuosa de aminas, implica un comportamiento no ideal de la mezcla que puede ser descrito a partir de coeficientes de actividad. Aronu et al. (2011) y Faramarzi et al. (2009), entre otros, aplicaron el modelo UNIQUAC para determinar los coeficientes de actividad de las especies, necesarios para representar el comportamiento termodinámico del sistema  $CO_2$ -MEA- $H_2O$ . Por su parte, Aboudheir et al. (2003), Liu et al. (1999), Austgen et al. (1989), etc., utilizaron el modelo NRTL (*non - random - two - liquid - model*). Si bien en cada caso se propusieron algunas modificaciones y/o mejoras en los modelos desarrollados, los parámetros esenciales de los mismos se obtuvieron por regresión (ajuste) a partir de datos experimentales, concluyendo en todos los casos, que la representación del equilibrio líquido vapor (solubilidad y

---

especiación) del sistema en estudio fue satisfactoria.

A medida que se evoluciona en el desarrollo de nuevos solventes y se pretende realizar la optimización del proceso, es necesario contar con correlaciones apropiadas válidas en un amplio rango de temperaturas, composiciones y presiones. En este aspecto, el trabajo experimental ha evolucionado consecuentemente. Por ejemplo, los trabajos de Austgen et al. (1989) y Liu et al. (1999) corresponden a concentraciones de amina menores o iguales a 30 % p/p de MEA y temperaturas de 298.15, 353.15 y 393.15 K, mientras que el trabajo de Aronu et al. (2011) presenta mediciones experimentales para soluciones 15, 30, 45 y 60 % p/p de MEA, en un amplio rango de composición de  $CO_2$  (expresado en mol  $CO_2$ /mol MEA) y temperatura (313.15 - 393.15 K). Al estudio del equilibrio líquido - vapor, Aboudheir et al. (2003) y Kucka et al. (2002, 2003a,b), incorporaron otros aspectos, tales como el análisis de diferentes mecanismos y órdenes de reacción.

### **Herramientas para la modelización. Uso de simuladores de procesos frente a programación matemática**

La aplicación de técnicas de programación matemática así como el uso de sistemas avanzados de simulación y optimización de procesos han surgido como importantes herramientas para estudiar y analizar en detalle cualquier proceso químico o industrial. Su aplicación ha recibido una importante atención durante los últimos años, debido a la valiosa información que proveen en el momento de determinar tanto la síntesis y el diseño óptimo de procesos complejos, como su factibilidad. De hecho, la modificación de las variables operativas y el planteo de distintas alternativas de proceso se pueden evaluar en corto tiempo sin la necesidad de experimentación a escala piloto, la cual tiene generalmente un costo elevado.

Según se desprende de la búsqueda bibliográfica, se publicaron numerosos estudios referidos a la simulación y optimización del proceso de absorción química de  $CO_2$  empleando diferentes herramientas para el análisis del sistema en estudio. Muchos autores emplearon simuladores de procesos tales como: Aspen Plus (Abu-Zahra et al., 2007a,b; Alie et al., 2005; Duan et al., 2012), Hysys (Khakdaman et al., 2008; Rodríguez et al., 2011), Aspen

---

Hysys (Nuchitprasittichai y Cremaschi, 2011; Øi, 2007), gPROMS (Kvamsdal et al., 2009; Lawal et al., 2010, 2009a,b). Otros autores propusieron y desarrollaron sus propios algoritmos de simulación (Aroonwilas y Veawab, 2007; Gáspár y Cormos, 2011; Rahimpour y Kashkooli, 2004). También se encontraron publicaciones en las que se combinan diferentes herramientas. Por ejemplo, Freguia y Rochelle (2003) integraron una subrutina programada en Fortran con Aspen Plus para modelar rigurosamente la absorción de  $CO_2$  en MEA. Por su parte, Ba-Shammakh et al. (2007) mediante programación matemática, desarrollaron un modelo MINLP (Mix-Integer Nonlinear Programming) para la planificación de la producción de un proceso de refinería con el objeto de lograr el máximo beneficio operativo, al mismo tiempo que las emisiones se reducen a un valor definido mediante el uso de diferentes opciones de mitigación, por ejemplo: instalación de un proceso de post-combustión basado en aminas, o la utilización de diferentes tipos de combustibles, entre otros.

Mediante el empleo de simuladores (Aspen Plus, Aspen Hysys, etc.), la optimización del proceso se realiza mediante simulación paramétrica. De esta forma, el modelo se resuelve repetidas veces empleando diferentes valores de una o más variables operativas y, mediante inspección y comparación, se determinan los valores óptimos. Estas herramientas permiten al usuario predecir la performance de un sistema en un corto tiempo sin la necesidad de definir un modelo matemático complejo. Sin embargo, la optimización paramétrica demanda un elevado número de simulaciones. Por otra parte, debido a la arquitectura propia de los simuladores, el costo computacional se incrementa en función de la cantidad de variables, los ciclos contemplados en el diagrama de flujo del proceso y las características de las restricciones que constituyen el modelo, las cuales son, en su gran mayoría, altamente no lineales y no convexas. En contraste, entornos de programación matemática tales como General Algebraic Modeling System (GAMS), general PROcess Modeling Systems (gPROMS), A Mathematical Programming Language (AMPL), entre otros, tienen capacidades de optimización superiores a las de los simuladores, especialmente cuando el problema es grande, combinatorio y altamente no lineal, haciendo factible afrontar tareas de síntesis y diseño óptimos. Otra ventaja reside en que es posible, mediante la optimización simultánea, considerar las relaciones de compromiso existentes entre todas

---

las variables operativas y de diseño. El acceso directo a los valores de todas las variables definidas en el modelo, así como al conjunto de ecuaciones y/o hipótesis que lo definen, es también una virtud a la hora de emplear las herramientas mencionadas.

La mayoría de los artículos consultados están centrados en la optimización paramétrica de las variables de proceso. A la fecha, pocos artículos presentaron modelos matemáticos basados en programación matemática para estudiar y analizar procesos de captura de  $CO_2$ .

### ***Absorción química. Modelos y su rigurosidad***

Si bien el proceso de absorción química de dióxido de carbono usando aminas es un fenómeno cinéticamente controlado, comúnmente se emplean dos tipos de enfoques para representar matemáticamente el proceso de transferencia de materia en unidades de absorción/ desorción: 1) Modelos de etapas en equilibrio y 2) modelos basados en la resistencia a la transferencia de materia (en base a la teoría de la doble capa, teoría de la renovación de la superficie o teoría de la penetración). El primero, más simple, asume etapas teóricas en equilibrio en las que la eficiencia de cada etapa se tiene en cuenta mediante un factor de corrección de eficiencia, ya que el equilibrio rara vez se alcanza. En este caso, se puede asumir que todas las reacciones son instantáneas o bien se puede considerar la cinética de reacción en la fase líquida. El segundo tipo de enfoque resulta más apropiado, sin embargo aquí también se presentan hipótesis particulares que permiten proponer modelos con diferentes niveles de rigurosidad. Específicamente, en base a la teoría de la doble capa se pueden plantear los siguientes casos:

- Fenómeno de resistencia a la transferencia de materia con reacciones instantáneas en la fase líquida. Esta aproximación es adecuada únicamente en el caso que la velocidad de reacción entre el solvente y el dióxido de carbono sea muy rápida. Algunos autores, como Ziaii et al. (2009) y Freguia y Rochelle (2003), asumen que el stripper puede modelarse de esta manera debido a las elevadas temperaturas de operación en dicho equipo.
  - Fenómeno de resistencia a la transferencia de materia con reacciones instantáneas en la fase líquida considerando la influencia de la reacción química en la transferencia de masa (reacciones cinéticamente controladas en la película) mediante el “factor de
-

Enhancement (E)”. En la literatura se encuentran expresiones matemáticas de este factor considerando diferentes tipos, órdenes y mecanismos de reacción.

- Fenómeno de resistencia a la transferencia de materia con reacciones instantáneas en la fase líquida y reacciones cinéticamente controladas en la película. Una de las metodologías propone realizar la discretización de la película e incorporar términos de velocidad de reacción en los balances de materia y energía para cada elemento del film. Es también modelado el efecto de los electrolitos en el comportamiento de la solución.

El modelado de procesos rigurosos (Rate-based) está recibiendo especial atención en los últimos años, y está ganando cada vez más aceptación frente al enfoque tradicional de modelado de etapas en equilibrio (Taylor et al., 2003). Yokoyama (2012), basado en un modelo de etapas en equilibrio, examinó la influencia de la velocidad de suministro de vapor y la velocidad de circulación del solvente en el calor de regeneración. Concluyó que concentrarse solo en el calor de reacción, que es una propiedad inherente del solvente, no es suficiente para minimizar el calor requerido para la regeneración de la amina, pues tanto el calor sensible como el calor de vaporización son fuertemente influenciados por las variables operativas, de manera tal que se deben tener en cuenta a la hora de disminuir la demanda térmica en el rehervidor. Oexmann y Kather (2010) publicaron conclusiones similares en base a un modelo riguroso implementado en Aspen Plus. Lawal et al. (2009b) y Zhang et al. (2009) compararon un modelo de equilibrio frente a un modelo riguroso (con reacciones en equilibrio) de la columna de absorción, concluyendo que los resultados de este último se ajustaron mejor a los datos experimentales reportados por Dugas (2006). Zhang et al. (2009) concluyeron además que el modelo riguroso, implementado en Aspen Plus, posee excelentes capacidades predictivas y resulta muy útil para el diseño de plantas de captura de  $CO_2$ . Freguia y Rochelle (2003) modelaron ambas columnas basados en el fenómeno de transferencia de materia; la unidad de absorción se representó de acuerdo al modelo más riguroso mientras que la columna de regeneración se representó según el modelo más simple.

Teniendo en cuenta que en el proceso de captura mediante post-combustión, la corriente

---

gaseosa a tratar se encuentra al final de la línea de producción de energía, es posible estudiarlo en forma independiente del sistema de generación asumiendo las condiciones de la corriente gaseosa como parámetros de entrada (temperatura, composición, flujo y presión), como es el caso de los trabajos citados anteriormente, entre otros. Aun así, no se debe perder de vista el hecho que el exceso de aire en la planta de generación y el tipo de combustible influyen fuertemente en el volumen y composición de los gases a tratar en la planta de captura, y por lo tanto en el óptimo del sistema en su conjunto.

En particular, Abu-Zahra et al. (2007a) con el fin de encontrar las condiciones operativas óptimas del proceso de captura de  $CO_2$ , lo simularon en Aspen Plus y, mediante un estudio paramétrico de las variables más importantes, obtuvieron un valor óptimo de recuperación para el cual el requerimiento energético fue mínimo. Esta condición óptima se seleccionó para realizar luego un análisis tecno-económico, cuyos resultados se publicaron en Abu-Zahra et al. (2007b).

Por otra parte, diferentes autores desarrollaron e implementaron modelos dinámicos con el fin de controlar el proceso, analizar la puesta en marcha y diagnosticar fallas. Gáspár y Cormos (2011) presentaron un modelo matemático riguroso de la planta de captura. Dicho modelo, implementado en Matlab-Simulink, permitió el análisis del comportamiento dinámico de las columnas durante la operación del sistema. La comparación de los resultados del modelo con los datos experimentales reportados por Tobiesen et al. (2008) fue satisfactoria. Lawal et al. (2010, 2009a,b) implementaron en gPROMS (Process Systems Enterprise Ltd.) modelos dinámicos rigurosos de la columna de absorción, del stripper y del sistema de captura en su conjunto, respectivamente. Desarrollando una interfaz Aspen Plus - gPROMS, realizaron la estimación de las propiedades de las corrientes y el equilibrio líquido vapor. Además, analizaron la respuesta del sistema operando a carga parcial frente a diferentes perturbaciones (variaciones en la carga de  $CO_2$ , flujo de gas, flujo de amina, concentración de dióxido de carbono en la corriente gaseosa, etc).

El estudio de la integración de plantas de potencia (convencionales y combinadas) y tecnologías de captura de  $CO_2$  es esencial si se desea reducir las penalidades energéticas existentes. Algunos autores analizaron la influencia en la performance del proceso cuando

---

se incorpora el sistema de captura a la planta de generación (Botero et al., 2009; Cifre et al., 2009; Khalilpour y Abbas, 2011; Liang et al., 2011; Möller et al., 2007; Pfaff et al., 2010; Popa et al., 2011; Romeo et al., 2008a).

Botero et al. (2009) rediseñaron un ciclo combinado de gas natural con el objeto de incluir la recirculación de gases exhaustos y la integración del rehervidor al sistema de recuperación de calor (*HRSG*). Khalilpour y Abbas (2011) mostraron que la penalidad debida al acoplamiento de un sistema de captura al final de la línea de producción de una planta de generación, se puede reducir mediante la optimización de la red de intercambio calórico. Romeo et al. (2008a) realizaron un estudio tecno-económico de diferentes opciones de configuración que permitan cubrir los requerimientos energéticos cuando una planta de aminas se integra a una planta de potencia de carbón pulverizado. Los autores concluyeron que la configuración más conveniente respecto a la pérdida de eficiencia del sistema de generación, consiste en extraer vapor del ciclo de vapor y energía eléctrica de la turbina de gas. Pfaff et al. (2010) sugirieron aprovechar parte del calor disponible en el vapor de calefacción para precalentar el condensado y el aire de combustión, considerando que el nivel térmico del vapor extraído de la turbina es superior al requerido en el hervidor. Cada alternativa implica diferentes cambios tecnológicos para su implementación, aunque en última instancia, el beneficio económico será el que determine el desarrollo en las plantas disponibles comercialmente. Popa et al. (2011) consideraron el planteo de dos escenarios: 1) suministrar el vapor de la planta de generación (*CCGT*) y 2) suministrar el vapor mediante hervidores auxiliares y tomar la energía eléctrica de la red. Los autores concluyeron que la segunda opción requiere menos cambios estructurales en la planta principal; sin embargo al tener que tratar mayores caudales de gas (debido a la presencia de quemadores auxiliares), el tamaño de las columnas es mayor. Liang et al. (2011) implementaron en Aspen Plus el modelo de un ciclo de vapor de agua de una planta de generación integrado al sistema de captura y compresión. Analizaron el desempeño de un sistema de captura que opera con dos niveles de presión en el stripper, variando la eficiencia de captura y las ubicaciones de la turbina en las que es extraído el vapor (0.97 MPa, 0.29 MPa y 0.14 MPa), observando que la utilización de dos niveles de presión en la columna

---

regeneradora, disminuye las penalidades respecto a un sistema con un nivel de presión. Mediante optimización paramétrica encontraron que eficiencias de captura entre 60 y 90 % reducen la penalidad energética, aun considerando que se opere a carga parcial. En este caso, la penalidad es mayor que si se operase a carga total. También mostraron que la eficiencia de la planta principal disminuye linealmente con el incremento de la eficiencia de captura.

Además del estudio de las condiciones operativas que permitan maximizar la eficiencia de captura con un consumo energético mínimo, el proceso de post-combustión se debe evaluar desde un punto de vista tecno-económico. El trabajo equivalente y el costo de mitigación son los principales parámetros reportados en la literatura para describir las consecuencias económicas de acoplar el sistema de tratamiento de gases exhaustos al proceso de generación, considerando al mismo tiempo el efecto de las pérdidas de energía asociadas a la captura y compresión de  $CO_2$ . Diferentes autores analizaron el impacto de las condiciones operativas y las variables de diseño en el costo de captura con el objetivo de maximizar el beneficio, considerando el sistema de captura como una unidad independiente (Abu-Zahra et al., 2007b; Karimi et al., 2011a; Nuchitprasittichai y Cremaschi, 2011; Panahi y Skogestad, 2011; Rao y Rubin, 2002, 2006; Rodríguez et al., 2011; Ziaii et al., 2011) ó el sistema de captura acoplado a una planta de generación de energía (Oexmann et al., 2008; Peeters et al., 2007; Romeo et al., 2008a).

Hasta el presente, la integración de ambos sistemas se ha estudiado empleando técnicas de simulación en donde la configuración a nivel de equipos del sistema (equipos y sus conexiones) se asume conocida. En lo que respecta a los tipos de modelos y su rigurosidad, se han utilizado diferentes estrategias para aplicar el modelado y optimización de la integración de plantas de potencia con tecnologías de tratamiento de gases. A continuación se listan algunos ejemplos:

- Cohen et al. (2011) desarrollaron e implementaron en GAMS un modelo MILP (Mix-Integer Linear Programming) para un sistema de captura, para luego optimizar sus indicadores económicos con el fin de analizar la performance de la planta frente a las variaciones del precio de la electricidad.
-

- Möller et al. (2007) integraron el sistema de producción de vapor con la etapa de regeneración del solvente en un ciclo combinado de gas natural, usando un modelo riguroso para representar la turbina de gas, correlaciones simplificadas para el rehervidor, relaciones tradicionales para los cálculos de la turbina de vapor y el método HEI (Heat-Exchanger-Institutes-method) para el condensador. El vapor es extraído tanto de la turbina de vapor como del HRSG.
- Pfaff et al. (2010) modelaron las unidades de captura proponiendo modelos del tipo “caja negra”, determinando los valores de la interfase a partir modelos detallados construidos en diferentes simuladores comerciales.
- Bernier et al. (2010, 2012) presentaron e implementaron en Aspen un modelo de captura integrado a un ciclo combinado de gas natural. Los autores propusieron un modelo simplificado para la turbina de gas y un modelo riguroso para los trenes de captura. Aplicando optimización multi-objetivo obtuvieron dos conjuntos de soluciones óptimas (curvas de Pareto), con y sin análisis de ciclo de vida, concluyendo que dicha estrategia permitiría mejorar la evaluación económica de las tecnologías de reducción de emisiones.

### 1.3. Estructura de la tesis

La presente tesis consiste en el modelado, simulación y optimización del proceso generación+captura, constituido por una planta de generación (ciclo combinado de gas natural) y por el proceso de captura de  $CO_2$  (absorción química utilizando aminas), explotando los beneficios de la aplicación de técnicas de programación matemática. Precisamente se propone el desarrollo de un modelo matemático orientado a ecuaciones, del tipo NLP, que permita abordar el diseño óptimo del proceso mencionado. Los equipos correspondientes a la planta de captura (columnas de absorción/ desorción, intercambiadores, enfriadores) y las propiedades fisico-químicas de cada corriente, se modelan en forma detallada y rigurosa. Por otra parte, el ciclo combinado de gas natural considera un arreglo multi-eje en la configuración de la planta, post-combustión

---

y regeneración en la turbina de gas, múltiples niveles de presión y secciones de intercambio en paralelo en la caldera de recuperación. Al igual que en el sistema de captura, se consideran balances de materia y energía, predicción de propiedades físico-químicas, y ecuaciones de diseño, que en conjunto permiten determinar las características de los equipos necesarios para cumplir con la demanda externa fijada.

Como herramienta de modelado e implementación de los distintos modelos matemáticos, se utiliza el software General Algebraic Modeling System - GAMS (Rosenthal, 2008), seleccionando el/los algoritmo/s de optimización apropiados para la resolución de los diferentes casos de estudio. Tanto el modelo desarrollado, el algoritmo y la estrategia de solución resultan ser robustos y flexibles, ya que el modelo siempre converge cuando se varían sus parámetros. Ciertamente, la convergencia del modelo está garantizada cuando el usuario varía un único parámetro por vez o varios parámetros al mismo tiempo.

Se presentan resultados mediante diferentes casos de estudio con el fin de analizar el diseño y la operación de una planta de absorción química de  $CO_2$  acoplada a una planta de generación de energía.

A continuación, se describe en forma breve la estructura general de esta tesis:

En los capítulos 2 (Proceso de absorción de  $CO_2$  en solución acuosa de monoetanolamina) y 3 (Proceso de regeneración del solvente, desorción y compresión de  $CO_2$ ) se presentan los modelos matemáticos detallados correspondientes a las etapas de absorción y regeneración del solvente, respectivamente. En la etapa de regeneración de amina se incluyen la columna de desorción y los equipos auxiliares necesarios para el acondicionamiento de las corrientes: enfriadores, condensadores, compresores e intercambiadores de calor. En primer lugar, los resultados obtenidos por cada uno de los modelos presentados en cada capítulo se verifican por comparación de los valores obtenidos con datos experimentales reportados en la bibliografía. Luego, se resuelven y discuten diferentes problemas de optimización. Ciertamente, se analizan dos casos de estudio basados en las siguientes funciones objetivo: 1) maximizar la cantidad de  $CO_2$  capturada por unidad de volumen del empaque y 2) minimizar la cantidad de energía requerida para la recuperación del solvente por unidad de masa de  $CO_2$  capturado.

---

En estos capítulos se varían paramétricamente diferentes variables operativas. En particular, en la columna de absorción se varía el caudal y la composición de entrada de solvente a la absorbidora (amina pobre), expresada como la relación entre la cantidad total de  $CO_2$  y la cantidad total de  $MEA$ , mientras que en la columna de desorción se varía la composición y temperatura de amina rica que ingresa por el tope de la columna y la presión operativa en el rehervidor.

Además de obtener un conjunto de soluciones óptimas en un amplio rango de condiciones operativas, el estudio de los procesos individuales permite desarrollar una estrategia de inicialización para el proceso completo, de manera tal de asegurar su convergencia.

Resultados parciales relacionados al capítulo 2 (Proceso de absorción de  $CO_2$  en solución acuosa de monoetanolamina) se presentaron en congresos y se publicaron revistas, según el siguiente detalle:

- Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2009. Mathematical model of carbon dioxide absorption into mixed aqueous solutions. *Computer Aided Chemical Engineering* 27, 1113-1118. 10th International Symposium on Process System Engineering (PSE 2009).
  - Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2009. Absorción química de  $CO_2$ : modelo matemático del equilibrio L-V para el sistema reaccionante  $MEA-CO_2-H_2O$ . II Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial (II MACI 2009), 14-16 de diciembre de 2009, Rosario, Argentina.
  - Sergio Mussati, Patricia Mores, Nicolás Scenna, 2010. Equilibrium stage mathematical model for the optimization of chemical absorption of carbon dioxide into monoethanolamine (MEA) aqueous solution. 2nd International Conference on Engineering Optimization (EngOpt 2010), 6-9 Septiembre de 2010. Lisbon, Portugal.
  - Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2012. A rate based model of a packed column for  $CO_2$  absorption using aqueous monoethanolamine solution. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 94, 21-36.
-

Por su parte, los artículos y presentaciones relacionados al capítulo 3 (Proceso de regeneración del solvente, desorción y compresión de  $CO_2$ ) se listan a continuación:

- Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2012.  $CO_2$  capture using MEA aqueous solution: Modeling and optimization of the solvent regeneration and  $CO_2$  desorption process. *Energy* 45, 1042-1058.
- Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2011. Optimization of a stripper unit for the desorption of MEA from (MEA- $H_2O$ - $CO_2$ ) system. *Mecánica Computacional*, XXX, 2089-2101. XIX Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones (ENIEF 2011), 1-4 de Noviembre de 2011, Rosario, Argentina.

En el capítulo 4 (Proceso de captura de  $CO_2$  mediante absorción química con MEA), se modela el sistema completo de absorción-desorción en forma global (ya no como unidades independientes), incorporando además, expresiones para la estimación del costo total del proceso, incluyendo costos operativos y de inversión. Aquí, en forma similar a los capítulos anteriores, la verificación del modelo resultante se lleva a cabo comparando los componentes económicos obtenidos (y algunas variables de diseño y operación) con resultados reportados en la bibliografía. Luego, se definen dos problemas de optimización del proceso considerando las siguientes funciones objetivo: 1) minimizar el trabajo equivalente por unidad de masa de  $CO_2$  capturado evaluando el costo resultante, y 2) minimizar el costo anual total definiendo diferentes niveles de recuperación.

.

Los resultados alcanzados en este capítulo dieron lugar a las siguientes publicaciones:

- Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2010. Optimization of  $CO_2$  capture process using an aqueous MEA solution. *The International Conference on Continuous Optimization (ICCOPT 2010)* , 26-29 Julio de 2010, Santiago de Chile, Chile.
  - Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2011. Post-combustion  $CO_2$  capture process: Equilibrium stage mathematical model of the chemical absorption of  $CO_2$  into monoethanolamine (MEA) aqueous solution. *Chemical Engineering Research and Design*, 89, 1587-1599.
-

- Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2011. Overall efficiency analysis of the post-combustion  $CO_2$  capture using aqueous solution of amines. Chemical Engineering Series -  $CO_2$  capture, Capítulo 2, 29-52. Science Network - Online Open Access Publisher, Canadá.
- Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2012.  $CO_2$  capture in power plants: Minimization of the investment and operating cost of the post-combustion process using MEA aqueous solution. International Journal of Greenhouse Gas Control, 10, 148-163.

En el capítulo 5 (Proceso de generación de energía: NGCC+Captura y compresión de  $CO_2$ ) se presenta y se discute el sistema de captura acoplado a un ciclo combinado de gas natural. El estudio del proceso se realiza tanto desde el punto de vista termodinámico como económico. Las variables operativas y de diseño se optimizaron simultáneamente, dando como resultado un conjunto de indicadores económicos óptimos (costo anual total, costo de la electricidad y costo de mitigación) para diferentes niveles globales de captura. En particular, y con el fin de cumplir con objetivos de generación (satisfacer la demanda externa de potencia) asegurando un nivel deseado de captura, se analiza la influencia de diferentes escenarios en el rendimiento tecno-económico del sistema integrado, generación+captura: dimensionamiento de los trenes de captura, número de unidades en paralelo y derivación parcial de la corriente de gases exhaustos.

Parte de los resultados alcanzados en este capítulo fueron comunicados recientemente en los siguientes congresos:

- Patricia Mores, Ezequiel Godoy, Nicolás Scenna, 2012. Influencia de la asignación de recursos para mantenimiento en los indicadores económicos de un ciclo combinado acoplado a un sistema de captura de  $CO_2$ . II Congreso Latinoamericano de Distribución Eléctrica (CLADE 2012), 24-26 de Septiembre de 2012, Rosario, Santa Fe, Argentina.
  - Patricia Mores, Nicolás Scenna, Sergio Mussati, 2012. Influence of number of operative trains on the economic optimal coupling of a  $CO_2$  capture system. XIX Congresso
-

Brasileiro de Engenharia Química (COBEQ 2012), 09-12 de Septiembre de 2012, Búzios, Río de Janeiro, Brasil.

Finalmente, en el capítulo 6 (Conclusiones y trabajos futuros) se desarrollan las conclusiones y se sintetizan las líneas de investigación surgidas a partir del trabajo de tesis.

---

# Capítulo 2

## Proceso de absorción de $CO_2$ en solución acuosa de monoetanolamina

### 2.1. Introducción

En general, el modelado de un proceso de absorción no es una tarea sencilla de realizar, debido a que exige considerar la compleja combinación de los diferentes fenómenos involucrados en los procesos de transferencia de materia, calor y cantidad de movimiento (difusión, reacciones, presencia de electrolitos, no idealidades termodinámicas, transferencia de energía, etc.), los cuales influyen considerablemente en el resultado.

Una columna de absorción, identificada por un fenómeno de equilibrio termodinámico entre fases fluidas, típicamente se modela como un arreglo en contracorriente. Dependiendo del grado de detalle que se considere, existen principalmente dos tipos de modelos para describir una etapa de separación: 1) un modelo de etapas teóricas de equilibrio (térmico, mecánico y químico) y 2) un modelo de etapas de no-equilibrio.

En el modelo de etapas de equilibrio, la columna de absorción se divide en etapas discretas, las cuales se describen mediante balances de materia, balances de energía, relaciones de equilibrio de fases y suma de composiciones (ecuaciones MESH). La no idealidad de las mismas se tiene en cuenta mediante un factor de eficiencia, siendo la eficiencia de Murphree la expresión más empleada. Sin embargo, los modelos de equilibrio

resultan inadecuados cuando los fenómenos de transferencia de materia y energía están influenciados por la presencia de reacciones químicas, más aun si están limitados por la cinética de las reacciones involucradas (Kucka et al., 2003a), como sucede en el caso de estudio. Por el contrario, un modelo de etapas de no equilibrio (rate-based model) se caracteriza por una mejor aproximación para esta clase de sistema ya que los efectos de la cinética de reacción, la transferencia de materia y la transferencia de energía se consideran en forma simultánea. La influencia de la reacción química en la transferencia de materia puede tenerse en cuenta mediante diferentes metodologías basadas en la teoría de la penetración, la teoría de la doble película o la teoría de renovación de la superficie. El método más simple consiste en emplear un factor de corrección (Enhancement factor), que ha sido desarrollado para diferentes tipos, órdenes y mecanismos de reacción. Sin embargo, en sistemas de reacción complejos aún no se cuenta con factores de corrección confiables. En estos casos, la aproximación típica consiste en dividir la película en segmentos radiales e incorporar el término velocidad de reacción en los balances de materia y energía para cada elemento del film, resultando en consecuencia, un problema con una enorme complejidad de resolución. El tamaño del modelo resultante depende del número de elementos del film, el cual varía entre 6 y 40 para una buena estimación de los perfiles en la película (Asprion, 2006). De esta manera, resulta fácil deducir que el esfuerzo computacional, comparado con el empleo del factor de Enhancement, se incrementa significativamente.

En la actualidad se trabaja exhaustivamente en la determinación de los mecanismos de reacción involucrados y su efecto en la eficiencia de absorción (Aboudheir et al., 2003; Bedell, 2011; Kucka et al., 2002; Mindrup y Schneider, 2010; Sexton y Rochelle, 2011). Además, se han desarrollado modelos matemáticos detallados basados en la teoría de la doble película y la teoría de la penetración (Faramarzi et al., 2010; Ghaemi et al., 2011; Lawal et al., 2009b; Simon et al., 2011; Zhang et al., 2009).

Por otra parte, la velocidad de absorción depende de la concentración de las especies iónicas y moleculares presentes en la solución. Es por ello que el modelo matemático debe considerar la variación de la concentración de todos los componentes a lo largo de la columna, para lo cual es necesario definir un modelo de equilibrio líquido vapor apropiado.

---

Algunos de los trabajos referentes al modelado del ELV han sido publicados por Aboudheir et al. (2003); Austgen et al. (1989); Liu et al. (1999) y Puxty et al. (2009a), entre otros.

En este capítulo, se desarrolla un modelo matemático riguroso de la columna de absorción, basado en el fenómeno de resistencia a la transferencia de materia, con reacciones en equilibrio en la fase líquida y reacción química en la interfase. El efecto de la reacción química se considera mediante la inclusión del factor de Enhancement para una reacción de pseudo primer orden. Mediante hipótesis simplificadoras se deduce también, un modelo de etapas de equilibrio. Se incluyen además, ecuaciones de diseño que permiten determinar el tamaño óptimo requerido para un nivel definido de recuperación, así como restricciones que aseguran una operación dentro de límites permisibles (caídas de presión, mínimo caudal de humedecimiento, porcentaje de inundación, etc.). Asimismo, se asume un modelo discreto, esto es, cascada de múltiples etapas en contracorriente.

El modelo propuesto se valida satisfactoriamente comparando los resultados obtenidos con datos experimentales reportados en la bibliografía. Además, se emplean diferentes correlaciones para determinar el área de transferencia de materia, y se analiza su influencia en la determinación de los perfiles internos de temperatura y composición. La determinación rigurosa de los perfiles internos de temperatura, presión, caudales y composiciones de las corrientes resultan imprescindibles a la hora de realizar el diseño final del equipo.

Finalmente, se determinan las condiciones operativas y de diseño óptimas que maximicen la eficiencia de absorción, definida de acuerdo a dos funciones objetivo diferentes: 1) relación entre la cantidad de  $CO_2$  absorbida y el volumen del empaque de la columna y 2) relación entre la cantidad de  $CO_2$  absorbida y el flujo de alimentación de solvente (expresado como la relación entre el caudal de amina y el caudal de gas).

## 2.2. Desarrollo del modelo matemático. Columna de absorción

### Consideraciones generales

La columna se considera como una cascada de múltiples etapas dispuestas en contracorriente. La Figura 2.1 muestra el esquema de una etapa genérica utilizada para modelar la columna de absorción. En la Figura, “z” ( $z=1, \dots, Z$ ) denota cada etapa, “x” e “y” denotan las fracciones molares de los componentes “i” y “j” presentes en las corrientes líquida (L) y gaseosa (G) respectivamente. El vapor circula en sentido ascendente desde la etapa  $z$  hacia la etapa  $z + 1$ , mientras que el líquido desciende desde la etapa  $z$  a la etapa  $z - 1$ . Las entalpías de las corrientes líquida y vapor se denotan por  $H_z^L$  y  $H_z^G$ , respectivamente.

El modelo matemático ha sido desarrollado teniendo en cuenta las siguientes consideraciones:

- Se adoptan empaques al azar como relleno de las torres de absorción y regeneración. Si bien el comportamiento de las columnas de platos es satisfactorio, se prefieren las columnas empacadas ya que se caracterizan por su mayor eficiencia de contacto, menor caída de presión y presentan una menor tendencia a la formación de espuma, entre otros factores (Fisher et al., 2005).
  - Se adopta como solvente una solución de monoetanolamina al 30 %.
  - Se asume que tanto la fase líquida como la gaseosa, se encuentran en mezcla completa. De esta manera, la temperatura de las corrientes líquida y gaseosa que abandonan la etapa son idénticas.
  - Se asume que solo las especies moleculares difunden entre las fases. Además, considerando que la solubilidad del  $O_2$  y el  $N_2$  en la solución de aminas es muy baja, se asume que la transferencia entre fases de estos componentes es despreciable.
  - Las reacciones tienen lugar en la fase líquida.
  - La fase líquida tiene comportamiento ideal.
-

- La fase gaseosa tiene comportamiento real.
- La torre de absorción no cuenta con sección de lavado de gases.

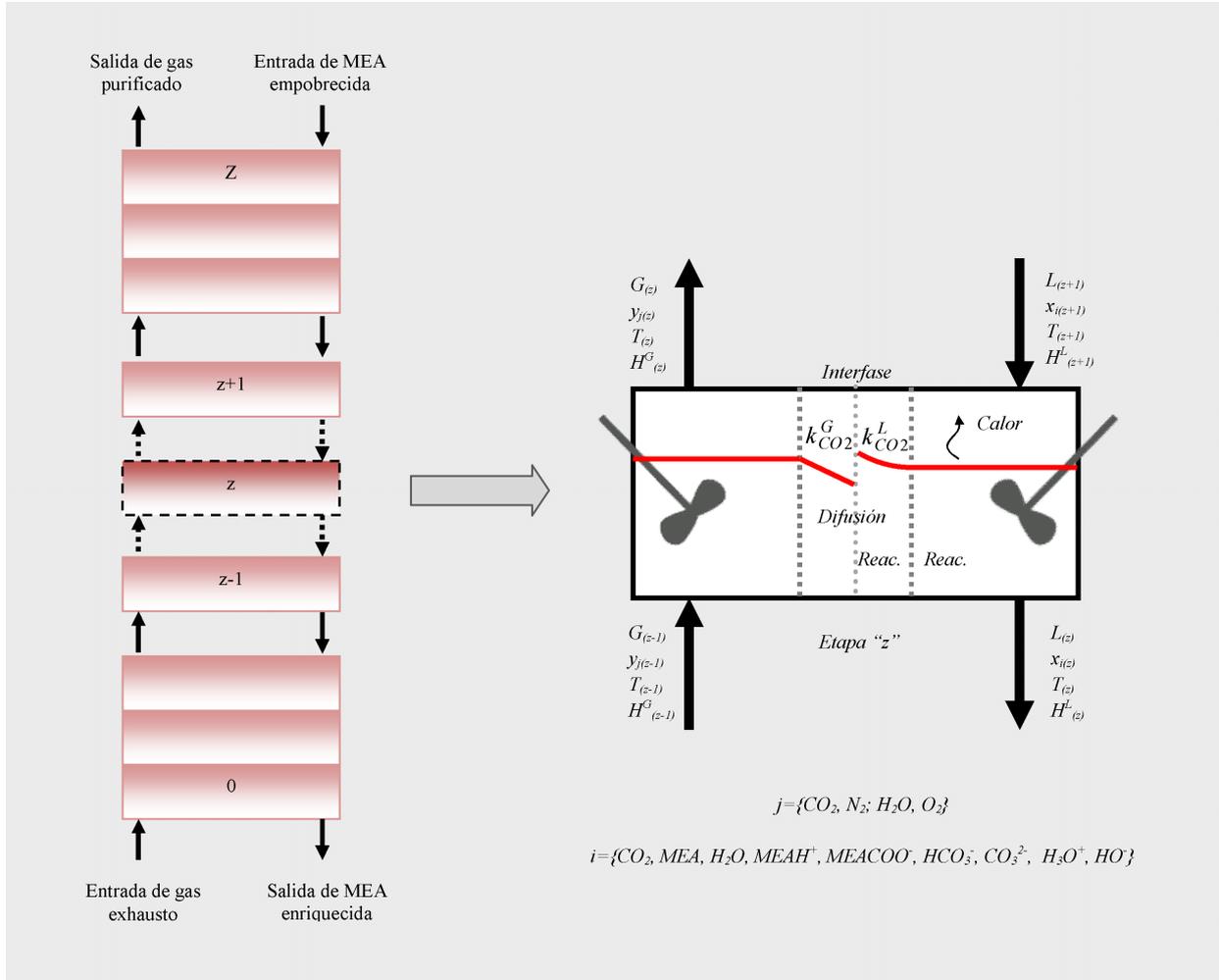


Figura 2.1 – Esquema de una etapa genérica de absorción.

### Balances de materia y energía

- *Balace de materia global en la etapa z*

$$L_{z+1} - L_z + G_{z-1} - G_z = 0 \quad (2.1)$$

- *Balace de materia por componentes en la etapa z*

$$L_{z+1} x_{i,z+1} - L_z x_{i,z} + G_{z-1} y_{j,z-1} - G_z y_{j,z} = 0 \quad (2.2)$$

- *Balance de energía en la etapa z*

$$L_{z+1} H_{z+1}^L - L_z H_z^L + G_{z-1} H_{z-1}^G - G_z H_z^G + (\Delta H_R)_z - (\Delta H_{H_2O})_z = 0 \quad (2.3)$$

Donde  $\Delta H_R$  denota el calor de reacción entre el  $CO_2$  y el solvente y  $\Delta H_{H_2O}$  denota el calor de vaporización del agua; las correlaciones correspondientes se adoptaron de Oyenekean (2007) y Hilliard (2008).

- *Balance de electroneutralidad en la etapa z*

$$\begin{aligned} [\text{MEA}H^+]_z + [\text{H}_3\text{O}^+]_z = \\ [\text{MEACOO}^-]_z + [\text{HCO}_3^-]_z + 2 [\text{CO}_3^{2-}]_z + [\text{OH}^-]_z \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde  $[i]$  corresponde a la composición de la especie iónica “i” expresada en [mol/l].

- *Restricciones de composición*

$$\sum x_{iz} = 1 \quad (2.5)$$

$$\sum y_{jz} = 1 \quad (2.6)$$

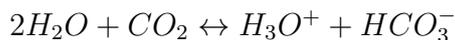
## Equilibrio líquido vapor (ELV)

Para la estimación de los valores de las concentraciones de equilibrio, es necesario considerar los equilibrios físico - químicos, los balances de materia y los balances de carga de los electrolitos presentes en la fase acuosa, los cuales se describen mediante un conjunto de restricciones no lineales. La reacción de  $CO_2$  con una solución de MEA, implica un complejo sistema de reacciones paralelas y consecutivas en la fase líquida (Kucka et al., 2002). Precisamente, las reacciones [R1] a [R5] son reacciones reversibles instantáneas, mientras que las reacciones [R6] y [R7] corresponden a reacciones reversibles cinéticamente controladas.

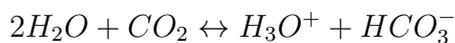
1. Hidrólisis del agua [R1]



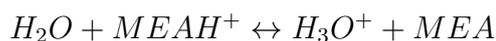
2. Formación de bicarbonato a partir del  $CO_2$  disuelto [R2]



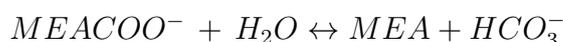
3. Disociación del bicarbonato [R3]



4. Disociación de la amina protonada [R4]



5. Hidrólisis del carbamato [R5]



6. Formación de carbamato (por el mecanismo de “*Zwitterion*”) [R6]



7. Formación de bicarbonato [R7]



■ **Constantes de equilibrio químico**

Para calcular la concentración de las especies iónicas y moleculares en la solución, las constantes de equilibrio químico se expresan en función de sus actividades de acuerdo a la Ecuación (2.7). Además, la actividad de las especies químicas presentes en la fase líquida es función de la temperatura de la solución, según se presenta en la Ecuación (2.8).

$$K_{mz} = \prod_i (a_{iz})^{\nu_i} = \prod_i (x_{iz} \gamma_{iz})^{\nu_i} \quad \forall m, \quad m = R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 \quad (2.7)$$

Si bien en todo sistema de reacción real la fase líquida tiene comportamiento no ideal, se asume aquí como primera aproximación que dicha fase tiene un comportamiento ideal, de manera tal que los coeficientes de actividad adoptan valores unitarios.

$$K_{mz} = \exp \left( A + \left( \frac{B}{T_z} \right) + C \ln (T_z) \right) \quad \forall m, \quad m = R_1, R_2, R_3, R_4, R_5 \quad (2.8)$$

donde  $T$  es la temperatura absoluta [K] mientras que  $a_{iz}$ ,  $\gamma_{iz}$  y  $\nu_i$  corresponden a la actividad, coeficiente de actividad y coeficiente estequiométrico del componente “ $i$ ” en la reacción “ $m$ ” respectivamente. Los coeficientes empleados en la Ecuación (2.8) se adoptan de Aboudheir et al. (2003) y se listan en la Tabla 2.1.

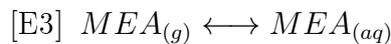
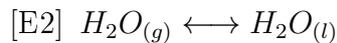
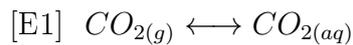
Tabla 2.1 – Coeficientes para la estimación de las constantes de equilibrio químico y las solubilidades.

	A	B	C	D	Referencia
$K_1$	140.9320	-13445.90	-22.47730	-	Aboudheir et al. (2003)
$K_2$	253.4820	-12.09200	-36.78160	0	
$K_3$	220.0670	-12.43170	-35.48190	0	
$K_4$	6.694250	-3090.830	0	0	
$K_5$	-3.36360	-5851.110	0	0	
$H_{CO_2-H_2O}$	170.7126	-8477.771	-21.95743	0.005871	Liu et al. (1999)
$H_{CO_2-MEA}$	89.4510	-2943.600	-11.59200	0.016440	

#### ■ *Relaciones de equilibrio de fases*

El equilibrio de fases gobierna la distribución molecular de las especies entre la fase líquida y la fase gaseosa. Para un valor dado de presión y temperatura, la condición de equilibrio de fases está dada por la igualdad entre el potencial químico en la fase líquida y el potencial químico en la fase gaseosa  $\left(\mu_{i(T,P,y)}^G = \mu_{i(T,P,x)}^L\right)$ , lo que da un valor mínimo de la energía libre de *Gibbs*.

Considerando la baja solubilidad del  $O_2$  y el  $N_2$  en la solución de amina, se asume que la transferencia de estos componentes entre las fases es despreciable. Así, el equilibrio de fases para los componentes volátiles está dado por las reacciones [E1] a [E3] y se representa matemáticamente según las Ecuaciones 2.9 a 2.11:



$$y_{CO_2} z \phi_{CO_2} z P_z = H_{CO_2} z [CO_2]_z \quad (2.9)$$

$$y_{H_2O\ z} \phi_{H_2O\ z} P_z = p_{H_2O\ z} x_{H_2O\ z} \quad (2.10)$$

$$y_{MEA\ z} \phi_{MEA\ z} P_z = p_{MEA\ z} x_{MEA\ z} \quad (2.11)$$

donde:

$H_{CO_2\ z}$  es la solubilidad de  $CO_2$  en la solución de amina [kPa l/mol].

$[CO_2]_z$  es la concentración molar de  $CO_2$  [mol/l].

$\phi$  es el coeficiente de fugacidad del componente, determinado a partir de la ecuación de estado para mezclas gaseosas de Peng y Robinson (1976).

$P_z$  es la presión total en la etapa  $z$  [kPa].

$p_{H_2O}$  y  $p_{MEA\ z}$  corresponden a la presión parcial del agua y la monoetanolamina en la etapa  $z$ , respectivamente, determinadas mediante la ecuación de Antoine y expresadas en kPa.

#### ■ *Coefficientes de fugacidad*

El coeficiente de fugacidad ( $\phi$ ) de un componente “k” en una mezcla líquida se determina mediante la Ecuación (2.12), basada en la ecuación de estado para mezclas de Peng y Robinson (1976).

$$\ln(\phi_{kz}) = \frac{b_k}{b_z} (f_{cz} - 1) - \ln(f_{cz} - B_z) - \frac{A_z}{2\sqrt{2}B_z} \left( \frac{2 \sum_i x_{iz} a_{ik}}{a_z} - \frac{b_{kz}}{b_z} \right) \ln \left( \frac{f_{cz} + 2.414B_z}{f_{cz} - 0.414B_z} \right) \quad (2.12)$$

donde:

$$a_z = \sum_i \sum_k x_{iz} x_{kz} a_{ikz} \quad (2.13)$$

$$b_z = \sum_i x_{iz} b_i \quad (2.14)$$

$$a_{iz} = 0.4572 \frac{R^2 T_{ci}^2}{P_{ci}} (1 + \Upsilon)^{0.5} \quad (2.15)$$

$$\Upsilon = (0.3746 + 1.5423\omega_i - 0.2699\omega_i^2) \left( 1 + \frac{T_z^2}{T_{c,i}^2} \right) \quad (2.16)$$

$$b_i = 0.07780 \frac{RT_{c,i}}{P_{c,i}} \quad (2.17)$$

$$A_z = \frac{a_z P_z}{R^2 T_z^2} \quad (2.18)$$

$$B_z = \frac{b_z P_z}{RT_z} \quad (2.19)$$

$R$  es la constante universal de los gases;  $a_{ik}$  son los parámetros de interacción binarios entre el componente “i” y el componente “k”;  $T_c$ ,  $P_c$  y  $\omega$  son la temperatura crítica, presión crítica y factor acéntrico del componente “i”. Las propiedades críticas y los parámetros de interacción binaria se presentan en las Tablas 2.2 y 2.3, respectivamente.

Tabla 2.2 – Propiedades críticas.

Componente	$T_c$ [K]	$P_c$ [kPa]	$\omega$
Oxígeno	154.620	5080.02	0.01900
Nitrógeno	126.044	3394.37	0.04000
Dióxido de carbono	303.950	7370	0.23894
Agua	647.149	22120	0.34400
Metanolamina	614.400	4450	0.86400

Tabla 2.3 – Coeficientes de interacción binaria.

	<b>O<sub>2</sub></b>	<b>N<sub>2</sub></b>	<b>CO<sub>2</sub></b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b>MEA</b>
<b>O<sub>2</sub></b>	0.0000	-0.0120	0.0975	0.0000	0.0000
<b>N<sub>2</sub></b>	-0.0120	0.0000	-0.0200	-0.3156	0.0000
<b>CO<sub>2</sub></b>	0.0975	-0.0200	0.0000	0.0445	0.0000
<b>H<sub>2</sub>O</b>	0.0000	-0.3156	0.0445	0.0000	-0.1800
<b>MEA</b>	0.0000	0.0000	0.0000	-0.1800	0.0000

Para el cálculo del coeficiente de fugacidad de la fase gaseosa, se reemplazan las fracciones molares de los componentes presentes en el líquido por las fracciones molares de los componentes presentes en la fase gaseosa, y el factor de compresibilidad del líquido por el del gas.

Por otro lado, para determinar el valor del factor de compresibilidad ( $f_c$ ), la Ecuación (2.20) (Ecuación de estado de Peng y Robinson (1976)) y la Ecuación (2.21) se combinan para dar una ecuación polinómica de tercer grado (Ec. 2.22). Como resultado de esta expresión, se puede tener de una a tres raíces reales según el número de fases del sistema. En el sistema bajo análisis se trabaja en la región de dos fases y, en consecuencia, se tendrá una raíz imaginaria (sin sentido físico) y dos raíces reales. El mayor valor real corresponde al factor de compresibilidad del vapor, mientras el menor valor real corresponde al factor de compresibilidad del líquido.

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b) + b(v-b)} \quad (2.20)$$

$$f_c = \frac{Pv}{RT} \quad (2.21)$$

$$f_{cz}^3 + (B_z - 1) f_{cz}^2 + (A_z - 3B_z^2 - 2B_z) f_{cz} + (B_z^3 + B_z^2 - A_z B_z) = 0 \quad (2.22)$$

## Diseño de columnas empacadas

### ■ Área transversal de la columna

El área transversal de la columna se calcula según las restricciones 2.23 y 2.24 y según se puede observar, depende de la velocidad de inundación ( $u_{fz}$ ) y el flujo másico ( $G_z''$ ) y la densidad ( $\rho_z^{G'}$ ) másica del gas. Es una práctica habitual diseñar las columnas empacadas por debajo del punto de inundación de las mismas. Para ello, se define un factor de inundación ( $f_z$ ), el cual afecta a la velocidad del gas que corresponde al punto de inundación ( $u_{fz}$ ). Normalmente el valor de dicho factor ( $f_z$ ) varía entre 0.70 y 0.80.

Esta práctica provee margen suficiente para prevenir las incertidumbres asociadas a la estimación del punto de inundación, y mantener el punto de diseño alejado de la región en la que la eficiencia disminuye rápidamente, esto es, cerca de esta condición crítica (Kister, 1992). A modo de ejemplo, en Karimi et al. (2011a) se realizó el dimensionamiento de las columnas de absorción y desorción en base a un valor de 75 %

de la velocidad de inundación del gas mientras que en Fisher et al. (2005) adoptaron 80 %.

La restricción respecto al factor de inundación se incluye en la Ecuación (2.25). Por otro lado, en la bibliografía se recomienda que el diámetro mínimo sea 10 veces el diámetro nominal del empaque ( $d_p$ ) (Seider et al., 2009), y el diámetro (económico) máximo sea de 12.8 m (Chapel et al., 1999). Estas restricciones se tienen en cuenta mediante la Ecuación (2.26).

$$DT_z = \sqrt{\frac{4 G_z''}{(0.3048 u_{fz}) f_z \pi \rho_z'^G}} \quad (2.23)$$

$$A_z = \pi \frac{DT_z^2}{4} \quad (2.24)$$

$$0.7 \leq f_z \leq 0.8 \quad (2.25)$$

$$10 d_p \leq DT_z \leq 12.8 \text{ m} \quad (2.26)$$

Donde  $DT_z$  es el diámetro de la torre [ $m$ ],  $G_z''$  es el flujo másico del gas [ $\frac{kg}{s}$ ],  $u_{fz}$  es la velocidad de inundación [ $\frac{ft}{s}$ ],  $f_z$  es el factor de inundación [*adimensional*] y  $\rho_z'^G$  es la densidad másica de la corriente gaseosa [ $\frac{kg}{m^3}$ ].

La velocidad de inundación ( $u_{fz}$ ) para empaques dispuestos al azar se determina de acuerdo a la correlación de Leva (1992), dada por las Ecuaciones 2.27 a 2.34. Como puede observarse, dicha velocidad es función de las propiedades de las corrientes, el factor de empaque ( $Fp$ ) y un parámetro de relación de flujos ( $f_{1z}$ ).

*Factor velocidad de inundación  $Y_z$  [*adimensional*]:*

$$Y_z = \frac{(u_f)_z^2 Fp}{g} \left( \frac{\rho_z^G}{\rho_{H_2O}^L} \right) f_{2z} f_{3z} = \exp \left[ -3.7121 - 1.0371 \ln(f_{1z}) - 0.1501 (\ln(f_{1z}))^2 - 0.00754 (\ln(f_{1z}))^3 \right] \quad (2.27)$$

*Parámetro de relación de flujos [*adimensional*]:*

$$f_{1z} = \frac{L'_z}{G'_z} \sqrt{\frac{\rho'_z{}^G}{\rho'_z{}^L}} \quad (2.28)$$

Factor de ajuste en función de la viscosidad de la corriente líquida  $\left[\frac{kg}{m \cdot s}\right]$ :

$$f_{2z} = 0.96 (\mu_z^L)^{0.19} \quad (2.29)$$

Factor de ajuste en función de la densidad [adimensional]:

$$f_{3z} = -0.8787 + 2.6776 \left(\frac{\rho_{H_2O}^L z}{\rho_z^L}\right) - 0.6313 \left(\frac{\rho_{H_2O}^L z}{\rho_z^L}\right)^2 \quad (2.30)$$

En estas expresiones, la velocidad de inundación ( $u_{fz}$ ), el factor de empaque ( $Fp$ ) y la constante gravitacional ( $g$ ) están expresadas en  $\left[\frac{ft}{s}\right]$ ,  $\left[\frac{ft^2}{ft^3}\right]$  y  $\left[\frac{ft}{s^2}\right]$ , respectivamente.

La correlación de Leva (1992) es aplicable dentro de los siguientes límites (Seider et al., 2009):

$$0.01 \leq Y_z \leq 10 \quad (2.31)$$

$$0.3 \times 10^{-3} \frac{kg}{m \cdot s} \leq \mu_z^L \leq 20 \times 10^{-3} \frac{kg}{m \cdot s} \quad (2.32)$$

$$d_p \geq 0.0254 \text{ m} \quad (2.33)$$

$$0.65 \leq \left(\frac{\rho_{H_2O}^L z}{\rho_z^L}\right) \leq 1.4 \quad (2.34)$$

#### ■ **Caída de presión**

La caída de presión total a través de la columna ( $\Delta P$ ) se obtiene al multiplicar la caída de presión por unidad de altura de empaque en cada etapa ( $\Delta P_z$ ) con la altura de la etapa ( $h_z$ ), según se indica en la siguiente ecuación:

$$\Delta P = \sum_z \Delta P_z h_z \quad (2.35)$$

A su vez, la caída de presión por unidad de altura de empaque en cada etapa ( $z$ ) expresada en  $[kPa/m]$ , se estima a partir de la siguiente correlación, desarrollada por Robbins (1991):

$$\Delta P_z = 0.8160 \left( \chi_z + 0.4 \left( \frac{L_{fz}}{20000} \right)^{0.1} \chi_z^4 \right) \quad (2.36)$$

$$\chi_z = 7.4 \times 10^{-8} G_{fz}^2 10^{2.7 \times 10^{-5}}$$

El primer sumando tiene en cuenta la caída de presión en el empaque seco mientras que el segundo corresponde a la caída de presión debido a la presencia de líquido. Los factores de carga de líquido ( $L_{fz}$ ) y de gas ( $G_{fz}$ ) se estiman mediante diferentes expresiones, dependiendo de la presión operativa ( $P_{op}$ ) y las características del empaque, específicamente el factor de empaque seco ( $Fpd$ ).

El factor de carga de la corriente gaseosa  $\left[ \frac{lb}{h \cdot ft^2} \right]$  se estima mediante la Ecuación (2.37) ó la Ecuación (2.38), mientras que el factor de carga de la corriente líquida  $\left[ \frac{lb}{h \cdot ft^2} \right]$  se calcula a partir de las Ecuaciones 2.39, 2.40 ó 2.41

$$G_{fz} = 986 \times \left( \frac{G'_z}{(\rho'_G)^{0.5} 3600} \right) \times \left( \frac{Fpd}{20} \right)^{0.5} \quad P_{op} \leq 1 \text{ atm} \quad (2.37)$$

$$G_{fz} = 986 \times \left( \frac{G'_z}{(\rho'_G)^{0.5} 3600} \right) \times \left( \frac{Fpd}{20} \right)^{0.5} \times (10)^{0.3 \rho'_G} \quad P_{op} > 1 \text{ atm} \quad (2.38)$$

$$L_{fz} = L'_z \left( \frac{62.4}{\rho'_L} \right) \left( \frac{Fpd}{20} \right)^{0.5} \left( \frac{\mu_z^L}{1000} \right)^{0.1} \quad P_{op} \leq 1 \text{ atm} \quad (2.39)$$

$$L_{fz} = L'_z \left( \frac{62.4}{\rho'_L} \right) \left( \frac{20}{Fpd} \right)^{0.5} \left( \frac{\mu_z^L}{1000} \right)^{0.1} \quad Fpd < 200 \quad P_{op} > 1 \text{ atm} \quad (2.40)$$

$$L_{fz} = L'_z \left( \frac{62.4}{\rho'_L} \right) \left( \frac{Fpd}{20} \right)^{0.5} \left( \frac{\mu_z^L}{1000} \right)^{0.2} \quad Fpd > 200 \quad P_{op} > 1 \text{ atm} \quad (2.41)$$

Donde:

$G'_z$  y  $L'_z$  son, respectivamente, las velocidades másicas del gas y el líquido expresadas en  $\left[ \frac{lb}{h \cdot ft^2} \right]$ ;  $\rho'_G$  y  $\rho'_L$  son las densidades másicas de la corriente gaseosa y la corriente

líquida expresadas en  $\left[\frac{lb}{ft^3}\right]$  y  $\mu_z^L$  es la viscosidad del solvente expresada en  $\left[\frac{kg}{m\ s}\right]$ . El factor de empaque seco se expresa en  $\left[\frac{ft^2}{ft^3}\right]$ .

Es importante destacar que la correlación de Robbins es aplicable únicamente a empaques dispuestos al azar. En caso de utilizar empaques estructurados es necesario recurrir a otras correlaciones.

Usualmente, las columnas empacadas se diseñan para un límite mínimo y un límite máximo de caída de presión en cualquier punto de la torre (Kister, 1992).

Para asegurar una velocidad del vapor a través del empaque que evite el flujo en régimen laminar y su mala distribución, se suelen diseñar para caídas de presión superiores a  $0.0817\ kPa/m$  (Kister, 1992).

En particular, Strigle (1987) sugiere un máximo de  $0.2042\ kPa/m$  para la absorbedora y  $0.2451\ kPa/m$  para la regeneradora. Sin embargo, el uso de aditivos que disminuyan la formación de espuma permite que la máxima caída de presión permisible sea superior. Si bien la caída de presión medida en el punto de inundación ronda entre  $1.6339$ - $2.0424\ kPa/m$ , se considera que una caída de presión de  $1.2255\ kPa/m$  corresponde al punto de inundación incipiente (Perry y Green, 2004).

De esta manera, las restricciones referidas a la caída de presión máxima y mínima se incluyen en la Ecuación (2.42), donde se asume un valor máximo para la caída de presión de  $1.0212\ kPa/m$ .

$$0.0817 \frac{kPa}{m} \leq \Delta P_z \leq 1.0212 \frac{kPa}{m} \quad (2.42)$$

- **Mínimo caudal de humedecimiento**

En general, para la operación eficiente de una columna de absorción, el empaque debe estar mojado en forma homogénea. La velocidad mínima de humedecimiento asegura un comportamiento estable del empaque.

El caudal mínimo de humedecimiento ( $Q_{MW}$ ), expresado en  $\left[\frac{m^3}{m^2s}\right]$  se evalúa a partir de la correlación presentada por Kister (1992), basada en un modelo teórico y reglas heurísticas.

$$Q_{MW} = 10^{-6} Q_{MW}^0 \left( \frac{60}{a_t} \right)^{0.5} \quad (2.43)$$

Los valores de referencia del mínimo caudal de humedecimiento ( $Q_{MW}^0$ ) para diferentes tipos de materiales se presentan en la Tabla 2.4. El área específica del empaque ( $a_t$ ) está expresada en  $\left[ \frac{ft^2}{ft^3} \right]$ .

Tabla 2.4 – Caudal mínimo de humedecimiento. Valor de referencia (Kister, 1992).

<b>Material</b>	<b><math>Q_{MW}^0</math> [ml/s m<sup>2</sup>]</b>
Cerámica no vidriada	1.17
Metal oxidado (Acero al carbono, cobre)	1.76
Metal con superficie tratada	2.34
Cerámica vidriada	4.69
Vidrio	5.86
Metal brillante (acero inoxidable, tantalio, otras aleaciones)	7.03
PVC-CPVC	8.21
Polipropileno	9.38
Fluoro-polímeros (tipo PTFE)	11.7

#### ■ *Altura de la etapa*

La altura de una columna empacada depende de los requerimientos de separación y de la eficiencia del empaque. Se emplea el concepto de unidad de transferencia, basado en modelos de transferencia de masa en contacto continuo, para la determinación de la eficiencia de las etapas y de la altura de la torre. La altura de un segmento de la columna ( $h_z$ ) se define en función del número de unidades de transferencia ( $NTU$ ) y la altura de la unidad de transferencia ( $HTU$ ), según se indica a continuación:

$$h_z = HTU_z \times NTU_z \quad (2.44)$$

#### *Altura de la unidad de transferencia*

La altura de la unidad de transferencia se calcula mediante la Ecuación (2.45) y, según se observa, es función de las propiedades de las corrientes, los coeficientes individuales de transferencia de materia ( $k^L$  y  $k^G$ ), el área superficial específica ( $a$ ) y el factor de Enhancement ( $E$ ).

$$HTU_z = \frac{G'_z}{R T_z k_z^G a_z \rho_z'^G} + \lambda_z \left[ \frac{L'_z}{k_z^L a_z \rho_z'^L E_z} \right] \quad (2.45)$$

Donde:

$L'$  y  $G'$  son las velocidades másicas del líquido y el vapor, respectivamente [ $kg/m^2 s$ ]

$T$  es la temperatura absoluta [K]

$g$  es la constante gravitacional [ $m/s^2$ ]

$R$  es la constante universal de los gases [ $Pa m^3/mol K$ ]

$\rho'^L$  y  $\rho'^G$  son las densidades másicas [ $kg/m^3$ ]

$\lambda_z$  es el coeficiente de desorción ( $\lambda_z = m_z G_z / L_z$ )

$k^L$ ,  $k^G$  y  $a$  están expresadas en [ $m/s$ ], [ $kmol/Pa s m^2$ ] y [ $m^2/m^3$ ] respectivamente.

### ***Eficiencia y número de unidades de transferencia***

Considerando que se asume mezcla perfecta en cada una de las etapas, la eficiencia puntual es igual a la eficiencia Murphree y, de esta manera, el número de unidades de transferencia, según lo sugirieron Molinari y Sala (2002), puede determinarse mediante la Ecuación (2.46).

$$NTU_z = -\ln(1 - \eta_z) \quad (2.46)$$

$$\eta_z = \frac{G_z y_{i,z} - G_{z-1} y_{i,z-1}}{G_z y_{i,z}^* - G_{z-1} y_{i,z-1}} \quad (2.47)$$

donde  $\eta_z$  (Ec. 2.47) es la eficiencia de Murphree y  $y_{i,z}^*$  se refiere a la composición de equilibrio de la especie “i” que abandona la etapa “z”.

### ***Coefficientes de transferencia de materia***

La velocidad de absorción está determinada por las condiciones hidrodinámicas (velocidad de flujo, geometría del relleno, propiedades físicas del líquido), y por las propiedades físico-químicas del sistema (solubilidad, densidad, viscosidad, etc.).

En el modelo se implementan las correlaciones presentadas por Onda et al. (1968) para determinar los coeficientes de transferencia de materia en la fase líquida ( $k^L$ ) y gaseosa ( $k^G$ ).

$$k_z^L \left( \frac{\rho_z'^L}{\mu_z^L g} \right)^{\frac{1}{3}} = 0.0051 \left( \frac{L_z'}{a_z \mu_z^L} \right)^{\frac{2}{3}} \left( \frac{\mu_z^L}{\rho_z'^L (D_{CO_2}^L)_z} \right)^{-\frac{1}{2}} (a_t D_p)^{0.4} \quad (2.48)$$

$$k_z^G \left( \frac{RT_z}{a_t D_z^G} \right) = 5.23 \left( \frac{G_z'}{a_t \mu_z^G} \right)^{0.7} \left( \frac{\mu_z^G}{\rho_z'^G D_z^G} \right)^{\frac{1}{3}} (a_t D_p)^{-2} \quad (2.49)$$

donde  $k^L$ ,  $k^G$  y  $a$  se expresan en  $[m/s]$ ,  $[kmol/Pa s m^2]$  y  $[m^2/m^3]$ , respectivamente.

$\mu^L$  y  $\mu^G$  son las viscosidades  $[Pa s]$

$D^G$  es la difusividad de la fase gaseosa  $[m/s^2]$

$D_{CO_2}^L$  es la difusividad de  $CO_2$  en la solución de amina  $[m/s^2]$

$D_p$ ,  $a_t$  y  $\sigma_c$  son el diámetro nominal  $[m]$ , el área específica  $[m^2/m^3]$  y la tensión superficial  $[N/m]$ , y corresponden a características particulares del tipo de empaque empleado.

Los supraíndices  $L$  y  $G$  se refieren a las corrientes líquida y gaseosa, respectivamente.

Además se implementan las correlaciones de Onda et al. (1968), Wilson (2004) y Bravo y Fair (1982) para determinar el área superficial específica para la transferencia de materia ( $a$ ) en rellenos dispuestos al azar. Estas correlaciones se seleccionan en el modelo en función del caso de estudio.

El área superficial específica según la correlación de Onda, se determina mediante las expresiones 2.50 a 2.53.

$$\frac{a_z}{a_t} = 1 - \exp \left( -1.45 \left( \frac{\sigma_c}{\sigma_z} \right)^{0.75} Re_z^{0.1} Fr_z^{-0.05} We_z^{0.2} \right) \quad (2.50)$$

$$Re_z = \frac{L_z'}{a_t \mu_z^L} \quad (2.51)$$

$$Fr_z = \frac{L_z'^2 a_t}{\rho_z'^L g} \quad (2.52)$$

$$We_z = \frac{L_z'^2}{\rho_z' L \sigma_z a_t} \quad (2.53)$$

donde  $\sigma$  es la tensión superficial del líquido [ $N/m$ ]; Re, We y Fr son los números adimensionales de Reynolds, Weber y Froude, respectivamente.

El área superficial específica según la correlación de Wilson, se determina mediante Ecuación (2.54).

$$a_z = \exp(4.73) u_z^G{}^{0.061} \left( \frac{L_z M_z^L}{1000 A_z} \right)^{0.148} \quad (2.54)$$

donde  $u_z^G$  es la velocidad superficial del gas [m/s],  $M_z^L$  es la masa molar de la mezcla [g/mol] y  $A_z$  es el área transversal de la torre [ $m^2$ ].

El área superficial específica según la correlación de Bravo, se determina mediante Ecuación (2.55).

$$a_z = a_t 0.310 \frac{\sigma_z^{0.5}}{h_z^{0.4}} \left( \left( \frac{\mu_z^L L_z'}{\rho_z' L \sigma} \right) \left( \frac{6 G_z'}{a_t \mu_z^G} \right) \right)^{0.392} \quad (2.55)$$

### **Factor de Enhancement**

En la bibliografía se pueden encontrar diferentes modelos para representar la transferencia de materia entre las fases líquida y gaseosa, entre ellos se pueden mencionar la teoría de la doble película (Whitman, 1923), la teoría de penetración (Higbie, 1935) y la teoría de renovación de la superficie (Danckwerts, 1951).

La teoría de la doble película es un modelo simplificado empleado para describir la transferencia de materia en la interfase líquido - gas. El sistema está constituido por el gas, una película gaseosa, la interfase, una película líquida y el líquido. Se asume que el gas y el líquido están en equilibrio en la interfase. Fuera del film, tanto en el líquido como en el gas, se supone que el nivel de turbulencia es tan elevado que no se observan gradientes de concentración (mezcla completa); de esta manera, la transferencia de materia por difusión molecular solamente ocurre en las películas. La Figura 2.2 esquematiza la difusión de una sustancia A desde la fase gaseosa hacia la fase líquida.

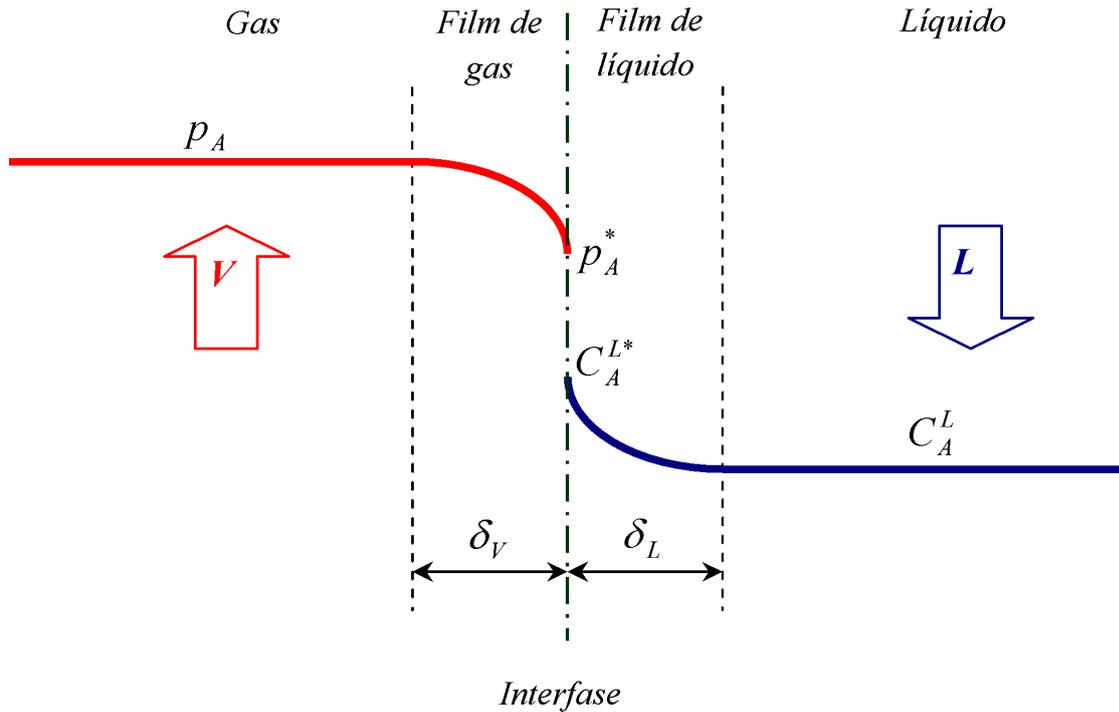


Figura 2.2 – Teoría de la doble película. Esquema general.

Debido a la naturaleza unidimensional del modelo de la doble película, en estado estacionario se debe cumplir que la cantidad de soluto transferido desde la fase gaseosa a la interfase tiene que ser igual a la cantidad de soluto transferida de la interfase a la fase líquida. Estas consideraciones generales son aplicables a todas las sustancias que difunden. Sin embargo, el  $CO_2$  reacciona con MEA apareciendo un nuevo factor que modifica la velocidad de transferencia de materia.

La reacción ocurre entre el soluto gaseoso y un reactivo disuelto en la fase líquida. Si la velocidad de reacción es muy lenta, todo el soluto gaseoso es transportado a la fase líquida antes de que pueda reaccionar, por lo que la velocidad de absorción no se incrementa significativamente. La transferencia de materia es gobernada por la diferencia de concentración entre la interfase y el líquido. Por el contrario, en el caso de reacciones muy rápidas, la reacción comienza cuando el soluto penetra ligeramente en la fase líquida.

Sin embargo, las velocidades de reacción varían desde velocidades muy bajas a extremadamente altas (instantáneas). Debido a esto, es posible diferenciar entre reacciones muy lentas, lentas, rápidas e instantáneas, dependiendo del valor del

número de Hatta (Doraiswamy y Sharma, 1984). En forma general, el número de Hatta se puede definir como:

$$Ha = \frac{\text{máxima conversión posible en la película}}{\text{máximo transporte por difusión a través de la película}}$$

Cuando el número de Hatta es mayor a uno todas las especies que difunden van a reaccionar en el film, pero no necesariamente van a consumirse, ya que esto depende de los valores de las constantes de equilibrio. Otra forma frecuente de describir el efecto de las reacciones químicas en el transporte de materia es el factor de Enhancement (E), definido en forma genérica como:

$$E = \frac{\text{velocidad de reacción}}{\text{velocidad de transporte de materia}}$$

Para el sistema  $MEA+CO_2+H_2O$ , la concentración del reactante en el líquido se encuentra en exceso, así la concentración en la interfase L-G es prácticamente igual a la concentración global en la fase líquida ( $C_{MEA}^L \approx C_{MEA}^{L*}$ ). Para el caso particular en el que la concentración del reactivo líquido pueda considerarse constante, se puede asumir que en la fase líquida se produce una reacción con una cinética de pseudo-primer orden. En la Figura 2.3 se presenta en forma esquemática el perfil de concentraciones para el sistema  $MEA+CO_2$ .

La reacción de  $MEA+CO_2$  típicamente ocurre en la primera zona de la película líquida entonces, al suponer una cinética de pseudo primer orden, el número de Hatta es igual al factor de Enhancement. El número de Hatta es una función de la concentración molar de MEA y  $CO_2$ , las velocidades de reacción, la difusividad de  $CO_2$  en la solución y la constante de transferencia de materia en la fase líquida, según se indica en la Ec. 2.56.

$$E_z = Ha_z = \frac{\sqrt{D_{CO_2}^L (k_{CO_2-MEA_z} [MEA]_z + k_{CO_2-OH_z} [CO_2]_z)}}{k_z^L} \quad (2.56)$$

La dependencia de las constantes cinéticas ( $k_{CO_2-MEA}$  y  $k_{CO_2-OH}$ ) con la temperatura para las reacciones paralelas [R6] y [R7], se adoptan de Aboudheir et al. (2003) y

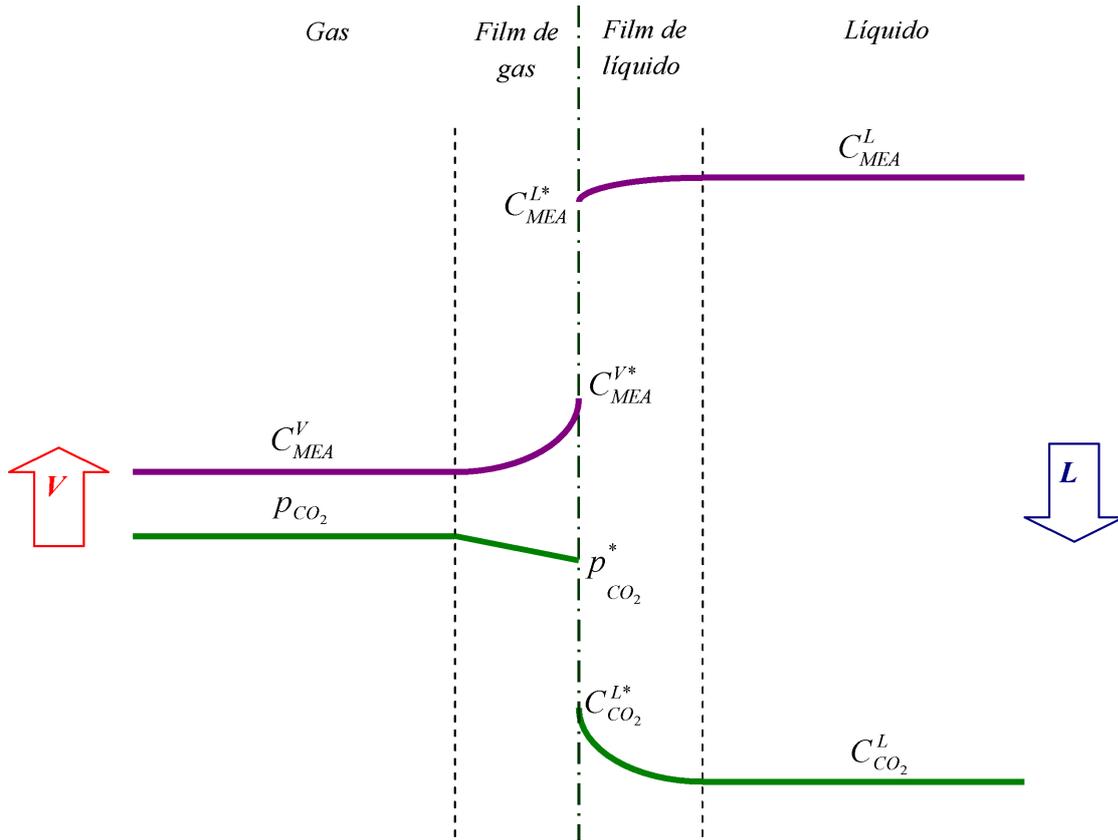


Figura 2.3 – Teoría de la doble película. Perfiles de concentración (MEA y  $CO_2$ ).

Kucka et al. (2002) y se computan de acuerdo a las Ecuaciones 2.57 y 2.58:

$$k_{CO_2-MEA_z} = 4.495 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{44940}{R T_z}\right) \quad (2.57)$$

$$k_{CO_2-OH_z} = \exp\left(31.396 - \frac{6658}{T_z}\right) \quad (2.58)$$

#### ■ Restricciones de tamaño

Por otro lado, el modelo incluye la restricción 2.59 referida a la relación dimensional permitida entre la altura y el diámetro de la columna mientras que la Ec. 2.60 asegura una columna de diámetro uniforme.

$$F_{min} \leq \left( \frac{\sum_{z=1}^Z h_z}{DT_z} \right)_{Torre} \leq F_{max} \quad (2.59)$$

$$DT_z = DT_{z-1} \quad \forall z > 1 \quad (2.60)$$

El volumen del empaque se determina de acuerdo a la Ecuación (2.61).

$$VT = \sum_{z=1}^Z \pi \left( \frac{DT_z}{2} \right)^2 h_z \quad (2.61)$$

La altura total de la columna se asume 15% mayor a la altura del empaque (Ec. 2.62). Por otro lado, para torres con extremos circulares y planos, el área superficial del empaque se determina según la Ecuación (2.63).

$$HT = 1.15 \sum_{z=1}^Z h_z \quad (2.62)$$

$$AS_z = \pi DT_z \left( 1.15 HT_z + \frac{DT_z}{2} \right) \quad (2.63)$$

Tanto el volumen del empaque como el área superficial de la columna son variables fundamentales para determinar el costo total de inversión, según se detallará en el capítulo 4.

## Propiedades de las corrientes

### ■ *Difusividad*

La difusividad de la corriente gaseosa se estima mediante una expresión simplificada (Ec. 2.64) de la correlación de Chapman-Enskog. Los coeficientes para la determinación de la difusividad de los componentes se presentan en la Tabla 2.5, los cuales fueron publicados por Reid et al. (1987).

$$D_z^G = \sum_j y_{jz} \frac{a_j T_z^{1.75}}{P_z} \quad (2.64)$$

La difusividad de  $CO_2$  en  $H_2O$  para una temperatura dada, se determina según la Ecuación (2.65) de Versteeg y Van Swaalj (1988). Sin embargo, para determinar la solubilidad de  $CO_2$  en la solución, se recurre a la Ecuación (2.66), que surge de considerar la analogía con el óxido nitroso y asumir despreciable el efecto de la presencia de  $N_2O$  en la viscosidad del agua y en la viscosidad de la solución de amina. La analogía con el óxido nitroso es ampliamente usada para la determinación de la

Tabla 2.5 – Coeficientes para el cálculo de la difusividad de los componentes en la fase gaseosa (Reid et al., 1987).

	$a_i$
CO <sub>2</sub>	8.65x10 <sup>-5</sup>
H <sub>2</sub> O	1.20x10 <sup>-4</sup>
N <sub>2</sub>	9.50x10 <sup>-5</sup>
O <sub>2</sub>	1.16x10 <sup>-4</sup>

difusividad (y también de la solubilidad) de CO<sub>2</sub> en la solución de amina, ya que el primero no reacciona con la solución, permitiendo así su medición experimental.

$$D_{CO_2-H_2Oz}^L = 2.35 \times 10^{-6} e^{-2119 T_z^{-1}} \quad (2.65)$$

$$D_{CO_2z}^L = D_{CO_2-H_2Oz}^L \left( \frac{\mu_{H_2Oz}^L}{\mu_z^L} \right)^\tau \quad (2.66)$$

Se adopta un valor de  $\tau = 0.51$ , reportado por Maceiras et al. (2008).

#### ■ **Viscosidad**

La viscosidad de la solución MEA-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O se estima mediante la correlación de Hansen (2004), según las Ecuaciones 2.67 a 2.72. En estas expresiones se tiene en cuenta el efecto de la temperatura [K] y la interacción entre las especies.

$$\mu_z^L = 1.2 \times r_z \times \mu_{mixz}^L \quad (2.67)$$

$$\ln(\mu_{mixz}^L) = x_{H_2Oz} \ln(\mu_{H_2Oz}^L) + x_{MEA z} \ln(\mu_{MEA z}^L) + x_{MEA z} x_{H_2O z} \Theta_z \quad (2.68)$$

$$\Theta_z = (372.1 - 3.11 T_z + 8.8093 \times 10^{-3} T_z^2 - 8.3457 \times 10^{-6} T_z^3) \quad (2.69)$$

$$r_z = 1 + 0.8031 \times \left( \frac{x_{CO_2 z}}{x_{MEA z}} \right) + 0.35786 \times \left( \frac{x_{CO_2 z}}{x_{MEA z}} \right)^2 \quad (2.70)$$

$$\mu_{MEA z}^L = 1 \times 10^{-3} \left( e^{-3.9356 + \frac{1010.8}{T_z - 151.17}} \right) \quad (2.71)$$

$$\mu_{H_2O\ z}^L = 2.414 \times 10^{-5} \left( 10^{\frac{247.8}{T_z - 140}} \right) \quad (2.72)$$

donde  $\mu_{MEA\ z}^L$ ,  $\mu_{H_2O\ z}^L$  y  $\mu_z^L$  corresponden a la viscosidad de la monoetanolamina, el agua y la solución respectivamente, expresadas en  $[Ns/m^2]$ .

$x_{CO_2\ z}$ ,  $x_{H_2O\ z}$  y  $x_{MEA\ z}$  son las fracciones molares de cada componente en la solución.

Por otro lado, la viscosidad de la corriente gaseosa se determina según la Ecuación (2.73), adoptada de Greer (2008). Los valores de los coeficientes correspondientes se listan en la Tabla 2.6.

$$\ln(\mu_z^G) = \sum_j \ln(y_{jz}(a_j T_z + b_j)) \quad \forall j, \quad j = CO_2, H_2O, N_2, O_2 \quad (2.73)$$

Tabla 2.6 – Coeficientes para el cálculo de la viscosidad de los componentes en la fase gaseosa.

	<i>a</i>	<i>b</i>
<i>CO</i> <sub>2</sub>	4.35x10 <sup>-8</sup>	1.93x10 <sup>-6</sup>
<i>H</i> <sub>2</sub> <i>O</i>	4.44x10 <sup>-8</sup>	-4.61x10 <sup>-6</sup>
<i>N</i> <sub>2</sub>	3.97x10 <sup>-8</sup>	6.03x10 <sup>-6</sup>
<i>O</i> <sub>2</sub>	4.84x10 <sup>-8</sup>	6.13x10 <sup>-6</sup>

donde  $\mu_z^G$  está expresada en  $[Ns/m^2]$ , la temperatura en [K] y las composiciones en fracciones molares.

#### ■ *Calor de vaporización*

La Ecuación (2.74) permite calcular el calor de vaporización [KJ/mol] de un componente puro a la temperatura T, conocido el valor  $\Delta\dot{H}_1$  para otra temperatura  $T_1$ .

$$\Delta\dot{H}_i(T_z) = \Delta\dot{H}_1(T_1) \left[ \frac{(T_{c_i} - T_z)}{(T_{c_i} - T_1)} \right]^{a_i + b_i \left( 1 - \frac{T_z}{T_{c_i}} \right)} \quad (2.74)$$

donde  $T_{c_i}$  es la temperatura crítica del componente “i”.

En la Tabla 2.7 se presentan los coeficientes a emplear en la Ecuación (2.74) para el cálculo del calor de vaporización del  $H_2O$  y de la MEA.

Tabla 2.7 – Coeficientes para el cálculo del calor de vaporización.

		H <sub>2</sub> O	MEA
$\Delta H_i(T_1)$	[KJ/mol]	40.6550	54.8358
$T_1$	[K]	373.15	399.82
$a_1$	-	0.3106	0.3288
$b_1$	-	0	-0.0857
$T_{c_i}$	[K]	647.149	614.4

### ■ *Calor de reacción*

El calor de reacción del  $CO_2$  con la  $MEA$  [KJ/mol de  $CO_2$ ] se determina mediante la Ecuación (2.75) publicada por Oyenekan (2007).

$$\left( -\frac{\Delta \dot{H}_{Rz}}{R} \right) = 14.28 + 1093 \frac{\alpha_z^2}{T_z} + 6801 \frac{\alpha_z}{T_z} + 32.67 \alpha_z \quad (2.75)$$

donde  $T$  es la temperatura del líquido [K] y  $\alpha$  es la carga de  $CO_2$  en la solución definida como la relación entre la concentración total de  $CO_2$  y la concentración total de amina según la Ecuación (2.76).

$$\alpha_z = \frac{[MEACOO^-]_z + [CO_2]_z + [HCO_3^-]_z + [CO_3^{2-}]_z}{[MEACOO^-]_z + [MEA H^+]_z + [MEA]_z} \quad (2.76)$$

### ■ *Entalpía*

La entalpía de la corriente gaseosa se estima en función de la regla de las mezclas (Ec. 2.77). El calor específico de las especies se determina a partir de una expresión polinómica de tercer grado (Ec. 2.78). Los coeficientes correspondientes, tomados de Reid et al. (1987), se indican en la Tabla 2.8.

$$H_{jz}^G = 1 \times 10^{-3} \sum_j y_j \int C_{p_j} dT \quad (2.77)$$

$$C_{p_{jz}} = a_j + b_j T_z + c_j T_z^2 + d_j T_z^3 \quad (2.78)$$

De manera similar se estima la entalpía de la corriente líquida (Ec. 2.79). Las capacidades caloríficas de  $CO_2$ ,  $HCO_3^-$ ,  $HO^-$  y  $H_3O^+$  se asumen iguales a la del agua, mientras que las de  $MEACOO^-$  y  $MEA H^+$  se asumen iguales a las de  $MEA$ .

La Ecuación (2.80) es una expresión polinómica de la capacidad calorífica en función de la temperatura para las especies consideradas, cuyos coeficientes se presentan en la Tabla 2.8 (Greer, 2008).

$$H_{iz}^L = 1 \times 10^{-3} \sum_i x_i \int C_{p_i} dT \quad (2.79)$$

$$C_{p_{iz}} = a_i + b_i \left( \frac{T_z}{1000} \right) + c_i \left( \frac{T_z}{1000} \right)^2 + d_i \left( \frac{T_z}{1000} \right)^3 + e_i \left( \frac{T_z}{1000} \right)^{-2} \quad (2.80)$$

Tabla 2.8 – Coeficientes para el cálculo de las capacidades caloríficas (Greer, 2008; Reid et al., 1987).

<b>Gases</b>					
	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>	<b>d</b>	<b>e</b>
<i>CO<sub>2</sub></i>	19.1	7.342x10 <sup>-2</sup>	-5.602x10 <sup>-5</sup>	1.715x10 <sup>-8</sup>	0
<i>H<sub>2</sub>O</i>	32.2	1.924x10 <sup>-3</sup>	1.055x10 <sup>-5</sup>	-3.596x10 <sup>-9</sup>	0
<i>N<sub>2</sub></i>	31.15	-1.357x10 <sup>-2</sup>	2.68x10 <sup>-5</sup>	-1.168x10 <sup>-8</sup>	0
<i>O<sub>2</sub></i>	28.11	-3.68x10 <sup>-6</sup>	1.746x10 <sup>-5</sup>	-1.065x10 <sup>-8</sup>	0
<i>MEA</i>	9.311	3.009x10 <sup>-1</sup>	-1.818x10 <sup>-4</sup>	4.656x10 <sup>-8</sup>	0
<b>Líquidos</b>					
	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>	<b>d</b>	<b>e</b>
<i>H<sub>2</sub>O</i>	-203.6060	1523.29	3196.413	2474.455	3.855326
<i>MEA</i>	520.3	2749	5313	-	-

Aquí, las capacidades caloríficas se expresan en [J/Kmol] y las entalpías en [KJ].

#### ■ **Presión de vapor**

Las presiones de vapor de componentes puros en función de la temperatura, específicamente MEA y *H<sub>2</sub>O*, se calculan a partir la ecuación de Antoine:

$$\ln(p_{H_2O}) = 65.93 - \frac{7228}{T_z} - 7.1770 \ln(T_z) + 4.0313 \times 10^{-6} T_z^2 \quad (2.81)$$

$$\ln(p_{MEA}) = 160.155 - \frac{13290.2}{T_z} - 21.0132 \ln(T_z) + 1.2701 \times 10^{-5} T_z^2 \quad (2.82)$$

#### ■ **Solubilidad**

La solubilidad de *CO<sub>2</sub>* en la solución de amina ( $H_{CO_2 z}$ ), se determina a partir de la solubilidad de *CO<sub>2</sub>* en *H<sub>2</sub>O* y en MEA ( $H_{CO_2 i z}$ ); y se corrige por el efecto de la fuerza

iónica (Greer, 2008). En la Tabla 2.1 se presentan los coeficientes correspondientes (Liu et al., 1999).

$$H_{CO_2 z} = (10^{0.152 I_z}) \left[ \frac{x_{H_2O z} H_{CO_2 MEA z} + x_{CO_2 z} H_{CO_2 H_2O z}}{\rho_z^L} \right] \quad (2.83)$$

$$H_{CO_2-i z} = \exp \left( A + \left( \frac{B}{T_z} \right) + C \ln (T_z) + D T_z \right) \quad \forall i, i = MEA, H_2O \quad (2.84)$$

La fuerza iónica de la solución ( $I$ , [l/mol]), se estima a partir de la carga iónica ( $\psi_k$ ) de cada ión “k” según se indica en la siguiente expresión:

$$I_z = \frac{1}{2} \sum_i \psi_i [i]_z \quad (2.85)$$

$$\forall k, k = MEAH^+, MEACOO^-, H_3O^+, OH^-, CO_3^{2-}, HCO_3^-$$

### 2.2.1. Modelo simplificado (equilibrio) versus modelo riguroso (rate-based)

El conjunto de ecuaciones presentado en la sección 2.2, corresponde a un modelo matemático riguroso basado en el fenómeno de resistencia a la transferencia de materia, con reacciones en equilibrio en la fase líquida y reacción química en la interfase. El efecto de la reacción química se considera mediante la inclusión del factor de Enhancement para una reacción con una cinética de pseudo primer orden. De acuerdo a la denominación general de este tipo de modelos, de aquí en adelante se lo llamará “Rate-based” (RB).

Sin embargo, es importante resaltar que a partir del modelo RB (Ec. 2.1 a 2.85) es posible derivar también un modelo de equilibrio (EM), por simple eliminación de algunas de las restricciones. La derivación de un modelo basado en etapas de equilibrio resulta sumamente útil ya que en principio se cuentan con dos modelos (RB y EM) bien diferenciados en cuanto a nivel de detalle y costo computacional. Luego, es posible comparar los resultados obtenidos por los dos modelos y así poder identificar en qué casos un modelo es preferible respecto al otro.

Básicamente, el modelo de equilibrio está constituido por las Ecuaciones 2.1 a 2.22, además de una restricción adicional que tiene en cuenta la eficiencia de la etapa.

Específicamente se utiliza la expresión de la eficiencia de Murphree (Ec. 2.47). En este modelo, dicha eficiencia debe fijarse en un valor apropiado. Seider et al. (2009) sugieren una eficiencia de 40 % en torres de absorción y 50 % en torres regeneradoras. Oyekan (2007), en su tesis doctoral, adoptó una eficiencia fija de 40 % en la columna de regeneración.

### 2.2.2. Implementación. Características matemáticas del modelo

El modelo se implementó en GAMS (General Algebraic Modeling System) y como resolvidor no-lineal se utilizó CONOPT, un algoritmo de optimización “local” basado en el método del gradiente reducido generalizado. El modelo matemático resultante que describe el estado estacionario de la columna de absorción, está conformado aproximadamente por 1500 variables y 1500 restricciones. Muchas de las restricciones son no-lineales de las cuales algunas son también no convexas. Además, en la totalidad de los balances de energía se puede observar la presencia de términos bilineales dados por el producto entre flujos y entalpías, lo cual, sumado al carácter no lineal de las restantes restricciones, puede conducir a la presencia de soluciones locales e incluso a problemas de convergencia.

Para asegurar la convergencia global, esto es, que el modelo converja cuando se modifica algún valor en los parámetros, y así poder obtener siempre el diseño óptimo para el caso de estudio que se esté considerando, se implementó un procedimiento adecuado de inicialización y acotamiento. Específicamente, se propone resolver el modelo simplificado de equilibrio (EM) y la solución óptima obtenida se utiliza para inicializar las variables del modelo riguroso (RB). Esta estrategia permite obtener soluciones iniciales factibles (o en el peor de los casos soluciones iniciales cuasi-factibles) para el modelo RB. Ambos modelos se resuelven en forma sucesiva y sistemática sin necesidad de introducir valores numéricos intermedios.

Tanto los modelos desarrollados como la estrategia de resolución son suficientemente flexibles, permitiendo llevar a cabo todas las simulaciones y optimizaciones con bajo costo computacional. Ciertamente, el modelo convergió para todos los casos en pocas iteraciones demandando tiempos muy cortos de cómputo.

Un hecho sumamente importante a destacar es que el modelo puede ser utilizado no solo para simular sino también para optimizar. Esto es, el modelo fue desarrollado e

---

implementado en GAMS de tal manera que pueda comportarse tanto como un simulador, en el caso que el usuario defina la cantidad de variables que anulen los grados de libertad del sistema, o como optimizador. En este caso, el modelo desarrollado y utilizado como un simulador posee las mismas características de un simulador de proceso (HYSYS, ASPEN PLUS). Sin embargo, los mayores beneficios se logran cuando se pretende realizar optimizaciones presentando varias ventajas respecto a un simulador de procesos, tales como: a) optimizar numerosas variables del proceso en forma simultánea, sin la necesidad de recurrir a optimizaciones paramétricas, b) reducir el tamaño del modelo fijando valores en algunas variables, y c) abordar distintas estrategias de inicialización y de solución.

---

## 2.3. Verificación del modelo vía simulación. Comparación con datos publicados

Con el fin de contar con un modelo general que sea aplicable a un amplio rango de condiciones operativas, tanto el modelo de equilibrio líquido-vapor como el de la columna de absorción, se desarrollaron en base a numerosos trabajos. De esta manera, verificar los modelos bajo diferentes condiciones es fundamental. En este aspecto, en una primera instancia se comparan los resultados del modelo de equilibrio líquido vapor con valores experimentales (y resultados de simulaciones) presentados por varios autores. Específicamente se analiza la distribución de concentraciones de las diferentes especies en la fase líquida y la presión parcial de  $CO_2$  a diferentes niveles de temperatura y concentración de  $CO_2$  en el solvente. Luego, se comparan los resultados del modelo de la torre de absorción (perfiles internos de temperatura y composición en las fases líquida y gaseosa) utilizando tanto el modelo riguroso (RB), como el modelo simplificado (EM) para dos caudales de gas (escala de laboratorio y planta piloto), y diferentes tipos de empaques (sillas Berl y sillas Intalox, en ambos casos de cerámica). Se emplean además diferentes correlaciones para la determinación del área específica para la transferencia de materia.

### 2.3.1. Verificación del modelo de equilibrio líquido vapor (ELV)

Como se puede intuir, el empleo de correlaciones rigurosas que representen el ELV de  $CO_2$  en soluciones acuosas de monoetanolamina, resulta fundamental no solo en el dimensionamiento de los equipos sino también en la determinación de las condiciones operativas que mejoren la performance del proceso (Aronu et al., 2011).

El comportamiento del equilibrio líquido-vapor de un sistema compuesto por  $CO_2$ - $H_2O$ -MEA depende fundamentalmente de las condiciones de temperatura y presión a las que se encuentre el mismo. El siguiente conjunto de restricciones constituye el modelo de equilibrio líquido-vapor para la solución mencionada, a partir del cual se determinan tanto las concentraciones de todas las especies presentes en la fase líquida, como la presión parcial de  $CO_2$  en la solución:

- Constantes de equilibrio químico en función de la concentración (Ec. 2.7)
- Constantes de equilibrio químico en función de la temperatura (Ec. 2.8)
- Balance de electroneutralidad (Ec. 2.4)
- Balance de MEA (Ec. 2.76)
- Equilibrio de fases (Ec. 2.9)

En las Figuras 2.4 y 2.5 se comparan los resultados obtenidos por el modelo de ELV con los datos reportados por Aboudheir et al. (2003) y Austgen et al. (1989), para diferentes valores de temperatura y cargas de  $CO_2$ . Específicamente, en la Figura 2.4 se representa la distribución de concentraciones de las especies presentes en una solución 2.5 M de MEA para dos valores de temperatura (313.15 y 373.15 K), mientras que en la Figura 2.5 se indica la presión parcial correspondiente a cada punto. Se puede observar que para 313.15 K, los resultados estimados por el modelo concuerdan satisfactoriamente con los valores reportados.

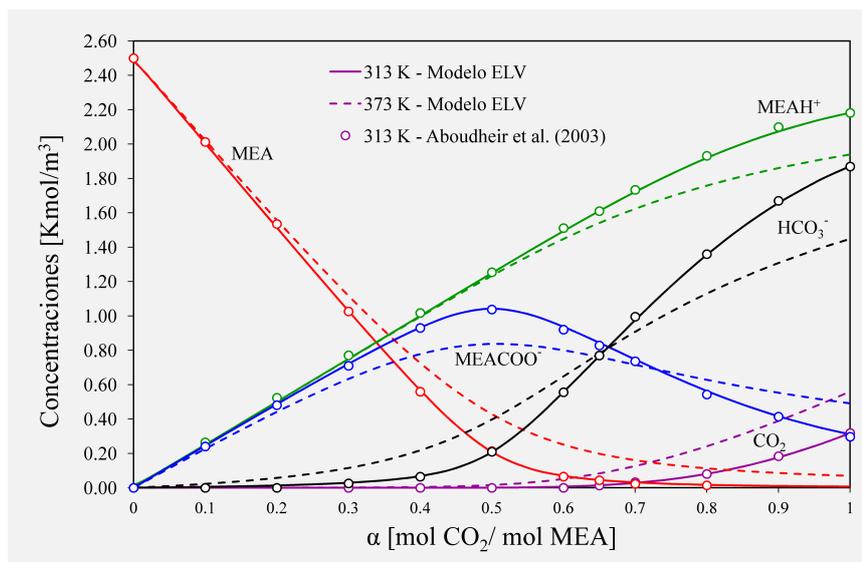


Figura 2.4 – Verificación del modelo de ELV por comparación con datos experimentales (Aboudheir et al., 2003): concentración de las especies en una solución 2.5 M de MEA en función de la carga de  $CO_2$  para 313 K y 373 K.

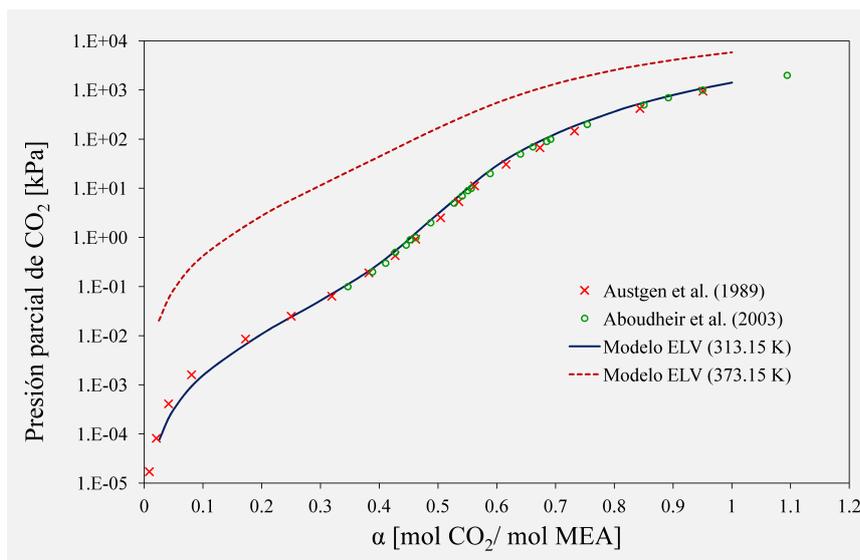


Figura 2.5 – Verificación del modelo de ELV por comparación con datos experimentales (Aboudheir et al., 2003; Austgen et al., 1989): presión parcial de  $\text{CO}_2$  en solución 2.5 M de MEA, a 313 K.

### 2.3.2. Verificación del modelo de la columna de absorción

Una vez verificado el modelo matemático propuesto para el equilibrio L-V, se procede con la verificación del modelo de la columna de absorción, esto es incluyendo los balances de materia y energía por etapas. Se utilizan como base de comparación los datos experimentales reportados por Alatiqi et al. (1994) y Tontiwachwuthikul et al. (1992). Además, resulta valorable introducir en la comparación los resultados obtenidos por el simulador Hysys, dado que es una herramienta ampliamente utilizada en otras investigaciones para simular el proceso de captura.

Solo con fines de validación, el modelo se ejecuta en modo simulación de manera predictiva, es decir que no se ajustan los parámetros a partir de los datos experimentales. Aquí, teniendo en cuenta los valores experimentales reportados, se fijan las variables necesarias para que los grados de libertad del sistema resulten cero.

Para esto se fijan, entre otras variables, las dimensiones de la columna (altura, diámetro) consideradas en las restricciones 2.23 y 2.44. Se debe tener presente que si bien los valores de dichas variables se asumen aquí fijos y conocidos, las mismas serán tratadas más adelante como variables de optimización; en otras palabras, dichos valores serán obtenidos como resultado del modelo, según se discutirá en los próximos capítulos.

Se comparan los resultados obtenidos utilizando el modelo riguroso (RB) y el modelo simplificado (EM) para dos caudales de gas diferentes. En el modelo de equilibrio (EM) se definen dos valores de eficiencia: 30 y 40 %. Además, en el modelo riguroso (RB) se emplean las correlaciones publicadas por Onda et al. (1968), Wilson (2004) y Bravo y Fair (1982) para determinar el área superficial de transferencia de materia.

***Caso 1. Caudal bajo (a escala de laboratorio)***

Las Tablas 2.9 y 2.10 resumen los parámetros del modelo utilizados para la comparación de resultados. Específicamente se definen las condiciones de entrada del solvente y del gas a tratar.

Tabla 2.9 – Condiciones operativas adoptadas de Tontiwachwuthikul et al. (1992) para la verificación del modelo de la columna de absorción.

		<b>Gases de combustión</b>	<b>Amina pobre</b>
Temperatura	[K]	288.15	292.15
Flujo molar	[mol/s]	0.14	1.03
H <sub>2</sub> O	[fracción molar]	0.10	0.94
CO <sub>2</sub>	[fracción molar]	0.19	0.00
MEA	[fracción molar]	0.00	0.06
N <sub>2</sub>	[fracción molar]	0.71	0.00
Presión	[kPa]	101.3	101.3

Tabla 2.10 – Especificaciones de diseño adoptadas de Tontiwachwuthikul et al. (1992) para la verificación del modelo de la columna de absorción.

Tipo de columna		empacada
Diámetro	[m]	0.10
Altura total del empaque	[m]	6.55
Número de etapas	-	10
Tipo de empaque	-	Sillas Berl (cerámica)
Area interfacial específica	[m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	545
Tamaño nominal del empaque	[m]	0.013
Fracción de huecos	-	0.65

En las Figuras 2.6 a 2.8 se comparan los resultados del modelo con siete puntos experimentales medidos a lo largo de la torre en términos de temperatura, composición en la fase gaseosa y composición en la fase líquida.

A partir de los resultados presentados, se concluye que:

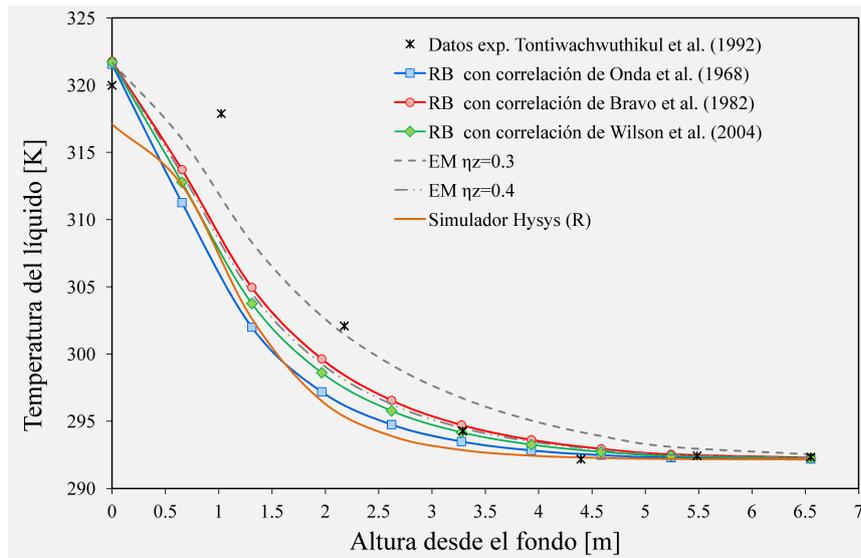


Figura 2.6 – Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Tontiwachwuthikul et al. (1992): perfil de temperatura.

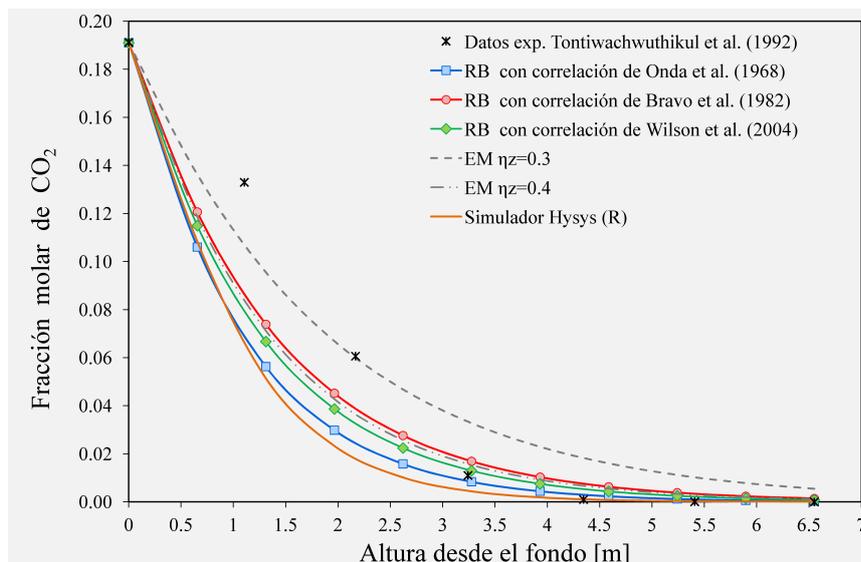


Figura 2.7 – Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Tontiwachwuthikul et al. (1992): perfil de composición de  $CO_2$  en el gas.

- No existe un único modelo que prediga satisfactoriamente los datos experimentales en toda la altura de la columna. En otras palabras, para una zona de la columna un tipo de modelo es preferido respecto al otro, y viceversa.
- Mediante el modelo simplificado con eficiencia de Murphree de 30% y el modelo riguroso que utiliza la correlación de Bravo y Fair (1982), en el fondo de la columna (de 0 a 2.1 m) se obtienen mejores resultados que con los otros modelos, tanto para el

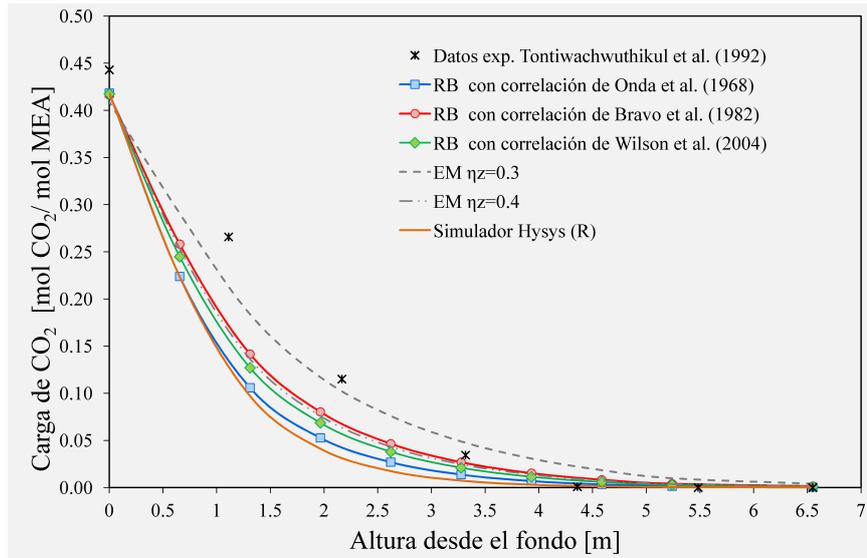


Figura 2.8 – Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Tontiwachwuthikul et al. (1992): perfil de composición de  $CO_2$  en el líquido.

perfil de temperatura de líquido como para el perfil de composición del gas (Figuras 2.6 y 2.7).

- Contrariamente al ítem anterior, todos los modelos, excepto el de EM=30 % estiman adecuadamente los perfiles de temperatura, composición de  $CO_2$  en el gas y carga de  $CO_2$  en el líquido desde los 2.1 m al tope de la columna (Figuras 2.6, 2.7 y 2.8).
- En la Figura 2.8 se puede observar con claridad que los valores de composición estimados (en la fase líquida), presentan la misma tendencia que los datos experimentales.

Finalmente, en la Tabla 2.11 se comparan los resultados obtenidos en los modelos propuestos en términos de temperatura de salida de líquido, carga de amina rica (mol  $CO_2$ /mol MEA) y composición (fracción molar) de la corriente de gases que se emite a la atmósfera. Como se puede observar, los valores estimados por todos los modelos son muy similares y muy cercanos a los datos experimentales reportados.

Los perfiles presentados en las Figuras 2.6 a 2.8 muestran que tanto el modelo riguroso (RB) como el modelo simplificado (EM) estiman satisfactoriamente los datos experimentales. Este hecho es sumamente importante desde el punto de vista del modelo

Tabla 2.11 – Comparación de los resultados del modelo de la columna de absorción con datos experimentales (Tontiwachwuthikul et al., 1992).

	Exp.	Sim. Com.	Modelos rigurosos			Modelos de equilibrio	
	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]	[6]	[7]
Temperatura de salida de líquido [K]	320.15	317.09	321.559	321.781	321.715	321.691	321.761
$\alpha$ (amina rica)	0.4430	0.4190	0.4180	0.4160	0.4170	0.4090	0.4170
Conc. de CO <sub>2</sub> en el gas de salida [fracción molar]	0.0000	6.30x10 <sup>-5</sup>	3.5x10 <sup>-4</sup>	1.4x10 <sup>-3</sup>	8.52x10 <sup>-4</sup>	5.5x10 <sup>-3</sup>	1.2x10 <sup>-3</sup>
CO <sub>2</sub> absorbido [mol/s]	0.0268	2.67x10 <sup>-2</sup>	0.0267	0.0265	0.0266	0.0261	0.0266

[1] Datos experimentales. Tontiwachwuthikul et al. (1992); [2] Hysys; [3] Modelo riguroso con correl. de Onda et al. (1968); [4] Modelo riguroso con correl. de Bravo et al. (1982); [5] Modelo riguroso con correl. de Wilson et al. (2004); [6] Modelo simplificado.  $\eta=0.3$ ; [7] Modelo simplificado.  $\eta=0.4$

matemático y la complejidad del problema resultante, pues, a la hora de su resolución, se prefiere el modelo simplificado ya que su menor tamaño reduce el esfuerzo computacional requerido. Sin embargo, debe remarcarse que el modelo riguroso (RB) se prefiere cuando se pretende una mayor comprensión acerca de los mecanismos de transferencia de materia, energía y cantidad de movimiento. Así, el tipo de modelo a utilizar dependerá principalmente de los objetivos y propósitos del usuario.

### *Caso 2. Caudal medio (a escala de planta piloto)*

Como se mencionó previamente, el modelo fue usado para estimar la performance de dos unidades absorción a escala piloto. Los datos operativos y de diseño se resumen en las Tablas 2.12 y 2.13. Los mismos corresponden a las unidades de absorción que se encuentran en operación en Kuwait, y que pertenecen a la Compañía Nacional de Petróleo (*KNPC*) y a la Compañía de Industrias Petroquímicas (*PIC*) (Alatqi et al., 1994).

Las Figuras 2.9 y 2.10 presentan la comparación de los resultados del modelo con datos experimentales en términos de temperatura y composición en la fase líquida. De las mismas se puede observar que los perfiles de temperatura y carga de CO<sub>2</sub> estimados por el modelo riguroso, utilizando la correlación de Onda et al. (1968), son muy similares a los publicados por Alatqi et al. (1994). La comparación también indica que la correlación utilizada para determinar el área interfacial efectiva influye fuertemente en los resultados. Por ejemplo, los resultados obtenidos a partir del empleo de la correlación de Wilson (2004), se estiman

Tabla 2.12 – Condiciones operativas adoptadas de Alatiqi et al. (1994) para la verificación del modelo de la columna de absorción.

	KNPC		PIC	
	Gases de combustión	Amina pobre	Gases de combustión	Amina pobre
Temperatura [K]	322.05	310.95	316.15	314.15
Flujo molar [kmol/h]	3338.85	18984.79	2656.21	22478.1
H <sub>2</sub> O [%, base molar]	0.73	92.61	0.48	93.11
CO <sub>2</sub> [%, base molar]	15.99	0.56	19.84	0.84
MEA [%, base molar]	0.00	6.83	0.00	6.15
N <sub>2</sub> [%, base molar]	83.29	0.00	79.67	0.00
Presión [kPa]	1482	1482	1819	1819

Tabla 2.13 – Variables de diseño y especificaciones adoptadas de Alatiqi et al. (1994) para la verificación del modelo de la columna de absorción.

	KNPC	PIC
Tipo de columna	empacada	empacada
Diámetro [m]	2.74	2.44
Altura total del empaque [m]	14.63	24.15
Número de etapas	10	10
Tipo de empaque	Sillas Intalox (cerámica)	Sillas Intalox (cerámica)
Area interfacial específica [m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	625	625
Tamaño nominal del empaque [m]	0.05	0.05
Fracción de huecos	0.78	0.78

apropiadamente desde el tope de la columna (0 m) hasta los 10 m. Los modelos rigurosos con las correlaciones de Bravo y Fair (1982) y ambos modelos de equilibrio (EM=30 % y EM=40 %) sobreestiman significativamente los valores reportados por Alatiqi et al. (1994).

En la Tabla 2.14 se presentan algunos datos adicionales a partir de los cuales se pueden realizar las siguientes observaciones:

- La temperatura del líquido que se obtiene usando el modelo de Wilson es muy similar al dato reportado por Alatiqi et al. (1994).
- Los resultados del modelo riguroso basado en la correlación de Onda se ajustan adecuadamente al perfil de temperatura en el interior de la columna, subestimando los valores reales en el extremo (-3.4 K). Por otro lado, los resultados del modelo de equilibrio, para ambos valores de eficiencia, subestiman los datos reales en +3 K.

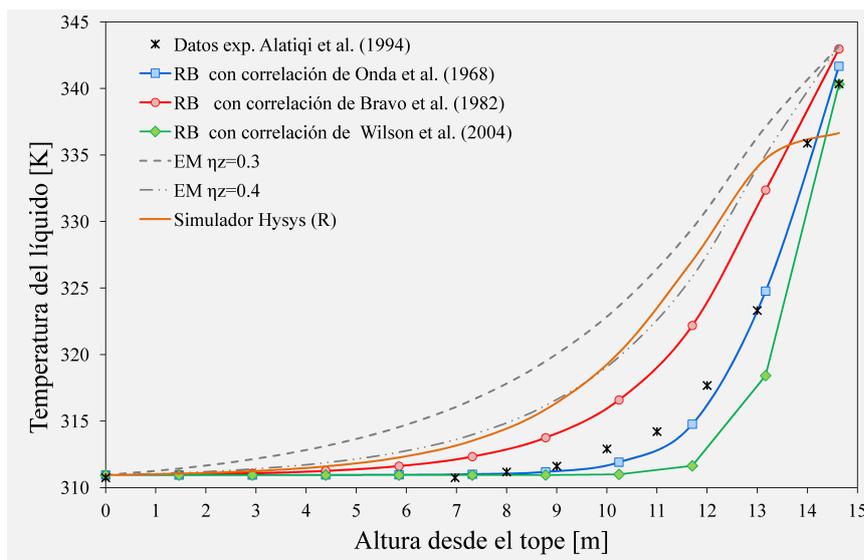


Figura 2.9 – Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Alatiqi et al. (1994), KNPC: perfil de temperatura.

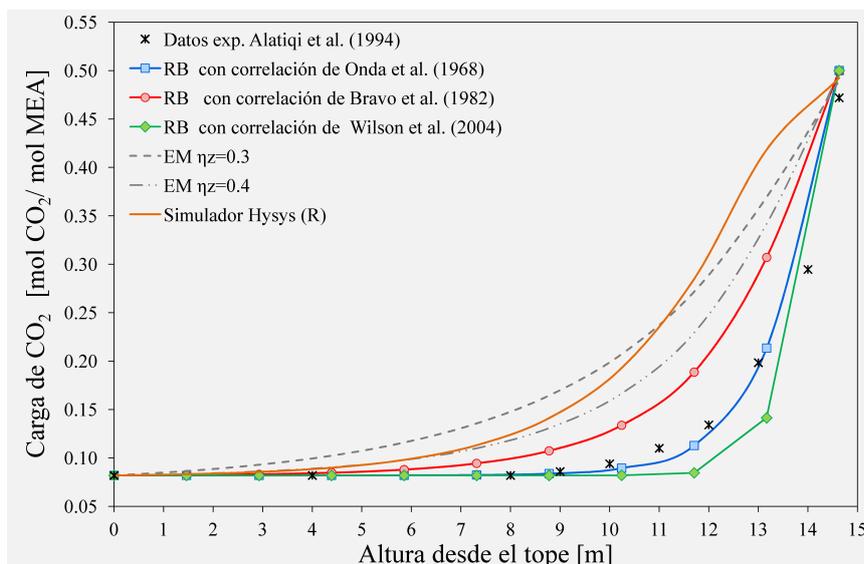


Figura 2.10 – Verificación del modelo de la columna de absorción por comparación con los datos reportados por Alatiqi et al. (1994), KNPC: perfil de composición de  $CO_2$  en el líquido.

- Los modelos que emplean las correlaciones de Onda y Wilson se ajustan apropiadamente a los datos experimentales de composición de  $CO_2$ .

Finalmente, en la Tabla 2.15 se comparan los resultados del modelo con la segunda unidad de absorción (PIC). Las conclusiones son similares a las obtenidas para el caso anterior (KNPC). Alatiqi et al. (1994) no reportaron los datos de los perfiles internos, por lo cual, la comparación se realiza fundamentalmente en función de los resultados estimados

Tabla 2.14 – Comparación de los resultados del modelo de la columna de absorción con datos experimentales (KNPC, Alatiqi et al. (1994)).

	Exp. [1]	Modelo riguroso [2]	Simul. Com. [3]	Modelo riguroso			Modelo de equilibrio	
				[4]	[5]	[6]	[7]	[8]
Temperatura de salida de gas [K]	322.050	323.050	311.029	310.950	310.995	310.950	311.438	311.120
Temperatura de salida de líquido [K]	-	340.350	336.670	336.980	342.973	340.323	343.176	343.285
$\alpha$ (amina rica)	-	0.4720	0.4928	0.5000	0.4996	0.5000	0.4895	0.4977
Conc. de CO <sub>2</sub> en el gas de salida [frac. mol]	<0.0001	8.90x10 <sup>-7</sup>	5.07x10 <sup>-4</sup>	7.48x10 <sup>-7</sup>	1.87x10 <sup>-4</sup>	5.51x10 <sup>-7</sup>	4.78x10 <sup>-3</sup>	1.06x10 <sup>-3</sup>
Conc. de H <sub>2</sub> O en el gas de salida [frac. mol]	<0.00045	4.34x10 <sup>-3</sup>	4.43x10 <sup>-3</sup>	4.72x10 <sup>-3</sup>	4.73x10 <sup>-3</sup>	4.72x10 <sup>-3</sup>	4.85x10 <sup>-3</sup>	4.76x10 <sup>-3</sup>
CO <sub>2</sub> recuperado [mol/s]	-	148.2041	148.5964	150.5061	150.3595	150.63	146.7249	149.6669

[1] Datos experimentales (KNPC). Alatiqi et al. (1994); [2] Modelo riguroso. Alatiqi et al. (1994); [3] Hysys; [4] Modelo riguroso con correl. de Onda et al. (1968); [5] Modelo riguroso con correl. de Bravo et al. (1982); [6] Modelo riguroso con correl. de Wilson et al. (2004); [7] Modelo simplificado.  $\eta=0.3$ ; [8] Modelo simplificado.  $\eta=0.4$

por el modelo riguroso desarrollado en el trabajo de referencia (columna 2 de la Tabla 2.15).

- Los valores de temperatura de salida de gas estimados en todos los modelos son muy similares (alrededor de 314 K), y en todos los casos son de alrededor de 2 K menores al valor de referencia (alrededor de 316 K). Una conclusión semejante se observa para la temperatura de salida de la corriente líquida rica en CO<sub>2</sub> y su composición (expresada en mol CO<sub>2</sub>/mol MEA).
- La cantidad de dióxido de carbono recuperada es similar para todos los casos, con excepción del modelo de equilibrio con EM=30 %, que es levemente menor.

En conclusión, los resultados indican que el modelo riguroso utilizando la correlación de Onda es más adecuado que los modelos que emplean las correlaciones de Bravo y Wilson,

Tabla 2.15 – Comparación de los resultados del modelo de la columna de absorción con datos experimentales (PIC, Alatiqi et al. (1994)).

	Exp. [1]	Modelo riguroso [2]	Simul. Com. [3]	Modelo riguroso			Modelo de equilibrio	
				[4]	[5]	[6]	[7]	[8]
Temperatura de salida de gas [K]	316.150	317.850	314.322	314.194	314.295	314.223	314.505	314.270
Temperatura de salida de líquido [K]	-	334.150	333.639	339.989	340.210	340.098	340.128	340.186
$\alpha$ (amina rica)	-	0.4810	0.5435	0.4995	0.4975	0.4990	0.4911	0.4981
Conc. de CO <sub>2</sub> en el gas de salida [frac. molar]	-	7.80x10 <sup>-7</sup>	1.99x10 <sup>-3</sup>	3.41x10 <sup>-4</sup>	1.63x10 <sup>-3</sup>	6.52x10 <sup>-4</sup>	5.77x10 <sup>-3</sup>	1.26x10 <sup>-3</sup>
Conc. de H <sub>2</sub> O en el gas de salida [frac. molar]	4.80x10 <sup>-3</sup>	3.36x10 <sup>-3</sup>	4.39x10 <sup>-3</sup>	4.73x10 <sup>-3</sup>	4.75x10 <sup>-3</sup>	4.74x10 <sup>-3</sup>	4.81x10 <sup>-3</sup>	4.75x10 <sup>-3</sup>
CO <sub>2</sub> recuperado [mol/s]	-	146.3097	145.2129	146.3895	145.4281	146.0060	142.9615	145.6450

[1] Datos experimentales (PIC). Alatiqi et al. (1994); [2] Modelo riguroso. Alatiqi et al. (1994); [3] Hysys; [4] Modelo riguroso con correl. de Onda et al. (1968); [5] Modelo riguroso con correl. de Bravo et al. (1982); [6] Modelo riguroso con correl. de Wilson et al. (2004); [7] Modelo simplificado.  $\eta=0.3$ ; [8] Modelo simplificado.  $\eta=0.4$

cuando el objetivo consiste en el estudio de la absorción de CO<sub>2</sub> a lo largo de la columna. Así, el primero puede ser usado para el análisis del comportamiento dinámico y control del proceso de absorción. Sin embargo, el modelo riguroso basado en la correlación de Wilson es muy apropiado a la hora de estimar las condiciones de las corrientes que abandonan la columna.

En contraste con el Caso 1 (caudal bajo), los resultados obtenidos muestran que en el estudio del fenómeno de absorción, los modelos rigurosos prevalecen sobre los modelos de equilibrio.

## 2.4. Diseño óptimo de la columna de absorción

### 2.4.1. Formulación del problema de optimización

Desde el punto de vista matemático, un problema de optimización (P1) puede definirse formalmente de la siguiente manera:

$$\text{mín } f(x) \quad (\text{P1})$$

$$\text{s.a. } h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

$$x \in X \subseteq R^n$$

donde  $x$  representa al vector de variables continuas del modelo;  $f(x)$  es la función objetivo a maximizar o minimizar;  $h(x)$  representa la totalidad de restricciones de igualdad (balances de materia, balances de energía, balances de cantidad de movimiento, correlaciones para la determinación de propiedades físico-químicas, etc.) y, finalmente,  $g(x)$  define el conjunto de restricciones de desigualdad utilizadas para establecer restricciones técnicas, especificaciones de diseño, límites superiores e inferiores en algunas de las variables, etc.

En particular, el problema de optimización desarrollado en esta sección, se formula de la siguiente manera:

Dadas las condiciones de gas exhausto (caudal, presión, temperatura y composición) y la composición de amina (30 % p/p), el objetivo consiste en determinar las condiciones operativas y de diseño óptimas que resulten de maximizar la cantidad de  $CO_2$  capturada por unidad de volumen de empaque. La función objetivo se define por la Ecuación (2.86). Las restricciones que definen el sistema se describen mediante los balances de materia y energía (Ec. 2.1 a 2.6), equilibrio líquido-vapor (Ec. 2.7 a 2.22), dimensionamiento de la columna, mínimo caudal de humedecimiento y caída de presión (Ec. 2.23 a 2.63) y propiedades físico-químicas (Ec. 2.64 a 2.85). En la Tabla 2.16 se indican los parámetros operativos y las características del empaque adoptados para el análisis.

Se emplea el modelo riguroso (RB) con la correlación de Onda et al. (1968) para obtener los valores óptimos de las principales variables del proceso (caída de presión, diámetro de la columna, volumen de empaque, cantidad de  $CO_2$  capturada, temperaturas de salida,

perfiles internos de temperatura y composición, etc.).

Tabla 2.16 – Diseño óptimo. Especificaciones de entrada al modelo.

<b>Gases de combustión</b>		
Temperatura	[K]	303.15
Flujo molar	[mol/s]	10000
H <sub>2</sub> O	[fracción molar]	0.0845
CO <sub>2</sub>	[fracción molar]	0.0422
MEA	[fracción molar]	0.0000
O <sub>2</sub>	[fracción molar]	0.1166
N <sub>2</sub>	[fracción molar]	0.7567
Presión	[kPa]	101.3
<b>Amina pobre</b>		
Temperatura	[K]	313.15
Flujo molar	[mol/s]	20000; 25000; 30000
Composición de amina	[fracción másica]	0.30
Carga de CO <sub>2</sub>	[mol CO <sub>2</sub> /mol MEA]	0.15 a 0.35
<b>Características de la columna</b>		
Tipo de empaque	-	Sillas Intalox de cerámica
Diámetro del empaque	[m]	0.05
Área característica	[m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	118
Factor de empaque seco	[m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	121.4
Fracción de huecos	-	0.76
Tensión superficial crítica	[N/m]	0.061
Número de etapas	-	10

$$FO_1 = \frac{G_Z y_{CO_2} z / G_{in}^{cap} y_{in}^{cap} CO_2}{\sum_{z=1}^Z h_z \pi \left( \frac{DT_z^2}{4} \right)} \quad (2.86)$$

De acuerdo a la bibliografía general, el valor del diámetro de la torre de absorción depende fuertemente del caudal y composición del gas a tratar, mientras que la altura depende, fundamentalmente, del nivel de captura que se desea alcanzar. En este caso, la altura y el diámetro, calculados a partir de las Ecuaciones 2.23 a 2.34 y 2.44, se consideran como variables de optimización. De esta manera, para lograr una recuperación máxima, la altura de la torre tiende a ser tan grande como el modelo se lo permita (mediante la restricción de tamaño definida en la Ec. 2.59) y al mismo tiempo, el sistema tiende a emplear la mayor cantidad de solvente. De esta forma, y con el objeto de analizar el desempeño de la columna de absorción frente a diferentes condiciones operativas, se varía la carga de CO<sub>2</sub>

en la corriente de alimentación de amina, la relación altura/diámetro (H/D) y la relación de flujos (L/G).

Se plantea además una segunda función objetivo (Ec. 2.87) con el fin de analizar el caudal mínimo requerido a diferentes cargas de  $CO_2$  y relaciones de tamaño.

$$FO_2 = \frac{G_{ZYCO_2} z / G_{in}^{cap} y_{in}^{cap} CO_2}{L_{in}^{cap} / G_{in}^{cap}} \quad (2.87)$$

A continuación se presenta el análisis de los resultados obtenidos a partir de la optimización según los diferentes casos de estudio.

## 2.4.2. Diseño óptimo. Análisis y discusión de resultados

**Caso 1. Influencia de las relaciones de dimensión (H/D), flujos (L/G) y la carga de  $CO_2$  ( $\alpha_L$ ) en las principales variables del sistema cuando se maximiza la cantidad de  $CO_2$  capturada por unidad de volumen de empaque ( $FO_1$ )**

En el análisis de resultados que se presenta a continuación, se debe tener en cuenta que en el modelo propuesto, la altura y el diámetro se consideran como variables de optimización. Como es de esperar, en todos los casos la relación entre la altura y el diámetro (H/D) alcanza los límites inferiores propuestos (1.5 y 2) de acuerdo a la restricción 2.59 ya que, explícitamente se pide minimizar el volumen ( $FO_1$ ). De forma similar, el caudal de solvente, acotado superiormente en 2.0, 2.5 y 3.0, alcanza su valor máximo, con el fin de maximizar la recuperación. Por su parte,  $\alpha_L$  se varía sistemática y paramétricamente en un rango comprendido entre 0.15 y 0.35 mol de  $CO_2$ /mol de MEA.

Cabe aclarar además, que las relaciones adoptadas se encuentran dentro del rango de valores comúnmente utilizados en este tipo de procesos. Por ejemplo, Rochelle (2003) y Fisher et al. (2005) reportaron una relación entre la altura y el diámetro igual a 2.15, mientras que en FETC (1999),  $H/D = 4.2$ ; en estudios de planta piloto, Mangalapally y Hasse (2011) variaron la relación de caudales (L/G) entre 0.66 y 2.64 (base másica) y Yokoyama (2012) lo hizo entre 3 y 6 ( $m^3/l$ ). Por otro lado, Abu-Zahra et al. (2007a), trabajaron en el siguiente rango de composiciones:  $0.16 \leq \alpha_L \leq 0.38$  obtenido por variación del grado de regeneración (20, 30, 40, 50 y 60 %); Rao y Rubin (2006) adoptaron  $\alpha_L = 0.20$ ,

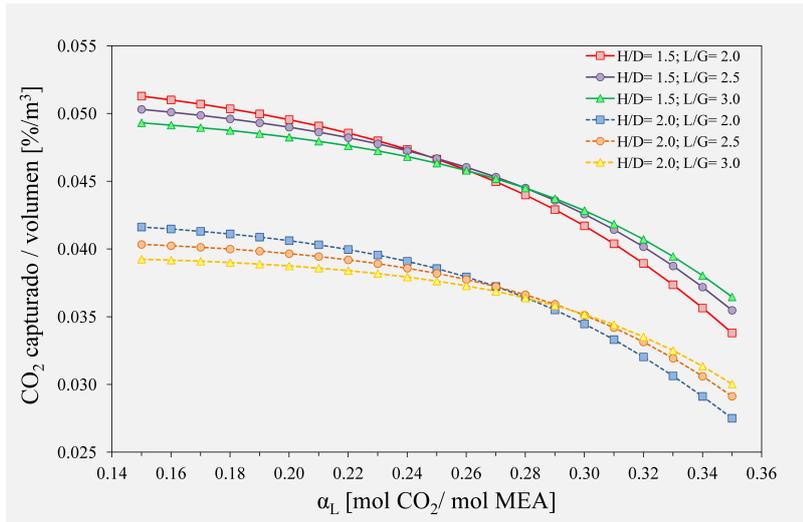
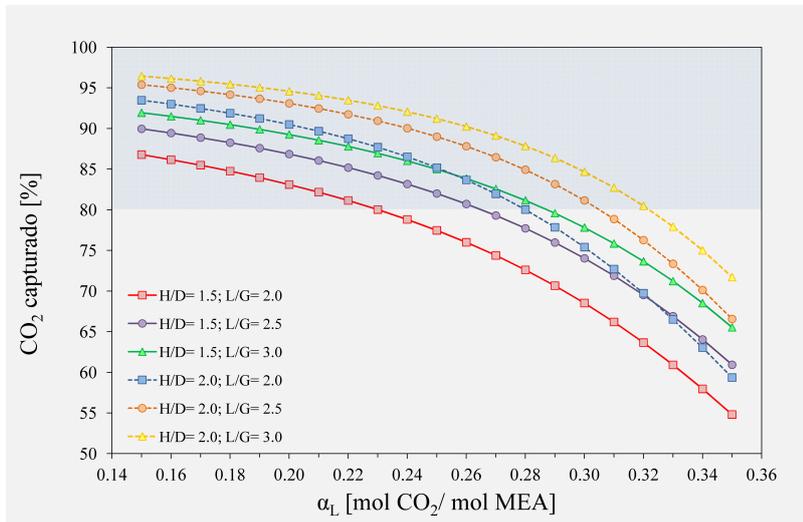
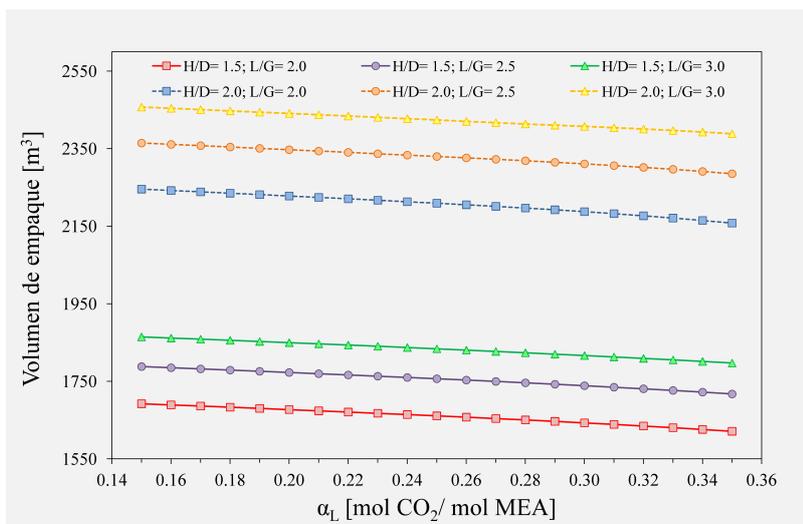
en Karimi et al. (2011a)  $\alpha_L = 0.30$ , en Rao y Rubin (2002)  $0.15 \leq \alpha_L \leq 0.30$  y en Simon et al. (2011)  $\alpha_L = 0.34$ . Si bien se citan algunos valores, es importante aclarar que corresponden a diferentes composiciones de gas (asociadas directamente al tipo de combustible empleado), caudales, tamaños de equipos, etc. Solo se mencionan aquí como referencia, y con el objeto de seleccionar condiciones operativas que permitan realizar el análisis dentro de un rango probable y amplio.

En la Figura 2.11 se ilustran los valores óptimos correspondientes a la función objetivo  $FO_1$  (Fig. 2.11a), el porcentaje de captura de  $CO_2$  (Fig. 2.11b) y el volumen total del empaque (Fig. 2.11c) para diferentes valores de carga de  $CO_2$  ( $\alpha_L$ ), relación entre la altura y el diámetro máxima (H/D) y relación de flujos (L/G).

Las tres variables disminuyen con el aumento de la concentración de  $CO_2$  en el solvente. En la Figura 2.11b se observa que en el rango de  $0.15 \leq \alpha_L \leq 0.25$ , un aumento en la relación de flujo y en la relación de tamaños produce una mejora en la eficiencia de captura. Para valores superiores de  $\alpha_L$ , se mantiene esta tendencia solo para algunas combinaciones de H/D y L/G: H/D=1.5 y L/G=2, H/D=2 y L/G=2.5, H/D=2 y L/G=3, mientras que para otras combinaciones, dicha tendencia no se cumple en forma estricta. Por ejemplo, en  $\alpha_L = 0.25$  tanto para las combinaciones de L/G=2 y H/D=2 como para L/G=3 y H/D=1.5 se obtienen recuperaciones muy similares (aprox. 85 %). Lógicamente y debido a la relación de compromiso existente entre el tamaño de las columnas y el flujo de solvente, el volumen requerido con la combinación L/G=2 y H/D=2 es 17 % mayor que para L/G=3 y H/D=1.5 (Figura 2.11c). Por otra parte, se puede observar que para obtener recuperaciones superiores al 80 % se requieren cargas inferiores a 0.23 para H/D=1.5 y L/G=2 mientras que para H/D=2 y L/G=3 la carga puede llegar a 0.32 (Figura 2.11b). Los volúmenes de empaque en cada caso son respectivamente 1661 y 2424  $m^3$  (Figura 2.11c).

En las Figuras 2.12 y 2.13 se ilustran los valores óptimos del diámetro y de la caída de presión para cada valor de  $\alpha_L$ , L/G y H/D. Se observa que el diámetro de la columna [m] disminuye casi linealmente al aumentar la carga de  $CO_2$ , mientras que la caída de presión por unidad de altura [Pa/m] aumenta. Por otra parte, para un valor dado de  $\alpha_L$  y relación de tamaño (H/D), el diámetro de la columna aumenta con el incremento de la relación

---

(a) Función objetivo ( $FO_1$ )(b) Nivel de captura de  $CO_2$ 

(c) Volumen requerido de empaque

Figura 2.11 – Diseño óptimo. Caso 1: función objetivo, cantidad de  $CO_2$  capturada y volumen de empaque.

de flujo y la caída de presión disminuye a medida que aumenta el valor de dicho cociente (L/G). Por ejemplo, para  $\alpha_L = 0.25$ , H/D=1.5 y L/G=2.0, el diámetro óptimo es 11.21 m y la caída de presión es de 652.3 Pa/m, mientras que para L/G=3.0, el diámetro es 3.25 % mayor y la caída de presión es 11.37 % menor (11.6 m y 585.7 Pa/m).

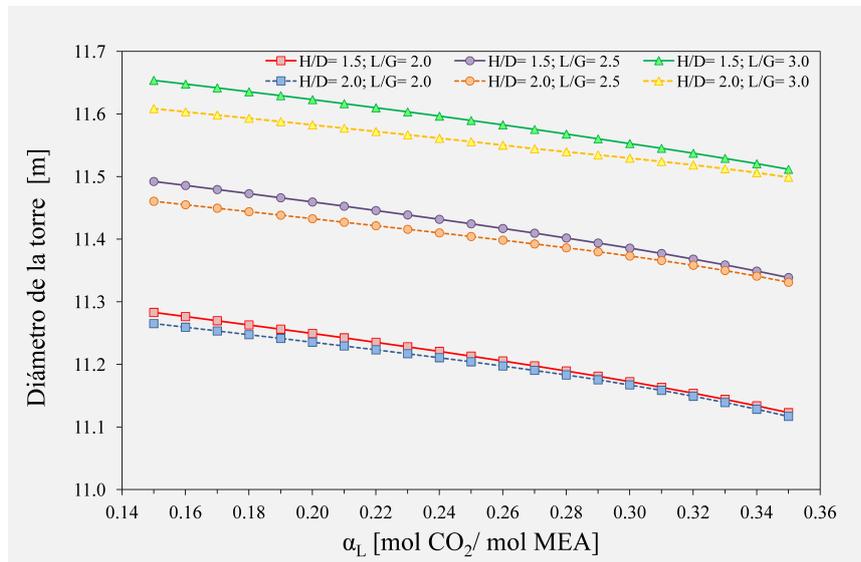


Figura 2.12 – Diseño óptimo. Caso 1: diámetro de la columna en función de la carga de  $CO_2$  ( $\alpha_L$ ).

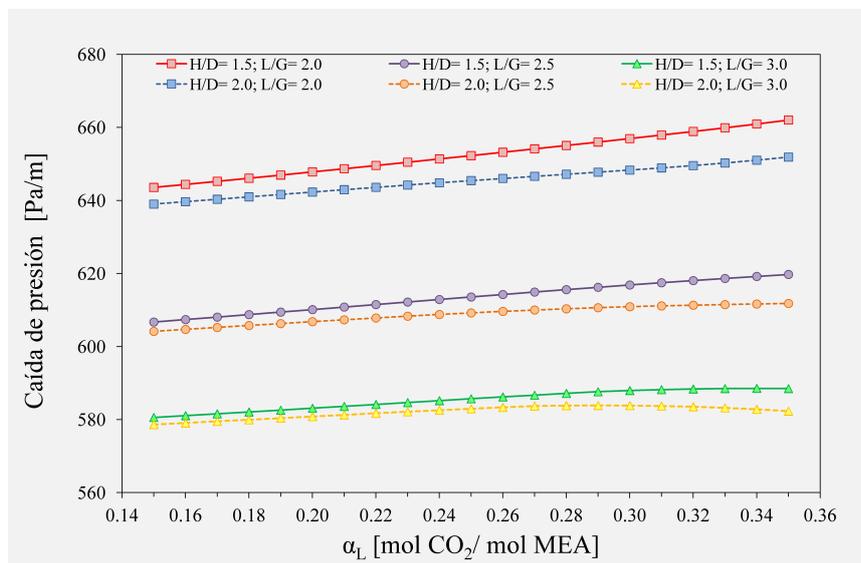


Figura 2.13 – Diseño óptimo. Caso 1: caída de presión en función de la carga de  $CO_2$  ( $\alpha_L$ ).

En la Figura 2.14 se presentan los valores óptimos de temperatura y composición del solvente enriquecido a la salida de la columna. Según se observa en la Figura 2.14a, la temperatura disminuye con el aumento de la carga de  $CO_2$  en el líquido que ingresa a la

absorbedora. Para un valor dado de  $\alpha_L$  y de relación de tamaño, la temperatura de salida aumenta con el incremento de la relación de flujo ( $L/G$ ). Específicamente, en  $\alpha_L = 0.25$ ,  $H/D=1.5$  y  $L/G=2.0$ , la temperatura óptima es 321.1 K mientras que para  $L/G=3.0$  la temperatura es 323 K. No debe perderse de vista que en este capítulo se está analizando solo la absorbedora y que estas variables están fuertemente vinculadas con la etapa de regeneración. Por ejemplo, una menor temperatura de la corriente de solvente que sale del fondo de la absorbedora, se traduce en la necesidad de un mayor aporte térmico para llevar dicha corriente a la temperatura requerida para alimentar la columna regeneradora y, consecuentemente, el área requerida para el intercambiador de calor [I1] también aumenta, según se indica en el diagrama de flujo del proceso (Fig. 1.2).

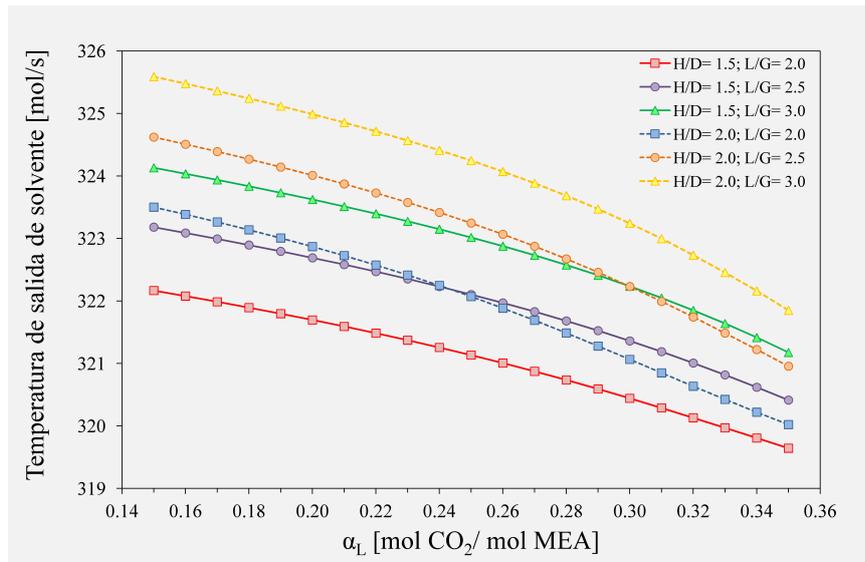
Por el contrario, la cantidad del contaminante en la corriente líquida que egresa aumenta con el aumento de  $\alpha_L$  (Figura 2.14b), lo que es acorde con la menor recuperación observada en la Figura 2.11b.

Finalmente, en las Figuras 2.15 y 2.16 se presentan los perfiles internos de temperatura y composición a lo largo de la columna, en términos de relaciones de tamaño y relaciones de caudal para una carga inicial  $\alpha_L = 0.25$ . En la Figura 2.15a se observa un perfil de flujo de  $CO_2$  en la fase gaseosa similar para todos los casos analizados, el cual disminuye a medida que aumenta la altura de la columna. Sin embargo, el flujo total de gas (Figura 2.15b) presenta valores máximos en las cercanías de las zonas de mayor temperatura (Figura 2.16a). Este hecho está directamente asociado a la presencia a una mayor cantidad de vapor de agua en la corriente gaseosa, donde la temperatura es máxima (debido a una mayor evaporación).

Se encuentran valores máximos de temperatura en el centro de cada columna o desplazado levemente hacia los lados (Figura 2.16a).

Por otra parte, la composición de  $CO_2$  en la fase líquida aumenta desde el tope hacia el fondo (Figura 2.16b); la mayor concentración del contaminante en el solvente ( $\alpha_R = 0.4080$ ) se obtiene para las relaciones  $L/G = 2$  y  $H/D = 2$ , mientras que el valor mínimo ( $\alpha_R = 0.3550$ ) se obtiene para las relaciones  $L/G = 3$  y  $H/D = 1.5$ . Si bien el valor de  $\alpha_R$  es 13 % menor que en el primer caso, la recuperación alcanzada es solo 0.23 % menor debido a que se compensan las relaciones entre el tamaño de la columna y el caudal de amina empleado

---



(a) Temperatura de salida de amina

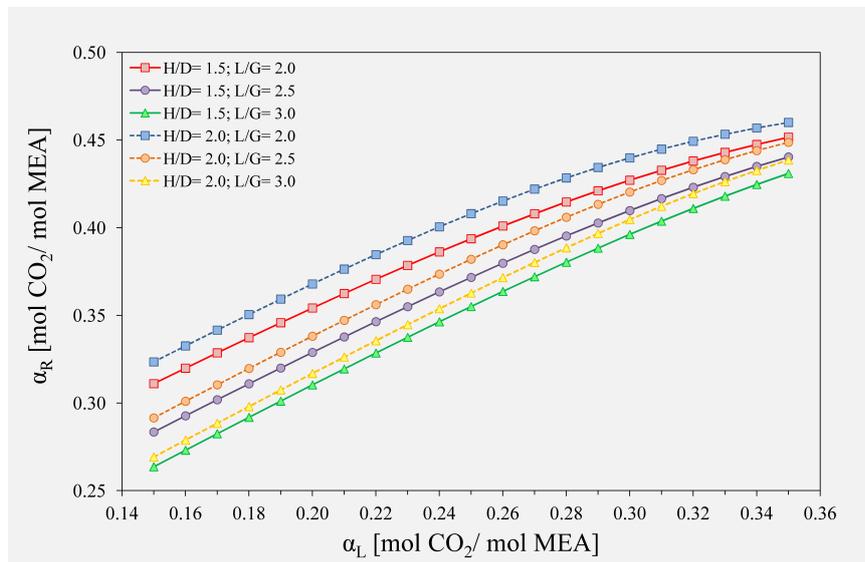
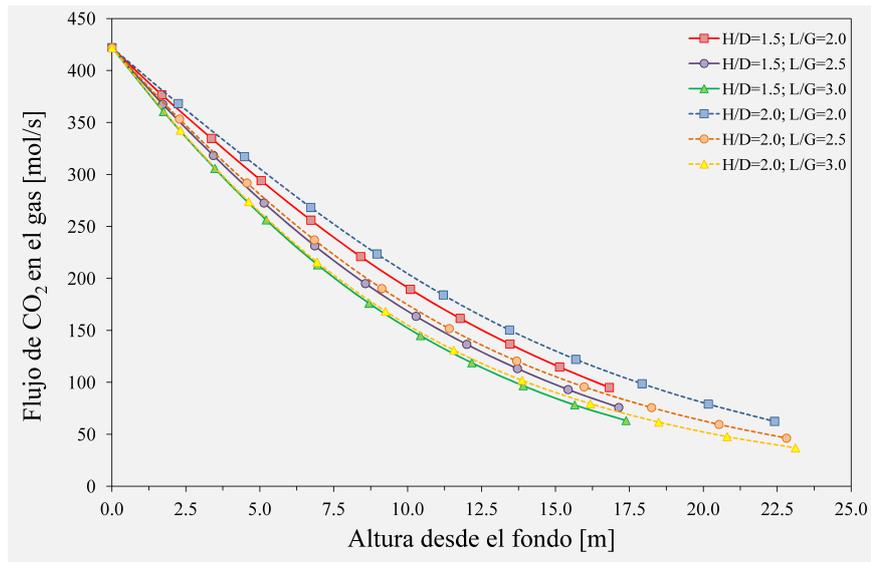
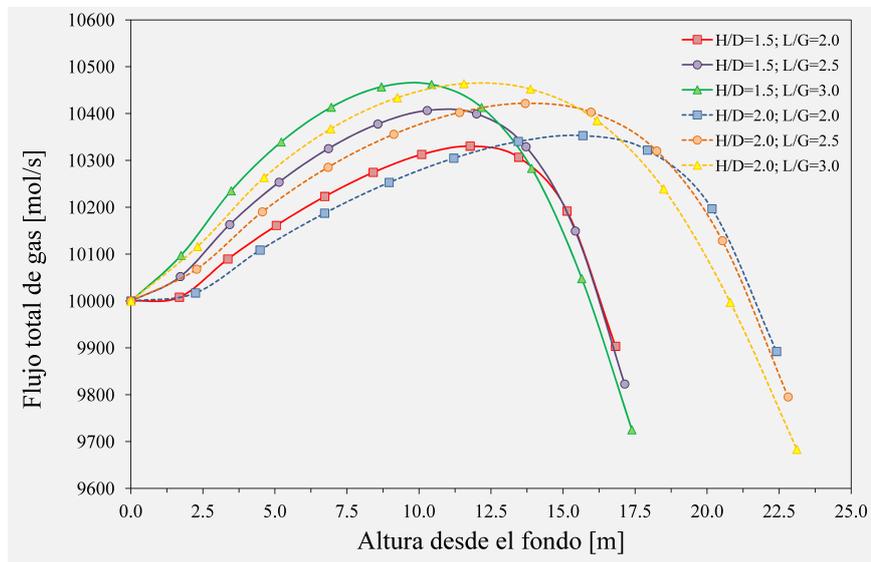
(b) Composición de  $CO_2$  en el líquido

Figura 2.14 – Diseño óptimo. Caso 1: temperatura y composición en el fondo de la columna de absorción.

para lograr una recuperación determinada (Observar Figura 2.11).

**Caso 2. Influencia de la carga de  $CO_2$  y las relaciones de dimensiones ( $H/D$ ) cuando se optimiza la cantidad de  $CO_2$  capturada por unidad de flujo de amina ( $FO_2$ )**

Como se indicó en el planteo del problema, se define una nueva función objetivo (Ec. 2.87) con el fin de analizar el caudal mínimo requerido a diferentes cargas de  $CO_2$  y

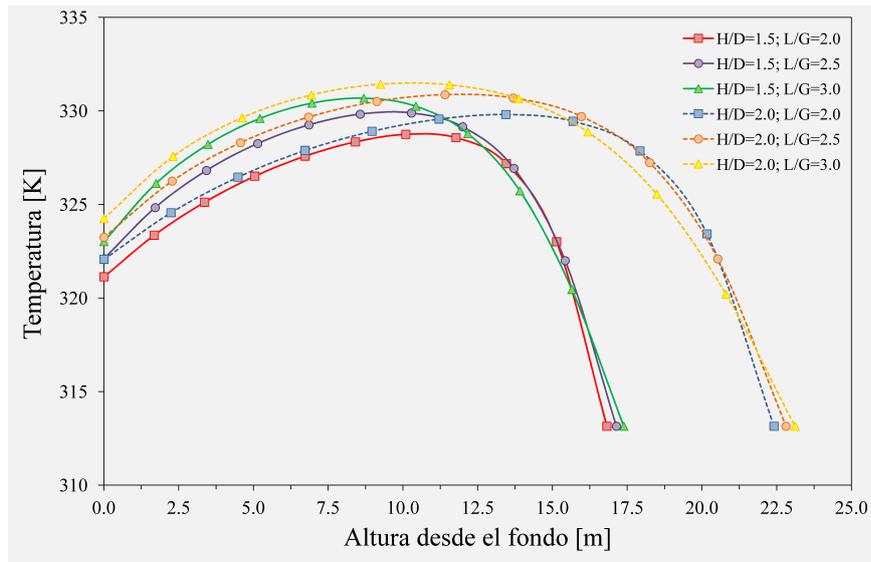
(a) Composición de  $CO_2$  en la fase gaseosa a través de la columna.

(b) Flujo de gas a través de la columna.

Figura 2.15 – Diseño óptimo. Caso 1: perfiles internos de flujo y composición de la corriente gaseosa.

relaciones de tamaño.

Al maximizar la cantidad de  $CO_2$  absorbida por unidad de flujo de solvente, se obtiene el mínimo caudal requerido para cada nivel de composición, y la relación de alturas alcanza el máximo valor estipulado en el modelo. La Figura 2.17 ilustra la función objetivo, la cantidad de  $CO_2$  capturada (expresada en porcentaje) y la relación óptima de flujos, respectivamente. Como se puede observar, la función objetivo y sus elementos componentes (recuperación de  $CO_2$  y caudal de amina) disminuyen con el aumento de la carga de  $CO_2$  en el solvente. Un



(a) Temperatura del líquido a través de la columna.

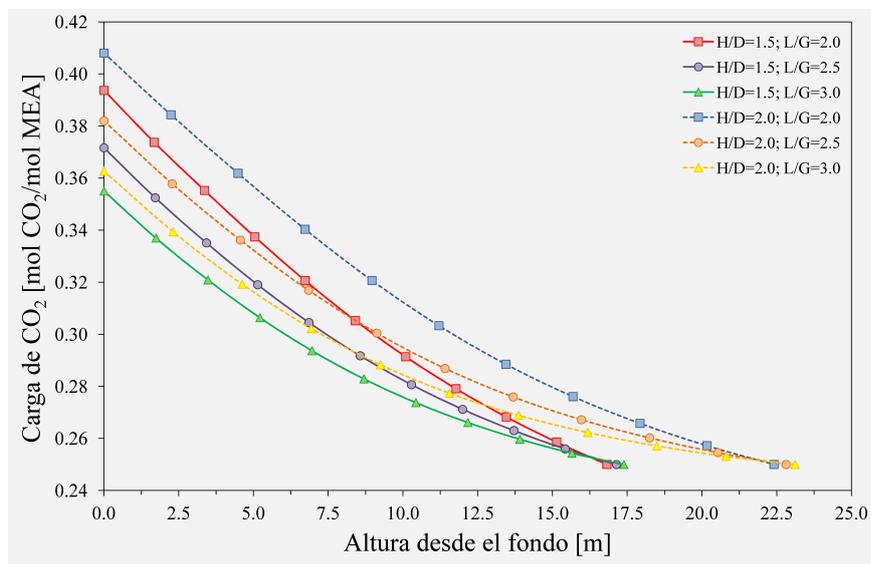
(b) Composición de  $CO_2$  en la fase líquida a través de la columna.

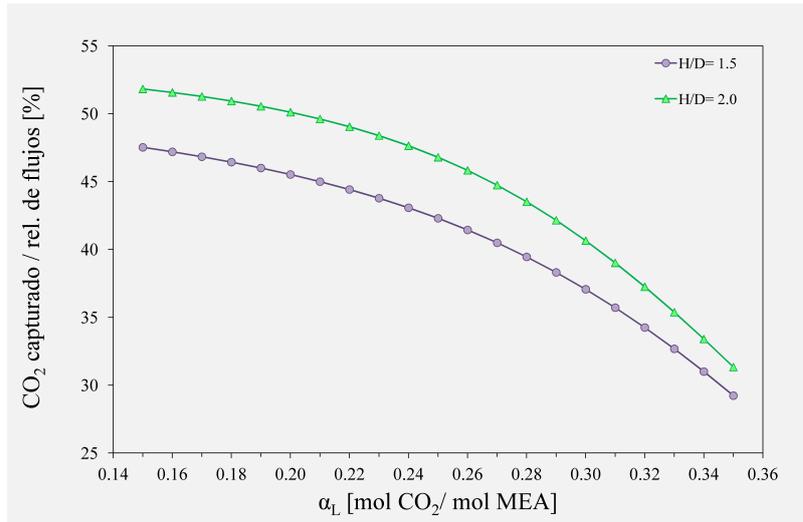
Figura 2.16 – Diseño óptimo. Caso 1: perfiles internos de temperatura y composición en el líquido.

nivel de recuperación de 80 %, que es el mínimo requerido para una columna de absorción, se alcanza con valores de  $\alpha_L \leq 0.26$  para las columnas más altas ( $H/D=2.0$ ) y con valores de  $\alpha_L \leq 0.20$  para las columnas más bajas ( $H/D=1.5$ ). Por otra parte, en columnas más altas se requieren caudales algo inferiores que para las columnas más bajas, aun cuando la recuperación obtenida es mayor en todo el rango de cargas de  $CO_2$  analizado. Para  $\alpha_L \geq 0.26$  el caudal requerido es sólo levemente menor, de alrededor de 0.08 %, resultando niveles de recuperación que son, en promedio, superiores en un 8.4 %.

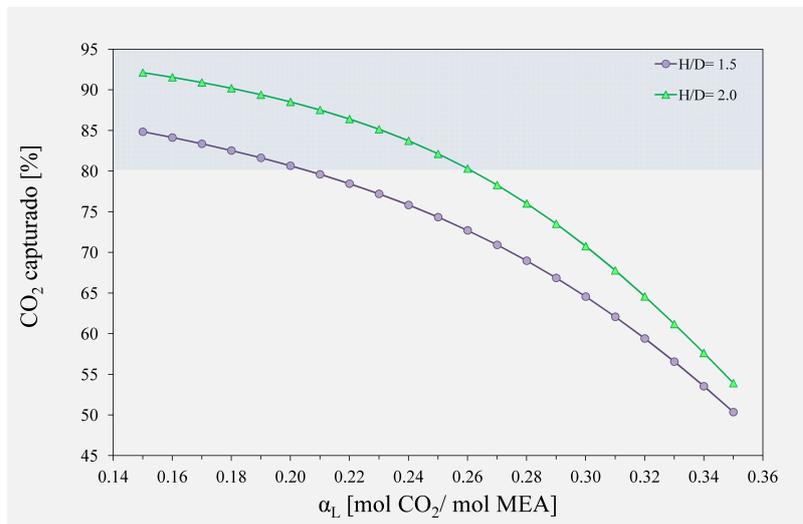
En la Tabla 2.17 se presentan, a modo de comparación, los resultados obtenidos para un mismo valor de  $\alpha_R$  empleando las dos funciones objetivo planteadas. Se observa que para una recuperación similar (alrededor de 80 %) y un valor de  $\alpha_L = 0.26$ , el volumen óptimo de empaque obtenido empleando la  $FO_2$  es 17.9 % mayor que si se emplea la  $FO_1$ . En contraste, la relación óptima de caudales es 42.65 % menor. Un mayor caudal de amina implica una columna de desorción de mayor tamaño y una mayor cantidad de energía para la recuperación del solvente, por lo que conclusiones más generales sólo pueden realizarse analizando el sistema de captura en su conjunto e incorporando al modelo expresiones para determinar los costos operativos y de inversión.

Tabla 2.17 – Diseño óptimo. Caso 2: comparación de valores óptimos empleando diferentes funciones objetivo.

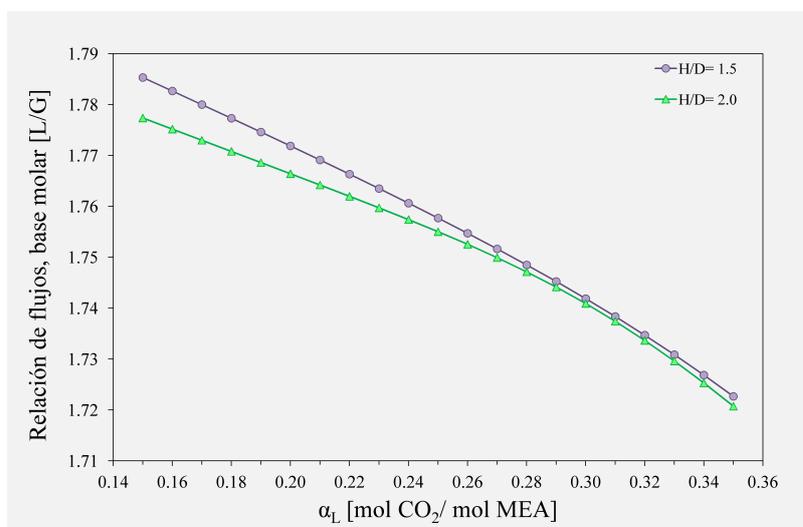
	FO <sub>1</sub>	FO <sub>2</sub>	Diferencia [%]
Carga de CO <sub>2</sub> ( $\alpha_L$ )	0.26	0.26	-
Recuperación [%]	80.72	80.32	1.23
H/D	1.5	2	25
L/G	2.5	1.7525	42.65
Volumen [m <sup>3</sup> ]	1753.36	2135.24	17.9



(a) Función objetivo 2 ( $FO_2$ )



(b) Porcentaje de  $CO_2$  capturado



(c) Relación de flujos

Figura 2.17 – Diseño óptimo. Caso 2.

## 2.5. Resumen

En primer lugar se realizó una exhaustiva búsqueda bibliográfica que permitió conocer los avances logrados en materia de modelado, simulación y optimización de los diferentes procesos de captura, y obtener la totalidad de las correlaciones (restricciones del modelo) necesarias para calcular propiedades físico-químicas, constantes cinéticas de reacción, calores de absorción, constantes de transferencia de materia, etc. Luego se procedió a implementar en GAMS un modelo matemático determinístico NLP que permita no solo simular sino también optimizar el proceso de absorción de  $CO_2$  utilizando aminas. Además se desarrolló una metodología adecuada de inicialización, considerando los aspectos fundamentales que garanticen la convergencia para cualquier cambio de valores en los parámetros. Precisamente se propuso una estrategia específica de inicialización, escalado de variables y definición de cotas superiores y/o inferiores que permitió la obtención de resultados en un amplio rango de condiciones operativas.

Por otro lado, es necesario enfatizar que una de las etapas principales y seguramente la más importante en el desarrollo de un modelo matemático es su verificación. En esta etapa se determina el grado de exactitud en que las variables del modelo son estimadas, en comparación con valores utilizados como referencias, generalmente datos obtenidos en forma experimental. En otras palabras, consiste en verificar si, tanto el grado de abstracción realizado para representar el comportamiento real del sistema y/o proceso bajo estudio (modelo conceptual) como si las hipótesis asumidas son apropiadas. De esta manera, y con el fin de contar con un modelo general que sea aplicable a un amplio rango de condiciones operativas, en una primera instancia se compararon los resultados del modelo de equilibrio líquido vapor con valores experimentales (y resultados de simulaciones) presentados por varios autores. Específicamente, se analizó la distribución de concentraciones de las diferentes especies en la fase líquida y la presión parcial de  $CO_2$  a diferentes niveles de temperatura y concentraciones de  $CO_2$  en el solvente. Luego se compararon los resultados del modelo de la columna de absorción (perfiles internos de temperatura y composición en las fases líquida y gaseosa) utilizando tanto el modelo riguroso (RB) como el modelo simplificado (EM) para dos caudales de gas (escala de laboratorio y planta

---

piloto), y diferentes tipos de empaques. Los resultados obtenidos muestran que los modelos desarrollados se ajustan satisfactoriamente a los datos experimentales publicados por otros autores, y a los resultados obtenidos mediante el empleo de simuladores comerciales.

Se investigó además, el efecto del planteo de diferentes hipótesis en la eficiencia de absorción: 1) modelo de equilibrio (EM) frente a un modelo riguroso (RB) que, a diferencia del anterior, considera el fenómeno de transferencia de materia con reacción química en la interfase, y 2) empleo de distintas correlaciones para la determinación del área específica de transferencia de materia.

Una de las conclusiones obtenidas revela que cuando se considera el menor tamaño y el menor esfuerzo computacional requerido para la resolución, se prefiere un modelo de equilibrio (EM) en lugar de un modelo riguroso (RB). Sin embargo, para efectivizar un estudio detallado del proceso es necesario el empleo de un modelo riguroso (RB). Por otra parte, a partir del empleo de diferentes correlaciones para determinar el área de transferencia de materia en el modelo riguroso, se observó que los resultados son altamente dependientes de las mismas. En particular, la correlación de Onda et al. (1968) es la más apropiada para estudiar el comportamiento de la absorción en el interior de la columna, mientras que la correlación de Wilson (2004) se puede utilizar para estimar las características de las corrientes líquida y gaseosa que abandonan la torre. De esta manera, la selección de la correlación a utilizar dependerá del propósito final que se persiga.

Después de la validación, se plantearon y resolvieron distintos problemas de optimización, los cuales difieren únicamente en sus funciones objetivo. De esta manera, explotando la robustez y la flexibilidad del modelo y la metodología de resolución propuesta, se determinaron conjuntos de condiciones óptimas de operación y de diseño en un rango amplio de composiciones de la corriente líquida de alimentación. Las temperaturas, composiciones y flujos de las corrientes líquida y gaseosa a lo largo de la torre, la caída de presión y las dimensiones del equipo (altura y diámetro), se consideraron como variables de optimización. Es importante aclarar que no se pueden garantizar soluciones óptimas globales debido a la presencia de algunas restricciones no convexas presentes en el modelo matemático, tales como términos bilineales (dados, por ejemplo, por el producto entre flujos y entalpías en

---

los balances de energía) y logaritmos, entre otras.

A partir de los resultados presentados, quedó en evidencia la existencia de una relación de compromiso entre las dimensiones de la columna de absorción (altura y diámetro), y el caudal requerido de solvente para una recuperación determinada.

En este punto no es posible concluir si una opción es más conveniente que otra, pues es necesario analizar el proceso completo (absorción-desorción) desde un punto de vista tecnoeconómico. Sin embargo, se puede prever fácilmente que el empleo de mayores caudales de amina implica un mayor consumo de energía térmica para la recuperación del solvente a la vez que se requieren columnas de regeneración de mayor tamaño.

Por otra parte, torres de absorción con mayores relaciones  $H/D$ , a pesar del mayor tamaño, presentan una menor caída de presión por unidad de altura de empaque, lo que se traduciría en un menor consumo de energía mecánica en los sopladores (S1) para vencer la caída de presión en las mismas.

Finalmente, desde el punto de vista del modelado, el modelo matemático propuesto e implementado en GAMS, resultó ser una herramienta valiosa tanto para optimizar como para simular el proceso (cuando el sistema no posee ningún grado de libertad). De hecho, el modelo fue utilizado para ambos propósitos.

---

# Capítulo 3

## Proceso de regeneración del solvente, desorción y compresión de $CO_2$

### 3.1. Introducción

Como se mencionó en capítulos anteriores, la absorción/desorción de  $CO_2$  con aminas es un proceso que demanda altos consumos de energía, siendo esta la principal desventaja a la hora de su implementación como sistema de tratamiento de gases en plantas de potencia.

Si bien este proceso es el que se encuentra en su fase de implementación y demostración más avanzada, y es el que cuenta con mayor probabilidad de aplicación a gran escala en el mediano plazo, disminuir el requerimiento total de energía (consumo de servicios auxiliares de calefacción, enfriamiento y energía eléctrica) es uno de los desafíos más importantes que se persigue desde la última década. En este contexto, se publicaron numerosos trabajos que analizan diferentes aspectos del problema. La carga térmica específica [Energía/ cantidad de  $CO_2$  desorbida] que se requiere en el rehervidor, es una de las variables más reportadas debido a su directa incidencia en el costo total de operación. Sin embargo, dicha variable depende fuertemente de las condiciones operativas y de diseño asociadas a cada caso en particular.

En general, diferentes autores analizaron en detalle la influencia de diferentes condiciones operativas en el requerimiento energético, tanto a escala de laboratorio (Galindo et al.,

2012; Sakwattanapong et al., 2005) como en planta piloto (Cottrell et al., 2009; Dugas, 2006; Kwak et al., 2012; Mangalapally y Hasse, 2011; Mangalapally et al., 2009; Tobiesen et al., 2008). Por otra parte, se desarrollaron modelos para representar la desorción de  $CO_2$  en la columna de regeneración, modelada en muchos casos como una unidad independiente.

Tobiesen y Svendsen (2006) desarrollaron un modelo riguroso para describir la desorción de  $CO_2$  a elevadas presiones ( $\geq 200 \text{ kPa}$ ), con el fin de investigar si bajo estas condiciones es posible disminuir significativamente la energía mecánica requerida en la etapa de compresión de la corriente concentrada de  $CO_2$ . Por otra parte, Tobiesen et al. (2007) propusieron un modelo de transferencia de materia para la absorción/ desorción de  $CO_2$  basado en la teoría de la penetración, donde se discretizó la película de la fase líquida. Luego, Tobiesen et al. (2008) validaron los resultados de la simulación con datos experimentales obtenidos en planta piloto. La velocidad de transferencia de materia simulada frente a la experimental presentó una desviación relativa de 9.91 % en promedio. Específicamente, los valores obtenidos mediante simulación se sobreestimaron para bajas cargas de amina (relación entre la cantidad total de  $CO_2$  y la cantidad total de MEA) y, por el contrario, se subestimaron para altas cargas. Los perfiles de temperatura y flujo de líquido en la zona de baja carga concuerdan satisfactoriamente con los datos experimentales. Por otra parte, a partir de una serie de ajustes de modelos de ELV con datos experimentales reportados en diferentes fuentes, concluyeron que los datos de equilibrio son fundamentales para la obtención de resultados de simulación apropiados, y que la rigurosidad del modelo puede no ser tan importante, siempre y cuando, tanto el ajuste del modelo como los datos experimentales sean suficientemente buenos. De esta manera, un modelo simplificado puede usarse en forma satisfactoria, reduciendo el tiempo computacional requerido para su resolución.

Oyenekan (2007) y Oyenekan y Rochelle (2007, 2009) llevaron a cabo simulaciones del sistema de regeneración para la desorción de  $CO_2$  utilizando Aspen Custom Modeler como herramienta de modelado. Para el análisis seleccionaron diferentes tipos de solventes (MEA, MDEA/PZ,  $K^+$ /PZ) y configuraciones del sistema. Los autores adoptaron una diferencia de temperatura de 5 y 10 K en el extremo caliente del economizador. Los resultados mostraron

---

que con un  $\Delta T = 5K$  en un sistema con una solución 7m de MEA (30 % p/p),  $P_R = 160 \text{ kPa}$ ,  $\alpha_R = 0.563$  y 90 % de recuperación, se reduce en 12 % el consumo energético total con respecto a un  $\Delta T = 10K$ . Por otra parte, los autores concluyeron que el diseño óptimo (con menor requerimiento de energía) se obtendría con columnas que operen entre el 50 % y el 80 % de inundación.

Mangalapally et al. (2009) y Mangalapally y Hasse (2011) implementaron en el simulador CHEMASIM, un modelo riguroso del proceso desarrollado por BASF y validaron los resultados con datos experimentales. A su vez, compararon la performance del sistema empleando diferentes tipos de empaques estructurados (Mellapack 250Y y BX500), concluyendo que a elevados niveles de recuperación de  $CO_2$  se observa una importante ventaja de BX500 sobre Mellapack 250Y, mientras que a bajos porcentajes de captura los resultados son similares. Por otra parte, no fue posible alcanzar el 90 % de captura de  $CO_2$  en el sistema que emplea el empaque menos eficiente (250Y) con un consumo energético razonable.

Mediante el empleo de simuladores, Oexmann y Kather (2010) demostraron que las variables del proceso tienen una fuerte influencia en el consumo de energía, en particular la presión operativa, de manera tal que no deben perderse de vista cuando se evalúa la performance de nuevos solventes. Además, observaron que para solventes con elevado calor de absorción, como la MEA, un incremento en la presión y/o temperatura operativas del rehervidor conduce a una menor cantidad de vapor de agua en el tope de la columna, por lo que se debe suministrar menor cantidad de energía. Sin embargo, la temperatura en el rehervidor no depende únicamente de la presión sino también del tipo de solvente, su composición y la carga de  $CO_2$  existente. Por otro lado, las características del solvente determinan el flujo requerido y por ende, los requerimientos de calor sensible. Ahora bien, cuando se considera acoplar el sistema de captura a una planta de potencia, la presión en el rehervidor presenta otros efectos que no deben ser ignorados. Por un lado, una presión de desorción más alta conduce a una menor demanda de potencia del compresor de  $CO_2$  ubicado aguas abajo del proceso de captura. Por otra parte, un incremento de presión se traduce en un aumento de temperatura en el reboiler. De esta manera, si el requerimiento

energético es cubierto con vapor de baja presión extraído de las turbinas de la planta de generación, el empleo de vapor de mayor calidad (mayor presión) inevitablemente conduce a mayores penalizaciones energéticas en la planta de producción de electricidad, esto es, disminución de la potencia entregada por la planta de potencia. Estos dos efectos son comúnmente considerados mediante el concepto de “trabajo equivalente”, que representa la cantidad de electricidad adicional (o pérdidas, cuando la planta de captura se integra a procesos de generación existentes) que debe producirse en la planta de potencia para cubrir el requerimiento de energía térmica y eléctrica de la planta de captura. Los autores concluyeron finalmente que, a la hora de optimizar el sistema, es necesario considerar los procesos de generación+captura+compresión en forma integral.

Con el mismo propósito de disminuir el consumo energético total varios autores propusieron modificaciones estructurales de la etapa de recuperación del solvente, empleando en la mayoría de los casos herramientas comerciales de simulación de procesos (Jassim y Rochelle (2006); Karimi et al. (2011a,b, 2012); Oyekan y Rochelle (2007); Pellegrini et al. (2011); Van Wagener y Rochelle (2011), entre otros). Dichas modificaciones incluyen operación en vacío, sistemas con múltiples niveles de presión, con y sin recompresión de vapor, incorporación de tanques de separación flash, con integración energética entre la etapa de compresión y la de regeneración, etc. Las configuraciones avanzadas reducen el consumo de energía incrementando la reversibilidad del proceso, aumentando la eficiencia y disminuyendo las pérdidas de exergía. Sin embargo, la demanda energética se reduce a expensas de incrementar el costo de inversión y la complejidad en la configuración del proceso.

En este capítulo se estudia la configuración más simple (Fig. 3.1) en la que tanto las condiciones operativas como las de diseño son simultáneamente optimizadas de manera tal de maximizar la eficiencia de regeneración y minimizar el consumo de servicios auxiliares, ya sea de calefacción y/o enfriamiento. El estudio consiste en analizar cómo influye la composición del solvente que alimenta la columna (expresada como la relación entre la cantidad de  $CO_2$  y la cantidad de MEA) y la presión operativa en el rehervidor sobre los objetivos arriba mencionados. Para ello, y con el fin de analizar el proceso en un amplio

---

rango de condiciones, tanto la composición del solvente como la presión de operación en el rehervidor, se varían paramétrica y sistemáticamente.

En la Sección 3.2 se desarrolla el modelo matemático de los diferentes equipos que integran el proceso de desorción y compresión de  $CO_2$ . Luego se comparan los resultados obtenidos mediante la resolución del modelo riguroso considerando las correlaciones de Onda et al. (1968) y Bravo y Fair (1982) con datos experimentales de planta piloto (Dugas, 2006).

Una vez validado el modelo, se estudian diferentes problemas de diseño óptimo teniendo en cuenta el planteo de dos funciones objetivo: 1) minimizar la relación entre el requerimiento energético en el rehervidor y la cantidad de dióxido de carbono removida de la corriente de amina rica en  $CO_2$ , y 2) minimizar la relación entre el requerimiento energético total (servicios de calefacción, enfriamiento y energía mecánica) y la cantidad de dióxido de carbono removida de la corriente de amina rica en  $CO_2$ . Además, se presenta un análisis de sensibilidad para investigar la influencia del empleo de distintas correlaciones para el cálculo del área específica para la transferencia de materia (precisamente las correlaciones de Onda et al. (1968) y Bravo y Fair (1982)), en la calidad de las soluciones.

El análisis de los resultados se realiza en base a una serie de conjuntos de valores óptimos de las principales variables de diseño y operación, tales como requerimiento energético y área de transferencia de calor de los equipos de intercambio térmico (rehervidor, condensador, economizador, enfriadores), trabajo de bombeo y compresión, consumo de agua de enfriamiento, dimensiones (diámetro y altura) y caída de presión en la columna de regeneración, entre otras.

## 3.2. Desarrollo del modelo matemático

En la Figura 3.1 se presenta un esquema genérico de la etapa de regeneración del solvente y compresión de  $CO_2$ . También se indica la nomenclatura utilizada en el desarrollo del capítulo. Aquí, a diferencia del capítulo anterior, el modelo resultante involucra un mayor número de equipos (columna regeneradora, intercambiadores, bombas, compresores, etc.).

La corriente de amina rica en  $CO_2$  que abandona el fondo de la columna de absorción

---

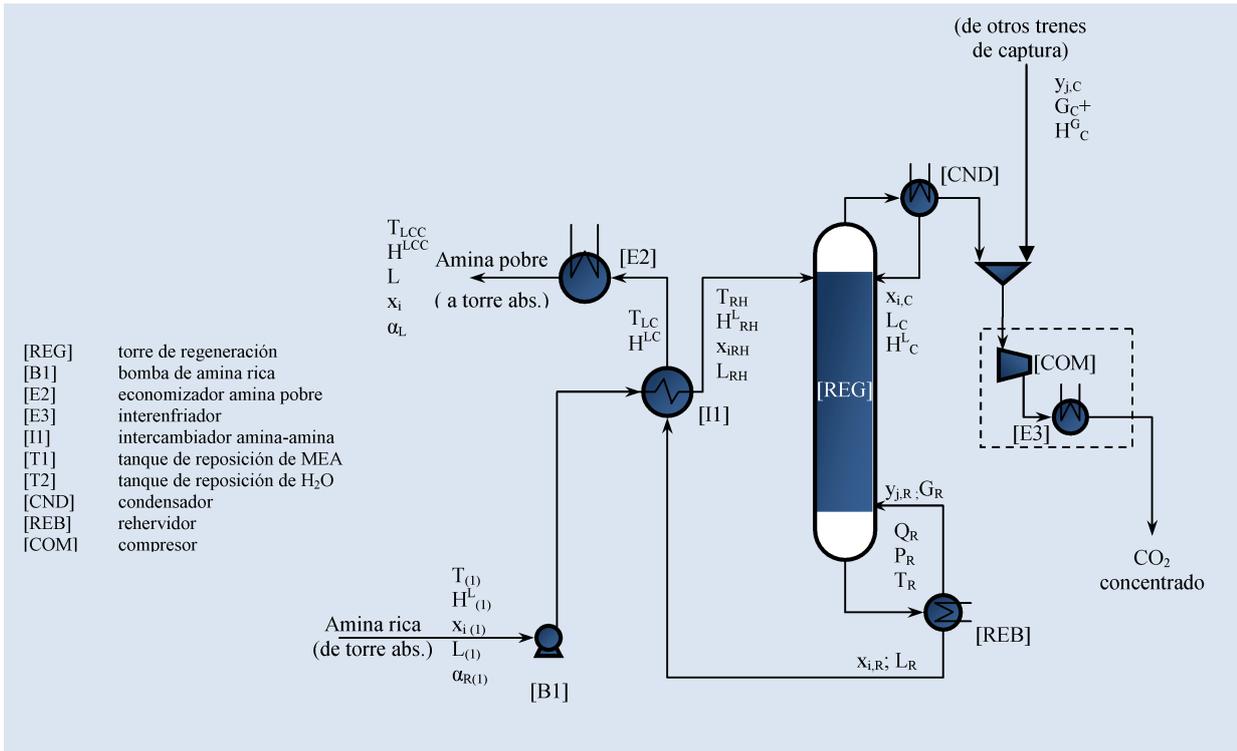


Figura 3.1 – Esquema de la etapa de regeneración del solvente y compresión de  $CO_2$ .

se precalienta en el intercambiador amina-amina [I1] y se bombea [B1] a la unidad de regeneración del solvente [REG]. La energía térmica suministrada [ $Q_R$ ] en el hervidor [REB] se utiliza para 1) incrementar la temperatura de la solución enriquecida (calor sensible), 2) remover el  $CO_2$  de la corriente líquida (calor de reacción) y 3) generar el vapor necesario para la separación (calor de vaporización de agua). Luego, el vapor de agua se condensa [CND] y realimenta la columna, mientras que la corriente gaseosa concentrada en  $CO_2$  se comprime [COM]. Por otro lado, la corriente de amina “pobre” que abandona el reboiler se enfría [I1, E2] y se envía nuevamente a la columna de absorción, cerrándose así el ciclo de absorción/desorción.

Tanto los niveles de presión y temperatura en las distintas unidades como las condiciones del solvente (temperatura, composición y flujo), influyen fuertemente en el desempeño del proceso de recuperación del solvente. El nivel de recuperación y las dimensiones de los equipos definen también su eficiencia. De esta manera, es importante identificar y cuantificar los diferentes trade-offs que existen entre las variables operativas y de diseño.

El modelo matemático de la etapa de regeneración del solvente y compresión de  $CO_2$  está conformado por restricciones similares a las presentadas en el capítulo 2 (Ec. 2.4 a

2.85) y las Ecuaciones 3.1 a 3.35 desarrolladas en este capítulo.

### 3.2.1. Consideraciones generales

- El rehervidor y el condensador se modelan como etapas de equilibrio.
- Se asume un único tren de compresión, compuesto por 4 etapas con iguales relaciones de compresión y enfriamiento intermedio.
- Se imponen límites máximos para la temperatura y presión de trabajo en el reboiler, para prevenir la degradación del solvente. Los valores límites asumidos son 393.15 K y 202.6 kPa.
- Se desprecia la caída de presión en los equipos de intercambio de energía.
- Se desprecia el cambio de temperatura en la corriente líquida debido al trabajo de bombeo (líquido incompresible).
- Se asume que la temperatura del agua y solvente que se reponen en el sistema es de 298.15 K.
- Se asume que la temperatura del agua de enfriamiento se incrementa desde 298.15 hasta 313.15 K.

### 3.2.2. Columna regeneradora

La columna regeneradora se modela considerando restricciones similares a las presentadas en el capítulo 2 (Ec. 2.4 a 2.85), y las expresiones de balance de materia y energía que se desarrollan a continuación.

Del mismo modo que se procedió para modelar la columna de absorción, la columna regeneradora se divide en “n” etapas dispuestas en contracorriente; n=1 corresponde a la etapa que está en el fondo de la columna mientras que n=N corresponde a la etapa que está en el tope. Esta última es alimentada por la corriente de amina rica ( $L_z$  con  $z=1$ ) y el condensado ( $L_C$ ).

---

## Balances de materia y energía

Los subíndices D, C y R se refieren a la columna regeneradora, el condensador y el reboiler, respectivamente, mientras que el subíndice RH (del inglés “rich hot”) se emplea para identificar las condiciones de la corriente de solvente enriquecido en  $CO_2$  que alimenta a la columna regeneradora.

- *Balance de materia*

$$L_{D_{n+1}} x_{D_{i_{n+1}}} - L_{D_n} x_{D_{i_n}} + G_R y_{R_j} - G_{D_n} y_{D_{j_n}} = 0$$

$$n = 1 \quad (3.1)$$

$$L_{D_{n+1}} x_{D_{i_{n+1}}} - L_{D_n} x_{D_{i_n}} + G_{D_{n-1}} y_{D_{j_{n-1}}} - G_{D_n} y_{D_{j_n}} = 0$$

$$\forall n, \quad 2 \leq n \leq N - 1 \quad (3.2)$$

$$G_{D_{n-1}} y_{D_{j_{n-1}}} - G_{D_n} y_{D_{j_n}} + L_z x_{i_z} + L_C x_{C_i} - L_{D_n} x_{D_{i_n}} = 0$$

$$z = 1 \quad n = N \quad (3.3)$$

- *Balance de energía*

$$G_{D_{n-1}} H_{D_{n-1}}^G - G_{D_n} H_{D_n}^G + L_{D_{n+1}} H_{D_{n+1}}^L - L_{D_n} H_{D_n}^L$$

$$+ (\Delta H_R)_{D_n} - (\Delta H_{H_2O})_{D_n} = 0 \quad n = 1 \quad (3.4)$$

$$L_{D_{n+1}} H_{D_{n+1}}^L - L_{D_n} H_{D_n}^L + G_{D_{n-1}} H_{D_{n-1}}^G - G_{D_n} H_{D_n}^G$$

$$+ (\Delta H_R)_{D_n} - (\Delta H_{H_2O})_{D_n} = 0 \quad \forall n, \quad 2 \leq n \leq N - 1 \quad (3.5)$$

$$G_{D_{n-1}} H_{D_{n-1}}^G - G_{D_n} H_{D_n}^G + L_z H_{RH}^L + L_C H_C^L - L_{D_n} H_{D_n}^L$$

$$+ (\Delta H_R)_{D_n} - (\Delta H_{H_2O})_{D_n} = 0 \quad z = 1 \quad n = N \quad (3.6)$$

### 3.2.3. Bombas de solvente

La solución enriquecida que abandona el absorbedor por el fondo, se bombea al tope de la columna regeneradora. El incremento de la presión de bombeo depende de las condiciones operativas existentes en el stripper (presión en el reboiler, caída de presión a través del empaque, etc.) y de la caída de presión a través del intercambiador amina - amina. En este trabajo se asume que la caída de presión a través de los equipos de intercambio térmico es despreciable.

La potencia de bombeo ( $W_{Bi}$ ; [kW]) se determina mediante la Ecuación (3.7), basada en las siguientes suposiciones: 1) estado estacionario ; 2) proceso adiabático y 3) fluido incompresible.

$$W_B = \frac{1}{\eta_{Bi}} \left( \frac{L_z}{\rho_z^L} \right) (P_z - P_n) \quad \text{con } z = 1 \quad \text{y } n = N \quad (3.7)$$

Donde  $\eta_B$  es la eficiencia isentrópica, cuyo valor se fija en 75 %.

La densidad molar ( $\rho_z^L$ ), el flujo molar ( $L_z$ ) y las presiones (P) están expresadas en [ $kmol/m^3$ ], [ $kmol/s$ ] y [ $Pa$ ], respectivamente.

### 3.2.4. Unidades de transferencia de energía

Aquí se describen los equipos de transferencia de energía en forma genérica. De esta manera el subíndice “e” se refiere a los enfriadores ([E1], [E2], [E3]) y economizadores ([I1]). Los subíndices “in” y “out” indican las condiciones de entrada y salida de una corriente de un equipo de intercambio térmico, mientras que “hot” y “cold” indican corriente caliente y fría respectivamente.

- *Balances de materia*

#### *Reboiler*

$$L_{Dn} x_{in} - L_R x_{Ri} + G_R y_{Rj} = 0 \quad n = 1 \quad (3.8)$$

#### *Condensador*

---

$$G_{Dn} y_{Din} - L_C x_{Ci} - G_C y_{Cj} = 0 \quad n = N \quad (3.9)$$

### ***Economizador y Enfriadores***

$$(x_i L)_{cold,in,e} = (x_i L)_{cold,out,e} \quad (3.10)$$

$$(x_i L)_{hot,in,e} = (x_i L)_{hot,out,e} \quad (3.11)$$

#### ■ *Balances de energía*

##### ***Reboiler***

$$L_{Dn} H_{Dn}^L + Q_R - L_R H_R^L - G_R (H_R^G + (\Delta H_R)_R + (\Delta H_{H_2O})_R) = 0 \quad (3.12)$$

$$n = 1$$

##### ***Condensador***

$$G_{Dn} (H_{Dn}^G + (\Delta H_R)_{Dn} + (\Delta H_{H_2O})_{Dn}) - L_C H_C^L - G_C (H_C^G + \Delta H_{H_2O,C}) - Q_C = 0 \quad n = N \quad (3.13)$$

### ***Economizador y Enfriadores***

$$Q_e = (LH^L)_{hot,in,e} - (LH^L)_{cold,out,e} = (LH^L)_{hot,out,e} - (LH^L)_{cold,in,e} \quad (3.14)$$

#### ■ *Equilibrio de fases*

##### ***Reboiler***

$$y_{RCO_2} \phi_{RCO_2} P_R = H_{RCO_2} [CO_2]_R \quad (3.15)$$

$$y_{RH_2O} \phi_{RH_2O} P_R = p_{RH_2O} x_{RH_2O} \quad (3.16)$$

$$y_{RMEA} \phi_{RMEA} P_R = p_{RMEA} x_{RMEA} \quad (3.17)$$

**Condensador**

$$y_{Cj} \phi_{Cj} P_C = p_i x_{Ci} \quad (3.18)$$

$$y_{Cj} = y_{Cj}^* \quad \forall j \quad j = MEA, CO_2, H_2O \quad (3.19)$$

Se asume que la presión en el condensador es igual a la presión en el tope de la columna regeneradora.

$$P_C = P_{Dn} \quad n = N \quad (3.20)$$

- **Restricciones de temperatura**

La diferencia de temperatura en el extremo caliente del economizador [I1] se encuentra entre 5 y 15 K. En general, en la bibliografía se adopta un valor fijo de 5 o 10 K.

$$5 \leq (T_{RH} - T_R) \leq 15 \quad (3.21)$$

La temperatura del vapor de calefacción ( $T^{VC}$ ) se asume 10 K superior a la temperatura del líquido en el rehervidor ( $T_R$ ).

$$T^{VC} \geq T_R + 10 \quad (3.22)$$

También se incorporan las restricciones 3.23 a 3.25, con el fin de evitar cruces de temperatura en los equipos de intercambio térmico y así facilitar la convergencia del modelo, sobre todo en el cómputo de la diferencia media logarítmica de temperatura.

$$T_{hot,in,e} \geq T_{hot,out,e} + 0.5 \quad (3.23)$$

$$T_{cold,in,e} \leq T_{cold,out,e} + 0.5 \quad (3.24)$$

$$T_{hot,in,e} - T_{cold,out,e} \geq 5 \quad (3.25)$$

Por otro lado, la temperatura de la corriente fría en cada etapa de compresión - enfriamiento se reduce a 313.15 K, de acuerdo a lo sugerido en Fisher et al. (2005); Oexmann et al. (2008); Rao y Rubin (2002).

### ■ Áreas de intercambio

Se plantea un modelo de puntos extremos para la determinación del área de intercambio térmico (Ec. 3.26) en base a las siguientes suposiciones: 1) las capacidades caloríficas y los coeficientes globales de transferencia de energía permanecen constantes a través del equipo; 2) la caída de presión es despreciable y 3) se desarrollan perfiles lineales de temperatura.

$$Q_e = U_e \times A_e \times DMLT_e \quad e = [I1], [E1], [E2], [E3], [REB], [CND] \quad (3.26)$$

En la Tabla 3.1 se listan algunos valores de los coeficientes globales de transferencia de energía reportados en distintas fuentes. Obviamente, la selección de estos parámetros juega un papel importante en la determinación de las áreas totales de intercambio térmico. En el modelo se adopta un promedio de los mismos.

Tabla 3.1 – Coeficientes globales de transferencia de energía [ $W/m^2K$ ].

	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]
Condensador [ $U_{CND}$ ]	454 (397-511)	340.5	300	-	387.1
Interenfriadores [ $U_{E3}$ ]	454 (397-511)	-	300	-	387.1
Enfriador amina agua [ $U_{E2}$ ]	483 (454-511)	1085	600	(794.4-1134.9)	763.2
Reboiler [ $U_{REB}$ ]	625 (568-909)	1348.2	1500	-	1081.3
Economizador [ $U_{I1}$ ]	511 (426-625)	712.4	600	(794.4-1134.9)	715.45

[1] Fisher et al. (2005); [2] FETC (1999); [3] Blauwhoff et al. (1985); [4] Seider et al. 2009); [5] Promedio.

### 3.2.5. Compresores y sopladores

Debido a restricciones de diseño, una planta de generación de energía con una capacidad de producción de 800 MW, necesitaría más de un tren de absorción para tratar la totalidad del gas generado. A su vez, cada tren de absorción podría contar con un sistema de compresión individual ó, en su defecto, podría disponerse de un único sistema de compresión

para comprimir el volumen total de gas producido. Por otro lado, la capacidad de diseño de los sopladores y los compresores depende, en cada caso, del flujo de gas a tratar.

Los balances de materia y energía que representan la suma de las corrientes gaseosas enriquecidas en  $CO_2$  que ingresan al sistema de compresión, se describen mediante las Ec. 3.27 y 3.28.

$$\sum_{k=1}^{NT} y_{Cjk} G_{Ck} = G_{in}^{comp} y_{j in}^{comp} \quad \forall j, j = MEA, CO_2, H_2O \quad (3.27)$$

$$\sum_{k=1}^{NT} H_{Ck}^G G_{Ck} = H_{in}^{comp} \quad (3.28)$$

El cambio de temperatura debido al trabajo de compresión, el trabajo requerido en el compresor para cada etapa ( $c$ ), la relación de compresión entre etapas y el trabajo total, se calculan según las Ecuaciones 3.29 a 3.34. Se asume un proceso de compresión adiabático no reversible (no isentrópico) con capacidades caloríficas constantes.

Además, se asume que la relación de compresión, que es una variable de optimización, es la misma en cada etapa (Ec. 3.32). De acuerdo a lo sugerido por Fisher et al. (2005), la temperatura máxima de cada etapa de compresión es de 450.15 K y la relación de compresión debe ser menor o igual a 3 (Ec. 3.33). Si se superan estas restricciones, se debe incrementar el número de etapas de compresión ( $c$ ).

La siguiente restricción vincula las temperaturas de entrada/ salida de los compresores con sus correspondientes presiones:

$$T_{out c} - T_{in c} = \left( \frac{1}{\eta_c} \right) \times T_{in c} \left[ \left( \frac{P_{out c}}{P_{in c}} \right)^{1 - \frac{1}{\gamma_c}} - 1 \right] \quad \forall c \quad c = 1, 2, \dots, C \quad (3.29)$$

donde  $\eta$  y  $\gamma$  son la eficiencia isentrópica y la relación de capacidades caloríficas a presión y volumen constante, respectivamente. Los subíndices “in” y “out” indican la entrada y salida de cada etapa de compresión.

$$T_{out c} \leq 450.15K \quad (3.30)$$

Mediante la Ec. 3.31 se determina el trabajo de compresión por etapas ( $W_c$ , [kW]).

$$W_c = \left( \frac{1}{\eta_c} \right) \times G_{in c} \times \left( \frac{R \times T_{in c} \times f_c \times \gamma_c}{\gamma_c - 1} \right) \times \left[ \left( \frac{P_{out c}}{P_{in c}} \right)^{1 - \frac{1}{\gamma_c}} - 1 \right] \quad (3.31)$$

donde  $f_c$  es el factor de compresibilidad en las condiciones de presión y temperatura de la etapa.

$$r_c = \left( \frac{P_{out\ c-1}}{P_{in\ c-1}} \right) = \left( \frac{P_{out\ c}}{P_{in\ c}} \right) \quad (3.32)$$

$$r_c \leq r_c \text{ máx} \quad (3.33)$$

El trabajo de compresión total [kW] se computa como la suma del trabajo realizado en cada una de las etapas. De acuerdo a la tecnología actual, se asume que la capacidad de trabajo máxima de un tren de compresión es de 40000 kW (GHG, 2002).

$$W_{TC} = NT \sum_{c=1}^C W_c \quad \forall c \quad c = 1, 2, \dots, C \quad (3.34)$$

$$W_{TC} \leq 40000 \text{ kW} \quad (3.35)$$

### **3.3. Verificación del modelo de la etapa de regeneración del solvente vía simulación. Comparación con datos experimentales**

Como se mencionó en el capítulo anterior, una de las etapas principales, y seguramente la más importante en el desarrollo de un modelo matemático, es su verificación.

Ahora bien, cuando no se dispone de una planta piloto propia para realizar mediciones experimentales, esta tarea puede resultar algo difícil de realizar ya que deben utilizarse valores experimentales obtenidos y publicados por otros autores. La mayoría de los autores solo reportan los valores de algunas variables del proceso, inclusive sin detallar bajo qué condiciones se obtuvieron dichos valores. Luego, es fácil deducir que en el caso de pretender verificar el modelo en forma minuciosa comparando todas las variables, los datos reportados por un mismo autor podrían resultar insuficientes. En esta tesis se prioriza utilizar como referencia aquellos trabajos que cuenten, en lo posible, con la mayor cantidad de valores experimentales. También, en numerosos casos, es posible observar que resultados

---

presentados por diferentes autores para una misma situación presentan ciertas discrepancias, lo que introduce cierto grado de incertidumbre para la validación del modelo.

Como en el capítulo anterior, la verificación del modelo se efectúa mediante la comparación de los resultados obtenidos por el modelo, ejecutado como simulador, con datos experimentales reportados en la literatura (Dugas, 2006). En particular, se emplean veinticuatro (24) de los cuarenta y ocho (48) casos reportados por Dugas (2006). Específicamente, se seleccionaron los casos que corresponden a mediciones experimentales en columnas con empaques dispuestos al azar. En caso de haber incluido el resto de los casos reportados, los cuales corresponden a empaques estructurados, hubiera sido necesario reemplazar ciertas correlaciones (caídas de presión, coeficientes y áreas específicas para la transferencia de materia, etc.) por otras, apropiadas para el tipo de empaque estructurado. También, sólo para los fines de verificación, en la comparación se incluyen los resultados obtenidos por HYSYS.

Por otro lado, el modelo se ejecuta activando la correlación de Onda et al. (1968) o la correlación de Bravo y Fair (1982), según se desee.

Las Tablas 3.2 y 3.3 listan los datos de entrada (parámetros del modelo), las especificaciones del empaque y las dimensiones de la columna empleadas en la validación. Es oportuno mencionar aquí que, con el fin de emular la planta piloto de la que se obtuvieron los datos experimentales, fue necesario modificar ligeramente el modelo matemático desarrollado (y representado mediante el diagrama de flujo mostrado en la Figura 3.1).

Para una mayor claridad, la discusión de resultados se realiza en base a las siguientes denominaciones:

- Exp: Datos experimentales reportados en (Dugas, 2006).
  - RBO: resultados obtenidos mediante la simulación con el modelo desarrollado activando la correlación de Onda para la determinación de las áreas de transferencia de materia.
  - RBB: resultados obtenidos mediante la simulación con el modelo desarrollado
-

Tabla 3.2 – Datos experimentales (Dugas, 2006).

Caso	Alimentación (amina rica que sale de la etapa de absorción)		
	Flujo molar [mol/s]	Carga de CO <sub>2</sub> [mol CO <sub>2</sub> / mol MEA]	Temperatura [K]
1	14.08	0.420	368.11
2	14.03	0.405	368.16
3	9.66	0.457	368.96
4	9.73	0.433	366.96
5	21.62	0.525	364.05
6	21.69	0.523	365.56
7	27.41	0.496	346.68
8	27.48	0.493	347.27
9	21.05	0.532	353.91
10	21.02	0.533	354.37
11	18.02	0.537	358.00
12	17.79	0.491	359.61
13	41.76	0.496	345.63
14	41.77	0.506	345.22
15	59.48	0.546	344.95
16	59.67	0.507	346.11
17	59.21	0.508	345.13
18	21.03	0.493	362.83
19	21.19	0.413	362.37
20	17.75	0.386	370.08
21	16.54	0.540	370.06
22	14.75	0.495	368.99
23	14.74	0.538	369.26
24	27.4	0.506	351.00

Tabla 3.3 – Características de la columna Dugas (2006).

Características de la columna	
Tipo de columna	Empacada
Diámetro [m]	0.427
Altura total del empaque [m]	6.1
Tipo de empaque	IMTP#40
Área específica [m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	145
Tamaño nominal [m]	0.04
Fracción de huecos	0.97

activando la correlación de Bravo para la determinación de las áreas de transferencia de materia.

- HYS: resultados obtenidos mediante el simulador Hysys.

En la Figura 3.2 se ilustra la cantidad de  $CO_2$  desorbida. La diferencia entre EXP, RBO, RBB y HYS depende de cada corrida en particular. Este comportamiento se observa también en los resultados presentados en las gráficas siguientes (Fig. 3.3 y 3.4). En particular, se observa que la mayoría de los puntos predichos por cada modelo se ajustan satisfactoriamente a los datos experimentales con desviaciones inferiores al 5%, siendo el modelo RBB más exacto que el modelo RBO.

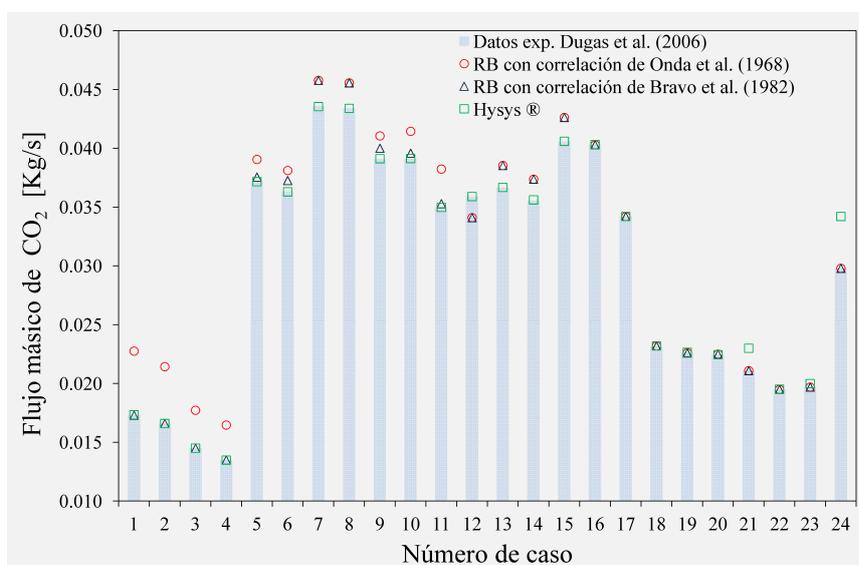


Figura 3.2 – Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): flujo másico de  $CO_2$ .

La composición en el líquido, expresada como carga de  $CO_2$  (moles de  $CO_2$ /mol MEA) en el fondo y en el medio de la unidad de regeneración, se representan en la Figura 3.3. Se observa que RBB (con un error promedio de 13%) es más exacto que RBO (con un error promedio de 37.2%) en los casos 1 a 11, mientras que en general, para los casos 12 a 24 los valores obtenidos son muy similares. Si bien en los puntos 12, 19 y 20, RBB, HYS y RBO dan valores semejantes en el fondo de la columna y un poco más dispares en el centro, se alejan sustancialmente de los datos experimentales (EXP). Los casos restantes tienen desviaciones promedio inferiores al 7% y 13.5% en el fondo y centro de la columna, respectivamente.

En la Figura 3.4 se presentan la temperatura y el calor requerido en el hervidor. Como puede apreciarse, 21 de los 24 datos experimentales de temperatura (Figura 3.4a)

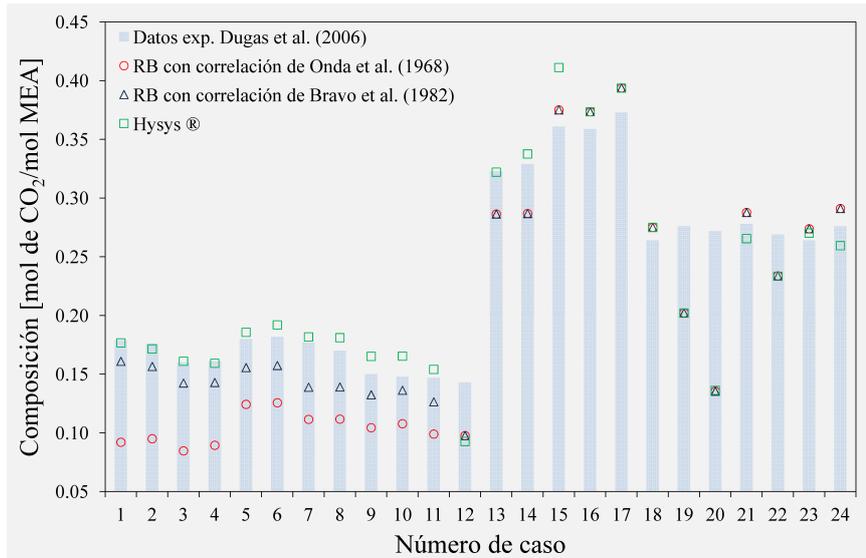
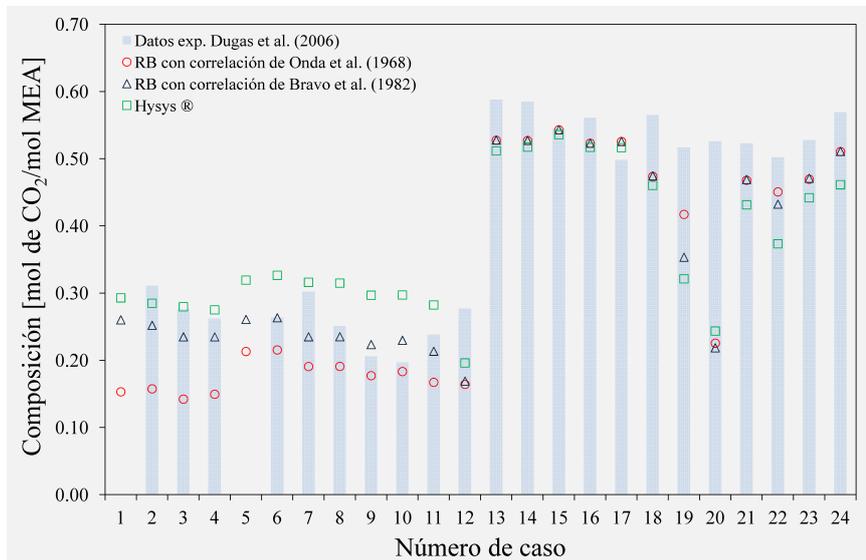
(a)  $\alpha$  a la salida del hervidor(b)  $\alpha$  en el centro de la columna

Figura 3.3 – Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): composición del líquido [mol  $CO_2$ /mol MEA].

se determinan en forma precisa por los modelos RBB y RBO. De hecho, la diferencia es menor a 2 K para los casos 2 a 14, 19, 20 y 22, mientras que para los casos 1, 18, 23 y 24 es de alrededor de 5 K. De este modo, la predicción de la temperatura es independiente de la correlación utilizada, ya que se alcanzan desviaciones promedio de 0.81 % y 0.71 % con los modelos RBB y RBO, respectivamente.

En lo que respecta al análisis del calor requerido en el rehervidor, es sumamente

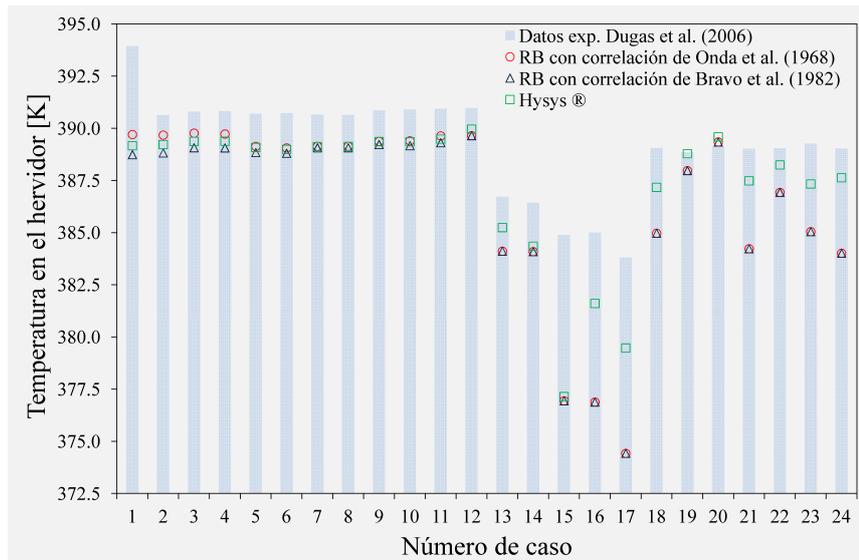
importante resaltar que los valores experimentales reportados están sujetos a incertidumbres debido a limitaciones inherentes a los instrumentos empleados, según se explica en detalle en Dugas (2006). En consecuencia, la verificación numérica de esta variable está asociada a tal incertidumbre. Luego es fácil deducir que, en el peor de los casos, si las mediciones efectuadas en realidad sobreestiman el valor real y el modelo propuesto subestima dicho valor, la diferencia entre ambos valores (experimental - obtenido), dependiendo del caso, podría ser muy significativa. En otras palabras, la verificación del  $Q_R$  se realiza teniendo en cuenta que existe incertidumbre en los valores experimentales, desconociendo si éstos se encuentran por encima o por debajo de los valores reales.

Como puede observarse en la Figura 3.4b, algunos puntos son más cercanos a los datos experimentales que otros. De hecho, para los casos 12 a 24 se obtienen valores aproximados a los datos experimentales mediante el empleo de ambas correlaciones. Sin embargo, los casos 1 a 3 y 5 a 11 no se determinan apropiadamente, mostrando diferentes comportamientos de acuerdo a la correlación utilizada. Por ejemplo, en los casos 1 y 2, los valores experimentales se sobreestiman y subestiman al emplear las correlaciones de Onda y Bravo, respectivamente. En el caso 3, mediante la correlación de Bravo se obtienen valores más cercanos a los experimentales; el caso opuesto se observa en el punto 4. Para los puntos 5 a 11, mediante ambas correlaciones se computan valores, aunque similares, bastante alejados de los datos reales. Específicamente, se observa que los errores son inferiores al 10 % en las siguientes corridas: 1) RBO: 4, 12 a 19 y 24; 2) RBB: 13 a 19 y 24 y 3) HYS: 3 y 19.

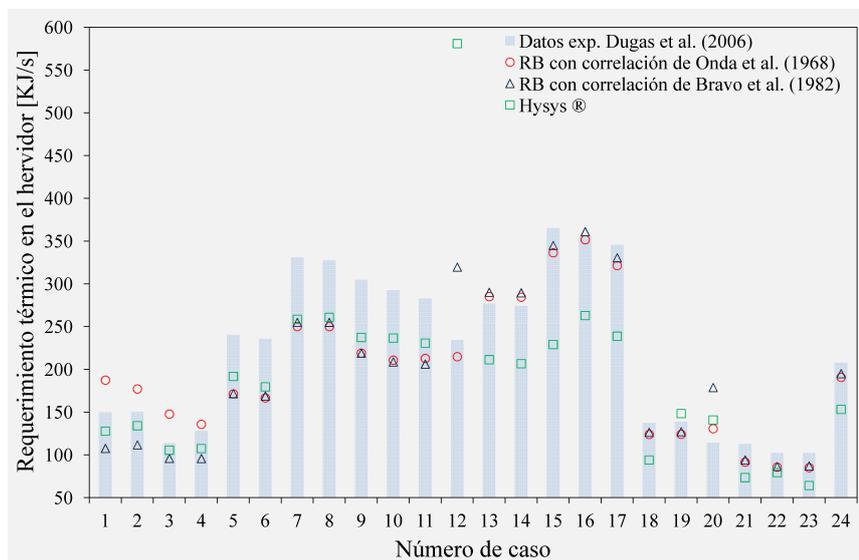
En la Tabla 3.4 se lista el porcentaje de error del calor de reboiler específico (KJ/kg de  $CO_2$  capturado) y el flujo de líquido que abandona la columna regeneradora. Como se puede observar, mediante el empleo de ambas correlaciones se brindan errores similares y aceptables para el flujo de líquido (RBO: 2.72 %; RBB: 2.22 %). Sin embargo, los errores en la determinación del calor de reboiler específico son superiores y dependen fuertemente de la correlación utilizada, contrariamente a lo observado para el caso de la temperatura.

De acuerdo a los resultados, es posible definir rangos de errores con el fin de analizar la influencia de las correlaciones. A partir del modelo RBO, se obtienen 10 puntos con errores inferiores al 10 % (casos 1-3, 12-14, 16-18 y 24) y 4 puntos con diferencias relativas entre 10

---



(a) Temperatura del líquido



(b) Calor requerido

Figura 3.4 – Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): condiciones operativas en el hervidor.

y 15 %. En forma similar, la aplicación del modelo RBB para los casos 13 a 19 y 24 presenta errores inferiores al 10 %, mientras que el caso 23 presenta un desvío de 15.0 %. Para los casos 5 a 11, 21 y 23 el modelo RBB predice valores más aproximados, aunque con errores comprendidos entre 15.6 y 30.2 %. En la predicción de  $Q_R$ , RBB es más precisa que RBO.

En principio, para “superar” el problema relacionado con las incertidumbres asociadas a los datos divulgados por Dugas (2006) sobre los calores de reboiler, se comparan los valores obtenidos por el modelo con los publicados por otros autores (Cottrell et al., 2009; Kwak

Tabla 3.4 – Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): desvío entre los datos estimados y los datos experimentales.

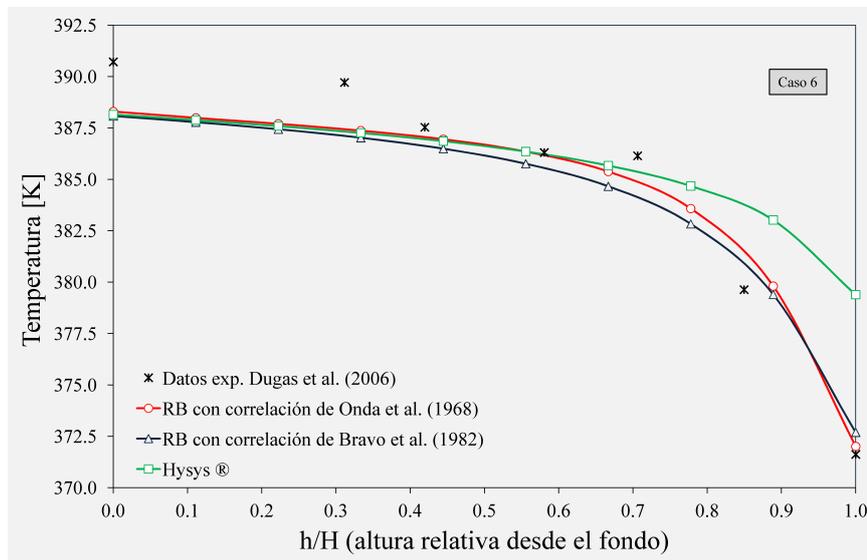
Caso	Desvío promedio [%]								
	Calor de reboiler específico			Flujo de amina ( $L_R$ )			Temp. en el hervidor ( $T_R$ )		
	[1]	[2]	[3]	[1]	[2]	[3]	[1]	[2]	[3]
1	4.7	28.0	14.7	2.89	2.18	0.48	1.08	1.32	1.21
2	8.8	25.7	10.8	2.13	1.50	-0.19	0.24	0.46	0.36
3	-6.3	15.6	7.1	3.16	2.55	0.87	0.26	0.44	0.36
4	13.1	25.2	16.0	1.56	1.00	-0.67	0.28	0.45	0.37
5	32.1	29.3	20.1	4.35	2.96	0.77	0.40	0.48	0.41
6	32.7	30.2	23.8	2.96	1.21	-1.13	0.43	0.49	0.44
7	28.1	26.7	21.8	5.72	3.89	1.31	0.39	0.41	0.39
8	27.2	25.8	20.3	5.40	3.55	1.03	0.38	0.40	0.39
9	31.5	29.8	22.2	4.97	3.66	1.82	0.38	0.42	0.38
10	32.1	29.6	19.2	4.05	3.04	1.09	0.39	0.45	0.40
11	31.2	27.8	18.4	3.56	3.25	1.34	0.33	0.41	0.37
12	3.5	-43.5	-147.8	4.37	4.37	3.91	0.34	0.34	0.26
13	2.1	0.3	23.7	4.59	4.59	0.82	0.67	0.67	0.38
14	1.3	-0.5	24.7	4.60	4.60	0.62	0.61	0.61	0.54
15	12.2	10.0	37.3	5.85	5.85	0.98	2.06	2.06	2.01
16	1.1	-1.5	26.1	-0.14	-0.14	-0.25	2.11	2.11	0.88
17	6.9	4.3	30.9	0.57	0.57	0.44	2.44	2.44	1.13
18	10.0	8.1	31.7	-0.01	-0.01	-0.08	1.05	1.05	0.49
19	10.4	8.3	-6.8	0.60	0.60	0.63	0.23	0.23	0.02
20	-14.2	-56.2	7.2	-1.83	-1.83	-2.01	-0.05	-0.05	-0.12
21	18.9	16.6	40.3	2.90	2.90	3.22	1.23	1.23	0.39
22	16.4	15.6	22.7	2.02	2.02	1.86	0.55	0.55	0.21
23	16.8	15.0	38.2	0.77	0.77	0.63	1.08	1.08	0.49
24	8.3	6.2	35.8	0.33	0.33	0.87	1.29	1.29	0.36

[1] RB con correlación de Onda et al. (1968); [2] RB con correlación de Bravo et al. (1982); [3] Simulador de procesos (Hysys)

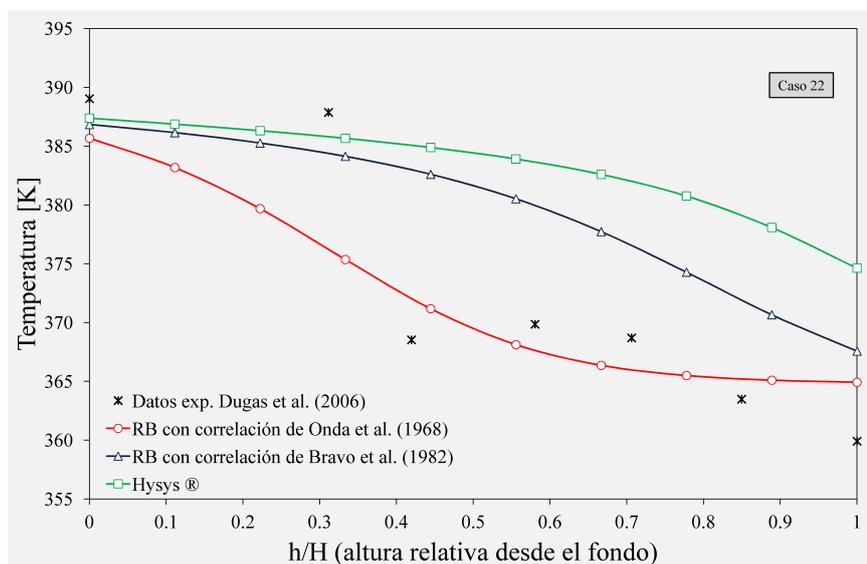
et al., 2012; Mangalapally et al., 2009; Tobiesen et al., 2008). El rango reportado es muy amplio y varía entre 3.6 y 11.2 GJ/tn para diferentes condiciones operativas y de diseño. A pesar de que las bases de comparación no son exactamente las mismas (diagramas de flujo e hipótesis ligeramente diferentes), es posible concluir que los valores de  $Q_R$  predichos por el modelo se aproximan en forma precisa a los valores reportados, e incluso más exacta que en la comparación con Dugas (2006).

Para una verificación más completa, también se compararon los perfiles de temperatura

dentro de la columna. La Figura 3.5 presenta la distribución de temperatura a lo largo de la unidad de regeneración para los casos 6 y 22. En ambos casos, se utilizaron como base para la comparación, los valores experimentales medidos a distintas alturas de la columna regeneradora.



(a) Caso 6



(b) Caso 22

Figura 3.5 – Verificación del modelo de la columna de regeneración por comparación con los datos experimentales reportados por Dugas (2006): perfil de temperatura.

Como se muestra en la Figura 3.5a, los perfiles obtenidos por los modelos RBB y RBO son similares y se aproximan muy bien a los datos experimentales, con errores inferiores al 0.7%. No obstante, el perfil de temperatura obtenido mediante RBB es levemente más

preciso. Los resultados de simulación obtenidos con Hysys presentan un error máximo del orden del 2.1 %. Los casos 1 a 13 presentan perfiles acordes a lo mostrado en la Figura 3.5a.

En contraste, la Figura 3.5b revela que los valores calculados son similares en los extremos, aunque algo diferentes en el interior de la columna. Como se puede observar en la última Figura, desde  $h/H=0$  hasta  $h/H=0.35$ , el modelo RBB predice valores más aproximados a los valores experimentales mientras que a partir de  $h/H=0.4$ , el modelo RBO arroja resultados más apropiados. Los casos 17 a 24 presentan perfiles y comportamientos similares a los discutidos en el caso 22.

En líneas generales, es posible concluir que los resultados obtenidos mediante el modelo riguroso desarrollado se aproximan de manera aceptable a los datos experimentales; aun así pueden observarse algunas discrepancias con diferentes niveles de error para cada una de las variables analizadas.

Para la mayoría de los casos y las variables analizadas, el modelo basado en la correlación propuesta por Bravo (RBB) ofrece mejores aproximaciones a los valores experimentales en comparación con el modelo RBO, observándose que para el resto de los casos, ambos modelos predicen valores muy similares. Por otro lado, la carga térmica en el rehervidor  $Q_R$  (que es considerada la variable más representativa) se ajusta mejor a los datos experimentales con el modelo RBO. De esta manera, resulta difícil decidir sobre la conveniencia de utilizar una u otra correlación, por lo que en la siguiente sección se emplearán ambas y se seguirán comparando los resultados.

---

## 3.4. Diseño óptimo de las etapas de regeneración del solvente y compresión de $CO_2$

### 3.4.1. Formulación del problema de optimización

La formulación del problema (P1), planteada en forma genérica en la Sección 2.4.1, se define de la siguiente manera:

Dado el diagrama de flujo mostrado en la Figura 3.1 y dadas las condiciones de amina rica (composición, temperatura y flujo) y la presión de operación en el rehervidor, el objetivo consiste en determinar las condiciones diseño y de operación óptimas con el fin de maximizar la eficiencia de regeneración. Precisamente, se definen como funciones objetivo dos tipos de eficiencias, según se describe a continuación:

- Minimizar la relación entre el requerimiento energético en el rehervidor y la cantidad de dióxido de carbono removida de la corriente de amina rica en  $CO_2$ .

$$FO_1 = \frac{Q_R}{G_{CO_2}CY_{CO_2}C} \quad (3.36)$$

- Minimizar la relación entre el requerimiento energético total (servicios de calefacción, enfriamiento y energía mecánica) y la cantidad de dióxido de carbono removida de la corriente de amina rica en  $CO_2$ .

$$FO_2 = \frac{Q_R + (Q_{E2} + Q_{E3} + Q_C) + (W_{comp.} + W_{B1})}{G_{CO_2}CY_{CO_2}C} \quad (3.37)$$

De esta manera, a diferencia de la sección anterior, el modelo propuesto es utilizado para optimizar el proceso ilustrado en la Figura 3.1, teniendo en cuenta los objetivos considerados en la  $FO_1$  y la  $FO_2$ . Para llevar a cabo las optimizaciones, se procedió a “liberar” los valores numéricos correspondientes a ciertas variables, que se mantuvieron fijos en el caso de verificación (diámetro, altura, relación H/D, carga de amina, caída de presión, temperatura en el condensador, diferencia de temperatura en el extremo caliente del economizador, entre otras), introduciéndose además para cada una de las variables, una cota inferior y

superior. De esta forma, dichas variables forman parte de la optimización y su valor óptimo se encontrará entre sus correspondientes cotas.

Las Tablas 3.5 y 3.6 presentan las características del empaque y las condiciones operativas empleadas para efectuar las optimizaciones y posterior análisis de resultados. Específicamente, se asumen tres valores para la presión operativa en el reboiler (130, 165 y 200 kPa) y 21 valores para la carga de amina que alimenta la columna ( $0.35 \leq \alpha_R \leq 0.55$ ), con el fin de obtener, para cada caso, los correspondientes conjuntos de valores óptimos de las principales variables de proceso: requerimientos energéticos, servicios auxiliares de calefacción y enfriamiento, dimensiones de los equipos principales (condensador, reboiler, columna de regeneración, compresores, intercambiadores, etc.), perfiles internos de temperatura, flujos y composición, caídas de presión, entre otras.

Además se comparan nuevamente los resultados obtenidos a partir de las correlaciones propuestas por Onda et al. (1968) y Bravo y Fair (1982).

Tabla 3.5 – Diseño óptimo: parámetros del modelo, características del empaque.

<b>Características de la columna</b>	
Tipo de columna	Empacada
Tipo de empaque	Sillas Intalox de cerámica
Área específica [m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	118
Tamaño nominal [m]	0.05
Factor de empaque [m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	121.4
Fracción de huecos	0.78

Tabla 3.6 – Diseño óptimo: Parámetros del modelo, condiciones de operación.

<b>Especificaciones de diseño</b>	
Flujo de amina [mol/s]	20000
Carga de CO <sub>2</sub> en la corriente de amina rica [(mol CO <sub>2</sub> /mol MEA)]	0.30-0.55
Temperatura de amina pobre (T <sub>LCC</sub> ) en el punto de alim. a la col. de abs. [K]	313.15
Temperatura de amina rica que sale de la col. de absorción [K]	320
Presión en el rehervidor [kPa]	130; 165; 200
Caudal de condensado adicional (G <sub>C</sub> <sup>+</sup> ) [mol/s]	0

### 3.4.2. Diseño óptimo. Análisis y discusión de resultados

#### Caso 1a. Influencia de la carga de $CO_2$ ( $\alpha_R$ ) y la presión operativa del rehervidor en la optimización de la etapa de desorción y compresión de $CO_2$ empleando la FO1. Empleo de la correlación de Onda

El análisis de los resultados se realiza en términos de temperaturas, flujos, cargas térmicas, caída de presión en la columna, capacidades de equipos (volumen de empaque, áreas de intercambio térmico, trabajo de bombeo y compresión) y consumo de los diferentes servicios auxiliares (vapor de proceso, agua de enfriamiento y electricidad). Los valores óptimos para cada valor de  $\alpha_R$  y presión operativa, se presentan mediante las Figuras 3.6 a 3.13 y las Tablas 3.7 y 3.8.

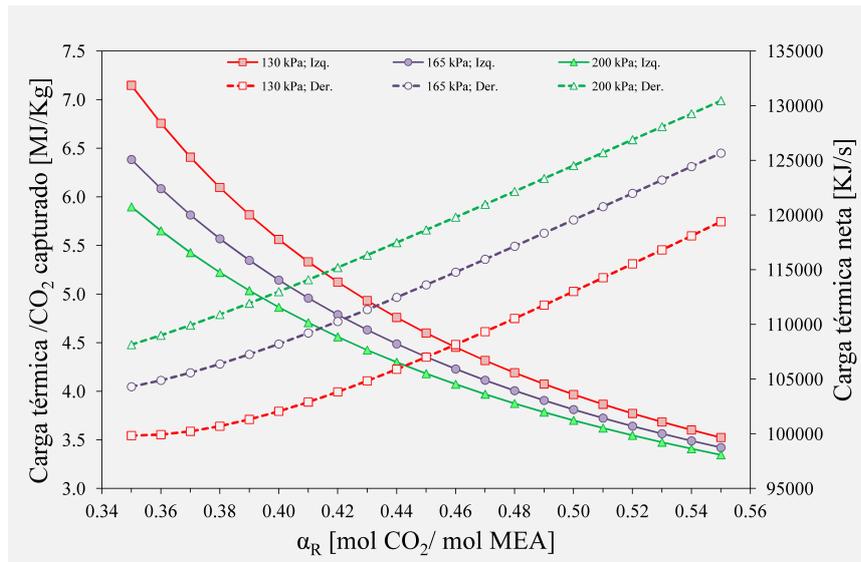
La Figura 3.6 ilustra la evolución de la función objetivo y las variables que la conforman (carga térmica neta ( $Q_R$ ) y cantidad de  $CO_2$  desorbida), para el conjunto de parámetros asumidos.

Según indica la Figura 3.6a, la carga térmica específica en el rehervidor (FO1) disminuye con el incremento de la concentración de  $CO_2$  en la alimentación a la columna ( $\alpha_R$ ) y con el incremento de la presión operativa en el rehervidor. Por el contrario, tanto el calor requerido para la recuperación alcanzada en cada caso (Fig. 3.6a), como la cantidad de  $CO_2$  desorbida (Fig. 3.6b), se incrementan con el aumento de  $\alpha_R$  y disminuyen con el aumento de  $P_R$ . Se observa un comportamiento similar en la carga térmica específica y la carga térmica neta requeridas en el condensador (Fig. 3.7), siendo  $Q_C$  alrededor de 32 % menor que  $Q_R$ .

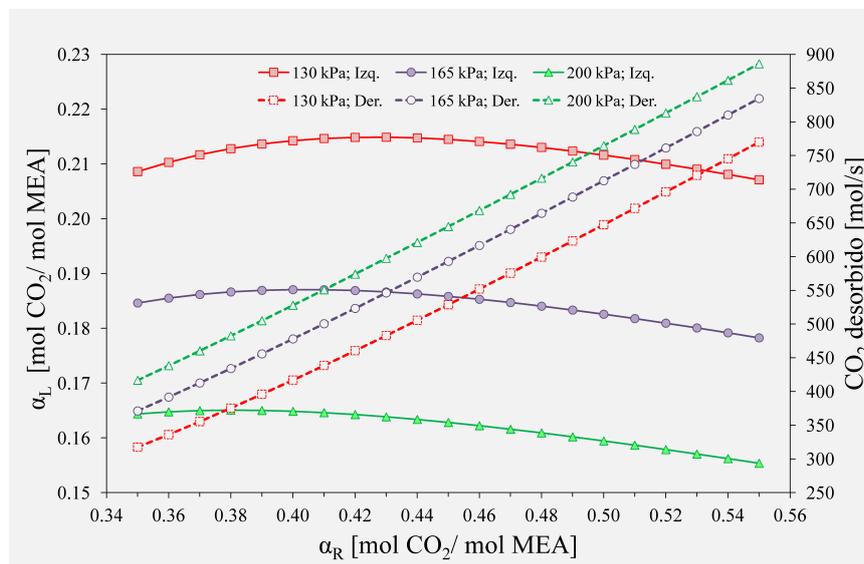
En la Figura 3.6b se representa además la carga óptima de alimentación a la absorbidora ( $\alpha_L$ ), la cual varía según los siguientes rangos 0.2071-0.2149, 0.1783-0.1871 y 0.1554-0.1651 con valores máximos en  $\alpha_R = 0.43$ ;  $\alpha_R = 0.40$  y  $\alpha_R = 0.38$  para 130, 165 y 200 kPa, respectivamente.

La corriente de amina pobre en  $CO_2$  que abandona el rehervidor, se enfría en los intercambiadores de calor [I1] y [E2] antes de ingresar a la columna de absorción, con el fin de favorecer la eficiencia de absorción. En la Figura 3.8 se representa la cantidad de energía requerida en el economizador [I1] así como el porcentaje del requerimiento total para llevar la temperatura del solvente hasta 313.15 K, valor sugerido por varios autores.

---



(a) Requerimiento térmico en el rehervidor.



(b) Cantidad de  $CO_2$  desorbida.

Figura 3.6 – Diseño óptimo. Caso 1a:  $FO_1$  y sus componentes en función de la carga de amina rica ( $\alpha_R$ ).

En el economizador se reduce el 78.8%, 81.0% y 82.4% de la carga térmica total si la presión de operación en el rehervidor es de 130, 165 y 200 kPa, respectivamente. La energía remanente se reduce en el intercambiador [E2] utilizando agua de enfriamiento, la que se encuentra disponible a la temperatura de 298.15 K.

En las Figuras 3.9 y 3.10 se muestran las dimensiones óptimas de la columna y la caída de presión asociada a cada condición operativa.

- La altura de la columna disminuye al aumentar la carga de amina ( $\alpha_R$ ), mientras que

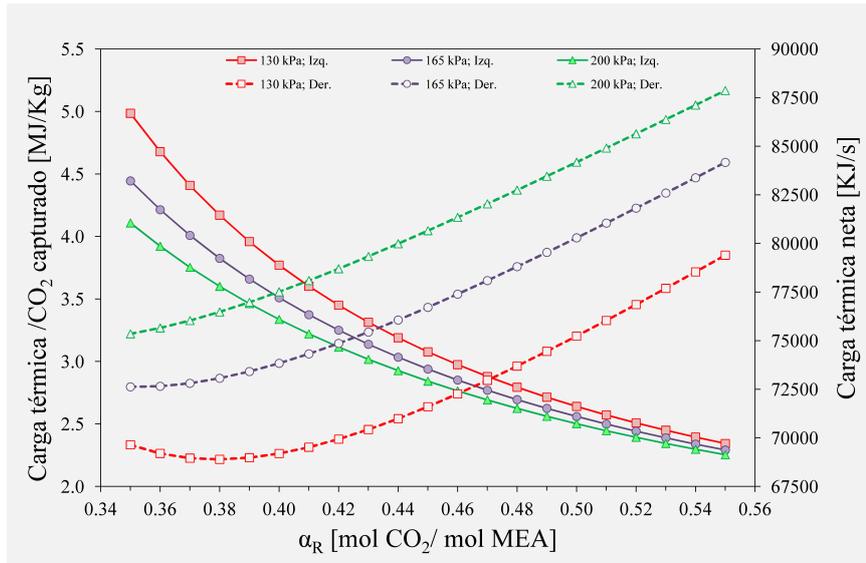


Figura 3.7 – Diseño óptimo. Caso 1a: requerimiento térmico en el condensador.

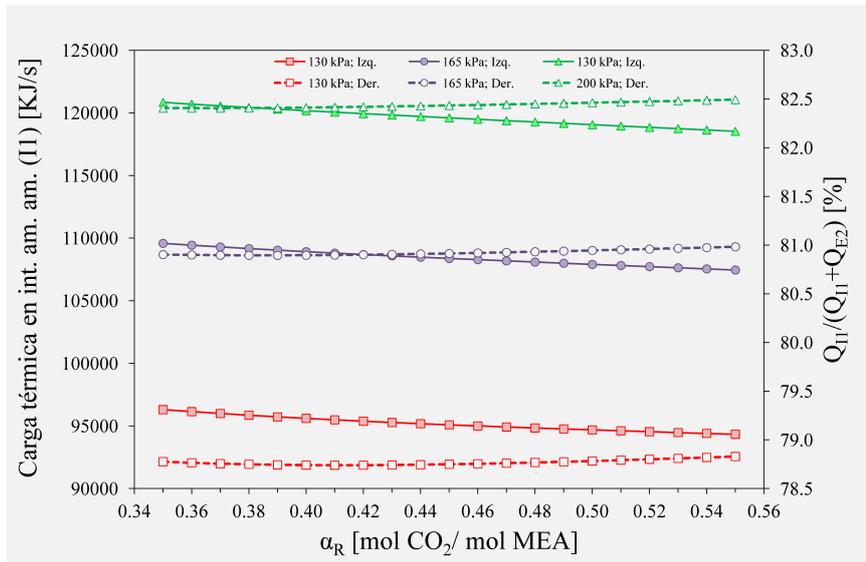


Figura 3.8 – Diseño óptimo. Caso 1a: etapa de enfriamiento de la corriente de amina pobre.

el diámetro, aunque con muy poca variación con la concentración de  $CO_2$ , presenta valores mínimos para cada nivel de presión considerado. El diámetro óptimo es de 5.4 m en promedio (Figura 3.9a).

- La relación entre la altura y el diámetro ( $H/D$ ) disminuye con el incremento de  $\alpha_R$  y  $P_R$  (Figura 3.10).
- Dichas relaciones en las dimensiones de la columna, arrojan como resultado valores mínimos de volumen en el rango de  $\alpha_R$  analizado (Figura 3.9b). Específicamente, 359.6, 340.8 y 324.2  $m^3$  para valores de  $\alpha_R$  iguales a 0.43, 0.40 y 0.38 a 130, 165 y 200

kPa, respectivamente. Por otra parte, mayores niveles de presión de operación en el reboiler se traducen en menores volúmenes de empaque. En particular, para  $\alpha_R = 0.35$  el volumen de empaque para  $P_R = 200 \text{ kPa}$  es 15.2 % inferior que para  $P_R = 130 \text{ kPa}$ , mientras que para  $\alpha_R = 0.55$  dicha diferencia disminuye aproximadamente a un 10 %. Aun con volúmenes menores, la cantidad de  $\text{CO}_2$  desorbida es 31.3 % mayor para  $\alpha_R = 0.35$  y 15.1 % mayor para  $\alpha_R = 0.55$ .

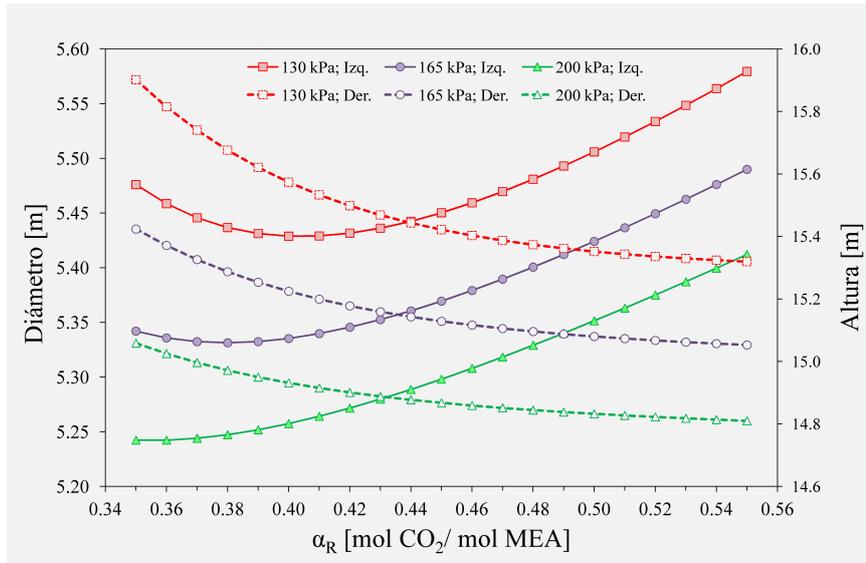
- La caída de presión ( $\Delta P$ ) es menor en las columnas de menor tamaño (con menor relación H/D), que corresponde a presiones operativas de 200 kPa en todo el rango de  $\alpha_R$  analizado. Para 130 kPa, la  $\Delta P$  decrece desde  $\alpha_R = 0.35$  hasta  $\alpha_R = 0.41$  y luego se incrementa. En forma similar, para 165 kPa se presenta una mínima caída de presión en  $\alpha_R = 0.38$ .

En la Figura 3.11 se observa que el trabajo de compresión se incrementa con el aumento de la presión y de la carga de  $\text{CO}_2$  en la corriente de amina rica. Si bien el trabajo de bombeo también se incrementa, el porcentaje de esta variable respecto al trabajo de compresión es despreciable (inferior al 1 %). La relación de compresión entre las etapas se mantiene prácticamente constante en todo el rango de  $\alpha_R$  considerado y disminuye con la presión: 2.87, 2.7 y 2.57 para 130, 165 y 200 kPa, respectivamente.

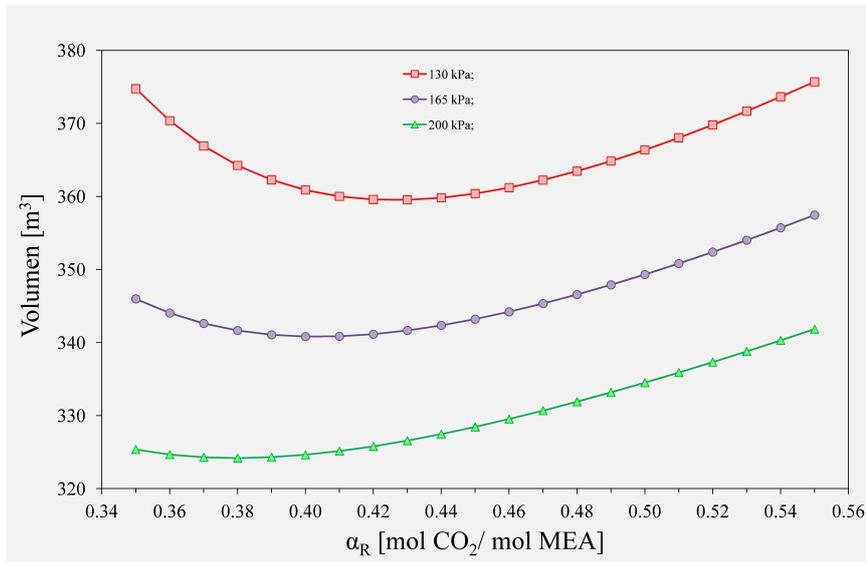
En la Figura 3.12 se muestra el efecto de la variación de  $\alpha_R$  y  $P_R$  en el flujo de vapor y líquido recirculados a la columna regeneradora. Se observa que la cantidad de agua condensada que se recircula al tope de la columna disminuye con el incremento de  $\alpha_R$ . Específicamente, a partir de un valor de  $\alpha_R = 0.35$  hasta  $\alpha_R = 0.55$ , la reducción que se alcanza es de 46.4 % para 130 kPa, 43.9 % para 165 kPa, y 42.4 % para 200 kPa. Por el contrario, la cantidad de vapor generada en el hervidor aumenta, respectivamente, en 19.7, 21.4 y 22.0 %.

Por otro lado, la influencia de la presión en el flujo de vapor recirculado es más importante que en el flujo de líquido. Por ejemplo, para  $\alpha_R = 0.45$  el flujo de vapor es de 2087 mol/s para 130 kPa y 2403 mol/s (15.1 % mayor) para 200 kPa, mientras que el flujo de líquido es de 630 mol/s a 130 kPa y 3.5 % mayor a 200 kPa.

Como indica la Figura 3.13, operar la columna a mayor presión implica también mayores



(a) Diámetro y altura



(b) Volumen del empaque

Figura 3.9 – Diseño óptimo. Caso 1a: dimensiones óptimas de la columna de regeneración.

niveles de temperatura, tanto en la columna de regeneración como en el rehervidor, por lo que se necesita mayor consumo de agua de enfriamiento para disminuir dichas temperaturas hasta la condición óptima de alimentación de la columna de absorción. Sin embargo, el consumo específico [ $\text{m}^3/\text{tn } \text{CO}_2$ ] disminuye con el aumento de presión y carga de amina. La Tabla 3.7 presenta el requerimiento porcentual de agua de enfriamiento en cada equipo y puede apreciarse que alrededor del 63.7% se consume en el condensador [CND], 21.3% en el intercambiador amina-agua [E2], y el resto (15%) en los interenfriadores [E3].

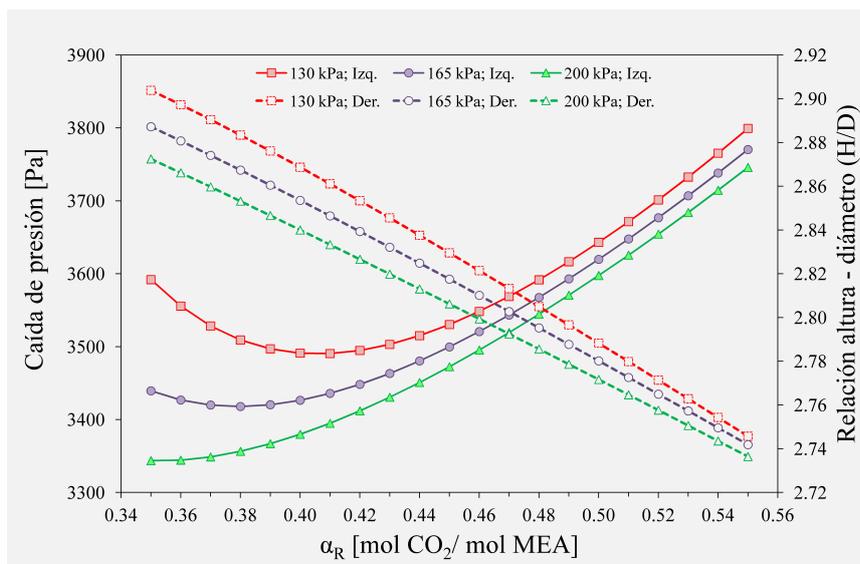


Figura 3.10 – Diseño óptimo. Caso 1a: caída de presión y relaciones de tamaño óptimas (H/D).

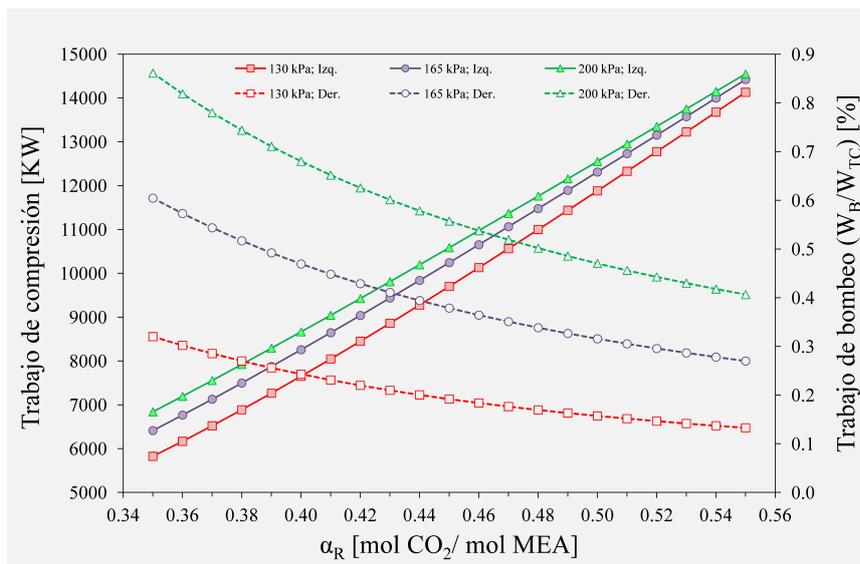


Figura 3.11 – Diseño óptimo. Caso 1a: trabajo óptimo de bombeo y compresión.

En las Figuras 3.14 y 3.15, se ilustra el efecto de la carga de amina rica y la presión operativa en el área de intercambio térmico de los diferentes equipos (intercambiador amina amina [I1], rehervidor [REB], condensador [CND], intercambiador amina agua [E2] e interenfriadores [E3]), directamente relacionada a las diferencias de temperatura y el requerimiento de energía.

Se puede observar en la Figura 3.14a, que un aumento del nivel de presión ( $P_R$ ) produce un aumento del área requerida en el rehervidor ( $A_R$ ) y el economizador ( $A_{I1}$ ). Específicamente, para  $\alpha_R = 0.45$  las áreas  $A_R$  y  $A_{I1}$  son, respectivamente, 4562 y 14513  $m^2$

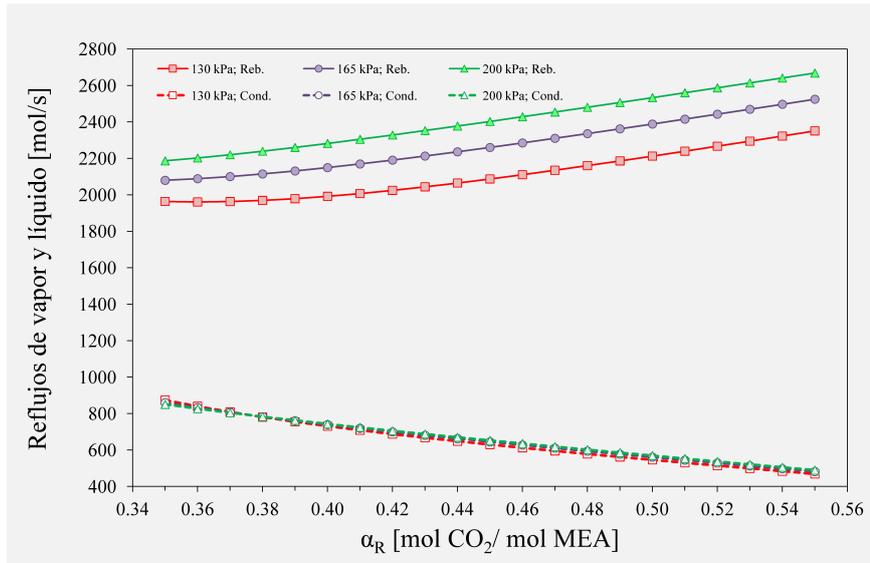


Figura 3.12 – Diseño óptimo. Caso 1a: recirculación óptima de líquido y vapor.

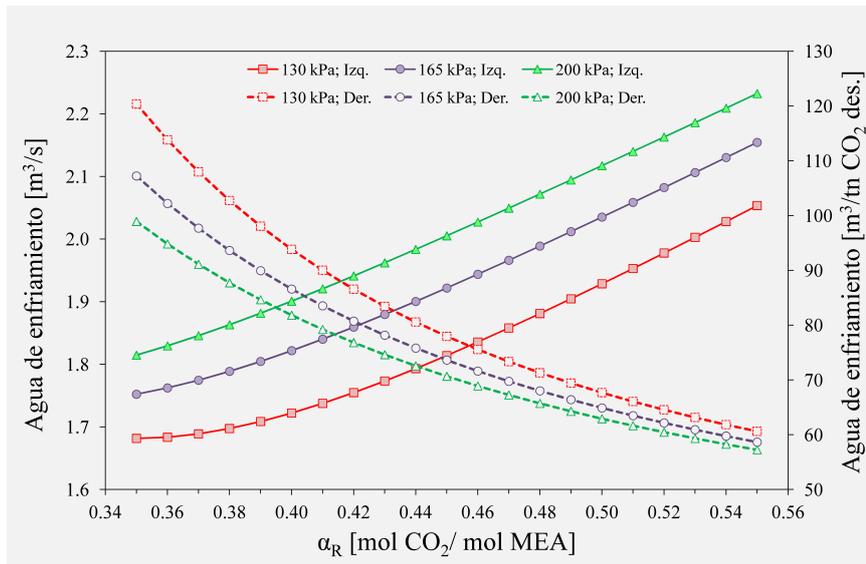


Figura 3.13 – Diseño óptimo. Caso 1a: requerimiento total de agua de enfriamiento.

para 130 kPa, incrementándose 10.7% y 22.2% para 200 kPa. Por otra parte, un aumento en la carga de amina produce un incremento del área en el rehervidor y una disminución en el economizador: en el rango de  $\alpha_R$  adoptado  $A_R$  aumenta, en promedio, 18.2, 19.7 y 20.3% mientras que  $A_{I1}$  disminuye 8.3, 9.0 y 9.6%, para 130, 165 y 200 kPa, respectivamente.

En la Figura 3.14b se presenta el valor de la diferencia media logarítmica de temperatura ( $DMLT$ ) para el economizador y el rehervidor. En el economizador, la  $DMLT$  aumenta con el incremento de  $\alpha_R$  y  $P_R$ , mientras que en el rehervidor se puede observar la presencia de valores máximos.

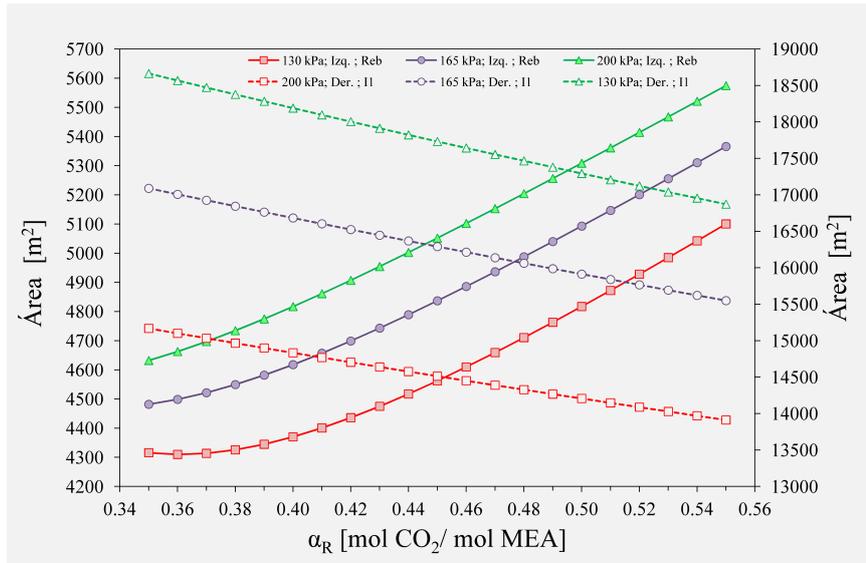
Tabla 3.7 – Diseño óptimo. Caso 1a: Agua de enfriamiento, porcentaje del requerimiento total.

$\alpha_R$	Agua de enfriamiento [%]								
	Condensador [CND]			Intercambiador am-agua [E2]			Interenfriadores [E3]		
-	130 kPa	165 kPa	200 kPa	130 kPa	165 kPa	200 kPa	130 kPa	165 kPa	200 kPa
0.35	65.99	66.04	66.17	24.58	23.52	22.65	9.43	10.44	11.18
0.36	65.49	65.69	65.89	24.53	23.36	22.44	9.97	10.95	11.66
0.37	65.06	65.37	65.64	24.43	23.17	22.22	10.51	11.45	12.14
0.38	64.67	65.08	65.40	24.28	22.96	21.99	11.05	11.95	12.61
0.39	64.33	64.82	65.18	24.10	22.74	21.75	11.58	12.44	13.07
0.40	64.02	64.58	64.98	23.88	22.50	21.50	12.10	12.93	13.52
0.41	63.75	64.36	64.78	23.64	22.25	21.25	12.61	13.40	13.97
0.42	63.50	64.15	64.60	23.38	21.99	21.00	13.11	13.86	14.40
0.43	63.28	63.95	64.42	23.11	21.73	20.75	13.61	14.32	14.83
0.44	63.08	63.77	64.25	22.83	21.46	20.50	14.09	14.77	15.25
0.45	62.89	63.60	64.09	22.54	21.19	20.25	14.57	15.20	15.66
0.46	62.73	63.44	63.93	22.25	20.93	20.01	15.03	15.63	16.06
0.47	62.57	63.28	63.78	21.95	20.66	19.76	15.48	16.05	16.45
0.48	62.42	63.14	63.63	21.65	20.40	19.52	15.92	16.46	16.84
0.49	62.28	63.00	63.49	21.36	20.14	19.29	16.36	16.86	17.22
0.50	62.16	62.86	63.35	21.07	19.89	19.06	16.78	17.25	17.59
0.51	62.03	62.73	63.22	20.78	19.63	18.83	17.19	17.64	17.95
0.52	61.92	62.60	63.09	20.49	19.38	18.60	17.59	18.01	18.31
0.53	61.81	62.48	62.96	20.21	19.14	18.38	17.98	18.38	18.66
0.54	61.70	62.36	62.83	19.93	18.90	18.17	18.36	18.74	19.00
0.55	61.61	62.25	62.71	19.66	18.66	17.95	18.74	19.09	19.33

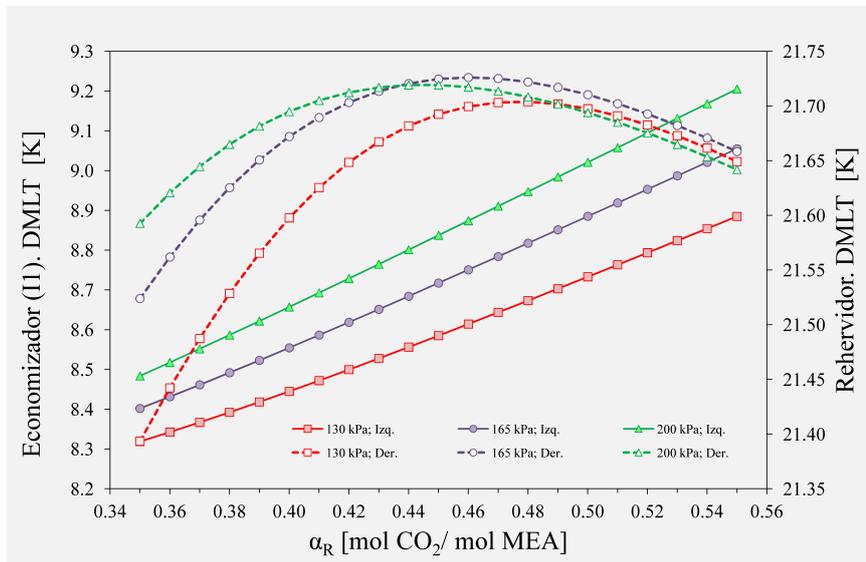
En la Figura 3.15 se presenta el área de transferencia de calor requerida en los equipos que emplean agua de enfriamiento como servicio auxiliar.

Si bien, de acuerdo a la Figura 3.7, el requerimiento térmico aumenta con el aumento de  $\alpha_R$  y  $P_R$  (excepto para  $P_R = 130$  y  $0.35 \leq \alpha_R \leq 0.38$ ), la DMLT disminuye linealmente con el incremento de  $\alpha_R$ : desde 46.89 hasta 40.86, desde 53.30 hasta 47.26 y desde 58.53 hasta 52.52 K a 130, 165 y 200 kPa, respectivamente, lo que se traduce en un aumento del área del condensador con el aumento de  $\alpha_R$  y una disminución con el aumento de presión (Figura 3.15a).

En la Figura 3.15b se observa que el área asociada al intercambiador amina-agua ( $A_{E2}$ ) disminuye con el aumento de  $\alpha_R$  y de  $P_R$ , mientras que el área total en los interenfriadores presenta un comportamiento opuesto. En particular, considerando que la diferencia media



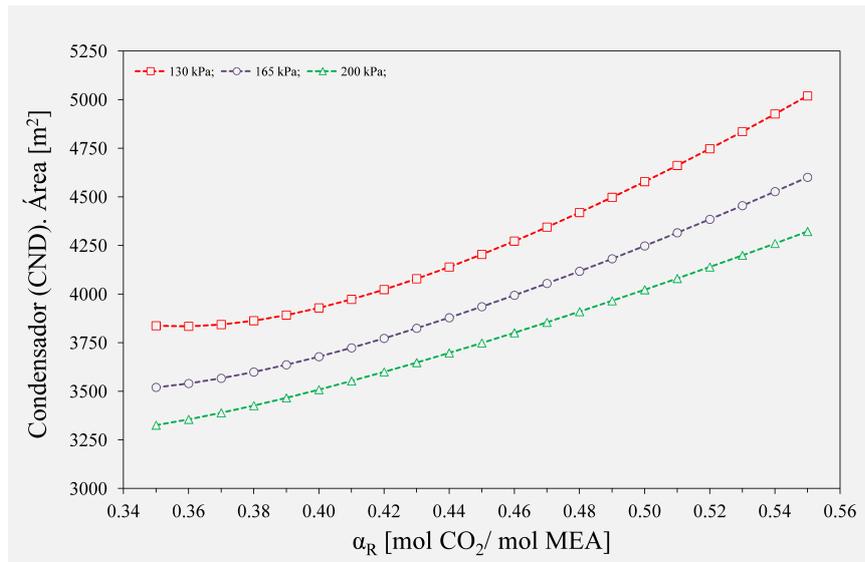
(a) Área



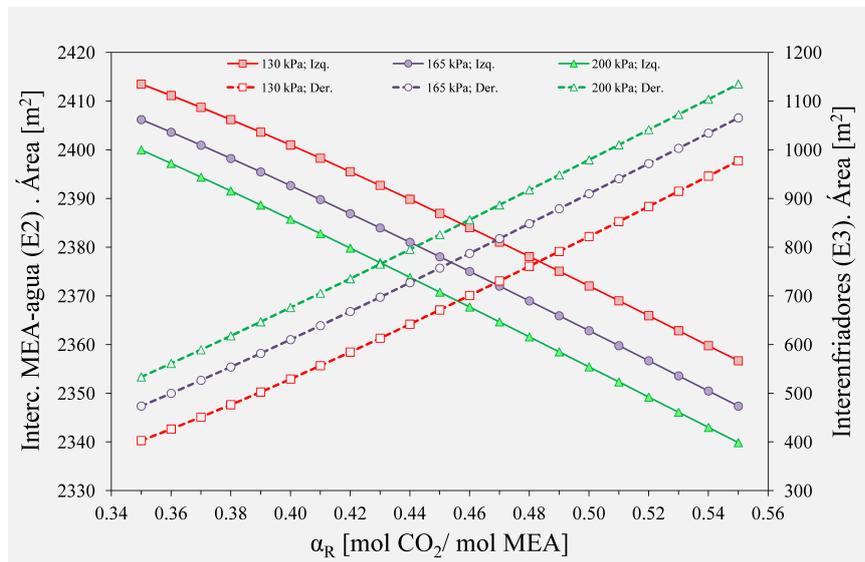
(b) Diferencia media logarítmica de temperaturas.

Figura 3.14 – Diseño óptimo. Caso 1a: área de intercambio térmico requerida en el rehervidor y en el economizador.

logarítmica de temperatura en [E2] tiene un valor constante (15.03 K), las áreas requeridas para la transferencia de energía presentan el mismo perfil que el requerimiento térmico (de acuerdo a la Ec. 3.26).



(a) Condensador.



(b) Intercambiador amina agua e interenfriadores.

Figura 3.15 – Diseño óptimo. Caso 1a: área de intercambio térmico requerida en los equipos de enfriamiento.

**Caso 1b. Influencia de la carga de  $CO_2$  ( $\alpha_R$ ) y la presión operativa del rehervidor en la optimización de la etapa de desorción y compresión de  $CO_2$  empleando la FO1. Comparación de resultados entre el empleo de la correlación de Onda y la correlación de Bravo**

Los resultados obtenidos mediante el empleo de la correlación de Onda (Caso 1a) y la correlación de Bravo presentan perfiles similares con valores del mismo orden de magnitud.

El análisis se realiza en términos de las variables de diseño referidas a la cantidad de  $CO_2$  desorbida (Fig. 3.16 a 3.21) y los perfiles internos de temperatura y composición (Fig. 3.22 y 3.23 ), a partir de las cuales se pueden realizar las siguientes observaciones:

- Para cada nivel de presión en el rehervidor, el empleo de la correlación de Bravo arroja como resultado valores específicos más altos.
- En todos los casos, las variables específicas disminuyen con el aumento de la carga de  $CO_2$  en la corriente de amina rica.
- Un aumento del nivel de presión reduce el tamaño de la columna (Fig. 3.16), el área del rehervidor (Fig. 3.18), el área del intercambiador amina-agua (Fig. 3.20) y el correspondiente consumo de agua de enfriamiento (Fig. 3.21). Por otro lado, se observa un aumento del consumo de trabajo para bombear el solvente (Fig. 3.17). Finalmente, el área del economizador aumenta con el aumento de la presión para  $0.35 \leq \alpha_R \leq 0.43$  cuando se emplea RBO, mientras que dicha tendencia se mantiene hasta  $\alpha_R = 0.52$  con RBB.

En las Figuras 3.22 y 3.23 se comparan los perfiles óptimos de temperatura y composición en la columna regeneradora que se obtienen con los modelos RBO y RBB para distintos valores de presión y carga de amina rica.

En la Figura 3.22 se observa que RBO y RBB presentan distribuciones similares de temperatura en el interior de la columna, con niveles térmicos superiores a mayores presiones operativas y a menores cargas de  $CO_2$ . En particular, una alimentación con  $\alpha_R = 0.35$  decrece casi linealmente a partir del fondo de la columna.

El perfil de composición en la corriente líquida obtenido a partir del modelo RBB es mayor que el obtenido por el modelo RBO (Fig. 3.23a y 3.23b). Por ejemplo, en el fondo de la columna la carga de  $CO_2$  en el solvente usando RBB es, en promedio, 20.2, 25.3 y 28.8 % mayor para  $\alpha_R = 0.35, 0.45$  y  $0.55$ , respectivamente. Sin embargo, en el tope de la columna las diferencias son considerablemente menores (1.4, 2.00 y 2.2 %).

---

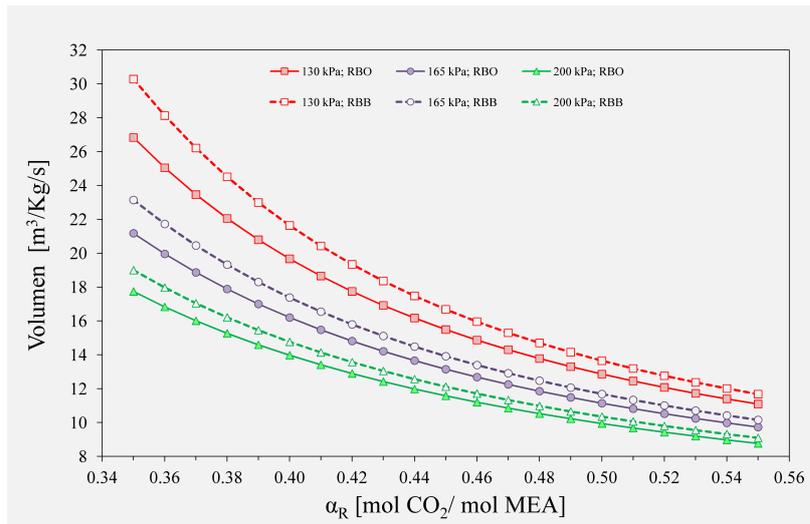


Figura 3.16 – Diseño óptimo. Caso 1b: volumen específico de la columna regeneradora.

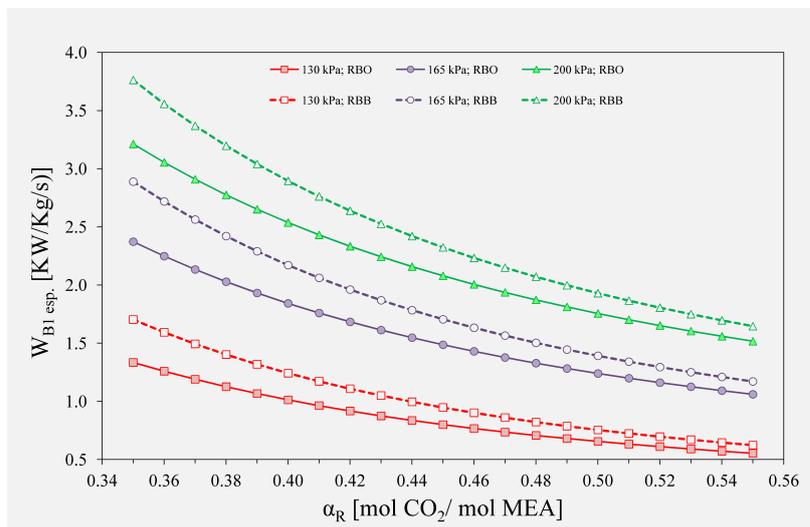


Figura 3.17 – Diseño óptimo. Caso 1b: trabajo de compresión específico.

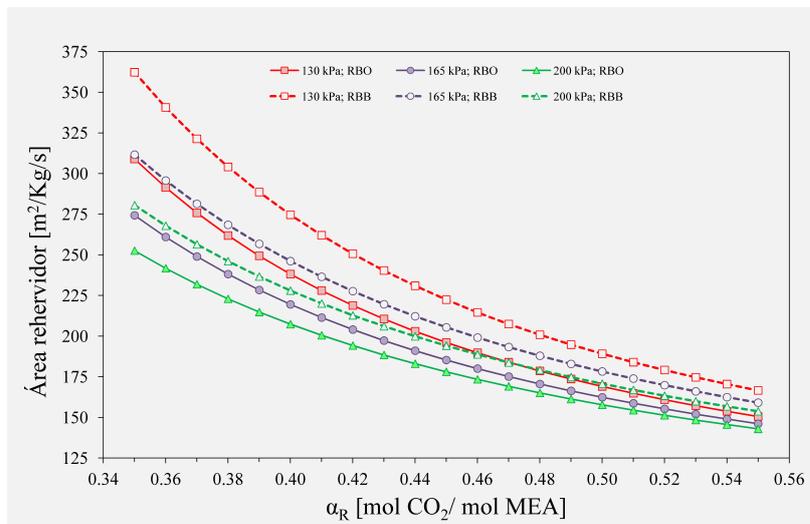


Figura 3.18 – Diseño óptimo. Caso 1b: área específica de intercambio térmico requerida en el rehervidor.

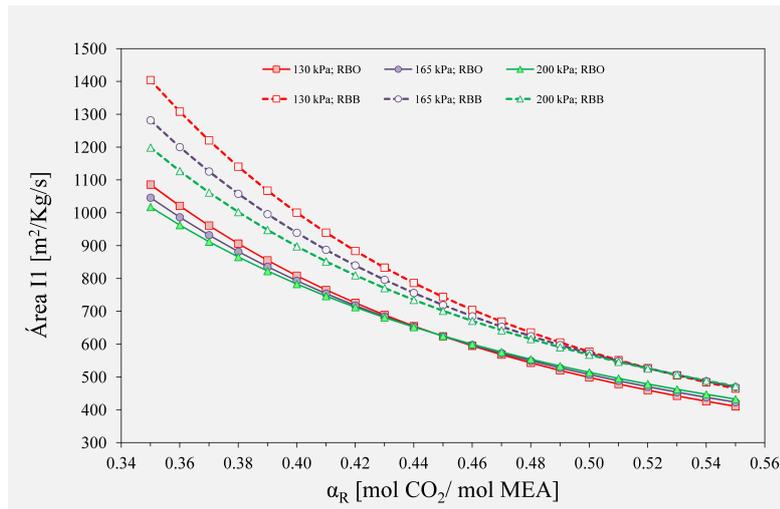


Figura 3.19 – Diseño óptimo. Caso 1b: área específica de intercambio térmico requerida en el economizador.

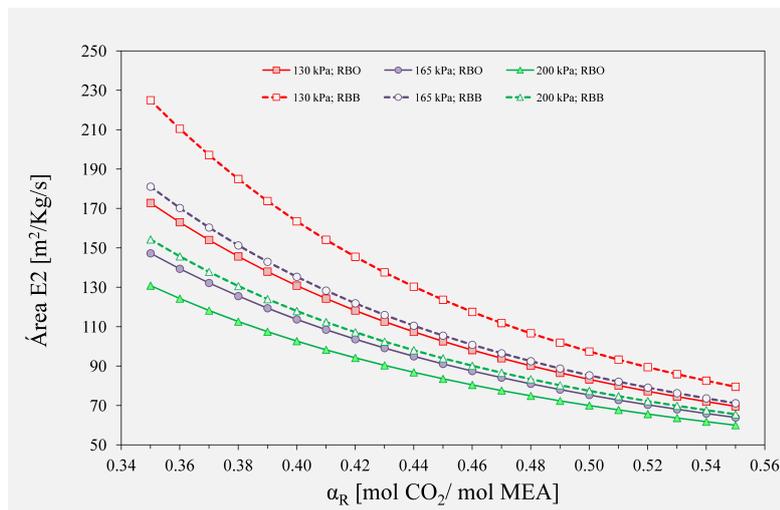


Figura 3.20 – Diseño óptimo. Caso 1b: área específica de intercambio térmico requerida en el intercambiador amina - agua.

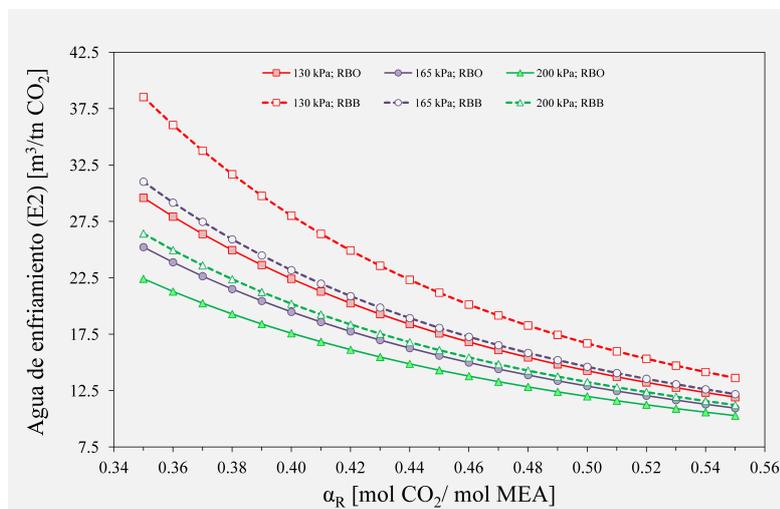


Figura 3.21 – Diseño óptimo. Caso 1b: consumo específico de agua de enfriamiento en el intercambiador amina - agua.

### Caso 2. Influencia de la carga de $CO_2$ ( $\alpha_R$ ) y la presión operativa del rehervidor en la optimización de las etapas de desorción y compresión de $CO_2$ empleando la FO2

En este caso se minimiza la función objetivo definida por la Ec. 3.37 y se analiza, al igual que en el Caso 1, la influencia de la carga de amina y la presión operativa del rehervidor en las principales variables del proceso. Los resultados obtenidos se discuten en términos de: 1) requerimiento energético en servicios de calefacción ( $Q_R$ ) y servicios de enfriamiento [ $Q_C+Q_{E2}+Q_{E3}$ ], 2) el trabajo total (compresión + bombeo) y 3) la cantidad de  $CO_2$  desorbida.

En la Figura 3.24 se comparan los valores de la  $FO_1$  y la  $FO_2$  para los distintos niveles de presión en el rehervidor y composición de la corriente de amina rica. Como se puede observar, la diferencia relativa (expresada de acuerdo a la Ec. 3.38) entre los valores de la  $FO_1$  y la  $FO_2$  es mínima (inferior al 0.15 %). Si bien se obtienen menores valores de trabajo y energía térmica (Fig. 3.25, 3.26 y 3.27) cuando se minimiza la  $FO_2$ , la cantidad de  $CO_2$  desorbida (Fig. 3.28) también es menor que la obtenida minimizando la  $FO_1$ , dando valores similares de las funciones objetivo.

Finalmente, en la Tabla 3.8 se muestran aquellas variables que presentan una diferencia porcentual mayor al 1 % respecto a todas las variables analizadas en el Caso 1a y se incluye además, el valor de las funciones objetivo. Específicamente, se indica la diferencia promedio en el intervalo de composición de la corriente de amina rica considerado y las diferencias mínima y máxima así como el valor de  $\alpha_R$  asociado. Se observan reducciones en el tamaño de los equipos (volumen de la columna de regeneración, áreas de intercambio térmico del rehervidor, el condensador y los interenfriadores, trabajo total), en la caída de presión y en los flujos de líquido y vapor que se recirculan a la columna.

Sin embargo, si estos valores se expresan en forma relativa a la cantidad de  $CO_2$  desorbido, el volumen, la caída de presión de la columna y el requerimiento energético en el condensador presentan diferencias mayores al 1 % para algunos valores de  $\alpha_R$  - según se ilustra en la Figura 3.29- mientras que el resto de las variables tienen diferencias insignificantes. De esta manera, se observan pocos beneficios al optimizar el sistema

minimizando la  $FO_2$  respecto a la  $FO_1$ .

$$dif_{\alpha_R P_R} = 100 \left( \frac{\chi_{\alpha_R P_R}^{FO_1} - \chi_{\alpha_R P_R}^{FO_2}}{\chi_{\alpha_R P_R}^{FO_1}} \right) \quad (3.38)$$

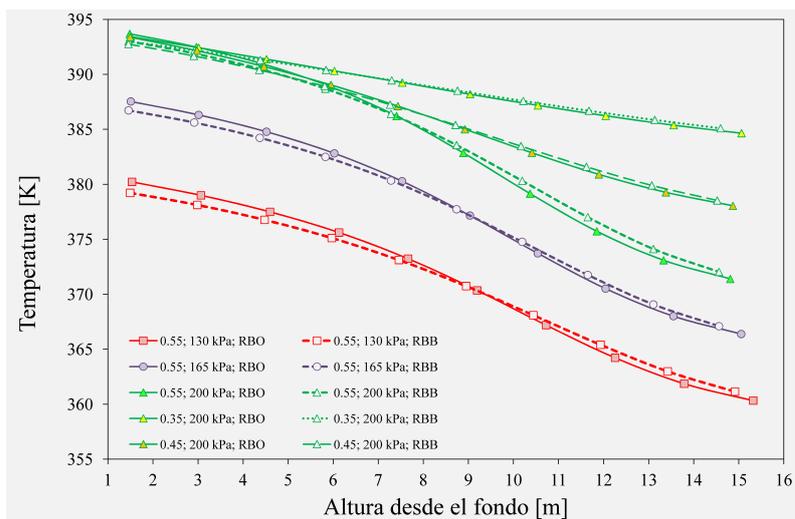
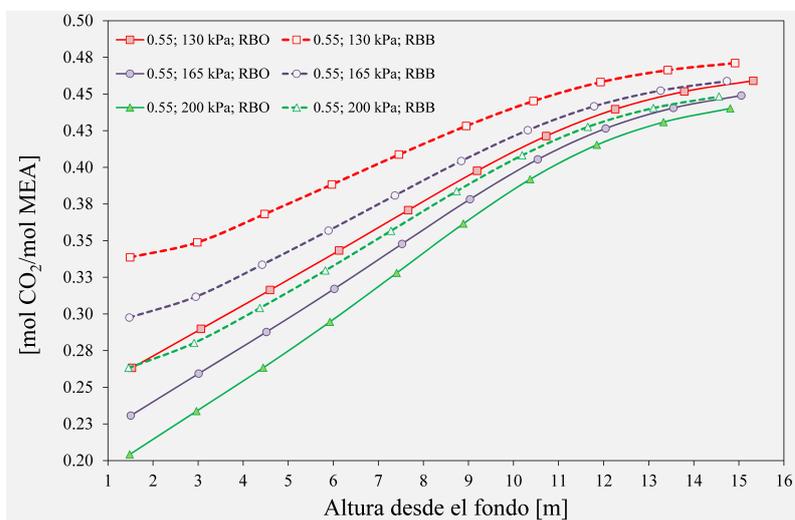
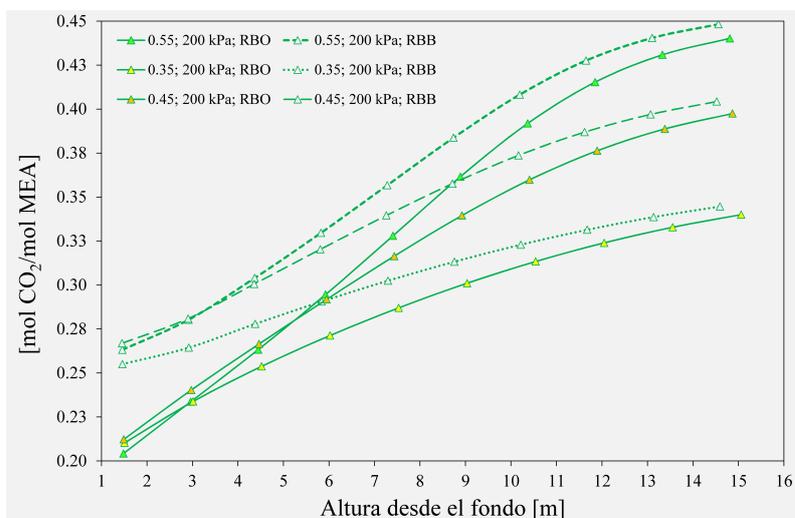


Figura 3.22 – Diseño óptimo. Caso 1b: perfil de temperatura en la fase líquida.



(a) Perfil de concentración para tres niveles de presión a una composición definida de alimentación ( $\alpha_R = 0.55$ )



(b) Perfil de concentración para tres niveles de composición de la alimentación líquida a una presión definida ( $P_R = 200\text{kPa}$ )

Figura 3.23 – Diseño óptimo. Caso 1b: perfil de composición en la fase líquida.

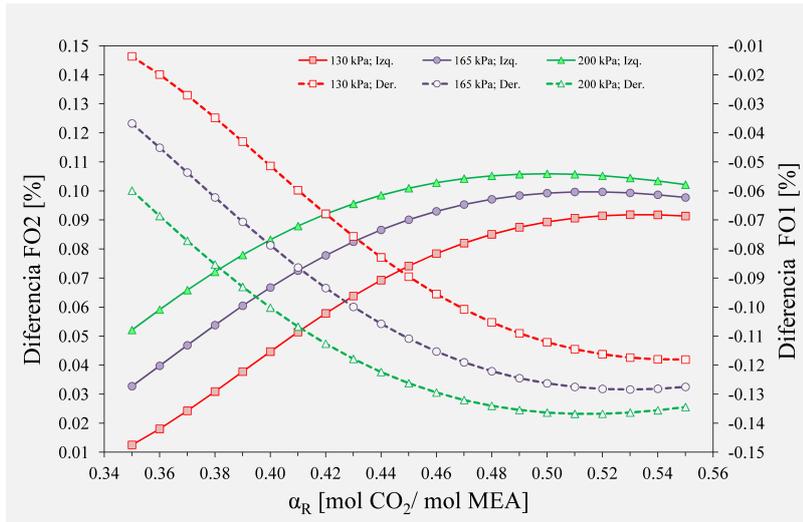


Figura 3.24 – Diseño óptimo. Caso 2: funciones objetivo (FO1 y FO2).

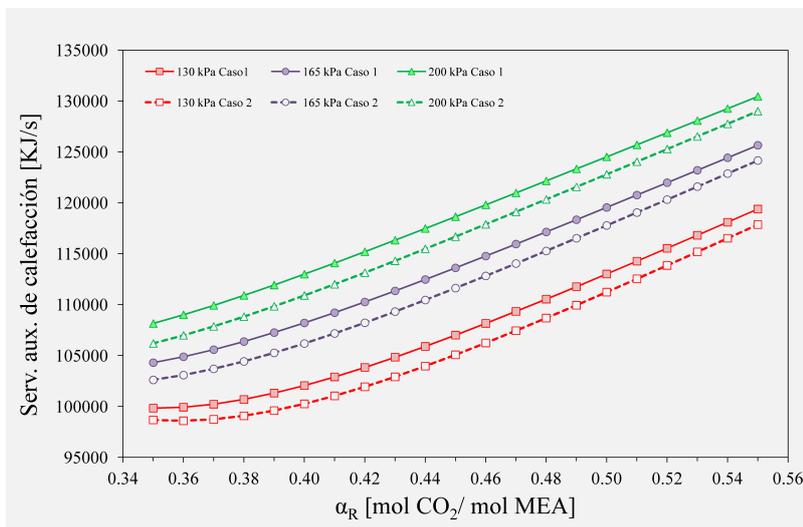


Figura 3.25 – Diseño óptimo. Caso 2: servicios auxiliares de calefacción.

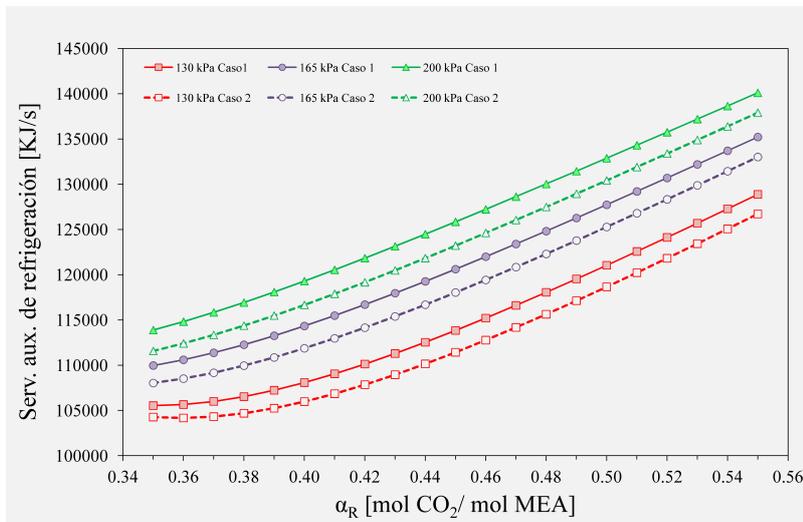


Figura 3.26 – Diseño óptimo. Caso 2: servicios auxiliares de enfriamiento.

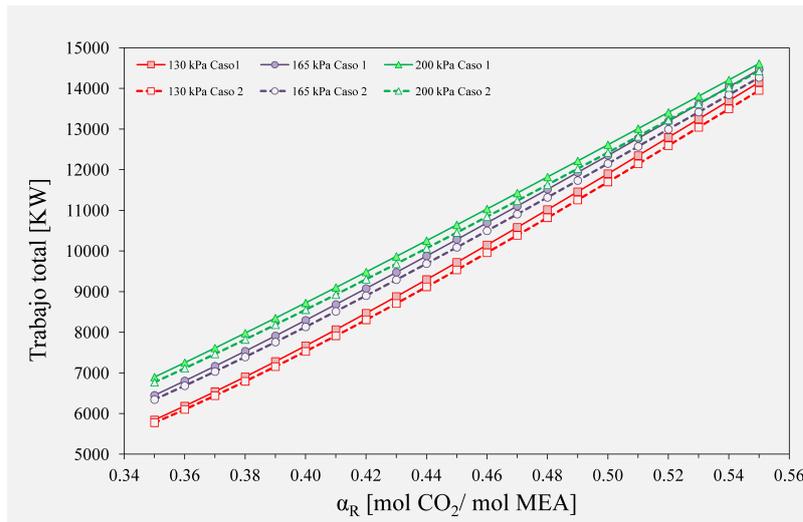


Figura 3.27 – Diseño óptimo. Caso 2: trabajo total (bombeo y compresión).

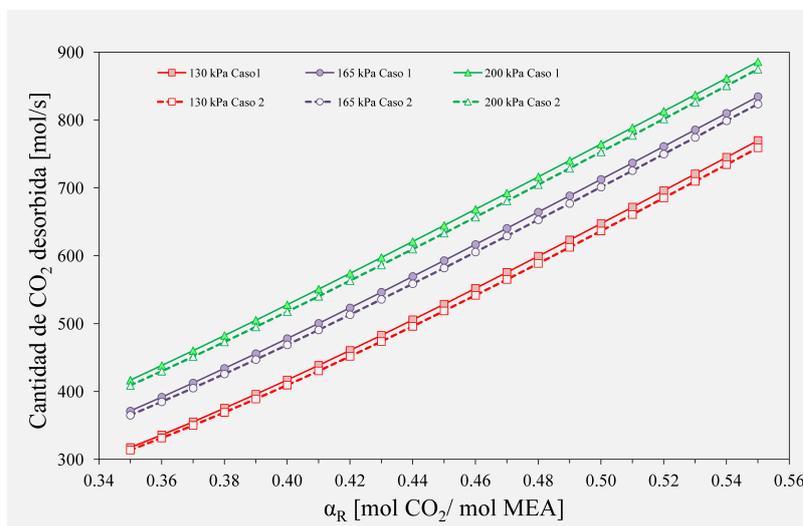


Figura 3.28 – Diseño óptimo. Caso 2: cantidad de  $CO_2$  desorbida.

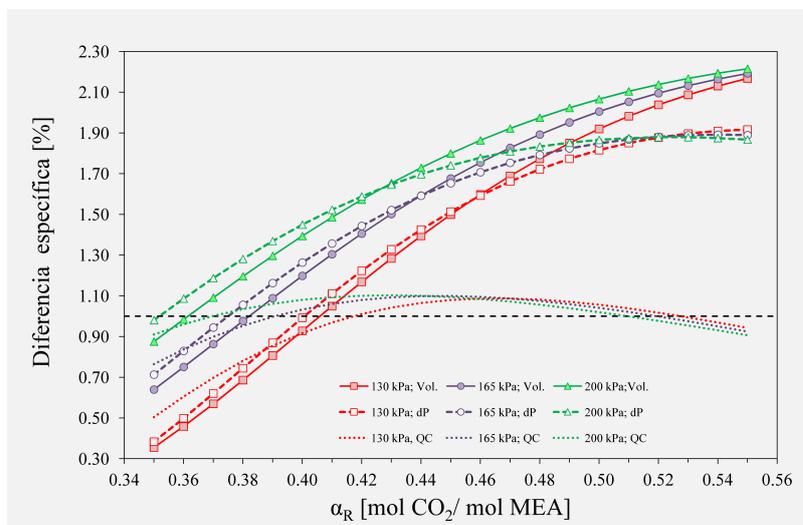


Figura 3.29 – Diseño óptimo. Caso 2: diferencias porcentuales en el volumen, la caída de presión y la carga térmica en el condensador al emplear la  $FO_1$  y la  $FO_2$ .

Tabla 3.8 – Diseño óptimo. Caso 2: empleo de diferentes funciones objetivo, comparación de variables.

	FO1	FO2	CO <sub>2</sub> desorb.	Q <sub>R</sub>	Q <sub>C</sub>	Q <sub>E3</sub>	L <sub>C</sub>	G <sub>R</sub>	Vol.	Area Reb.	Area cond.	Area E3	Caída de presión	W <sub>C</sub> +W <sub>B1</sub>
Diferencia mínima [%]	130 kPa	-0.0136	0.0125	1.1697	1.1562	1.6686	1.9293	1.3656	1.5203	1.2835	1.6519	1.1684	1.5490	1.1769
	$\alpha_R$	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35
	165 kPa	-0.0367	0.0328	1.3181	1.1923	2.2307	2.8742	1.8482	2.2902	1.8750	1.9473	1.3163	2.3625	1.3335
	$\alpha_R$	0.35	0.35	0.55	0.55	0.55	0.35	0.55	0.35	0.55	0.55	0.55	0.35	0.55
	200 kPa	-0.0599	0.0521	1.2433	1.1105	2.1384	3.3757	1.7862	2.7280	1.8242	1.8740	1.2419	2.8312	1.2540
$\alpha_R$	0.35	0.35	0.55	0.55	0.55	0.35	0.55	0.35	0.55	0.55	0.55	0.35	0.55	
Diferencia máxima [%]	130 kPa	-0.1181	0.0918	1.9105	1.8363	2.9536	4.4518	2.4371	3.5793	2.3578	2.8123	1.9078	3.4814	1.9281
	$\alpha_R$	0.55	0.53	0.43	0.43	0.44	0.55	0.45	0.51	0.45	0.44	0.43	0.49	0.43
	165 kPa	-0.1284	0.0997	1.9540	1.8728	3.0035	4.3483	2.5149	3.5797	2.4359	2.8737	1.9520	3.4909	1.9632
	$\alpha_R$	0.53	0.52	0.41	0.4	0.42	0.51	0.42	0.49	0.43	0.41	0.41	0.46	0.41
	200 kPa	-0.1368	0.1059	1.9603	1.8762	3.0083	4.2518	2.5449	3.5639	2.4641	2.8893	1.9588	3.4871	1.9617
$\alpha_R$	0.51	0.50	0.39	0.38	0.4	0.48	0.48	0.48	0.41	0.39	0.39	0.44	0.39	
Diferencia promedio [%]	130 kPa	-0.0796	0.0650	1.6736	1.5953	2.6038	3.8015	2.1422	3.0517	2.0774	2.4461	1.6710	3.0184	1.6910
	165 kPa	-0.0995	0.0804	1.7301	1.6323	2.7194	4.0216	2.2709	3.2782	2.2202	2.5512	1.7283	3.2225	1.7412
	200 kPa	-0.1151	0.0919	1.7013	1.5881	2.7113	4.0774	2.2879	3.3756	2.2509	2.5392	1.6998	3.2963	1.7069

## 3.5. Resumen

En este capítulo, se describió el modelo matemático de las etapas de regeneración del solvente y desorción y compresión de  $CO_2$ . Se incluyeron también los intercambiadores de calor necesarios para lograr la integración energética de la corriente fría (amina rica en  $CO_2$ ) con la corriente caliente (amina pobre) y un enfriamiento adicional de esta última. Luego se procedió a su verificación comparando los resultados obtenidos vía simulación con datos experimentales disponibles en la literatura.

En líneas generales, es posible concluir que los resultados obtenidos mediante el modelo riguroso desarrollado se aproximan en forma aceptable a los datos experimentales; aun así pueden observarse algunas discrepancias con diferentes niveles de error para cada una de las variables analizadas.

Para la mayoría de los casos y las variables analizadas, el modelo basado en la correlación propuesta por Bravo (RBB) ofreció mejores aproximaciones a los valores experimentales en comparación con el modelo RBO, observándose que para el resto de los casos, ambos modelos predijeron valores muy similares. Por otro lado, la carga térmica en el rehervidor  $Q_R$  (que es considerada la variable más representativa) se ajustó mejor a los datos experimentales con el modelo RBO. De esta manera, resulta difícil decidir sobre la conveniencia de utilizar una u otra correlación por lo que en la siguiente sección se emplearon ambas y se siguieron comparando los resultados.

Luego, mediante el planteo de diferentes problemas de optimización, se obtuvieron conjuntos de variables óptimas en un amplio rango de condiciones operativas a partir del empleo de dos modelos rigurosos: RBO (Rate-based empleando la correlación de Onda et al. (1968) para la determinación del área específica de transferencia de materia) y RBB (Rate-based empleando la correlación de Bravo y Fair (1982) para la determinación del área específica de transferencia de materia). Básicamente, los resultados obtenidos con RBB presentaron un comportamiento similar a los obtenidos con RBO.

En base a lo observado, se decidió utilizar el modelo RBO para describir la columna de absorción y de regeneración y realizar las distintas optimizaciones que serán discutidas en los próximos capítulos.

---

Por otra parte, se concluyó que al minimizar el calor específico del reboiler se obtienen resultados similares a los obtenidos al minimizar el consumo energético total (servicios auxiliares de calefacción, enfriamiento y energía eléctrica).

Además, se observó que al incrementar la presión operativa en el rehervidor disminuye el requerimiento térmico necesario para regenerar el solvente. A su vez, aumenta la energía necesaria para la compresión. Esta generalidad, no debe ser considerada en forma separada del resto de las variables del sistema que definen cada conjunto de soluciones óptimas. Esto es, dimensiones de equipos, caídas de presión, la energía requerida en el condensador, inter-enfriadores y el economizador, niveles de temperatura, la cantidad de dióxido de carbono desorbida, flujos, perfiles internos de presión, temperatura y composición, áreas de intercambio térmico, consumo de servicios auxiliares, etc. presentadas en este capítulo.

En particular, si bien el área requerida en la mayoría de los equipos de intercambio de calor (rehervidor, economizador, interenfriadores) aumenta con el incremento de la presión, el volumen de empaque, el área de transferencia de calor del condensador y el área del intercambiador amina-agua disminuyen. Por otro lado, al expresar las variables más importantes en forma relativa a la cantidad de dióxido de carbono capturada, se observa un beneficio al incrementar la presión operativa en el rehervidor pues disminuye el consumo específico de agua de enfriamiento, vapor de calefacción y energía eléctrica para la compresión. Las capacidades de los equipos y el consumo de servicios auxiliares influyen fuertemente en los costos de inversión y los costos operativos del proceso. De esta manera, queda planteada la necesidad de optimizar el sistema desde el punto de vista tecn-económico, en la cual serían sopesadas las relaciones entre las capacidades de los equipos y el consumo de servicios auxiliares para un nivel definido de captura de  $CO_2$  con el fin de minimizar dichos costos que, al fin y al cabo, son la clave a la hora de analizar la viabilidad de los proyectos en la etapa de diseño preliminar.

Finalmente, desde el punto de vista de la flexibilidad del modelo, se destaca que no se presentaron problemas de convergencia en todo el rango de condiciones operativas adoptado. La estrategia de resolución está basada en la inicialización del modelo riguroso a partir del modelo de equilibrio así como en el establecimiento de cotas superiores y/o inferiores en las

---

variables que así lo requirieron.

# Capítulo 4

## Proceso de captura de $CO_2$ mediante absorción química con MEA

### 4.1. Introducción

Como se ha concluido en los capítulos anteriores, el nivel de captura de  $CO_2$  depende tanto del proceso de absorción como de la etapa de desorción, donde las principales variables de ambos procesos se encuentran fuertemente relacionadas. En consecuencia, la optimización simultánea del sistema de captura resulta esencial para determinar las mejores condiciones operativas y de diseño que permitan maximizar su eficiencia y/o minimizar el costo anual total.

Por otra parte, el costo total asociado a la captura depende de numerosos factores, tales como el tipo de combustible, la ubicación de la planta, la eficiencia de captura y especificaciones, configuración, etc., los cuales deben tenerse en cuenta en la etapa de diseño preliminar. En este sentido, Adams y Davison (2007) consideran además que es necesario tratar aspectos adicionales, tales como: 1) la flexibilidad de operación de la planta y su compatibilidad con futuros requerimientos de la demanda, 2) riesgos por bajo rendimiento, 3) la diversidad y disponibilidad de equipos y tecnología, y 4) el potencial de mejoras futuras.

Según varios autores, el costo de los sistemas de captura de  $CO_2$  puede variar entre 30

y 100 usd/tn de  $CO_2$  capturado. Sin embargo, los datos de costos reportados por algunos autores presentan ciertas discrepancias para plantas de tamaños similares, además de estar afectados por cierto grado de incertidumbre (Bernier et al., 2010; IPCC, 2005). Como se mencionó en el capítulo anterior, los autores no presentan soluciones detalladas ni tampoco mencionan bajo que hipótesis se obtuvieron las mismas, por lo que resulta difícil en muchos casos establecer una comparación valedera.

Considerando que el sistema de tratamiento de gases mediante post-combustión se ubica al final de la línea de producción del ciclo de potencia, es posible estudiar el proceso completo de captura independientemente del sistema de generación asumiendo, a partir del tipo de combustible empleado, las condiciones de la corriente de gases a tratar (temperatura, composición, flujo y presión).

Sin embargo, debido a las características energético-intensivas del proceso, es necesario estudiar de qué manera los requerimientos de energía térmica y eléctrica afectan la eficiencia del sistema de generación. Para este estudio, varios autores emplearon el concepto de trabajo equivalente total para indicar el efecto de la extracción de vapor y energía eléctrica en la eficiencia del ciclo de potencia, considerando además el impacto de diferentes condiciones operativas y de diseño en la eficiencia de la planta de captura de  $CO_2$  (Karimi et al. (2011a); Le Moullec y Kanniche (2011); Oexmann et al. (2008); Rao y Rubin (2002, 2006); Van Wagener y Rochelle (2011); Ziaii et al. (2011), entre otros).

Basados en resultados obtenidos por simulación paramétrica utilizando el simulador de procesos Aspen Plus, Fisher et al. (2005) realizaron el análisis económico del proceso de captura para diferentes opciones de configuración (sistema convencional, compresión con/sin recuperación de calor y regeneración a varios niveles de presión con/sin recuperación de calor). Dichos autores asumieron la composición del combustible (carbón) y seleccionaron una planta de generación con una capacidad de diseño de 500 MW para determinar el caudal y composición de gases de combustión a tratar. El análisis económico se realizó considerando la adaptación del sistema de captura conformado por 4 trenes de absorción y un único tren de compresión a una planta de generación existente. De esta manera, los autores determinaron que el costo de la planta de captura varía, para las diferentes

---

configuraciones, entre 15.4 y 16.5 usd/tn  $CO_2$  capturado, base anual. Por su parte, Le Moullec y Kanniche (2011) también analizaron diferentes opciones de configuración interna, aunque incorporando criterios de disponibilidad en el análisis económico.

Rao y Rubin (2002, 2006) realizaron el análisis tecno-económico incluyendo diferentes aspectos, según se detalla a continuación: Rao y Rubin (2002) consideraron dos opciones de provisión de energía: 1) el vapor y la electricidad son extraídos de la planta de generación con la consecuente pérdida de potencia y 2) la energía eléctrica se extrae de la central térmica y el vapor de calefacción es provisto mediante un sistema auxiliar independiente y conformado por una caldera y una turbina de vapor. A partir de un conjunto de simulaciones realizadas también en Aspen Plus, los autores obtuvieron una serie de restricciones que definen las relaciones funcionales existentes entre las principales variables del proceso. Además, en función del rango de variación de los parámetros de operación y diseño reportados en la bibliografía, advirtieron acerca de la variabilidad e incertidumbre asociada al diseño del sistema en estudio. Rao y Rubin (2006) examinaron el efecto de aumentar sistemáticamente la eficiencia de captura en el costo de mitigación. Determinaron que para plantas de carbón supercríticas de 650 y 1000 MW con sistema de captura de  $CO_2$ , las eficiencias de captura más rentables resultaron ser 87 % y 81 %, respectivamente. Los autores también concluyeron que dichas eficiencias “óptimas” dependen de varios factores de diseño (tamaño y configuración de la planta, entre otros).

Abu-Zahra et al. (2007b), aplicando también simulación paramétrica, demostraron que es posible disminuir los costos de captura mediante la optimización de la carga de solvente que alimenta la columna de absorción, el aumento de la concentración de solvente fresco y el aumento de la presión operativa en el stripper.

Los altos requerimientos de energía térmica y eléctrica, necesarios para recuperar el solvente y comprimir el  $CO_2$ , incrementan drásticamente los costos operativos del proceso de captura. En particular, Oyenekan (2007) concluyó que los requerimientos energéticos para regenerar el solvente representan alrededor del 80 % de los costos totales de operación y mantenimiento.

Por otro lado, y considerando que no se han desarrollado simuladores comerciales

---

específicos para la optimización del sistema de absorción química de  $CO_2$ , Tobiesen y Schumann-Olsen (2011), incorporaron un paquete de optimización al software comercial *CO2SIM*. Básicamente, los valores óptimos se determinan por prueba y error utilizando una estructura matricial generada a partir de múltiples simulaciones. Con una finalidad similar Sipöcz et al. (2011b) desarrollaron modelos matemáticos basados en redes neuronales (ANN - Artificial Neural Network), comprobando que el modelo ANN entrenado puede reproducir los resultados de un simulador riguroso (*CO2SIM*), pero utilizando menores tiempos de cómputo.

A partir de una extensa búsqueda bibliográfica es posible concluir que, hasta el momento, no se han publicado trabajos en los que se proponga la optimización simultánea de todas las variables (operativas, diseño, económicas) del proceso de captura mediante el empleo de técnicas de programación matemática.

En este sentido, en este capítulo se presenta y discuten diferentes casos de optimización tecno-económica, incluyendo costos operativos y de inversión. A partir del modelo de la columna de absorción y el modelo de regeneración del solvente y compresión de  $CO_2$  presentados en los capítulos anteriores, resulta sencillo acoplar ambos modelos (equipos y corrientes) con el fin de optimizar el sistema de captura en forma integral, analizando el proceso según dos criterios: a) eficiencia termodinámica y b) costo total anual (costo de inversión y de operación). De esta manera, con el solo hecho de incorporar un modelo de costos y ciertas restricciones relacionadas con el acople de los modelos, se cuenta con un modelo completo y detallado de la planta de captura, a partir del cual es posible abordar el diseño tecno-económico.

## 4.2. Desarrollo del modelo matemático

El modelo matemático considerado en este capítulo, está constituido básicamente por la totalidad de las restricciones presentadas en el capítulo 2 correspondiente al proceso de absorción (Ec. 2.1 a Ec. 2.85), y en el capítulo 3 referidas al proceso de desorción (Ec. 3.1 a Ec. 3.35) en conjunto con las restricciones referidas al pre-tratamiento de los gases de combustión (Ec. 4.1 a Ec. 4.5), la reposición de agua de proceso y solvente (Ec. 4.6) y al

---

cálculo de los costos de operación y de inversión de cada uno de los equipos (Ec. 4.7 a Ec. 4.27), según se describirá a continuación. Es por ello que en esta Sección, únicamente se presentan las nuevas restricciones en lugar del modelo completo.

#### 4.2.1. Pre-tratamiento de los gases de combustión

En la Figura 4.1 se representa en forma esquemática la distribución de corrientes y equipos que constituyen la etapa de pre-tratamiento de los gases de combustión exhaustos.

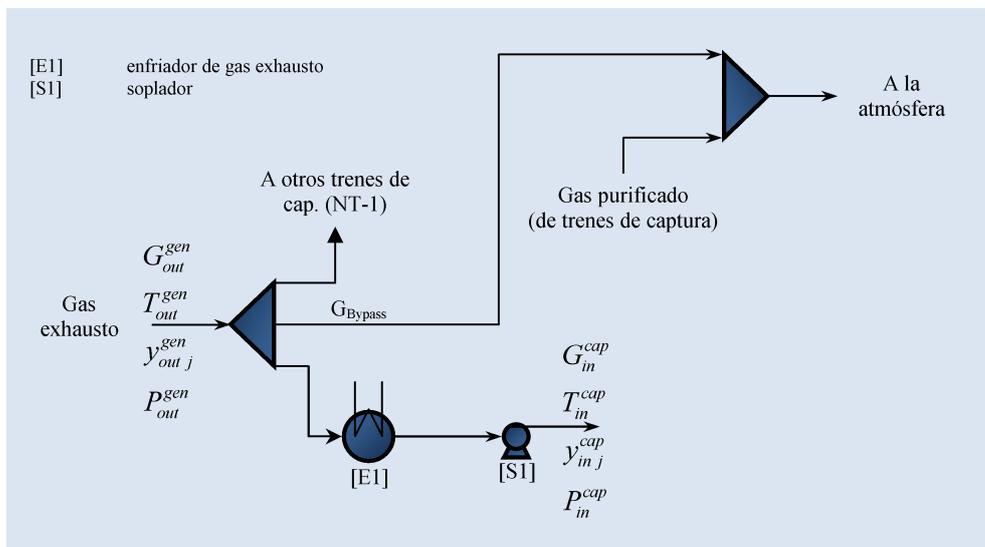


Figura 4.1 – Esquema de la etapa de pre-tratamiento de los gases de combustión.

##### Consideraciones generales.

- La corriente de gases exhaustos está compuesta por  $CO_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$  y  $H_2O$ . De esta manera, los equipos de eliminación de  $SO_X$ ,  $NO_X$  y material particulado no se incluyen en el modelo.
- Considerando que el modelo desarrollado será acoplado al modelo de un ciclo combinado de gas natural, se asume una baja concentración de  $CO_2$  en la corriente de alimentación a las columnas de absorción.
- La composición de los gases exhaustos se determina en función de la combustión estequiométrica del metano con exceso de aire.

- Debido a las limitaciones tecnológicas referidas al tamaño de la unidad de absorción (restricción de diámetro máximo), el volumen de gas que se puede tratar por tren de absorción es limitado. De acuerdo a la literatura, en ciclos combinados de gas natural, el máximo flujo de  $CO_2$  que puede tratarse es 2400 tn/día mientras que en ciclos combinados de carbón este valor asciende a 4600 tn/día (Chapel et al., 1999).
- Se asume que se trata el flujo total de gases de combustión producidos en la planta de generación.

Las restricciones 4.1 a 4.5, relacionan las condiciones (temperatura, flujo, composición y presión) de los gases de combustión exhaustos que abandonan la caldera de recuperación de calor (HRSG) del ciclo combinado con las condiciones a las que ingresan a la planta de captura (Ver Fig. Figura 4.1).

Las ecuaciones que corresponden al modelo del enfriador [E1] y al soplador [S1] se desarrollaron en las secciones 3.2.4 y 3.2.5 respectivamente.

$$G_{out}^{gen} = NT G_{in}^{cap} + G_{bypass} \quad (4.1)$$

$$y_{out\ j}^{gen} = y_{in\ j}^{cap}, \quad j = N_2, O_2, H_2O, CO_2 \quad (4.2)$$

$$T_{out}^{gen} \geq T_{in}^{cap} \quad (4.3)$$

$$313.15 \leq T_{in}^{cap} \leq 323.15 \quad (4.4)$$

$$P_{in}^{cap} = P_{out}^{gen} + \Delta P_{abs} \quad (4.5)$$

Donde  $P$  es la presión [kPa],  $T$  es la temperatura [K],  $y$  es la fracción molar del componente “ $j$ ” y  $G$  es el flujo molar [mol/s]. Los supraíndices  $cap$  y  $gen$  se refieren a las plantas de captura y generación, respectivamente.

En la restricción 4.1 (balance de materia), el término  $G_{bypass}$  considera la opción de desviar parte de los gases de combustión exhaustos en función de la capacidad y número

de trenes de captura (NT). Sin embargo, en este capítulo (y a diferencia del próximo) no se considera la posibilidad de venteo y, en consecuencia, se asume que  $G_{bypass} = 0$ .

### 4.2.2. Reposición de agua y solvente

Diversos factores influyen en la velocidad de reposición de amina: degradación térmica, pérdidas por evaporación, reducción de la capacidad de absorción debido a la formación de sales estables, etc. El modelo permite estimar las pérdidas por evaporación pero no considera las pérdidas debido a otros factores, de manera tal que se adopta una pérdida nominal de amina de 1.5 (0.5 - 3.1) kg/tn de  $CO_2$  capturado, sugerido en Rao y Rubin (2002). Por otro lado, el valor nominal sugerido para la reposición de agua es de 0.8 (0.5-1.8)  $m^3$ /tn de  $CO_2$  capturado. La capacidad de los tanques de reposición de amina y agua se estiman mediante la Ecuación (4.6), considerando un tiempo de retención ( $\tau$ ) de 30 días y 24 hs., respectivamente. El caudal considerado ( $L_k$ ) tiene en cuenta la velocidad de reposición supuesta más las pérdidas por evaporación en la columna de absorción. El agua condensada en la etapa de compresión se recircula al tope de la regeneradora.

$$V_{T k} = \left( \frac{L_k}{\rho_k} \right) \tau_k \quad (4.6)$$

### 4.2.3. Estimación de los costos de captura de $CO_2$

El modelo para la determinación de los costos de captura de  $CO_2$  que se presenta a continuación, se desarrolló en base a las consideraciones clásicas que se utilizan comúnmente en la etapa de diseño conceptual de cualquier planta en general.

#### Consideraciones generales

- Las fronteras del sistema están definidas de manera tal que se incluye el costo de compresión de  $CO_2$  (capital de inversión y costos de operación y mantenimiento), y se excluye el costo adicional debido al transporte y almacenamiento.
- Se asume que la temperatura del agua y del solvente que se reponen en el sistema es de 298.15 K.

- Se asume que la temperatura del agua de enfriamiento asciende de 298.15 a 313.15 K.
- Se asume que el costo de los inhibidores es el 20 % del costo de reposición de amina (Rao y Rubin, 2006).
- Se asume un diámetro máximo de 12.8 m. Si bien se pueden diseñar columnas con diámetros mayores para disminuir la cantidad de trenes de absorción, podrían ser más costosas debido a las restricciones de tamaño y construcción de los recipientes (Fisher et al., 2005).

Las Ecuaciones 4.7 a 4.27 conforman el conjunto de restricciones empleadas para la determinación del costo total anual del proceso.

- ***Costo total (base anual)***

El costo total anual (TAC) se calcula como la suma del costo total de inversión en base anual (TAI) y el costo total de operación y mantenimiento (OMC).

$$TAC = TAI + OMC \quad (4.7)$$

- ***Costo total de inversión (base anual)***

El capital de inversión (TAI) se define como la relación entre el capital total de inversión (TCI) y el factor de recupero de capital (CRF). El factor de recupero de capital se estima asumiendo un ciclo de vida útil (n) de 25 años, y una tasa de interés anual (i) de 8 % (Ec. 4.9).

$$TAI = TCI \cdot CRF \quad (4.8)$$

$$CRF = \frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \quad (4.9)$$

El capital de inversión (TCI) depende de los costos directos de fabricación (DC), los costos indirectos de fabricación (IC) y el capital de inversión fijo (FCI). Cada uno de los términos de la Ecuación (4.10) se estiman como un porcentaje del costo de adquisición de equipos, pudiendo reformularse de la siguiente manera:

$$TCI = DC + IC + FCI \quad (4.10)$$

$$TCI = \delta_4 PC \quad (4.11)$$

El coeficiente  $\delta_4$  ( $=\delta_1+\delta_2+\delta_3$ ) incluye la estimación de costos de instrumentación y control, tuberías, instalaciones (equipos, tendido eléctrico, servicios), adquisición y mejora del terreno, ingeniería y construcción, contingencias, puesta en marcha y capital de trabajo. Los porcentajes correspondientes a cada ítem son también utilizados por Abu-Zahra et al. (2007b) y se detallan en la Tabla 4.1.

Tabla 4.1 – Coeficientes empleados para la determinación del capital de inversión total.

<b>Ítem</b>	<b>Fracción de PC</b>
<b>Costos directos de fabricación (<math>\delta_1 \times PC</math>)</b>	<b>2.6880</b>
Adquisición de equipos (PC)	1.0000
Instalación de equipos	0.5280
Instrumentación y control	0.2000
Tuberías	0.4000
Instalación eléctrica	0.1100
Construcción	0.1000
Mejora de terreno	0.1000
Instalación de servicios	0.2000
Terreno	0.0500
<b>Costos indirectos (<math>\delta_2 \times PC</math>)</b>	<b>1.0080</b>
Ingeniería	0.2688
Gastos de construcción	0.2688
Contratistas	0.0134
Contingencias	0.4570
<b>Capital de inversión fijo (<math>\delta_3 \times PC</math>)</b>	<b>1.2936</b>
Capital de trabajo	0.9240
Puesta en marcha y carga de solvente inicial	0.3696
<b>Capital de inversión total (<math>\delta_4 \times PC</math>)</b>	<b>4.9896</b>

■ *Costo de operación y mantenimiento total (base anual)*

El costo de operación y mantenimiento total (costos fijos y variables), se estima

como un porcentaje del costo de mano de obra operativa (OLC), el costo operativo variable (VOC) y el costo de adquisición de equipos (PC). Los costos adicionales considerados incluyen: impuestos, seguros, supervisión, gastos generales de planta, gastos administrativos, investigación y desarrollo y gastos de laboratorio. Los porcentajes correspondientes a cada ítem se listan en Tabla 4.2 (Abu-Zahra et al., 2007b).

$$OMC = \delta_5 PC + \delta_6 VOC + \delta_7 OLC \quad (4.12)$$

Tabla 4.2 – Coeficientes empleados para la determinación del costo total de operación y mantenimiento.

<b>Fracción del costo de compra de equipos (PC)</b>	
$\delta_5$	<b>0.3863</b>
Impuestos locales	0.0739
Seguros	0.0370
Mantenimiento	0.1478
Suministros de operación	0.0222
Gastos generales de planta	0.0887
Investigación y desarrollo	0.0185
<b>Fracción del costo operativo variable [VOC]</b>	
$\delta_6$	<b>1.0500</b>
Materias primas y servicios auxiliares [VOC]	1.0000
Investigación y desarrollo	0.0500
<b>Fracción de costo de mano de obra [OLC]</b>	
$\delta_7$	<b>2.4466</b>
Mano de obra operativa [OLC]	1.0000
Supervisión	0.3000
Laboratorio	0.1000
Costo administrativo	0.1500
Gastos generales de planta	0.7800
Investigación y desarrollo	0.1165

#### ■ *Costo de adquisición de equipos*

El costo total de adquisición de equipos se determina como la suma de los costos de cada equipo en particular. Para el estudio tecno-económico del proceso se consideran los costos de las columnas (recipiente y empaque), condensadores, hervidores, compresores, intercambiadores, enfriadores, bombas, sopladores y tanques

de almacenamiento.

El costo de adquisición de cada equipo “k” ( $PC_k$ ), expresado en Musd, se puede estimar a partir de correlaciones válidas para un rango determinado de capacidades de diseño ( $X_k$ ). Si la capacidad se encuentra fuera de dicho rango, el costo se estima mediante la regla de potencia 0.6, en función de un costo ( $PC_k^0$ ) y capacidad ( $X_k^0$ ) de referencia calculado a partir de las correlaciones mencionadas. Lo dicho queda matemáticamente expresado según la Ecuación (4.13) ó Ecuación (4.14).

$$PC_k = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) f(X_k^1) \quad \forall X_k^1, \quad X_k^{\text{mín}} \leq X_k^1 \leq X_k^{\text{máx}} \quad (4.13)$$

$$PC_k = PC_k^0 \left( \frac{X_k^1}{X_k^0} \right)^{0.6} \quad (4.14)$$

$$PC_k^0 = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) f(X_k^0) \quad X_k^{\text{mín}} \leq X_k^0 \leq X_k^{\text{máx}}$$

El efecto inflacionario se tiene en cuenta mediante la incorporación de los índices de precios actual ( $I^1$ ) y de referencia ( $I^0$ ). En la Tabla 4.3 se listan las características constructivas de los equipos y, a continuación, se presentan las correlaciones empleadas para el cálculo de  $PC_k$  y/o  $PC_k^0$ :

- El costo unitario de los tanques se estima en función de su capacidad volumétrica, determinada de acuerdo a la Ecuación (4.6).

$$PC_{Tk} = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) (0.1045 V_{Tk}^{0.51})$$

$$113.6 \text{ m}^3 \leq V_{Tk} \leq 3785.4 \text{ m}^3 \quad (4.15)$$

$$k = 1, 2$$

- El costo de adquisición de compresores y bombas de  $CO_2$ , bombas de solvente y sopladores se estima en función de la potencia de diseño.

El aumento de la presión de la corriente rica en  $CO_2$  que sale del condensador, se logra por compresión hasta los 8600 kPa (fase gaseosa) y por bombeo (fase densa) hasta la presión suficiente para su transporte por tuberías, aproximadamente 14000 kPa (Rao y Rubin, 2002).

Tabla 4.3 – Equipos. Características constructivas.

Equipo	Tipo de equipo	Material de construcción	Capacidad (X)
Columna de absorción	Recipiente	CS recubierto de SS	Área superficial
	Empaque–Sillas Intalox 5mm	Cerámica	Volumen de empaque
Columna de regeneración	Recipiente	CS recubierto de SS	Área superficial
	Empaque–Sillas Intalox 5 mm	Cerámica	Volumen de empaque
Interenfriador	Cabeza flotante	SS (tubos) – CS (coraza)	Área de intercambio
Condensador			
Enfriador amina-agua			
Intercambiador amina amina			
Rehervidor	Horizontal tipo Kettle	SS (tubos) – SS (coraza)	
Tanque de almacenamiento de amina		CS	Capacidad volumétrica
Tanque de almacenamiento de agua			
Soplador +motor	Centrífuga (turbo)	SS	Potencia
Compresor+motor	Centrífuga		
Bomba de amina rica+motor	Centrífuga		

El costo unitario de los compresores se calcula a partir de la Ecuación (4.16) en función del trabajo de compresión total (Ec. 3.35).

$$PC_{COMP} = 2.5 \times 10^{-6} \left( \frac{I^1}{I^0} \right) \exp(7.58 + 0.8 \log(1.341 W_{TC})) \quad (4.16)$$

$$150 \text{ KW} \leq W_{TC} \leq 22370 \text{ KW}$$

El costo de las bombas de  $CO_2$  (Ec. 4.17), las bombas de solvente (Ec. 4.19) y los sopladores (Ec. 4.18), se estima en base a la potencia neta de bombeo, expresada en KW.

$$PC_{BCO_2} = (1.1 \times 10^{-3} W_{BCO_2} + 0.07) \left( \frac{I^1}{I^0} \right) \quad (4.17)$$

$$PC_S = 1 \times 10^{-6} \left( \frac{I^1}{I^0} \right) \exp(6.8929 + 0.79 \ln(1.341 W_S)) \quad (4.18)$$

$$3.7 \text{ KW} \leq W_S \leq 745.7 \text{ KW}$$

$$PC_B = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) 5.424 \times 10^{-6} \times 10^{3.5793 + 0.3208 \log(W_B) + 0.02850(\log(W_B))^2} \quad (4.19)$$

$$0.01 \text{ KW} \leq W_{TC} \leq 250 \text{ KW}$$

- El costo de adquisición de los equipos de transferencia de energía se determina en función del área de transferencia de calor [ $m^2$ ], determinada según la Ecuación (3.26).

Las Ecuaciones 4.20 y 4.21 se emplean para calcular el costo de los economizadores [I1] y rehervidores [REB], respectivamente. Los costos de condensadores [CND], interenfriadores [E3] e intercambiadores MEA-agua [E2] se determinan mediante la Ecuación (4.22).

$$PC_{I1} = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) 6.3 \times 10^{-6} \times 10^{3.4338+0.1445 \log(A_{I1})+0.1079(\log(A_{I1}))^2} \quad (4.20)$$

$$10 \text{ m}^2 \leq A_{I1} \leq 900 \text{ m}^2$$

$$PC_{REB} = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) 6.3 \times 10^{-6} \times 10^{3.5638+0.1906 \log(A_R)+0.1107(\log(A_R))^2} \quad (4.21)$$

$$10 \text{ m}^2 \leq A_R \leq 100 \text{ m}^2$$

$$PC_k = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) 4.35 \times 10^{-6} \times 10^{3.4338+0.1445 \log(A_k)+0.1079(\log(A_k))^2} \quad (4.22)$$

$$10 \text{ m}^2 \leq A_k \leq 900 \text{ m}^2$$

$$k = \text{CND}, \text{ E2}, \text{ E3}$$

- El costo de adquisición de las columnas de absorción/ regeneración se determina en función del costo del empaque (Ec. 4.23) y el costo del recipiente (Ec. 4.24).

$$CP_{Emp \ k} = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) (0.0094 HT_k + 0.0017) \left( \frac{VT_k}{\pi \left( \frac{D_k^0}{2} \right)^2 HT_k} \right)^{0.6} \quad (4.23)$$

$$CP_{Rec \ k} = \left( \frac{I^1}{I^0} \right) (0.0565 HT_k + 0.2753) \left( \frac{AS_{Tk}}{4\pi \left( 1.5 HT_k + \frac{D_k^0}{2} \right)} \right)^{0.6}$$

$$D_k^0 = 4 \text{ m} \quad (4.24)$$

$$7 \text{ m} \leq HT_k \leq 50 \text{ m}$$

$$k = \text{ABS}, \text{ REG}$$

Las correlaciones para la estimación de los costos de tanques, compresores y

sopladores se adoptan de Seider et al. (2009), mientras que para bombas de solvente, columnas de absorción/ regeneración y equipos de intercambio térmico se toman de Henao (2005) y para las bombas de  $CO_2$  de McCollum y Ogden (2006).

Es importante destacar en este punto que, a partir de la revisión bibliográfica, se observaron **diferencias significativas** en la estimación de los costos unitarios de adquisición de los equipos. A modo de ejemplo, en la Tabla B.1 del Apéndice B se comparan los costos unitarios obtenidos a partir de diferentes fuentes ampliamente utilizadas en la bibliografía para la estimación de costos en la etapa de diseño preliminar (Henao, 2005; Matches, 2003; Peters et al., 2003; Seider et al., 2009).

■ **Costo de materias primas y servicios auxiliares**

El costo operativo variable total (VOC) se estima como la suma del costo de materias primas y servicios auxiliares ( $VOC_1$ ), de acuerdo a la Ecuación (4.25).

$$VOC = \sum_i VOC_i = \sum_i Y_i PSA_i \quad (4.25)$$

donde  $Y$  y  $PSA$  son, respectivamente, el consumo anual calculado de los balances de materia y energía y el precio unitario del servicio auxiliar “i” (electricidad, agua de enfriamiento, vapor de baja presión, reposición de amina, reposición de agua e inhibidores).

El costo de los servicios auxiliares se determina, de acuerdo a los lineamientos presentados por Ulrich y Vasudevan (2006), en función del precio del combustible ( $P_{comb.}$ ) y el índice de precios actual ( $I_i^1$ ), según la Ecuación (4.26). Los coeficientes  $a$  y  $b$  se indican en la Tabla 4.4.

$$PSA_i = a I_i^1 + b P_{comb.} \quad (4.26)$$

Asumiendo que el costo del combustible es **3.31754 usd/GJ** (U.S. Department of Energy, 2011) se tiene que el costo unitario de la electricidad es **0.1093 usd/KWh**.

Típicamente el vapor de baja presión se encuentra a una temperatura de 573.15 K y a una presión entre 60-80 psia (4-5.5 bar) (Rao y Rubin, 2002). El costo unitario de vapor con tales características es **0.0176 usd/kg** (8.2086 usd/GJ).

El valor máximo de caudal de agua de enfriamiento ( $10 \text{ m}^3/\text{s}$ ) está dado por el límite práctico del tamaño del sistema de refrigeración. De esta manera, asumiendo un consumo máximo de agua de enfriamiento, el costo unitario es **0.0703 usd/m<sup>3</sup>**. Además, se asume que el costo de agua de reposición es igual al costo de agua de enfriamiento.

El costo actualizado del solvente (monoetanolamina) es **1858.35 usd/tn**, y el costo de inhibidores se estima como un 2 % del costo de reposición de solvente (Rao y Rubin, 2002).

Tabla 4.4 – Coeficientes para el cálculo del costo unitario de servicios auxiliares (Ulrich y Vasudevan, 2006).

		a	b
<b>Electricidad</b>	[usd/KWh]	1.30E-04	0.01
<b>Vapor de proceso</b>	[usd/Kg]		
$1 < p < 46 \text{ barg}; 0.06 < m < 40 \text{ kg/s}$		$2.7 \times 10^{-5} m^{-0.9}$	$0.0034 p^{0.05}$
<b>Agua de enfriamiento</b>	[usd/m <sup>3</sup> ]		
$0.01 < q < 10 \text{ m}^3/\text{s}$		$0.0001 + 3.0 \times 10^{-5} q^{-1}$	0.003

#### ▪ *Costo de mano de obra operativa*

El costo de mano de obra operativa (OLC) se estima mediante la expresión 4.27:

$$OLC = \frac{t \sum_k L_{S_k} N_k}{L_{Y_{op}}} S_{op} \quad (4.27)$$

donde  $N_k$  es la cantidad de equipos de un mismo tipo,  $S_{op}$  es el salario anual de un operario (usd/año);  $t$  se refiere al número de turnos operativos de la planta por año;  $L_{Y_{op}}$  es la cantidad de trabajo operativo que un operador realiza durante un año. El número de operadores por turno ( $L_{S_k}$ ) depende del tipo de equipo. En la literatura pueden encontrarse tablas con valores para este parámetro. Los valores adoptados se toman de Henao (2005) y se listan en la Tabla 4.5.

Se asume: 1) 1000 turnos/año; 2) 8000 horas operativas por año; 3) 3 turnos por día; 4) 245 turnos operador/operador año y 5) 30000 usd/operador año.

Tabla 4.5 – Número de operadores por equipo (Henao, 2005).

<b>Equipo</b>	<b>N<sub>k</sub> por tren</b>	<b>Op.</b>
Torres separadoras	2	0.35
Sopladores y compresores	5	0.15
Intercambiadores de calor	8	0.1
Recipientes	2	0
Bombas	2	0
Rehervidores	1	0.3
<b>Total</b>		<b>2.55</b>

#### 4.2.4. Características del modelo. Esquema de resolución

De esta manera, las Ecuaciones 4.1 a 4.27 sumadas a las presentadas anteriormente (Ec. 2.1 a Ec. 3.35), conforman el modelo detallado que describe el estado estacionario del proceso completo de absorción y desorción. Como es lógico de esperar, el número de ecuaciones y variables se incrementa considerablemente respecto a cada uno de los modelos presentados en los capítulos anteriores. Precisamente, éste cuenta con aproximadamente 3200 ecuaciones y 3250 variables. Las nuevas restricciones asociadas al cálculo de los costos son, en su mayoría, no lineales, las cuales sumadas a las otras correspondientes al cálculo de entalpía, caída de presión, diferencia media logarítmica de temperatura y la presencia de términos bi-lineales (producto de dos variables), exige el desarrollo de una metodología robusta de solución. Generalmente, la convergencia de un modelo con tales características depende de la correcta inicialización, escalado y acotamiento (valores inferiores y superiores) de sus variables. La Figura 4.2 ilustra el esquema de solución utilizado.

Como puede observarse, la estrategia es similar a la propuesta en los capítulos anteriores y consiste en resolver sucesivamente diferentes modelos, los cuales aumentan progresivamente de tamaño a medida que se incorpora mayor nivel de detalle. La solución óptima de una etapa más simple se utiliza como punto inicial de la etapa actual, al mismo tiempo que se liberan y acotan ciertas variables fijas, lo que le otorga mayor robustez. Precisamente, en primer lugar se propone resolver el modelo de equilibrio tanto para el

proceso de absorción como el de desorción considerando únicamente los balances de materia y energía (las condiciones de diseño son parámetros fijos del problema). Luego, la solución obtenida por este modelo se utiliza como punto inicial para resolver el modelo riguroso (RB), el cual conserva los balances de materia y energía del modelo anterior además de las restricciones para la determinación del área de transferencia de materia, propiedades de transporte (viscosidades, difusividades, etc.) y eficiencia, entre otras variables. Esto permite obtener una solución en muy pocas iteraciones, ya que el modelo de equilibrio utilizado se aproxima en forma aceptable al modelo RB. A continuación, se procede a resolver el modelo RB pero ahora considerando restricciones de diseño (estimación del diámetro, altura y caída de presión), y utilizando nuevamente la solución óptima del modelo anterior como inicialización. Luego se incorporan las restricciones referidas al diseño de los equipos de intercambio térmico, sopladores y compresores y las referidas a las interconexiones entre corrientes y equipos. Y, finalmente, se resuelve el modelo RB incluyendo ahora todas las ecuaciones de costos, obteniéndose la solución óptima deseada, indicando las condiciones de operación y las dimensiones del proceso completo.

### 4.3. Diseño óptimo del proceso de absorción química de $CO_2$ según criterios termodinámicos y económicos

#### 4.3.1. Formulación del problema de optimización

Dados el diagrama mostrado en la Figura 1.2, las condiciones del gas exhausto que ingresa a las torres de absorción (flujo, composición y temperatura), la presión operativa en el rehervidor y la presión final de producto (14 MPa), el objetivo consiste en determinar las condiciones operativas y de diseño óptimas que permitan cumplir con diferentes metas de captura al menor costo anual total. Para tal fin se varía paramétricamente la eficiencia de captura de  $CO_2$  y se minimiza el costo anual total (TAC) definido por la Ecuación 4.7:

$$FO_1 = TAC^{cap} = TAI^{cap} + OMC^{cap}.$$

Por otra parte, con el fin de representar las pérdidas de potencia debidas a la extracción

---

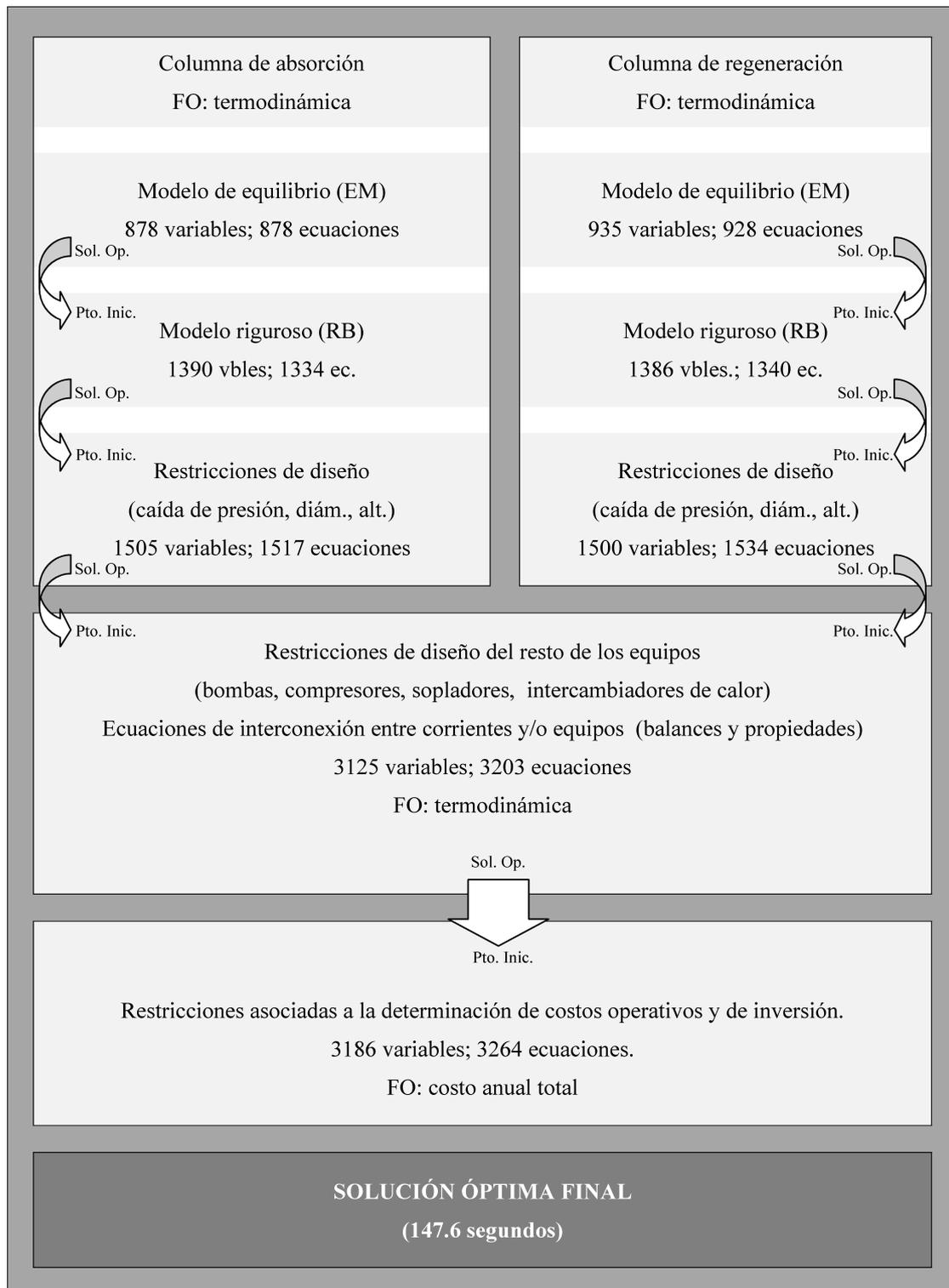


Figura 4.2 – Estrategia de resolución del modelo correspondiente al sistema de captura de  $CO_2$ .

de vapor para la regeneración del solvente, es común afectar la carga térmica en el rehervidor ( $Q_R$ ) por un factor de equivalencia ( $f_{eq}$ ), el cual depende de las condiciones operativas del vapor extraído y del vapor condensado que se recircula al sistema de generación. Dicho

factor varía desde 0.09 hasta 0.22 para centrales térmicas nuevas y desde 0.22 hasta 0.30 para plantas existentes (Rao y Rubin, 2002). De esta forma, aunque de manera simplificada, al cubrir ambos rangos es posible identificar y definir zonas de operación óptimas y diseños factibles tanto para adaptar el sistema de captura nuevo a ciclos de potencia existentes como para diseñar desde un principio el sistema acoplado (generación+captura).

En base a las consideraciones mencionadas en el párrafo anterior, se plantea el segundo caso de estudio en el cual se analiza el efecto de la variación paramétrica del factor de equivalencia ( $f_{eq}$ ) en las variables de operación, diseño y consecuentemente su influencia en la distribución de costos del sistema. El objetivo consiste en optimizar el sistema de captura de manera tal que se minimice la pérdida de eficiencia en la planta de generación debida al consumo de energía eléctrica (bombas, compresores, sopladores) y térmica (extracción de vapor). Para esto se propone minimizar la función objetivo indicada en la Ecuación (4.28), la cual computa la relación entre el trabajo equivalente total ( $W_{eq}$ ) y la cantidad de dióxido de carbono removida. Al mismo tiempo, se comparan los resultados obtenidos al minimizar el costo anual total por unidad  $CO_2$  capturada (Ec. 4.29).

$$FO_2 = \frac{(f_{eq} Q_R + W_{B1} + W_{S1} + W_{BCO_2} + W_{TC})}{G_{ec} y_{CO_2 ec}} \quad \forall \quad ec = 4 \quad (4.28)$$

$$FO_3 = \frac{TAC^{cap}}{NT G_{ec} y_{CO_2 ec}} \quad \forall \quad ec = 4 \quad (4.29)$$

Donde “ec=4” se refiere a las condiciones de salida de la última etapa de compresión y NT es el número de trenes de captura.

### 4.3.2. Diseño óptimo. Análisis y discusión de resultados

En la Tabla 4.6 se listan los parámetros adoptados en el sistema para los diferentes casos de estudio. Como se indica, se asume un sistema de captura con 4 trenes de captura y 4 trenes de compresión para tratar un caudal de gases de combustión igual a 40000 mol/s, que es aproximadamente la cantidad de gas que producen en ciclos combinados de gas natural con una capacidad de generación de electricidad de aproximadamente 800 MW. La composición de los gases exhaustos se determina en función de la combustión

---

estequiométrica del metano con exceso de aire.

El análisis de los resultados se realiza en términos de costo anual total, costo de operación y mantenimiento, capital de inversión y las principales variables de diseño y operación que definen el espacio de soluciones óptimas.

### Caso 1. Optimización del sistema de captura utilizando criterios económicos

Como se mencionó en la formulación del problema, el objetivo consiste en determinar el costo anual total (TAC) mínimo que garantice un cierto nivel de eficiencia de remoción de  $CO_2$  inherente a cada tren de captura, definida por la Ecuación (4.30). El modelo es resuelto paramétrica y sistemáticamente para valores de remoción de  $CO_2$  comprendidos entre 80 y 95 %.

$$\eta_T^{cap} = \frac{G_{out\ T}^{cap} Y_{out\ CO_2\ T}^{cap}}{G_{in\ T}^{cap} Y_{in\ CO_2\ T}^{cap}} \quad (4.30)$$

donde el subíndice  $T$  se refiere a cada tren de captura.

Varios autores han considerado que el vapor de calefacción y la energía eléctrica que necesita la planta de captura, se toman del ciclo de potencia de manera tal que, en la determinación de los costos de operación y mantenimiento, sus costos se asumen nulos (Abu-Zahra et al. (2007b); Fisher et al. (2005); Rubin et al. (2007), entre otros). En este análisis se considera además la posibilidad de comprarlos externamente. Así, es posible plantear dos situaciones según se indica a continuación:

- Caso 1a: considerar el costo de vapor de calefacción y de energía eléctrica en el costo total de materias primas y servicios auxiliares.

$$VOC = C_{Vapor} + C_{E.Elec.} + C_{MEA} + C_{H_2O} + C_{A. Enf}$$

- Caso 1b: NO considerar el costo de vapor de calefacción y de energía eléctrica en el costo total de materias primas y servicios auxiliares, pues son suministrados por la planta de potencia.

$$VOC = C_{MEA} + C_{H_2O} + C_{A. Enf}$$


---

Tabla 4.6 – Diseño óptimo: parámetros del modelo.

<b>Corrientes</b>	
<b>Gas exhausto</b>	
Caudal [mol/s]	40000
Temperatura [K]	323.15
CO <sub>2</sub> [fracción molar]	0.0422
H <sub>2</sub> O [fracción molar]	0.0845
O <sub>2</sub> [fracción molar]	0.1166
N <sub>2</sub> [fracción molar]	0.7567
<b>Reposición de MEA</b>	
MEA [fracción másica]	0.3
Temperatura [K]	298.15
<b>Reposición de H<sub>2</sub>O</b>	
Temperatura [K]	298.15
<b>Agua de enfriamiento</b>	
Temperatura de entrada [K]	298.15
Temperatura de salida [K]	313.15
<b>Equipos</b>	
<b>Número de trenes de absorción</b>	4
<b>Intercambiadores de calor</b>	
Coeficiente global de transferencia de materia [KW / m <sup>2</sup> K]	
Condensador [U <sub>CND</sub> ]	0.3871
Interenfriadores [U <sub>I3</sub> ]	0.3871
Enfriador amina agua [U <sub>E2</sub> ]	0.7155
Reboiler [U <sub>REB</sub> ]	1.0813
Economizador [U <sub>I1</sub> ]	0.7632
<b>Factor de equivalencia</b>	0.1-0.32
<b>Eficiencia de bombas, sopladores y compresores [%]</b>	75
<b>Presión en el reboiler [kPa]</b>	130, 165 y 200
<b>Presión final de CO<sub>2</sub> [kPa]</b>	14000
<b>Etapas de compresión</b>	4
<b>Tiempo de retención del tanque de agua [días]</b>	1
<b>Tiempo de retención del tanque de amina [días]</b>	30
<b>Unidades de absorción y regeneración</b>	
Tipo de columna	Empacada
Número de etapas	10
<b>Especificaciones del empaque</b>	
Tipo de empaque	Sillas Intalox de cerámica
Área específica [m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	118
Tamaño nominal [m]	0.05
Tensión superficial crítica [N/m]	0.061
Fracción de huecos	0.79
Factor de empaque seco [m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]	121.4

En las Figuras 4.3, 4.4 y 4.5 se presentan los valores óptimos del costo total (TAC), el costo de inversión de capital (TAI) y el costo de operación y mantenimiento (OMC) para cada nivel de recuperación y para los mismos valores de presión operativa en el rehervidor adoptados en el capítulo 3 (130, 165 y 200 kPa).

El costo anual total (Fig. 4.3), el costo de operación y mantenimiento (Fig. 4.4) y el capital de inversión (Fig. 4.5) aumentan con el nivel de recuperación y, para un valor dado de recuperación, son mayores cuanto menor es la presión operativa en el reboiler. En particular, para 90 % de recuperación y un aumento de presión de 130 a 200 kPa, el costo total, el capital de inversión y el costo de operación y mantenimiento decrecen, respectivamente, alrededor de 7.76 %, 8.80 % y 7.45 % para el Caso 1a y 7.67 %, 7.63 % y 7.70 % para el Caso 1b. Si bien para cada nivel de recuperación se obtiene un conjunto de condiciones tecno-económicas óptimas, cuando los costos se normalizan respecto a la cantidad de  $CO_2$  capturada se observa que:

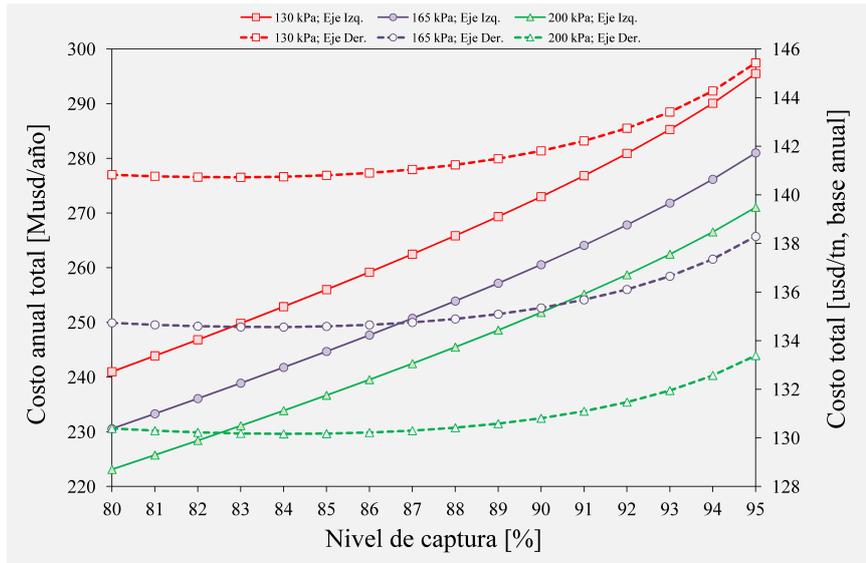
- Para el Caso 1a, se presentan costos anuales totales mínimos entre 83 y 84 %, con costos de operación y mantenimiento mínimos entre 80 y 82 %, y costos mínimos de inversión a 86 y 87 %.
- Para el Caso 1b, se presentan costos anuales totales mínimos entre 87 y 88 %, donde los costos operativos y de inversión mínimos se encuentran en el mismo rango de captura.

En base a los items anteriores se debe remarcar que se presentan diferencias importantes en los valores óptimos de costos en función del caso analizado, arrojando diferentes valores de recuperación en los cuales el costo anual total alcanza un valor mínimo.

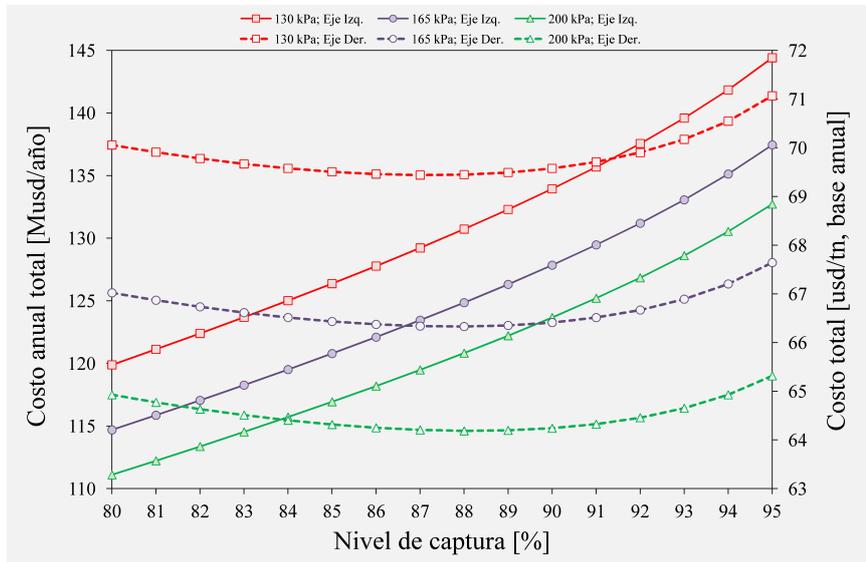
#### ***Distribución de costos de operación y mantenimiento.***

El costo de operación y mantenimiento (OMC) representa entre el 76 y 77.2 % del costo anual total (TAC) cuando el vapor y la electricidad se compran externamente (Caso 1a), mientras que la contribución es del 54.8 % si los mismos son provistos por la planta de potencia (Caso 1b). En la Figura 4.6 se observa que para el Caso 1a, el costo total de materias primas y servicios auxiliares (VOC) aumenta 16.4 % (130 kPa), 17.15 % (165 kPa)

---



(a) Caso 1a.

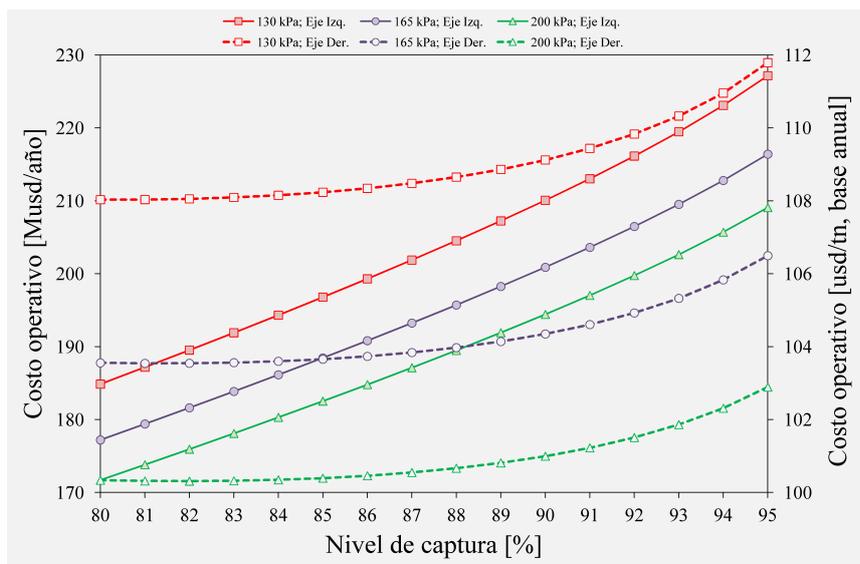


(b) Caso 1b.

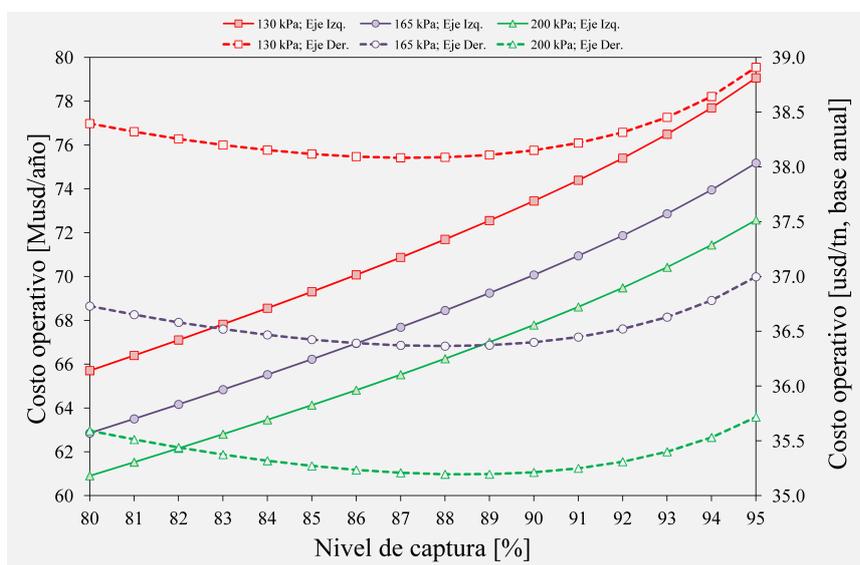
Figura 4.3 – Diseño óptimo. Caso 1: costo anual total en función del nivel de captura de CO<sub>2</sub>.

y 18.62% (200 kPa) con un aumento de recuperación desde 80% hasta 95%, mientras que para el Caso 1b aumenta 19.47% (130 kPa), 18.64% (165 kPa) y 18.15% (200 kPa).

En el Apéndice B se presenta la distribución de los costos de materias primas y servicios auxiliares para los distintos niveles de presión (Tablas B.2, B.3 y B.4). La Tabla 4.7 lista, en orden decreciente, el aporte relativo (valores máximos y mínimos en el rango de recuperaciones adoptado) del costo de vapor de calefacción, energía eléctrica, agua de enfriamiento, reposición de amina y reposición de agua al costo total de materias primas y



(a) Caso 1a.

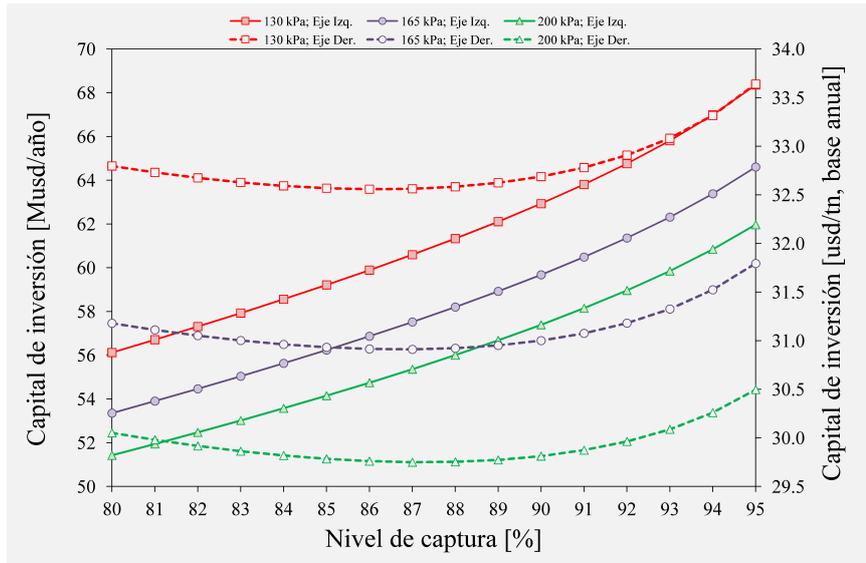


(b) Caso 1b.

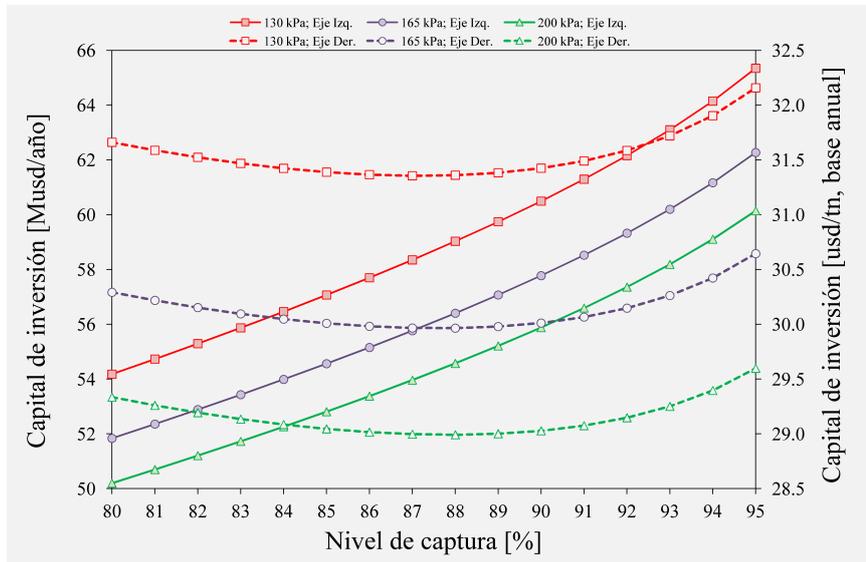
Figura 4.4 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de operación y mantenimiento en función del nivel de captura de  $CO_2$ .

servicios auxiliares (VOC) y sus costos específicos, expresados en usd/tn  $CO_2$  capturado. Se observa que el orden de clasificación (y el aporte relativo) es similar para todos los niveles de presión adoptados. En el Caso 1a, el vapor de calefacción y la energía eléctrica representan más del 80 % del costo operativo variable (VOC), mientras que en el Caso 1b el costo de agua de enfriamiento es el más representativo (más del 60 %). Además se advierte que mientras mayor es la presión operativa menor es el costo de cada utilitario.

En la Figura 4.7 se muestra la penalidad eléctrica total debido al trabajo de bombeo y



(a) Caso 1a.



(b) Caso 1b.

Figura 4.5 – Diseño óptimo. Caso 1: capital de inversión anual en función del nivel de captura de  $CO_2$ .

compresión. De la Figura 4.8 se advierte que el consumo de energía eléctrica utilizado por los sopladores [S1] y compresores [COMP] representa en promedio el 38 y 60 % del consumo total para el Caso 1a (200 kPa). Se observa un comportamiento similar para el Caso 1b con un aporte a la penalidad eléctrica total de 40 y 58 %, respectivamente. Fisher et al. (2005) y Ystad et al. (2012) reportaron penalidades eléctricas algo menores (418.15 y 430 MJ/tn, respectivamente) donde el trabajo de compresión corresponde aproximadamente al 71 % del trabajo total.

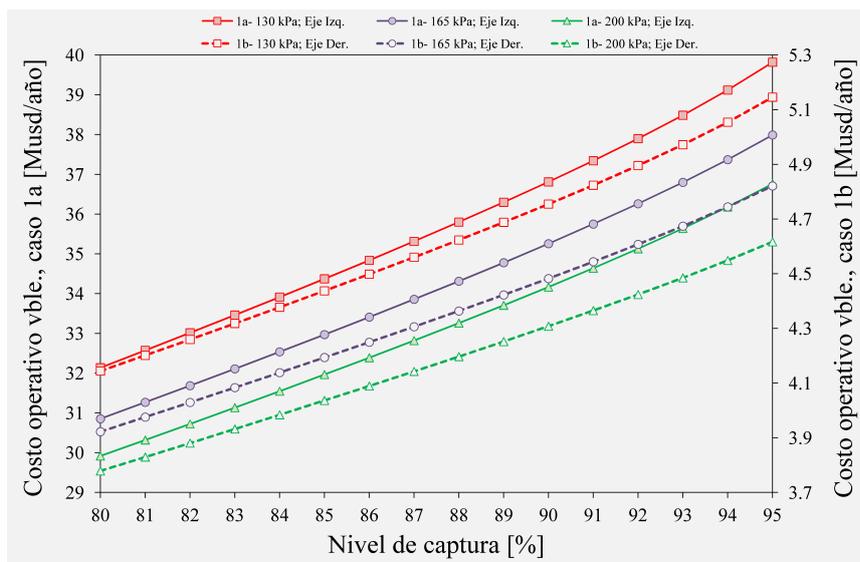


Figura 4.6 – Diseño óptimo. Caso 1: costo total de servicios auxiliares.

En la Figura 4.9 se muestra la penalidad térmica relacionada al consumo de vapor para la regeneración del solvente, representado en la Figura 4.10.

Como se definió en la formulación del problema, en el Caso 1b no se considera el costo de vapor de calefacción y energía eléctrica en la función objetivo. De esta manera, y según se observa en las Figuras 4.7 y 4.9, los valores óptimos de consumo de estos servicios auxiliares son mayores que en el Caso 1a. Aun cuando se observan comportamientos similares con respecto al aumento de presión y aumento de recuperación, la penalidad eléctrica (Figura 4.7) para el Caso 1b es 7.9, 9.1 y 9.9 % (en promedio) mayor que para el Caso 1a a 130, 165 y 200 kPa, respectivamente. Por su parte, la penalidad térmica (Figura 4.9) es 11.6 % (130 kPa), 9.0 % (165 kPa) y 7.4 % (200 kPa) mayor.

De acuerdo a la Figura 4.10, el consumo óptimo de vapor de calefacción (3 barg de presión) varía entre 2029.5 y 2496.6 kg/tn  $CO_2$  capturado, mientras que el consumo de agua de enfriamiento (Fig. 4.11) varía entre 74.6 y 95.7  $m^3$ /tn  $CO_2$ , dependiendo de los niveles de recuperación y presión, así como de la función objetivo planteada.

Abu-Zahra et al. (2007a,b) reportaron consumos de agua de enfriamiento algo superiores a los valores óptimos presentados: 100 y 117  $m^3$ /tn  $CO_2$  para 80 % y 95 % de eficiencia de captura, respectivamente.

Según se observa en la Figura 4.12, entre 59.3 y 64 % del agua de enfriamiento total se consume en los condensadores [CND], entre 25.4 y 26.4 % en los enfriadores de amina [E2]

Tabla 4.7 – Diseño óptimo. Caso 1: costos de materias primas y servicios auxiliares, distribución porcentual.

200 kPa								
	1a				1b			
	[%]		[usd/tn]		[%]		[usd/tn]	
	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.
Vapor de calefacción	55.82	57.00	9.9652	10.0991	-	-	-	-
Energía eléctrica	30.65	32.06	5.3580	5.7991	-	-	-	-
Agua de enfriamiento	7.42	7.49	1.3102	1.3423	61.49	62.57	1.3580	1.4217
Reposición de MEA	4.62	4.78	0.8363	0.8363	36.81	37.87	0.8363	0.8363
Reposición de H <sub>2</sub> O de proceso	0.08	0.08	0.0141	0.0141	0.62	0.64	0.0141	0.0141
165 kPa								
	1a				1b			
	[%]		[usd/tn]		[%]		[usd/tn]	
	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.
Vapor de calefacción	55.66	56.84	10.2481	10.4061	-	-	-	-
Energía eléctrica	30.82	32.24	5.5572	6.0282	-	-	-	-
Agua de enfriamiento	7.55	7.62	1.3745	1.4110	62.90	64.16	1.4418	1.5223
Reposición de MEA	4.47	4.64	0.8363	0.8363	35.25	36.48	0.8363	0.8363
Reposición de H <sub>2</sub> O de proceso	0.08	0.08	0.0141	0.0141	0.59	0.61	0.0141	0.0141
130 kPa								
	1a				1b			
	[%]		[usd/tn]		[%]		[usd/tn]	
	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.
Vapor de calefacción	55.52	56.63	10.6360	10.8787	-	-	-	Máx.
Energía eléctrica	31.01	32.40	5.8231	6.3483	-	-	-	-
Agua de enfriamiento	7.75	7.83	1.4707	1.5186	64.89	66.42	1.5715	1.6821
Reposición de MEA	4.27	4.45	0.8363	0.8363	33.02	34.53	0.8363	0.8363
Reposición de H <sub>2</sub> O de proceso	0.07	0.07	0.0141	0.0141	0.56	0.58	0.0141	0.0141

y el resto en la etapa de compresión [E3].

#### *Distribución de costos de inversión de capital.*

En las Figuras 4.13 a 4.18 se muestra el costo de adquisición de los equipos más importantes del proceso para distintos niveles de presión y recuperación de CO<sub>2</sub> y, como es de esperar, aumentan con el incremento del nivel de captura. Considerando que a 200 kPa de presión operativa, el costo total anual es menor que a 165 y 130 kPa, en todo el rango de recuperaciones adoptado, se presentan las áreas de los equipos de intercambio, las

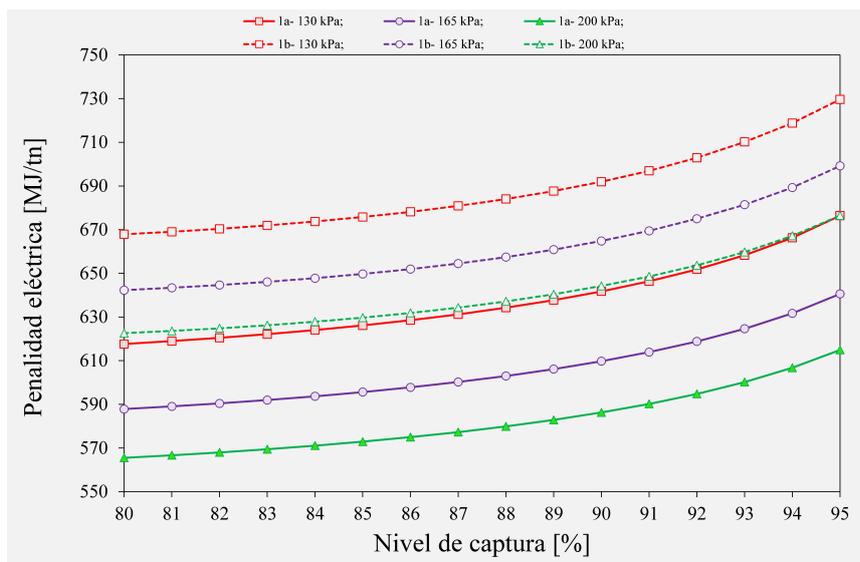


Figura 4.7 – Diseño óptimo. Caso 1: penalidad eléctrica.

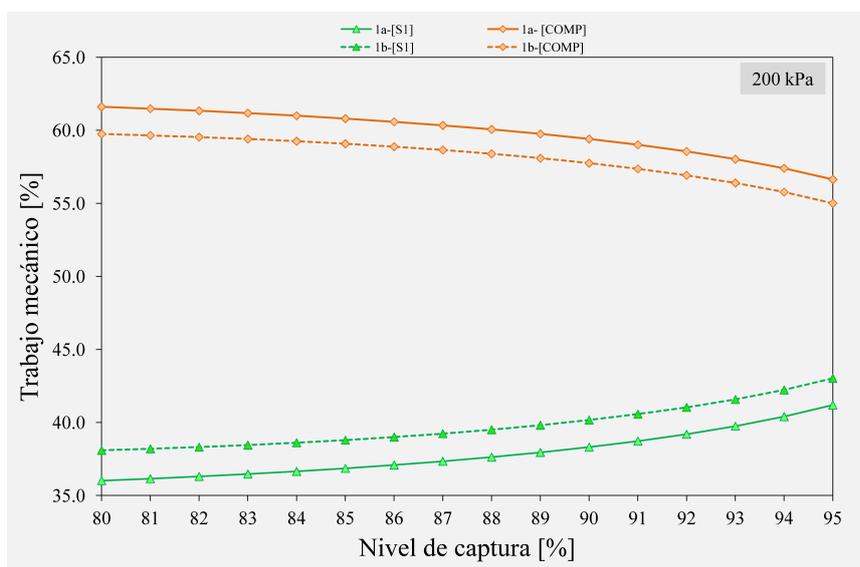


Figura 4.8 – Diseño óptimo. Caso 1: distribución de trabajo mecánico.

potencias de diseño de los equipos de bombeo y compresión, y los tamaños de las columnas para tal nivel de presión. Aun así, se observan comportamientos similares a 165 y 130 kPa según se puede apreciar en las Tablas B.5 a B.12 del Apéndice B.

En la Tabla 4.8, se lista además la distribución porcentual del costo de adquisición de equipos. Se observa que el costo de las columnas de absorción y los compresores influyen fuertemente en el costo de inversión total, representando aproximadamente entre 58.5 y 65.0 % del costo total de adquisición de equipos (PC), dependiendo del valor de recuperación deseado y de la presión de operación del rehervidor. El tercer y cuarto lugar es ocupado,

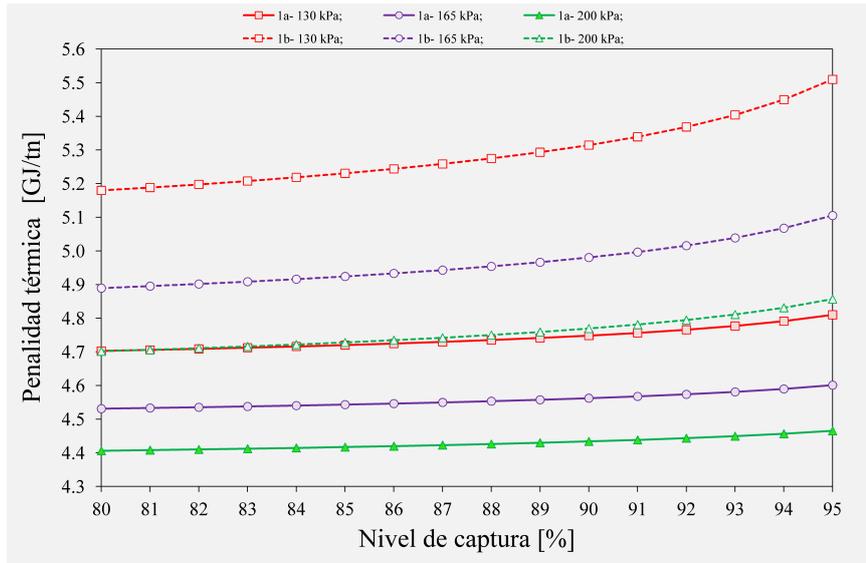


Figura 4.9 – Diseño óptimo. Caso 1: penalidad térmica.

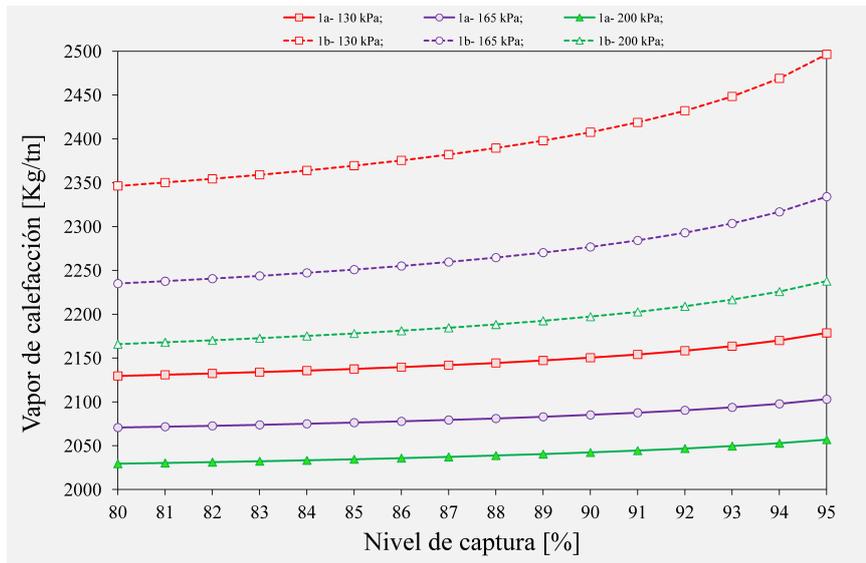


Figura 4.10 – Diseño óptimo. Caso 1: consumo de vapor de calefacción.

respectivamente por el costo de rehervidores y el costo de columnas de regeneración.

A diferencia del resto de los equipos, en los que el caso de estudio no hace variar el orden de clasificación, el costo de economizadores [I1] y sopladores [S1] ocupan el quinto y sexto lugar en el Caso 1a, mientras que dicho orden se invierte para el Caso 1b.

Condensadores [CND], enfriadores de solvente [E2], bombas de  $CO_2$  [BCO2], tanques de agua [T1], interenfriadores [E3], tanques de solvente [T2] y bombas de solvente [B1], en ese orden, representan en total menos del 9% del costo total de adquisición de equipos (PC). Los costos respectivos se detallan en las Figuras B.1 a B.5 del Apéndice B.

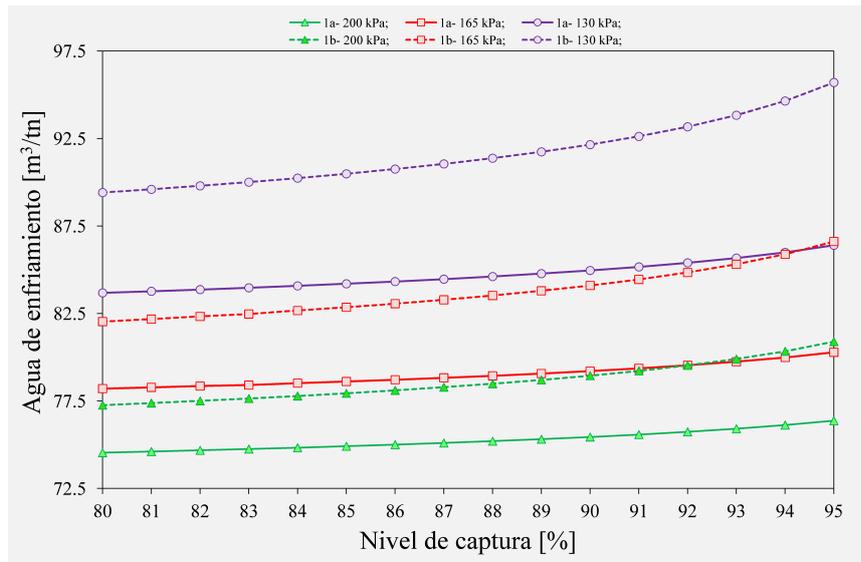


Figura 4.11 – Diseño óptimo. Caso 1: consumo de agua de enfriamiento.

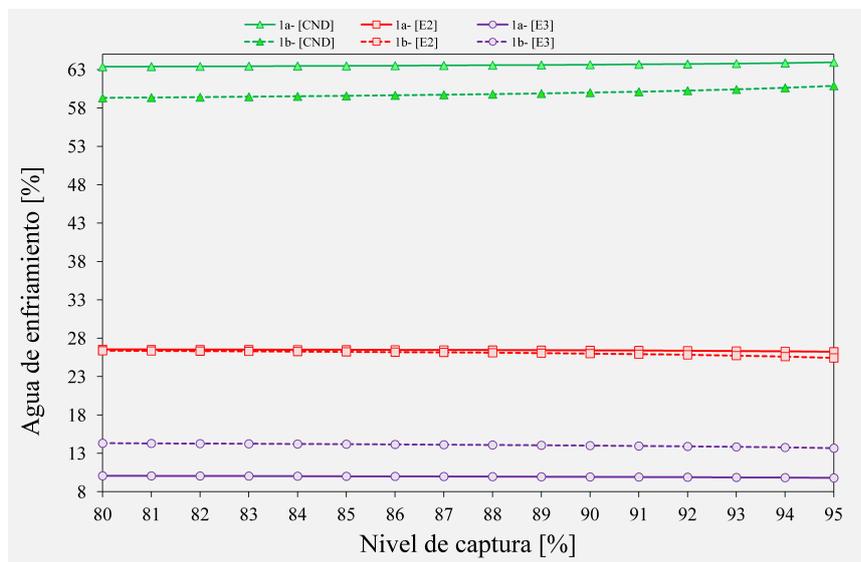


Figura 4.12 – Diseño óptimo. Caso 1: consumo de agua de enfriamiento, distribución por equipos.

Según se indicó en la formulación del problema, la recuperación inherente a cada tren, definida por la Ec. 4.30 se varía paramétricamente. Sin embargo, la eficiencia de remoción de  $CO_2$  de cada columna y su tamaño son variables de optimización. De esta manera, el aumento del costo de las columnas de absorción (Fig. 4.13) y regeneración (Fig. 4.16) está relacionado con el aumento del volumen de empaque para lograr una mayor recuperación (Tablas 4.9 y 4.10).

Como se había anticipado en el capítulo 2, el diámetro de las columnas de absorción (variable de optimización) es fuertemente sensible a las variaciones de caudal de gas a

Tabla 4.8 – Diseño óptimo. Caso 1: costos de adquisición de equipos, distribución porcentual.

	1a [%]			1b [%]	
	Mínimo	Máximo		Mínimo	Máximo
Columna de abs.	34.95	39.49	Columna de abs.	33.39	37.32
Compresores	23.52	25.15	Compresores	25.55	27.01
Rehervidores	8.24	9.29	Rehervidores	9.52	10.06
Columnas de reg.	7.52	9.35	Columnas de reg.	6.93	8.20
<b>Economizadores</b>	<b>6.51</b>	<b>7.31</b>	<b>Sopladores</b>	<b>6.31</b>	<b>7.07</b>
<b>Sopladores</b>	<b>5.59</b>	<b>6.31</b>	<b>Economizadores</b>	<b>6.01</b>	<b>6.67</b>
Condensadores	3.06	3.36	Condensadores	2.42	2.96
Enfriadores de solv.	1.77	2.25	Enfriadores de solv.	1.71	2.14
Bombas de CO <sub>2</sub>	1.00	1.17	Bombas de CO <sub>2</sub>	1.04	1.20
Tanques de agua	0.90	1.09	Tanques de agua	0.94	1.12
Interenfriadores	0.73	0.83	Interenfriadores	0.86	1.02
Tanques de solv.	0.19	0.23	Tanques de solv.	0.20	0.23
Bombas de solv.	0.05	0.16	Bombas de solv.	0.05	0.16

tratar. Considerando que en el caso de estudio el flujo de gases exhaustos es un parámetro del problema (10000 mol/s por tren de captura), se observa que la variación del diámetro es despreciable frente a la variación de la altura. Por ejemplo, para el Caso 1a el diámetro aumenta un 1.0 % con un incremento de la eficiencia de captura desde 80 hasta 95 %, mientras que la altura aumenta 59.2 %. Consecuentemente, la relación entre la altura y el diámetro de las columnas de absorción aumenta con el incremento de recuperación (Tabla 4.9).

No ocurre lo mismo con las columnas de regeneración en la que todos los flujos son variables de optimización (caudal de alimentación de solvente, reflujo de líquido y reflujo de vapor). A partir de los valores óptimos de diseño listados en la Tabla 4.10, se observa que tanto el diámetro como la altura varían en proporciones similares (aproximadamente entre 9 y 15 %). Además, si bien la altura y el diámetro aumentan con el aumento de la eficiencia de captura, la variación ocurre de tal manera que la relación entre la altura y el diámetro presenta valores mínimos a determinados niveles de recuperación (En el Caso 1a a 93 % y en el Caso 1b a 89 %).

El aumento de trabajo de compresión con la recuperación (Tabla 4.12.) y, consecuentemente, el costo de los compresores (Fig. 4.14), está directamente asociado al incremento

del flujo de  $CO_2$  a comprimir ya que la relación de compresión y la presión operativa en el condensador (que se asumió igual a la presión de operación en el tope de la columna de regeneración), son prácticamente independientes del nivel de captura.

Se observa además, que el flujo de gas a comprimir en el Caso 1b es de 3.6 a 4.5 veces mayor que en el Caso 1a, produciendo un incremento de trabajo de compresión entre 6.8 y 26.8 % y un aumento del costo de compresores entre 5.9 y 20.9 %.

Un aumento del costo de los sopladores (Fig. 4.18) está relacionado al aumento de la caída de presión en las columnas de absorción (Tabla 4.9) a medida que se incrementa el nivel de recuperación. En particular, a 200 kPa, entre 80 y 95 % de captura se observa un aumento de 27.25 % del costo del equipo frente a un aumento de 54.3 % en la caída de presión a través de la columna.

El costo de las bombas de solvente y bombas de  $CO_2$  es mínimo (aportan en total entre 1.05 y 1.3 % del PC), y está asociado a un trabajo despreciable respecto a la penalidad eléctrica total (Ver Tabla 4.12 y Fig. 4.8).

El área de transferencia de calor de todos los equipos de intercambio térmico, al igual que las demás variables de diseño (trabajo de bombeo y compresión y dimensiones de las columnas), aumenta con el incremento de la cantidad de  $CO_2$  capturada. En particular, el área requerida en los rehervidores [REB] y los economizadores [I1], representa más del 70 % del área de intercambio térmico total (Tabla 4.11).

Como puede observarse, el área total de transferencia de calor para el Caso 1a se distribuye de la siguiente manera (orden decreciente): 37.3 % corresponde a **economizadores**; 32.8 % a **rehervidores**; 19.6 % a condensadores; 8.4 % a enfriadores de solvente; y 2.0 % a interenfriadores.

Para el Caso 1b, el área total de transferencia de calor presenta la siguiente distribución: 40.1 % corresponde a **rehervidores**; 34.9 % a **economizadores**; 13.7 % a condensadores; 8.3 % a enfriadores de solvente; y 2.9 % a interenfriadores.

Al comparar ambos casos, se puede observar que algunos equipos cambian de orden y el resto conserva su posición. Precisamente, para el Caso 1a el equipo que más área requiere es el economizador seguido por el rehervidor, mientras que para el Caso 1b se invierte dicho

---

orden.

Aún así, el costo de los rehervidores ocupa el tercer lugar en la distribución de costos para los dos casos bajo análisis (Tabla 4.8).

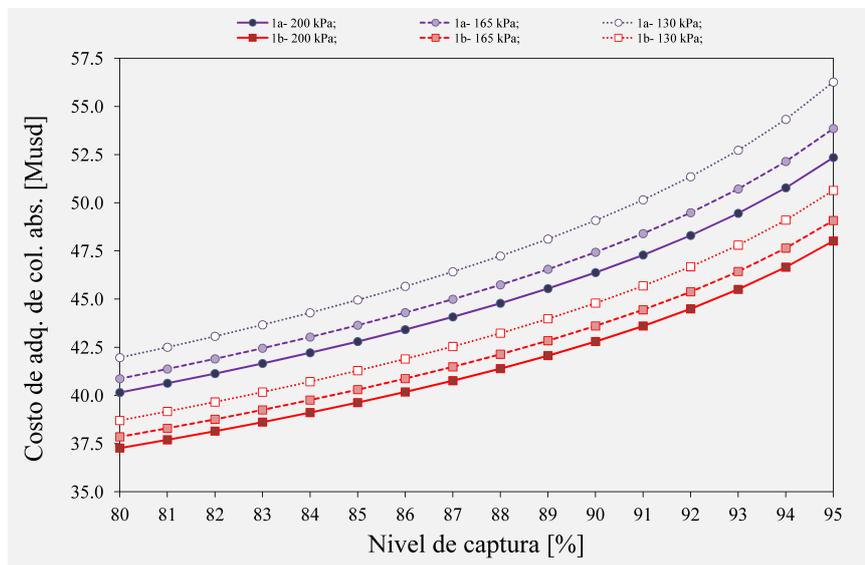


Figura 4.13 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de las columnas de absorción.

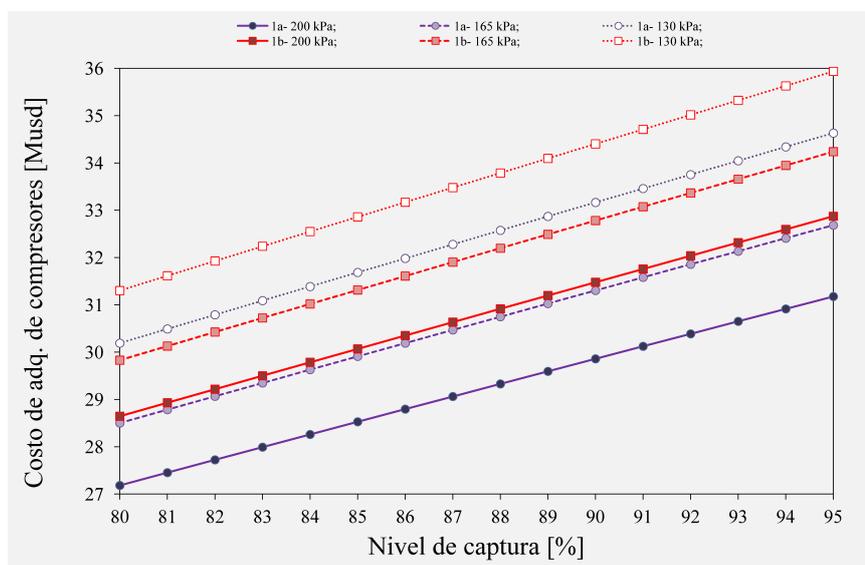


Figura 4.14 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de compresores.

Finalmente, es posible concluir que, al considerar el costo del vapor de calefacción y la energía eléctrica en la función objetivo a minimizar (Caso 1a), aumenta el tamaño de las columnas de absorción y de regeneración a la vez que se reduce el trabajo en los compresores y la carga térmica (y el área de transferencia) en el rehervidor, en todo el rango de eficiencia de captura considerado. Específicamente, las columnas de regeneración aumentan su tamaño

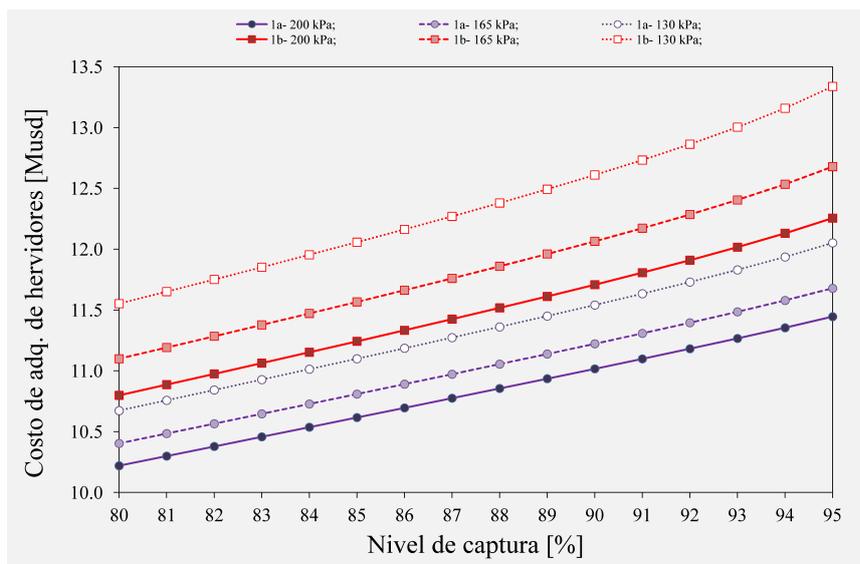


Figura 4.15 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de rehervidores.

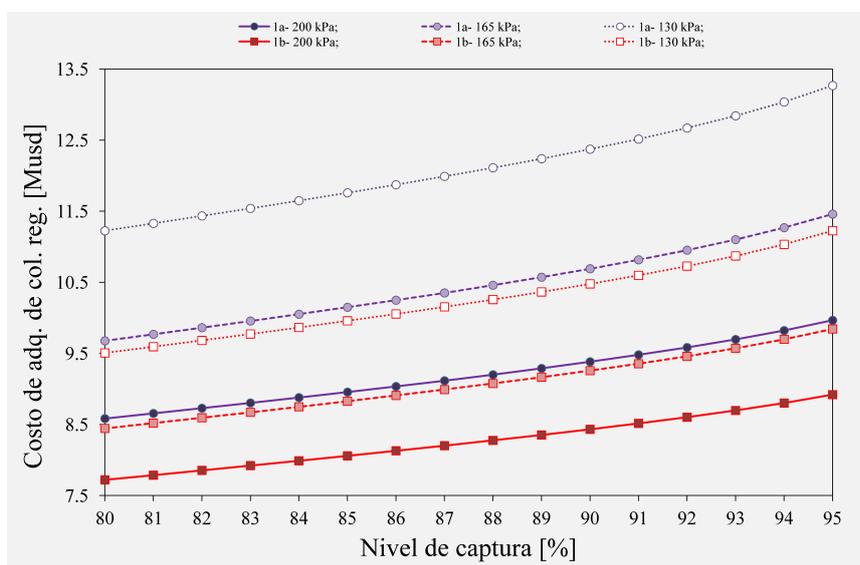


Figura 4.16 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de columnas de regeneración.

entre un 45.1 y 47.3 % y las columnas de absorción entre 14.7 y 16.6 %. El área de los rehervidores, el trabajo de compresión y la carga térmica en rehevidores disminuyen entre 8.8 y 10.8 %, 6.3 y 6.4 % y 6.3 y 8.1 %, respectivamente.

***Variables operativas más importantes.***

A continuación, se listan las condiciones operativas más importantes que hacen mínimo el costo anual total.

- La carga óptima de amina pobre varía entre 0.1516 y 0.2116 (Fig. 4.19), disminuyendo con el aumento de la recuperación o de la presión. En la bibliografía, a partir de

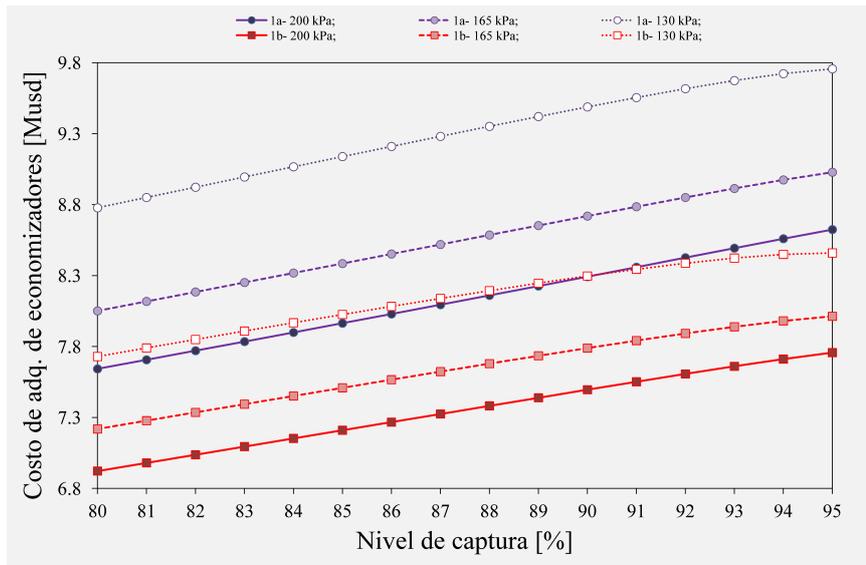


Figura 4.17 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de economizadores.

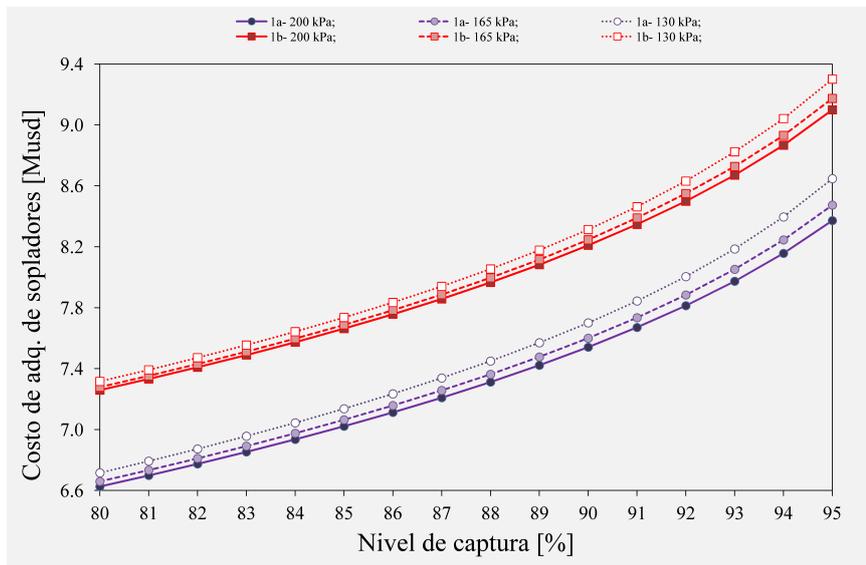


Figura 4.18 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de sopladores.

simulación paramétrica, se determinaron diferentes valores óptimos: Abu-Zahra et al. (2007a,b) encontraron que para valores de  $\alpha_L$  entre 0.25 y 0.33 se observan valores mínimos de los costos de captura en coincidencia con la zona de menor requerimiento térmico en el rehervidor [GJ/tn]. Por su parte, Alie et al. (2005), a partir del estudio del proceso completo, encontraron que el mínimo requerimiento energético (4 GJ/tn) se alcanza con cargas de amina entre 0.25 y 0.30 mol  $CO_2$ / mol MEA. Valores de  $\alpha_L$  iguales a 0.15, 0.2 y 0.2392 fueron reportados, respectivamente, por Kwak et al. (2012), Jordal et al. (2012) y Ystad et al. (2012) para 90 % de recuperación.

Tabla 4.9 – Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de absorción.

200 kPa								
Rec. tren [%]	Vol. de empaque [m <sup>3</sup> ]		Caída de presión [kPa]		Recuperación [%]		H/D [-]	
	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b
	80	2439	2127	9.10	10.71	86.36	86.36	1.73
81	2498	2177	9.28	10.90	87.09	87.09	1.77	1.76
82	2559	2229	9.47	11.11	87.82	87.81	1.81	1.80
83	2624	2284	9.66	11.33	88.54	88.53	1.85	1.84
84	2692	2342	9.87	11.56	89.26	89.25	1.89	1.88
85	2765	2403	10.09	11.80	89.97	89.95	1.94	1.93
86	2841	2468	10.33	12.07	90.67	90.66	1.99	1.98
87	2923	2537	10.58	12.35	91.37	91.35	2.04	2.03
88	3012	2611	10.85	12.66	92.07	92.04	2.10	2.08
89	3107	2691	11.14	13.00	92.75	92.73	2.16	2.14
90	3211	2778	11.47	13.37	93.44	93.41	2.23	2.21
91	3326	2874	11.82	13.78	94.11	94.09	2.30	2.28
92	3454	2981	12.23	14.24	94.79	94.76	2.39	2.36
93	3598	3101	12.68	14.77	95.45	95.42	2.48	2.46
94	3766	3238	13.22	15.40	96.11	96.08	2.59	2.56
95	3965	3400	13.86	16.15	96.77	96.74	2.73	2.69

- La relación de flujo de solvente a flujo de gas (L/G) en la torre de absorción varía entre 0.9 y 1.26 (Fig. 4.20a). En esta Figura se indica que mientras mayor es la presión operativa en el rehervidor, menor es la relación L/G. En oposición, cuanto mayor es la recuperación, mayor es la relación de flujo óptima (L/G). En algunos de los últimos trabajos publicados por Amrollahi et al. (2012), Jordal et al. (2012) y Ystad et al. (2012) se reportaron, respectivamente, los siguientes valores de L/G (base másica): L/G=0.9977, 1.14 y 1.45 para un 90 % de recuperación.

Los valores óptimos de flujo de solvente (Fig. 4.20b) varían entre 15.9 y 18.7 m<sup>3</sup>/tn CO<sub>2</sub>, los que están en concordancia con el rango reportado por Abu-Zahra

Tabla 4.10 – Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de regeneración.

200 kPa								
Rec. tren [%]	Vol. de empaque		Caída de presión		Recuperación		H/D	
	[m <sup>3</sup> ]		[kPa]		[%]		[-]	
	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b
80	106.9	72.5	2.01	1.33	63.19	63.18	2.234	1.344
81	108.8	73.9	2.01	1.34	63.19	63.20	2.229	1.341
82	110.7	75.3	2.02	1.35	63.19	63.22	2.223	1.338
83	112.7	76.7	2.03	1.36	63.19	63.24	2.218	1.336
84	114.8	78.2	2.03	1.37	63.19	63.26	2.213	1.334
85	116.9	79.7	2.04	1.37	63.19	63.29	2.208	1.332
86	119.0	81.3	2.05	1.38	63.20	63.32	2.203	1.331
87	121.3	82.9	2.05	1.39	63.20	63.36	2.198	1.330
88	123.7	84.6	2.05	1.41	63.21	63.40	2.193	1.329
89	126.2	86.4	2.05	1.42	63.21	63.44	2.188	1.329
90	128.9	88.3	2.05	1.43	63.22	63.50	2.183	1.330
91	131.7	90.3	2.05	1.45	63.24	63.57	2.179	1.331
92	134.8	92.5	2.05	1.47	63.26	63.65	2.175	1.334
93	138.2	95.0	2.05	1.49	63.30	63.76	2.174	1.338
94	142.1	97.8	2.05	1.51	63.34	63.90	2.174	1.344
95	146.6	101.1	2.05	1.55	63.42	64.09	2.177	1.354

et al. (2007a) ( $15\text{-}50\text{ m}^3/\text{tn CO}_2$ ) para recuperaciones entre 80 y 95 %.

- El calor aportado en el reboiler por unidad de  $\text{CO}_2$  capturada (Fig. 4.9) es mínimo a 80 % de recuperación y 200 kPa (4.4 GJ/tn), y máximo a 95 % de recuperación y 130 kPa (5.51 GJ/tn).

Se puede advertir además, que al considerar el costo del vapor de calefacción en el costo anual total, se logra una importante reducción de la carga térmica específica en el reboiler (Caso 1a respecto al Caso 1b). Tal reducción es menor cuanto mayor sea la presión operativa en el reboiler y menor la recuperación.

Como es de esperar, y considerando que el costo de vapor de calefacción es el principal

Tabla 4.11 – Diseño óptimo. Caso 1: área requerida en los equipos de intercambio de calor.

200 kPa, [m <sup>2</sup> ]										
[%]	[I1]		[REB]		[CND]		[E2]		[E3]	
	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b
80	5977.8	5068.9	5289.6	5798.2	3132.4	1969.1	1392.9	1252.4	321.3	432.5
81	6061.4	5139.2	5358.2	5877.2	3177.4	1997.5	1406.9	1265.0	325.2	437.9
82	6145.7	5209.8	5427.1	5956.9	3222.6	2026.3	1420.7	1277.4	329.1	443.3
83	6230.6	5280.9	5496.3	6037.4	3268.0	2055.4	1434.2	1289.5	333.0	448.7
84	6316.3	5352.3	5565.9	6118.8	3313.6	2085.0	1447.5	1301.3	337.0	454.1
85	6402.8	5424.2	5635.9	6201.1	3359.4	2115.2	1460.4	1312.8	340.9	459.5
86	6490.2	5496.4	5706.4	6284.6	3405.6	2145.8	1473.0	1323.9	344.8	464.9
87	6578.5	5568.8	5777.4	6369.5	3452.0	2177.2	1485.1	1334.5	348.8	470.3
88	6667.7	5641.6	5849.1	6455.9	3498.8	2209.4	1496.8	1344.7	352.7	475.7
89	6757.7	5714.4	5921.4	6544.2	3545.9	2242.5	1507.9	1354.2	356.7	481.1
90	6848.8	5787.2	5994.6	6634.9	3593.6	2276.9	1518.3	1363.0	360.6	486.5
91	6940.9	5859.7	6069.1	6728.6	3642.0	2312.7	1527.9	1370.8	364.6	491.9
92	7033.9	5931.2	6145.0	6826.1	3691.2	2350.4	1536.4	1377.5	368.5	497.3
93	7127.4	6001.1	6223.0	6928.7	3741.7	2390.7	1543.5	1382.7	372.5	502.7
94	7220.6	6067.7	6303.8	7038.7	3793.9	2434.6	1548.6	1385.6	376.5	508.1
95	7311.8	6128.1	6388.7	7159.8	3848.9	2483.9	1550.9	1385.5	380.5	513.5

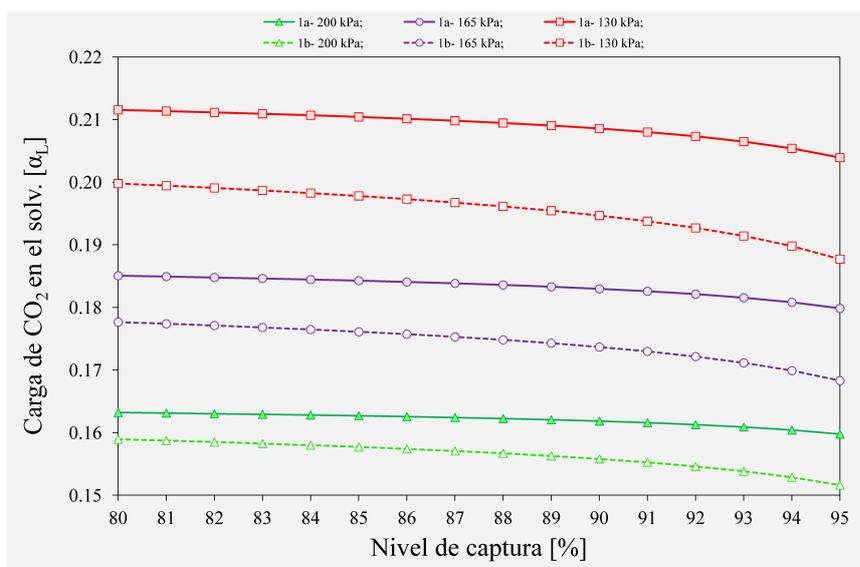


Figura 4.19 – Diseño óptimo. Caso 1: carga de CO<sub>2</sub> en el solvente pobre.

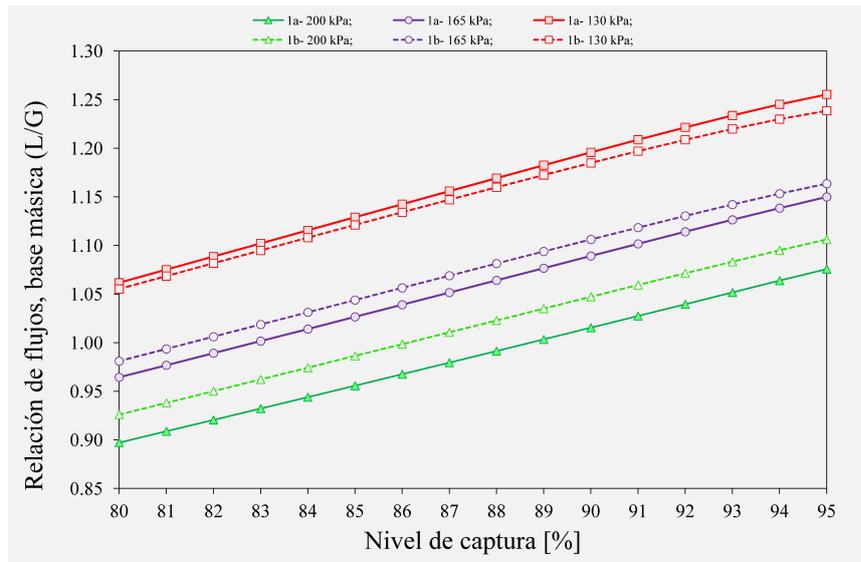
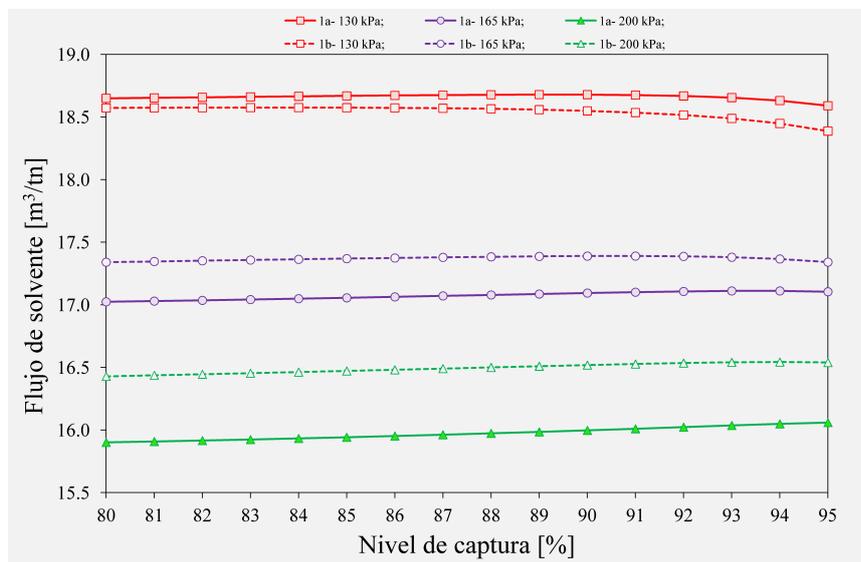
Tabla 4.12 – Diseño óptimo. Caso 1: trabajo de bombeo y compresión por tren de captura.

200 kPa, [KW]							
[%]	[COMP]		[S1]		[BCO2]	[B1]	
	1a	1b	1a	1b	1a-1b	1a	1b
80	5176.3	5526.5	3026.2	3523.3	169.5	28.9	29.0
81	5240.8	5595.6	3081.8	3582.8	171.6	29.3	29.4
82	5305.2	5664.8	3140.0	3645.5	173.7	29.6	29.7
83	5369.7	5733.9	3201.1	3711.5	175.8	29.9	30.0
84	5434.2	5803.1	3265.4	3781.5	177.9	30.2	30.3
85	5498.6	5872.2	3333.5	3855.9	180.1	30.6	30.6
86	5563.1	5941.4	3405.8	3935.4	182.2	30.9	30.9
87	5627.6	6010.5	3483.1	4020.9	184.3	31.2	31.2
88	5692.1	6079.7	3566.1	4113.4	186.4	31.5	31.5
89	5756.6	6148.9	3656.0	4214.2	188.5	31.8	31.8
90	5821.1	6218.1	3754.1	4325.1	190.7	32.1	32.0
91	5885.6	6287.3	3862.3	4446.8	192.8	32.4	32.3
92	5950.1	6356.6	3983.2	4582.5	194.9	32.6	32.5
93	6014.7	6425.8	4120.3	4737.3	197.0	32.9	32.7
94	6079.3	6495.1	4279.3	4917.8	199.1	33.1	32.9
95	6143.9	6564.5	4469.0	5134.5	201.2	33.2	32.9

componente del costo operativo variable (Caso 1a), a 80 % se observa también el mínimo valor del costo de operación y mantenimiento (Fig. 4.4a).

Como se discutió en el capítulo 3, se han reportado valores de carga térmica específica ( $Q_R$ ) entre 3.6 y 11.2 GJ/tn para diferentes condiciones operativas y de diseño. De esta manera, se observa que los valores óptimos obtenidos se encuentran dentro del rango reportado y sobre el extremo inferior mencionado.

- Se mencionó anteriormente (en los diferentes capítulos), que en la mayoría de los trabajos se adopta una temperatura de solvente (tope de la columna de absorción) igual a 313.15 K, y una variación de temperatura en el extremo caliente del economizador [I1] igual a 5 o 10 K, mientras que en el modelo desarrollado se consideran como variables de optimización. De esta manera, en la Figura 4.21 se

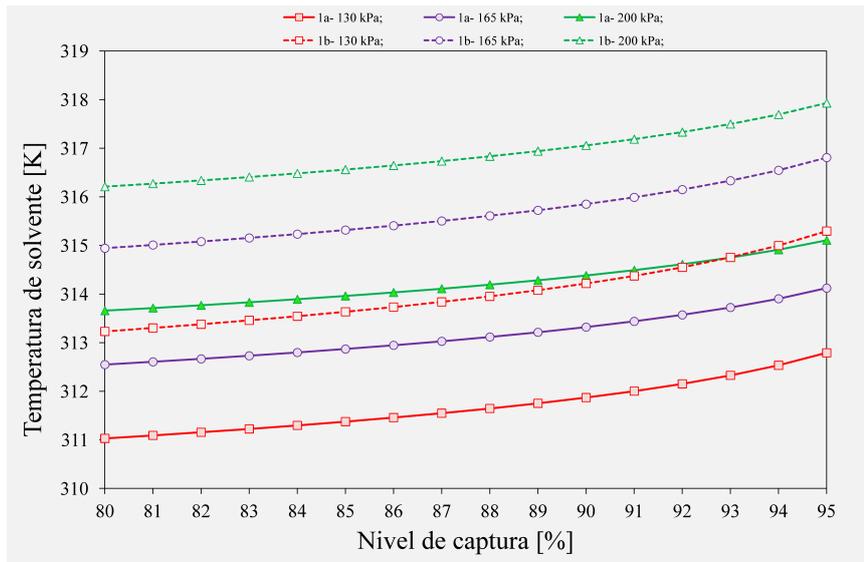
(a) Relación de flujos  $L/G$ .

(b) Flujo específico de solvente.

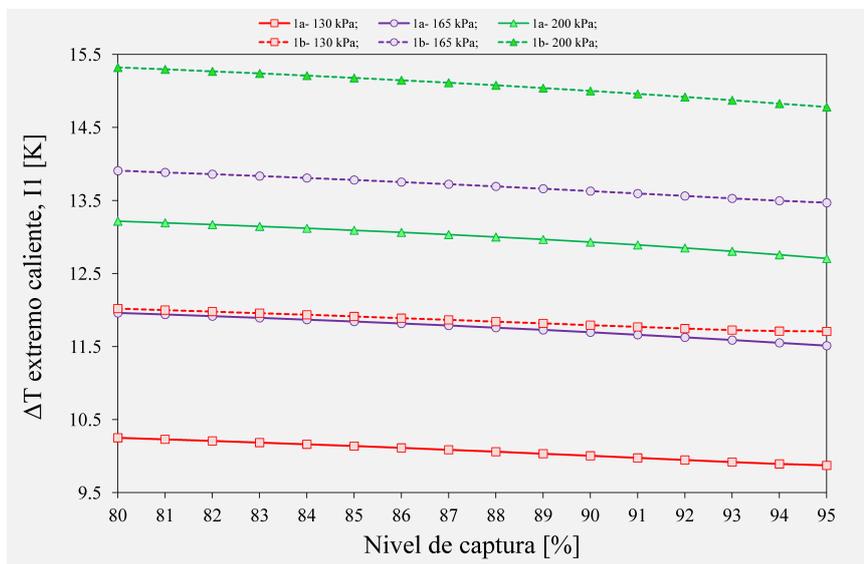
Figura 4.20 – Diseño óptimo. Caso 1: flujo de solvente.

presentan los valores óptimos de temperatura para cada nivel de recuperación. Se observa que los niveles térmicos en el Caso 1a son inferiores que para el Caso 1b.

Es posible concluir que, los valores óptimos de las variables operativas que se analizaron en este punto, se encuentran dentro del rango de valores reportados por otros autores. Sin embargo, es el único trabajo en el que se realiza la optimización simultánea de todas las variables (operativas y diseño) del proceso de captura considerando un modelo tecno-económico detallado.



(a) Temperatura de alimentación del solvente (columna de absorción)



(b) Diferencia de temperaturas en el extremo caliente del economizador.

Figura 4.21 – Diseño óptimo. Caso 1: temperaturas.

## Comparación de los valores de costo óptimos con costos reportados en la bibliografía.

En la Tabla 4.13 se comparan los resultados obtenidos con los datos reportados en diferentes fuentes (para 90 % de recuperación), detallando las composiciones y flujos de gas correspondientes a diferentes tipos de combustibles (carbón y gas natural) y flujos de gas. Específicamente, en Sipöcz y Tobiesen (2012) aplican el sistema de absorción química a gases obtenidos de la combustión de gas natural, mientras que en Abu-Zahra et al. (2007b) y Fisher et al. (2005) lo hacen para gases obtenidos de la combustión de carbón.

Tabla 4.13 – Diseño óptimo. Caso 1: comparación de los costos óptimos obtenidos con datos reportados en la bibliografía.

		[1] (a)	[1] (b)	[2] (b)	[3] (b)	[4] (b)
Tipo de combustible		Gas natural		Gas natural	Carbón	Carbón
Contenido de CO <sub>2</sub> (gas exhausto)	[fracción molar]	0.0422	0.0422	0.0420	0.0812	0.1233
Flujo de gas exhausto	[mol/s]	40000	40000	22897.0	22433.4	23563.1
Presión final de CO <sub>2</sub>	[MPa]	14	14	-	11	13.884
CO <sub>2</sub> capturado	[tn/año]	1.93e+06	1.93E+06	1.08E+06	1.95E+06	3.09E+06
<b>TAI</b>	[usd/tn]	29.81	29.03	55.4	10.21	9.04
<b>OMC</b>	[usd/tn]	100.00	35.21	32.1	16.08	5.22
<b>TAC</b>	[usd/tn]	130.81	64.24	87.5	26.29	14.25

[1] Esta tesis; [2] Sipöcz y Tobiesen, 2012; [3] Abu-Zahra et al., 2007; [4] Fisher et al., 2005

(a) Se considera que se compra el vapor de calefacción y la energía eléctrica.

(b) Se considera que la planta de potencia suministra el vapor de calefacción y la energía eléctrica, de manera tal que su consumo no influye en el costo operativo variable.

Como se puede observar, el capital de inversión [usd/tn] es 47.6 % menor que el publicado por Sipöcz y Tobiesen (2012) mientras que el costo de operación y mantenimiento es 9.6 % mayor. Sin embargo, es necesario hacer la salvedad que Sipöcz y Tobiesen (2012), de acuerdo a lo sugerido por representantes de la industria de generación, debieron aumentar en un 40 % el costo de adquisición de los equipos obtenidos a partir de correlaciones ampliamente utilizadas, con el fin de aproximarse a los valores reales de mercado.

En este trabajo se trata aproximadamente el doble de volumen de gas exhausto - y con menos de la mitad de CO<sub>2</sub> - que en Abu-Zahra et al. (2007b) y en Fisher et al. (2005), lo que se ve reflejado en el aumento del costo total anual (58 y 78 % respectivamente).

En general, los valores obtenidos concuerdan satisfactoriamente con los datos publicados. Las diferencias observadas en cada caso particular podrían estar dadas naturalmente por las diferentes hipótesis, escenarios, casos de referencia, correlaciones empleadas, incertidumbres, etc.. En este sentido, esta tesis reporta, además de los valores de los parámetros asumidos, todas las correlaciones y sus fuentes respectivas, así como las variables operativas y de diseño asociadas con el fin de brindar la posibilidad de una apropiada comparación y reproducibilidad de resultados.

## Caso 2. Optimización del sistema de captura utilizando criterios termodinámicos

Los parámetros del proceso se listaron en la Tabla 4.6. Se asume una presión de operación en el rehervidor de 200 kPa. El análisis de resultados se realiza en base a la comparación de óptimos entre el Caso 2a (minimizar el trabajo equivalente específico, FO2) y el Caso 2b (minimizar el costo anual total específico, FO3).

En la estimación del costo total de operación y mantenimiento se consideran únicamente el costo de agua de enfriamiento, reposición de agua y reposición de solvente (equivalente al Caso 1b discutido anteriormente).

Mediante la definición de un trabajo equivalente (Función objetivo termodinámica, Ec. 4.28) se tienen en cuenta las penalidades eléctricas asociadas al trabajo de bombeo y compresión y las penalidades térmicas asociadas a la extracción de vapor de calefacción de la turbina de baja presión del ciclo de vapor. De acuerdo a lo mencionado en la formulación del problema de optimización, el rango del factor de extracción considerado permite realizar el análisis de resultados para dos opciones de diseño: 1) acoplar una planta de captura (nueva) a una planta de generación existente y 2) acoplar una planta de captura (nueva) a una planta de generación nueva.

Mediante la observación de los primeros resultados de optimización se advierte que:

- Al minimizar el trabajo equivalente total (FO2) se alcanza el mínimo nivel de recuperación que se defina (como cota inferior), considerando un rango entre 80 y 95 % de recuperación de  $CO_2$ .
- Al minimizar la FO3, el costo anual total específico es 64.19 usd/tn, dando un nivel mínimo de recuperación de 88.18 %. Obviamente, estos resultados son independientes del valor del factor de extracción.

De esta manera, y con el fin de comparar ambos casos, en el Caso 2a se define un nivel de recuperación mínimo igual al obtenido en el Caso 2b (88.18 %).

En la Figura 4.22 se indican los valores óptimos del trabajo equivalente específico en función del factor de equivalencia. Como es de esperar, el trabajo equivalente total aumenta linealmente con el aumento de  $f_{eq}$ .

---

Se produce un aumento de 0.99 a 1.51 KW/tn para plantas nuevas ( $0.1 \leq f_{eq} \leq 0.22$ ), y de 1.51 a 1.84 KW/tn para plantas de generación existentes ( $0.22 \leq f_{eq} \leq 0.30$ ). Los valores óptimos obtenidos son algo superiores a los reportados en Ystad et al. (2012) (0.934 KW/tn;  $Q_R = 3.6 \text{ GJ/tn}$ ), Van Wagener y Rochelle (2011) (0.795 y 0.865 KW/tn;  $Q_R = 3.6 \text{ GJ/tn}$ ) y Karimi et al. (2011a) (0.9364 KW/tn;  $Q_R = 3.611 \text{ GJ/tn}$ ). En los dos últimos casos no se considera el trabajo consumido por los sopladores, que como se indicó tiene una importante influencia en la penalidad térmica total. Por otra parte, el calor específico en el rehervidor resulta también inferior al obtenido a partir de la optimización.

La penalidad térmica debida a la extracción de vapor representa entre 44.4 y 61.1 % de la penalidad total en plantas nuevas, y es mayor en plantas existentes (entre 61.1 y 67.4 %).

Para el Caso 2b, el trabajo de compresión (10.44 MW/tren) y la carga específica en el rehervidor (4.75 GJ/tn) son constantes, aunque de acuerdo a la Ec. 4.28 el trabajo específico equivalente aumenta con el aumento del factor de extracción.

En la Figura 4.23 se indica la variación del capital de inversión y el costo de operación y mantenimiento con el incremento del factor de extracción. Se observa claramente que es económicamente más ventajoso diseñar el sistema generación+captura desde un principio (plantas nuevas) que adaptar el sistema de captura a una planta de generación existente. Sin embargo, el costo anual total específico aumenta solo un 1.78 % al variar  $f_{eq}$  desde 0.1 hasta 0.3.

Por otro lado se advierte que el costo anual total para el Caso 2a (FO2) es entre 9.4 y 11.4 % mayor que en el Caso 2b (FO3), mientras que el trabajo equivalente es alrededor de un 10.5 % menor.

A continuación la Tabla 4.14 presenta, en orden decreciente y en función del factor de equivalencia, la distribución de costos de adquisición de los equipos y los servicios auxiliares.

La primera observación es acerca de la distribución del costo de adquisición de equipos. En particular, rehervidores [REB], columnas de regeneración [REG], sopladores [S1] y economizadores [E2], ocupan del tercer al sexto lugar. Sin embargo, el orden difiere de acuerdo al caso de estudio.

El costo de los tanques [T1, T2] y las bombas de  $CO_2$  [BCO2] es constante e

---

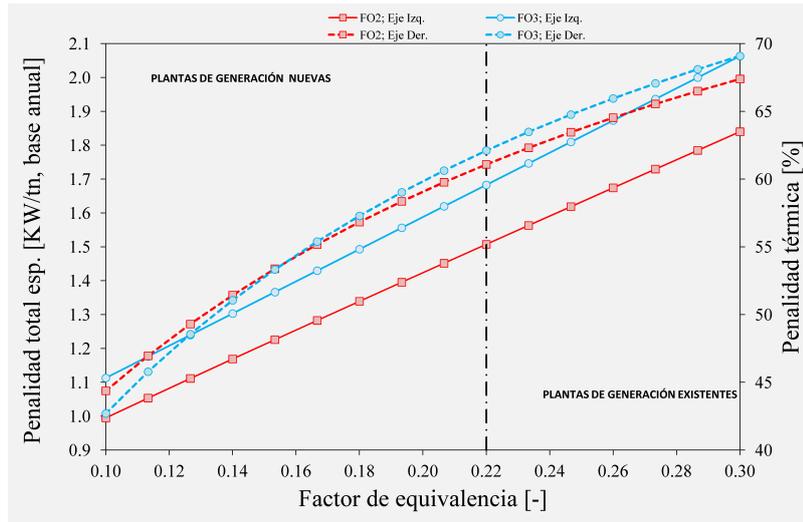


Figura 4.22 – Diseño óptimo. Caso 2: trabajo equivalente específico en función del factor de equivalencia.

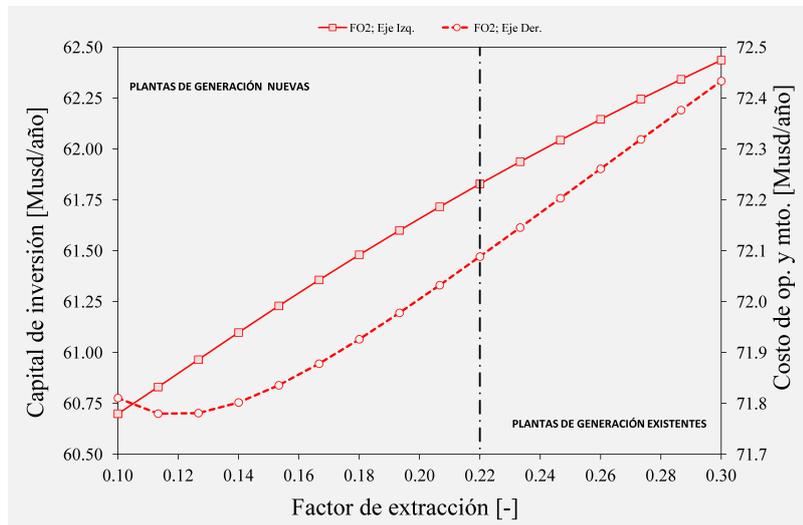


Figura 4.23 – Diseño óptimo. Caso 2: capital de inversión y costo de operación y mantenimiento.

independiente de la función objetivo empleada y de la variación del factor de equivalencia.

A partir de la expresión de la FO2, se observa que al afectar la carga térmica en el rehervidor por un factor de equivalencia, las penalidades térmica y eléctrica tienen pesos relativos similares (Fig. 4.22). Así, para minimizar el trabajo equivalente total aumenta considerablemente el tamaño de las columnas de absorción [ABS] y regeneración [REG], condensadores [CND], economizadores y enfriadores de solvente [E2], mientras que disminuyen en menor proporción el área de rehervidores [REG] e interenfriadores [E3], y la potencia de diseño de compresores [COMP] y sopladores [S1]. La diferencia porcentual en

los tamaños de equipos del Caso 2a respecto al Caso 2b, se lista en la Tabla 4.15 para tres valores del factor de extracción.

Las variaciones en el área de los equipos de intercambio, está fuertemente influenciada por los niveles térmicos y se observan importantes reducciones cuando se minimiza el trabajo equivalente. Específicamente, la DMLT en el economizador [E2] se reduce, en promedio en el rango del factor de equivalencia considerado, un 53.4% (desde 14.8 K a 6.6 K), en el condensador [CND] se reduce un 66% (desde 56.2 K hasta 19.17 K) y en el enfriador de amina un 42.2% (desde 21.86 K hasta 12.63 K). Por otro lado, la temperatura de alimentación del solvente alcanza el mínimo valor permitido (308.15 K).

Finalmente, en la Tabla 4.16 se presenta la distribución de costos y el consumo de agua de enfriamiento por equipo. El consumo en los condensadores es de alrededor del 66% del consumo total y superior al Caso 2b en todo el rango del factor de equivalencia considerado, mientras que el consumo en los enfriadores es menor en la mayoría de los puntos.

Tabla 4.14 – Diseño óptimo. Caso 2: distribución de costos de adquisición de equipos.

Caso 2b (min FO3)															
f eq	[ABS]	[COMP]	[REB]	[REG]	[S1]	[REB]	[S1]	[I1]	[CND]	[E2]	[BCO2]	[T1]	[E3]	[T2]	[B1]
0.1-0.3	41.5103	30.9673	11.5345	8.2899	7.9861	7.9861	7.3924	2.9092	2.1579	1.3789	1.2610	1.1573	0.2628	0.1841	
Caso 2a (min FO2)															
f eq	[ABS]	[COMP]	[I1]	[REG]	[REB]	[S1]	[I1]	[CND]	[E2]	[BCO2]	[T1]	[E3]	[T2]	[B1]	
0.100	43.1767	28.9604	13.6649	13.4073	10.6578	6.9015	6.0267	3.0520	0.9174	=caso 2b	=caso 2b	0.9174	=caso 2b	0.1929	
f eq	[ABS]	[COMP]	[REG]	[I1]	[REB]	[S1]	[CND]	[E2]	[BCO2]	[T1]	[E3]	[T2]	[B1]		
0.113	43.6362	28.9635	13.5119	13.3990	10.5933	7.0120	5.9976	3.0172			0.9174		0.1906		
0.127	44.0529	28.9661	13.5995	13.1862	10.5423	7.1082	5.9744	2.9901			0.9174		0.1889		
0.140	44.4351	28.9682	13.6739	13.0111	10.5008	7.1936	5.9555	2.9683			0.9175		0.1874		
0.153	44.7887	28.9700	13.7382	12.8638	10.4664	7.2705	5.9397	2.9503			0.9175		0.1862		
0.167	45.1183	28.9716	13.7941	12.7378	10.4372	7.3405	5.9263	2.9352			0.9175		0.1852		
0.180	45.4273	28.9730	13.8433	12.6287	10.4122	7.4049	5.9148	2.9223			0.9175		0.1843		
0.193	45.7186	28.9742	13.8870	12.5329	10.3904	7.4645	5.9047	2.9112			0.9175		0.1835		
0.207	45.9944	28.9753	13.9259	12.4482	10.3713	7.5200	5.8958	2.9015	=caso 2b	=caso 2b	0.9175	=caso 2b	0.1828		
0.220	46.2565	28.9763	13.9609	12.3726	10.3544	7.5721	5.8879	2.8929			0.9175		0.1822		
0.233	46.5065	28.9771	13.9925	12.3046	10.3393	7.6211	5.8808	2.8852			0.9176		0.1817		
0.247	46.7455	28.9779	14.0212	12.2432	10.3257	7.6675	5.8745	2.8784			0.9176		0.1811		
0.260	46.9746	28.9786	14.0473	12.1873	10.3134	7.7114	5.8687	2.8722			0.9176		0.1807		
0.273	47.1948	28.9793	14.0712	12.1362	10.3022	7.7532	5.8634	2.8666			0.9176		0.1803		
0.287	47.4069	28.9799	14.0932	12.0894	10.2920	7.7932	5.8586	2.8615			0.9176		0.1799		
0.300	47.6115	28.9805	14.1135	12.0462	10.2826	7.8314	5.8541	2.8568			0.9176		0.1795		

Tabla 4.15 – Diseño óptimo. Caso 2: tamaño de equipos, diferencia porcentual entre los distintos casos bajo análisis (2a y 2b).

Equipo	Variable de diseño	f eq		
		0.1	0.22	0.3
[ABS]	Vol. de empaque	7.14%	21.62%	27.96%
[REG]		221.14%	240.13%	245.07%
[I1]	Área	178.42%	135.93%	125.65%
[CND]		236.65%	223.83%	220.74%
[E2]		78.20%	62.99%	59.62%
[E3]		-32.11%	-32.08%	-32.08%
[REB]		-12.34%	-16.46%	-17.43%
[S1]	Trabajo	-21.59%	-8.49%	-3.21%
[COMP]		-8.03%	-7.97%	-7.95%

Tabla 4.16 – Diseño óptimo. Caso 2: consumo de agua de enfriamiento.

f eq	Consumo específico				Costo total
	[CND]	[E2]	[E3]	Total	[Musd/año]
	[m <sup>3</sup> /tn]	[m <sup>3</sup> /tn]	[m <sup>3</sup> /tn]	[m <sup>3</sup> /tn]	
0.1-0.3	46.97	20.49	11.06	78.53	2.60
<b>f eq</b>	<b>Caso 2b</b>				
<b>f eq</b>	<b>Caso 2a</b>				
0.100	54.35	<b>21.06</b>	6.70	<b>82.11</b>	2.72
0.113	53.74	20.68	6.70	<b>81.12</b>	2.69
0.127	53.25	20.38	6.70	<b>80.33</b>	2.66
0.140	52.85	20.14	6.70	<b>79.70</b>	2.64
0.153	52.52	19.95	6.71	<b>79.17</b>	2.62
0.167	52.24	19.78	6.71	<b>78.73</b>	2.61
0.180	51.99	19.64	6.71	78.34	2.60
0.193	51.78	19.53	6.71	78.01	2.59
0.207	51.59	19.42	6.71	77.72	2.58
0.220	51.42	19.33	6.71	77.46	2.57
0.233	51.27	19.25	6.71	77.23	2.56
0.247	51.14	19.18	6.71	77.02	2.55
0.260	51.01	19.11	6.71	76.83	2.55
0.273	50.90	19.05	6.71	76.66	2.54
0.287	50.80	19.00	6.71	76.50	2.54
0.300	50.70	18.95	6.71	76.36	2.53

## 4.4. Resumen

En este capítulo se acoplaron los modelos matemáticos correspondientes a las etapas de absorción (capítulo 2), acondicionamiento y regeneración del solvente y compresión de  $CO_2$  (capítulo 3) para conformar el modelo matemático correspondiente al proceso completo de captura. Aquí, a diferencia de los capítulos anteriores, se incorporaron también las restricciones necesarias para la estimación de los costos de adquisición de equipos (soplador, compresores, bombas, columnas de absorción, columnas de regeneración, intercambiadores, condensadores y rehervidores) y los costos de operación variables (energía eléctrica, vapor de calefacción, agua de enfriamiento, reposición de solvente y agua).

Los costos directos e indirectos de fabricación y el capital de inversión fijo, componentes del capital de inversión total, se estiman como un porcentaje del costo de adquisición de equipos. El costo de operación y mantenimiento total (costos fijos y variables) se estima como un porcentaje del costo de mano de obra operativa, el costo operativo variable y el costo de adquisición de equipos. Los costos adicionales considerados incluyen: impuestos, seguros, supervisión, gastos generales de planta, gastos administrativos, investigación y desarrollo y gastos de laboratorio.

Se empleó la expresión del costo anual total (capital de inversión total anual + costo de operación y mantenimiento total) como función objetivo a minimizar. Como resultado, el modelo arroja los perfiles de temperatura, composición y caudales óptimos a lo largo de las columnas de absorción y desorción. Además se obtienen las capacidades de diseño óptimas de los equipos considerados (trabajo de compresores, bombas y sopladores, volumen de empaque y área superficial de las columnas, áreas de intercambio térmico y volúmenes de tanques de reposición de solvente y agua) y el consumo óptimo de servicios auxiliares de enfriamiento y calefacción.

Se analizó el efecto del nivel de captura en la distribución de costos del sistema. Se concluyó que a un valor dado de recuperación, un incremento de la presión operativa en el rehervidor produce costos anuales menores. Sin embargo, el costo total anual específico a las toneladas de  $CO_2$  capturadas es mínimo para un 88 % de recuperación y 200 kPa de presión operativa en el reboiler, alcanzando un valor de 64.2 usd/tn (base anual) cuando el

---

vapor de calefacción y la energía eléctrica son suministradas por la planta de generación. En el caso que los mismos se adquirieran a través de agentes externos el mínimo costo de captura (130.2 usd/tn) se obtiene a un 84 % de recuperación.

En este último caso, el costo de operación y mantenimiento total, altamente influenciado por el consumo de servicios auxiliares, representa más del 75 % del costo anual total. La contribución del vapor empleado en el rehervidor y la energía eléctrica necesaria en compresores, bombas y sopladores representa en promedio, el 56.6 % y el 31.1 %, respectivamente, del costo operativo variable. Las contribuciones al costo operativo total disminuyen en el siguiente orden: 1) vapor de calefacción, 2) electricidad, 3) agua de enfriamiento, 4) reposición de amina y 5) de agua de proceso. Este orden no está afectado por el nivel de recuperación ni por un aumento del nivel de presión. Sin embargo, como era de esperar, a mayor recuperación mayor es el costo de operación y mantenimiento ya que aumenta el consumo de materias primas y servicios auxiliares. Del mismo modo, a mayor recuperación mayor es el costo de inversión de capital ya que aumenta el tamaño de los equipos que más influyen en el costo de adquisición.

En forma general, para todos los casos de estudio presentados, se puede concluir que:

- El costo de las columnas de absorción y los compresores representan, en total, más del 60 % del costo total de adquisición de equipos (PC). El costo de sopladores, economizadores, columnas de regeneración y rehervidores compiten entre el 3<sup>er</sup> al 6<sup>to</sup> lugar, y el orden de clasificación depende del caso de estudio considerado, y en total aportan alrededor del 30 % del PC.
  - Los niveles térmicos son altamente influenciados por la función objetivo empleada, alcanzando menores temperaturas operativas cuando se emplea una función objetivo termodinámica.
  - El flujo óptimo de solvente que alimenta la torre de absorción por el tope varía entre 15.9 y 18.7 m<sup>3</sup>/tn CO<sub>2</sub> capturado para recuperaciones entre 80 y 95 %.
  - La carga óptima de CO<sub>2</sub> en la corriente de amina pobre en CO<sub>2</sub> varía entre 0.1516 y 0.2116 mol CO<sub>2</sub>/ mol MEA, mientras que en la corriente de amina rica en CO<sub>2</sub> varía
-

entre 0.423 y 0.448 mol  $CO_2$ / mol MEA.

- El consumo de agua de enfriamiento varía entre 74.6 y 95.7  $m^3/tn$ , el de vapor de calefacción (a 3 barg de presión) varía entre 2030 y 2497 kg/tn, dependiendo de los niveles de recuperación y presión, así como de la función objetivo planteada.
- El consumo de energía eléctrica aumenta con el incremento del nivel de captura y disminuye con el incremento de presión en el reboiler, variando entre 0.5656 y 0.7297 GJ/tn de  $CO_2$  capturado.
- La penalidad eléctrica está dada fundamentalmente por el consumo de energía en compresores y sopladores.
- Desde el punto de vista tecno-económico resulta beneficioso aumentar la presión operativa en el rehervidor y el nivel de recuperación, ya que el costo específico total disminuye.

Finalmente, es posible concluir que al considerar el costo del vapor de calefacción y la energía eléctrica en la función objetivo a minimizar (Caso 1a), aumenta el tamaño de las columnas de absorción y de regeneración a la vez que se reduce el trabajo en los compresores y la carga térmica (y el área de transferencia) en el rehervidor, en todo el rango de eficiencia de captura considerado. Específicamente, las columnas de regeneración aumentan su tamaño entre un 45.1 y 47.3 % y las columnas de absorción entre 14.7 y 16.6 %. La carga térmica y el área de los rehervidores disminuyen, respectivamente, entre 8.8 y 10.8 % y 6.3 y 8.1 % mientras que el trabajo de compresión se reduce entre 6.3 y 6.4 %.

Por otra parte, se observó que al minimizar el trabajo equivalente total (función objetivo termodinámica), el tamaño de la mayoría de los equipos se incrementó considerablemente (en algunos casos más del 200 % respecto al caso en el que se minimiza el costo anual total). De esta manera, una reducción del 10.5 % del trabajo equivalente total produce un aumento del costo anual total de la misma proporción.

Se evaluó además el efecto de la pérdida de eficiencia de las plantas de generación a partir de un factor de equivalencia que permite representar la penalidad térmica debida a

---

la extracción de vapor de la turbina de baja presión para la regeneración del solvente. Esta simplificación, ampliamente utilizada en la bibliografía para un determinado valor del factor de extracción, permite considerar un rango de condiciones operativas factibles al adaptar la planta de captura a una planta de potencia existente o bien al diseñar el sistema captura + generación desde el principio (sistema nuevo). Las diferencias en el costo anual total son inferiores al 8 % dentro de todo el rango considerado (0.1-0.3).

La diferencia entre los resultados de los casos presentados deja en evidencia las relaciones de compromiso existentes entre las variables de diseño, las variables operativas y los criterios económicos, que son simultáneamente optimizados de tal manera que permitan obtener el costo anual mínimo (o el trabajo equivalente mínimo) a cada nivel de captura exigido, para tratar el flujo total de gases de combustión generados a partir de la combustión de gas natural en un ciclo combinado. Además, se destacan claramente las bondades de la optimización mediante el uso de herramientas computacionales avanzadas y empleando técnicas de programación matemática frente a los simuladores de procesos. Abordar la optimización simultánea de todas las variables del sistema, queda afuera del alcance de los simuladores.

Hasta aquí se ha considerado el estudio del sistema de captura completo independiente del ciclo de potencia, asumiendo que agentes externos suministran la energía térmica y eléctrica. Por otra parte, en base a ciertas hipótesis simplificadoras, se introdujo el concepto de trabajo equivalente para analizar la influencia de la extracción de vapor y energía eléctrica del ciclo de potencia.

En el siguiente capítulo, que es la última etapa del desarrollo de esta tesis, se estudiará la integración entre el proceso de captura de  $CO_2$  y la planta de generación de energía eléctrica, con el principal objetivo de obtener diseños óptimos y analizar la influencia de las principales variables de ambas plantas en el costo anual total.

# Capítulo 5

## Proceso de generación de energía:

## NGCC+Captura y compresión de $CO_2$

### 5.1. Introducción

De acuerdo a las conclusiones parciales presentadas en los capítulos anteriores, resulta fundamental analizar los efectos de acoplar la planta de captura a una planta de generación de energía eléctrica, debido al elevado requerimiento energético del que se debe disponer para el funcionamiento del sistema de absorción química con MEA. En este aspecto, y con el fin de reducir las penalidades energéticas, diferentes autores estudiaron la influencia en el rendimiento de generación al incorporar el sistema de captura para el tratamiento de gases de combustión (Amrollahi et al., 2012; Botero et al., 2009; Cifre et al., 2009; Lucquiaud y Gibbins, 2011; Möller et al., 2007; Pfaff et al., 2010; Popa et al., 2011; Romeo et al., 2008a,b; Simmonds et al., 2003; Sipöcz et al., 2011a; Sipöcz y Tobiesen, 2012; Ystad et al., 2012). Además de la extracción de vapor de la turbina de baja presión, se han considerado diferentes opciones de configuración para mejorar la pérdida de eficiencia del sistema de generación: recirculación de gases exhaustos (Botero et al., 2009; Sipöcz y Tobiesen, 2012), extracción de vapor de la caldera de recuperación de calor HRSG (Botero et al., 2009; Möller et al., 2007), integración energética (Khalilpour y Abbas, 2011; Pfaff et al., 2010; Ystad et al., 2012), y suministro de energía eléctrica de la red de distribución (Popa et al.,

2011), entre otras.

Sipöcz et al. (2011a); Sipöcz y Tobiesen (2012), y Botero et al. (2009) simularon el proceso de captura de  $CO_2$  mediante absorción química con MEA acoplado a un ciclo combinado de gas natural y carbón pulverizado, respectivamente. Los autores concluyeron que la integración del ciclo combinado y el sistema de captura, así como la recirculación de gases exhaustos hacia la turbina de gas (logrando de esta manera una mayor concentración de  $CO_2$  en la corriente gaseosa que alimenta los trenes de captura), tiene importantes beneficios en los costos de inversión, operación y mantenimiento.

En cada caso se emplearon diferentes simuladores comerciales. Por ejemplo, en el trabajo de Sipöcz y Tobiesen (2012), las simulaciones se llevan a cabo empleando IPSEpro (Simtech, 2010) para el sistema de generación, y CO2SIM para el sistema de captura. Los modelos del sistema de captura y sus diferentes opciones de configuración (tradicional, interenfriamiento del solvente en la columna de absorción y recompresión del vapor) se desarrollaron en trabajos anteriores (Tobiesen et al., 2008, 2007). Ystad et al. (2012) usaron GT PRO y STEAM PRO para simular las turbinas de gas y vapor, y UniSim Design Suite para modelar la planta de captura. Romeo et al. (2008b) y Liang et al. (2011) utilizaron Aspen Plus como simulador. En estos trabajos, primero determinaron los flujos, temperaturas, composiciones y presiones mediante simulación y, en una segunda instancia, realizaron el dimensionamiento de los equipos y/o el cálculo de los costos del proceso.

Por otro lado, acoplar el sistema de captura al sistema de generación permite plantear dos opciones de diseño diferentes:

- Diseñar el sistema de captura para adaptarlo (acoplarlo) a un sistema de potencia existente (retrofit design). En este caso, no existe mucho margen para realizar modificaciones estructurales en la planta de energía, por lo que se requiere determinar el tamaño y número de los trenes de captura a construir, y sus interconexiones con el sistema actual. Posteriormente, el estudio consiste en determinar las condiciones operativas de la planta entera, y analizar de que manera la incorporación de la planta de captura afecta el rendimiento de la planta de energía existente.
  - Diseño completo de las instalaciones nuevas de generación de energía y del sistema
-

de captura (greenfield design), considerando diferentes escenarios de configuración y operación, satisfaciendo a su vez la demanda energética y la reducción de emisiones para cumplir con una meta mínima de captura.

Botero et al. (2009); Lucquiaud y Gibbins (2009); Romeo et al. (2008b); Simmonds et al. (2003), trabajaron sobre la primera opción de diseño (diseño del sistema de captura para adaptarlo a una central térmica existente). Por su parte, Pfaff et al. (2010); Popa et al. (2011); Sipöcz et al. (2011a); Sipöcz y Tobiesen (2012), trabajaron en el diseño de plantas nuevas de generación + captura.

En este capítulo se presenta un modelo matemático que permite abordar el diseño integral de instalaciones nuevas correspondientes a un ciclo combinado de gas natural (NGCC) acoplado a un sistema de captura de  $CO_2$  por post-combustión (greenfield design), con el objetivo de asegurar que el sistema sea capaz de cumplir con los requerimientos del proceso (metas de captura y generación) a un costo mínimo. Como en todos los casos desarrollados en esta tesis, se emplea un sistema orientado a ecuaciones, a diferencia del sistema modular secuencial comúnmente implementado en herramientas comerciales de simulación de procesos.

La performance económica del proyecto se evalúa a través del costo total anual mediante una metodología de cálculo tradicional, que incluye el gasto anual de inversión y el costo de operación y mantenimiento.

Se analizan el costo de la electricidad, el costo de mitigación, las penalidades energéticas y los valores óptimos de las principales variables de decisión, a la vez que se discute la relación costo beneficio cuando se varía paramétricamente el número de trenes operativos, la eficiencia global del proceso y la eficiencia inherente de cada tren de captura.

## 5.2. Indicadores económicos y de eficiencia

Existe una relación de compromiso entre minimizar el costo total (costos de inversión y operativos) y optimizar la eficiencia del proceso (capacidad del proceso, calidad de producto, disponibilidad del sistema, etc.).

---

El diseño de plantas de generación tipo “capture-ready”, constituye un desafío en el cual se deben ponderar las decisiones tecnológicas necesarias para hacer frente a las metas de generación y captura de gases efecto invernadero, contra las consecuencias económicas de las alternativas implementadas.

En este aspecto, en la bibliografía se emplean diferentes tipos de indicadores que permiten describir la influencia de la integración de ambos sistemas: captura y generación.

### ***Indicadores de eficiencia: Captura y generación***

La eficiencia de remoción de dióxido de carbono en cada tren de captura representa la performance técnica inherente de los mismos, y se calcula de acuerdo a la Ecuación (4.30) mientras que la eficiencia global considera la cantidad de  $CO_2$  removida con respecto a la cantidad de  $CO_2$  que abandona la planta de potencia, según la Ecuación (5.1).

$$\eta_{CO_2} = \frac{NT G_{out}^{cap} y_{out}^{cap} CO_2 T}{NT G_{in}^{cap} y_{in}^{cap} CO_2 T + G_{bypass} y_{out}^{gen} CO_2} \quad (5.1)$$

La emisión de dióxido de carbono por unidad de energía generada (variable empleada para determinar el costo de mitigación), se determina según la Ecuación (5.2).

$$E = \frac{(1 - \eta_{CO_2}) G_{out}^{gen} y_{out}^{gen} CO_2}{W_{net} POT} \quad (5.2)$$

La eficiencia térmica de la planta de potencia se computa como la producción disponible para cubrir la demanda ( $W_0$ ) por unidad de energía consumida como combustible, según se indica en la Ecuación (5.3).

$$\eta^{gen} = \frac{W_0}{MF LHV} \quad (5.3)$$

donde  $MF$  y  $LHV$  se refieren, respectivamente, a la masa y al poder calorífico inferior del combustible.

### ***Indicadores económicos: Costo de electricidad y costo de mitigación***

El costo de la energía generada (COE) se calcula de acuerdo a la Ecuación (5.4), expresado como costo anual por unidad de energía generada en el tiempo operativo anual (POT).

$$COE = \frac{TAC}{W_{Net} POT} \quad (5.4)$$

La relación entre el costo de la electricidad ( $COE$ ) y la emisión de dióxido de carbono ( $E$ ) se traduce en el costo de mitigación ( $MC$ ), el cual representa una medida normalizada del costo de generación con respecto a la cantidad de dióxido capturada (Rao y Rubin, 2002, 2006), según se indica en la Ecuación (5.5).

$$MC = \frac{COE_{cap} - COE_{ref}}{E_{ref} - E_{cap}} \quad (5.5)$$

### 5.3. Modelo tecno-económico del sistema acoplado

#### 5.3.1. Descripción del sistema integrado

En la Figura 5.1 se presenta un esquema del sistema integrado.

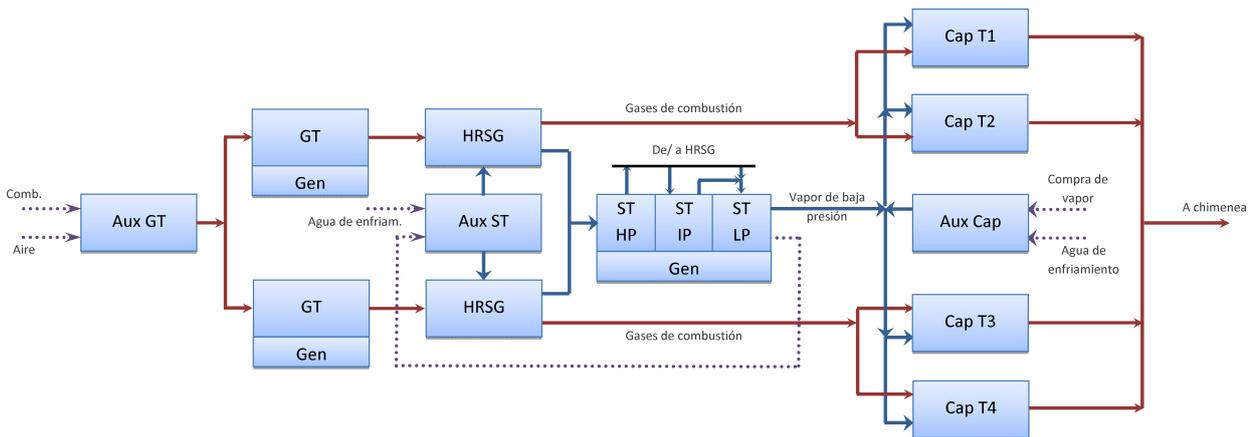


Figura 5.1 – Vista esquemática de la integración de la planta de generación y la planta de captura.

El ciclo combinado de gas natural seleccionado como caso de estudio (Fig. 5.2), incluye características innovadoras que permiten alcanzar eficiencias elevadas, resultando altamente competitivo en el mercado de generación eléctrica, incluyendo el mercado eléctrico argentino. Considera un arreglo multi-eje en la configuración de la planta, post-combustión y regeneración en la turbina de gas, múltiples niveles de presión y secciones de intercambio en paralelo en la caldera de recuperación. Está compuesto por dos turbinas de gas (GT), la caldera de recuperación de calor (HRSG) y una turbina de vapor (ST). La descripción detallada del sistema puede encontrarse en Godoy et al. (2010a,b).

Los gases de combustión exhaustos que abandonan el HRSG, previamente acondicionados, ingresan a las torres de absorción por el fondo. El volumen de gases a tratar depende de la potencia de diseño entre otros factores, por lo que comúnmente se requieren al menos dos trenes de absorción en paralelo. En la Figura 5.1 se representa un sistema compuesto por cuatro trenes de absorción.

El vapor de calefacción requerido para la regeneración del solvente, se puede derivar parcialmente de la planta de generación y/o puede adquirirse (comprarse) como un servicio auxiliar, mientras que la energía eléctrica es tomada directamente de la central térmica de ciclo combinado.

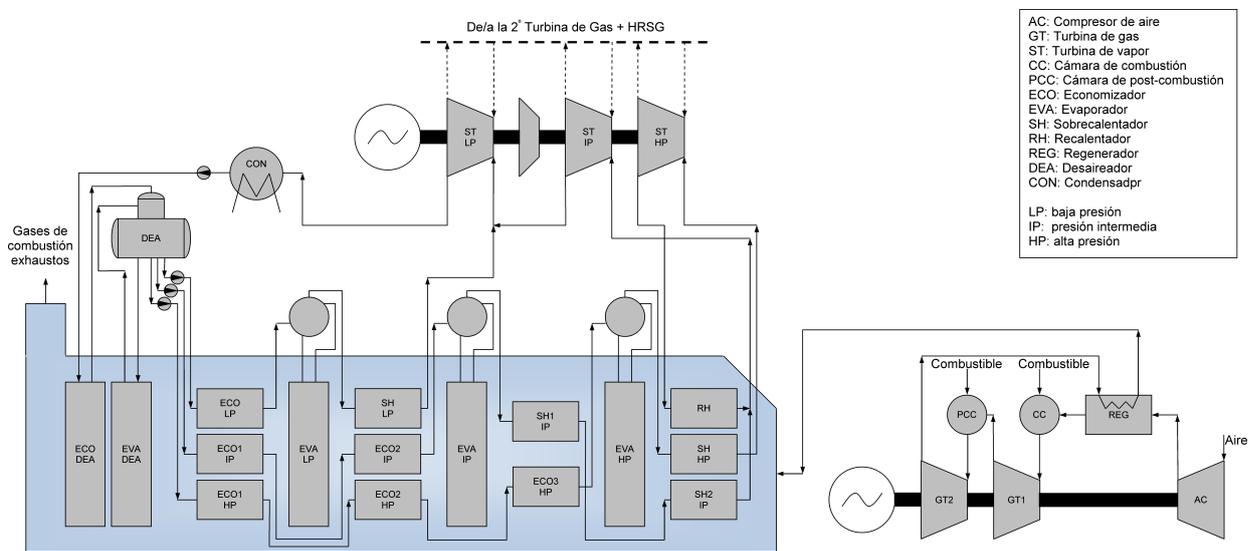


Figura 5.2 – Ciclo combinado de gas natural. Configuración.

### 5.3.2. Descripción del modelo matemático

En líneas generales, el modelo matemático está conformado por balances de materia y energía, ecuaciones de diseño y de estimación de costos operativos y de inversión incluyendo:

- Unidades de absorción y regeneración, condensadores, hervidores, calentadores, enfriadores, bombas y compresores de la planta de captura, de acuerdo a lo presentado en los capítulos anteriores.
- Turbinas de gas y vapor, compresores de aire, HRSGs, bombas y otros equipos de intercambio térmico en la planta de potencia descritos en Godoy et al. (2010a,b).

En el Apéndice C se listan las principales restricciones técnicas consideradas en los trabajos citados y cuyo modelo se incorpora al modelo de la planta de captura.

Las relaciones existentes entre la corriente de gases exhaustos y la corriente gaseosa que ingresa a cada tren de captura se expresan matemáticamente mediante las Ecuaciones 4.1 a 4.5 (desarrolladas en el capítulo 4).

Por otro lado, el requerimiento de energía térmica en el hervidor ( $Q_R$ ) se cubre con vapor como servicio auxiliar ( $Q_{R,C}$ ), más una posible extracción de vapor de baja presión de la turbina de vapor ( $Q_{R,E}$ ). Esta consideración se expresa matemáticamente mediante la Ecuación 5.6.

$$Q_{Reb} = Q_{Reb,C} + Q_{Reb,E} \quad (5.6)$$

$$f_{eq} NT Q_{Reb,E} = W_{E,STLP} \quad (5.7)$$

Mediante la Ecuación (5.7) se determina el trabajo equivalente correspondiente a la extracción de vapor. A diferencia del capítulo 4, en el que el factor de equivalencia ( $f_{eq}$ ) entre la energía térmica y la extracción de vapor se varía paramétricamente, aquí se determina en función de las condiciones operativas de la turbina de vapor según las consideraciones sugeridas en Oexmann et al. (2008) y expresadas mediante la Ec. 5.8, en la que la variable A surge de asumir que el vapor extraído sería empleado en un ciclo de Carnot, mientras la variable B representa las pérdidas adicionales del ciclo de potencia.

$$f_{eq} = A \times B \quad (5.8)$$

$$A = 1 - \frac{T_{cond}^{gen}}{T_{ext}^{sat}}$$

$$B = 0.6102 + 0.00165 (T_{ext}^{sat} - 273.15)$$

Aquí,  $T_{cond}^{gen}$  y  $T_{ext}^{sat}$  se refieren, respectivamente, a la temperatura de saturación del condensado [K], y a la temperatura de saturación del vapor [K] a la presión de extracción [bar] de la turbina de baja presión.

Oyenekean y Rochelle (2007); Van Wagener y Rochelle (2011) entre otros, utilizaron una

expresión similar basada en las siguientes hipótesis: 1) la temperatura de saturación del vapor es 10 K superior a la temperatura de operación en el rehervidor; 2) la temperatura del condensado es 313.15 K, y 3) las pérdidas adicionales (B) se asumen constantes e iguales a 0.75.

En contraste con las hipótesis adoptadas en Oyenekan y Rochelle (2007); Panahi y Skogestad (2011); Rao et al. (2006); Van Wagener y Rochelle (2011); Ziaii et al. (2011) (entre otros), y en el capítulo 4, donde la penalidad energética debida a la extracción de vapor se calcula independientemente de la planta de generación, aquí se computa en forma integral, considerando tanto la evolución isentrópica como la eficiencia de expansión del sistema de potencia. Específicamente, la extracción de vapor se calcula para las condiciones operativas actuales de la turbina de vapor de acuerdo a la Ecuación (5.9).

$$W_{STLP} + W_{E,STLP} = m_{STLP} \Delta h_{STLP} \quad (5.9)$$

El consumo total de energía eléctrica ( $W_{loss}$ ) para alimentar bombas ( $W_B$ ), compresores ( $W_{COMP}$ ) y sopladores ( $W_S$ ) se determina a partir de la Ecuación (5.10).

$$W_{loss} = NT (W_B + W_{COMP} + W_S) \quad (5.10)$$

La potencia neta de producción en la planta de generación resulta de un balance respecto al destino de la energía generada, según se muestra en la Ecuación (5.11). Cuando se construye una nueva planta, el tamaño de los equipos se debe incrementar de manera tal que pueda cumplirse con la demanda externa de energía, a la vez que se alimente la planta de captura (incluyendo los requerimientos de electricidad y vapor).

$$W_{Net} = W_0 + W_{loss} + W_{E,STLP} \quad (5.11)$$

El costo anual total se estima según la Ecuación (5.12). Los componentes del capital de inversión (Ec. 5.13) y el costo de operación y mantenimiento (Ec. 5.14), se estiman de acuerdo a los lineamientos presentados en Abu-Zahra et al. (2007b) y en Rao y Rubin (2002), descriptos previamente en el capítulo 4. El factor de recupero de capital (CRF) se estima asumiendo un ciclo de vida útil de 25 años y una tasa de interés anual de 8 % (Ec.

4.9).

$$TAC^{cap+gen} = TAI^{cap+gen} + OMC^{cap+gen} \quad (5.12)$$

$$TAI^{cap+gen} = CRF \delta_4 \left( NT \sum_{k,cap} PC_k^{cap} + \sum_{k,gen} PC_k^{gen} \right) \quad (5.13)$$

$$OMC^{cap+gen} = \delta_5 PC^{cap+gen} + \delta_6 VOC^{cap+gen} + \delta_7 OLC^{cap+gen} \quad (5.14)$$

Los costos de las materias primas (combustible, reposición de agua de proceso y reposición de solvente) y los servicios auxiliares (vapor de calefacción y agua de enfriamiento) se estiman mediante las correlaciones publicadas en Ulrich y Vasudevan (2006) y desarrolladas en el capítulo 4, considerando un tiempo de operación (POT) de 8000 horas/año. El precio actualizado de la electricidad y el combustible se adoptan de U.S. Department of Energy (2011).

El costo de adquisición de los equipos que integran el sistema de captura ( $PC_k^{cap}$ ) se describieron en el capítulo anterior. El costo de las turbinas de gas, turbinas de vapor y el sistema de recuperación de calor (HRSG) se estiman a partir de una relación lineal (Ec. 5.15) con sus capacidades de diseño -X- (Godoy et al., 2010a,b).

$$PC_k^{gen} = a X \quad (5.15)$$

Donde la constante  $a$  vale 258.3 usd/kW para las turbinas de gas y las turbinas de vapor, y 11151 usd/ $m^2$  para la caldera de recuperación de calor.

### 5.3.3. Características del modelo. Esquema de resolución

En la Figura 5.3 se presenta el esquema de inicialización, la función objetivo y los tiempos de resolución asociados a cada etapa. En primer lugar, se resuelve el modelo de la planta de generación empleando una función objetivo termodinámica (maximizar la eficiencia térmica) y luego, a partir de los resultados óptimos obtenidos, se resuelve empleando una función objetivo económica (minimizar el costo anual total). Paralelamente se resuelve el modelo del sistema de captura, siguiendo la metodología descrita en el cap.

4 (Fig. 4.2). Finalmente, incluyendo todas las restricciones de acoplamiento se resuelve el sistema completo.

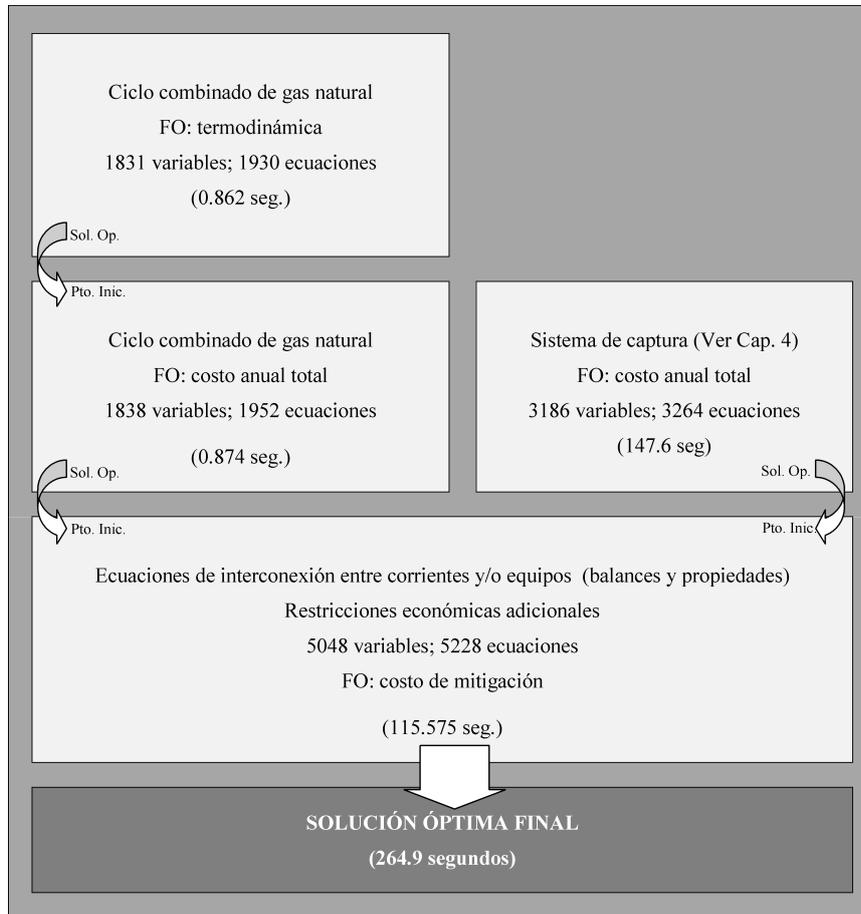


Figura 5.3 – Estrategia de resolución del sistema captura+generación.

## 5.4. Diseño óptimo de un ciclo combinado de gas natural (NGCC) con sistema de captura de $CO_2$

### 5.4.1. Formulación del problema de optimización

El objetivo de este capítulo consiste en diseñar un ciclo combinado de gas natural con sistema de captura de  $CO_2$  integrado, con el fin de cumplir con una demanda externa de **800 MW** y diferentes metas de captura al menor costo. Con este propósito, el problema matemático (P1) definido en forma genérica en la Sección 2.4.1, se resuelve minimizando el costo de mitigación (Ec. 5.5) y, consecuentemente, el costo de la electricidad (COE, Ec.

5.4) y el costo total anual ( $TAC^{cap+gen}$ , Ec. 5.12).

Mediante el planteo de diferentes casos de estudio se analiza la influencia del nivel de captura en el costo de la electricidad, el costo de mitigación, las penalidades energéticas y los valores óptimos de las principales variables de decisión, a la vez que se discute la relación costo/beneficio cuando se varía paramétricamente el número de trenes operativos (NT), la eficiencia global del proceso (Ec. 5.1) y la eficiencia inherente de cada tren de captura (Ec. 4.30).

La adopción de una potencia de diseño de 800 MW es consistente con los últimos proyectos llevados a cabo en Argentina para cubrir los futuros incrementos en la demanda. A través del FONINVEMEM (Fondo para Inversiones necesarias que permitan incrementar la oferta de energía eléctrica en el Mercado Eléctrico Mayorista, creado por Resolución SE N° 712/2004) se está llevando a cabo la instalación de dos ciclos combinados de gas natural de 825 MW, uno en Timbúes (Pcia. de Santa Fé) y otro en Campana (Pcia. de Bs. As.). Cada ciclo combinado estará conformado por dos turbinas de gas de alto régimen térmico; dos calderas de recuperación; un turbogenerador, sistema de condensación y refrigeración; equipos auxiliares de planta; transformadores, equipos eléctricos y subestación de conexión a la red de 500 KV y equipos de instrumentación y control.

---

### 5.4.2. Diseño óptimo. Análisis y discusión de resultados

#### Caso 1. Óptimo económico considerando distinto número de trenes y venteo del gas exhausto

Dentro de las alternativas de diseño se considera el dimensionamiento de los trenes de captura, la variación de la cantidad de unidades en paralelo y el venteo parcial de la corriente de gases exhaustos. Las ventajas y desventajas de las tres opciones necesitan ser económicamente ponderadas por el diseñador para determinar qué alternativa conviene ponerse en práctica cuando se desea cumplir con objetivos de generación y captura, teniendo en cuenta que:

1. El dimensionamiento de los trenes de captura está limitado por restricciones tecnológicas incluyendo disponibilidad comercial de tamaños de equipos, resistencia de materiales, temperaturas máximas que eviten la degradación de amina y la corrosión de los equipos, etc. En forma general, se necesitan columnas de absorción y desorción de mayor tamaño para tratar mayores volúmenes de gases de combustión y/o mayores cantidades de  $CO_2$ . Esta tendencia se observa también cuando se requieren niveles de captura más altos.
2. Para un nivel de captura de  $CO_2$  definido por regulaciones medioambientales y un volumen dado de gas a tratar, surge la posibilidad de analizar diferentes arreglos de los trenes de captura. Una vez más, el tamaño máximo de cada tren está limitado por restricciones tecnológicas, de manera tal que el número de trenes en paralelo quedará definido por el volumen de gas proveniente de la planta de generación.
3. El “by-pass” es una práctica común en ingeniería, donde una parte de una corriente es desviada del proceso y luego re-incorporada a la línea de producción. En este caso, el flujo de gases exhaustos puede derivarse parcialmente a la etapa de absorción, mientras que el resto se mezcla con la corriente de gases purificada y se libera a la atmósfera.

En función de lo mencionado, se presenta un estudio paramétrico respecto a la porción de gases a tratar y al número de trenes de captura, y se analiza la influencia de estos parámetros

---

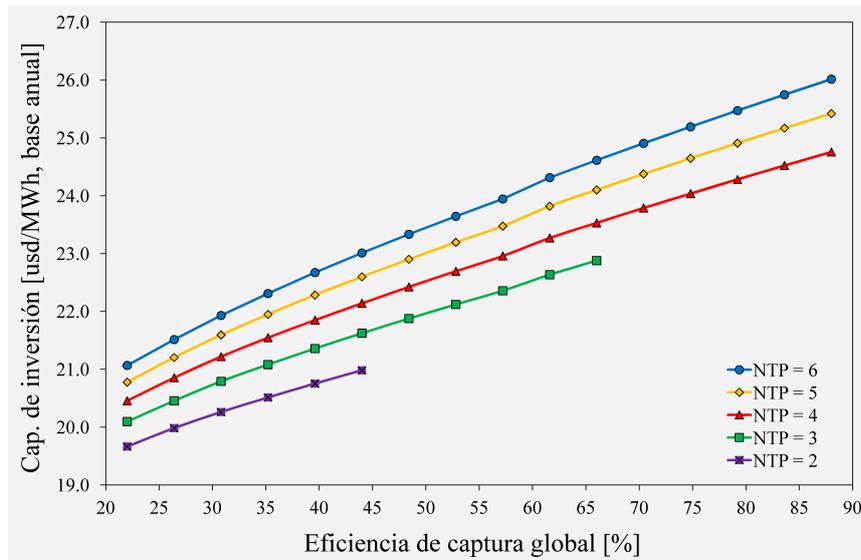
en el rendimiento económico del sistema integrado. Se adopta un nivel de captura de  $CO_2$  de 88 % (eficiencia inherente por tren,  $\eta_T^{cap}$ ), que es el valor con mínimo costo anual total encontrado en el capítulo 4 mientras que la recuperación global ( $\eta_{CO_2}$ ), computada de acuerdo a la Ecuación (5.1), varía de 22 % a 88 %.

Para mayor claridad, se debe hacer notar que la eficiencia global ( $\eta_{CO_2}$ ) es máxima e igual a la eficiencia inherente de cada tren ( $\eta_T^{cap}$ ) cuando no se ventea gas ( $G_{bypass}=0$ ), es decir, que se trata el flujo total de los gases exhaustos producidos en la central térmica.

Dado que el aumento de la eficiencia global implica tratar una mayor proporción de los gases de combustión, el costo anual total presenta una tendencia creciente. La Figura 5.4 y la Figura 5.5 muestran los dos componentes principales, el costo de inversión y el costo de operación y mantenimiento, respectivamente.

Dado el número de trenes en paralelo (con un valor fijo de su eficiencia inherente para cada tren de captura,  $\eta_T^{cap}$ ), se requiere un capital de inversión mayor para lograr mayores tasas de recuperación de  $CO_2$  (se necesita tratar una mayor cantidad de gas por lo que aumenta el tamaño de los equipos). Además, mayor recuperación global implica mayores cantidades de  $CO_2$  capturado, requiriendo mayores cantidades de energía para alimentar la planta de absorción, y una mayor capacidad de generación (como se expresa en la Ec. 5.11). Aunque se pueden observar dos tendencias:

- Desde el punto de vista de la planta de potencia, el capital de inversión por unidad de energía generada se incrementa con el incremento de la capacidad de generación, como se puede observar en la Figura 5.4a. Considerando que el costo de inversión de las turbinas de gas es el más significativo (alrededor del 45 % del costo total de inversión para el sistema NGCC+4 trenes de captura), y que se adoptan relaciones lineales entre el tamaño de las turbinas y su capital de inversión (Ec. 5.15), el aumento el capital de inversión total (generación+captura) por unidad de energía generada tiende a ser prácticamente lineal.
  - Las correlaciones empleadas para calcular los costos de inversión de los equipos del proceso de captura están basadas en la ley de potencia 0.6 (que es una suposición comúnmente empleada en ingeniería). Dicha funcionalidad implica una ventaja
-



(a) Por unidad de energía generada

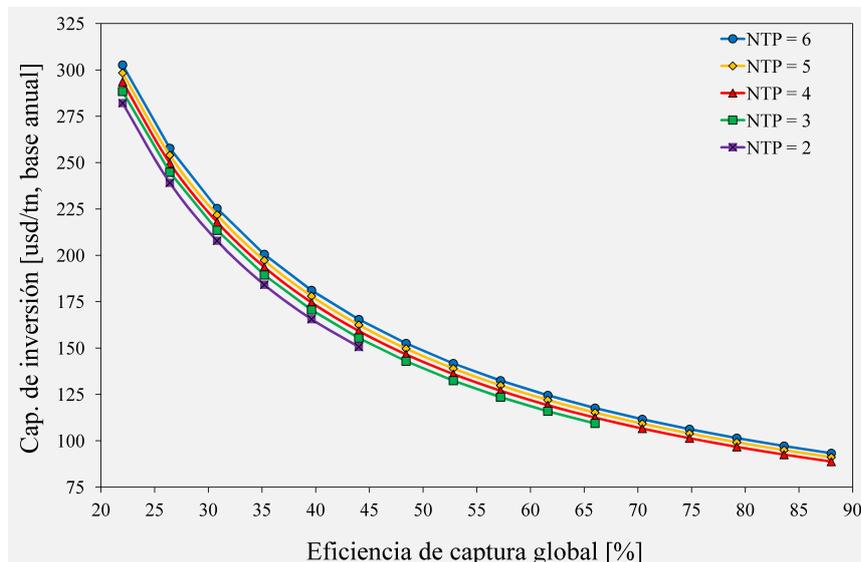
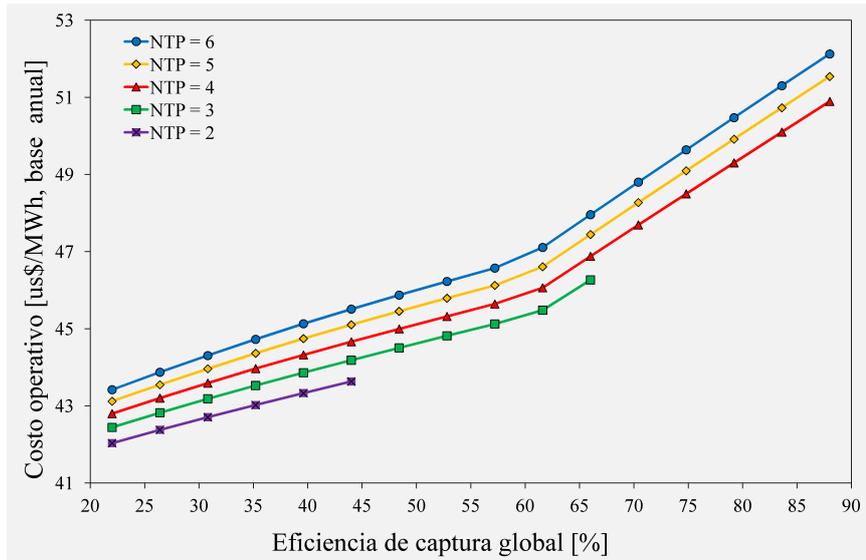
(b) Por unidad de CO<sub>2</sub> capturada

Figura 5.4 – Diseño óptimo. Caso 1: capital de inversión en función de la eficiencia de captura global y el número de trenes en paralelo.

económica, en la que el capital de inversión por unidad de capacidad decrece a medida que el tamaño de los equipos se incrementa. Así, el capital de inversión específico referido a la cantidad de dióxido de carbono capturado disminuye con el incremento de la eficiencia de captura global ( $\eta_{CO_2}$ ), como se observa en la Figura 5.4b.

En la Figura 5.5a se presenta el costo de operación y mantenimiento total (incluyendo costos fijos y variables de la planta integrada) por unidad de energía generada. Para un número dado de trenes en paralelo (con un valor fijo de su eficiencia inherente, en este caso



(a) Por unidad de energía generada

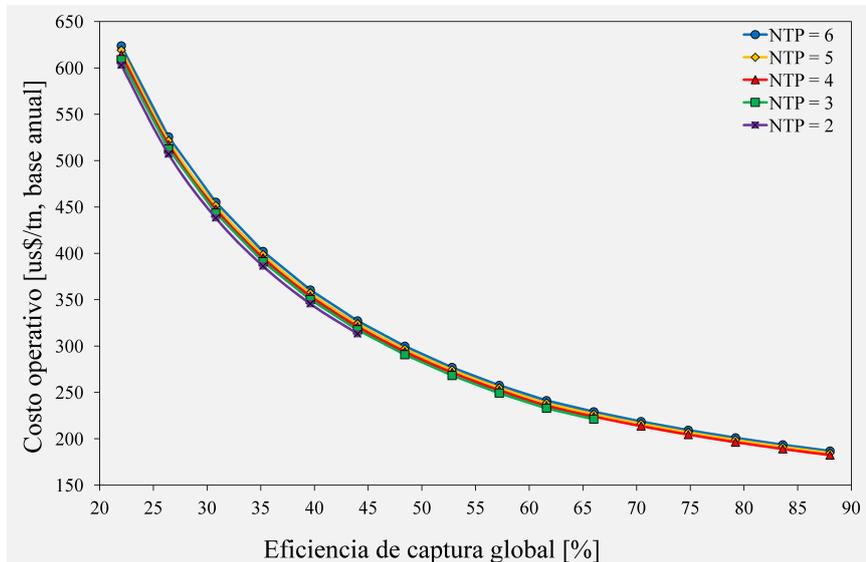
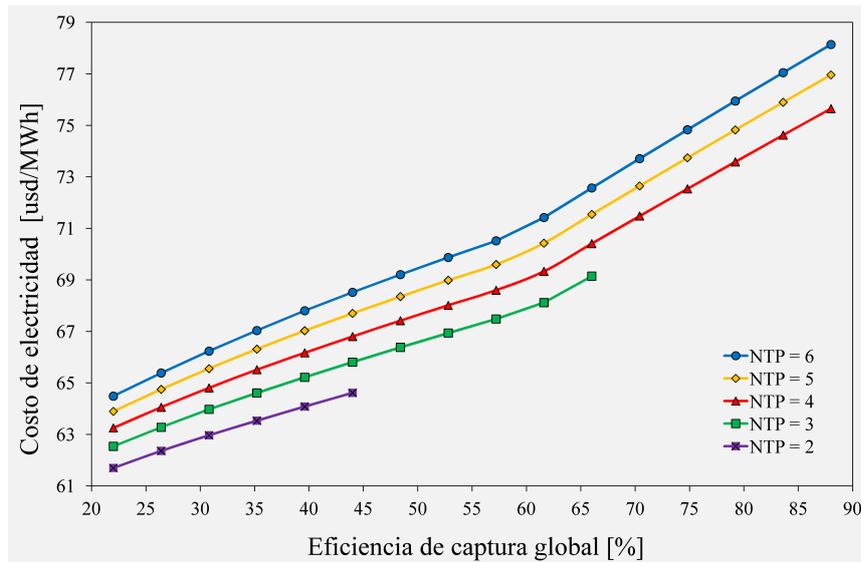
(b) Por unidad de  $CO_2$  capturada

Figura 5.5 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de operación y mantenimiento en función de la eficiencia de captura global y el número de trenes de captura en paralelo.

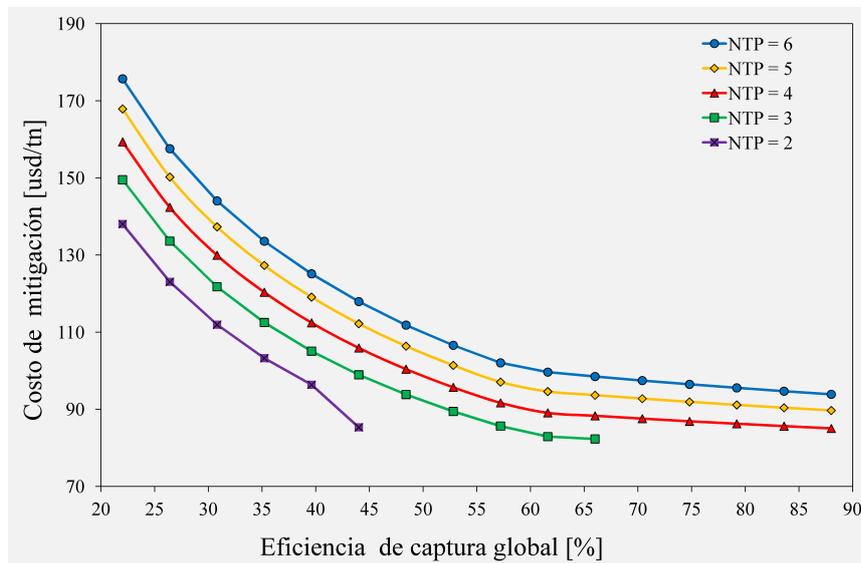
$\eta_T^{cap} = 88\%$  para cada tren), alcanzar mayores niveles de eficiencia global ( $\eta_{CO_2}$ ) implica un mayor consumo de servicios auxiliares, que se trasladan en una tendencia creciente de los costos operativos por unidad de energía generada. Por otro lado, el incremento del costo operativo necesario para aumentar la recuperación global, se compensa por la cantidad de dióxido capturado dando una tendencia decreciente del costo operativo por unidad de  $CO_2$  capturado, como se indica en la Figura 5.5b.

La relación de compromiso que existe entre el costo total, la capacidad de generación y

la cantidad de  $CO_2$  capturada se representa mediante el costo de electricidad y el costo de mitigación. La Figura 5.6 introduce los valores óptimos de costos de electricidad y mitigación para diferentes niveles de recuperación, los cuales evolucionan como consecuencia de las tendencias de los costos operativos y de inversión (por unidad de energía generada y por unidad de  $CO_2$  capturado) discutidos previamente.



(a) Costo de electricidad



(b) Costo de mitigación

Figura 5.6 – Diseño óptimo. Caso 1: indicadores económicos en función de la eficiencia de captura global y el número de trenes de captura en paralelo.

El costo de la electricidad, calculado de acuerdo a la Ecuación (5.4) como el costo total por unidad de energía entregada -  $W_{net} POT$  - (satisfiriendo la demanda externa de

energía y la alimentación de la planta de captura), presenta una tendencia creciente respecto a la eficiencia de captura global y el número de trenes en paralelo, como se muestra en la Figura 5.6a. Además, tratar una unidad extra de gas resulta menos costoso, de manera tal que el costo de mitigación mínimo se alcanza cuanto mayor es la eficiencia global (Fig. 5.6b). Rao y Rubin (2006) presentaron conclusiones similares, respecto a la evolución de una central térmica alimentada con carbón. En esta tesis se amplía el rango operativo para cada configuración adoptada.

En las Figuras 5.4 y 5.5 se puede observar que, para una recuperación global dada, los costos operativo y de capital se incrementan cuando se añade un tren de absorción a la configuración del sistema de captura. Este perfil indica que, para lograr un nivel de recuperación definido, el número de trenes en paralelo debe mantenerse dentro del mínimo valor factible, así se disminuyen los gastos totales y se asegura un mejor aprovechamiento de la capacidad de captura instalada.

Cuando se fijan la eficiencia de captura ( $\eta_T^{cap}$ ) y el número de trenes en paralelo (NT), la capacidad máxima de recuperación global ( $\eta_{CO_2}$ ) queda definida por las restricciones de tamaño, específicamente cuando la columna de absorción alcanza el máximo diámetro (técnicamente) factible. Se observa que cuando se supera cierto valor de eficiencia ( $\eta_{CO_2}$ ), es necesario agregar un tren de absorción adicional, y dicho cambio depende de la composición y caudal de gas a tratar. Rao y Rubin (2006) también usaron el criterio de restricciones de tamaño para estimar el número de trenes requerido para un nivel definido de recuperación.

La Figura 5.7 presenta el número mínimo de trenes de absorción necesario para alcanzar una recuperación global y el porcentaje asociado de by-pass de la corriente de gases exhaustos, a partir de la cual se obtienen las siguientes conclusiones:

- Una configuración del sistema de captura conformada por cuatro trenes en paralelo, permite tratar tanto el flujo total de gases exhaustos generado en la central térmica de 800 MW (demanda externa), como una porción de los mismos. En el primer caso se alcanza una eficiencia de captura de 88 % ( $\eta_{CO_2} = \eta_T^{cap}$  y  $G_{bypass} = 0$ ), mientras que en el segundo  $70\% \leq \eta_{CO_2} < 88\%$ ;  $\eta_T^{cap} = 88\%$  y  $G_{bypass} > 0$  (Esta última opción implica el venteo de gases exhaustos).
-

- Se observa un comportamiento similar para niveles de recuperación inferiores al 70 %. Por ejemplo, con un mínimo de tres unidades en paralelo se pueden alcanzar eficiencias globales entre 47 % y 67 %, venteando, respectivamente, entre 45 % y 22 % de los gases de combustión.

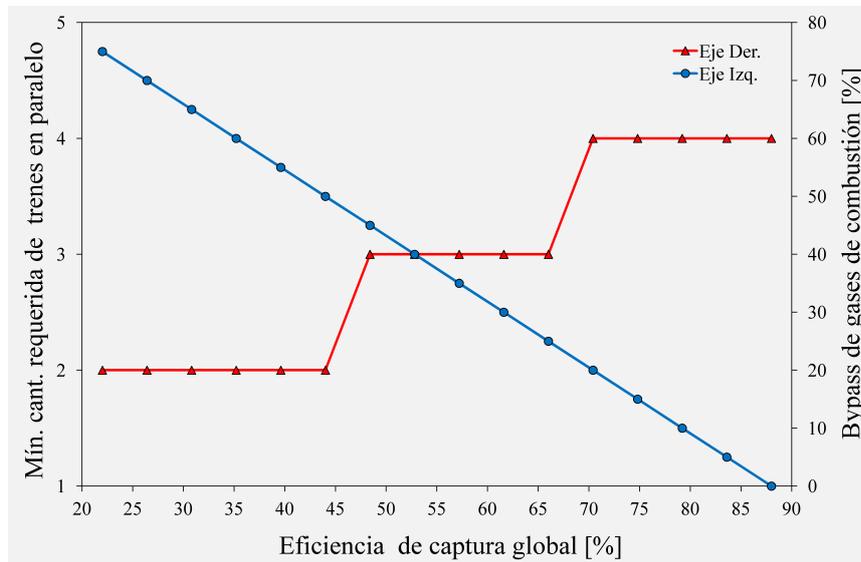


Figura 5.7 – Diseño óptimo. Caso 1: by-pass y número mínimo de trenes de absorción en función de la eficiencia de captura global.

## Caso 2. Influencia de la eficiencia del tren de captura en los indicadores económicos

En la sección anterior se concluye que se requieren al menos cuatro trenes de absorción, con 88 % de eficiencia por tren, para tratar el flujo total de los gases de combustión generados en un ciclo combinado de gas natural de 800 MW ( $G_{bypass} = 0$ ), y el mismo nivel de eficiencia global ( $\eta_{CO_2} = \eta_T^{cap}$ ).

En este caso, se selecciona esta configuración (4 trenes en paralelo) para analizar el efecto de variar paramétricamente la eficiencia de cada tren ( $\eta_T^{cap}$ ) en los indicadores económicos y en las variables de decisión más importantes, específicamente las penalidades energéticas.

Para este propósito, el problema matemático se resuelve minimizando el costo de mitigación y variando, paramétrica y sistemáticamente, los niveles de eficiencia de captura por tren desde 80 % hasta 95 %.

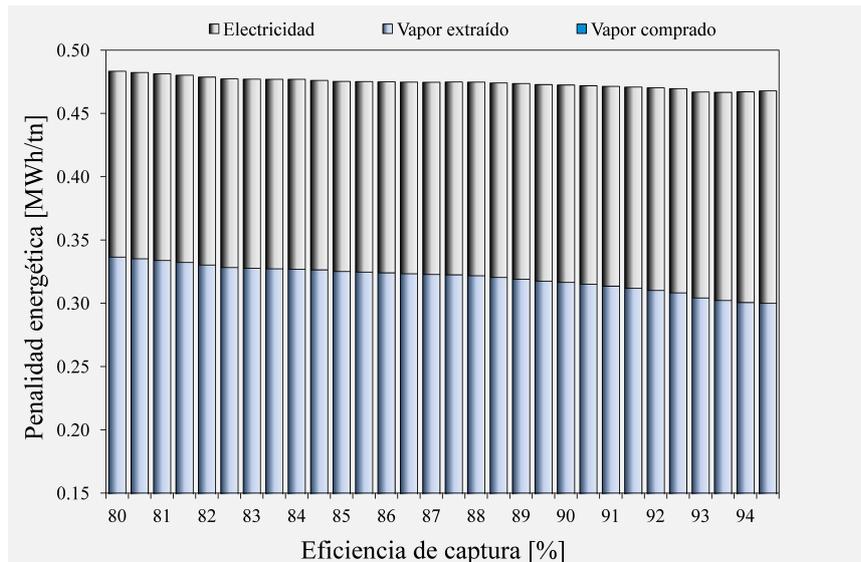
La regeneración del solvente y la compresión de  $CO_2$  son procesos energético-intensivos, respecto a los requerimientos térmicos y eléctricos y, consecuentemente, sus penalidades energéticas son particularmente elevadas. La Figura 5.8a muestra la distribución de la energía consumida por la planta de captura, a partir de la cual se observa que:

- De acuerdo a la Ecuación (5.11), parte de la capacidad de generación de la planta se desvía hacia la planta de captura para operar los equipos, específicamente bombas, compresores y sopladores ( $W_{loss}$ ). El diseño óptimo implica una penalidad promedio de 0.154 MWh/tn, mientras que las desviaciones máxima y mínima alcanzan un 8.95 y 4.71 %, respectivamente.
- La penalidad térmica promedio (en todo el rango de eficiencias considerado) representa alrededor del 67.3 % de la penalidad energética total. Según se expresa matemáticamente en la Ecuación (5.6), el requerimiento de energía térmica (específicamente vapor de calefacción), se puede cubrir mediante la extracción de vapor de la planta de potencia, o bien se puede comprar a un agente externo. Es evidente que resulta económicamente más conveniente la extracción de vapor del ciclo de potencia que su adquisición, ya que solo a 94.5 % de recuperación se compra una muy pequeña fracción (0.001 MWh/tn) del vapor necesario (0.4679 MWh/tn).

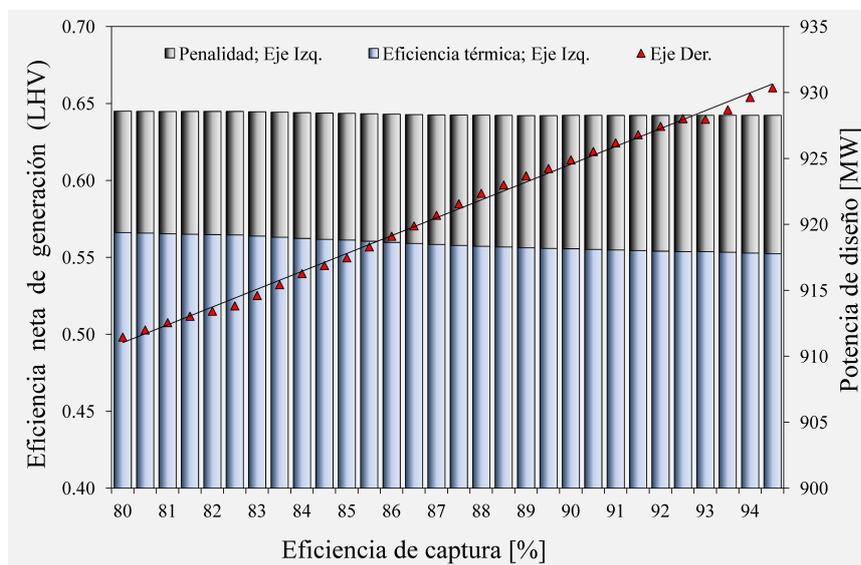
Por otro lado, en la Figura 5.8b se observa que, en coincidencia con el comportamiento observado por Liang et al. (2011), la eficiencia de la planta de generación (Ec. 5.3) disminuye linealmente con el aumento del nivel de captura, mientras que la potencia de diseño se incrementa. Un aumento de la recuperación desde 80 % hasta 95 % produce un incremento de las penalidades asociadas a la integración de la planta de captura en un 14.1 % (desde 0.0789 hasta 0.09 puntos).

La Figura 5.9 muestra la influencia de la eficiencia de los trenes de captura en los costos operativos y de inversión del sistema acoplado. Las conclusiones obtenidas son similares a las presentadas en el primer caso de estudio con las siguientes distinciones:

- Aumentar la eficiencia de un tren implica aumentar su tamaño e incrementar el consumo de vapor y electricidad. Así, se incrementa también el tamaño de las turbinas
-



(a) Distribución de las penalidades energéticas



(b) Potencia de diseño y eficiencia térmica de la planta de generación

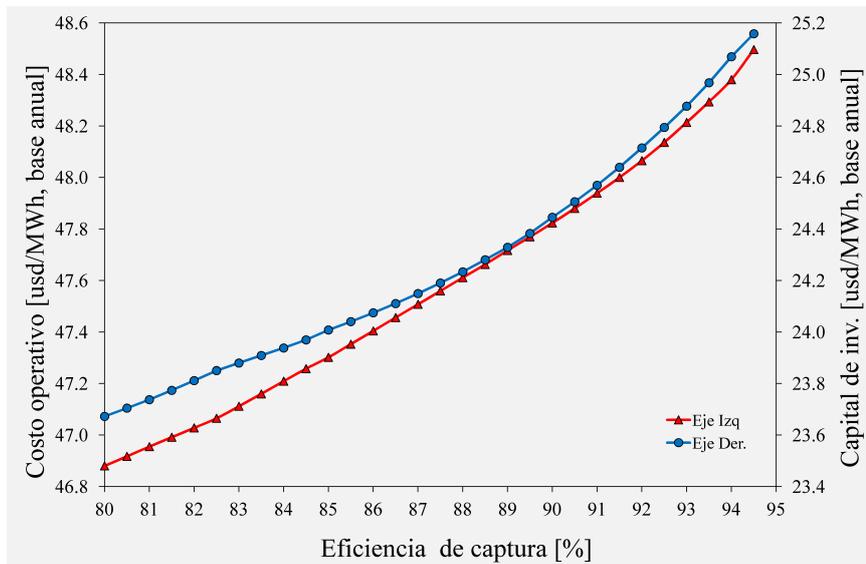
Figura 5.8 – Diseño óptimo. Caso 2: penalidades térmicas y eléctricas como función de la eficiencia de captura de cada tren de absorción.

para cubrir la demanda energética de la planta de captura y, consecuentemente el consumo de combustible. Por lo tanto, los costos de operación y de capital presentan una tendencia creciente respecto al aumento de la eficiencia de la unidad de captura, como puede observarse en la Figura 5.9a

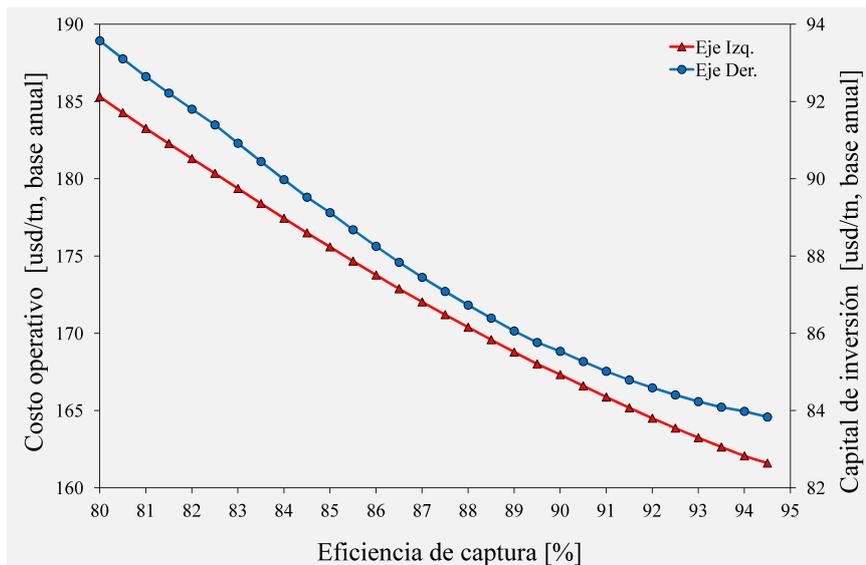
- Debido a la economía de escala, se observa una tendencia decreciente del capital de inversión por unidad de  $CO_2$  capturado, como se indica en la Figura 5.9b. También se observa que el incremento de la cantidad de  $CO_2$  capturado compensa el incremento

del costo de operación y mantenimiento debido al incremento de la eficiencia de las unidades de absorción.

- En todos los casos, los costos operativos representan alrededor de las 2/3 partes del costo anual total. Rao y Rubin (2006) publicaron una distribución de costos similar para un sistema de captura basado en absorción química con aminas (con 90 % de eficiencia de remoción de  $CO_2$ ).



(a) Por unidad de energía generada



(b) Por unidad de  $CO_2$  capturado

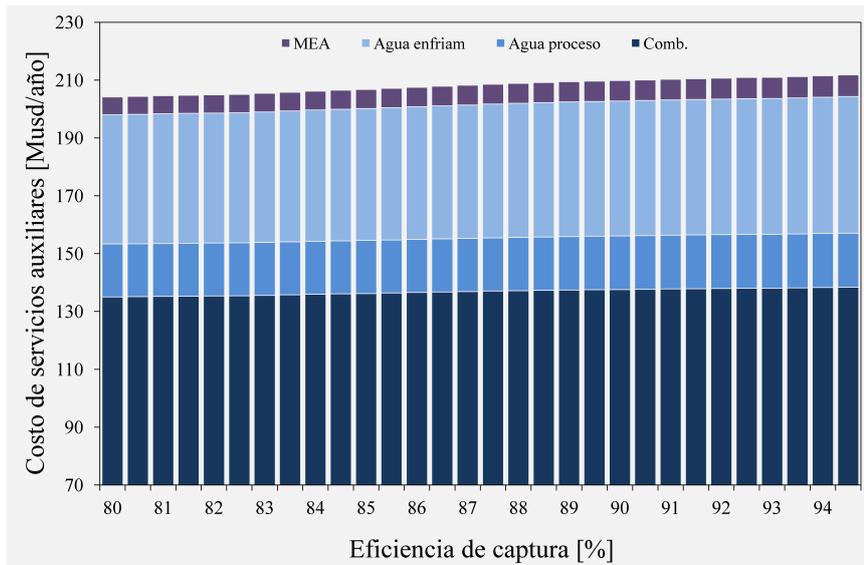
Figura 5.9 – Diseño óptimo. Caso 2: capital de inversión y costo de operación y mantenimiento como función de la eficiencia de captura de cada tren de absorción.

En las Figuras 5.10a y 5.10b se presenta la distribución de costos de materias primas, servicios auxiliares y adquisición de equipos. En la primera se observa que el costo del combustible es el más importante (65.7% del VOC), seguido por el costo de agua de enfriamiento (22.1%) y el costo de agua de proceso (8.9%). Por otro lado, el costo total de los equipos que integran la planta de generación representan el 69.4% (en promedio) del costo total de adquisición de equipos del sistema generación + captura. Específicamente, se presenta la siguiente distribución: turbinas de gas (45.1%), turbina de vapor (19.5%), columnas de absorción (11.5%), compresores (8.7%), HRSG (7.4%), intercambiadores del sistema de captura (6.6%), columnas de regeneración (2.4%), y sopladores (2%).

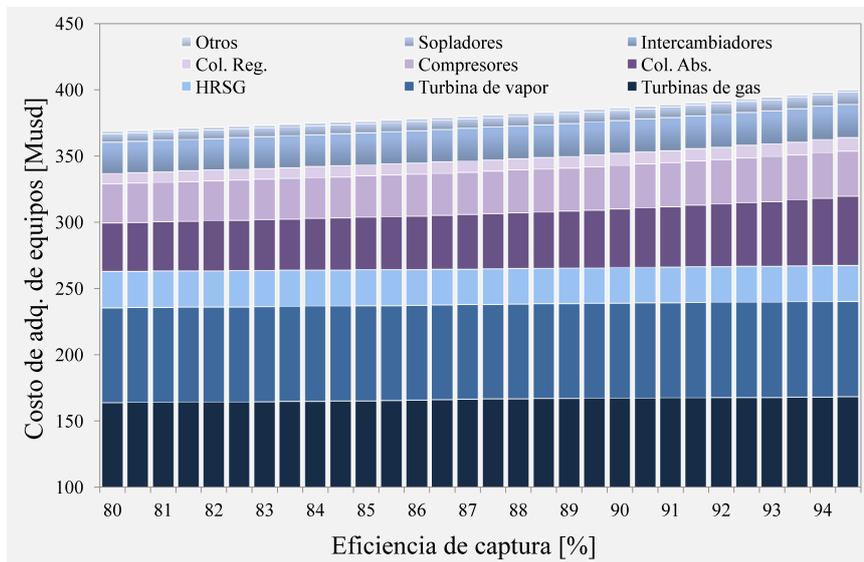
La Figura 5.11 muestra de qué manera el costo de electricidad se incrementa con el aumento de la eficiencia inherente del tren. En contraste, el costo de mitigación presenta un valor mínimo de 71.41 usd/tn a 89.5% de recuperación de  $CO_2$ . Otros autores también observaron esta tendencia. Por ejemplo, Abu-Zahra et al. (2007b) encontraron un costo mínimo de mitigación de alrededor de 39 €/tn a 90% de recuperación de  $CO_2$ , para una central eléctrica alimentada con carbón bituminoso. Por otro lado, se observa que el incremento del costo de mitigación, cuando la eficiencia de captura es menor a 89.5%, hace que esta alternativa sea cada vez menos atractiva. Sin embargo, una reducción de la eficiencia de recuperación es acompañada por una disminución del costo de la energía generada, ampliando el margen de ganancias (beneficios) del generador.

Otra forma de interpretar el costo de mitigación consiste en considerar que los generadores deben pagar un impuesto por los derechos de emisión. Cuando la penalidad económica asociada a las emisiones se incrementa, el costo de electricidad de la planta de referencia (sin control de emisiones) aumenta más rápidamente que el costo de la electricidad de la planta con sistema de captura. Existe un punto en el cual el costo de la electricidad de la planta de referencia es igual al costo del sistema generación+captura, según se observa en la Figura 5.12 (para 90% de recuperación de  $CO_2$ ). En este punto resulta lo mismo incorporar el sistema de tratamiento de gases o pagar impuestos por emisiones, en tal caso el costo de mitigación es nulo.

De la Figura 5.11 se puede concluir también que para un 90% de eficiencia de captura,



(a) Distribución de costos de materias primas y servicios auxiliares.



(b) Distribución del costo de adquisición de equipos.

Figura 5.10 – Diseño óptimo. Caso 2: costos de adquisición de equipos, materias primas y servicios auxiliares como función de la eficiencia de captura de cada tren de absorción.

el costo de mitigación es 71.42 usd/tn y el costo de electricidad es 72.27 usd/MWh. Rao y Rubin (2002) reportaron un valor de 68 usd/tn  $CO_2$  y 118 usd/MWh para la misma recuperación (retrofit design).

Sin embargo, las penalidades económicas por derecho de emisión se encuentran alejadas del valor del costo de mitigación. En particular, Sipöcz y Tobiesen (2012) y Hustad (2008) emplearon, respectivamente, un costo de 16.83 y 32.43 €/tn  $CO_2$  emitido correspondiente al precio spot promedio por derechos de emisión en la Unión Europea (valores actualizados a

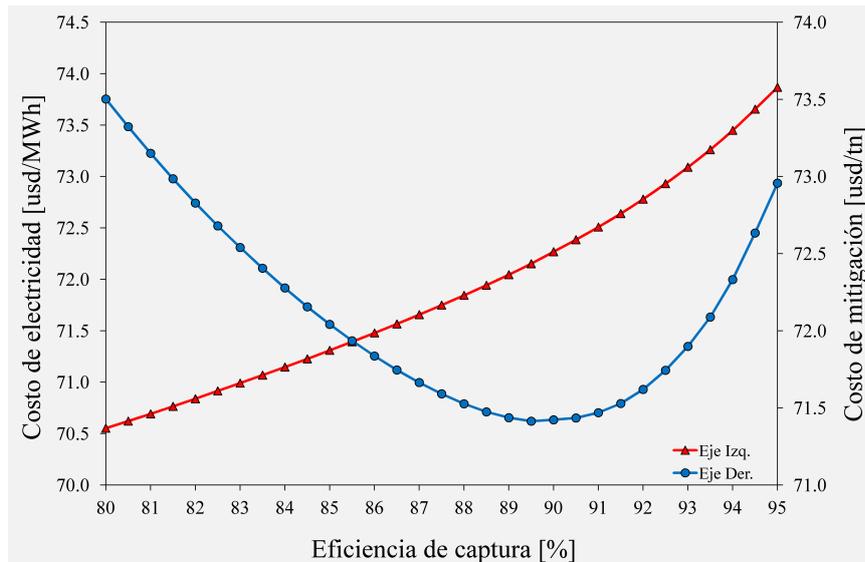


Figura 5.11 – Diseño óptimo. Caso 2: costo de electricidad y costo de mitigación como función de la eficiencia de captura de cada tren de absorción.

2011). De esta manera, el esfuerzo en investigación debe seguir focalizado en la optimización del sistema acoplado con el fin de reducir el costo anual total.

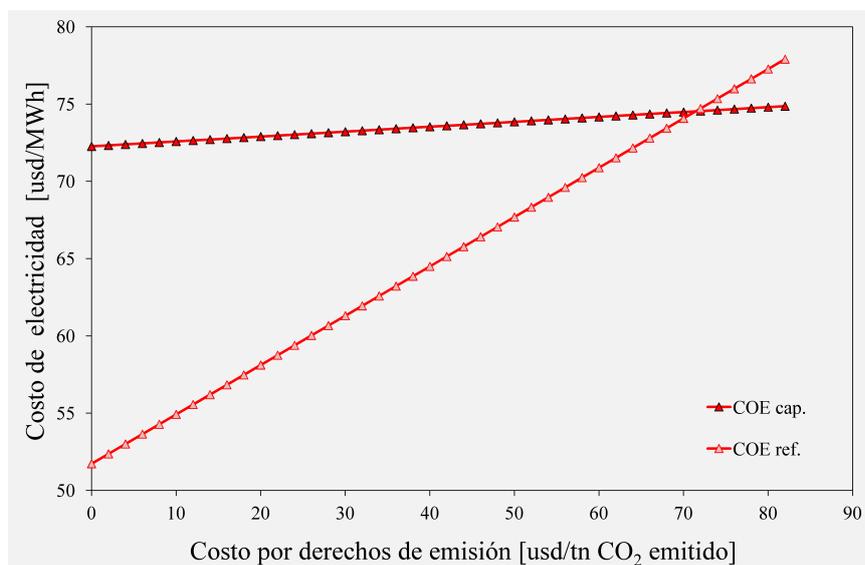


Figura 5.12 – Diseño óptimo. Caso 2: costo de la electricidad en función del costo por derechos de emisión (90 % recuperación).

En las Tablas 5.1 y 5.2 se listan los valores óptimos de las variables operativas y de diseño asociados a la planta acoplada, y se comparan con los valores óptimos de la planta de generación diseñada para cubrir la misma demanda externa (800 MW).

Respecto a la planta de potencia integrada al sistema de captura, se observa que

la capacidad de generación (tamaño de las turbinas y áreas de intercambio) se debe incrementar, con el fin de suministrar la energía requerida por el sistema de captura de  $CO_2$ . Este incremento es acompañado por el aumento del consumo de combustible y otros servicios auxiliares. Los valores reportados caen dentro de rangos típicos; sin embargo, en el desarrollo de este capítulo, ambas plantas se optimizan simultáneamente abordando el diseño de la planta integrada (generación+captura).

Finalmente, con fin de comparar los valores del costo anual total del sistema de captura obtenidos en los cap. 4 y 5 y, considerando que en el cap. 4 el flujo de gases exhaustos es una variable fija (40 Kmol/s), mientras que en el cap. 5 varía entre 40.8 y 42 Kmol/s, se define la siguiente relación:

$$TAC_{norm}^{cap} = \frac{TAC^{cap}}{G_{out}^{gen} \sum_{T=1}^{T=NT} (G_{ec} y_{CO_2 ec})}$$

Así, la variable  $TAC_{norm}^{cap}$  representa una medida normalizada del costo anual total del sistema de captura ( $TAC^{cap}$ ) respecto al volumen de gas tratado ( $G_{out}^{gen}$ ) y a la cantidad de  $CO_2$  capturada  $\left( \sum_{T=1}^{T=NT} G_{ec} y_{CO_2 ec} \right)$ .

A partir de los resultados mostrados en la Figura 5.13 quedan expuestas las ventajas de optimizar simultáneamente el sistema generación+captura, pues el costo anual total normalizado se reduce entre 6.9 % y 9.1 % respecto del costo anual total obtenido cuando se considera únicamente la planta de captura.

Tabla 5.1 – Variables óptimas de diseño y operación. Sistema integrado con 90 % de eficiencia de captura.

		NGCC Refer.	NGCC+ captura
<b><i>Ciclo de potencia</i></b>			
Área de transferencia específica	[m <sup>2</sup> /MW]	447.7	566.8
Potencia de diseño de la turbina de gas	[MW]	584.7	646.9
Potencia de diseño de la turbina de vapor	[MW]	215.3	278.0
Capacidad neta de generación	[MW]	800	924.9
Potencia disponible para satisfacer la demanda externa	[MW]	800	800.0
Capacidad de extracción de vapor	[MW]	-	83.7
Energía eléctrica para alimentar la planta de captura	[MW]	-	41.2
Eficiencia térmica	[-]	0.6388	0.5556
Factor de equivalencia	[-]	-	-
Relación de compresión	[-]	23.0	29.7
Flujo de combustible	[Kmol/seg]	0.753	0.866
Flujo de aire	[Kmol/seg]	18.5	19.9
Área total de intercambio en el HRSG	[m <sup>2</sup> ]	171537	217737
Separadores de aire	[%]	17.5	15.8
Sección de baja presión	[%]	7.4	10.9
Sección de presión intermedia	[%]	23.3	20.0
Sección de alta presión	[%]	48.2	49.5
Recalentador	[%]	3.6	3.7
Presión operativa			
Separadores de aire	[kPa]	314	269
Sección de baja presión	[kPa]	550	618
Sección de presión intermedia	[kPa]	869	1070
Sección de alta presión	[kPa]	6193	8219
Recalentador	[kPa]	6193	8219
<b><i>Costo total de inversión (TAI)</i></b>	[Musd/año]	107.7	167.2
<b><i>Costo total de operación y mantenimiento (OMC)</i></b>	[Musd/año]	223.4	279.7
<b><i>Costo total anual (TAC)</i></b>	[Musd/año]	331.1	446.9
<b><i>Costo de electricidad (COE)</i></b>	[usd/MWh]	51.7	72.3

Tabla 5.2 – Variables óptimas de diseño y operación. Sistema integrado con 90 % de eficiencia de captura (continuación de la Tabla 5.1).

<b>Sistema de captura (características por tren)</b>		NGCC+ captura
<b>Intercambiadores</b>		
Área total de intercambio	[m <sup>2</sup> ]	14446
Rehervidor	[%]	13.5
Condensador	[%]	24.0
Economizador	[%]	49.6
Enfriador de amina	[%]	8.2
Interenfriadores	[%]	4.7
Diferencia media logarítmica de temperaturas		
Rehervidor	[K]	39.4
Condensador	[K]	42.5
Economizador	[K]	12.8
Enfriador de amina	[K]	23.8
<b>Columna de absorción</b>		
Diámetro de la columna de absorción	[m]	12.0
Altura total del empaque (col. abs.)	[m]	25.7
Flujo de gas	[Kmol/s]	10.4
Fracción molar de CO <sub>2</sub> (gases de combustión)	[%]	4.4472
Flujo de solvente	[Kmol/s]	13.6
Temperatura de entrada de gases de combustión	[K]	323.2
Temperatura de salida de gases (a la atmósfera)	[K]	324.7
Caída de presión	[kPa]	11.9
Relación de flujos (base másica)	[-]	1.07
Temperatura de entrada de solvente	[K]	318.7
<b>Columna de regeneración</b>		
Temperatura de entrada del solvente	[K]	382.1
Temperatura de salida del solvente (rehervidor)	[K]	395.2
Diámetro de la columna de regeneración	[m]	4.5
Altura total del empaque	[m]	6.7
Caída de presión	[kPa]	1.6
Carga térmica específica	[GJ/tn]	4.54
<b>Etapa de compresión</b>		
Trabajo de compresión y bombeo de CO <sub>2</sub>	[KW]	6404
Relación de compresión	-	2.57
<b>Costo total de inversión (TAI)</b>	[Musd/año]	13.7
<b>Costo total de operación y mantenimiento (OMC)</b>	[Musd/año]	18.5
<b>Costo total anual (TAC)</b>	[Musd/año]	32.2
<b>Costo de mitigación (MG)</b>	[usd/tn]	71.4

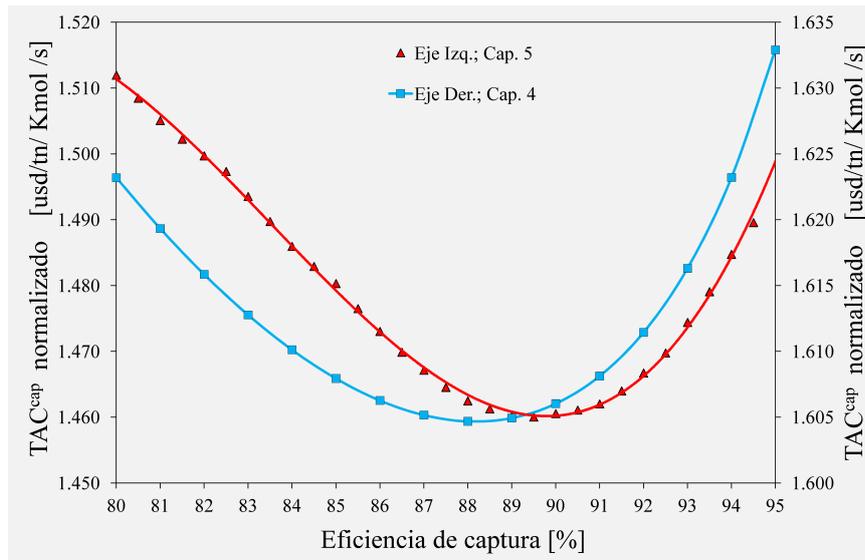


Figura 5.13 – Diseño óptimo. Comparación del costo total anual del sistema de captura (Cap. 4 versus Cap. 5).

### 5.4.3. Resumen

En este capítulo, se incorporó el modelo detallado de un ciclo combinado de gas natural al modelo correspondiente al sistema de captura de  $CO_2$  desarrollado en los cap. anteriores. Se introdujeron además todas las restricciones correspondientes al acoplamiento de ambos sistemas. El ciclo combinado de gas natural considera un arreglo multi-eje en la configuración de la planta, post-combustión y regeneración en la turbina de gas, múltiples niveles de presión y secciones de intercambio en paralelo en la caldera de recuperación.

Se evaluaron distintas opciones de configuración (tratamiento parcial o total de los gases de combustión, dimensionamiento y número de trenes de absorción en paralelo) para producir 800 MW de potencia (meta de generación), variando paramétricamente la recuperación global de  $CO_2$  desde 22 hasta 88 %. El objetivo consiste en obtener el diseño de equipos y condiciones operativas óptimas que minimicen el costo total anual del sistema captura+generación. Se considera que tanto la planta de generación como la de captura son nuevas (greenfield design), es decir, no se estudia en este capítulo el acoplamiento del sistema de absorción química (nuevo) a una planta de potencia existente (retrofit design).

Los componentes de la planta de potencia se diseñan para satisfacer tanto la demanda externa como la demanda de energía térmica y eléctrica de la planta de captura.

Específicamente, las pérdidas de eficiencia neta de generación están dadas por la extracción de vapor de la turbina de baja presión y por el consumo de energía para las bombas y compresores. En particular, el vapor de calefacción requerido en la planta de captura se puede extraer de la planta de potencia y/o se puede comprar a un agente externo.

En contraste con las consideraciones presentadas en el capítulo 4, en las que la penalidad energética debida a la extracción de vapor se calcula independientemente de la planta de generación (empleando un factor de equivalencia), aquí se computa en forma integral, considerando tanto la evolución isentrópica como la eficiencia de expansión del sistema de potencia.

A partir del análisis de las distintas opciones de configuración, se observó que para tratar el flujo total de gases de combustión producidos en la central térmica (el cual varía entre 36.2 y 39.7 Kmol/s para cubrir una demanda externa de 800 MW), se necesitan al menos 4 unidades de captura en paralelo con una eficiencia de captura de 88 % por tren. Considerando que el diseño óptimo está basado en tal valor (88 %), el venteo de una porción de los gases exhaustos implica una disminución de la eficiencia global y, consecuentemente, la operación del sistema de captura a carga parcial.

Cuando se fijan la eficiencia de captura ( $\eta_T^{cap}$ ) y el número de trenes en paralelo (NT), la capacidad máxima de recuperación global ( $\eta_{CO_2}$ ) queda definida por las restricciones de tamaño, específicamente cuando la columna de absorción alcanza el máximo diámetro (técnicamente) factible. Se observó que cuando se supera cierto valor de eficiencia ( $\eta_{CO_2}$ ), es necesario agregar un tren de absorción adicional, y dicho cambio depende de la composición y caudal de gas a tratar.

La relación de compromiso que existe entre el costo total, la capacidad de generación y la cantidad de  $CO_2$  capturada, se representa mediante el costo de electricidad y el costo de mitigación. Dado que el aumento de la eficiencia global implica tratar una mayor proporción de los gases de combustión, el costo anual total, el costo de la electricidad y el costo total por unidad de energía entregada, presentan una tendencia creciente respecto al incremento de la eficiencia de captura global y del número de trenes en paralelo. Además, tratar una unidad extra de gas resulta menos costoso, de manera tal que el costo de mitigación mínimo

---

se alcanza a la mayor eficiencia global.

Por otro lado, para un sistema con 4 trenes en paralelo, se observó que aumentar la eficiencia de un tren implica aumentar su tamaño e incrementar el consumo de vapor y electricidad. Así, se incrementa también el tamaño de las turbinas para cubrir la demanda energética de la planta de captura y, consecuentemente, el consumo de combustible. De esta manera, los costos de inversión y operativo aumentan con el incremento de la eficiencia de la unidad de captura. Se encontró que en el espacio de soluciones óptimas, a 89.5% de recuperación el costo de mitigación es mínimo (71.41 usd/tn). El incremento del costo de mitigación cuando la eficiencia de captura es menor a 89.5% hace que esta alternativa sea cada vez menos atractiva. Sin embargo, una reducción de la eficiencia de captura es acompañada por una disminución del costo de la energía generada, ampliando el margen de ganancias (beneficios) del generador.

Finalmente, con el fin de comparar los valores del costo anual total del sistema de captura obtenidos en los cap. 4 y 5 y, considerando que en el cap. 4 el flujo de gases exhaustos es una variable fija (40 Kmol/s), mientras que en el cap. 5 varía entre 40.8 y 42 Kmol/s, se analiza el valor de la relación entre el costo anual total del sistema de captura, el volumen de gas tratado y la cantidad de  $CO_2$  capturada. De esta manera, quedan expuestas las ventajas de optimizar simultáneamente el sistema generación+captura (cap. 5), pues el costo anual total normalizado se reduce entre 6.9% y 9.1% respecto del costo anual total obtenido cuando se considera únicamente la planta de captura (cap. 4).

# Capítulo 6

## Conclusiones y trabajos futuros

### 6.1. Conclusiones

El presente capítulo tiene por objetivo presentar las conclusiones obtenidas en esta tesis, así como sus alcances y limitaciones, además de exponer las líneas de investigación que se abren a partir de los resultados alcanzados.

El desarrollo e implementación de modelos matemáticos del proceso en estudio en herramientas avanzadas de optimización es una tarea compleja, pues involucra el desarrollo de modelos detallados y precisos que describan los diferentes equipos presentes en el proceso (columnas de absorción y desorción, compresores, bombas, sopladores, intercambiadores, etc.), el equilibrio líquido - vapor, las propiedades termodinámicas (calor de reacción, entalpías, viscosidades, difusividades, densidades, coeficientes de transferencia de materia, constantes cinéticas de reacción, etc.), caídas de presión, y restricciones de tecnológicas, entre otras. De esta manera, se propuso desarrollar la tesis en forma gradual, esto es, comenzar por desarrollar e implementar el modelo matemático de la columna absorbedora (cap. 2) para luego ir incorporando los equipos restantes hasta lograr el acoplamiento del proceso de captura de  $CO_2$  a una planta generadora de electricidad (cap. 5). A continuación se presentan las principales conclusiones obtenidas:

- Capítulo 2

En primer lugar se realizó una exhaustiva búsqueda bibliográfica que permitió conocer los avances logrados en materia de modelado, simulación y optimización de los diferentes procesos de captura, y obtener la totalidad de las correlaciones (restricciones del modelo) necesarias para calcular propiedades fisico-químicas, constantes cinéticas de reacción, calores de absorción, constantes de transferencia de materia, etc. Luego se procedió a implementar en GAMS un modelo matemático determinístico NLP, para permitir no solo simular sino también optimizar el proceso de absorción de  $CO_2$  utilizando aminas. Además, se desarrolló una metodología adecuada de inicialización, considerando los aspectos fundamentales que permitan garantizar la convergencia para cualquier cambio de valores en los parámetros. Precisamente se propuso una estrategia específica de inicialización, escalado de variables y definición de cotas superiores y/o inferiores, que permitió la obtención de resultados en un amplio rango de condiciones operativas.

Por otro lado, es necesario enfatizar que una de las etapas principales, y seguramente la más importante en el desarrollo de un modelo matemático, es su verificación. En esta etapa se determina el grado de exactitud en que las variables del modelo son estimadas en comparación con valores utilizados como referencias, generalmente datos obtenidos en forma experimental. En otras palabras, consiste en verificar si, tanto el grado de abstracción realizado para representar el comportamiento real del sistema y/o proceso bajo estudio (modelo conceptual), como las hipótesis asumidas son apropiadas. De esta manera, y con el fin de contar con un modelo general que sea aplicable a un amplio rango de condiciones operativas, en una primera instancia se compararon los resultados del modelo de equilibrio líquido-vapor con valores experimentales (y resultados de simulaciones), presentados por varios autores. Específicamente, se analizó la distribución de concentraciones de las diferentes especies en la fase líquida, y la presión parcial de  $CO_2$  a diferentes niveles de temperatura y concentraciones de  $CO_2$  en el solvente. Luego se compararon los resultados del modelo de la columna de absorción (perfiles internos de temperatura y composición en ambas fases - líquida y gaseosa), utilizando tanto el modelo riguroso (RB) como el modelo simplificado (EM)

para dos caudales de gas (escala de laboratorio y planta piloto) y diferentes tipos de empaques. Los resultados obtenidos mostraron que los modelos desarrollados se ajustan satisfactoriamente a los datos experimentales publicados por otros autores, y a los resultados obtenidos mediante el empleo de simuladores comerciales.

Se investigó además, el efecto del planteo de diferentes hipótesis en la eficiencia de absorción: 1) modelo de equilibrio (EM) frente a un modelo riguroso (RB) que, a diferencia del anterior, considera el fenómeno de transferencia de materia con reacción química en la interfase, y 2) empleo de distintas correlaciones para la determinación del área específica de transferencia de materia.

Una de las conclusiones obtenidas reveló que cuando se considera el menor tamaño y el menor esfuerzo computacional requerido para la resolución, se prefiere un modelo de equilibrio (EM) en lugar de un modelo riguroso (RB). Sin embargo, para efectivizar un estudio detallado del proceso es necesario el empleo de un modelo riguroso (RB). Por otra parte, a partir del empleo de diferentes correlaciones para determinar el área de transferencia de materia en el modelo riguroso, se observó que los resultados son altamente dependientes de las mismas. En particular, la correlación de Onda et al. (1968) es la más apropiada para estudiar el comportamiento de la absorción en el interior de la columna, mientras que la correlación de Wilson (2004) se puede utilizar para estimar las características de las corrientes líquida y gaseosa que abandonan la torre. De esta manera, la selección de la correlación a utilizar dependerá del propósito final que se persiga.

Después de la validación, se plantearon y resolvieron distintos problemas de optimización, los cuales difieren únicamente en sus funciones objetivo. De esta manera, explotando la robustez y la flexibilidad del modelo y la metodología de resolución propuesta, se determinaron conjuntos de condiciones óptimas de operación y de diseño en un rango amplio de composiciones de la corriente líquida de alimentación. Las temperaturas, composiciones y flujos de las corrientes líquida y gaseosa a lo largo de la torre, la caída de presión y las dimensiones del equipo (altura y diámetro) se consideraron como variables de optimización. Es importante aclarar que no se pueden

---

garantizar soluciones óptimas globales debido a la presencia de algunas restricciones no convexas presentes en el modelo matemático, tales como términos bilineales (dados por ejemplo, por el producto entre flujos y entalpías en los balances de energía) y logaritmos, entre otras.

A partir de los resultados presentados, quedó en evidencia la existencia de una relación de compromiso entre las dimensiones de la columna de absorción (altura y diámetro) y el caudal requerido de solvente para una recuperación determinada.

En este punto no se pudo concluir si una opción es más conveniente que otra, pues es necesario analizar el proceso completo (absorción-desorción) desde un punto de vista tecno-económico. Sin embargo, se puede prever fácilmente que el empleo de mayores caudales de amina implica un mayor consumo de energía térmica para la recuperación del solvente, a la vez que se requieren columnas de regeneración de mayor tamaño.

Por otra parte, torres de absorción con mayores relaciones H/D, a pesar del mayor tamaño, presentan una menor caída de presión por unidad de altura de empaque, lo que se traduciría en un menor consumo de energía mecánica en los sopladores (S1) para vencer la caída de presión en las mismas.

Finalmente, desde el punto de vista del modelado, el modelo matemático propuesto e implementado en GAMS resultó ser una herramienta valiosa tanto para optimizar como para simular el proceso (cuando el sistema no posee ningún grado de libertad). De hecho, el modelo fue utilizado para ambos propósitos.

#### ■ Capítulo 3

Se describió el modelo matemático de las etapas de regeneración del solvente, y desorción y compresión de  $CO_2$ . Se incluyeron también los intercambiadores de calor necesarios para lograr la integración energética de la corriente fría (amina rica en  $CO_2$ ) con la corriente caliente (amina pobre), y un enfriamiento adicional de esta última. Luego se procedió a su verificación comparando los resultados obtenidos vía simulación con datos experimentales disponibles en la literatura.

En líneas generales, fue posible concluir que los resultados obtenidos mediante

---

el modelo riguroso desarrollado se aproximan en forma aceptable a los datos experimentales, aun así se observaron algunas discrepancias con diferentes niveles de error para cada una de las variables analizadas.

Para la mayoría de los casos y las variables analizadas, el modelo basado en la correlación propuesta por Bravo (RBB) ofreció mejores aproximaciones a los valores experimentales en comparación con el modelo RBO, observándose que para el resto de los casos, ambos modelos predijeron valores muy similares. Por otro lado, la carga térmica en el rehervidor  $Q_R$  (que es considerada la variable más representativa) se ajustó mejor a los datos experimentales con el modelo RBO. De esta manera, resulta difícil decidir sobre la conveniencia de utilizar una u otra correlación, por lo que en la siguiente sección se emplearon ambas para comparar los resultados.

Luego, mediante el planteo de diferentes problemas de optimización, se obtuvieron conjuntos de variables óptimas en un amplio rango de condiciones operativas, a partir del empleo de dos modelos rigurosos: RBO (Rate-based empleando la correlación de Onda et al. (1968) para la determinación del área específica de transferencia de materia), y RBB (Rate-based empleando la correlación de Bravo y Fair (1982) para la determinación del área específica de transferencia de materia). Básicamente, los resultados obtenidos con RBB presentaron un comportamiento similar a los obtenidos con RBO.

En base a lo observado, se decidió utilizar el modelo RBO para describir la columna de absorción y de regeneración y realizar las distintas optimizaciones que serán discutidas en los próximos capítulos.

Por otra parte, se concluyó que al minimizar el calor específico del reboiler se obtienen resultados similares a los obtenidos al minimizar el consumo energético total (servicios auxiliares de calefacción, enfriamiento y energía eléctrica).

Además, se observó que al incrementar la presión operativa en el rehervidor disminuye el requerimiento térmico necesario para regenerar el solvente. A su vez, aumenta la energía necesaria para la compresión. Esta generalidad no debe ser considerada en

---

forma separada del resto de las variables del sistema que definen cada conjunto de soluciones óptimas. Esto es, dimensiones de equipos, caídas de presión, la energía requerida en el condensador, inter-enfriadores y el economizador, niveles de temperatura, la cantidad de dióxido de carbono desorbida, flujos, perfiles internos de presión, temperatura y composición, áreas de intercambio térmico, consumo de servicios auxiliares, etc., presentadas en este capítulo.

En particular, si bien el área requerida en la mayoría de los equipos de intercambio de calor (rehervidor, economizador, interenfriadores) aumenta con el incremento de la presión, el volumen de empaque, el área de transferencia de calor del condensador y el área del intercambiador amina-agua disminuyen. Por otro lado, al expresar las variables más importantes en forma relativa a la cantidad de dióxido de carbono capturada, se observó un beneficio al incrementar la presión operativa en el rehervidor pues disminuye el consumo específico de agua de enfriamiento, vapor de calefacción y energía eléctrica para la compresión. Las capacidades de los equipos y el consumo de servicios auxiliares influyen fuertemente en los costos de inversión y los costos operativos del proceso. De esta manera, queda planteada la necesidad de optimizar el sistema desde el punto de vista tecno-económico, en la cual serían sopesadas las relaciones entre las capacidades de los equipos y el consumo de servicios auxiliares para un nivel definido de captura de  $CO_2$  con el fin de minimizar dichos costos, que al fin y al cabo son la clave a la hora de analizar la viabilidad de los proyectos en la etapa de diseño preliminar.

Finalmente, desde el punto de vista de la flexibilidad del modelo, se destaca que no se presentaron problemas de convergencia en todo el rango de condiciones operativas adoptado. La estrategia de resolución está basada en la inicialización del modelo riguroso a partir del modelo de equilibrio así como en el establecimiento de cotas superiores y/o inferiores en las variables que así lo requirieron.

- Capítulo 4

Se acoplaron los modelos matemáticos correspondientes a las etapas de absorción

---

(capítulo 2), acondicionamiento y regeneración del solvente y compresión de  $CO_2$  (capítulo 3) para conformar el modelo matemático correspondiente al proceso completo de captura. Aquí, a diferencia de los capítulos anteriores, se incorporaron también las restricciones necesarias para la estimación de los costos de adquisición de equipos (soplador, compresores, bombas, columnas de absorción, columnas de regeneración, intercambiadores, condensadores y rehervidores) y los costos de operación variables (energía eléctrica, vapor de calefacción, agua de enfriamiento, reposición de solvente y agua).

Los costos directos e indirectos de fabricación y el capital de inversión fijo, componentes del capital de inversión total, se estiman como un porcentaje del costo de adquisición de equipos. El costo de operación y mantenimiento total (costos fijos y variables) se estima como un porcentaje del costo de mano de obra operativa, el costo operativo variable y el costo de adquisición de equipos. Los costos adicionales considerados incluyen: impuestos, seguros, supervisión, gastos generales de planta, gastos administrativos, investigación y desarrollo y gastos de laboratorio.

Se empleó la expresión del costo anual total (capital de inversión total anual + costo de operación y mantenimiento total) como función objetivo a minimizar. Como resultado, el modelo arroja los perfiles de temperatura, composición y caudales óptimos a lo largo de las columnas de absorción y desorción. Además se obtienen las capacidades de diseño óptimas de los equipos considerados (trabajo de compresores, bombas y sopladores, volumen de empaque y área superficial de las columnas, áreas de intercambio térmico y volúmenes de tanques de reposición de solvente y agua) y el consumo óptimo de servicios auxiliares de enfriamiento y calefacción.

Se analizó el efecto del nivel de captura en la distribución de costos del sistema. Se concluyó que a un valor dado de recuperación un incremento de la presión operativa en el rehervidor produce costos anuales menores. Sin embargo, el costo total anual específico a las toneladas de  $CO_2$  capturadas es mínimo para un 88 % de recuperación y 200 kPa de presión operativa en el reboiler, alcanzando un valor de 64.2 usd/tn (base anual) cuando el vapor de calefacción y la energía eléctrica son suministradas

---

por la planta de generación. En el caso que los mismos se adquirieran a través de agentes externos el mínimo costo de captura (130.2 usd/tn) se obtiene a un 84 % de recuperación.

En este último caso, el costo de operación y mantenimiento total, altamente influenciado por el consumo de servicios auxiliares, representa más del 75 % del costo anual total. La contribución del vapor empleado en el rehervidor y la energía eléctrica necesaria en compresores, bombas y sopladores representa en promedio, el 56.6 % y el 31.1 %, respectivamente, del costo operativo variable. Las contribuciones al costo operativo total disminuyen en el siguiente orden: 1) vapor de calefacción, 2) electricidad, 3) agua de enfriamiento, 4) reposición de amina y 5) de agua de proceso. Este orden no está afectado por el nivel de recuperación ni por un aumento del nivel de presión. Sin embargo, como era de esperar, a mayor recuperación mayor es el costo de operación y mantenimiento ya que aumenta el consumo de materias primas y servicios auxiliares. Del mismo modo, a mayor recuperación mayor es el costo de inversión de capital ya que aumenta el tamaño de los equipos que más influyen en el costo de adquisición.

En forma general, para todos los casos de estudio presentados, se puede concluir que:

- El costo de las columnas de absorción y los compresores representan, en total, más del 60 % del costo total de adquisición de equipos (PC). El costo de sopladores, economizadores, columnas de regeneración y rehervidores compiten entre el 3<sup>er</sup> al 6<sup>to</sup> lugar, y el orden de clasificación depende del caso de estudio considerado y en total aportan alrededor del 30 % del PC.
  - Los niveles térmicos son altamente influenciados por la función objetivo empleada, alcanzando menores temperaturas operativas cuando se emplea una función objetivo termodinámica.
  - El flujo óptimo de solvente que alimenta la torre de absorción por el tope varía entre 15.9 y 18.7  $m^3/tn$   $CO_2$  capturado para recuperaciones entre 80 y 95 %.
  - La carga óptima de  $CO_2$  en la corriente de amina pobre en  $CO_2$  varía entre
-

0.1516 y 0.2116 mol  $CO_2$ / mol MEA, mientras que en la corriente de amina rica en  $CO_2$  varía entre 0.423 y 0.448 mol  $CO_2$ / mol MEA.

- El consumo de agua de enfriamiento varía entre 74.6 y 95.7  $m^3/tn$ , y el de vapor de calefacción (a 3 barg de presión) varía entre 2030 y 2497 kg/tn, dependiendo de los niveles de recuperación y presión, así como de la función objetivo planteada.
- El consumo de energía eléctrica aumenta con el incremento del nivel de captura y disminuye con el incremento de presión en el reboiler, variando entre 565.6 y 729.7 MW/tn de  $CO_2$  capturado.
- La penalidad eléctrica está dada fundamentalmente por el consumo de energía en compresores y sopladores.
- Desde el punto de vista tecno-económico resulta beneficioso aumentar la presión operativa en el rehervidor y el nivel de recuperación, ya que el costo específico total disminuye.

Finalmente, fue posible concluir que al considerar el costo del vapor de calefacción y la energía eléctrica en la función objetivo a minimizar (Caso 1a), aumenta el tamaño de las columnas de absorción y de regeneración, a la vez que se reduce el trabajo en los compresores y la carga térmica (y el área de transferencia) en el rehervidor, en todo el rango de eficiencia de captura considerado. Específicamente, las columnas de regeneración aumentan su tamaño entre un 45.1 y 47.3 % y las columnas de absorción entre 14.7 y 16.6 %. La carga térmica y el área de los rehervidores disminuyen, respectivamente, entre 8.8 y 10.8 %, y 6.3 y 8.1 %, mientras que el trabajo de compresión se reduce entre 6.3 y 6.4 %.

Por otra parte, se observó que al minimizar el trabajo equivalente total (función objetivo termodinámica), el tamaño de la mayoría de los equipos se incrementó considerablemente (en algunos casos más del 200 % respecto al caso en el que se minimiza el costo anual total). De esta manera, una reducción del 10.5 % del trabajo equivalente total produce un aumento del costo anual total de la misma proporción.

Se evaluó además el efecto de la pérdida de eficiencia de las plantas de generación,

---

a partir de un factor de equivalencia que permite representar la penalidad térmica debida a la extracción de vapor de la turbina de baja presión para la regeneración del solvente. Esta simplificación, ampliamente utilizada en la bibliografía para un determinado valor del factor de extracción, permite considerar un rango de condiciones operativas factibles al adaptar la planta de captura a una planta de potencia existente, o bien al diseñar el sistema captura + generación desde el principio (sistema nuevo). Las diferencias en el costo anual total son inferiores al 8 % dentro de todo el rango considerado (0.1-0.3).

La diferencia entre los resultados de los casos presentados, puso en evidencia las relaciones de compromiso existentes entre las variables de diseño, las variables operativas y los criterios económicos, que son simultáneamente optimizados con el fin de obtener el costo anual mínimo (o el trabajo equivalente mínimo), a cada nivel de captura exigido, para tratar el flujo total de gases de combustión generados a partir de la combustión de gas natural en un ciclo combinado. Por otro lado, se destacan claramente las bondades de la optimización mediante el uso de herramientas computacionales avanzadas, y empleando técnicas de programación matemática frente a los simuladores de procesos. Abordar la optimización simultánea de todas las variables del sistema, queda afuera del alcance de los simuladores.

Hasta aquí se ha considerado el estudio del sistema de captura completo, independientemente del ciclo de potencia, asumiendo que agentes externos suministran la energía térmica y eléctrica. Por otra parte, en base a ciertas hipótesis simplificadoras, se introdujo el concepto de trabajo equivalente para analizar la influencia de la extracción de vapor y energía eléctrica del ciclo de potencia.

En el siguiente capítulo, que es la última etapa del desarrollo de esta tesis, se estudiará la integración entre el proceso de captura de  $CO_2$  y la planta de generación de energía eléctrica, con el principal objetivo de obtener diseños óptimos y analizar la influencia de las principales variables en el costo anual total.

Se incorporó el modelo detallado de un ciclo combinado de gas natural al modelo correspondiente al sistema de captura de  $CO_2$  desarrollado en los cap. anteriores. Se introdujeron además todas las restricciones correspondientes al acoplamiento de ambos sistemas. El ciclo combinado de gas natural considera un arreglo multi-eje en la configuración de la planta, post-combustión y regeneración en la turbina de gas, múltiples niveles de presión y secciones de intercambio en paralelo en la caldera de recuperación.

Se evaluaron distintas opciones de configuración (tratamiento parcial o total de los gases de combustión, dimensionamiento y número de trenes de absorción en paralelo) para producir 800 MW de potencia (meta de generación), variando paramétricamente la recuperación global de  $CO_2$  desde 22 hasta 88 %. El objetivo consistió en obtener el diseño de equipos y condiciones operativas óptimas que minimicen el costo total anual del sistema captura+generación. Se consideró que tanto la planta de generación como la de captura son nuevas (greenfield design), es decir que no se estudió en este capítulo el acoplamiento del sistema de absorción química (nuevo) a una planta de potencia existente (retrofit design).

Los componentes de la planta de potencia se diseñan para satisfacer tanto la demanda externa como para suministrar la energía (térmica y eléctrica) a la planta de captura. Específicamente, las pérdidas de eficiencia neta de generación están dadas por la extracción de vapor de la turbina de baja presión, y por el consumo de energía para las bombas y compresores. En particular, el vapor de calefacción requerido en la planta de captura se puede extraer de la planta de potencia y/o se puede comprar a un agente externo.

En contraste con las consideraciones presentadas en el capítulo 4, en las que la penalidad energética debida a la extracción de vapor se calculó independientemente de la planta de generación (empleando un factor de equivalencia), aquí se computó en forma integral, considerando tanto la evolución isentrópica como la eficiencia de expansión del sistema de potencia.

A partir del análisis de las distintas opciones de configuración, se observó que para

---

tratar el flujo total de gases de combustión producidos en la central térmica (el cual varía entre 36.2 y 39.7 kmol/s para cubrir una demanda externa de 800 MW), se necesitan al menos 4 unidades de captura en paralelo con una eficiencia de captura de 88 % por tren. Considerando que el diseño óptimo está basado en tal valor (88 %), el venteo de una porción de los gases exhaustos implica una disminución de la eficiencia global y, consecuentemente, la operación del sistema de captura a carga parcial.

Cuando se fijan la eficiencia de captura ( $\eta_T^{cap}$ ) y el número de trenes en paralelo (NT), la capacidad máxima de recuperación global ( $\eta_{CO_2}$ ) queda definida por las restricciones de tamaño, específicamente cuando la columna de absorción alcanza el máximo diámetro (técnicamente) factible. Se observó que cuando se supera cierto valor de eficiencia ( $\eta_{CO_2}$ ), es necesario agregar un tren de absorción adicional, y dicho cambio depende de la composición y caudal de gas a tratar.

La relación de compromiso que existe entre el costo total, la capacidad de generación y la cantidad de  $CO_2$  capturada, se representa mediante el costo de electricidad y el costo de mitigación. Dado que el aumento de la eficiencia global implica tratar una mayor proporción de los gases de combustión, el costo anual total, el costo de la electricidad y el costo total por unidad de energía entregada, presentan una tendencia creciente respecto al incremento de la eficiencia de captura global y del número de trenes en paralelo. Además, tratar una unidad extra de gas resulta menos costoso, de manera tal que el costo de mitigación mínimo se alcanza a la mayor eficiencia global.

Por otro lado, para un sistema con 4 trenes en paralelo, se observó que aumentar la eficiencia de un tren implica aumentar su tamaño e incrementar el consumo de vapor y electricidad. Así, se incrementa también el tamaño de las turbinas para cubrir la demanda energética de la planta de captura y, consecuentemente, el consumo de combustible. De esta manera, los costos de inversión y operativo aumentan con el incremento de la eficiencia de la unidad de captura. Se encontró que en el espacio de soluciones óptimas, a 89.5 % de recuperación el costo de mitigación es mínimo (71.41 usd/tn). El incremento del costo de mitigación cuando la eficiencia de captura es menor a 89.5 %, hace que esta alternativa sea cada vez menos atractiva. Sin embargo,

una reducción de la eficiencia de captura es acompañada por una disminución del costo de la energía generada, ampliando el margen de ganancias (beneficios) del generador. Finalmente, con el fin de comparar los valores del costo anual total del sistema de captura obtenidos en los cap. 4 y 5 y, considerando que en el cap. 4 el flujo de gases exhaustos es una variable fija (40 kmol/s), mientras que en el cap. 5 varía entre 40.8 y 42 kmol/s, se analizó el valor de la relación entre el costo anual total del sistema de captura, el volumen de gas tratado, y la cantidad de  $CO_2$  capturada. De esta manera, quedaron expuestas las ventajas de optimizar simultáneamente el sistema generación+captura (cap. 5), pues el costo anual total normalizado se redujo entre 6.9% y 9.1% respecto del costo anual total obtenido cuando se consideró únicamente la planta de captura (cap. 4).

Resumiendo, se desarrolló progresivamente un modelo matemático no lineal para el proceso de captura integrado a un ciclo combinado de gas natural. En particular, las unidades de absorción y desorción, se modelaron en forma rigurosa en base al fenómeno de resistencia a la transferencia de materia, con reacciones en equilibrio en la fase líquida y reacción química (cinéticamente controlada) en la interfase. Se consideró el efecto de la reacción química mediante la inclusión del factor de Enhancement para una reacción de pseudo primer orden (mediante el mecanismo de Zwitterion). Se incluyeron además, ecuaciones de diseño que permitieron determinar el tamaño óptimo requerido para un nivel definido de recuperación así como restricciones que aseguran una operación dentro de límites permisibles (caídas de presión, mínimo caudal de humedecimiento, porcentaje de inundación, etc.). Asimismo, para el modelado se asumió un modelo discreto, esto es, cascada de múltiples etapas en contracorriente. Además se modelaron los equipos de intercambio térmico, bombas, compresores y sopladores, con el fin de construir un modelo completo y detallado de la planta de captura, en base a la configuración de equipos tradicional descrita en el presente trabajo.

El modelo final, captura + generación cuenta con aproximadamente 5048 variables y 5228 restricciones (incluyendo desigualdades), de las cuales 3186 variables y 3264 restricciones corresponden al modelo de captura, y el tiempo necesario para resolverlo

---

demandó aproximadamente 264.9 segundos. Como era de esperar, a medida que se incrementó la complejidad, también lo hizo el tiempo computacional para su resolución. Sin embargo, no se presentaron problemas de convergencia en todo el rango de condiciones operativas adoptado. Como se mencionó anteriormente, cada modelo matemático se resolvió empleando una metodología eficiente de resolución. En particular, el conjunto de soluciones factibles del modelo termodinámico completo se empleó para inicializar el modelo económico, mientras que los modelos rigurosos de las columnas se inicializaron a partir de los modelos de equilibrio. Además, fue imprescindible la definición de cotas superiores y/o inferiores y el escalado de las variables problemáticas. De esta manera, es posible concluir que se cuenta con un modelo detallado y flexible, y una metodología de resolución que permite realizar el diseño tecno-económico óptimo de plantas tipo “capture-ready”, para cumplir con diferentes metas de generación y captura de  $CO_2$ .

## 6.2. Alcances y limitaciones. Trabajos futuros

- **Aspectos teóricos.**

- *Diseños alternativos para las columnas de absorción y desorción.*

Desde el punto de vista del diseño, como se discutió a partir del análisis de diferentes ejemplos, tratar grandes volúmenes de gas implica utilizar más de un tren de captura, ya que el diámetro económico de las columnas de absorción es alcanzado con un bajo caudal de gas exhausto (un ciclo combinado de gas natural de 800 MW requiere al menos 4 trenes de captura - con una eficiencia por tren de 88 % - para tratar el 100 % de los gases de combustión producidos). Si bien aquí se empleó la configuración tradicional para cada tren (una columna de absorción, una columna de desorción, un tren de compresión y los equipos auxiliares necesarios), es claro que para columnas grandes (grandes diámetros y/o alturas) se pueden emplear también columnas con más de una sección (o dos columnas con dimensiones diferentes). Esta configuración podría ser beneficiosa porque, manteniendo la eficiencia del proceso, reduciría los riesgos de canalización de

---

las corrientes en el empaque, hecho que provocaría problemas operativos en columnas de elevada altura. Esta línea de investigación surge naturalmente a partir de los resultados discutidos en el capítulo 2. Ciertamente, la ventaja de haber desarrollado un modelo que considere el diámetro variable a lo largo de la altura de la columna, permitiría obtener como solución una distribución óptima de diámetros a lo largo de la columna, indicando claramente un posible beneficio si en lugar de una única unidad de absorción se consideran dos unidades de menor diámetro y altura. Además, esto también resultaría atractivo y beneficioso desde el punto de vista de la confiabilidad del sistema.

Algo similar ocurre con la etapa de compresión. En los casos de estudio se observó que al emplear un tren de compresión por cada tren de absorción (configuración 1 a 1), no se alcanzó el valor trabajo máximo permisible para los sistemas actuales. Así, existe la posibilidad de comprimir el gas enriquecido en  $CO_2$  de más de un tren de captura, estando aún dentro de los parámetros tecnológicos de diseño. Por ejemplo, es posible emplear 1, 2, 3 ó 4 trenes de compresión cada 1, 2, 3, ó 4 trenes de captura. La selección de la configuración óptima entre los trenes de captura y los trenes de compresión estará dada por las relaciones costo-beneficio existentes entre niveles de captura, eficiencias, costos, restricciones tecnológicas, etc.

- *Introducción de conceptos de confiabilidad y políticas de mantenimiento en la etapa de diseño.*

Como es sabido, las plantas de generación de electricidad deben cubrir una demanda de potencia pre-acordada con las empresas de distribución estatales y/o privadas (mediante contratos y regulaciones entre partes). A su vez, deben cumplir con las reglamentaciones medioambientales existentes. Considerando que existen fuertes penalizaciones cuando no se cumplen los requerimientos asociados, la disponibilidad de la planta es un factor crítico en la performance económica del proyecto, haciendo necesaria la incorporación de aspectos de confiabilidad y políticas de mantenimiento de equipos en la etapa de diseño, en la que el objetivo

---

principal es determinar el costo total de la planta durante su tiempo de vida útil, de manera tal que se garantice el nivel de generación de electricidad exigido y las metas de captura reglamentadas. Hasta el presente, se han publicado pocos trabajos en los que se tienen en cuenta las consideraciones mencionadas en los sistemas de captura, y menos aún considerando el sistema integrado “Generación + Captura”, de manera tal que se plantea una nueva faceta del problema a ser investigada.

■ **Aspectos de modelado.**

Básicamente, bajo esta línea de investigación, se propone extender el modelo matemático desarrollado considerando los siguientes aspectos:

● *Estimación de las propiedades físico-químicas.*

Se intentará introducir, en lo posible, nuevas correlaciones más exactas para el cálculo del calor de reacción, coeficientes de transferencia de materia, difusividad y viscosidad de las especies en la solución empleada como solvente, coeficientes cinéticos de reacción, etc. Si bien los resultados presentados en esta tesis son satisfactorios, esta línea de investigación apunta a mejorar el cálculo de las propiedades de transporte, y la predicción de los fenómenos de transferencia de materia y energía entre fases. También se propondrá analizar otros mecanismos de reacción no considerados, tal como el mecanismo termolecular. Para ello, es necesario conocer los últimos avances logrados en materia de estimación de propiedades físico-química de las aminas para una mejor predicción de las concentraciones para el sistema MEA/ $CO_2$ / $H_2O$ . Finalmente, también resulta interesante extender el modelo de manera tal que permita estudiar, como solvente, otros tipos de aminas incluyendo sus mezclas.

● *Diferentes variantes de integración entre el proceso de captura de  $CO_2$  y la planta de generación de energía eléctrica.*

Bajo esta línea de investigación, es interesante proponer y analizar nuevos esquemas de integración entre los ciclos de cogeneración y los procesos de

captura. Por ejemplo, diferentes puntos de extracción de vapor, la inclusión de evaporadores adicionales en el sistema de regeneración de calor (HRSG) para alimentar el sistema de captura, la integración entre las corrientes calientes y frías presentes en ambos procesos (ciclo de potencia y proceso de captura), etc.

Abordar la optimización del diseño (tamaño de equipos y condiciones de operación), teniendo en cuenta que existen distintas alternativas de integración (tipo y número de equipos e interconexiones entre ellos) considerando criterios tecno-económicos, conduce a formular y resolver un problema de programación matemática que incluya tanto decisiones discretas como continuas. En este aspecto, la representación de un problema de optimización basado en una superestructura de alternativas, puede abordarse a través de la programación matemática no lineal mixto-entera (Mixed Integer Non Linear Programming - MINLP) en donde las decisiones discretas se modelan a través de variables binarias de tipo 0-1. Otro enfoque es el de la programación disyuntiva (Generalized Disjunctive Programming - GDP), en el que se emplean variables booleanas para modelar el espacio estructural (existencia de equipos y sus interconexiones), disyunciones para indicar el conjunto de ecuaciones que deben considerarse o no en función de que si un equipo es seleccionado o eliminado de la superestructura, y relaciones lógicas que permiten vincular, de manera sencilla, las relaciones topológicas del proceso. En particular, el segundo enfoque ha cobrado especial interés para la tarea de síntesis y diseño de procesos, ya que permite resolver problemas de variables continuas-discretas en forma eficiente, es decir, con bajo costo computacional.

Sin embargo, varios son los factores que deben considerarse en la postulación de una superestructura asociada a un proceso. Existe una relación intrínseca entre el tipo de formulación a plantear (modelos MINLP, modelos GDP), la representación que se proponga, y el grado de dificultad de resolución asociado. No existe una ley general que indique la forma de representar y resolver el problema, ya que ambas dependen del tipo de proceso a estudiar y de la

---

experiencia con la que cuente el modelador.

- *Modelo Dinámico.*

Resulta atractivo extender el modelo matemático presentado para el proceso de captura de  $CO_2$  a un modelo dinámico, con el principal objetivo de estudiar distintos tipos de arranque y parada, y diseñar un sistema de control apropiado.

De lo expuesto, se desprende con claridad que existen varias líneas de investigación por explorar, de las cuales algunas de ellas ya se encuentran en desarrollo.

# Apéndice A

## Nomenclatura

### *Subíndices*

$z$	Etapa de referencia de la columna de absorción
$z+1$	Etapa superior a la de referencia en la columna de absorción
$z-1$	Etapa inferior a la de referencia en la columna de absorción
$Z$	Etapa superior de la columna de absorción (tope)
$n$	Etapa de referencia de la columna de regeneración
$n+1$	Etapa superior a la de referencia en la columna de regeneración
$n-1$	Etapa inferior a la de referencia en la columna de regeneración
$N$	Etapa superior de la columna de regeneración (tope)
$D$	Torre de regeneración
$R$	Rehervidor
$C$	Condensador
$e$	Equipo de intercambio térmico: [E1], [E2], [E3], [I1]
$i$	Componentes de la corriente líquida: $CO_2, MEA, H_2O, MEAH^+, MEACOO^-, HCO_3^-, CO_3^{2-}, H_3O^+, OH^-$
$j$	Componentes de la corriente gaseosa: $CO_2, N_2, H_2O, O_2$
$in$	Entrada
$out$	Salida
$cold$	Corriente fría

---

hot	Corriente caliente
c	Número de etapas de compresión
m	Reacciones químicas
RH	Amina rica que ingresa a la regeneradora (rich hot)
VC	Vapor de calefacción usado en el reboiler

### *Supraíndices*

L	Líquido
G	Gas
*	Condición de equilibrio de fases
cap	Condiciones referidas a la planta de captura
gen	Condiciones referidas a la planta de generación
cap+ gen	Condiciones referidas al sistema de captura integrado a la planta de generación

### *Letras griegas*

$\alpha$	Carga de $CO_2$ [mol de $CO_2$ / mol de MEA]
$\gamma$	Coefficiente de actividad
$\gamma_c$	Relación entre la capacidad calorífica a presión y volumen constantes
$\nu$	Coefficiente estequiométrico [-]
$\mu$	Viscosidad [ $kg/m \cdot s$ ]
$\phi$	coeficiente de fugacidad del gas [-]
$\omega_c$	Factor acéntrico
$\rho$	Densidad molar [ $mol/m^3$ ]
$\rho'$	Densidad másica [ $kg/m^3$ ]
$\lambda$	Coefficiente de desorción [-]
$\eta$	Eficiencia de Murprhee [-]

---

$\eta_B$	Eficiencia isentrópica de la bomba de amina rica
$\eta_c$	Eficiencia isentrópica de sopladores y compresores
$\eta^{gen}$	Eficiencia térmica del sistema de generación
$\eta_{CO_2}$	Eficiencia de captura global
$\eta_T^{cap}$	Eficiencia de captura inherente a cada tren
$\sigma$	Tensión superficial del líquido [ $N/m$ ]
$\sigma_c$	Tensión superficial crítica del material de empaque [ $N/m$ ]
$\psi$	Carga iónica
$\tau$	Tiempo de residencia en tanques [s]

### ***Equipos***

[ <i>CND</i> ]	Condensadores
[ <i>COM</i> ]	Compresores
[ <i>REB</i> ]	Rehervidores
[ <i>ABS</i> ]	Torres de absorción
[ <i>REG</i> ]	Torres de regeneración
[ <i>B1</i> ]	Bombas de amina rica
[ <i>S1</i> ]	Sopladores
[ <i>E1</i> ]	Enfriadores de la corriente de gases exhaustos
[ <i>E2</i> ]	Enfriadores de la corriente de amina pobre
[ <i>E3</i> ]	Conjunto de inter-enfriadores de la etapa de compresión
[ <i>I1</i> ]	Intercambiadores amina amina
[ <i>T1</i> ]	Tanques de reposición de agua
[ <i>T2</i> ]	Tanques de reposición de amina
[ <i>BCO2</i> ]	Bombas de $CO_2$
[ <i>HRS</i> G]	Calderas de recuperación de calor del ciclo combinado
[ <i>LST</i> ]	Turbinas de vapor de baja presión del ciclo combinado
[ <i>IST</i> ]	Turbinas de vapor de media presión del ciclo combinado

---

- [*HST*] Turbinas de vapor de baja presión del ciclo combinado
- [*GT*] Turbinas de gas del ciclo combinado

---

a	Actividad	
$a$	Área superficial específica de transferencia de materia	$[m^2/m^3]$
A	Área transversal de la torre	$[m^2]$
AS	Área superficial del recipiente	$[m^2]$
$A_R$	Área de intercambio térmico en el rehervidor	$[m^2]$
$A_C$	Área de intercambio térmico en el condensador	$[m^2]$
$A_{E1}$	Área de intercambio térmico en el enfriador de gases exhaustos	$[m^2]$
$A_{E2}$	Área de intercambio térmico en el enfriador de amina pobre	$[m^2]$
$A_{E3}$	Área de intercambio térmico en los interenfriadores	$[m^2]$
$A_{I1}$	Área de intercambio térmico en el economizador amina-amina	$[m^2]$
$a_t$	Área específica del empaque	$[m^2/m^3]$
$C_{vapor}$	Costo total de adquisición del vapor de calefacción	$[M\text{usd/año}]$
$C_{E.Elect.}$	Costo total de adquisición de la energía eléctrica	$[M\text{usd/año}]$
$C_{MEA}$	Costo total de adquisición del solvente	$[M\text{usd/año}]$
$C_{H_2O}$	Costo total de adquisición del agua de proceso	$[M\text{usd/año}]$
$C_{A.Enf.}$	Costo total de adquisición del agua de enfriamiento	$[M\text{usd/año}]$
COE	Costo de electricidad	$[usd/kW]$
$C_p$	Calor específico a presión constante	$[KJ/mol \cdot K]$
CRF	Factor de recupero de capital	$[-]$
DC	Costos directos de fabricación	$[M\text{usd}]$
$D^G$	Difusividad de la fase gaseosa	$[m/s^2]$
$D_{CO_2}^L$	Difusividad de $CO_2$ en la solución de amina	$[m/s^2]$
DMLT	Diferencia media logarítmica de temperatura	$[K]$

---

---

$D_p$	Diámetro nominal del empaque	[m]
DT	Diámetro de la columna	[m]
$\Delta h_{STLP}$	Entalpía específica del vapor de baja presión extraído	[KJ/kmol]
$\Delta P$	Caída de presión total	[kPa]
$\Delta P_z$	Caída de presión por unidad de altura de empaque en la etapa z	[kPa/m]
E	Factor de Enhancement	[-]
$E_{ref}$	Emisiones de la planta de generación	[tn/kWh]
$E_{cap}$	Emisiones de la planta de generación con sistema de captura	[tn/kWh]
f	Factor de inundación	[%]
$f_c$	Factor de compresibilidad	[-]
$F_p$	Factor de empaque	[m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]
Fpd	Factor de empaque seco	[ft <sup>2</sup> /ft <sup>3</sup> ]
FCI	Capital de inversión fijo	[Musd]
$f_{eq}$	Factor de extracción	[-]
Fr	Número de Froude	[-]
g	Constante gravitacional	[m/s <sup>2</sup> ]
G	Flujo molar de gas	[mol/s]
$G'$	Flujo másico de gas	[kg/m <sup>2</sup> · s]
$G''$	Velocidad másica de gas	[kg/s]
$G_f$	Factor de carga de gas	[lb/h · ft <sup>2</sup> ]
h	Altura de cada etapa	[m]
H	Entalpía específica	[KJ/mol]
$H_{CO_2}$	Constante de Henry. Solubilidad de CO <sub>2</sub> en la solución de amina	[kPa m <sup>3</sup> /mol]

---

---

$Ha$	Número de Hatta	[-]
HT	Altura total de la columna	[m]
HTU	Altura de la unidad de transferencia	[m]
$\Delta H_R$	Calor de reacción por unidad de $CO_2$ absorbida	[ $KJ/mol$ ]
$\Delta H_{H_2O}$	Calor latente de vaporización de agua	[ $KJ/mol$ ]
I	Fuerza iónica de la solución	[mol/l]
IC	Costos indirectos de fabricación	[ $Musd$ ]
$I^0, I^1$	Índices de ajuste inflacionario	[-]
$k^L$	Coefficiente de transferencia de materia en la fase líquida	[ $m/s$ ]
$k^G$	Coefficiente de transferencia de materia en la fase gaseosa	[ $kmol/Pa \cdot s \cdot m^2$ ]
k	Constante cinética de reacción	[ $l/mol \cdot s$ ]
K	Constante de equilibrio químico	
L	Flujo molar de líquido	[ $mol/s$ ]
$L'$	Flujo másico de líquido	[ $kg/m^2 \cdot s$ ]
$L''$	Velocidad másica de líquido	[kg/s]
$L_f$	Factor de carga de líquido	[ $lb/h \cdot ft^2$ ]
LHV	Poder calorífico inferior del combustible	[ $KJ/kmol$ ]
$L_{S k}$	Número de operadores por equipo	[ $op/equipo$ ]
$L_{Y op}$	Cantidad de trabajo operativo	[ $turnos - op/op - año$ ]
M	Masa molar	[ $kg/kmol$ ]
MC	Costo de mitigación	[ $usd/tn$ ]
MF	Flujo molar de combustible	[ $kmol/s$ ]
$m_{STLP}$	Masa de vapor que ingresaría a la turbina de vapor, sección de baja presión	[ $kmol/s$ ]
$N_k$	Número de equipos del mismo tipo	[-]

---

---

$NT$	Número de trenes de captura	[-]
$NTU$	Número de unidades de transferencia	[-]
$OLC$	Costo de mano de obra operativa	[ $MUSD$ ]
$OMC$	Costo de operación y mantenimiento	[ $MUSD/año$ ]
$P$	Presión	[kPa]
$p$	Presión de vapor	[kPa]
$P_c$	Presión crítica	[kPa]
$P_{comb}$	Precio del combustible	[ $USD/GJ$ ]
$PC$	Costo total de adquisición de equipos	[ $MUSD$ ]
$PSA$	Costo unitario de cada servicio auxiliar	[ $MUSD/cantidad$ ]
$POT$	Tiempo operativo anual	[ $h/año$ ]
$Q_C$	Calor intercambiado en condensadores	[ $KJ/s$ ]
$Q_{E1}$	Calor intercambiado en las torres de enfriamiento de gases exhaustos	[ $KJ/s$ ]
$Q_{E2}$	Calor intercambiado en enfriadores de amina pobre	[ $KJ/s$ ]
$Q_{E3}$	Calor intercambiado en interenfriadores	[ $KJ/s$ ]
$Q_{I1}$	Calor intercambiado en economizadores amina-amina	[ $KJ/s$ ]
$Q_{MW}$	Caudal mínimo de humedecimiento	[ $m^3/m^2 \cdot s$ ]
$Q_R$	Calor intercambiado en el rehervidor	[ $KJ/s$ ]
$Q_{Reb,C}$	Energía demandada en los rehervidores, suministrada por vapor comprado como servicio auxiliar	[ $KJ/s$ ]
$Q_{Reb,E}$	Energía demandada en los rehervidores, suministrada por vapor de baja presión extraído del ciclo combinado	[ $KJ/s$ ]
$R$	Constante universal de los gases	[ $Pa \cdot m^3/mol \cdot K$ ]
$r$	Relación de compresión	[-]
$Re$	Número de Reynolds	[-]

---

---

$S_{op}$	Salario de un operador	[ <i>usd/año</i> ]
$T$	Temperatura	[K]
$TAC$	Costo anual total	[ <i>Musd/año</i> ]
$TAC_{norm}^{cap}$	Costo anual total del sistema de captura normalizado respecto al volumen de gas tratado y a la cantidad de $CO_2$ capturada	[ <i>usd/tn/kmol/s</i> ]
$TAI$	Capital de inversión anual	[ <i>Musd/año</i> ]
$T_c$	Temperatura crítica	[K]
$TCI$	Capital de inversión	[ <i>Musd</i> ]
$T_{Cond}^{gen}$	Temperatura de saturación del condensado	[K ]
$T_{ext}^{sat}$	Temperatura de saturación del vapor extraído	[K ]
$U$	Coefficiente global de transferencia de energía	[ <i>kW/m<sup>2</sup>K</i> ]
$UC$	Costo unitario de materias primas y servicios auxiliares	[ <i>Musd/cantidad</i> ]
$u_f$	Velocidad de inundación	[ <i>ft/s</i> ]
$u^G$	Velocidad superficial del gas	[ <i>m/s</i> ]
$VOC$	Costo total de materias primas y serv. aux.	[ <i>Musd</i> ]
$VT$	Volumen total del empaque	[ <i>m<sup>3</sup></i> ]
$V_T$	Volumen de tanque	[ <i>m<sup>3</sup></i> ]
$W_B$	Trabajo de la bomba	[kW]
$W_c$	Trabajo de compresión de la etapa “c”	[kW]
$W_{TC}$	Trabajo de compresión total	[kW]
$We$	Número de Weber	[-]
$W_{Net}$	Potencia neta de diseño de la central térmica	[ <i>MW</i> ]
$W_0$	Potencia disponible para satisfacer la demanda externa	[ <i>MW</i> ]

---

---

$W_{loss}$	Potencia disponible para satisfacer la demanda de energía mecánica del sistema de captura	[MW ]
$W_{STLP}$	Trabajo total producido por la turbina de vapor, sección de baja presión	[MW ]
$W_{E,STLP}$	Pérdida de trabajo debida a la extracción de vapor para satisfacer la demanda de energía térmica del sistema de captura	[MW ]
$X$	Capacidad de diseño de equipos	
$x$	Composición del líquido. Fracción molar	[-]
$y$	Composición del gas. Fracción molar	[-]
$Y$	Consumo anual de materias primas y servicios auxiliares	[cantidad/año ]

---

## Apéndice B

# Estimación de los costos de captura de $CO_2$

### B.3. Costo total de adquisición de equipos

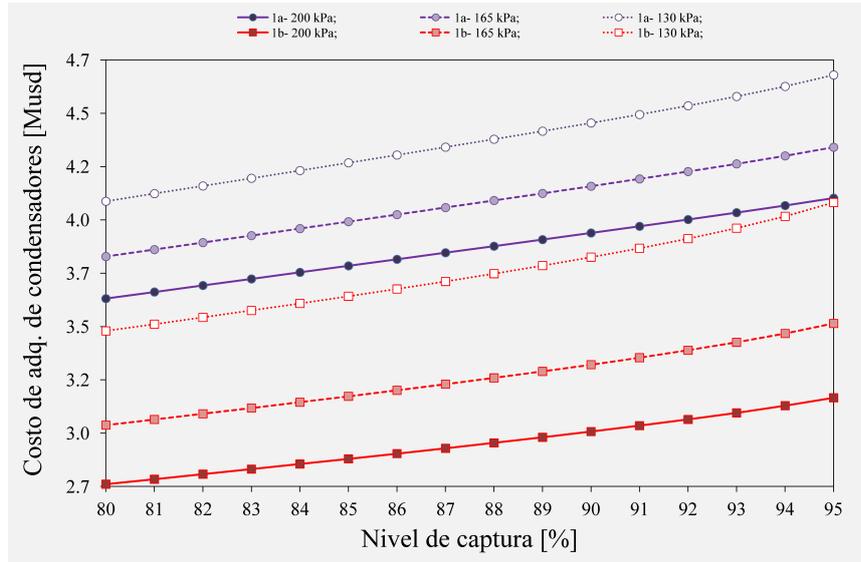


Figura B.1 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de condensadores [CND].

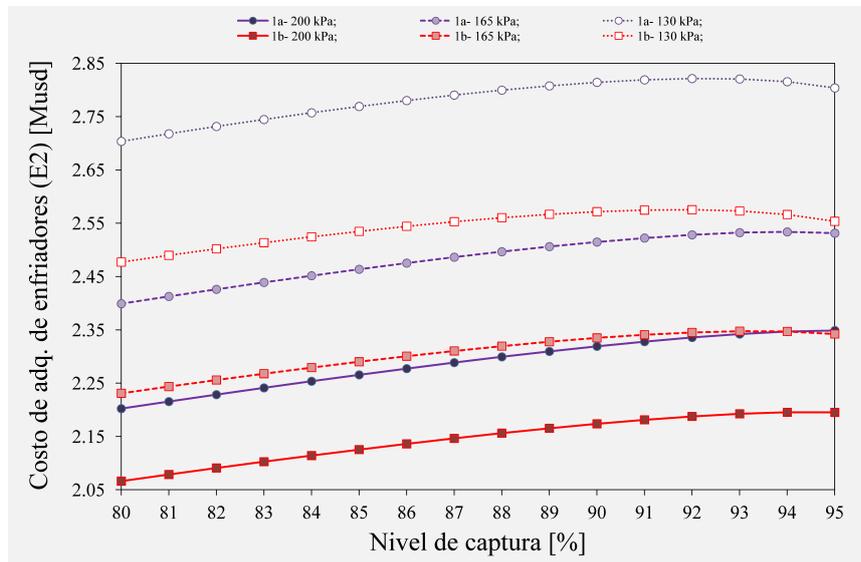


Figura B.2 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de enfriadores de MEA [E2].

## B.1. Comparación de costos de adquisición de equipos

Tabla B.1 – Comparación de costos unitarios de adquisición de equipos a partir de diversas fuentes.

Material		Costo unitario en MUSD (Capacidad característica)			
		Matches, 2003	Peters et al., 2003	Seider et al., 2009	Henao, 2005
Intercambiador de coraza y tubos, cabeza flotante	CS-SS	0.914 (929 m <sup>2</sup> )	0.2067 (929 m <sup>2</sup> )	0.4870 (929 m <sup>2</sup> )	0.4340 (929 m <sup>2</sup> )
	SS-SS	1.141 (929 m <sup>2</sup> )	0.3647 (929 m <sup>2</sup> )	0.4341 (929 m <sup>2</sup> )	0.6285 (929 m <sup>2</sup> )
Rehervidor tipo Kettle	SS-SS (316)	0.2202 (92.9 m <sup>2</sup> )	-	0.1443 (92.9 m <sup>2</sup> )	0.2253 (92.9 m <sup>2</sup> )
Soplador centrífugo	CS	0.017 (4.72 m <sup>3</sup> /s)	0.179 (4.72 m <sup>3</sup> /s)	0.2706 (1000 Hp)	0.0179 (1000 Hp)
Compresor centrífugo	CS	2.707 (6000 KW)	4.832 (6000 KW)	3.057 (6000 KW)	15.4389 (6000 KW)
	SS	-	12.081 (6000 KW)	7.642 (6000 KW)	38.6212 (6000 KW)
Columnas, recipientes	CS	0.1514 (21938 Kg)	0.433 (H=12 m, D= 4 m)	0.2133 (H=12 m, D= 4 m)	0.5322 (H=12 m, D= 4 m)
	SS	0.3294 (21938 Kg)	-	0.4479 (H=12 m, D= 4 m)	2.1286 (H=12 m, D= 4 m)
Columnas, empaques	CS	-	0.2136 (H=12 m, D= 4 m)	0.206 (H=12 m, D= 4 m)	0.2065 (H=12 m, D= 4 m)
	Polietileno	-	0.1780 (H=12 m, D= 4 m)	0.137 (H=12 m, D= 4 m)	0.1721 (H=12 m, D= 4 m)
	Porcelana	-	0.1780 (H=12 m, D= 4 m)	0.148 (H=12 m, D= 4 m)	0.1721 (H=12 m, D= 4 m)
	SS 316	-	0.7477 (H=12 m, D= 4 m)	0.655 (H=12 m, D= 4 m)	0.7228 (H=12 m, D= 4 m)
Tanques de almacenamiento	CS	0.6233 (3785.4 m <sup>3</sup> )	0.3636 (3785.4 m <sup>3</sup> )	0.5821 (3785.4 m <sup>3</sup> )	-
	SS	2.1191 (3785.4 m <sup>3</sup> )	1.0909 (3785.4 m <sup>3</sup> )	-	-

## B.2. Distribución de costos de materias primas y servicios auxiliares

Tabla B.2 – Diseño óptimo. Caso 1: distribución de costos de servicios auxiliares (200 kPa).

P <sub>REB</sub> =200 kPa										
	Vapor de calefacción		Energía eléctrica		Agua de enfriamiento				MEA	Agua
	1a		1a		1a		1b		1a, 1b	1a, 1b
[%]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[Musd/a]
80	17.053	9.965	9.169	5.358	2.242	1.310	2.324	1.358	1.431	0.024
81	17.273	9.969	9.301	5.368	2.272	1.311	2.356	1.360	1.449	0.024
82	17.495	9.974	9.437	5.380	2.302	1.313	2.389	1.362	1.467	0.025
83	17.717	9.979	9.575	5.393	2.333	1.314	2.423	1.365	1.485	0.025
84	17.940	9.984	9.716	5.408	2.363	1.315	2.456	1.367	1.503	0.025
85	18.164	9.990	9.862	5.424	2.394	1.317	2.491	1.370	1.520	0.026
86	18.389	9.996	10.012	5.442	2.425	1.318	2.525	1.373	1.538	0.026
87	18.616	10.003	10.167	5.463	2.456	1.320	2.561	1.376	1.556	0.026
88	18.844	10.011	10.327	5.486	2.488	1.322	2.597	1.379	1.574	0.026
89	19.073	10.019	10.495	5.513	2.520	1.324	2.633	1.383	1.592	0.027
90	19.305	10.028	10.672	5.543	2.553	1.326	2.671	1.388	1.610	0.027
91	19.539	10.038	10.858	5.578	2.586	1.328	2.710	1.392	1.628	0.027
92	19.777	10.050	11.058	5.619	2.620	1.331	2.751	1.398	1.646	0.028
93	20.019	10.063	11.275	5.668	2.654	1.334	2.794	1.404	1.664	0.028
94	20.266	10.079	11.514	5.726	2.690	1.338	2.839	1.412	1.681	0.028
95	20.522	10.099	11.784	5.799	2.728	1.342	2.889	1.422	1.699	0.029

Tabla B.3 – Diseño óptimo. Caso 1: distribución de costos de materias primas y servicios auxiliares (165 kPa).

P <sub>REB</sub> =165 kPa										
	Vapor de calefacción		Energía eléctrica		Agua de enfriamiento				MEA	Agua
	1a		1a		1a		1b		1a, 1b	1a, 1b
[%]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[Musd/a]
80	17.537	10.248	9.510	5.557	2.352	1.375	2.467	1.442	1.431	0.024
81	17.764	10.253	9.647	5.568	2.384	1.376	2.503	1.444	1.449	0.024
82	17.992	10.258	9.788	5.580	2.415	1.377	2.538	1.447	1.467	0.025
83	18.221	10.263	9.932	5.594	2.447	1.379	2.574	1.450	1.485	0.025
84	18.451	10.269	10.079	5.609	2.480	1.380	2.611	1.453	1.503	0.025
85	18.682	10.275	10.230	5.627	2.512	1.382	2.648	1.456	1.520	0.026
86	18.915	10.282	10.386	5.646	2.545	1.383	2.685	1.460	1.538	0.026
87	19.150	10.290	10.548	5.668	2.578	1.385	2.724	1.464	1.556	0.026
88	19.386	10.299	10.716	5.693	2.612	1.387	2.763	1.468	1.574	0.026
89	19.624	10.308	10.891	5.721	2.645	1.390	2.804	1.473	1.592	0.027
90	19.865	10.319	11.075	5.753	2.680	1.392	2.846	1.478	1.610	0.027
91	20.109	10.331	11.271	5.790	2.715	1.395	2.889	1.484	1.628	0.027
92	20.357	10.344	11.481	5.834	2.751	1.398	2.934	1.491	1.646	0.028
93	20.611	10.361	11.709	5.886	2.788	1.402	2.983	1.499	1.664	0.028
94	20.872	10.381	11.962	5.949	2.827	1.406	3.035	1.509	1.681	0.028
95	21.146	10.406	12.250	6.028	2.867	1.411	3.093	1.522	1.699	0.029

Tabla B.4 – Diseño óptimo. Caso 1: distribución de costos de materias primas y servicios auxiliares (130 kPa).

<b>P<sub>REB</sub>=130 kPa</b>											
	<b>Vapor de calefacción</b>		<b>Energía eléctrica</b>		<b>Agua de enfriamiento</b>				<b>MEA</b>	<b>Agua</b>	
	<b>1a</b>		<b>1a</b>		<b>1a</b>		<b>1b</b>		<b>1a, 1b</b>	<b>1a, 1b</b>	
	[%]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[usd/tn]	[Musd/a]	[Musd/a]
80	18.201	10.636	9.965	5.823	2.517	1.471	2.689	1.571	1.431	0.024	
81	18.440	10.643	10.110	5.835	2.551	1.472	2.728	1.575	1.449	0.024	
82	18.680	10.650	10.258	5.849	2.585	1.474	2.768	1.578	1.467	0.025	
83	18.922	10.658	10.410	5.864	2.620	1.476	2.809	1.582	1.485	0.025	
84	19.165	10.666	10.566	5.880	2.655	1.478	2.850	1.586	1.503	0.025	
85	19.410	10.675	10.726	5.899	2.691	1.480	2.891	1.590	1.520	0.026	
86	19.657	10.686	10.891	5.921	2.726	1.482	2.934	1.595	1.538	0.026	
87	19.906	10.697	11.063	5.945	2.763	1.484	2.978	1.600	1.556	0.026	
88	20.159	10.709	11.241	5.972	2.799	1.487	3.023	1.606	1.574	0.026	
89	20.414	10.723	11.428	6.003	2.837	1.490	3.070	1.612	1.592	0.027	
90	20.674	10.739	11.625	6.038	2.875	1.493	3.118	1.620	1.610	0.027	
91	20.939	10.757	11.834	6.080	2.914	1.497	3.169	1.628	1.628	0.027	
92	21.211	10.778	12.060	6.128	2.954	1.501	3.223	1.638	1.646	0.028	
93	21.492	10.804	12.307	6.187	2.995	1.506	3.281	1.649	1.664	0.028	
94	21.788	10.836	12.583	6.258	3.039	1.511	3.345	1.663	1.681	0.028	
95	22.107	10.879	12.900	6.348	3.086	1.519	3.418	1.682	1.699	0.029	

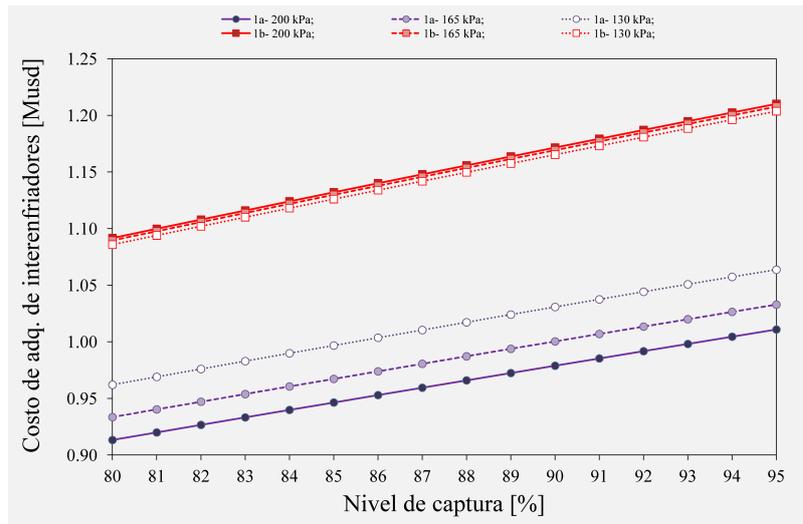


Figura B.3 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de interenfriadores [E3].

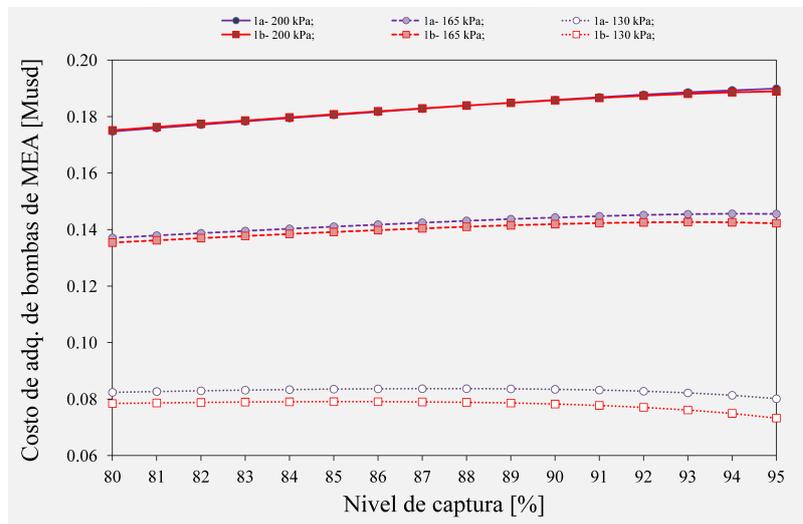


Figura B.4 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de bombas de solvente [B1].

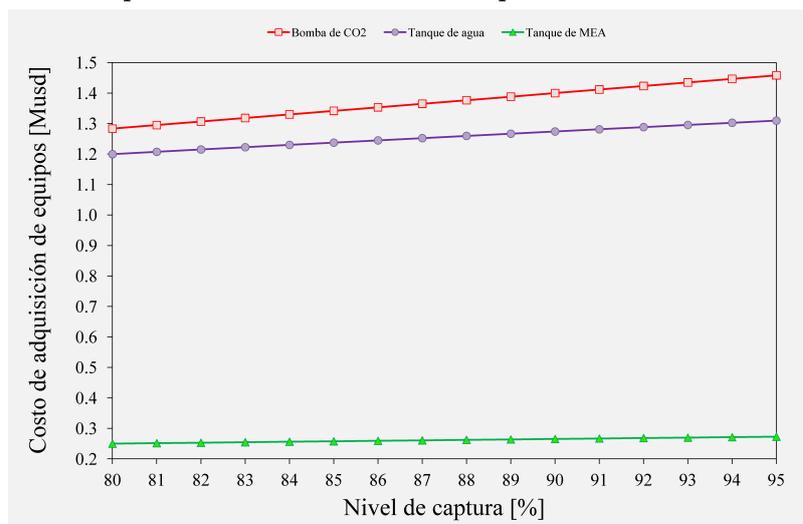


Figura B.5 – Diseño óptimo. Caso 1: costo de adquisición de bombas de  $CO_2$  [BCO2], tanques de agua de proceso [T1] y de solvente [T2].

## B.4. Variables de diseño de equipos

Tabla B.5 – Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de absorción (165 kPa).

165 kPa								
Rec. tren [%]	Vol. de empaque		Caída de presión		Recuperación		H/D	
	[m <sup>3</sup> ]		[kPa]		[%]		[-]	
	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b
80	2525.9	2193.4	9.18	10.76	87.25	87.12	1.77	1.76
81	2588.0	2245.6	9.37	10.96	87.94	87.82	1.81	1.80
82	2653.1	2300.3	9.56	11.17	88.63	88.50	1.85	1.84
83	2721.5	2357.8	9.76	11.39	89.31	89.19	1.89	1.88
84	2793.8	2418.3	9.97	11.62	89.98	89.86	1.94	1.92
85	2870.4	2482.3	10.20	11.87	90.64	90.53	1.99	1.97
86	2952.0	2550.2	10.44	12.14	91.30	91.19	2.04	2.02
87	3039.2	2622.7	10.70	12.43	91.96	91.85	2.09	2.07
88	3133.0	2700.5	10.99	12.75	92.61	92.50	2.15	2.13
89	3234.8	2784.5	11.29	13.10	93.25	93.15	2.22	2.19
90	3346.0	2875.9	11.63	13.48	93.89	93.79	2.29	2.26
91	3468.8	2976.3	12.00	13.91	94.52	94.43	2.37	2.33
92	3606.3	3087.8	12.43	14.40	95.14	95.06	2.46	2.42
93	3762.7	3214.3	12.91	14.95	95.76	95.68	2.56	2.52
94	3944.4	3359.7	13.48	15.60	96.38	96.30	2.68	2.63
95	4162.2	3531.4	14.17	16.40	96.99	96.92	2.83	2.77

Tabla B.6 – Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de absorción (130 kPa).

130 kPa								
Rec. tren [%]	Vol. de empaque		Caída de presión		Recuperación		H/D	
	[m <sup>3</sup> ]		[kPa]		[%]		[-]	
	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b
80	2438.7	2126.8	9.10	10.71	86.36	86.36	1.73	1.73
81	2497.5	2176.9	9.28	10.90	87.09	87.09	1.77	1.76
82	2559.2	2229.2	9.47	11.11	87.82	87.81	1.81	1.80
83	2624.0	2284.2	9.66	11.33	88.54	88.53	1.85	1.84
84	2692.3	2342.1	9.87	11.56	89.26	89.25	1.89	1.88
85	2764.6	2403.2	10.09	11.80	89.97	89.95	1.94	1.93
86	2841.4	2468.1	10.33	12.07	90.67	90.66	1.99	1.98
87	2923.5	2537.3	10.58	12.35	91.37	91.35	2.04	2.03
88	3011.7	2611.5	10.85	12.66	92.07	92.04	2.10	2.08
89	3107.1	2691.5	11.14	13.00	92.75	92.73	2.16	2.14
90	3211.1	2778.5	11.47	13.37	93.44	93.41	2.23	2.21
91	3325.7	2874.2	11.82	13.78	94.11	94.09	2.30	2.28
92	3453.5	2980.6	12.23	14.24	94.79	94.76	2.39	2.36
93	3598.4	3100.5	12.68	14.77	95.45	95.42	2.48	2.46
94	3765.9	3238.3	13.22	15.40	96.11	96.08	2.59	2.56
95	3965.2	3400.5	13.86	16.15	96.77	96.74	2.73	2.69

Tabla B.7 – Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de regeneración (165 kPa).

165 kPa								
Rec. tren	Vol. de empaque		Caída de presión		Recuperación		H/D	
[%]	[m <sup>3</sup> ]		[kPa]		[%]		[-]	
80	138.4	91.2	1.86	1.53	58.44	59.12	2.237	1.429
81	141.1	93.0	1.86	1.54	58.45	59.14	2.229	1.426
82	143.9	94.8	1.86	1.55	58.46	59.17	2.221	1.423
83	146.8	96.6	1.86	1.56	58.47	59.20	2.214	1.421
84	149.7	98.5	1.86	1.57	58.48	59.24	2.207	1.419
85	152.7	100.5	1.86	1.58	58.49	59.28	2.200	1.418
86	155.9	102.5	1.85	1.60	58.50	59.33	2.194	1.417
87	159.2	104.7	1.85	1.61	58.52	59.38	2.188	1.416
88	162.6	106.9	1.85	1.63	58.54	59.43	2.182	1.416
89	166.3	109.3	1.85	1.64	58.57	59.50	2.176	1.416
90	170.2	111.8	1.84	1.66	58.60	59.58	2.171	1.418
91	174.5	114.5	1.84	1.68	58.64	59.68	2.167	1.420
92	179.1	117.5	1.84	1.71	58.69	59.80	2.165	1.424
93	184.2	120.8	1.84	1.74	58.76	59.94	2.164	1.429
94	190.2	124.6	1.84	1.77	58.85	60.14	2.166	1.437
95	197.1	129.2	1.85	1.82	58.99	60.40	2.175	1.449

Tabla B.8 – Diseño óptimo. Caso 1: variables de diseño de las columnas de regeneración (130 kPa).

130 kPa								
Rec. tren [%]	Vol. de empaque [m <sup>3</sup> ]		Caída de presión [kPa]		Recuperación [%]		H/D [-]	
	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b
	80	189.7	121.8	1.77	1.84	52.72	54.38	2.254
81	193.3	124.2	1.78	1.85	52.74	54.42	2.250	1.529
82	197.0	126.7	1.79	1.86	52.75	54.46	2.247	1.527
83	200.9	129.3	1.80	1.88	52.77	54.51	2.245	1.525
84	204.9	131.9	1.81	1.89	52.79	54.56	2.243	1.523
85	208.9	134.7	1.83	1.91	52.82	54.62	2.242	1.522
86	213.2	137.6	1.84	1.93	52.85	54.68	2.241	1.521
87	217.6	140.6	1.85	1.94	52.88	54.76	2.242	1.521
88	222.2	143.7	1.87	1.97	52.92	54.84	2.243	1.521
89	227.2	147.1	1.89	1.99	52.96	54.93	2.246	1.522
90	232.4	150.7	1.90	2.01	53.02	55.05	2.251	1.524
91	238.1	154.6	1.93	2.04	53.09	55.18	2.257	1.527
92	244.4	158.9	1.95	2.08	53.18	55.34	2.267	1.532
93	251.5	163.8	1.98	2.12	53.30	55.55	2.280	1.538
94	259.6	169.5	2.03	2.17	53.46	55.81	2.301	1.548
95	269.6	176.5	2.09	2.24	53.70	56.17	2.333	1.562

Tabla B.9 – Diseño óptimo. Caso 1: área requerida en los equipos de intercambio de calor (165 kPa).

165 kPa, [m <sup>2</sup> ]										
[%]	[I1]		[REB]		[CND]		[E2]		[E3]	
	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b
80	6520.1	5435.8	5449.0	6069.8	3424.8	2315.9	1606.5	1423.3	333.2	431.0
81	6610.1	5509.3	5519.8	6154.2	3474.5	2350.2	1621.8	1436.8	337.2	436.4
82	6700.8	5583.0	5591.1	6239.4	3524.4	2385.0	1636.8	1449.9	341.3	441.8
83	6792.1	5656.8	5662.8	6325.7	3574.6	2420.3	1651.4	1462.7	344.4	446.3
84	6884.0	5730.8	5734.9	6413.1	3625.2	2456.3	1665.5	1475.0	349.4	452.6
85	6976.5	5804.8	5807.5	6501.8	3676.0	2493.0	1679.3	1486.8	353.5	458.0
86	7069.7	5878.7	5880.8	6592.1	3727.2	2530.6	1692.5	1498.1	357.6	463.4
87	7163.5	5952.4	5954.7	6684.2	3778.9	2569.2	1705.1	1508.8	361.7	468.7
88	7257.4	6025.7	6029.6	6778.4	3831.1	2609.0	1716.9	1518.7	365.7	474.1
89	7351.7	6098.3	6105.5	6875.2	3884.0	2650.3	1727.9	1527.6	369.8	479.5
90	7446.2	6169.8	6182.7	6975.2	3937.6	2693.3	1737.8	1535.5	373.9	484.9
91	7540.5	6239.6	6261.4	7079.4	3992.3	2738.6	1746.4	1542.0	378.0	490.3
92	7633.8	6306.6	6342.1	7188.9	4048.4	2786.9	1753.3	1546.8	382.1	495.7
93	7725.2	6369.3	6425.7	7305.7	4106.6	2839.2	1758.1	1549.4	386.2	501.1
94	7812.3	6424.8	6513.1	7433.1	4167.8	2897.2	1759.7	1548.8	390.3	506.4
95	7891.6	6468.2	6606.9	7576.7	4234.0	2964.0	1756.9	1543.6	394.4	511.8

Tabla B.10 – Diseño óptimo. Caso 1: área requerida en los equipos de intercambio de calor (130 kPa).

130 kPa, [m <sup>2</sup> ]										
[%]	[I1]		[REB]		[CND]		[E2]		[E3]	
	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b	1a	1b
80	7529.6	6091.2	5686.1	6488.1	3825.4	2914.2	1960.6	1694.6	350.3	428.6
81	7633.6	6170.7	5761.7	6581.2	3882.4	2959.1	1977.8	1709.1	354.6	434.0
82	7737.9	6249.9	5837.8	6675.5	3939.7	3004.8	1994.5	1723.0	358.9	439.4
83	7842.6	6328.8	5914.5	6771.3	3997.5	3051.4	2010.5	1736.3	363.1	444.7
84	7947.6	6407.3	5991.8	6868.8	4055.8	3099.0	2025.8	1748.9	367.4	450.1
85	8052.8	6485.3	6070.0	6968.2	4114.7	3148.0	2040.4	1760.8	371.7	455.4
86	8158.0	6562.4	6149.0	7069.8	4174.3	3198.3	2054.0	1771.8	375.9	460.8
87	8263.0	6638.4	6229.1	7174.0	4234.7	3250.3	2066.7	1781.8	380.2	466.1
88	8367.6	6712.9	6310.4	7281.3	4296.0	3304.3	2078.1	1790.6	384.5	471.5
89	8471.3	6785.3	6393.2	7392.6	4358.7	3360.8	2088.0	1798.0	388.8	476.8
90	8573.2	6854.8	6478.0	7508.6	4422.9	3420.4	2096.2	1803.7	393.1	482.2
91	8672.5	6920.1	6565.2	7630.8	4489.3	3483.9	2102.1	1807.2	397.3	487.5
92	8767.1	6979.4	6655.6	7761.2	4558.8	3552.5	2105.1	1808.0	401.6	492.9
93	8854.2	7029.8	6750.5	7902.9	4632.6	3628.3	2104.1	1805.2	405.9	498.2
94	8929.1	7066.1	6851.6	8061.1	4713.5	3714.4	2097.8	1797.5	410.1	503.6
95	8981.1	7079.6	6963.0	8244.9	4806.2	3816.6	2083.3	1782.7	414.2	508.9

Tabla B.11 – Diseño óptimo. Caso 1: trabajo de bombeo y compresión por tren de captura (165 kPa).

165 kPa, [KW]							
[%]	[COMP]		[S1]		[BCO2]	[B1]	
	1a	1b	1a	1b	1a-1b	1a	1b
80	5492.1	5813.9	3051.6	3538.9	169.4	19.3	18.9
81	5560.3	5886.6	3108.5	3599.3	171.6	19.5	19.1
82	5628.6	5959.4	3168.2	3662.8	173.7	19.7	19.3
83	5696.9	6032.2	3230.9	3729.9	175.8	19.9	19.5
84	5765.2	6105.0	3297.0	3801.0	177.9	20.1	19.6
85	5833.5	6177.7	3367.1	3876.8	180.0	20.2	19.8
86	5901.9	6250.5	3441.7	3957.9	182.2	20.4	20.0
87	5970.2	6323.4	3521.6	4045.2	184.3	20.6	20.1
88	6038.5	6396.2	3607.7	4139.8	186.4	20.7	20.2
89	6106.9	6469.0	3701.0	4243.2	188.5	20.9	20.4
90	6175.2	6541.9	3803.2	4357.2	190.6	21.0	20.5
91	6243.6	6614.8	3916.3	4484.3	192.7	21.1	20.5
92	6312.0	6687.7	4043.2	4628.2	194.9	21.2	20.6
93	6380.4	6760.7	4187.9	4789.0	197.0	21.3	20.6
94	6448.8	6833.8	4356.7	4977.4	199.1	21.4	20.6
95	6517.2	6907.0	4559.9	5205.0	201.2	21.3	20.5

Tabla B.12 – Diseño óptimo. Caso 1: trabajo de bombeo y compresión por tren de captura (130 kPa).

130 kPa, [KW]							
[%]	[COMP]		[S1]		[BCO2]	[B1]	
	1a	1b	1a	1b	1a-1b	1a	1b
80	5901.9	6174.4	3095.0	3569.6	169.4	8.3	7.6
81	5975.3	6251.8	3154.2	3631.5	171.5	8.3	7.6
82	6048.8	6329.1	3216.4	3696.7	173.6	8.4	7.7
83	6122.3	6406.5	3282.0	3765.7	175.8	8.4	7.7
84	6195.8	6483.8	3351.3	3838.9	177.9	8.4	7.7
85	6269.3	6561.2	3424.9	3917.1	180.0	8.5	7.7
86	6342.9	6638.6	3503.5	4000.9	182.1	8.5	7.7
87	6416.5	6716.1	3587.9	4091.4	184.2	8.5	7.7
88	6490.1	6793.5	3679.1	4189.7	186.4	8.5	7.7
89	6563.8	6871.0	3778.4	4297.4	188.5	8.5	7.6
90	6637.5	6948.5	3887.7	4416.6	190.6	8.4	7.6
91	6711.2	7026.1	4009.3	4550.0	192.7	8.4	7.5
92	6784.9	7103.8	4146.5	4701.8	194.8	8.3	7.4
93	6858.7	7181.6	4304.3	4877.8	196.9	8.2	7.2
94	6932.5	7259.5	4490.1	5080.4	199.1	8.1	7.1
95	7006.2	7337.7	4716.6	5325.5	201.2	7.9	6.8

# Apéndice C

## Descripción del ciclo combinado de gas natural NGCC.

Los trabajos publicados por Godoy et al. (2010a) y Godoy et al. (2010b) se utilizan como base para representar el sistema de generación NGCC. Los modelos elaborados se integran al sistema de captura desarrollado a lo largo de la tesis (Cap. 2 a 4). Específicamente, en Godoy et al. (2010a) se describió la planta de generación por ciclo combinado seleccionada como caso de estudio, con énfasis en las características que la destacan como un sistema del estado del arte para generación eléctrica a partir de gas natural. Se detallaron brevemente los principios de funcionamiento de este tipo de sistemas; se discutió la estrategia de modelado que se utilizó para describir sus características operativas y de diseño, permitiendo relevar la performance del proyecto a través de distintos escenarios.

En el segundo trabajo (Godoy et al., 2010b) se exploraron los espacios de soluciones óptimas obtenidos al considerar, desde diferentes puntos de vista, tanto la optimización del sistema de generación como las relaciones que entre ellos existen y la forma de las funcionalidades que los vinculan.

En una primera instancia, se analizó el espacio de soluciones óptimas termodinámicas obtenido al maximizar la eficiencia térmica del sistema basada en el primer principio. Mediante un procedimiento de simple implementación y bajo costo computacional, se hallaron relaciones lineales entre aquellas variables de diseño y operativas óptimas que

---

tienen más repercusión sobre la performance del sistema desde el punto de vista práctico-industrial.

Con base en la necesidad de diseñar plantas de generación capaces de subsistir en las condiciones actuales del mercado, en segundo lugar se obtuvieron soluciones económicamente óptimas minimizando las erogaciones totales de capital y operativas del proyecto. Más aún, la evolución de las variables de decisión óptimas para distintas condiciones de mercado, también revela la existencia de relaciones con el espacio de soluciones óptimas termodinámicas, que fueron luego explotadas al proponer nuevas estrategias tendientes a simplificar la resolución del problema de optimización original.

En base a las características distintivas de los espacios termodinámico y económico de soluciones óptimas, y a las relaciones que entre ellos existen, se propuso una nueva estrategia que permitió obtener soluciones que representan estimaciones precisas de la planta de generación desde el punto de vista de su economía, incluyendo tanto variables de diseño como operativas. En este enfoque se utilizaron tanto las relaciones funcionales que describen a las variables de decisión en los distintos espacios de soluciones óptimas (y que por su misma naturaleza, condensan la información que estos contienen) como restricciones adicionales en la formulación de optimización, con el objeto de transformar a ésta última en un sistema de ecuaciones que sea capaz de abordar el diseño de plantas de generación óptimas desde el punto de vista de su economía, con un bajo error de estimación y reduciendo drásticamente el costo computacional.

A continuación se listan las principales restricciones técnicas consideradas en los trabajos citados y cuyo modelo se integra al modelo de la planta de captura.

- Diferencias mínimas y máximas de temperatura (5 K y 15 K, respectivamente) para evitar la evaporación de agua en los economizadores y evitar también el shock térmico a la entrada de los evaporadores.
  - Diferencias mínimas y máximas de temperatura, para asegurar valores razonables de áreas de transferencia en el HRSG.
  - Niveles máximos de presión de vapor para cada nivel operativo de presión en el HRSG
-

(110 atm para alta presión, 18.3 atm para presiones intermedias, 6.1 atm para bajas presiones, 3.1 atm para el deaerador), asegurando la operación dentro de parámetros normales.

- Presión operativa mínima en el condensador (0.05 atm), definida por la temperatura mínima de agua de enfriamiento.
  - Temperatura máxima del gas a la entrada del HRSG (900 K), para prevenir el deterioro de los materiales.
  - Mínima presión en la descarga del HRSG (1.005 atm), para asegurar la operación dentro de parámetros normales.
  - Mínima temperatura de gas en la descarga del HRSG (360 K), para prevenir la corrosión promovida por la condensación de agua.
  - Temperatura máxima a la entrada de la turbina (1500 K), definida por la resistencia de los materiales.
  - Diferencia mínima de temperaturas a la salida del sobrecalentador (30 K), para asegurar la operación dentro de parámetros normales.
  - Diferencia mínima de temperatura en el condensador (4 K), para evitar un consumo excesivo del agua de enfriamiento.
  - Diferencia mínima de temperatura a la salida del regenerador (40 K), para asegurar parámetros operativos adecuados.
  - Mínima y máxima calidad de vapor en la descarga de la turbina de vapor (0.92 y 0.97, respectivamente), para lograr la operación normal de la turbina.
-

# Bibliografía

- Aboudheir, A., Tontiwachwuthikul, P., Chakma, A., Idem, R., 2003. Kinetics of the reactive absorption of carbon dioxide in high  $CO_2$ -loaded, concentrated aqueous monoethanolamine solutions. *Chemical Engineering Science* 58 (23-24), 5195–5210.
- Abu-Zahra, M., Schneiders, L., Niederer, J., Feron, P., Versteeg, G., 2007a.  $CO_2$  capture from power plants: Part I. A parametric study of the technical performance based on monoethanolamine. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 1 (1), 37–46.
- Abu-Zahra, M. R., Niederer, J. P., Feron, P. H., Versteeg, G. F., 2007b.  $CO_2$  capture from power plants: Part II. A parametric study of the economical performance based on monoethanolamine. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 1 (2), 135–142.
- Adams, D., Davison, J., 2007. Capturing  $CO_2$ . IEA Greenhouse Gas R&D Programme.
- Alatiqi, I., Sabri, M., Bouhamra, W., Alper, E., 1994. Steady-state rate-based modelling for  $CO_2$ /amine absorption–desorption systems. *Gas Separation & Purification* 8 (1), 3–11.
- Alie, C., Backham, L., Croiset, E., Douglas, P., 2005. Simulation of  $CO_2$  capture using MEA scrubbing: a flowsheet decomposition method. *Energy Conversion and Management* 46 (3), 475–487.
- Amrollahi, Z., Ystad, P., Ertesvåg, I., Bolland, O., 2012. Optimized process configurations of post-combustion  $CO_2$  capture for natural-gas-fired power plant–power plant efficiency analysis. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 8, 1–11.
- Aronu, U., Gondal, S., Hessen, E., Haug-Warberg, T., Hartono, A., Hoff, K., Svendsen, H., 2011. Solubility of  $CO_2$  in 15, 30, 45 and 60 mass % MEA from 40 to 120 C and model

representation using the extended UNIQUAC framework. *Chemical Engineering Science* 66 (24), 6393–6406.

Aroonwilas, A., Veawab, A., 2007. Integration of  $CO_2$  capture unit using single-and blended- amines into supercritical coal-fired power plants: Implications for emission and energy management. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 1 (2), 143–150.

Asprion, N., 2006. Nonequilibrium rate-based simulation of reactive systems: Simulation model, heat transfer, and influence of film discretization. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 45 (6), 2054–2069.

Austgen, D., Rochelle, G., Peng, X., Chen, C., 1989. Model of vapor-liquid equilibria for aqueous acid gas-alkanolamine systems using the electrolyte-NRTL equation. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 28 (7), 1060–1073.

Ba-Shammakh, M., Elkamel, A., Douglas, P., Croiset, E., 2007. A mixed-integer non-linear programming model for  $CO_2$  emission reduction in the power generation sector. *International Journal of Environment and Pollution* 29 (1), 254–273.

Bedell, S., 2011. Amine autoxidation in flue gas  $CO_2$  capture—mechanistic lessons learned from other gas treating processes. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 5 (1), 1–6.

Bello, A., Idem, R., 2006. Comprehensive study of the kinetics of the oxidative degradation of  $CO_2$  loaded and concentrated aqueous monoethanolamine (MEA) with and without sodium metavanadate during  $CO_2$  absorption from flue gases. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 45 (8), 2569–2579.

Bernier, E., Maréchal, F., Samson, R., 2010. Multi-objective design optimization of a natural gas-combined cycle with carbon dioxide capture in a life cycle perspective. *Energy* 35 (2), 1121–1128.

Bernier, E., Maréchal, F., Samson, R., 2012. Optimal greenhouse gas emissions in NGCC plants integrating life cycle assessment. *Energy* 37 (1), 639–648.

---

- Botero, C., Finkenrath, M., Bartlett, M., Chu, R., Choi, G., Chinn, D., 2009. Redesign, optimization, and economic evaluation of a natural gas combined cycle with the best integrated technology  $CO_2$  capture. *Energy Procedia* 1 (1), 3835–3842.
- Bravo, J., Fair, J., 1982. Generalized correlation for mass transfer in packed distillation columns. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development* 21 (1), 162–170.
- Chapel, D., Mariz, C., Ernest, J., 1999. Recovery of  $CO_2$  from flue gases: commercial trends. Aliso Viejo.
- Cifre, P., Brechtel, K., Hoch, S., García, H., Asprion, N., Hasse, H., Scheffknecht, G., 2009. Integration of a chemical process model in a power plant modelling tool for the simulation of an amine based  $CO_2$  scrubber. *Fuel* 88 (12), 2481–2488.
- Cohen, S., Rochelle, G., Webber, M., 2011. Optimal operation of flexible post-combustion  $CO_2$  capture in response to volatile electricity prices. *Energy Procedia* 4, 2604–2611.
- Cottrell, A., McGregor, J., Jansen, J., Artanto, Y., Dave, N., Morgan, S., Pearson, P., Attalla, M., Wardhaugh, L., Yu, H., et al., 2009. Post-combustion capture R&D and pilot plant operation in Australia. *Energy Procedia* 1 (1), 1003–1010.
- Danckwerts, P., 1951. Significance of liquid-film coefficients in gas absorption. *Industrial & Engineering Chemistry* 43 (6), 1460–1467.
- Doraiswamy, L., Sharma, M., 1984. Heterogeneous reactions: Analysis examples and reactor design. Vol. 1: Gas solid and solid-solid reactions. John Wiley and Sons, New York, NY.
- Duan, L., Zhao, M., Yang, Y., 2012. Integration and optimization study on the coal-fired power plant with  $CO_2$  capture using MEA. *Energy*.
- Dugas, R., 2006. Pilot plant study of carbon dioxide capture by aqueous monoethanolamine. Ph.D. thesis, University of Texas at Austin.
-

- Faramarzi, L., Kontogeorgis, G., Michelsen, M., Thomsen, K., Stenby, E., 2010. Absorber model for  $CO_2$  capture by monoethanolamine. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 49 (8), 3751–3759.
- Faramarzi, L., Kontogeorgis, G., Thomsen, K., Stenby, E., 2009. Thermodynamic modeling of the solubility of  $CO_2$  in aqueous alkanolamine solutions using the extended UNIQUAC model application to monoethanolamine and methyldiethanolamine. *Energy Procedia* 1 (1), 861–867.
- FETC, 1999. Combustion 2000 phase II. Federal Energy Technology Center and United Technologies Research Center Report No. DE-AC22-95PC95144–25.
- Fisher, K., Beitler, C., Rueter, C., Searcy, K., Rochelle, G., Jassim, M., 2005. Integrating MEA regeneration with  $CO_2$  compression and peaking to reduce  $CO_2$  capture costs. US Department of Energy Report No. DEFG02-04ER84111.
- Freguia, S., Rochelle, G., 2003. Modeling of  $CO_2$  capture by aqueous monoethanolamine. *AIChE Journal* 49 (7), 1676–1686.
- Galindo, P., Schäffer, A., Brechtel, K., Unterberger, S., Scheffknecht, G., 2012. Experimental research on the performance of  $CO_2$ -loaded solutions of MEA and DEA at regeneration conditions. *Fuel* 101, 2–8.
- Gáspár, J., Cormos, A., 2011. Dynamic modeling and validation of absorber and desorber columns for post-combustion  $CO_2$  capture. *Computers & Chemical Engineering* 35 (10), 2044–2052.
- Ghaemi, A., Torab-Mostaedi, M., Maragheh, M., 2011. Nonequilibrium dynamic modeling of simultaneous reactive absorption of gases. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* 42 (1), 173–179.
- GHG, I., 2002. Transmission of  $CO_2$  and energy. IEA Greenhouse Gas R&D Programme, Report PH4/6, IEA GHG.
-

- Godoy, E., Benz, S., Scenna, N., 2010a. A strategy for the economic optimization of combined cycle gas turbine power plants by taking advantage of useful thermodynamic relationships. *Applied Thermal Engineering* 31, 852–871.
- Godoy, E., Scenna, N., Benz, S., 2010b. Families of optimal thermodynamic solutions for combined cycle gas turbine (CCGT) power plants. *Applied Thermal Engineering* 30 (6-7), 569–576.
- Greer, T., 2008. Modeling and simulation of post combustion  $CO_2$  capturing. Master's thesis, Telemark University College.
- Hansen, D., 2004. Dynamic modeling of an absorption tower for the removal of carbon dioxide from exhaust gas by means of Monoethanolamine. Master's thesis, Telemark University College, Faculty of Technology, Porsgrunn, Norway.
- Henao, C., 2005. Simulación y evaluación de procesos químicos. Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín, Colombia.
- Higbie, R., 1935. The rate of absorption of a pure gas into still liquid during short periods of exposure. The University of Michigan.
- Hilliard, M., 2008. A predictive thermodynamic model for an aqueous blend of potassium carbonate, piperazine, and monoethanolamine for carbon dioxide capture from flue gas. Ph.D. thesis, The University of Texas at Austin, Austin, Texas.
- Hustad, C., 2008. Deployment of low and zero emission fossil fuel power generation in emerging niche markets. Paper GT2008-50106, ASME Turbo Expo, Berlin, Germany.
- IEA, 2011. IEA statistics:  $CO_2$  emissions from fuel combustion-highlights. International Energy Agency.
- IPCC, 2005. IPCC special report on carbon dioxide capture and storage. Prepared by working group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change.
-

- Jassim, M., Rochelle, G., 2006. Innovative absorber/stripper configurations for  $CO_2$  capture by aqueous monoethanolamine. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 45 (8), 2465–2472.
- Jordal, K., Ystad, P., Anantharaman, R., Chikukwa, A., Bolland, O., 2012. Design-point and part-load considerations for natural gas combined cycle plants with post combustion capture. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 11, 271–282.
- Karimi, M., Hillestad, M., Svendsen, H., 2011a. Capital costs and energy considerations of different alternative stripper configurations for post combustion  $CO_2$  capture. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (8), 1229.
- Karimi, M., Hillestad, M., Svendsen, H., 2011b. Investigation of the dynamic behavior of different stripper configurations for post-combustion  $CO_2$  capture. *International Journal of Greenhouse Gas Control*.
- Karimi, M., Hillestad, M., Svendsen, H., 2012. Positive and negative effects on energy consumption by interheating of stripper in  $CO_2$  capture plant. *Energy Procedia* 23, 15–22.
- Khakdaman, H., Zoghi, A., Abedinzadegan, M., H.A., G., 2008. Revamping of gas refineries using amine blends. *IUST International Journal of Engineering Science* 19 (3), 27–32.
- Khalilpour, R., Abbas, A., 2011. HEN optimization for efficient retrofitting of coal-fired power plants with post-combustion carbon capture. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 5 (2), 189–199.
- Kim, I., Svendsen, H., 2011. Comparative study of the heats of absorption of post-combustion  $CO_2$  absorbents. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 5 (3), 390–395.
- Kister, H., 1992. *Distillation operations*. McGraw-Hill Professional, USA.
- Kucka, L., Kenig, E., Górak, A., 2002. Kinetics of the gas-liquid reaction between carbon
-

- dioxide and hydroxide ions. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 41 (24), 5952–5957.
- Kucka, L., Müller, I., Kenig, E., Górak, A., 2003a. On the modelling and simulation of sour gas absorption by aqueous amine solutions. *Chemical Engineering Science* 58 (16), 3571–3578.
- Kucka, L., Richter, J., Kenig, E., Gorak, A., 2003b. Determination of gas-liquid reaction kinetics with a stirred cell reactor. *Separation and Purification Technology* 31 (2), 163–175.
- Kvamsdal, H., Jakobsen, J., Hoff, K., 2009. Dynamic modeling and simulation of a  $CO_2$  absorber column for post-combustion  $CO_2$  capture. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 48 (1), 135–144.
- Kwak, N., Lee, J., Lee, I., Jang, K., Shim, J., 2012. A study of the  $CO_2$  capture pilot plant by amine absorption. *Energy*.
- Lawal, A., Wang, M., Stephenson, P., Koumpouras, G., Yeung, H., 2010. Dynamic modelling and analysis of post-combustion  $CO_2$  chemical absorption process for coal-fired power plants. *Fuel* 89 (10), 2791–2801.
- Lawal, A., Wang, M., Stephenson, P., Yeung, H., 2009a. Dynamic modeling and simulation of  $CO_2$  chemical absorption process for coal-fired power plants. *Computer Aided Chemical Engineering* 27, 1725–1730.
- Lawal, A., Wang, M., Stephenson, P., Yeung, H., 2009b. Dynamic modelling of  $CO_2$  absorption for post combustion capture in coal-fired power plants. *Fuel* 88 (12), 2455–2462.
- Le Moullec, Y., Kanniche, M., 2011. Optimization of MEA based post combustion  $CO_2$  capture process: Flowsheeting and energetic integration. *Energy Procedia* 4, 1303–1309.
- Lepaumier, H., da Silva, E., Einbu, A., Grimstvedt, A., Knudsen, J., Zahlsen, K., Svendsen,
-

- H., 2011. Comparison of MEA degradation in pilot-scale with lab-scale experiments. *Energy Procedia* 4, 1652–1659.
- Lepaumier, H., Martin, S., Picq, D., Delfort, B., Carrette, P., 2010. New amines for  $CO_2$  capture. III. Effect of alkyl chain length between amine functions on polyamines degradation. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 49 (10), 4553–4560.
- Lepaumier, H., Picq, D., Carrette, P., 2009a. Degradation study of new solvents for  $CO_2$  capture in post-combustion. *Energy Procedia* 1 (1), 893–900.
- Lepaumier, H., Picq, D., Carrette, P., 2009b. New amines for  $CO_2$  capture. I. Mechanisms of amine degradation in the presence of  $CO_2$ . *Industrial & Engineering Chemistry Research* 48 (20), 9061–9067.
- Lepaumier, H., Picq, D., Carrette, P., 2009c. New amines for  $CO_2$  capture. II. Oxidative degradation mechanisms. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 48 (20), 9068–9075.
- Leva, M., 1992. Reconsider packed-tower pressure-drop correlations. *Chemical Engineering Progress* 88 (1), 65–72.
- Liang, H., Xu, Z., Si, F., 2011. Economic analysis of amine based carbon dioxide capture system with bi-pressure stripper in supercritical coal-fired power plant. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 5, 702–709.
- Liu, Y., Zhang, L., Watanasiri, S., 1999. Representing vapor-liquid equilibrium for an aqueous MEA –  $CO_2$  system using the electrolyte nonrandom-two-liquid model. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 38 (5), 2080–2090.
- Lucquiaud, M., Gibbins, J., 2009. Retrofitting  $CO_2$  capture ready fossil plants with post-combustion capture. Part 1: requirements for supercritical pulverized coal plants using solvent-based flue gas scrubbing. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy* 223 (3), 213–226.
-

- Lucquiaud, M., Gibbins, J., 2011. On the integration of  $CO_2$  capture with coal-fired power plants: A methodology to assess and optimise solvent-based post-combustion capture systems. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (9), 1553–1571.
- Maceiras, R., Álvarez, E., Cancela, M., 2008. Effect of temperature on carbon dioxide absorption in monoethanolamine solutions. *Chemical Engineering Journal* 138 (1), 295–300.
- Mangalapally, H., Hasse, H., 2011. Pilot plant study of post-combustion carbon dioxide capture by reactive absorption: Methodology, comparison of different structured packings, and comprehensive results for monoethanolamine. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (8), 1216–1228.
- Mangalapally, H., Notz, R., Hoch, S., Asprion, N., Sieder, G., Garcia, H., Hasse, H., 2009. Pilot plant experimental studies of post combustion  $CO_2$  capture by reactive absorption with MEA and new solvents. *Energy Procedia* 1 (1), 963–970.
- Matches, 2003. Mathematics and chemistry – MATCHES. <http://www.matche.com/EquipCost/>.
- McCollum, D., Ogden, J., 2006. Techno-economic models for carbon dioxide compression, transport, and storage & correlations for estimating carbon dioxide density and viscosity. UCD-ITS-RR-06-14, Institute of Transportation Studies, University of California.
- Mindrup, E., Schneider, W., 2010. Computational comparison of the reactions of substituted amines with  $CO_2$ . *ChemSusChem* 3 (8), 931–938.
- Molinari, L., Sala, L., 2002. The selective sweetening system. *Hydrocarbon Engineering* 7 (5), 67–72.
- Möller, B., Genrup, M., Assadi, M., 2007. On the off-design of a natural gas-fired combined cycle with  $CO_2$  capture. *Energy* 32 (4), 353–359.
- Moser, P., Schmidt, S., Sieder, G., Garcia, H., Stoffregen, T., 2011. Performance of
-

- MEA in a long-term test at the post-combustion capture pilot plant in Niederaussem. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 5 (4), 620–627.
- Nuchitprasittichai, A., Cremaschi, S., 2011. Optimization of  $CO_2$  capture process with aqueous amines using response surface methodology. *Computers & Chemical Engineering* 35 (8), 1521–1531.
- Oexmann, J., Hensel, C., Kather, A., 2008. Post-combustion  $CO_2$ -capture from coal-fired power plants: Preliminary evaluation of an integrated chemical absorption process with piperazine-promoted potassium carbonate. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 2 (4), 539–552.
- Oexmann, J., Kather, A., 2010. Minimising the regeneration heat duty of post-combustion  $CO_2$  capture by wet chemical absorption: The misguided focus on low heat of absorption solvents. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 4 (1), 36–43.
- Øi, L., 2007. Aspen HYSYS simulation of  $CO_2$  removal by amine absorption from a gas based power plant. In: *Proceedings of the 48th Scandinavian Conference on Simulation and Modeling*. pp. 30–31.
- Olajire, A., 2010.  $CO_2$  capture and separation technologies for end-of-pipe applications – a review. *Energy* 35 (6), 2610–2628.
- Onda, K., Takeuchi, H., Okumoto, Y., 1968. Mass transfer coefficients between gas and liquid phases in packed columns. *Journal of Chemical Engineering of Japan* 1 (1), 56–62.
- Oyenekan, B., 2007. Modeling of strippers for  $CO_2$  capture by aqueous amines. Ph.D. thesis, The University of Texas at Austin, Austin, Texas.
- Oyenekan, B., Rochelle, G., 2007. Alternative stripper configurations for  $CO_2$  capture by aqueous amines. *AIChE Journal* 53 (12), 3144–3154.
- Oyenekan, B., Rochelle, G., 2009. Rate modeling of  $CO_2$  stripping from potassium carbonate promoted by piperazine. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 3 (2), 121–132.
-

- Panahi, M., Skogestad, S., 2011. Economically efficient operation of  $CO_2$  capturing process. Part I: Self-optimizing procedure for selecting the best controlled variables. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 50 (3), 247–253.
- Peeters, A., Faaij, A., Turkenburg, W., 2007. Techno-economic analysis of natural gas combined cycles with post-combustion  $CO_2$  absorption, including a detailed evaluation of the development potential. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 1 (4), 396–417.
- Pellegrini, G., Strube, R., Manfrida, G., 2010. Comparative study of chemical absorbents in postcombustion  $CO_2$  capture. *Energy* 35 (2), 851–857.
- Pellegrini, L., Moioli, S., Gamba, S., 2011. Energy saving in a  $CO_2$  capture plant by MEA scrubbing. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (9), 1676–1683.
- Peng, D., Robinson, D., 1976. A new two-constant equation of state. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 15 (1), 59–64.
- Perry, R., Green, D., 2004. *Perry's chemical engineers' handbook*. McGraw-Hill, New York, USA.
- Peters, M., Timmerhaus, K., West, R., 2003. *Plant design and economics for chemical engineers*. <http://www.mhhe.com/engcs/chemical/peters/data/ce.html>.
- Pfaff, I., Oexmann, J., Kather, A., 2010. Optimised integration of post-combustion  $CO_2$  capture process in greenfield power plants. *Energy* 35 (10), 4030–4041.
- Pires, J., Martins, F., Alvim-Ferraz, M., Simões, M., 2011. Recent developments on carbon capture and storage: An overview. *Chemical Engineering Research and Design*.
- Popa, A., Edwards, R., Aandi, I., 2011. Carbon capture considerations for combined cycle gas turbine. *Energy Procedia* 4, 2315–2323.
- Puxty, G., Allport, A., Attalla, M., 2009a. Vapour liquid equilibria data for a range of new carbon dioxide absorbents. *Energy Procedia* 1 (1), 941–947.
-

- Puxty, G., Rowland, R., Allport, A., Yang, Q., Bown, M., Burns, R., Maeder, M., Attalla, M., 2009b. Carbon dioxide postcombustion capture: A novel screening study of the carbon dioxide absorption performance of 76 amines. *Environmental Science & Technology* 43 (16), 6427–6433.
- Rahimpour, M., Kashkooli, A., 2004. Modeling and simulation of industrial carbon dioxide absorber using amine-promoted potash solution. *Iranian Journal of Science & Technology* 28 (B6).
- Rao, A., Rubin, E., 2002. A technical, economic, and environmental assessment of amine-based  $CO_2$  capture technology for power plant greenhouse gas control. *Environmental Science & Technology* 36 (20), 4467–4475.
- Rao, A., Rubin, E., 2006. Identifying cost-effective  $CO_2$  control levels for amine-based  $CO_2$  capture systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 45 (8), 2421–2429.
- Rao, A., Rubin, E., Keith, D., Granger Morgan, M., 2006. Evaluation of potential cost reductions from improved amine-based  $CO_2$  capture systems. *Energy Policy* 34 (18), 3765–3772.
- Reid, R., Prausnitz, J., Poling, B., 1987. *The properties of gases and liquids*. McGraw Hill Book Co., New York, NY.
- REN21, 2011. *Renewables 2011 Global status report*. Paris: REN21 Secretariat, DIANE Publishing.
- Robbins, L., 1991. Improve pressure-drop prediction with a new correlation. *Chemical Engineering Progress* 87 (5), 87–90.
- Rochelle, G., 2003. Innovative stripper configurations to reduce the energy cost of  $CO_2$  capture. In: *Second Annual Carbon Sequestration Conference*, Alexandria, VA. pp. xx–yy.
- Rodríguez, N., Mussati, S., Scenna, N., 2011. Optimization of post-combustion  $CO_2$  process
-

- using DEA-MDEA mixtures. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (9), 1763–1773.
- Romeo, L., Bolea, I., Escosa, J., 2008a. Integration of power plant and amine scrubbing to reduce  $CO_2$  capture costs. *Applied Thermal Engineering* 28 (8), 1039–1046.
- Romeo, L., Espatolero, S., Bolea, I., 2008b. Designing a supercritical steam cycle to integrate the energy requirements of  $CO_2$  amine scrubbing. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 2 (4), 563–570.
- Rosenthal, R., 2008. *GAMS: A User's Guide*. GAMS Development Corp., Washington DC, USA.
- Rubin, E., Chen, C., Rao, A., 2007. Cost and performance of fossil fuel power plants with  $CO_2$  capture and storage. *Energy Policy* 35 (9), 4444–4454.
- Sakwattanapong, R., Aroonwilas, A., Veawab, A., 2005. Behavior of reboiler heat duty for  $CO_2$  capture plants using regenerable single and blended alkanolamines. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 44 (12), 4465–4473.
- Seider, W., Seader, J., Lewin, D., 2009. *Product & process design principles: Synthesis, analysis and evaluation*. Wiley & Sons, Inc., USA.
- Sexton, A., Rochelle, G., 2009. Catalysts and inhibitors for MEA oxidation. *Energy Procedia* 1 (1), 1179–1185.
- Sexton, A., Rochelle, G., 2011. Reaction products from the oxidative degradation of monoethanolamine. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 50 (2), 667–673.
- Simmonds, M., Hurst, P., Wilkinson, M., Reddy, S., Khambaty, S., 2003. Amine based  $CO_2$  capture from gas turbines. In: *Second Annual Conference on Carbon Sequestration*. pp. 1–10.
- Simon, L., Elias, Y., Puxty, G., Artanto, Y., Hungerbuhler, K., 2011. Rate based modeling and validation of a carbon-dioxide pilot plant absorption column operating on monoethanolamine. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (9), 1684–1692.
-

- Sipöcz, N., Tobiesen, A., Assadi, M., 2011a. Integrated modelling and simulation of a 400 MW NGCC power plant with  $CO_2$  capture. *Energy Procedia* 4, 1941–1948.
- Sipöcz, N., Tobiesen, F., 2012. Natural gas combined cycle power plants with  $CO_2$  capture—opportunities to reduce cost. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 7, 98–106.
- Sipöcz, N., Tobiesen, F., Assadi, M., 2011b. The use of artificial neural network models for  $CO_2$  capture plants. *Applied Energy* 88 (7), 2368–2376.
- Strigle, R., 1987. Random packings and packed towers: Design and applications. Gulf Publishing Company, Houston, TX.
- Taylor, R., Krishna, R., Kooijman, H., 2003. Real-world modeling of distillation. *Transfer* 1000, 1.
- Tobiesen, A., Schumann-Olsen, H., 2011. Obtaining optimum operation of  $CO_2$  absorption plants. *Energy Procedia* 4, 1745–1752.
- Tobiesen, F., Juliussen, O., Svendsen, H., 2008. Experimental validation of a rigorous desorber model for  $CO_2$  post-combustion capture. *Chemical Engineering Science* 63 (10), 2641–2656.
- Tobiesen, F., Svendsen, H., 2006. Study of a modified amine-based regeneration unit. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 45 (8), 2489–2496.
- Tobiesen, F., Svendsen, H., Juliussen, O., 2007. Experimental validation of a rigorous absorber model for  $CO_2$  postcombustion capture. *AIChE* 53 (4), 846–865.
- Tontiwachwuthikul, P., Meisen, A., Lim, C., 1992.  $CO_2$  absorption by NaOH, monoethanolamine and 2-amino-2-methyl-1-propanol solutions in a packed column. *Chemical Engineering Science* 47 (2), 381–390.
- Ulrich, G., Vasudevan, P., 2006. How to estimate utility costs. *Chemical Engineering* 113 (4), 66–69.
-

- U.S. Department of Energy, 2011. U.S. Energy Information Administration. <http://www.eia.gov>.
- Van Wagener, D., Rochelle, G., 2011. Stripper configurations for  $CO_2$  capture by aqueous monoethanolamine. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (9), 1639–1646.
- Versteeg, G., Van Swaalj, W., 1988. Solubility and diffusivity of acid gases (carbon dioxide, nitrous oxide) in aqueous alkanolamine solutions. *Journal of Chemical and Engineering Data* 33 (1), 29–34.
- Wang, M., Lawal, A., Stephenson, P., Sidders, J., Ramshaw, C., 2011. Post-combustion  $CO_2$  capture with chemical absorption: A state-of-the-art review. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (9), 1609–1624.
- Whitman, W., 1923. Preliminary experimental confirmation of the two-film theory of gas absorption. *Chemical & Metallurgical Engineering* 29, 146–148.
- Wilson, I., 2004. Gas-liquid contact area of random and structured packing. Ph.D. thesis, The University of Texas at Austin.
- Yokoyama, T., 2012. Analysis of reboiler heat duty in MEA process for  $CO_2$  capture using equilibrium-staged model. *Separation and Purification Technology* 94, 97–103.
- Ystad, P., Bolland, O., Hillestad, M., 2012. NGCC and hard-coal power plant with  $CO_2$  capture based on absorption. *Energy Procedia* 23, 33–44.
- Zhang, Y., Chen, H., Chen, C., Plaza, J., Dugas, R., Rochelle, G., 2009. Rate-based process modeling study of  $CO_2$  capture with aqueous monoethanolamine solution. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 48 (20), 9233–9246.
- Zhou, S., Wang, S., Chen, C., 2012. Thermal degradation of MEA in  $CO_2$  capture with acidic impurities in flue gas. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 51 (6), 2539–2547.
-

Ziaii, S., Rochelle, G., Edgar, T., 2009. Dynamic modeling to minimize energy use for  $CO_2$  capture in power plants by aqueous monoethanolamine. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 48 (13), 6105–6111.

Ziaii, S., Rochelle, G., Edgar, T., 2011. Optimum design and control of amine scrubbing in response to electricity and  $CO_2$  prices. *Energy Procedia* 4, 1683–1690.

---