Simulación y optimización de un proceso de cogeneración de vapor y energía eléctrica incluyendo la captura de emisiones contaminantes en los gases de combustión.

CAIMI UTN – FRRo

por Néstor Hugo Rodríguez

Director Nicolás Scenna

Codirector: Sergio Mussati

Índice de la Tesis

Capítulo I	1
I. INTRODUCCION. LA PROBLEMÁTICA DE LOS GASES DE	
EFECTO INVERNADERO	1
II. LOS BONOS DE CARBONO Y EL PROTOCOLO DE KYOTO	7
II.1 El mercado de los bonos de emisión	9
II.1.1 Amenazas al sistema o mercado de Bonos de emisión	15
II.1.2 El precio de los bonos de carbono	16
II. 2 El Mercado de Carbono en algunos países de América	17
II.2.1 Argentina	18
II.2.2 Estados Unidos	20
II.2.3 Chile	21
II.3. Estado actual y tendencias en el uso de los bonos	
de carbono en proyectos de generación eléctrica	21
II. PROCESOS DE GENERACIÓN DE ENERGÍA	
ELECTRICA SUSTENTABLES.	24
III.1 Procesos alternativos de generación eléctrica	24
III.2 Procesos de Generación eléctrica por ciclos combinados	25
III.2.1 Cogeneración con Turbinas de Vapor.	25
III.2.2 Cogeneración con Turbina de Gas	27
III.2.3 Ciclo Combinado	27
III.2.4 Combustibles empleados en plantas de cogeneración.	28
III. 3 Procesos para la captura del CO2 en los gases	
de combustión	29
III. 3. 1 Pre-combustión	31
III. 3. 2 Post-combustión	31
III. 3. 3 Combustión con aire enriquecido	32

IV. OBJETIVOS. ALCANCES DE LA TESIS	
CAPITULO II	40
II.1 Proceso de Generación de Energía Eléctrica	41
II.1.1 Descripción general	41
II.2 Modelado del Proceso de Generación de Energía eléctrica.	43
II.2.1 El simulador HYSYS®.	44
II.2.1.1 Rasgado, particionado y Ordenamiento	47
II.2.2 Modelos y Parámetros de Equipos	54
II.2.2 .1 Modelo del Compresor de Aire	56
II.2.2 .2 Modelo de Cámara de combustión	57
II.2.2 .3 Modelo de Precalentador de aire	58
II.2.2 .4 Modelo de Turbina de Gas	60
II.2.2 .5 Modelo del Sistema de Vapor	62
II.2.2 .5.a Modelo del Recalentador	63
II.2.2 .5.b Modelo de la Caldera	64
II.2.2 .5.c Modelo del Economizador	65
II.2.2 .6 Modelo de la Turbina de Vapor	67
II.2.2 .7 Modelo del Condensador	68
II.2.2 .8 Modelo de Bomba centrífuga	70
II.2.2 .9. Modelo de Nodo Divisor	72
II.2.2 .10 Modelo de Nodo Sumador	73
II.2.2 .11 Modelo de Chimenea	74
II.3 Estimación de costos. Modelo de costos	75
II.4 OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO	79
II.4.1 El Optimizer del Hysys®	82
II.5 RESULTADOS NUMÉRICOS. DISCUSIÓN	84
II.6 CONCLUSIONES	87
ANEXO I:	90

Métodos de optimización disponibles en HYSYS	90
Método BOX	90
Método SQP	91
Método MIXTO	91
Método FLETCHER REEVES	92
Método QUASI-NEWTON	92
CAPITULO III	94
III.1. Circuito de absorción de CO2. Descripción del Proceso	94
III.2 Modelo del Sistema de absorción-regeneración	96
III.2.1 Modelo de Etapa de Equilibrio	97
III.2.1.1 Solubilidad de equilibrio- Modelo de Kent	
y Eisenberg	99
III.2.1.2 Modelo electrolítico Li-Mather:	102
La ecuación de Clegg-Pitzer	105
III.2.2 Modelo de Absorbedor	110
III.2.3 Modelo del Regenerador	112
III.2.4 Modelo de Enfriador primario	118
III.2.5 Modelo de Separador	121
III.2.6 Modelo de Intercambiador recuperador	123
III.2.7 Modelo de Inter enfriador	125
III.2.8 Modelo de Bomba de reflujo	126
III.2.9 Modelo de Deshumidificador (incluye sumador y	
knockout pot)	127
III.2.10 Modelo de Blower (compresor, enfriador)	129
III.2.11 Componentes químicos	131
III.3 Modelos de costos	132
III.4 Optimización del proceso de Captura de CO2.	134

CAPITULO IV		
IV.1 Descripción del Proceso. Modelado		
IV.2 Optimización de la planta de generación de potencia acoplada		
a un sistema de captura de dióxido de carbono mediante un		
esquema de post-combustión	151	
IV.3 Discusión de resultados. Implicancia del valor de los bonos		
de carbono	165	
IV.3.1 Bonos de Carbono	166	
CAPITULO V	172	
V.1 Conclusiones Finales de la tesis	172	
V.1.1 La estrategia de modelado	174	
V.2 Futuros trabajos	177	
V.2.1 Integración energética	177	
V2.2 Desalinización de aguas de mar por procesos Duales.		
Plantas de cogeneración acopladas a procesos de captura		
de CO2	182	
V.2.3 Nuevas herramientas informáticas	185	
V.2.4 Otras opciones para la captura de CO2	186	
Glosario	187	
Bibliografía		

CAPITULO I

Hoy en día se percibe, además de la necesidad imperiosa proclamada por los técnicos y ambientalistas, una mayor intensidad y creciente preocupación pública e institucional por la conservación y protección del medio ambiente, conllevando a la transformación de las posturas de la industria y el comercio hacia esta importante cuestión. El diseño de una planta industrial debe considerar, a partir de la ingeniería conceptual, que el diseño del sistema global contemple las descargas de excedentes gaseosos, sólidos y líquidos consideradas en las normativas ambientales vigentes, buscando además la más completa reutilización de materiales.

Organizaciones de todo tipo están intensificando sus esfuerzos por lograr y demostrar un desempeño ambiental sano mediante el control del impacto de sus actividades, productos y/o servicios, sobre el medio ambiente. Existe un acuerdo general creciente en cuanto a que resulta de sumo interés estudiar e investigar las emisiones ya sean líquidas, sólidas y/o gaseosas que se emiten al medio ambiente a través del desarrollo de herramientas apropiadas que faciliten la toma de decisión acerca de las mejores alternativas de proceso y optimizar su operación considerando en forma simultánea aspectos económicos y aquellos relacionados con la protección ambiental.

I. INTRODUCCION. LA PROBLEMÁTICA DE LOS GASES DE EFECTO INVERNADERO

El marcado cambio climático originado en un aumento de la concentración de dióxido de carbono y otros gases de efecto invernadero debido al uso de combustibles fósiles durante los últimos 2 siglos, ha provocado una concientización que lleva a la optimización creciente de los procesos existentes con vistas a la minimización de las emisiones contaminantes, o bien la búsqueda

de fuentes alternativas de energía, con el mismo objetivo. Este incremento en la producción de gases generadores del llamado efecto invernadero se debe entre muchos factores, a las actividades industriales y a una creciente demanda de energía por parte de la población. Existe un acuerdo cada vez mas consolidado, en que esta situación lleva a un incremento de la temperatura media global con desastrosas consecuencias climáticas.

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

En esta tesis se pretende analizar la problemática de la generación de energía eléctrica sustentable, es decir, minimizando los impactos ambientales y su factibilidad económica y de ciclo de vida. Para ello es importante analizar e investigar aspectos tales como los estímulos económicos existentes para viabilizar proyectos de inversión para la reducción de impacto ambiental que de otra manera resultarían inviables económicamente. En el campo de la generación de energía, el protocolo de Kyoto y los bonos de carbono se manifiestan como uno de los aspectos fundamentales en este sentido.

Por otra parte, el diseño óptimo de procesos, entendido como una tecnología relevante dentro del área de ingeniería de procesos, establece el

marco conceptual y metodológico que permite obtener las alternativas de procesos óptimas según diferentes criterios. Por último, el campo de la generación eléctrica es muy amplio. Aquí se tratará de obtener conclusiones en cierto aspecto generales, por lo que se tratará de acotar el problema a cierta clase de sistemas de generación de energía eléctrica, simplificando el tratamiento tanto en las opciones estructurales como en las metodologías operacionales. Esto es, se adoptará un tipo de combustible, una alternativa de generación convencional y paralelamente sencilla, entre otros aspectos relevantes del problema. No obstante, y como se observará en los próximos capítulos a través de algunas comparaciones con trabajos publicados en la bibliografía específica, los resultados obtenidos son representativos de la situación actual, y representan una base sólida para juzgar la factibilidad económica y las estrategias adecuadas para instrumentar políticas públicas de incentivos para la generación de "energía eléctrica ecológica o sustentable".

Un aspecto importante al hablar de costos y beneficios de todo proyecto de generación es la continua volatilidad de los precios. Por ejemplo, recientemente se ha verificado un sustancial incremento de los precios de los combustibles, que a mediados del año 2008 casi triplica el precio del año anterior. Paciera también, que un sustancial incremento de precios lleva aparejado etapas de crisis en la economía global, en particular debido a la fuerte dependencia de los factores de producción y consumo con esta variable. Esto es, la economía se torna inestable, se desacelera, y ello lleva a realizar ajustes en la producción y consumo, lo cual a su vez genera una caída violenta en los precios de los combustibles y demás materias primas básicas o commodities. Por ello, si bien los ciclos se separan tal vez décadas entre ellos, el consenso es que en el futuro seguirán existiendo, y con una frecuencia mayor. Si bien las crisis económicas (y sus efectos en los precios por ende) no pueden ser solo atribuidas al factor precio de los combustibles, resulta claro que un aumento en los precios de los combustibles contribuye a consolidar y acelerar los procesos que llevan a las fases recesivas típicas de la economía en los diversos países en particular, y de la economía global en general, como se ha visto en el año 2008.

En resumen, existirá una volatilidad de precios en los combustibles, con oscilaciones muy importantes, que implican un continuo avance a medida que la economía crece y se consolida, acompañando el desarrollo y crecimiento de los países emergentes a escala global, y correcciones de precios ante crisis importantes, para iniciar un nuevo ciclo de crecimiento. La tendencia, por lo tanto, es de crecimiento de precios sostenidos, con cierta volatilidad debido a los ciclos económicos. Nótese que el precio del barril de petróleo, luego de la reciente crisis, ha encontrado su piso en un valor que tenía anteriormente a ella, no por debajo.

Esta escalada de precios de los combustibles genera un escenario diferente, en el sentido que impulsa la investigación de nuevas fuentes y modos de operación y consumo, aunque como se ha visto, debe seguir consumiéndose combustibles fósiles para generar energía debido a la ventana de tiempo necesaria para que las demás tecnologías resulten masivas y eficientes además de económicamente viables. Además, los cálculos económicos para la viabilidad, se ensombrecen ante la incertidumbre descrita más arriba en los precios de los combustibles, ya que es harto difícil la estimación de la duración de las fases expansivas y contractivas. No obstante, dado la profundidad de la reciente caída económica, los gobiernos (por ejemplo de EEUU) han decidido instrumentar grandes planes de rescate económico para impulsar la recuperación económica, mediante el gasto público, y parte de los mismos va dirigido al impulso de alternativas energéticas más eficientes. Sin embargo, aún con éxito, estos desarrollos llevarán tiempo, varias décadas, para lograr eficiencia y el consumo masivo a escala global.

Resulta necesario entonces, que la generación de energía de ahora en adelante, sea cual fuera el escenario de precios de los combustibles, se realice en forma amigable con el medio ambiente, aún con las tecnologías actualmente

disponibles. Más aún, su reemplazo llevará tiempo, y por lo tanto, en la ventana de "transición" entre paradigmas de producción y consumo, o sea de organización u orden económico mundial, será necesario maximizar la eficiencia de los procesos y minimizar su impacto ambiental.

Algunas propuestas en el campo de la generación de energía eléctrica consisten en eficientes ciclos combinados de generación o cogeneración que minimicen la emisión de contaminantes (por ejemplo mediante el uso de oxígeno en lugar de aire) o procedan a la captura y disposición de dichos gases.

En la actualidad existen varias alternativas para la modificación de procesos térmicos de generación de energía eléctrica que tienden a minimizar las emisiones de gases invernadero. Las más simples son aquellas que utilizan sólo gas natural como combustible ya que el principal gas a tratar es el CO₂. En cambio, si el combustible es carbón, al CO₂ se le agregan otros gases productos de la combustión, como por ejemplo el SO₂ y el NO₂ (genéricamente identificados como NO_x), entre otros.

Además de los gases contaminantes que se producen al utilizar distintos combustibles debe analizarse el costo y la disponibilidad estratégica. Los combustibles gaseosos y líquidos tienen precios inestables con aumentos sostenidos en los últimos tiempos [9], en un paralelismo a lo expresado más arriba en cuanto a combustibles en general. Según el citado artículo, el carbón es el que mantiene más estable su precio en comparación con otros tomando en cuenta las últimas décadas. Sin embargo, es el que más efecto contaminante provoca al utilizárselo en la generación de energía eléctrica.

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

La Tabla I-1 muestra la diferencia entre ambos casos en los productos generados:

Tabla I-1. Combustión vs. gasificación

	Combustión	Gasificación
Carbono	CO ₂	СО
Hidrógeno	H ₂ O	H ₂
Nitrógeno	NO, NO ₂	NH ₃ , N ₂
Azufre	SO ₂ o SO ₃	H₂S, COS

- * SO₂ o SO₃ se absorben * H₂S, COS se remueven mediante álcalis.
- de los gases de chimenea fácilmente transformándolo en sulfuro y ácido sulfúrico
- * NO_x se controlan mediante quemadores de bajo NO_x o mediante catalizadores.
- * NH₃ se lava con agua. NO_x controlado mediante diluyente.
- * Grandes cantidades de cenizas y sedimentos.
- * Las cenizas se vitrifican inertizándolas.
- * El Hg puede removerse mediante carbón activado.
- * El Hg puede removerse mediante carbón activado.

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

No es de extrañar entonces que en la literatura específica existan numerosos estudios de sistemas de generación acoplados a plantas de captura de CO2, quemando carbón. En nuestro caso, y dado que nuestro país se caracteriza por la escasa disponibilidad de carbón como combustible, y que recientemente ha incrementado sustancialmente el parque de usinas termoeléctricas que consumen gas, analizaremos plantas que utilicen dicho combustible para nuestro estudio.

En muchos países existen plantas en funcionamiento que son muy poco eficientes, y que en algunos casos se pueden mejorar con modificaciones poco costosas.

Uno de los emprendimientos más importantes en cuanto a la reducción de emisión de gases de efecto invernadero es el emprendimiento de las Naciones Unidas, conocido como el protocolo de Kyoto.

II. LOS BONOS DE CARBONO Y EL PROTOCOLO DE KYOTO

El recalentamiento global constituye el problema ambiental más importante y de mayor repercusión en la industria energética y otras asociadas en el mundo, especialmente para los países altamente desarrollados. La regulación del clima de la tierra depende en gran medida de un equilibrio entre el calentamiento y el enfriamiento de su superficie, de manera tal que parte del calor producido por la energía solar se disipe en la atmósfera y parte quede retenido en una barrera de gases (vapor de agua, dióxido de carbono, metano y otros), que actúa de la misma forma que el techo de vidrio o de plástico en un invernadero. De allí el nombre de "Gases Efecto Invernadero" (GEI). Este fenómeno natural ha permitido la vida en las formas que conocemos; pero el factor humano ha alterado este equilibrio con un resultado perjudicial para los ecosistemas.

La combustión de fósiles, libera a la atmósfera 6 billones de toneladas de CO₂. Desde la Revolución Industrial las concentraciones atmosféricas de Dióxido de Carbono (CO₂) se han incrementado en un 30%, las de Oxido Nitroso (N₂O) en más del 15% y las de Metano (CH₄) se han duplicado. Asimismo, si no se adoptan las medidas apropiadas, se estima que las actuales emisiones de GEI, se duplicarán para el 2050. Estos incrementos han provocado

y provocarán una mayor retención de calor en la atmósfera y, en consecuencia, un aumento de la temperatura promedio de la tierra.

En 1992 la Conferencia de las Naciones Unidas para el Desarrollo y Medio Ambiente, luego de evaluar los informes de aproximadamente 2.500 científicos, y las reuniones multilaterales que se venían realizando desde la década del '80, decidió adoptar la Convención Marco sobre el Cambio Climático, que entró en vigencia en 1994. Posteriormente, el 11 de Diciembre de 1997, en la ciudad de Kyoto, Japón, se adoptó el llamado Protocolo de Kyoto (PK), que regula y fija obligaciones para 39 países, en su mayoría desarrollados, para disminuir sus emisiones de GEI en un promedio de 5,2%, tomando como base las emisiones del año 1990. El Protocolo preveía su entrada en vigencia al ser ratificado por 55 países que emitieran el 55% del total de las emisiones mundiales de GEI. Esto ocurrió el 17 de febrero de 2005 cuando fue ratificado por Rusia, y pese a la negativa de EEUU de apoyarlo.

Entre las alternativas para esta reducción de emisiones de GEI, el Protocolo propone los llamados Mecanismos de Desarrollo Limpio (MDL). Estos mecanismos ofrecen la posibilidad a los países desarrollados de reducir emisiones de GEI fuera de sus fronteras, financiando la producción de energía limpia en países en desarrollo. El principio imperante apunta al efecto global de estas reducciones, con independencia del lugar donde se generan. A su vez la ubicación de proyectos en países en desarrollo los hace más rentables y económicamente atractivos, dado el atraso tecnológico relativo con respecto a los países centrales.

Aún antes de la entrada en vigencia del Protocolo de Kyoto, la Comunidad Económica Europea ya venía elaborando normas y un sistema propio de reducción de Dióxido de Carbono (CO₂) llamado Emission Trade System (ETS). Este programa entró en vigencia el 1 de Enero del año 2005 y limitará las emisiones de CO₂ en los países de la Comunidad y en Noruega y Suecia. El ETS homologa los Mecanismos de Desarrollo Limpio como

metodología de reducción de emisiones y fija para el primer período de cumplimiento (2005-2007) una multa de 40 euros por cada tonelada métrica de CO₂ que supere el límite respectivo. Para el segundo período de cumplimiento (2008-2012) esta multa aumentaría a 100 euros por cada tonelada métrica de CO₂ de exceso.

Estas reglamentaciones han llevado a las grandes empresas industriales, a buscar modos más eficientes de producción y, entre otras estrategias, al traslado de plantas a regiones que no se encuentran sometidas al cumplimiento de estas normativas o a los compromisos de Kyoto.

II.1 El mercado de los bonos de emisión

Como se mencionaba, el Protocolo de Kyoto (PK) y los Acuerdos de Marrakech determinan un plan integral y coordinado donde se conjugan tanto los intereses ecológicos, como los económicos.

El PK establece un régimen de reducción de emisiones de GEI para 39 países; lo mismo sucede con el ETS respecto de los miembros de la UE, a lo que debemos agregar las políticas similares de Japón, Canadá y algunos Estados de EE. UU. La normativa interna de cada país involucrado en estas reducciones fija límites máximos de emisiones de GEI para sus respectivas industrias y otras opciones que podríamos llamar indirectas.

Una opción interesante es el financiamiento de energía limpia en países en desarrollo a través de la adquisición de Certificados de Emisiones Reducidas de Gases Efecto Invernadero (CERs).

En este camino, países como Japón, Italia, Holanda, Bélgica, Alemania, Austria y Dinamarca ya han creado fondos de inversión para Bonos de Carbono y el Banco Mundial, a través del *Prototype Carbon Fund* han iniciado operaciones por un monto de U\$S 500 millones. También podemos mencionar la Corporación Andina de Fomento (CAF), y la recientemente creada Carbonfund.Org., fundación registrada en el Estado de Delaware (EE.UU.).

Esto se traduce en que muchos gobiernos y consultores vean con avidez las posibilidades de negocios que se abren a partir de los efectos que se esperan en:

- 1.- Financiamiento de energía limpias en países que no estén obligados a reducir sus GEI teniendo como retorno los CERs. (Un CER equivale a una tonelada métrica certificada y reducida de GEI)
- 2.- Compra de CERs a industrias que hayan reducido sus GEI por iniciativas locales.
- 3.- Financiamiento de proyectos forestales destinados a actuar como sumideros de CO2.
- 4.- Pago de CERs que provengan de reducción de GEI en proyectos forestales.

Cabe señalar que dentro del PK, la energía nuclear no puede ser utilizada como Mecanismo para el Desarrollo Limpio (MDL) y que los proyectos forestales sólo pueden ser utilizados para el 1% anual de las obligaciones de reducción.

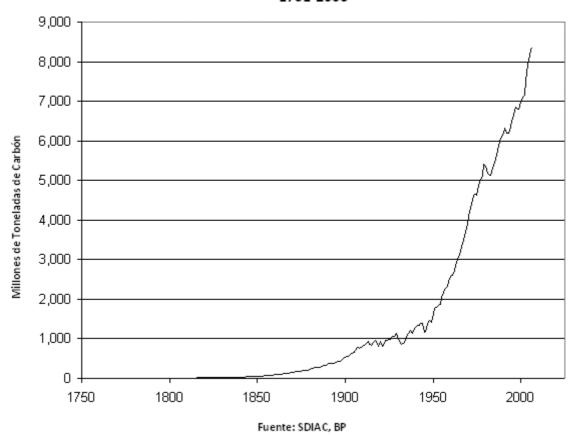
Se estima que sólo el mercado de CO₂ llegó en el 2004 a los U\$S 1.190 millones, lo que equivale a transacciones del orden de los 100 millones de toneladas métricas. De hecho esta cifra podría aumentar debido a los requerimientos de países tales como Japón, España e Italia. El informe publicado el 12 de Enero de 2004 por el *Institute for European Environmental Policy* señala que de los 15 países de la Comunidad Económica Europea sólo Alemania, Reino Unido y Suecia cumplirán la meta fijada de reducción. El resto debería adquirir por lo menos CERs equivalentes a 729 millones de toneladas.

El Protocolo de Kyoto prevé una reducción global del 5.2 por ciento de las emisiones del hemisferio norte para 2012 con respecto al nivel que había en

1990, aunque cada país tiene una cuota diferente. El mecanismo impone un esfuerzo mayor a los países industrializados, donde las emisiones de dióxido de carbono y de cinco gases nocivos más, como el metano, el óxido nitroso y otros tres fluidos industriales, han aumentado considerablemente desde 1990, no sólo en Estados Unidos (13 por ciento hasta 2002), sino en otros países como Canadá (20), Japón (12) o España (40), según Naciones Unidas (ONU). Sólo Estados Unidos emite 21 por ciento del total de dióxido de carbono que se incorpora a la atmósfera. El protocolo no obliga a los países en desarrollo, aunque sus economías sean del tamaño de las de China, India o Brasil, a reducir sus emisiones de gases contaminantes.

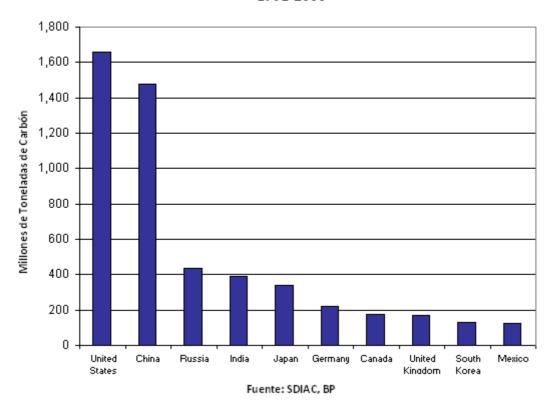
Según [2], se debe observar que dentro del Mecanismo para el Desarrollo Limpio (MDL) no todos los proyectos significan el mismo tipo de inversión, ni el mismo orden para llevarlas a cabo. Es importante determinar si la inversión necesaria en activos tangibles significa lograr una mejora directa en los medios de producción de bienes (ya sea a través de la introducción de una mejor tecnología que signifique menores costos, mayor eficiencia operativa o de vida útil de los bienes productivos), o si se trata de mejorar la calidad del proceso productivo a través de la reducción en los niveles de emisión con el objeto de lograr una mejor imagen corporativa por el esfuerzo que significa reducir emisiones y económicamente transformar este hecho en utilidades a través del empleo del MDL y lograr de esta forma los CER's (certificados de reducción de emisiones) para su venta.

Emisiones globales de CO₂ provenientes del uso de combustibles fósiles 1751-2006



Carbon Dioxide Information Analysis Center

Emisiones globales de CO₂ provenientes del uso de combustibles fósiles 1751-2006



Según el Banco Mundial, las emisiones globales de carbono son aproximadamente de 7.500 millones de toneladas por año (década del 1990). Se estima una reducción de emisiones s/PK: 420 millones de toneladas por año. La estimación de las fuentes de reducción:

Medidas domésticas: 1/3

Comercio de carbono entre países Anexo I y economías en transición: 1/3
Comercio con países en desarrollo a través del Mecanismo de Desarrollo
Limpio: 1/3

Kazuhito Yamada, experto de JICA –la agencia japonesa de cooperación internacional-, presentó en la jornada "Seminario Aspectos Legales y Financieros del Mecanismo para un Desarrollo Limpio" realizada el 27 de febrero de 2007, una estimación para el mercado. Se espera que la oferta de instrumentos para cumplir con el Protocolo de Kyoto, considerando a Rusia, alcance a 5.725 millones de t/Co₂e. El sotck disponible de Ucrania se ubica en

2.549 millones de t/Co₂e, los demás países de Europa Oriental se estiman en 2.184 millones de t/Co₂e, mientras que los CER's se estiman en 1.250 millones.

La demanda esta compuesta principalmente por 15 países de la Comunidad Europea con necesidades de cubrir una emisión extra de 1.640 millones de t/Co₂e, Canadá con 720 millones completa el cuadro junto a Japón con 710 millones de t/Co₂e. Una simple cuenta arroja como resultado que la oferta supera ampliamente a la demanda potencial (11.700 M a 3.100 M). La brecha es muy amplia, siendo que además falta agregar la demanda esperada de EEUU (aproximadamente 5.900 millones t/Co₂e).

Se espera que el mercado requiera cada vez más bonos para cubrir una demanda creciente que cubra las expectativas de crecimiento de los países industrializados, hecho que se puede comprobar con el crecimiento sostenido de la demanda que se ve reflejada en la evolución del precio en los mercados donde se comercializan. Ayuda a sostener la demanda el sistema de multas y castigos que los países han implementado para aquellas industrias que no ofrezcan los bonos necesarios, por ejemplo el sistema español [8] supone multas que superan el valor de mercado de los bonos por incumplimiento de las empresas sujetas al plan de mitigación ambiental; más aún cuando el pago de la multa sólo supone la falta de presentación en tiempo y forma, ya que no lo exime de la entrega de los certificados correspondientes (aquí se usa indistintamente el término bonos o certificados).

Un factor a tener en cuenta es el caso particular de Rusia, cuya industria del '90 era mucho mayor a la actual y muy ineficiente, por lo cual emitía una gran cantidad de GEI que hoy le dan un respaldo en permisos de contaminación muy superior al necesario para sus industrias; por lo que el excedente podría ser lanzado al mercado con resultados no medidos. Es tal la magnitud que este sobrante de permisos de la industria rusa recibe el nombre propio de "aire caliente".

II.1.1 Amenazas al sistema o mercado de Bonos de emisión

Es sabido que tanto los EE.UU., principal emisor mundial de GEI, como Australia se han negado a ratificar el Protocolo de Kyoto, a efectos de no ver reducidas sus expectativas de crecimiento económico. Esto, sumado a que dos grandes economías como son China e India que no están incluidas en el Anexo I del Protocolo de Kyoto (PK), determinan una de las principales divergencias entre las Naciones del Mundo en la lucha a favor de una economía de baja emisiones de carbono.

En cuanto a EEUU, luego de esta crisis económica del año 2008, pareciera perfilarse un gobierno que al contrario de la última década, impulse por convicción y/o por necesidad, efectivamente las acciones descritas dentro del PK.

El caso particular de China resulta más grave debido al tamaño del mercado, y su crecimiento sostenido (no confundir con sostenible, ya que luego de la crisis del 2008 muchos ponen en duda si es posible la expansión a las tasas recientes de crecimiento del PBI anual), con una matriz energética sucia en carbono y que desde hace décadas se convirtió, y se sigue consolidando, como la fábrica del mundo. Corresponde indicar que la gran divergencia que aquí se produce está dada por el hecho que mientras otras economías menores a la China deben recortar sus emisiones, ésta no debe dar cuenta de la misma —por lo cual no solo puede incrementar la emisión de GEI según los requerimientos de sus industrias- sino que cuando realiza inversiones de reconversión industrial para mejorar la eficiencia en el uso de los recursos, la misma inversión le permite presentar proyectos MDL con los que luego de aprobados solicita, certifica y obtiene CER's para vender a las Naciones con compromiso de reducción.

II.1.2 El precio de los bonos de carbono

Los bonos o certificados existentes en el mercado son variados de acuerdo a su origen, entre ellos podemos distinguir como los más usuales:

- *UCA:* (*AAU's*) corresponde a la cantidad atribuida que le corresponde a cada país de acuerdo al nivel de 1990 y reducido por las metas establecidas. Surge del siguiente cálculo: AAU=emisiones año 1990 * (1-meta) = año base * porcentaje asignado. Para el caso de Japón, sería: 1.173.360.000 t/Co2e * 0,94 = 1.102.958.400 t/CO₂ por cada año del primer período de compromiso. Estas AAU's quedan acreditadas en una cuenta de retiro en el Registro Nacional del País Anexo I que corresponda, cada año durante los cinco años que van del 2008 al 2012.
- *URE*: este tipo de certificado se obtiene como consecuencia de la participación de un país Anexo I (o sus empresas), en mecanismos de reducción de emisiones de GEI o secuestro de carbono en un país distinto al propio pero que también pertenece al Anexo I.
- *RCE*: se obtienen estos certificados cuando un país Anexo I, a través de inversiones y transferencia tecnológica, logra reducciones de emisiones de GEI en un país que siendo signatario del PK no esté incluido entre los países Anexo I. El objetivo propuesto es que mientras uno se hace de los bonos, el otro recibe a cambio inversiones y tecnología limpia que le permitan tener una economía sustentable.

Estos certificados pueden ser logrados también por empresas o países No Anexo I sin intervención de inversiones ni transferencia de tecnologías de países desarrollados, con la única meta de reducir emisiones, certificarlas y vender luego el producido.

La comercialización de los diferentes certificados se ha desarrollado principalmente en mercados OTC (Over The Counter), donde los operadores del

mismo son brokers que en algunos casos median entre las partes, y en otros directamente representan a grandes compañías que de esta forma adquieren los certificados con los cuales resuelven sus problemas por las emisiones de GEI.

La comercialización se basa en los Certificados de Emisiones Reducidas de Gases Efecto Invernadero (CERs). La unidad utilizada es 1 CER (que en caso de dióxido de carbono se corresponde a la reducción de una tonelada de dicho elemento y su valor fluctúa según las reglas del mercado específico. Se realiza a través de un contrato estandarizado que se denomina ERPA (Emissions Reduction Purchase Agreement) y cuyo modelo esta dado por la IETA (International Emissions Trade Agreement).

El precio de los bonos de carbono, está sujeto a mucha volatilidad. Esta se debe a muchos factores, y depende de la demanda, la oferta, la variación de precios del petróleo, factores políticos, entre otros. Analizando la serie histórica, se registraron valores que fluctuaron entre U\$S 3,5 y U\$S 6,5, aunque en los últimos años el precio de la tonelada de CO2 era de 10 euros, llegando a 30 euros.

Sin embargo, en 2007, el precio de la tonelada de dióxido de carbono ha pasado de 31,00 euros a 12,30 euros en menos de tres semanas. Detrás del retroceso de la cotización, según los expertos, está el exceso de derechos del primer año de funcionamiento del Régimen de Comercio de Derechos de Emisión de la Unión Europea.

II. 2 El Mercado de Carbono en algunos países de América

En esta sección solo se destacan algunos proyectos y características del mercado del CO2 en América, en particular en América Latina, específicamente analizando Argentina y Chile. Se destaca además, la tendencia en el sector de generación de energía eléctrica en EEUU.

II.2.1 Argentina

La Argentina firmó el protocolo de Kyoto en marzo de 1998 y lo ratificó en septiembre de 2001. Hoy en día la Argentina tiene un mercado poco desarrollado en proyectos MDL. La participación argentina sobre el total de proyectos MDL presentados es de aproximadamente el 2%. De ellos, de gran escala podríamos diferenciar aproximadamente el 80 %, mientras que de pequeña escala sería cerca del 15%. La mayoría se da en el sector de disposición de residuos (aproximadamente el 50%) y le sigue la industria de la energía con el 25%. Los procesos industriales en general se aproximan a un 10 %. El resto serían emisiones generales y halocarburos (6 %) y la industria metalúrgica (9 %) [2].

Los proyectos argentinos aprobados y en trámite de aprobación ante la JE-MDL tienen un fuerte componente de proyectos relacionados con los residuos sólidos urbanos, y principalmente de los grandes centros de disposición que maneja el CEAMCE. También la empresa Aluar aprobó un proyecto para la reducción de las emisiones de GEI a través de la instalación de un nuevo algoritmo en el Sistema de Control Automático en 400 cubas de Electrólisis. La implementación de este algoritmo de control de proceso se financiará a través de la venta de las reducciones certificadas de las emisiones en el contexto del Mecanismo para un Desarrollo Limpio (MDL) del Protocolo de Kyoto [3]. En este proyecto, la empresa espera recibir, en promedio, 93.939 Certificados de Reducción de Emisiones anuales.

Un proyecto importante fue el de la captura, almacenamiento y descomposición de hidrofluorocarbono 23 (HFC23) de la empresa Frío Industrias Argentinas S.A., con un potencial de calentamiento equivalente a 11.700 t/Co2e por tonelada recuperada, con un promedio anual esperado de 1.434.196 CER's.

En el campo específico de la generación eléctrica, tanto de sustitución de la materia prima de la energía entregada a la red troncal, como el cambio de tecnología para su generación son importantes. El primer caso corresponde a aquellas máquinas que reemplazan el carbón por gas, y dentro del cambio de tecnología encontramos a quienes han optado por la generación en parques eólicos como así también quienes cambiaron de ciclo abierto a ciclo combinado.

Una obra importante se dio en la central térmica Agua del Cajón, que funcionando a gas, y a través de inversiones muy importantes cambió de tecnología pasando de ciclo abierto a ciclo combinado, lo cual le permite incrementar en forma muy importante la producción eléctrica y reducir emisiones que significaban más de 480.000 Cer's anuales, aunque el proyecto no ha sido ratificado para la obtención de los certificados.

La Cooperativa local de servicios públicos de la ciudad de Comodoro Rivadavia, Provincia del Chubut, Argentina, bajo la denominación de Sociedad Cooperativa Popular Limitada de Comodoro Rivadavia (SCPLCR), estudia un proyecto de "conversión de la turbina a gas existente, de ciclo abierto a ciclo combinado en la Central Térmica Patagonia, Comodoro Rivadavia, Argentina. La actividad del proyecto convertirá las dos turbinas que actualmente funcionan en ciclo abierto, a ciclo combinado en la Central Térmica Patagonia de Energía del Sur (EDS), ubicada en Comodoro Rivadavia, Argentina. Esto implica la instalación de dos generadores de vapor por recuperación de calor (HRSG) que utilizan el calor de desecho de la turbina de gas para producir vapor. Este será usado para generar electricidad por medio de una turbina de vapor. La central consta de dos turbinas de gas (PATATG01 y PATATG02), actualmente funcionando en ciclo abierto. El proyecto producirá un aumento de la eficiencia de la central de aproximadamente 73%, lo que permitirá una generación adicional de electricidad. Para aprovechar al máximo la capacidad de la nueva turbina de vapor el proyecto también incluirá combustible suplementario (gas) en la turbina de vapor con el consecuente aumento de la combustión total de combustibles fósiles en el emplazamiento del proyecto [5].

Por último, se puede comentar otro proyecto que se encuentra certificado, que prevé instalar una unidad de generación eléctrica dentro de la planta de Aceitera General Deheza. Esta se encuentra ubicada en la localidad de General Deheza -provincia de Córdoba-, Argentina. Se utilizarán residuos de biomasa para generación de energía e intercambio con el sistema eléctrico argentino. Esto reducirá, en su proporción, la dependencia del sistema eléctrico que opera a partir de, entre otras, fuentes de combustibles fósiles y, consecuentemente, disminuirán las emisiones de gases de efecto invernadero. La planta de bioenergía usará tecnología de combustión directa en una caldera. La capacidad instalada del proyecto será de 10 MW. El combustible usado será principalmente cáscara de maní. También se empleará como combustible cáscara de girasol, desecho del proceso de extracción de aceite de la planta de Aceitera General Deheza. La electricidad generada será usada principalmente en la planta de aceite. La energía eléctrica producida reemplazará la generación del sistema.

El sistema eléctrico argentino está basado en generación hidráulica, térmica y nuclear. La producción térmica emplea gas natural, fuel oil, diesel oil, y carbón, estos últimos en cantidades crecientes. Se estima una generación anual a partir de biomasa exclusivamente de 63.359 MWh año. En base a esta hipótesis, la cantidad total de CERs que se espera obtener a lo largo de los 21 años de créditos es 585.760,9 ton CO2. La actividad de proyecto (generación eléctrica) alimentará parte de la demanda de la planta de producción de aceite. Actualmente Aceitera General Deheza toma toda su demanda eléctrica de la red [6].

II.2.2 Estados Unidos

En el sector energético, los Estados federales en EEUU han priorizado la mejora de la eficiencia, en particular las centrales de carbón y el gas natural, responsables de más del 35% de las emisiones nocivas en el país. Actualmente, 25 Estados tienen objetivos calculados y datados de consumo de energía renovable - incluido Texas-, que actualizan periódicamente. En California, por

ejemplo, los distribuidores de electricidad deberán, al 2010, obtener un 20% de la electricidad consumida de fuentes renovables. Un desafío para el sector de la energía propia, cuyo mercado anual en 2005 rozó un crecimiento de 50 %.

California estudia implementar un sistema de tope de emisiones y de permisos negociables. Ya existe un decreto que impone la reducción de las emisiones de gas de efecto invernadero a los niveles de 2000 en 2010, de 1990 en 2020, y del 80% por debajo de 1990 en 2050.

Recientemente, varios Estados firmaron la iniciativa regional para los gases de efecto invernadero, que orienta prioritariamente las centrales eléctricas y prevé un mercado de permisos negociables.

II.2.3 Chile

Los proyectos de compañías chilenas se encuentran en condiciones de vender sus reducciones de gases con efecto invernadero a las empresas internacionales, lo que representa un incremento de 34,3% si se las compara con los proyectos registrados en 2004, según estadísticas de ProChile. De acuerdo a la entidad gubernamental, Chile ya ha concretado cinco importantes transacciones y otras cinco se encuentran en "avanzado estado de negociación". Los proyectos vendidos corresponden a los rubros de energía renovable (hidroeléctrico), recuperación de metano y cambio de combustible.

Por sector, según las estadísticas de ProChile, los grandes proyectos en carpeta son los hidroeléctricos (28 %), seguidos por la captura de metano con 24%, la biomasa con 18% y la forestación con 11%.

II.3. Estado actual y tendencias en el uso de los bonos de carbono en proyectos de generación eléctrica

Es posible concluir que el mercado de bonos de carbono, si bien incipiente, se caracteriza por ser vigoroso y consolidado. Existen en los países de América del Sur una experiencia importante en desarrollo de proyectos.

Es necesario también destacar la volatilidad de los precios, lo cual no resulta conveniente a la hora de los cálculos de viabilidad de las inversiones proyectadas. También es crítica la estabilidad de la normativa y las voluntades de los estados de potenciar los compromisos asumidos.

Con respecto al área de generación termoeléctrica, es importante el número de proyectos que se han desarrollado, o bien en estudio. En general, se trata de emprendimientos destinados a disminuir la emisión de CO₂ por medio de modificaciones a plantas de producción de energía reemplazando subsistemas ineficientes por otros más eficientes. Por ejemplo el cambio de sistema de combustión, produciendo de esta manera menos CO₂. Esto es comprensible, ya que es la inversión menor que logra un importante impacto en la reducción de las emisiones. También podríamos mencionar aquí cambios en los sistemas existentes reemplazando calderas, hornos, turbinas por ciclos combinados, etc. Aquí la inversión es mayor, y resulta viable cuando la primera fase de cambios ha sido ya finalizada. Existe también la posibilidad de estudiar todo el sistema de generación eléctrica en su conjunto, de forma tal de optimizar los cambios introducidos en cada nodo de generación, distribución, en forma óptima.

Resulta obvio que si se pretende mayores reducciones, la próxima fase es introducir mayores cambios en el proceso de generación, recurriendo a la captura de CO₂ directamente en el proceso de generación eléctrica. Esto implica ya una nueva etapa u "ola" de cambios tecnológicos con un diseño radicalmente diferente de las plantas de producción de energía eléctrica. Por supuesto, esto implica aumentar sustancialmente la magnitud de las inversiones, según se cuantificará en los próximos capítulos. Es este estadio el que no se ha alcanzado todavía, pero existen numerosas investigaciones internacionales para lograr reducir el costo de tales procesos de captura de gases de efecto invernadero, ya que se torna inevitable en el futuro cercano la implementación de procesos de generación termoeléctrica con captura, si se pretende lograr las metas de emisión propuestas oportunamente en el PK en forma sostenida en las próximas décadas.

Por último, si bien la volatilidad en el precio de bonos de carbono ya existía antes de la crisis económica del 2008, puede concluirse que ante la fase de depresión económica se acentuará la tendencia. Con respecto a este punto, y en función de la crisis global económica y financiera, es pensable una retracción importante del producto bruto global en el año 2009 y el siguiente. Esto es, las estadísticas y tendencias comentadas en los puntos anteriores, pueden verse momentáneamente discontinuadas por tal acontecimiento, y los valores estimados de emisiones (proporcionales a la producción y actividad económica en general), se verán marcadamente disminuidas, por lo que los precios de los bonos de carbono recibirán el impacto negativo. No obstante, y como se ha expresado en puntos anteriores, la tendencia de la producción global, al igual que los precios de los combustibles, superadas las fases recesivas, es al crecimiento a largo plazo, por lo que el precio de los bonos de carbono, aún con altibajos, se espera creciente superada la etapa depresiva actual del mercado global. Por otra parte, la necesidad de impulsar desde los distintos gobiernos un nuevo orden o paradigma de políticas económicas y de supervisión pública, y el compromiso asumido por la nueva administración de EEUU ante la crisis, permiten vislumbrar un impulso concreto con respecto al PK, y también, en la asignación de fondos públicos para el desarrollo de proyectos que impacten benéficamente en el medio ambiente.

Resumiendo, se espera que la tendencia a desarrollar proyectos de inversión que utilicen los beneficios que brinda la legislación vigente a través de los bonos de carbono, o bien cualquier sustituto a la misma, se incremente en el futuro, y en particular, en el mercado de generación de energía termoeléctrica.

En esta tesis se estudiaran procesos de generación de energía con captura de CO₂ utilizando gas natural como combustible. Se explorará la influencia de considerar en la función objetivo de minimización de costos, el beneficio potencial del ingreso por ventas de certificados de carbono.

III. PROCESOS DE GENERACIÓN DE ENERGÍA ELECTRICA SUSTENTABLES.

III.1 Procesos alternativos de generación eléctrica

Existe una gran variedad de plantas de generación de energía eléctrica. Por ejemplo, en industrias petroquímicas están generalmente acopladas con las necesidades de energía térmica del proceso, por lo que existe un sistema de generación de vapor que por lo general tiene tres niveles de presión. Además, existen necesidades de consumo de potencia, que entre otras alternativas, pueden satisfacerse por medio de turbinas de vapor. Esto hace que el sistema integre la generación de potencia mecánica y también eléctrica, por medio de turbinas de vapor, según las necesidades del complejo. Obviamente, dado un sistema tal, existen numerosas oportunidades de optimización del proceso, según sean los objetivos, los alcances del modelo planteado, etc. No debe extrañar la gran cantidad de publicaciones existentes al respecto en la bibliografía científica.

A este sistema, puede también introducirse la opción de integrar una turbina de gas, como así también considerar o no rigurosamente el diseño de los hornos/calderas en los cuales se genera vapor, entre otras numerosas alternativas. Obviamente, el modelo será cada vez más complejo.

Considérese ahora la captura del CO₂ producido en el proceso. La integración de este nuevo subproceso, dentro de la estructura (en realidad superestructura que contiene numerosas alternativas) agrega un grado de complejidad tal, que es de muy difícil abordaje. Esto también puede verificarse fácilmente ante una búsqueda bibliográfica: no existen trabajos que utilicen modelos rigurosos para la selección óptima de una estructura contemplando la gran variedad de alternativas existentes, cuando se plantea la generación de energía eléctrica en un sentido amplio como el indicado, y la captura simultánea de CO₂. Existen, no obstante, cientos de trabajos publicados que enfocan el problema de sistemas específicos de generación (termoeléctrica por ejemplo), al cual se les acopla el proceso de captura de CO₂. Se procede a la simulación para

estimar costos y rara vez a la optimización algorítmica.

Dentro de este contexto, en esta tesis se abordarán procesos de generación de energía termoeléctrica, y dentro de ellos, aquellos basados en ciclos combinados, con captura simultánea de CO2, a los efectos de acotar el problema de diseño. Y además, para tener una base concreta que permita analizar los resultados obtenidos, con cierta generalidad. Más aún, dada la tendencia de los últimos años, se puede considerar a los ciclos de cogeneración quemando gas natural como representativos de una opción convenientemente utilizada en nuestro país.

III.2 Procesos de Generación eléctrica por ciclos combinados

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

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

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

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

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

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

A continuación se describen brevemente cada uno de los sistemas.

III.2 .1 Cogeneración con Turbinas de Vapor.

En este sistema la energía mecánica se produce por la turbina mediante la expansión del vapor de alta presión, generado en una caldera convencional. Bajo este sistema la generación de energía eléctrica por unidad de combustible es menor que en la turbina de gas (generalmente del orden de 15%), aunque la eficiencia global del sistema es más alta (del 85 al 90%) que en la turbina de gas ya que produce energía térmica del orden del 75%.

Las turbinas de vapor se dividen en tres tipos: a contrapresión, a extracción y a condensación.

En las turbinas de contrapresión su principal característica es que el vapor, cuando sale de la turbina se envía directamente al proceso integrado sin necesidad de contar con un condensador y equipo periférico, como por ej. una torre de enfriamiento.

En la turbina de extracción/condensación, una parte del vapor puede extraerse en uno o varios puntos de la turbina antes de la salida al condensador, obteniendo así, vapor de proceso a varias presiones, mientras que el resto del

vapor se expande hasta la salida del condensador.

En las turbinas de condensación, la salida de vapor expandido en la turbina pasa al condensador a una presión normalmente inferior a la presión atmosférica.

Estos sistemas se aplican principalmente en aquellas instalaciones en las que la necesidad de energía térmica respecto a la eléctrica es de 4 a 1 o mayor.

III.2.2 Cogeneración con Turbina de Gas

En este sistema el combustible es quemado en una cámara de combustión, de la cual los gases generados son introducidos a la turbina, para convertirse en energía mecánica, la que podrá ser transformada en energía eléctrica usando un alternador. Los gases de escape tienen una temperatura que va de 500 a 650° C. Estos gases son relativamente limpios y por lo tanto se pueden aplicar directamente a los procesos de combustión posteriores, ya que tienen un contenido de oxígeno de alrededor del 15% al 16%. Debido a su alta temperatura suelen ser empleados a su vez para producir otro fluido caliente como vapor, aire, o agua.

La cogeneración con turbina de gas resulta muy adecuada para los procesos en los que se requiere de una gran cantidad de energía térmica. Entre las ventajas que presenta el uso de turbinas de gas se pueden mencionar: amplia gama de capacidades, desde 500 kW hasta 265 MW, altas eficiencias de conversión de energía térmica y eléctrica, alta seguridad de operación y un costo relativo de inversión. Por otro lado, presentan las siguientes deventajas: baja eficiencia en carga parcial, vida útil relativamente baja y limitaciones en cuanto al combustible usado.

III.2.3 Ciclo Combinado

A este sistema se le caracteriza por que emplea una turbina de gas y una turbina de vapor. En este sistema los gases producidos en la combustión de la turbina de gas, se emplean para producir vapor a alta presión a través de una

caldera de recuperación, para posteriormente alimentar a la turbina de vapor, sea de contrapresión o extracción-condensación y producir por segunda vez energía eléctrica, utilizando el vapor a la salida de la turbina o de las extracciones directamente en los procesos integrados, de existir.

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

III.2.4 Combustibles empleados en plantas de cogeneración.

Los combustibles mayormente utilizados en el proceso de combustión son el carbón, gas natural y fuel-oil. Independientemente del tipo de combustible utilizado para la producción de vapor, los gases generados en la combustión deben necesariamente ser tratados para evitar la contaminación ambiental.

El gas natural es el combustible fósil con menor impacto medioambiental de todos los utilizados. A pesar de ello, los gases de combustión producto de la reacción deben ser tratados. Las consecuencias atmosféricas del uso del gas natural son menores que las de otros combustibles por las siguientes razones:

- La menor cantidad de residuos producidos en la combustión permite su uso como fuente de energía directa en los procesos productivos o en el sector terciario, evitando los procesos de transformación como los que tienen lugar en las plantas de refino del crudo.
- Menores emisiones de gases contaminantes (SO₂, CO₂, NO_x y CH₄) por unidad de energía producida.

El gas natural como cualquier otro combustible produce CO2; sin

embargo, debido a la alta proporción de hidrógeno-carbono de sus moléculas, sus emisiones son unos 40-50% menores de las del carbón y unos 25-30% menores de las del fuel-oil.

Por su parte, el carbón es la mayor fuente de combustible usada para la generación de energía eléctrica. Más de la mitad de la producción total de carbón a nivel mundial, provee actualmente cerca del 40% de la electricidad producida mundialmente. Muchos países son altamente dependientes del carbón para su electricidad.

Ciertos productos de la combustión del carbón pueden tener efectos perjudiciales sobre el medio ambiente si éstos no son tratados adecuadamente. Al quemar carbón se produce gases altamente contaminantes como por ej. CO₂, SO₂ y NO_x entre otros compuestos.

III. 3 Procesos para la captura del CO2 en los gases de combustión

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

Las tecnologías limpias de carbón se definen como "las tecnologías diseñadas para mejorar tanto la eficiencia como la tolerancia ambiental en la extracción, preparación y uso de carbón". Estas tecnologías reducen las emisiones, disminuyen pérdidas y aumentan la cantidad de energía aprovechada de cada tonelada de carbón. Entre las tecnologías limpias más utilizadas se pueden mencionar: sistemas de combustión de carbón pulverizado y combustión en lecho fluidizado (FBC). Los programas de tecnologías limpias de carbón han sido adoptados vigorosamente por muchos países, y se gastan anualmente muchos recursos financieros en el desarrollo y pruebas de estas técnicas.

La Fig. I-1 muestra en forma resumida las diferentes formas posibles de captura de CO2 a partir de combustibles fosiles. En general, se pueden considerar tres tipos de capturas: 1) pre-combustion, 2) combustion con aire enriquecido (oxi-fuel) y, 3) post-combustión.

Captura Post-combustión Captura Conversión de Energía eléctrica, de CO₂ Energía vapor ASU (Unidad separadora de aire) Combustión Oxi-fuel Combustible Fósil Conversión de Captura Almacenaje/uso Energía de CO₂ del CO₂ Descarbonización Pre-combustión Energía eléctrica/ vapor, Gasificación o CO Extracción Shift reformado de gases Hidrógeno

Figura I-1. Caminos alternativos para la recuperación del CO₂ en los procesos de conversión de energía fósil.

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

III. 3. 1 Pre-combustión

En el proceso de captura por la metodología pre-combustión, se procede a la conversión del combustible fósil en hidrógeno y CO, por medio de oxígeno, aire o vapor. El CO puede convertirse (reaccionando con vapor) en un reactor catalítico para dar CO₂ y más H2. Como se observa, debe separarse aquí también el CO₂ producido para lograr como combustible H2. Para ello debe tenerse en cuenta que la turbina de gas del ciclo combinado debe operar con este combustible. El hidrógeno deberá ser diluido con nitrógeno (N2) o vapor para controlar la temperatura de combustión. Existen pruebas para emplear hidrógeno en turbinas de gas ya existentes con pequeñas modificaciones, aunque el funcionamiento a gran escala no ha sido reportado aún.

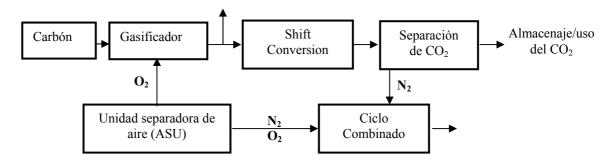


Figura I-2. Proceso de Pre-combustión. _{J2}, H₂O a la atmósfera

Un análisis de un sistema de precombustión y el diseño de algunos componentes principales, y sus características pueden verse en (Poggi, y col., 2004).

III. 3. 2 Post-combustión

La captura del CO2 de las unidades que operan con combustibles derivados del petroleo se conoce como proceso de captura en la post-combustión (como por ej. calderas y calentadores industriales). En este proceso, la

combustión se realiza con exceso de aire, resultando en corriente de gas que contiene baja concentración de CO₂ (5-20 % dependiendo del tipo de industria). El CO₂ procedente de la post-combustión puede ser capturado mediante diferentes técnicas, como la absorción con aminas, separación con membranas, separación criogénicas, entre otras (Fig. I-3) [10]

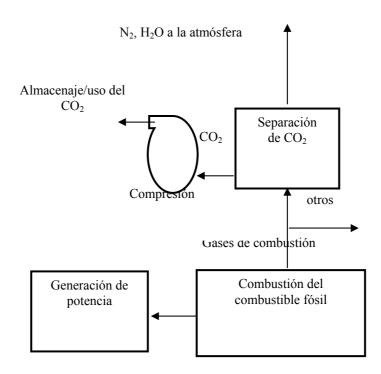


Figura I-3. Proceso de Post-combustión.

III. 3. 3 Combustión con aire enriquecido

El método de captura del CO₂ mediante la combustión con aire enriquecido es una variante del anterior. Sin embargo, la eliminación del N₂ del aire en la corriente oxidante produce altas concentraciones de la corriente del gas que puede ser fácilmente concentrado mediante simple técnicas de purificacion de gases, como la separación criogénica. Su aplicación en grandes industrias (calderas y turbinas en general) es aún un nuevo concepto, y requiere de sustancial integración y desarrollo [11].

Como mencionamos, las dos tecnologías más promisorias actualmente son la *pre y la post combustión*. En esta última, la baja concentración de CO₂ en el gas efluente de centrales térmicas determina el procesamiento posterior de grandes volúmenes de gas, que implica equipos de gran tamaño y altos costos de inversión. Además, se necesitan solventes químicos para la captura el CO₂ que luego deben regenerarse, por lo cual se consume mucha energía. Con un aumento en la concentración y/o la presión del CO₂, los equipos se reducen y se podrían utilizar otros solventes, cuya regeneración es más sencilla.

Si bien existen ventajas y desventajas en cada proceso (post o pre combustión), en la actualidad la inversión de capital necesaria entre uno y otro no es muy diferente, y el proceso post combustión es al momento actual totalmente viable tecnológicamente. Este es otro de los motivos por el cual se adopta esta metodología como objeto de estudio en esta tesis.

IV. OBJETIVOS. ALCANCES DE LA TESIS

Como se ha expresado en los puntos anteriores, en esta tesis se pretende analizar la problemática de la generación de energía eléctrica sustentable, es decir, minimizando los impactos ambientales y su factibilidad económica a largo plazo.

Dado que el campo de la generación eléctrica es muy amplio, aquí se tratará de obtener conclusiones en cierto aspecto generales, por lo que se acotará el problema a cierta clase de sistemas de generación de energía eléctrica, simplificando el tratamiento tanto en las opciones estructurales como en las metodologías operacionales. Esto es, se adoptará un tipo de combustible, una alternativa de generación termoeléctrica convencional y paralelamente sencilla, entre otros aspectos relevantes del problema.

Por otra parte, si centramos la atención en nuestro país, la mayor parte de las emisiones de CO₂ fueron originadas por la combustión de gas natural en

centrales térmicas (44%), siguiendo las industrias del cemento (16%), industria del hierro y el acero (14%) y quema de otros combustibles en refinerías (13%).

En cuanto a la generación eléctrica, hace 40 años las centrales termoeléctricas convencionales eran las dominantes. Entrada la década del ochenta, ya la generación hidroeléctrica y la nuclear tomaron relevancia. En la década del noventa, al generarse una mayor competencia, se introdujeron los ciclos combinados a gas natural, para reducir costos aumentando la eficiencia. Estos han crecido sostenidamente dentro del parque de generación nacional. Dentro de este contexto, el caso de estudio seleccionado concuerda con la actualidad de nuestro sistema de generación, siendo que la componente termoeléctrica dentro del mismo es la de mayor impacto en la generación de dióxido de carbono, y los sistemas de cogeneración quemando gas natural están en franco crecimiento dentro de dicho sector.

Como se observa, aún habiendo simplificado el espacio de alternativas según lo expresado en la sección III.1 (cogeneración y ciclos combinados a gas natural), el problema sigue siendo de dimensiones importantes, a juzgar por el espacio de alternativas a considerar. En nuestro caso se abordarán los sistemas de generación por ciclo combinados con captura de CO₂, y dentro de ellos, los descritos en la sección III.3.2 (post- combustión convencional).

Como se ha analizado, resulta importante investigar aspectos tales como los estímulos económicos existentes para viabilizar proyectos de inversión para la reducción de impacto ambiental que de otra manera resultarían inviables económicamente, dada la magnitud de las inversiones en juego. En el campo de la generación de energía, el protocolo de Kyoto y los bonos de carbono se convierten en una variable fundamental en este sentido. Dentro de este contexto, según lo descrito en la sección II, el objetivo es explorar la importancia y el impacto que pueda tener el mecanismo de adquisición de CERs en la viabilidad económica de las centrales de generación con captura de CO₂. Para ello, se deberá conocer la magnitud de las inversiones puestas en juego en el diseño de

plantas de producción de energía eléctrica teniendo en cuenta la captura del CO₂ producido. Además, se deberá obtener el diseño de manera tal de optimizar el costo de la planta bajo análisis.

Dentro de este contexto, el diseño óptimo de procesos, entendido como una herramienta relevante dentro del área de ingeniería de procesos, establece el marco conceptual y metodológico que permite obtener las alternativas de procesos óptimas según diferentes criterios.

En este sentido, se pretende utilizar las herramientas convencionales de la ingeniería de procesos para contribuir en la búsqueda de soluciones tecnológicas conducentes a la disminución de emisiones gaseosas generadas en plantas de generación de vapor y electricidad de manera tal de minimizar la contaminación del medio ambiente, y a la vez, minimizando los costos.

Se deberá entonces desarrollar herramientas computacionales para la tarea de diseño óptimo de plantas de generación de vapor y electricidad incluyendo el tratamiento de sus emisiones gaseosas. Se investigarán además, posibles estructuras que permitan optimizar el proceso, debido a las múltiples combinaciones existentes al acoplar la planta de producción de energía y la de captura de CO₂. Esto es, un paso hacia la síntesis de tales sistemas.

Los trabajos publicados en la bibliografía para el problema aquí abordado, en su mayoría, cuando se refieren a la generación de nuevos flowsheets, muestran que los resultados surgen a partir del juicio creativo del diseñador, y no en base a un procedimiento conceptual y metodológico. No se ha publicado aún una metodología para la síntesis y diseño aplicada al proceso aquí descrito que contemple tratamientos de emisiones gaseosas y que simultáneamente considere un profundo nivel de detalle e involucre una "superestructura" que incluya las potenciales configuraciones no sólo para el proceso de tratamiento integrado sino también para el proceso generador de las emisiones. El problema radica en la gran dimensión del modelo resultante, lo cual hace dificultosa su

resolución.

En este sentido, es interesante mencionar que resolver un típico problema de diseño de procesos como el que aquí nos ocupa, contemplando la síntesis del sistema, a través de técnicas de programación matemática y su posterior resolución (problemas de elevada dimensión mixto entero no lineales –MINLP-), implica un gran esfuerzo de desarrollo, típicamente de miles de horas hombres de ingeniería. La resolución con software específico, por ejemplo GAMS; implica en primer lugar el desarrollo de un modelo del proceso, lo cual es una etapa ciertamente compleja y que necesita de una experiencia muy importante por parte del modelador. Esto es, es necesario no solo el conocimiento en detalle del proceso, sino también el necesario para desarrollar modelos de optimización mixto-entera, con superestructuras que contemplen distintas variables operacionales, y además, conocer el lenguaje de programación del software en particular.

La tarea no termina aquí. La convergencia de un modelo cada vez más amplio y riguroso, con funciones fuertemente no lineales y variables binarias, con restricciones de todo tipo, hace que hallar la solución (soluciones), esto es la convergencia del problema, sea una tarea muy ardua; en particular, lograr factibilidad satisfaciendo todas las restricciones de igualdad y desigualdad, para iniciar el proceso iterativo. Además, no puede asegurarse una solución optima global, dada la característica no lineal del problema, por lo que igual debe recurrirse al análisis y juicio ingenieril de la (las) solución (es) hallada (s). Esto implica probar con numerosos puntos iniciales para lograr posibles soluciones óptimas locales, y seleccionar la mejor de ellas como una buena solución al problema en cuestión. Se plantean entonces numerosas corridas de optimización, con los problemas que describimos para cada una. No es de extrañar que en el estado del arte actual, esta tarea se encare como programas de tesis de doctorado en ingeniería para cada problema de cierta envergadura que se plantee, dada la magnitud de la tarea emprendida.

Esto esta lejos obviamente de la utilización en la industria como herramienta de diseño, más aun si lo que se pretende es obtener respuestas mas o menos rápidas ante escenarios cambiantes, como lo es la industria en general. Es esta la principal limitación a esta técnica de diseño basada en programación matemática (síntesis y/o diseño de procesos) para la resolución de problemas de diseño ingenieril. La principal ventaja, por cierto, es que dificilmente se puedan obtener mejores soluciones, siguiera una igual, utilizando otras metodologías, en cuanto al valor óptimo hallado como solución.

Como se ha expresado, en el desarrollo de esta tesis, lo que se pretende en primer lugar es obtener conclusiones en cuanto a la factibilidad de obtener procesos de generación termo-eléctrica con captura de CO₂ (utilizando métodos de captura post-combustión), basándose en un cierto proceso de cogeneración adoptado como caso de estudio, y explorando la importancia en este sentido de la utilización del mecanismo de bonos de carbono como un paliativo al costo y su factibilidad económica. Dentro de este contexto, obtener soluciones que minimicen el costo de la planta es crucial. No obstante, lo más importante resulta la comparación entre costos óptimos entre distintas variantes de operación. Por lo tanto, dentro del espacio limitado del desarrollo de tesis, y a los efectos de utilizar modelos rigurosos, se priorizará el uso de herramientas existentes, tales como simuladores de proceso, como por ejemplo HYSYS, e instrumentos de optimización de redes de recuperación de calor, como por ejemplo HX-NET, para resolver el problema de diseño y de optimización, y un eventual análisis estructural del problema de síntesis considerando integración calórica de corrientes, desechando entonces la programación matemática y el desarrollo de modelos específicos de optimización para la planta completa en un entorno específico orientado a ecuaciones (por ejemplo GAMS).

Por otro lado, la problemática de resolver el problema de la optimización estructural y operativa utilizando simuladores de procesos comerciales, y además explorar la posibilidad de la utilización de herramientas disponibles de

optimización y/o integración energética como una metodología de síntesis para obtener buenas soluciones al problema de diseño, evitando los problemas descritos más arriba, no es un problema menor, y justificaría el desarrollo de una tesis de doctorado en ingeniería solo en este sentido. Este enfoque se ha reportado en la bibliografía solo en escasos trabajos; aplicado a otros procesos en la industria química [Glavic y col. (2006); Howe y col. (2005)], (Francesconi y col. 2005)]. Sin embargo, en ellos se propone un método de trabajo para resolver un problema, no una metodología aplicable en forma general, y además, garantizando una solución óptima con las mejores características estructurales posibles.

Esta tesis, como se ha mencionado, también se limita a obtener una solución adecuada, para distintas variantes de procesos de obtención de energía termo-eléctrica con captura de CO₂ por cogeneración utilizando *post combustión*. Se analizarán los resultados obtenidos, aún cuando no se discuta profundamente el procedimiento o metodología de obtención del proceso óptimo, ni se analicen variantes que puedan aplicarse a procesos distintos, ya sean en el campo de la producción de energía eléctrica u otros. Esto es, se aplicará un método de trabajo, que se postula permitirá obtener una muy buena solución al problema bajo enfoque, aún sin discutir los alcances y bondades de la metodología empleada, ni demostrar su eficacia para hallar el óptimo para un problema general, distinto al aquí contemplado.

Dentro de este contexto, en el próximo capítulo, el Capítulo II, se obtendrá la solución del problema de optimización de la planta de cogeneración utilizando un simulador de procesos (en este caso Hysys), empleando modelos rigurosos para todos los equipos. Esto es, en lugar de desarrollar el modelo en un software de optimización, como por ejemplo GAMS, lo cual implica un tiempo de desarrollo prudencial, y una dificultad importante en la resolución del problema en cuanto a la convergencia para la obtención del óptimo (diseño óptimo) a medida que se incorporen más equipos y modelos rigurosos, por

ejemplo los de captura de CO₂; se resolverá el mismo problema, utilizando herramientas existentes (en particular, el simulador HYSYS®). El objetivo es lograr optimizar una planta generadora de electricidad de manera tal que determine sus condiciones óptimas de operación con el objetivo de satisfacer la demanda eléctrica minimizando el costo total de la planta.

En el capítulo III se desarrollará el diseño óptimo del sistema de absorción de CO₂, en forma aislada. En el Capítulo IV se integrarán ambos procesos, a los efectos de lograr la optimización del conjunto. Se analizarán los resultados obtenidos, realizando un análisis paramétrico considerando las principales variables (precio del CERs, recuperación de CO₂, potencias requeridas, entre otros). Finalmente, en el Capítulo V se desarrollarán las conclusiones finales y se describirán los futuros trabajos posibles en este campo de investigación y desarrollo. En particular, se exploran la factibilidad de una metodología de síntesis que combine en etapas sucesivas la simulación-optimización (empleando Hysys ®) con otras empleando procedimientos de diseño óptimo de redes de intercambio térmico.

CAPITULO II

Si se pretende el estudio de procesos de generación termoeléctrica ecológicos, en el sentido de acoplarlos a procesos de captura de CO₂, es necesario en principio obtener un diseño óptimo para la generación convencional, a los efectos de tener una base de costos para una posterior comparación.

La parte primordial en la planta generadora de Energía Eléctrica es el ciclo de potencia. Una de las principales opciones es la selección del combustible, ya sea por su composición como por su estado de agregación. Cada una de las opciones presenta una serie de ventajas y desventajas. Como se mencionó en al capítulo I, aquí se optará por el gas natural. Tiene éste la ventaja de utilizárselo fácilmente en estado gaseoso y disponerse a la presión que sea necesaria. Otra ventaja indiscutible es su bajo contenido de azufre por lo que no se requiere su remoción. En nuestro país además, la política de precios ha favorecido a este combustible.

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

Según se ha explicado en el capítulo anterior, aquí se toma como base una planta sencilla de cogeneración por ciclo combinado que usa como combustible gas natural.

II.1 Proceso de Generación de Energía Eléctrica:

II.1.1 Descripción general

El proceso típico de generación de potencia por ciclo combinado adoptado como base de estudio puede apreciarse en el flowsheet de la figura II-1:

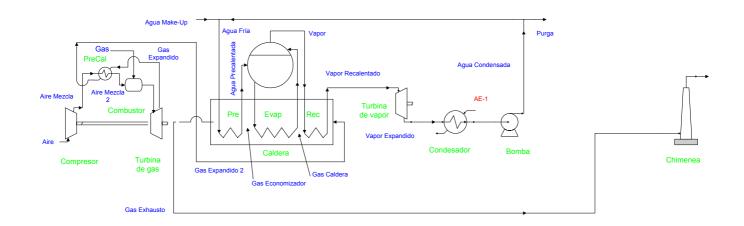


Figura II-1: Circuito de potencia- ciclo combinado

Nótese que se ha supuesto un solo nivel de presión para la generación de vapor y la utilización de la turbina de vapor. Además, la turbina de vapor expande el mismo a un nivel de presión que permita luego una potencial integración con otras corrientes de proceso en la planta de captura de CO2, es decir, una turbina de contrapresión y no de condensación.

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

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

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

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

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

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

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

II.2 Modelado del Proceso de Generación de Energía eléctrica.

La planta descrita en el apartado anterior es típica en cuanto a la cogeneración se refiere. El modelado de tales plantas ha sido ampliamente estudiado en la bibliografía, desde distintos puntos de vista. Una corriente de investigadores que desarrolla un trabajo muy importante de análisis termodinámico de la eficiencia de tales procesos, han publicado en la bibliografía especializada un modelo básico llamado "CGAM PROBLEM" [3]. En el se estudia el caso de una planta de potencia con ciclo combinado. El mismo fue tomado como modelo y punto de comparación para validar los resultados del modelo propuesto, tomándose además algunas de sus ecuaciones descriptivas de los principales equipos y la función objetivo, cuando en el simulador resultara necesario, al no disponer de módulos de equipos para el modelado de uno específico.

Como se mencionó en el capítulo I, el Hysys ® es una poderosa herramienta para la simulación y optimización de procesos químicos. Para la simulación, se hace uso de los módulos representativos de los diferentes equipos presentes en el proceso, cuando existen, mientras que se desarrollan aquellos que no se disponen en la biblioteca de módulos y forman parte de la planta a simular.

II.2.1 El simulador HYSYS®.

El Hysys® es un simulador de procesos comercial basado principalmente en la filosofía modular. Esto significa que los diferentes equipos de procesos están representados por módulos, subrutinas de resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas que tratan de emular los fenómenos que ocurren en dicha operación o equipo.

En general, cada módulo resuelve un modelo que se obtiene a partir del planteo de balances de materia, energía y en algunos casos de cantidad de movimiento. Cuando corresponde deben expresarse relaciones de equilibrio químico o de fases, al igual que todas las expresiones algebraicas que deban plantearse para la estimación de las propiedades físicoquímicas y de transporte. Estas relaciones expresadas en forma matemática implican a menudo complejos sistemas de ecuaciones no lineales que deben ser resueltos a través de métodos numéricos apropiados.

Paralelamente existen algoritmos encargados de la estimación de propiedades fisicoquímicas los cuales también, en general, deben resolverse por métodos numéricos iterativos. Esto conforma el banco de estimaciones de propiedades de transporte y fisicoquímicas del simulador.

En la concepción modular secuencial, los módulos se resuelven en el sentido de las corrientes materiales, esto es, dado como datos sus corrientes de entrada y parámetros del equipo (que cierran los grados de libertad del sistema) se calculan todas sus salidas. En estos casos no es posible calcular una entrada sabiendo las salidas y el resto de las entradas aunque el sistema tenga una solución real. Esto es debido a la forma en que se adopta la filosofía modular secuencial

En el caso particular del Hysys®, su filosofía mixta le permite realizar ambas tareas, esto es que puede calcular algunas entradas en función de sus salidas y determinados parámetros del equipo, en función de las combinaciones posibles que están disponibles en la biblioteca de módulos de equipos.

Por otra parte, existen simuladores globales u orientados ecuaciones en los cuales todos los equipos y las ecuaciones que los representan se calculan en forma simultánea. Este tipo de simuladores implica desventajas como las que el sistema a resolver se torna muy complejo, perdiéndose la relación entre variable y equipo asociado y siendo, además necesaria, una buena inicialización de las variables a iterar. Por el contrario, facilita el problema de optimización al emplear un modelo global del problema.

Los simuladores modulares solo se preocupan de resolver un modulo a la vez y por el método más eficiente. Esto implica que al agregar una función objetivo, solo algunos métodos pueden utilizarse eficientemente ya que los gradientes son difícilmente calculables, al estar las ecuaciones agrupadas implícitamente en los distintos módulos seleccionados para representar el proceso. También es difícultoso incorporar y tratar restricciones al problema de optimización, ya que las variables restringidas pueden pertenecer a distintos módulos en la biblioteca de módulos del simulador.

En general, no todos los equipos u operaciones se encuentran en la biblioteca de módulos de un simulador, siendo en ocasiones necesario para simular un proceso la asociación de varios módulos a fin de representar a un equipo determinado. En casos extremos se debe recurrir a la programación de módulos propios los que se agregan al simulador para ser conectados con aquellos existentes en la biblioteca de módulos o equipos.

En nuestro caso, un ejemplo de lo expuesto es la turbina de gas. Se sabe que está conformada de un compresor de aire, un precalentador, un combustor (en donde se quema el combustible) y de un expansor en donde los gases pierden presión y entregan su potencia mecánica a los álabes de la misma cuyo eje es solidario a un generador de energía eléctrica que entrega la potencia. Un modelo para el sistema, utilizando los módulos disponibles en Hysys ® es el siguiente:

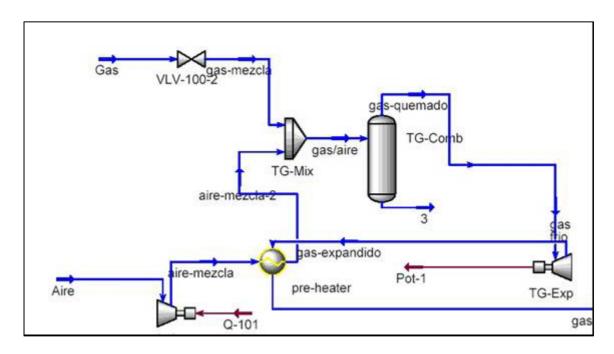


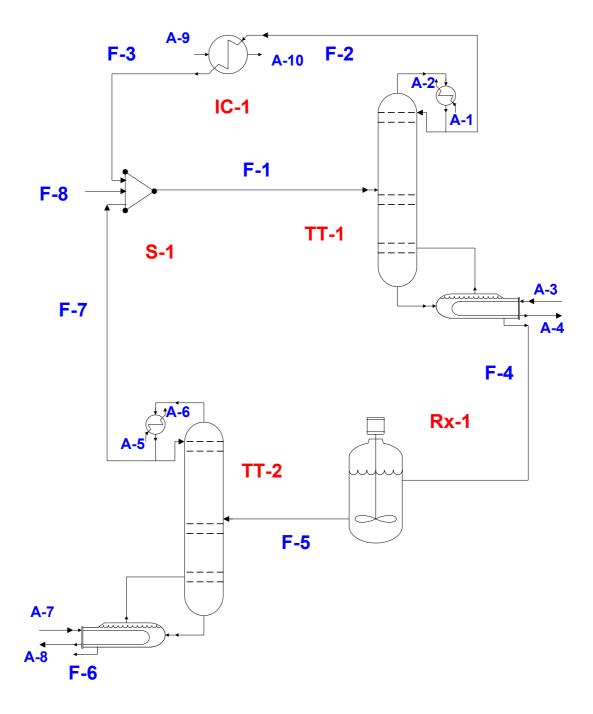
Figura V-1: módulos de simulación representando una turbina de gas.

La implementación completa del modulo de proceso de generación de energía eléctrica en el simulador puede verse en la figura V-2. Además del modelado de equipos mediantes módulos simples o la implementación unitarias de de operaciones a través operaciones de usuario, macrolenguajes o extensiones de operaciones es posible introducir objetos lógicos que facilitan la simulación de procesos. Entre estas operaciones lógicas se puede encontrar SET, ADJUST, RECYCLE y SPREADSHEET entre otras.

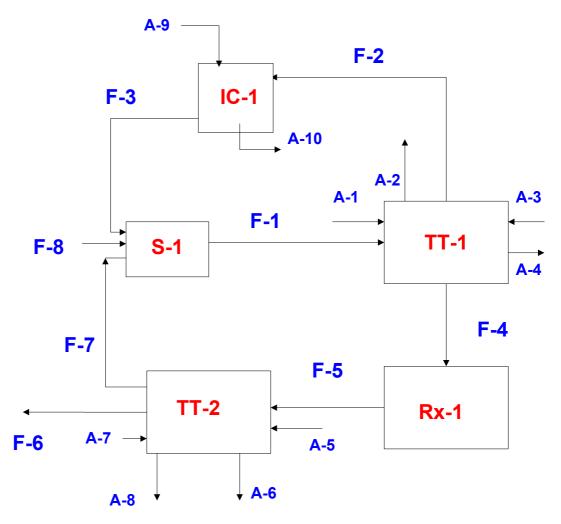
Suele ocurrir que al representar un proceso se originen ciclos en los cuales ninguno de los módulos tiene la información suficiente para ser resuelto si se aplica la filosofía modular secuencial, o bien híbrida como Hysys®. El uso de la función RECYCLE es necesario en estos casos. Mediante su aplicación se inserta un corte al ciclo lo que origina una linealización del diagrama de flujo, abriendo el ciclo y permitiendo su resolución.

II.2.1.1 Rasgado, particionado y Ordenamiento [7].

Por tratarse el Hysys® de un simulador de tipo modular enfrenta algunos inconvenientes a la hora de tratar con reciclos de información. Sea un ejemplo:



Si bien las columnas tienen reciclos, pueden considerarse como un único módulo (sub-flowsheet) y de este modo podemos reducir el flowsheet anterior en uno más sencillo:



El rasgado es la operación que permite determinar el número de ciclos presentes en el flowsheet. En el caso de ejemplo hay 2. Uno de 3 caminos de distancia y que lo forman los equipos S-1, TT-1 y el IC-1. Hay otro ciclo de 4 que lo forman S-1, TT-1, Rx-1 y TT-2.

Puesto que para resolver cada módulo en forma individual se necesita conocer todas sus entradas y que alguna de esas entradas procede de equipos que aun no están resueltos se alcanza a ver que el problema no puede resolverse en primera instancia.

Sin embargo, si asumimos (rasgamos) las entradas desconocidas y las definiéramos convenientemente (flujo, presión, temperatura y composición) podríamos resolver uno de los equipos y de este modo continuar la resolución del resto del proceso. El algoritmo equivale a la transformación de un proceso cerrado en uno abierto.

Los métodos de particionado permiten determinar el conjunto mínimo de corrientes de corte. A priori podría suponerse que se necesitarían tantas corrientes de corte como ciclos haya, pero no es así.

En nuestro ejemplo, de la aplicación de dicho método, se encuentra que para cortar los dos ciclos presentes se requiere solo una corriente de corte convenientemente seleccionada, esta es, la corriente F-1.

Asumida la/s corriente/s de corte queda determinada una cierta secuencia de resolución de módulos, es el llamado ordenamiento.

Volviendo al ejemplo: una vez definida la corriente F-1, y conocidas todas las entradas (F-8, A-1, A-3, A-5, A7 y A-9) se puede resolver el módulo TT-1 y sus corrientes de salida (A-2, A4 y F-4). Luego el módulo IC-1 (salidas A-10 y F3), el modulo Rx-1 (salida F-5). El modulo TT-2 (salidas A-6, A8, F-6 y F7) y por último el módulo S-1 (salida F-1). Aquí se ve que la salida del último módulo es la misma corriente que supusimos al comienzo. Si sus variables (flujo, presión, temperatura y composición) coinciden (con cierto margen de error) decimos que el problema está resuelto.

En caso contrario, los valores obtenidos en F-1 se emplean nuevamente para recomenzar la secuencia de cálculo ya expuesta (método de sustitución directa). Si el problema converge los valores de cada iteración se aproximarán tanto como se desee. En cambio si el problema tiende a diverger en un número máximo de iteraciones permitido (esto puede deberse a una mala inicialización de F-1, la naturaleza del problema en alguno de los módulos que no converge, o a que el problema no presenta

ninguna solución factible), será necesario suponer un nuevo valor para cada una de las corrientes de iteración.

Dentro de este contexto, dicha operación trabaja asignando valores a la corriente de corte (salida del RECYCLE) permitiendo de esta forma resolver todo el ciclo. Una vez resuelta la corriente a la que está conectado el RECYCLE (su entrada) esta operación compara los valores estimados con aquellos calculados. Si el error satisface cierto criterio de tolerancia dada se considera resuelto el ciclo, de lo contrario usa los valores recién calculados para reiniciar todo el cálculo. Repite esto hasta la convergencia teniendo en cuenta el máximo número de iteraciones permitido.

Debe destacarse que el análisis anterior supone módulos estructurados según la filosofía modular secuencial pura. Si se utilizan módulos híbridos, es decir, que pueden ser resueltos según cierta combinación de corrientes de entrada y/o salida conocidas (y no uno rígido en el cual solo se suponen conocidas las entradas), no se resuelve el problema de la necesidad de corrientes de corte, es decir, la existencia de ciclos. No obstante, se logra una relajación en cuanto a las alternativas de los sentidos de resolución de corrientes y su orientación en el grafo o diagrama de flujo, por lo que el número de corrientes iteradoras necesarias en un simulador híbrido es menor o igual al que resulta si los módulos fueran orientados según la filosofía secuencial pura.

Analizando el proceso completo para nuestra planta (el proceso de captura será descrito y analizado en el próximo capítulo), y por simplicidad suponiendo una filosofía de resolución secuencial, vemos que existen dos ciclos y por lo tanto se necesitan dos corrientes de corte. El condensado del vapor que sale de la turbina de vapor debe devolverse a la caldera ya que la misma es agua que está convenientemente tratada para evitar incrustaciones

en las superficies de intercambio. El otro reciclo es el de amina y será tratado en el capítulo siguiente.

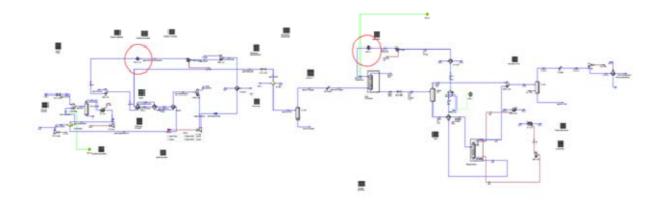


Figura V-2: Diagrama de flujo indicando los reciclos.

Otra operación lógica de gran importancia en nuestro caso es la SPREADSHEET. Mediante la misma podemos introducir las ecuaciones de costo o relacionar corrientes y valores entre las mismas. De esta manera a cada solución de la simulación se le asocia un costo total expresado en forma de "velocidad de costo". Este será función entre otras, de ciertas variables que consideramos optimizables (variables de optimización) y de ciertas relaciones de restricción que deberán ser satisfechas para que la solución sea aceptable (conjunto de soluciones factibles) según veremos más adelante.

Del punto precedente puede apreciarse que son muchas las variables de interés, sin embargo mencionaremos las de mayor importancia. De estudios en la bibliografía, y del análisis del proceso se concluye que las variables más importantes para la optimización del proceso son las siguientes:

- 1- Caudal de gas natural.
- 2- Caudal de aire.

3- Caudal del agua en el ciclo de vapor.

Estas son las principales variables operativas una vez adoptadas las presiones de operación tanto en el circuito de gases como en el de vapor. En las combustiones tradicionales el caudal de aire es importante ya que valores bajos del mismo dejarían una parte de combustible sin quemar en forma completa. Puesto que el mezclado nunca es completo y la eficiencia de combustión no llega a la unidad no se emplea en general la cantidad estequeométrica que aseguraría la combustión total sino que se entrega con un cierto exceso. Debemos notar que un importante exceso de aire aunque asegure una combustión completa redunda en una inferior temperatura de dichos gases de combustión. Finalmente, el exceso de aire implica un exceso de consumo de potencia en la compresión al aumentar el caudal de gases. Además, como se verá más adelante, cambia drásticamente la composición y caudal de gases a tratar en la planta de captura de CO₂.

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

Otras variables de interés (que conviene mantener en niveles acotados) son las temperaturas de las corrientes que intercambian calor. En el parágrafo anterior se mencionó la importancia de no permitir la

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

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

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

A continuación se detalla el modelo para cada equipo en función de los modelos disponibles y seleccionados en Hysys®.

II.2.2 Modelos y Parámetros de Equipos

La siguiente tabla lista los componentes que forman parte del sistema de cogeneración. Incluye al gas combustible (asumido como metano puro pero se agrega además hidrógeno de manera tal que el mismo proceso pueda ser aplicado a este combustible o bien al carbón gasificado que lo contiene entre sus componentes), los componentes del aire (oxígeno y

nitrógeno), y los productos finales e intermedios de la combustión (monóxido y dióxido de carbono y agua)

Ciclo de Potencia			
##	Compuesto	Formula	
1	Oxígeno	O_2	
2	Monóxido de carbono	CO	
3	Dióxido de carbono	CO_2	
4	Hidrógeno	H_2	
5	Agua	H ₂ O	
6	Metano	CH4	
7	Nitrógeno	N_2	

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

Corrientes de Entrada a la planta

"Gas"			
Variable	Valor	Unidad	
Temperatura	25	$^{\circ}\mathrm{C}$	
Presión	8.5	atm	
Flujo másico	Valor	Kg/h	
Metano	1.000	Fracción molar	

"Aire"			
Variable	Valor	Unidad	
Temperatura	25	$^{\circ}\mathrm{C}$	
Presión	1.000	atm	
Flujo másico	Valor	Kg/h	
Oxígeno	0.210	Fracción molar	
Nitrógeno	0.790	Fracción molar	

"Agua Fría"			
Variable	Valor	Unidad	
Temperatura	100.321	°C	
Presión	30.000	atm	
Flujo másico	Valor	Kg/h	
Agua	1.000	Fracción	
Agua	a de Enfri	amiento	
Variable	Valor	Unidad	
Temperatura	25	°C	
Presión	1.000	atm	
Fluio másico	Valor	Kg/h	
Agua	1.000	Fracción molar	

II.2.2 .1 Modelo del Compresor de Aire

El compresor eleva la presión del aire para introducirlo en la cámara de combustión y su esquema se muestra en la figura siguiente. Las ecuaciones que modelan al sistema son:

Hipótesis adoptadas

Aire Mezcla
$$T_{AM} - T_A \left\{ 1 + \frac{1}{\eta_{AC}} \left[\frac{P_{AM}}{P_A} \right]^{\frac{\gamma_a - 1}{\gamma_a}} - 1 \right\} = 0 \quad [1]$$

$$W_{AC} - m_a * Cp_a (T_{AM} - T_A) = 0 \quad [2]$$

$$F_{AM} - F_A = 0 \quad [3]$$

$$P_A + \Delta P_{AC} - P_{AM} = 0 \quad [4]$$

Donde:

T_A y P_A: temperatura y presión de entrada ("Aire")

T_{AM} y P_{AM}: temperatura y presión de salida ("Aire Mezcla")

 η_{AC} : eficiencia del compresor

ma: flujo de "Aire"

W_{AC}: Potencia del compresor

 γ_a : Cp/Cv del aire

Cp_a: capacidad calorífica a presión constante del aire

F_A, F_{AM}: los flujos másicos de entrada y salida

 P_{AM} , P_{A} , ΔP_{AC} : presión de entrada, salida y elevación de presión del compresor

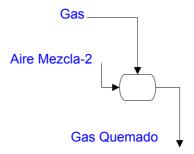
La composición de la corriente de salida es igual a la de entrada.

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

Compresor de Aire			
Variable Valor Unidad			
Eficiencia adiabática	84.680	%	
Presión de descarga	8.500	atm	

II.2.2.2 Modelo de Cámara de combustión

Se modela la combustión del combustible. En general se emplea aire en exceso. Para el caso del gas natural (tomado como metano) con aire (tomado como Nitrógeno y Oxígeno). El esquema del modelo es:



Planteadas las relaciones estequeométricas y los balances se tiene:

$$CH_4 + (0.21*n)O_2 + (0.79*n)N_2 \rightarrow$$

 $CO_2 + 2H_2O + (0.21*n - 2)O_2 + (0.79*n)N_2$

Donde *n* es la cantidad de moles de aire aspirado por mol de metano. Para el balance de energía:

$$M_{AM2} * H_{AM2} + M_{Gas} * H_{Gas} + M_{Gas} * LHV - M_{GO} * H_{GO} = 0$$
 [5]

$$F_{AM2} + F_G - F_{GO} = 0 ag{6}$$

$$P_{AM2} - P_G = 0 ag{7}$$

$$P_{AM2} - P_{GO} = 0 ag{8}$$

Donde:

 P_{AM2} , P_{G} y P_{GQ} : presión de "Aire Mezcla-2", de "Gas" y de "Gas Quemado". Se asume nula la caída de presión en el equipo.

 F_{AM2} , F_{G} y F_{GQ} : flujos másicos de "Aire Mezcla-2", de "Gas" y de "Gas Quemado".

Se deduce que no hay variación en el número de moles. La entalpía de salida se evalúa a la temperatura adiabática (T₄) de llama con la composición correspondiente a la estequeometrica. La composición deriva de las relaciones estequeométricas.

II.2.2.3 Modelo de Precalentador de aire

Tiene por objeto precalentar el aire que ingresa a la cámara de combustión aprovechando parte del calor que portan los gases que escapan de la turbina de gas. El esquema y las ecuaciones que lo modelan son:



$$Q - m_a * Cp_a * (T_{AM2} - T_{AM}) = 0$$
 [9]

$$Q - m_g * Cp_g * (T_{GE} - T_{GE2}) = 0$$
 [10]

$$Q - (IIA) \frac{(T_{GE} - T_{AM2}) - (T_{GE2} - T_{AM})}{(T_{GE} - T_{AM2})} = 0$$
 [11]

$$Q - m_g * Cp_g * (T_{GE} - T_{GE2}) = 0$$

$$Q - (UA)_{PA} \frac{(T_{GE} - T_{AM2}) - (T_{GE2} - T_{AM})}{Ln \frac{(T_{GE} - T_{AM2})}{(T_{GE2} - T_{AM})}} = 0$$
[10]

$$F_{AM2} - F_{AM} = 0 ag{12}$$

$$F_{GE2} - F_{GE} = 0 ag{13}$$

$$P_{AM2} - P_{AM} = 0 ag{14}$$

$$P_{GE\,2} - P_{GE} = 0 \tag{15}$$

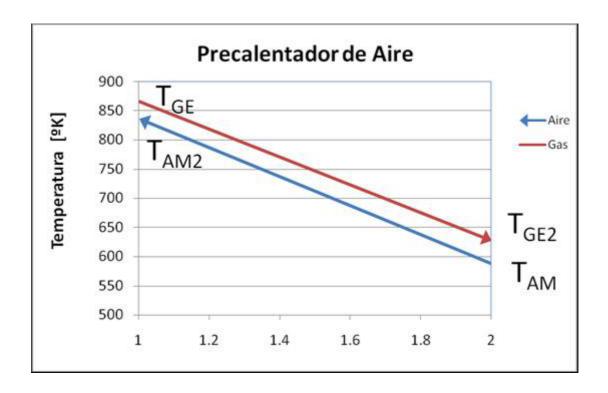
Donde:

P_{AM2}, P_{AM}: presión de "Aire Mezcla-2" y del "Aire Mezcla", se asume nula la caída de presión en el equipo.

F_{AM2}, F_{AM}: flujos másicos de "Aire Mezcla-2" y del "Aire Mezcla2.

F_{GE2}, F_{GE}: flujos másicos de "Gas Expandido-2" y del "Gas Expandido" P_{GE2}, P_{GE}: presión de "Gas Expandido-2" y del "Gas Expandido".

En la figura siguiente se muestra el diagrama de la evolución de temperaturas durante el intercambio térmico.

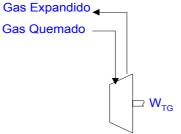


La siguiente tabla indica los valores de los parámetros adoptados para el equipo.

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

II.2.2.4 Modelo de Turbina de Gas

En este equipo se produce la transformación de la energía mecánica del trabajo de expansión de los gases provenientes del combustor en energía mecánica en el eje de la turbina. El eje de la misma es solidario de un generador eléctrico que provee una parte de la generación de potencia del sistema. El esquema que lo representa y las ecuaciones que lo modelan son:



$$T_{GE} - T_{GQ} \left\{ 1 + \frac{1}{\eta_{TG}} \left[\frac{P_{GQ}}{P_{GE}} \right]^{\frac{1 - \gamma_g}{\gamma_g}} - 1 \right\} = 0 [16]$$

$$\vec{W}_{TG} - \vec{m}_g * Cp_g (T_{GQ} - T_{GE}) = 0$$

$$F_{GQ} - F_{GE} = 0$$

$$P_{GQ} - P_{GE} - \Delta_{TG} = 0$$
[18]

Donde:

T_{GO} y P_{GO}: temperatura y presión de entrada ("Gas quemado").

T_{GE} y P_{GE}: temperatura y presión de salida ("Gas expandido").

H_{TG}: eficiencia del compresor.

M_g: flujo de gases provenientes del combustor.

W_{TG}: Potencia de la turbina de gas.

γ_g: Cp/Cv del gas.

Cpg: capacidad calorífica a presión constante del gas.

 P_{GQ} , P_{GE} , ΔP_{TG} : presión de "Gas Quemado"," Gas Expandido" y perdida de carga de la turbina.

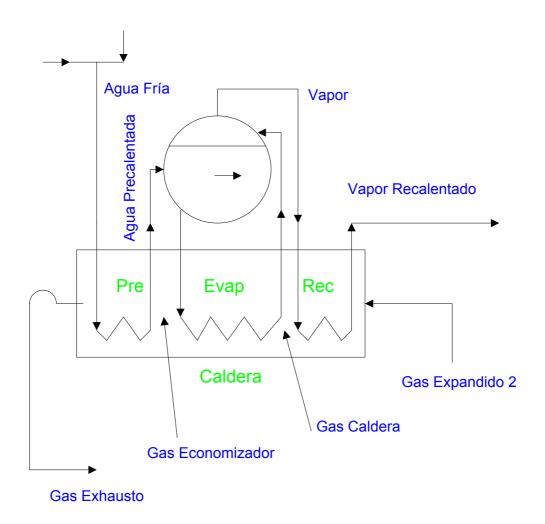
F_{GQ}, F_{GE}: flujos másicos de "Gas Quemado" y "Gas Expandido".

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

Turbina de Gas			
Variable	Valor	Unidad	
Eficiencia adiabática	87.86	%	
Presión de descarga	1.500	Atm	

II.2.2.5 Modelo del Sistema de Vapor

Este sistema, según el proceso que se adoptó en esta tesis está formado por un precalentador del agua que ingresa a la caldera, la caldera generadora de vapor propiamente dicha y el recalentador de vapor. Esto se aprecia en la figura siguiente, mientras que en la que le sigue se visualiza el perfil de temperatura en los tres equipos que conforman el sistema. En todos ellos la composición de las corrientes permanece constante por lo que las composiciones de salida se igualan a las de entrada.



II.2.2.5.a Modelo del Recalentador

Las ecuaciones que representan el comportamiento de este equipo, al ser trivial el balance de materia, resultan del balance de energía y las relaciones de transferencia calórica.

$$Q - m_g * Cp_g * (T_{GE2} - T_{GC}) = 0$$
 [20]

$$Q - m_v * Cp_v * (T_{VR} - T_V) = 0$$
 [21]

$$Q - m_{v} * Cp_{v} * (T_{VR} - T_{V}) = 0$$

$$Q - (UA)_{Rec} \frac{(T_{GC} - T_{V}) - (T_{GE} - T_{VR})}{Ln \frac{(T_{GC} - T_{V})}{(T_{CE} - T_{VR})}} = 0$$
[21]

$$F_{GE2} - F_{GC} = 0 ag{23}$$

$$F_{VR} - F_V = 0 ag{24}$$

$$P_{GE2} - P_{GC} = 0 ag{25}$$

$$P_{VR} - P_V = 0 ag{26}$$

Donde:

P_{GE2}, P_{GC}: presión de "Gas Expandido-2" y de "Gas Caldera".

P_{VR}, P_V: presión de "Vapor Recalentado" y del "Vapor". Se asume nulas las caídas de presión en el equipo.

F_{GE2}, F_{GC}: flujos másicos de "Gas Expandido-2" y de "Gas Caldera".

F_{VR}, F_V: flujos másicos de "Vapor Recalentado" y del "Vapor".

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

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

II.2.2.5.b Modelo de la Caldera

Las ecuaciones que representan el comportamiento de este equipo surgen de igual manera que el anterior.

$$Q - m_g * Cp_g * (T_{GC} - T_{GEC}) = 0$$
 [27]

$$Q - m_v * \lambda_{Vap} = 0$$
 [28]

$$Q - (UA)_{Rec} \frac{(T_{GC} - T_V) - (T_{GEC} - T_V)}{Ln \frac{(T_{GC} - T_V)}{(T_{GEC} - T_V)}} = 0$$
 [29]

$$F_{GC} - F_{GEC} = 0$$
 [30]

$$F_{APC} - F_V = 0$$
 [31]

$$P_{GC} - P_{GEC} = 0$$
 [32]

$$P_{APC} - P_V = 0$$
 [33]

Donde:

P_{GEC}, P_{GC}: presión de "Gas Economizador" y de "Gas Caldera".

P_{APC}, P_V: presión de "Agua Precalentada" y del "Vapor". Se asumen nulas las caídas de presión en el equipo.

 F_{GEC} , F_{GC} : flujos másicos de "Gas Economizador" y de "Gas Caldera".

F_{APC}, F_V: flujos másicos de "Agua Precalentada" y del "Vapor".

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

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

II.2.2.5.c Modelo del Economizador

Las ecuaciones que representan el comportamiento de este equipo surgen del planteo de los balances de materia y energía.

$$Q - m_g * Cp_g * (T_{GEc} - T_{GEx}) = 0$$
 [34]

$$Q - m_v * Cp_{aq} * (T_{APC} - T_{AF}) = 0$$
 [35]

$$Q - m_v * Cp_{aq} * (T_{APC} - T_{AF}) = 0$$
 [35]

$$Q - (UA)_{Rec} \frac{(T_{GEc} - T_{APC}) - (T_{GEx} - T_{AF})}{Ln \frac{(T_{GEc} - T_{APC})}{(T_{GEx} - T_{AE})}} = 0$$
 [36]

$$F_{GEC} - F_{GEx} = 0 ag{37}$$

$$F_{APC} - F_{AF} = 0 ag{38}$$

$$P_{GEC} - P_{GEx} = 0 ag{39}$$

$$P_{APC} - P_{AF} = 0 ag{40}$$

Donde:

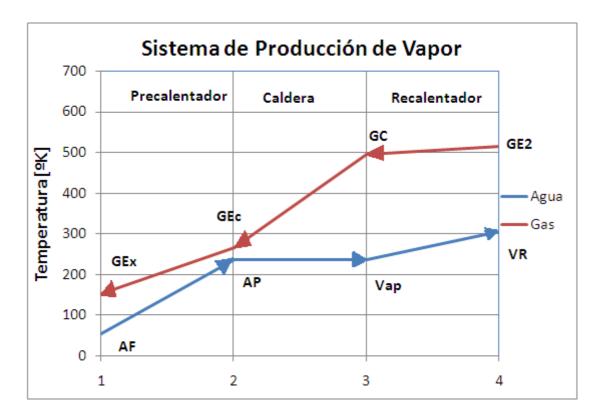
P_{GEC}, P_{GEx}: presión de "Gas Economizador" y de "Gas Expandido".

P_{APC}, P_{AF}: presión de "Agua Precalentada" y "Agua Fría". Se asumen nulas las caídas de presión en el equipo.

F_{GEC}, F_{EX}: flujos másicos de "Gas Economizador" y de "Gas Expandido".

F_{APC}, F_{AF}: flujos másicos de "Agua Precalentada" y "Agua Fría".

El perfil típico de temperaturas en el sistema de vapor se puede apreciar en la figura siguiente.

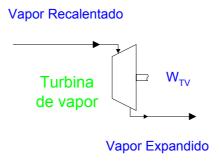


La siguiente tabla indica los valores de los parámetros adoptados para el equipo.

Economizador			
Variable	Valor	Unidad	
Caída de Presión "Gas Economizador"	0	Atm	
Caída de Presión "Agua Fría"	0	Atm	
Fracción vaporizada de "Agua Precalentada"	0	adim	
Corriente de "Gas Economizador"	Por		
Corriente de "Agua Precalentada"	Por		

II.2.2 .6 Modelo de la Turbina de Vapor

Solidario al eje de la turbina hay otro generador de electricidad que aprovecha la energía mecánica producida por la expansión del vapor generado por la caldera. La expresión es análoga a la turbina de gas por basarse en el mismo principio. En la figura siguiente se aprecia el esquema del sistema bajo análisis.



Las ecuaciones que representan su comportamiento y los balances de materia y energía son:

$$T_{VE} - T_{VR} \left\{ 1 + \frac{1}{\eta_{TV}} \left[\frac{P_{VR}}{P_{VE}} \right]^{\frac{1 - \gamma_w}{\gamma_w}} - 1 \right\} = 0$$

$$W_{TV} - \left[m_v * \left(H_v \left(T_{VR}, P_{VR} \right) - H \left(T_{VE}, P_{VE} \right) \right) \right] = 0$$
[41]

$$W_{TV} - \left[\dot{m}_{v} * (H_{v}(T_{VR}, P_{VR}) - H(T_{VE}, P_{VE})) \right] = 0$$
 [42]

$$F_{VR} - F_{VE} = 0 ag{43}$$

$$P_{VR} + \Delta P_{TV} - P_{VE} = 0 ag{44}$$

Donde:

P_{VR}, P_{VE}: presión de "Vapor Recalentado" y del "Vapor Expandido". Se asumen nulas las caídas de presión en el equipo.

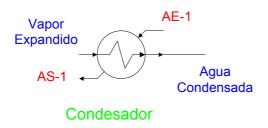
F_{VR}, F_{VE}: flujos másicos de "Vapor Recalentado" y del "Vapor Expandido".

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

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

II.2.2.7 Modelo del Condensador

El vapor expandido, una vez que abandona la turbina de vapor, se condensa mediante el uso de agua de enfriamiento para poder ser reenviado a la caldera para cerrar el ciclo del agua. El esquema de este equipo se muestra en la siguiente figura:



Las ecuaciones para este modelo surgen de los balances de materia y energía.

$$Q - [m_v * (H_V(T_{VE}) - H_L(T_{VE}))] = Q - m_v * \lambda(T_{VE}) = 0$$
 [45]

$$Q - m_{AE} * Cp_{AE} * (T_{AS} - T_{AE}) = 0$$
 [46]

$$Q - m_{AE} \cdot Cp_{AE} \cdot (T_{AS} - T_{AE}) = 0$$

$$Q - (UA)_{Rec} \frac{(T_{VE} - T_{AS}) - (T_{VE} - T_{AE})}{Ln \frac{(T_{VE} - T_{AS})}{(T_{VE} - T_{AE})}} = 0$$
[40]

$$F_{VE} - F_{AC} = 0 ag{48}$$

$$F_{AE-1} - F_{AS-1} = 0 ag{49}$$

$$P_{VE} - P_{AC} = 0 ag{50}$$

$$F_{AE-1} - F_{AS-1} = 0 ag{51}$$

Donde:

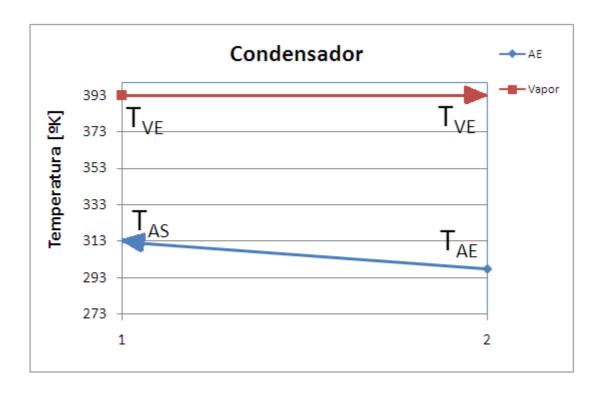
P_{AE-1}, P_{AS-1}: presión del Agua de Enfriamiento a entrada y salida.

P_{Ac}, P_{VE}: presión del "Agua Condensada" y del "Vapor Expandido". Se asumen nulas las caídas de presión en el equipo.

F_{AE-1}, F_{AS-1}: flujos másicos del Agua de Enfriamiento a entrada y salida.

F_{VR}, F_{VE}: flujos másicos de "Vapor Recalentado" y del "Vapor Expandido".

El perfil típico de temperaturas en el equipo se puede apreciar en la figura:

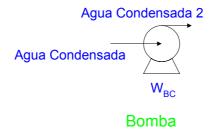


La siguiente tabla indica los valores de los parámetros adoptados para el equipo.

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

II.2.2.8 Modelo de Bomba centrífuga

En la figura se aprecia un esquema del equipo.



Las ecuaciones que involucran al modelo son:

$$W_{BC} - \frac{1}{\eta_{BC}} * q * (P_{AC2} - P_{AC}) = 0 \quad [52]$$

$$P_{AC2} - P_{AC} - \Delta P_{BC} = 0 ag{53}$$

$$F_{AC2} - F_{AC} = 0 ag{54}$$

Donde:

W_{BC}: potencia de la bomba centrífuga.

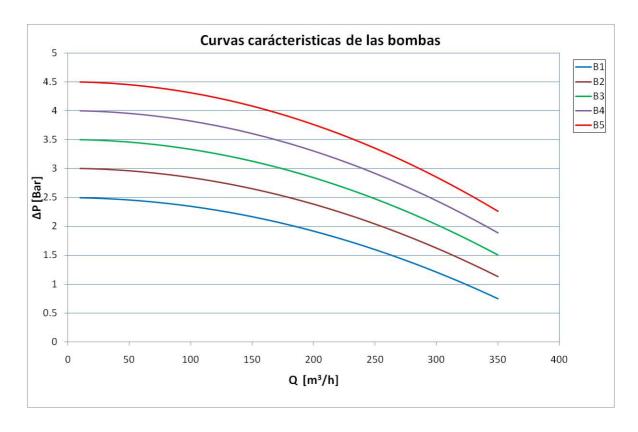
 η_{BC} : eficiencia adiabática.

q: caudal.

 P_{AC} , P_{AC2} , ΔP_{BC} : presión en "Agua Condensada", "Agua Condensada 2" y elevación de presión de la bomba.

F_{AC} ,F_{AC2}: flujos másicos en "Agua Condensada" y "Agua Condensada 2".

El comportamiento de una bomba centrífuga se puede asociar a una curva del tipo de la figura, adoptando un modelo simplificado. Aquí se expresa una relación entre la caída de presión y el caudal. En principio, se puede optar por dos modelos, uno tiene en cuenta esta relación, y el otro la ignora.

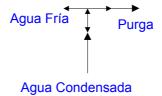


La siguiente tabla indica los valores de los parámetros adoptados para el equipo.

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

II.2.2.9. Modelo de Nodo Divisor [18]:

La corriente de agua una vez condensada y antes de enviarse nuevamente a la caldera se purga a fin de mantener acotados los niveles de sales que de otro modo se concentrarían. En la figura siguiente se muestra el esquema y las ecuaciones derivadas del balance de materia. El balance de energía puede obviarse y las composiciones a la salida son iguales que a la entrada.



$$F_{AC} - F_{AF} - F_{Pu} = 0 ag{55}$$

$$P_{AC} - P_{AF} = 0 ag{56}$$

$$P_{AC} - P_{Pu} = 0 ag{57}$$

Donde:

P_{AC}, P_{AF} y P_{Pu}: presión del Agua Condensada, Agua Fría y Purga. Se asume nulas las caídas de presión en el equipo.

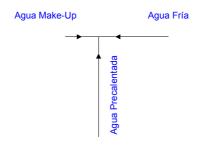
 $F_{AC},\,F_{AF}\,y\,\,F_{Pu}\!:\,flujos\,másicos\,del\,\text{``Agua Condensada''},\,\text{``Agua Fría''}\,y\,\\\text{``Purga''}.$

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

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

II.2.2.10 Modelo de Nodo Sumador:

A la corriente de agua una vez purgada se la adiciona el make-up de agua suficiente para mantener el inventario en el circuito de vapor. En la figura se muestra el esquema y las ecuaciones derivadas del balance de materia y energía. Se asume que no hay cambios de fase y que no existe caída de presión. Si se asume agua casi pura puede desdeñarse el balance por componentes.



$$F_{AMK} + F_{AF} - F_{APC} = 0 ag{58}$$

$$F_{AMK} \times H_{AMK}(T_{AMK}) + F_{AF} \times H_{AF}(T_{AF}) - F_{APC} \times H_{APC}(T_{APC}) = 0 \quad [59]$$

$$P_{APC} - P_{AMK} = 0 \quad [60]$$

$$P_{APC} - P_{AMK} = 0 ag{60}$$

$$P_{APC} - P_{AF} = 0 ag{61}$$

Donde:

P_{AC}, P_{AF} y P_{Pu}: presión del "Agua Condensada", "Agua Fría" y "Purga". Se asume nulas las caídas de presión en el equipo.

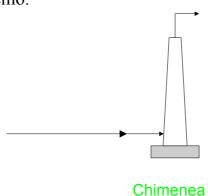
F_{AC}, F_{AF} y F_{Pu}: flujos másicos del "Agua Condensada", "Agua Fría" y "Purga".

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

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

II.2.2.11 Modelo de Chimenea

El tiro de la chimenea se produce principalmente por la diferencia de peso de la columna de gas de la chimenea y una columna igual de aire a la presión barométrica y temperatura del exterior. En la figura se aprecia un esquema del mismo.



La ecuación simplificada que describe el comportamiento es

$$Z - H_{CH} * (\rho_l - \rho_m) = 0$$
 [62]

Donde:

H_{CH}: altura de la chimenea [m].

 ρ_1 : peso específico del aire exterior [Kg/m³].

 ρ_m : peso específico del gas a la mitad de la altura de la chimenea [Kg/m³].

La acción del viento influye sobre el tiro aunque su influencia es poco apreciable y de un cálculo más complejo [12].

II.3 Estimación de costos. Modelo de costos

En este trabajo se adoptan costos propuestos en la bibliografía, según lo indicado en la tabla II-1. En la misma se indican en cada caso la cita correspondiente para la obtención de los parámetros necesarios.[15][16]

Equipo	Ecuaciones	Parámetros
Compresor	$Z_{AC} = \left(\frac{C_{11}m_a}{C_{12} - \eta_{AC}}\right) \left(\frac{P_2}{P_1}\right) Ln\left(\frac{P_2}{P_1}\right)$	$C_{11} = 39.5 \$ / (Kg / s)$ $C_{12} = 0.9$
Cámara de		$C_{21} = 25.6 \ \$(Kg/s)$
Combustión	$Z_{CC} = \left[\frac{C_{21} m_a}{C_{22} - \frac{P_4}{P_3}} \right] \left[1 + \exp(C_{23} T_4 - C_{24}) \right]$	$C_{22} = 0,995$ $C_{23} = 0,018 K^{-1}$ $C_{24} = 26,4$
Turbina de Gas	$Z_{GT} = \left(\frac{C_{31}m_g}{C_{32} - \eta_{GT}}\right) Ln\left(\frac{P_4}{P_5}\right) [1 + \exp(C_{33}T_4 - C_{34})]$	$C_{31} = 266,3 \$ (Kg/s)$ $C_{22} = 0,92$
		$C_{23} = 0.036 K^{-1}$ $C_{24} = 54.4$
		$C_{24} = 54,4$

Equipo		Ecuac	iones		Parámetros
Precalentador aire	$Z_{APH} = C_{41} \left(\frac{m_g (h_5 - h_6)}{(U)(\Delta T_{LM})} \right)^{0.6}$				$C_{41} = 2990 \$/(m^{1,2})$ $U = 18KW/(m^2K)$
Precalentador					$K_1 = 3,4338$
agua e					K ₂ =0,14450
intercambiador					K ₃ =1,0790.10 ⁻²
es de Calor	372	C_{EQ} °. F_{CM}	_		$C_1 = -6,4990.10^{-2}$
	CIVI	$B_1 + B_2 . F_M . I$ $C_1 + C_2 . Log($	$(P) + C_3 \cdot (Log)$	$(P))^2$	$C_2=5,250.10^{-2}$
	0 (1)	1 2 0	$(A_K) + K_3(L\alpha)$	` //	$C_3=1,4740.10^{-2}$
	$A_K =$	área del inter	cambiador, A	(m^2)	B ₁ =1,8
					B ₂ =1,5
Caldera de		C_{EQ} °. F_{CM} . F_{S}			K ₁ =2,1903
vapor con	CIN	$B_1 + B_2 . F_M . I$ $C_1 + C_2 . P + C_3 . I$	1		K ₂ =0,7644
Recalentador	, *,		$(A_K) + K_3(La)$	$(g(A_K))^2$	K ₃ =0,0000
	$A_K =$	Flujo de calo	r, Q(KW)		$C_1=1,10$
					$C_2 = -2,500.10^{-2}$
	Factor	F _{SH} (sobrec	alentamien	to °C)	$C_3=1,000.10^{-3}$
	0	50	100	150	B ₁ =0,0000
	1,00	1,10	1,15	1,20	B ₂ =1,800
Turbina de		$=C_{EQ}$ °. F_{CM}			K ₁ =2,9945
Vapor		$= B_1 + B_2 . F_M .$	F_P $g(A_K) + K_3(L_0)$	$\alpha \sigma(A))^2$	K ₂ =0,9542
	_		$\frac{1}{1}$ dráulica, 8000		K ₃ =0,0000
	$C_M^{a} = C_M \left(\frac{W}{8000}\right)^{0.6}$				B ₁ =0,0000
	(8000)			B ₂ =3,50	
					$F_{P}=1,0$
					$W_{\text{Max}} = 8000 \text{ KW}$

Equipo	Ecuaciones	Parámetros
Bombas	$C_{M} = C_{EQ} \circ .F_{CM}$	K ₁ =3.57930
Centrífugas	$F_{CM} = B_1 + B_2 . F_M . F_P$ $F_P = C_1 + C_2 . Log(P) + C_3 . (Log(P))^2$ $Log(C_{Eq})^\circ = K_1 + K_2 . Log(A_K) + K_3 (Log(A_K))^2$	$K_2=0.32080$ $K_3=2.8500.10^{-2}$
	$A_K = $ Potencia en el eje, $W_S(KW)$	C_1 =0.16820 C_2 =0.34770 C_3 =0.48410
		$B_1=1.8$ $B_2=1.51$

Tabla II-1- Costo de equipos

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

La velocidad de costo será [15]:

$$\overset{o}{Z}_{i} = \frac{Z_{i} CRF \, \varphi}{N * 3600} \tag{63}$$

Donde:

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

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

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

φ: factor de mantenimiento (1,06)

La velocidad de costo asociada al combustible:

$$\overset{\circ}{C}_{f} = c_{f} * \overset{\circ}{m_{f}} * LHV_{f}$$
 (64)

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

$${\stackrel{\circ}{C}}_{T} = c_{f} * m_{f}^{o} * LHV_{f} \sum_{i=1}^{NC} {\stackrel{\circ}{Z}}_{i}$$
(65)

Para la estimación de los costos operativos se emplean las ecuaciones proporcionadas en (Chemical Engineering, 2006)³:

$$\overset{\circ}{CS}_{U} = a * (CEPCI) + b * (CS_{F})$$
(66)

Donde:

CS_F: precio de la utilidad

a y b: coeficientes asociados a dicha utilidad

En la tabla II-2 se indican los factores utilizados para el cálculo

Agua de enfriamient	o a	b	
Módulo de proces	so 0,0001+3,0*10 ⁻⁵ *q ⁻¹	0,003	q>0,01 m ³ /s
Planta	0,00007+2,5*10 ⁻⁵ *q ⁻¹	0,003	$q<10m^3/s$
Vapor de calefacción	n a	b	
Módulo de proces	so $2.7*10^{-5}*m_s^{-0.9}$	0,0034*p ^{0,05}	1 <p<46 barg<="" td=""></p<46>
Planta	$2.3*10^{-5}*m_s^{-0.9}$	0,0034*p ^{0,05}	0,06 <m<sub>s<40 Kg/s</m<sub>

Tabla II-2: Costos operativos

II.4 OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO [17]

Como hemos expresado en el capítulo anterior, en general, la síntesis del flowsheet implica la toma de decisiones en el espacio de todas las estructuras posibles, y en el espacio de todas las variables de operación asociadas a cada una de las estructuras. En efecto, en la tarea de síntesis y diseño de cualquier proceso químico existen dos grandes grupos de variables. Las "variables estructurales" son aquellas que están íntimamente ligadas a la estructura del sistema; especifican la presencia de equipos y las vinculaciones entre ellos. Las "variables de operación" representan las condiciones de operación del sistema, como por ejemplo, temperatura, presión y caudal.

Aquí se denomina problema de "diseño óptimo" a aquél cuyo objetivo consiste en determinar, dada una estructura conocida, según lo descrito en los apartados anteriores, el valor de las variables que minimizan el costo total anual, tales como diámetros de carcaza, número de tubos y área de transferencia de calor en los pre-calentadores, entre otras, y las condiciones operativas (gradientes de temperaturas y presiones, flujos, velocidad del líquido dentro de los tubos de pre-calentamiento, evaporación y sobrecalentamiento, entre otras).

Por el contrario, nos referiremos a un problema de "síntesis y diseño óptimo" cuando, además de determinar las condiciones de operación y el diseño geométrico del sistema, se considera a la estructura como una variable (número de etapas en la columna de absorción/desorción, trayectorias posibles de las corrientes de proceso, etc). Este punto no es el objetivo central de la tesis, aunque será analizado como un problema de interés futuro, sentando las bases para la consideración de las variables más

importantes a ser tenidas en cuenta en su formulación, como se verá en el último capítulo.

La tarea de síntesis y diseño de cualquier proceso continuo exige, desde el punto de vista de la programación matemática, la formulación y resolución de un problema matemático mixto entero no lineal (MINLP) ó eventualmente un modelo matemático disyuntivo (GDP) involucrando decisiones discretas y continuas. Las decisiones discretas están relacionadas a las posibles unidades estructurales de la planta mientras que las decisiones continuas están relacionadas con las variables de operación del proceso (temperatura, presión, caudal, etc) [13]

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

min
$$f(x,y)$$

s.t. $h_m(x,y) = 0$, $m \in M$, M restricci ones de igualdad
 $g_k(x,y) \le 0$, $k \in K$, K restriccio nes de desigualda d
 $x \in X \le R^n$,
 $y \in Y = \{0,1\}^l$

Donde las $h_m(x,y)$ son funciones de igualdad y representan a las ecuaciones que modelizan cada uno de los equipos que forman parte de la planta (desde la ecuación [1] hasta [62]). Las $g_k(x,y)$ son funciones de desigualdad y representan las restricciones impuestas a las variables y funciones.

Las variables binarias aparecen cuando se pretende considerar la estructura del proceso como variable. Esta metodología de trabajo exige el planteo de una "superestructura" que incluya un conjunto de alternativas de interés tanto para el proceso en sí, como también para las posibles

tecnologías de reducción de las emisiones. En general, la postulación de una superestructura asociada a un proceso no resulta una tarea sencilla, ya que son varios los factores que deben considerarse. Una vez formulada la superestructura que embeba no sólo las distintas alternativas para la producción de energía sino también el correspondiente tratamiento de las emisiones, se deberá proponer una metodología de resolución robusta y flexible ya que el número de variables involucradas en el modelo y el carácter combinatorio debido a la componente estructural del problema (topología de equipos) dificulta su resolución.

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

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

Dado que los resolvedores (software) para problemas de programación matemática del tipo no lineal (non linear program NLP) no pueden garantizar optimalidad global y que los programas/modelos para optimización global no manejan problemas de gran tamaño, debemos asegurar que se consigue una buena solución al problema. Además, es sabido que cuando se presentan fuertes y múltiples no linealidades, es

posible encontrar soluciones óptimas locales diferentes, dependiendo del punto inicial utilizado para la optimización. Por lo tanto, es necesario lograr una adecuada inicialización para asegurar un óptimo local "aceptable".

En nuestro caso se utilizarán los algoritmos de optimización incluidos en el simulador HYSYS®. En el *Anexo I* se describen en forma sintética los distintos algoritmos existentes en el simulador. En la tabla siguiente se resumen los mismos, con sus características principales:

	Problemas	Problemas con		Cálculo
Método	sin	restricciones		de las
	restricciones	Desigualdades	Igualdades	Derivadas
BOX	X	X		
MIXED	X	X		X
SQP	X	X	X	X
FLETCHER REEVES	X			X
QUASI-NEWTON	X			X

Resumen de los Métodos de Optimización implementados en Hysys®

II.4.1 El Optimizer del Hysys®

El simulador comercial Hysys® incluye un optimizador multivariable de estado estacionario. Una vez lograda la convergencia del flowsheet, se pueden definir las variables de optimización para encontrar una solución mejor ya sea maximizando o minimizando una función objetivo determinada. Al igual que en el esquema general, Hysys® permite el armado de una función objetivo que se define en una hoja de cálculos adhoc que permite relacionarla con las variables del modelo del proceso a optimizar.

Una vez definida la función objetivo (a ser maximizada o minimizada) se deben definir las relaciones de restricción, esto es, límites para ciertas variables de operación o expresiones basadas en las mismas.

Para facilitar el tratamiento numérico, es conveniente normalizar todas las variables, por ejemplo según la siguiente definición para las variables de optimización:

$$x_{norm} = \frac{x - x_{inferior}}{x_{superior} - x_{inferior}}$$
 (68)

Se define como el número *máximo de evaluaciones* de la función como el mayor número de veces que será calculada una porción relevante del flowsheet en cada interación. No debe confundirse con el número de iteraciones. Se asocia con que en una cierta iteración cierta parte del flow debe recalcularse varias veces.

La *tolerancia* aplicada a la función objetivo o a las variables primarias es un criterio de convergencia mientras que el *número máximo de iteraciones* detiene el cálculo independientemente de si dicha convergencia fue lograda o no.

A fin de suavizar la variabilidad de las variables primarias, Hysys® define un *máximo cambio por iteración*.

Como ciertos métodos de optimización utilizan derivadas de la función objetivo y puesto que ésta se realiza en forma numérica se impone la definición de un cierto incremento en las variables, que facilite la convergencia y permita en lo posible cierto grado de aceleración del proceso. Para lograr este trade-off se asigna valor a los parámetros ShiftA y ShiftB de tal modo que afecte a la variable primaria x según:

$$x_{SHIFT} = ShiftA * x + ShiftB$$
 (69)

Que aplicada a la ecuación siguiente permite evaluar la tasa de cambio de la función evaluada (derivada):

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{y_2 - y_1}{x_{SHIET}} \tag{70}$$

 y_2 = valor de la variable afectada correspondiente a $x+x_{SHIFT}$

 y_1 = valor de la variable afectada correspondiente a x

II.5 RESULTADOS NUMÉRICOS. DISCUSIÓN

Como vimos, la función objetivo en nuestro caso es la función de costo, expresada en forma de "velocidad de costo" en U\$S/seg. Esto incluye costos operativos y fijos (equipos) y ha sido detallada más arriba en la sección II.3.

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

El costo unitario de la electricidad en u\$s por KW generado será pues:

$$C_{Unitario} \left[\frac{u\$s}{KW \times hora} \right] = \frac{C_{Total} \left[\frac{u\$s}{seg} \right] * 3600 \left[\frac{seg}{hora} \right]}{P_{Neta} \left[MW \right] * 1000 \left[\frac{KW}{MW} \right]}$$
(71)

Las restricciones incorporadas al modelo garantizan una potencia determinada, temperaturas mínimas o máximas en ciertos equipos, acercamientos de temperatura en los equipos de intercambio térmico y parámetros tecnológicos a cumplir debido a la operación de los equipos. En

la tabla II-3 se indican todas las restricciones de desigualdad utilizadas en la optimización. Las restricciones de igualdad consisten en los parámetros adoptados para cada equipo y detallados en cada modelo en la sección II.2, al igual que en la determinación de los parámetros de las corrientes de entrada a la planta, descritos en la misma sección.

Restricción	Objeto	Operador	Valor	Unidad
Potencia Neta	$W_{TG}+W_{TV}-W_{AC}$	=		
T _{GEx} -T _{AF}	Economizador	>	30	° C
T_{GEc} - T_{APC}	Caldera	>	30	° C
T_{GC} - T_{V}	Caldera	>	30	° C
T_{GE2} - T_{VR}	Recalentador	>	30	° C

Tabla II-3- Tabla de restricciones

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

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

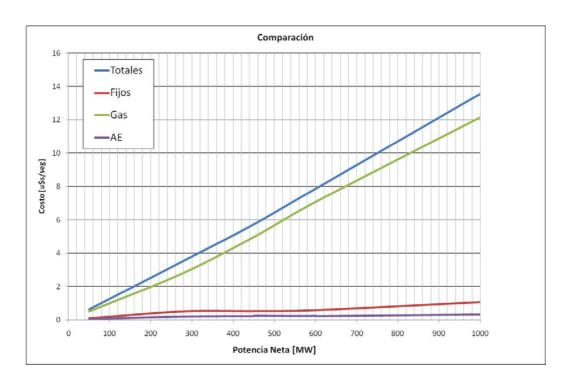


Figura V-3: Curva de costo total en función de la potencia neta

Si visualizamos el costo unitario tal como lo representa la ecuación (71), de la Figura V-3 se advierte que la curva tiene un crecimiento casi lineal. Así se ve que el costo unitario promedio resulta de 0.0455753 [u\$s/KW h] con un desvío estándar de 0.0016026 [u\$s/KW h]. Si bien la función de costos utilizada es rigurosa y contempla factores de escala en todos los equipos, el costo unitario de la potencia producida no depende del tamaño de la planta. Esto se explica debido al costo de energía dominante, según se aprecia en la figura, la cual discrimina entre todos los costos considerados. Por lo tanto, podemos hablar de un costo unitario constante, si se diseña la planta en condiciones óptimas, para todo el rango de producción estudiado.

Las curvas mencionadas se obtuvieron aplicando el OPTIMIZER para valores de potencia neta que van desde 50 MW hasta 1000 MW, esto es, que las variables operativas se ajustaron para obtener la solución óptima correspondiente a cada valor de potencia neta. La convergencia exigió, por

momentos, el preajuste manual de sus valores a fin de facilitar el proceso de optimización previo al mismo.

II.6 CONCLUSIONES

Se ha mostrado durante el capítulo que es posible definir modelos en general rigurosos para representar el comportamiento de una planta simple de cogeneración por ciclo combinado utilizando el simulador HYSYS. Se realizaron optimizaciones de la planta de generación de potencia, asumido un valor de potencia neta entregada y las diferencias de temperaturas en los diferentes equipos de intercambio térmico como restricciones.

Para la corriente de gas se ha fijado una presión tal que los gases de escape tengan la suficiente fuerza impulsora para ingresar a la planta de absorción. Con respecto a la descarga de vapor, se pretende conservar cierto nivel térmico para poder analizar una potencial integración energética con respecto a la planta de captura de CO₂. Así planteado el problema, nos quedan como variables de optimización los acercamientos térmicos entre corrientes que intercambian calor y los flujos operativos de los fluidos principales, gas, agua y aire. Los acercamientos térmicos en cada equipo de intercambio se restringen mediante una ecuación que se incorpora al programa de optimización. En general, se toma como acercamiento mínimo permitido 30 grados a un intercambio donde participa una corriente líquida y una de gas y 10 grados a una con intercambio entre corrientes líquidas.

Se ha visto que el costo total está fuertemente asociado al costo del combustible, que es el dominante. El costo o precio unitario en la planta de generación es prácticamente constante, dado que el costo dominante es el costo del combustible y no los costos de inversión (por lo que el factor de escala no incide) según los valores asumidos para el cálculo del factor de

recupero de capital (tasa de interés y vida útil de la planta, en el modelo de costos adoptado). Si se realizan cambios en dichos valores, tomando en cuenta valores típicos en proyectos de inversión, el comportamiento descrito se mantiene. Debe remarcarse en este punto, que si se consideran sistemas más complejos de cogeneración, con más niveles de presión, el costo de inversión se incrementa y los costos operativos se reducen. Por lo tanto, podría no ser válido en este caso el comportamiento prácticamente lineal del costo en función de la potencia, y por lo tanto podrían existir variaciones en el precio unitario de la energía, en función del factor de escala.

No obstante, de comparaciones respecto de valores reportados en la bibliografía, de diversas fuentes y sistemas de generación, se concluye que de existir tal comportamiento, la variación aludida en el precio unitario es mínima, y en particular, no reviste demasiada importancia frente a la componente que agrega el costo extra que involucra la captura del CO₂ generado. Esto se debe, entre otros factores, a que el costo de inversión y operación de tal planta es considerable, y bastante significativo en comparación con la planta de generación propiamente dicha, según se verá en el capítulo IV. Por otro lado, si bien un incremento en la eficiencia agregando mayor inversión en la planta de generación se traduce en un menor consumo de combustible por KW-h generado, y por ende en un menor caudal de gases a la planta de recuperación, este factor es menor comparado con el incremento de costos que involucra la captura de una tonelada de CO₂ y la magnitud de gases producidos, aún a eficiencias muy significativas (debido a su comportamiento asintótico respecto de la inversión).

La potencia neta de la planta (sin considerar pequeños consumos en bombas) es la suma de las aportadas por las turbinas y este valor puede obtenerse de diferentes maneras mostrando un alto nivel de acople que existe entre las variables. En otras palabras, una misma potencia neta se podría conseguir con un arreglo diferente de potencias aportadas por ambas turbinas. Esta característica dificulta la tarea de optimización.

Por otra parte, una operación de la turbina de gas en condiciones cercanas a la relación estequeométrica suministraría mucha potencia y gases a altas temperauras, que desde el punto de vista técnico lleva a la posibilidad de destrucción de la turbinas de gas, y en lo económico dispara los precios exponencialmente.

En cuanto a las restricciones a los acercamientos térmicos definidas, del análisis de las soluciones obtenidas se observa que en general, la solución óptima lleva a las restricciones a ser activas.

Resumiendo, se ha definido un esquema representativo y simple para una planta de generación termoeléctrica que nos permite relacionar las principales variables del sistema y obtener un costo óptimo por Kw-h de generación, con lo cual se tiene una base de comparación indispensable para avanzar en el estudio de la factibilidad técnica y económica de un proceso ecológico, en el cual se capture el CO₂ contenido en los gases de escape, según una restricción impuesta a la cantidad que pueda emitirse a la atmósfera.

ANEXO I:

Métodos de optimización disponibles en HYSYS [17].

Método BOX

Vagamente basado en el método de "caja negra", este método resuelve problemas con funciones objetivo no lineales sujetos a restricciones de desigualdades no lineales. No requiere el cálculo de derivadas ni soporta restricciones de igualdad.

No es un método eficiente ya que requiere gran cantidad de evaluaciones, pero en los casos en que es aplicable resulta ser muy robusto. El mismo opera de la siguiente manera:

- 1. Dado un punto de arranque factible, el programa genera un complejo de n+1 puntos alrededor de ese punto tomado como centro dentro de la región factible (n es el número de variables).
- 2. Se evalúa la función objetivo en cada punto. El punto con el valor más alto se reemplaza por el obtenido por extrapolación a través de la cara de dicho complejo cruzándolo desde el punto de valor alto (reflexión).
- 3. Si el nuevo punto reduce la función objetivo Hysys® intenta una nueva extrapolación. De otro modo, si el nuevo punto es peor que el segundo punto más alto, hysys® realiza una contracción unidimensional.
- 4. Si un punto mantiene un cierto valor alto, todos los puntos son contraídos alrededor del punto más bajo.

- 5. El nuevo punto debe satisfacer tanto los límites de las variables como las restricciones de desigualdad. Si se viola un límite, el punto se traslada hasta dicho límite. Si se viola una restricción, el punto se mueve a lo largo de la centroide de los puntos remanentes hasta que dicha restricción se satisfaga.
- 6. Repetir los pasos 2 hasta 5 hasta logar el criterio de convergencia esperado.

Método SQP

El método de programación cuadrática secuencial (SQP) maneja restricciones tanto de igualdades como de desigualdades. Es considerado por muchos como el más eficiente cuando sus variables primarias son provistas de una razonable iniciación y el número de las mismas es reducido.

Lo hace minimizando una aproximación cuadrática de la función Lagrangiana sujeta a aproximaciones lineales de las restricciones. La matriz de la derivada segunda se estima automáticamente. La convergencia se fuerza empleando la técnica "watchdog".

Método MIXTO

Este método toma las ventajas de las características de convergencia global del método BOX con la eficiencia del método SQP. Se inicia la minimización con el método BOX usando una tolerancia relajada (50 veces la tolerancia deseada). Después de la convergencia se aplica el método SQP para hallar la solución final con la tolerancia deseada.

Método FLETCHER REEVES

El procedimiento implementado es la modificación de Polak-Ribiere del esquema de gradiente conjugado de Fletcher-Reeves. Este método es eficiente para la minimización de problemas sin restricciones.

Procedimiento:

- 1. Dado un punto de inicio se evalúa la derivada en la función objetivo con respecto a las variables primarias.
- 2. Evalúa la nueva dirección de búsqueda como la conjugada al viejo gradiente.
- 3. Mejora la búsqueda unidimensional a lo largo de la nueva dirección hasta que se alcance el mínimo local.
- 4. Si cualquier variable excede sus límites se retrocede hasta dicha frontera
- 5. Se repite los pasos 1 al 4 hasta lograr la convergencia

Método QUASI-NEWTON

El simulador Hysys® implementa el método Quasi-Newton de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS). Este método comparte la aplicabilidad y limitaciones del Método FLETCHER REEVES.

Este método calcula la nueva dirección de búsqueda a partir de aproximaciones de la inversa de la matriz Hessiana.

Método	Problemas	Problemas con		Cálculo
		Desigualdades	Igualdades	
BOX	X	X		
MIXED	X	X		X
SQP	X	X	X	X
FLETCHER REEVES	X			X
QUASI-NEWTON	X			X

Resumen de los Métodos de Optimización implementados en Hysys®

CAPITULO III

En este capítulo analizaremos el modelado y optimización del sistema de absorción de CO₂. Al igual que en el capítulo II se utilizará el simulador Hysys® empleando módulos rigurosos para modelar el sistema. Siguiendo los mismos lineamientos ya explicados en el capítulo anterior a continuación se indican las características del modelo de simulación, el problema de optimización y los resultados obtenidos para el subsistema de captura de CO₂ acoplado al proceso de cogeneración. Se supone en este caso una dada corriente representativa de gases provenientes de dicho subsistema como alimentación a la planta de captura.

III.1. Circuito de absorción de CO₂. Descripción del Proceso

Con el fin de reducir las emisiones de gases responsables del efecto invernadero se propone la incorporación a la planta de cogeneración de un proceso de absorción del CO₂ contenido en los gases de escape.

Aún siendo numerosas las alternativas, en nuestro caso se adopta la dietanolamina (DEA) por ser una de las más empleadas según la bibliografía, en particular en procesos de gran escala en la industria del gas y petroquímica en general. Para este caso, Hysys® posee un paquete especial para la estimación de las propiedades fisicoquímicas y de equilibrio, que reviste gran rigurosidad.

En la figura III-1. se aprecia el circuito de absorción de dióxido de carbono adoptado.

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

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

La solución de etanolamina enriquecida de CO₂ se precalienta y envía a una torre regeneradora que tiene como objeto separar los gases carbónicos por la parte superior y recomponer la amina libre de CO2 para ser recirculada al regenerador previo enfriamiento.

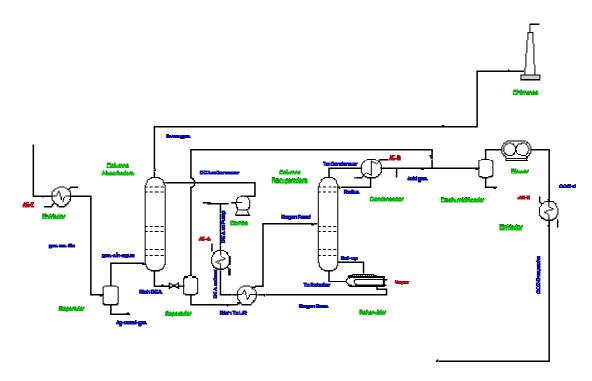


Figura III-1: Flowsheet de la planta de absorción

Como la torre regeneradora opera a menor presión que la de contacto, a la salida de esta se produce una descompresión que libera algo del dióxido carbono que se encontraba disuelto. Esta corriente se suma a la de tope de la columna regeneradora y se envía a su disposición final, que puede ser comercialización o deposición geológica o submarina. En nuestro

caso no consideraremos el costo de tales operaciones. Se define el proceso de tal forma de entregar una corriente de CO₂ a las condiciones adecuadas para luego ser transportado al lugar de disposición.

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

III.2 Modelo del Sistema de absorción-regeneración [19].

El paquete de propiedades adoptado hace uso de un modelo de noequilibrio desarrollado al efecto. El concepto fundamental usado es que la velocidad de absorción/desorción de los gases ácidos desde y hacia la solución de amina se considera como un fenómeno de transferencia de masa entre fases.

El modelo incorpora una modificación de la eficiencia de Murphree para tener en cuenta la variabilidad de velocidad de transferencia de los componentes del gas ácido. Las eficiencias de cada etapa son funciones de los coeficientes de transferencia de masa y del diseño mecánico del plato. A continuación se muestra el esquema general para una etapa genérica en un equilibrio múltiple etapa. El resultado de las ecuaciones de balances que caracterizan estos fenómenos se detallan luego; para su resolución se usa un método modificado de Newton-Raphson para la resolución simultánea de las ecuaciones para la temperatura, composición y flujos de vapor y líquido en cada etapa de la columna.

El concepto básico de modelado de separación múltiple etapa se detalla a continuación. Para el caso particular de paquete de aminas, el simulador Hysys® presenta una serie de opciones que el usuario debe escoger: para la solubilidad el modelo Kent-Eisenberg o el de Li-Mather, mientras que para la fase vapor se puede asumir comportamiento ideal o no ideal.

III.2.1 Modelo de Etapa de Equilibrio

En la figura siguiente se indica una etapa de equilibrio

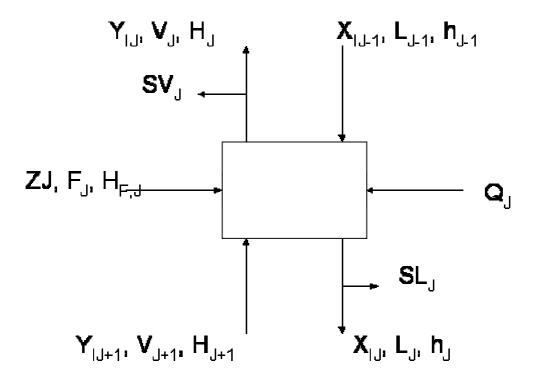


Figura III-2: Una etapa elemental de equilibrio

Hipótesis adoptadas:

A partir de los balances de materia y energía, y la definición de eficiencia de Murphree se tienen las siguientes ecuaciones que representan el modelo de los absorbedores:

$$\eta = \frac{(V_J + SV_J) * Y_J - V_{J+1} * Y_{JJ+1}}{(V_J + SV_J) * K_{IJ} * X_{IJ} - V_{J+1} * Y_{JJ+1}}$$
(1)

Donde:

η: eficiencia de la etapa

I: número de componente

J: número de etapa

K: constante de equilibrio

V: Flujo molar de vapor

X: Fracción molar en la fase líquida

Y: Fracción molar en la fase vapor

Modelo de etapas de no-equilibrio

Balance global de materia:

$$F_J + L_{J-1} + V_{J+1} - (L_J + SL_J) - (V_J + SV_J) = 0$$
(2)

Balance de materia por componente:

$$F_J * z_{I,J} + L_{J-1} * x_{I,J-1} + V_{J+1} * y_{I,J+1} - (L_J + SL_J) * x_{I,J} - (V_J + SV_J) * y_{I,J} = 0$$
(3-11)

Balance de energía:

$$F_J * H_{FJ} + L_{J-1} * h_{J-1} + V_{J+1} * H_{J+1} + Q_J - (L_J + SL_J) * - (V_J + SV_J) = 0$$
(12)

Relaciones de equilibrio:

$$\eta_{IJ} * K_{IJ} * x_{IJ} * (V_J + SV_J) - (V_J + SV_J) * y_{IJ} + (1 - \eta_{IJ}) * V_{J+1} * y_{I,J+1} = 0$$
(13-21)

Restricciones de suma

$$\sum y_{I,J} - 1,0 = 0 \tag{22}$$

III.2.1.1 Solubilidad de equilibrio- Modelo de Kent y Eisenberg

El presente modelo ha sido validado mediante datos experimentales. Las composiciones de los componentes considerados inertes tales como los hidrocarburos se calculan mediante las constantes de Henry ajustadas para estimar su fuerza iónica.

En las siguientes tablas se indican las reacciones químicas consideradas en el modelo, al igual que la definición de las relaciones de equilibrio químico correspondientes, las ecuaciones de equilibrio de fase, los balances de materia por componente y las balances de carga iónica correspondientes.

Reacciones químicas	
$R_1 R_2 NH + H_2 O \Leftrightarrow R_1 R_2 NH_2^+ + OH^-$	(31)
$R_1 R_2 R_3 N + H_2 O \Leftrightarrow R_1 R_2 R_3 N H^+ + O H^-$	(32)
$R_1 R_2 NH + CO_2 \Leftrightarrow R_1 R_2 NCOO^- + H^+$	(33)
$H_2O \Leftrightarrow H^+ + OH^-$	(34)
$H_2S \Leftrightarrow H^+ + SH^-$	(35)
$CO_2 + H_2O \Leftrightarrow H^+ + HCO_3^-$	(36)
$HS^- \Leftrightarrow H^+ + S^{}$	(37)
$HCO_3^- \Leftrightarrow H^+ + CO_3^{}$	(38)

Relaciones de equilibrio	
$K_{1} = \frac{[H^{+}][R_{1}R_{2}NH]}{[R_{1}R_{2}NH_{2}^{+}]}$	(39)
$K_{2} = \frac{[H^{+}][R_{1}R_{2}R_{3}N]}{[R_{1}R_{2}R_{3}NH^{+}]}$	(40)
$K_{3} = \frac{[HCO_{3^{\circ}}^{+}][R_{1}R_{2}NH]}{R_{1}R_{2}NCOO^{-}}$	(41)
$K_4 = \frac{\left[H^+\right]\left[OH^-\right]}{\left[H_2O\right]}$	(42)
$K_5 = \frac{[H^+][SH^-]}{[H_2S]}$	(43)
$K_6 = \frac{\left[H^+\right]\left[HCO_3^-\right]}{\left[CO_2\right]\left[H_2O\right]}$	(44)
$K_{7} = \frac{\left[H^{+}\right]\left[S^{}\right]}{\left[HS^{-}\right]}$	(45)
$K_8 = \frac{\left[H^+\right]\left[CO_3^{}\right]}{\left[HCO_3^{-}\right]}$	(46)

Equilibrios de fase	
$y_{H_2S}\phi_{H_2S}^V P = H_{H_2S}[H_2S]$	(47)
$y_{CO_2} \phi_{CO_2}^V P = H_{CO_2} [CO_2]$	(48)

Balance de Carga		
$[H^{+}] + [R_{1}R_{2}NH_{2}^{+}] + [R_{1}R_{2}R_{3}NH^{+}]$	+	
$[OH^{-}] + [R_{1}R_{2}NCOO^{-}] + [HCO_{3}^{-}] + [HS^{-}] + 2[CO_{3}^{}] + 2[S^{}]$		(49)
	-	

Balance de masa	
$C_{\text{Aminas 1}^{\circ} \text{y 2}^{\circ}} = [R_1 R_2 N H] + [R_1 R_2 N H_2^{+}] + [R_1 R_2 N COO^{-}]$	(50)
$C_{\text{Amina } 3^{\circ}} = [R_1 R_2 R_3 N] + [R_1 R_2 R_3 N H^+]$	(51)
$C_{CO_2} = (C_{\text{Aminas 1}^{\circ} \text{y 2}^{\circ}} + C_{\text{Amina 3}^{\circ}})\alpha_{CO_2} = \\ [CO_2] + [R_1 R_2 N COO^{-}] + [HCO_3^{-}] + [CO_3^{}]$	(52)
$C_{H_2S} = (C_{\text{Aminas 1}^{\circ} \text{y 2}^{\circ}} + C_{\text{Amina 3}^{\circ}})\alpha_{H_2S} = [H_2S] + [HS^{-}] + [S^{}]$	(53)

Donde los α_{CO2} y α_{H2S} son las "cargas" de dióxido de carbono y de sulfuro de hidrógeno definidas como la relación de concentración de dichos gases con respecto a la concentración de las aminas. Las concentraciones son molares y H es la constante de Henry.

Los coeficientes de fugacidad de las especies moleculares se calculan a partir de la ecuación de Peng-Robinson:

$$p = \frac{R \times T}{v - b} - \frac{a \times (T)}{v \times (v + b) + b \times (v - b)}$$
(54)

Donde a y b para los componentes puros:

$$a = \frac{\alpha \times (0,45724) \times R^2 \times T_C^2}{P_C}$$
 (55)

$$a = \frac{\alpha \times (0.45724) \times R^2 \times T_C^2}{P_C}$$

$$b = \frac{(0.07780) \times R \times T_C}{P_C}$$
(55)

Y el parámetro dependiente de la temperatura resulta:

$$\alpha^{1/2} = 1 + \alpha_1 \times (1 - \sqrt{T_r}) + \alpha_2 \times (1 - T_r) \times (0, 7 - T_r)$$
(57)

Los parámetros α_1 y α_2 son dependientes de las sustancias y se determinan a través de regresiones rigurosas de datos experimentales. Para mezclas, los parámetros a y b se estiman mediante las siguientes reglas de mezclado.

$$a = \sum_{i=1}^{NC} \sum_{i=1}^{NC} x_i \times x_j \times (a_i \times a_j)^{0.5} \times (1 - k_{ij})$$
 (58)

$$b = \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} x_i \times x_j \times \left(\frac{b_i + b_j}{2}\right) \times (1 - k_{ij})$$
 (59)

III.2.1.2 Modelo electrolítico Li-Mather:

Tiene excelentes propiedades predictivas para un amplio rango de temperaturas, presiones y cargas de gases y de concentraciones de amina. Se basa en dos tipos de equilibrio: líquido-vapor y químico en fase líquida.

Equilibrio de fase:

El equilibrio liquido-vapor para las diferentes especies moleculares se plantea según:

$$y_i \times \phi_i^V \times P = H_i \times x_i \times \gamma_i^L$$

Donde:

H_i: constante de Henry

P: presión del sistema

x_i, y_i: fracciones molares de la especie i en el líquido y vapor

 Φ_i^{V} : fugacidad de la especie i en la fase vapor

 γ_i^L : coeficiente de actividad de la especie i en la fase líquida

Los coeficientes de fugacidad se calculan de la ya mencionada ecuación de estado de Peng Robinson.

Los coeficientes de actividad se calculan a partir de la ecuación de Clegg-Pitzer que se describirá posteriormente.

Equilibrio químico

Para el simple caso de los sistemas amina-H₂S-CO₂-agua las reacciones químicas de disociación más importantes son:

Reacciones de disociación química
$Amina^+ \Leftrightarrow Amina + H^+$
$H_2S \Leftrightarrow HS^- + H^+$
$CO_2 + H_2O \Leftrightarrow HCO_3^- + H^+$
$H_2O \Leftrightarrow OH^- + H^+$
$HCO_3^- \Leftrightarrow CO_3^{-2} + H^+$
$HS^- \Leftrightarrow S^{-2} + H^+$

Las constantes del equilibrio químico en sistemas gas ácido-amina juegan un papel importante en la predicción de las solubilidades de equilibrio de dichos gases en soluciones acuosas de aminas. La constante K puede ser expresada:

$$K = \prod_{i=1}^{NC} (x_i \times y_i)^{\beta_i}$$

Que, en función de la temperatura, se puede expresar:

$$\ln K = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 \times \ln T + C_4 \times T$$

La constante de Henry tiene una funcionalidad parecida a la anterior. En la fase líquida hay 4 especies moleculares: amina, H₂O, H₂S y CO₂ y siete especies iónicas: Amina⁺, HCO₃⁻, HS⁻, H⁺, OH⁻, CO₃⁻², S⁻². En la fase gaseosa hay 4 especies: Amina, H₂O, CO₂ y H₂S.

La determinación de la composición de todas las especies moleculares e iónicas tanto en la fase líquida como en la gaseosa involucra la resolución simultánea de un sistema de ecuaciones no lineales que describen tanto el equilibrio de fases como el equilibrio químico, la eletroneutralidad (balance de cargas) y el balance de masa de los electrolitos en la fase acuosa.

La ecuación de Clegg-Pitzer:

En este modelo todas las especies presentes en el sistema se consideran partículas que interactúan entre sí. La discrepancia de energía libre de Gibbs consiste en un término de interacción electrostática de Debye-Huckel y una expansión de Margules con 2 y 3 sufijos:

$$g^{ex} = g^{DH} + g^{S}$$

$$\frac{g^{DH}}{R \times T} = \frac{4 \times A_x \times I_x}{\rho} Ln(1 + \rho \times I_x^{1/2}) + \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} x_c \times x_a \times B_{ac} \times g \times (\alpha \times I_x^{1/2})$$

$$\frac{g^{S}}{R \times T} = \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} a_{ij} \times x_i \times x_j + \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \sum_{k=1}^{NC} a_{ijk} \times x_i \times x_j \times x_k$$

$$\frac{g^{S}}{R \times T} = x_{l} \sum_{n=1}^{NC} x_{n} \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} F_{c} \times F_{a} \times W_{nca} + \sum_{n=1}^{NC} \sum_{n'=1}^{NC} x_{n} \times x_{n'} \times (A_{nn'} \times x_{n'} + A_{n'n} \times x_{n})$$

Donde:

$$A_{nn'} = 2 \times a_{nn'} + 3 \times a_{n'n}$$

$$A_{n'n} = 2 \times a_{nn'} + 3 \times a_{nn'n''}$$

$$W_{nca} = \frac{(2 \times w_{nc} + 2 \times_{na} - w_{ca} + 2 \times u_{nc} + 2 \times u_{na})}{4}$$

$$w_{ij} = 2 \times \alpha_{ij} + \frac{3}{2 \times (a_{iij} + a_{ijj})}$$

$$u_{ij} = \frac{3}{2 \times (a_{iij} - a_{ijj})}$$

Los coeficientes de actividad para el solvente N y el ion M⁺ son los siguientes:

$$Ln \gamma_{N} = \frac{2 \times A_{x} \times I_{x}^{3/2}}{1 + \rho \times I_{x}^{1/2}} - \sum \sum x_{c} \times x_{a} \times B_{ca} \times e^{\left(-\alpha \times I_{x}^{1/2}\right)}$$

$$+ x_{l} \times (1 - x_{N}) \sum \sum F_{c} \times F_{a} \times W_{Nca} - x_{l} \times \sum_{n=1}^{NC} x_{n} \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} F_{c} \times F_{a} \times W_{nca}$$

$$+ \sum_{n=1}^{NC} x_{n} \left[A_{Nn} \times x_{n} \times (1 - 2 \times x_{N}) + 2 \times A_{nN} \times x_{N} \times (1 - x_{N})\right]$$

$$-2 \times \sum_{n=1}^{NC} \sum_{n'=1}^{NC} x_{n} \times x_{n'} \times (A_{nn'} \times x_{n'} + A_{n'n} \times x_{n})$$

$$\ln \gamma_{M^{+}} = -z_{M}^{2} \times A_{x} \left[\frac{2}{\rho} \ln \left(1 + \rho \times I_{x}^{1/2} \right) + \frac{I_{x}^{1/2} \times \left(1 - 2 \times I_{x} / z_{M}^{2} \right)}{1 + \rho \times I_{x}^{1/2}} \right]
+ \sum_{a=1}^{NC} B_{na} \times g \left(\alpha \times I_{x}^{1/2} \right)
- \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} x_{c} \times x_{a} \times B_{ca} \times \left[\frac{z_{M}^{2} \times g \left(\alpha \times I_{x}^{1/2} \right)}{2 \times I_{x}} + \left(1 - \frac{z_{M}^{2}}{2 \times I_{x}} \right) \times e^{\left(-\alpha \times I_{x}^{1/2} \right)} \right]
+ 2 \times \sum_{n=1}^{NC} x_{n} \sum_{a=1}^{NC} F_{a} \times W_{nMa} - \sum_{n=1}^{NC} x_{n} \times \left(1 + x_{j} \right) \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} F_{c} \times F_{a} \times W_{nca}
- 2 \times \sum_{n=1}^{NC} F_{a} \times W_{2Ma} + \sum_{c=1}^{NC} \sum_{a=1}^{NC} F_{c} \times F_{a} \times W_{2ca}
- 2 \times \sum_{n=1}^{NC} \sum_{n'=1}^{NC} x_{n} \times x_{n'} \times \left(A_{nn'} \times x_{n'} + A_{n'n} \times x_{n} \right)$$

Donde los subíndices c, a, n y n' representan a los cationes, aniones y especies moleculares. El subíndice 2 representa al agua. La fracción molar total de iones es:

$$x_l = 1 - \sum_{n=1}^{NC} x_n$$

Las fracciones de cationes y aniones Fc y Fa están definidas para sistemas electrolíticos totalmente simétricos:

$$F_c = \frac{2 \times x_c}{x_l}$$
$$F_a = \frac{2 \times x_a}{x_l}$$

La fuerza iónica se define como:

$$I_x = \frac{1}{2\sum_{i=1}^{NC} z_i^2 \times x_l}$$

La función g(x) se expresa como:

$$g(x) = \frac{2 \times [1 - (1 + x) \times e^{(-x)}]}{x^2}$$

Donde:

$$x = \alpha \times I_x^{1/2} = 2 \times I^{1/2}$$

$$I = \frac{1}{2 \times \sum_{i=1}^{NC} z_i^2 \times C_i}$$

A_x es el parámetro de Debye-Huckel de fracción molar

$$A_{x} = A_{\phi} \times \left(\sum_{n=1}^{NC} C_{n}\right)^{1/2}$$

 C_j y C_n son las concentraciones molares del ión i y del solvente n respectivamente. I es la fuerza iónica en concentraciones molares. A_{Φ} es el parámetro de Debye-Huckel, que es función de la temperatura, densidad y constante dieléctrica de los solventes en la mezcla. El parámetro ρ está relacionado al diámetro de colisión de la esfera rígida o la mínima distancia a la que pueden acercarse los iones en solución. $A_{n`n}$ y $A_{nn'}$ son los parámetros de interacción entre las especies moleculares, respectivamente.

 B_{ca} es el parámetro de repulsión de la esfera rígida entre los iones y W_{nca} es el parámetro de interacción entre iones y entre el ión y el solvente.

Los parámetros $A_{n'n}$, $A_{nn'}$, B_{ca} y W_{nca} tienen la misma funcionalidad con respecto a la temperatura:

$$Y = a + \frac{b}{T}$$

Estos son los parámetros ajustables del modelo. Por otro lado, tanto el agua como la amina se consideran como solventes, el estado estándar de cada uno de ellos se adopta como líquido puro a la temperatura y presión del sistema. El estado de referencia adoptado para las especies iónicas y las moleculares es el ideal y la de su solución acuosa a dilución infinita.

Entalpía de fases

La entalpía de la fase vapor se calcula a través de la ecuación de estado de Peng Robinson la cual integra datos de capacidad calorífica del gas ideal a su temperatura de referencia. La entalpía de la fase líquida también incluye el efecto del calor latente de vaporización y el calor de reacción.

La absorción y desorción de H₂S y de CO₂ en soluciones acuosas involucran los efectos debidos a las reacciones químicas. Este efecto térmico depende del tipo de amina y la carga molar de los gases ácidos. El calor de disolución de los gases ácidos se obtiene por diferenciación de datos experimentales de solubilidad mediante una forma de la ecuación de Gibbs-Helmholtz.

Los efectos resultantes de la evaporación y condensación de la amina y el agua tanto en la columna absorbedora como en la regeneradora se consideran en los términos de calor latente que aparecen en el cálculo de la entalpía de la fase líquida.

III.2.2 Modelo de Absorbedor

En la presente tesis se adoptó el modelo Kent-Eisenberg para el cálculo de la solubilidad y un comportamiento no ideal en fase vapor para poder contemplar presiones de operación en las cuales los gases dejan de ser ideales.

En la figura se muestra un esquema de la columna absorbedora, la encargada de extraer los gases ácidos de la corriente de gases de combustión.

En el apartado anterior se enumeraron las ecuaciones intervinientes en cada etapa de equilibrio. El modelado de la columna absorbedora implica la repetición de todo ese sistema de ecuaciones (2 a 59) para cada una de las etapas de equilibrio. En nuestro caso, luego de realizar un número importante de simulaciones se adoptaron 10 etapas ya que resultan adecuadas para la separación deseada para diversos tipos de carga. Este número de etapas es similar también a las utilizadas en la mayoría de los trabajos publicados.

En nuestro caso son 9 los componentes como se muestra en la tabla III-1. Puesto que cada etapa recibe y entrega flujo y por ende, información de otros platos, es que para lograr convergencia en forma general deben resolverse todas simultáneamente. El método de resolución adoptado es el Hysym® Inside-Out. Es esta una metodología de doble lazo; primero se realiza un cálculo simplificado que sirve para la inicialización de las variables y luego se procede a la solución rigurosa del sistema de ecuaciones considerado en el modelo.

Tomando como referencia la figura III-2 se asumen las siguientes hipótesis:

I=1 a 9

J=1 a 10

 $Q_J = 0$ para todo J=1 a 10 (adiabático en toda su extensión)

 $F_J = 0$ para todo J=1 a 10 (no hay alimentaciones laterales)

 $SV_J = 0$ para todo J=1 a 10 (no hay extracciones laterales de vapor)

 $SL_J = 0$ para todo J=1 a 10 (no hay extracciones laterales de líquido).

Las corrientes de entrada que definen al sistema:

Corriente líquida L_0 , de composición X_0 , totalmente definida por la corriente "DEA to Contactor" de la "Bomba de Reciclo".

La corriente gaseosa V_{11} , de composición Y_{11} , totalmente definida por la corriente "gas-sin-agua" del "Enfriador Primario".

Las corrientes de salida son resultado de la simulación del equipo

La corriente líquida L_{10} de composición X_{10} , define completamente a la corriente "Rich DEA" que es entrada del "Separador".

La corriente gaseosa V_1 de composición Y_1 , define completamente a la corriente "Sweet gas" que se envía a la atmósfera a través de la "Chimenea".

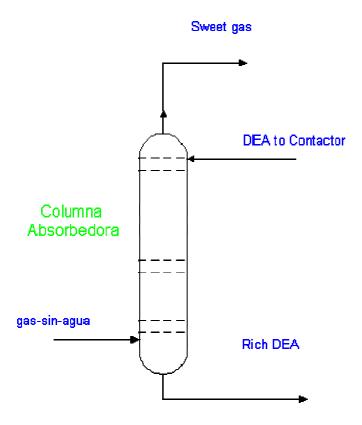


Figura III-3: Esquema Columna absorbedora

III.2.3 Modelo del Regenerador

En la figura siguiente se muestra un esquema de la columna regeneradora, la encargada de recuperar el solvente (DEA) y separar el CO₂ para su acondicionamiento y disposición final.

Con respecto al modelado de la columna propiamente dicha, la metodología es similar a la expuesta para la columna absorbedora. A diferencia de la columna absorbedora, la regeneradora cuenta con algunos equipos auxiliares los cuales tienen la misión de proveer la corriente líquida descendente (condensador) y la corriente ascendente de vapor (rehervidor) entre los que se redistribuyen los componentes de acuerdo a su diferente volatilidad relativa.

Como se aprecia el rehervidor es total mientras que el condensador es a reflujo total, por lo tanto ambos son etapas de equilibrio. Realizando varias simulaciones como en el caso de la columna absorbedora, se ha adoptaron 11 etapas para la columna regeneradora, incluyendo condensador y rehervidor.

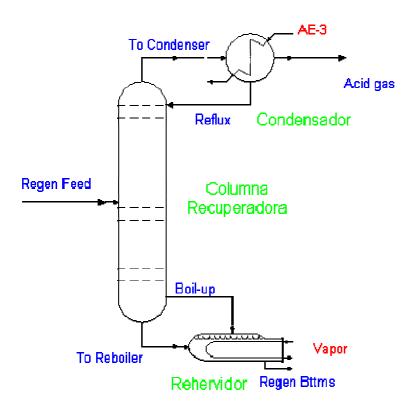


Figura III-4: Esquema Columna Regeneradora

Tomando como referencia la figura III-2 se asumen las siguientes hipótesis:

I=1 a 9

J=0 a 11 (0 para el condesador y 11 para el rehervidor)

Q_J=0 para todo J=1 a 10 (adiabático en toda su extensión)

 $Q_0 = Q_{Cond}$

 $Q_{11}=Q_{Reb}$

F_J=0 para todo J=0 a 4 y de 6 a 11 (hay una única alimentación en la etapa 5)

SV_J =0 para todo J=1 a 10 (no hay extracciones laterales de vapor)

SL_J =0 para todo J=1 a 10 (no hay extracciones laterales de líquido).

L₋₁=0 (el condensador no recibe corrientes líquidas)

 V_{12} =0 (el rehervidor no recibe una corriente de vapor, no incluye al vapor de calefacción)

Las corrientes de entrada que definen al sistema:

Corriente líquida F_5 , de composición Z_5 , totalmente definida por la corriente "Regen Feed" del equipo "Intercambiador Recuperador".

La corriente líquida L_1 , de composición X_1 , corresponde al reflujo del condensador (etapa 0).

La corriente gaseosa V_{11} , de composición Y_{11} corresponde al Boil-up del rehervidor (etapa 11)

Las corrientes de salida resultado de la simulación del equipo

La corriente líquida L_{11} de composición X_{11} , define completamente a la corriente "Regen Bttms" que es entrada del "Intercambiador Recuperador".

La corriente gaseosa V_0 de composición Y_0 , define completamente a la corriente "Acid gas" que es entrada del sumador que forma parte del "Deshumidificador".

Servicios auxiliares y balances entálpicos

Si bien la columna es adiabática, no lo son sus equipos auxiliares. El condensador se enfría con agua de enfriamiento mientras que el rehervidor se calefacciona con vapor saturado de agua. En la figura III-5 se indica un perfil típico de la evolución de las temperaturas. Los balances resultantes para estos equipos son:

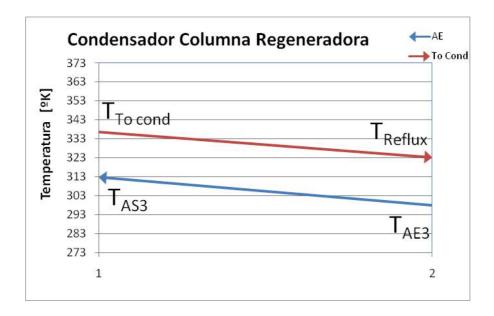


Figura III-5: Perfil de temperaturas- Condensador Columna

$$\begin{split} F_{AE3} - F_{AS3} &= 0 \\ Q_{Cond} - F_{AE3} \times Cp_{AE3} \times \left(T_{AS3} - T_{AE3}\right) &= 0 \\ Q_{Cond} - \left(UA\right)_{CondCol} \times \frac{\left(T_{ToCond} - T_{AS3}\right) - \left(T_{Reflux} - T_{AE3}\right)}{Ln\frac{\left(T_{ToCond} - T_{AS3}\right)}{\left(T_{Reflux} - T_{AE3}\right)} \end{split}$$

Los balances respectivos al vapor que condensa ya se contemplaron en el modelo de etapas múltiples. En la figura III-6 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura. Se define a la relación de reflujo como:

Reflux Ratio =
$$\frac{F_{\text{Reflux}}}{F_{\text{Acid Gas}}}$$

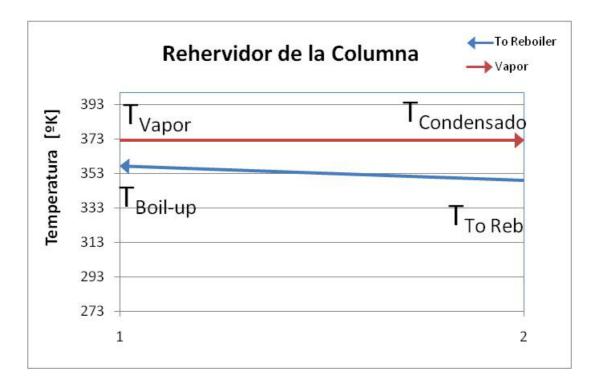


Figura III-6: Perfil de temperaturas- Rehervidor Columna

$$\begin{split} F_{Vapor} - F_{Condesado} &= 0 \\ Q_{Reb} - F_{AE3} \times \lambda_{vapor} \left(P_{vapor} \right) &= 0 \\ Q_{Reb} - \left(UA \right)_{RebCol} \times \frac{\left(T_{Vapor} - T_{Boil-up} \right) - \left(T_{Vapor} - T_{ToReb} \right)}{Ln \frac{\left(T_{Vapor} - T_{Boil-up} \right)}{\left(T_{Vapor} - T_{ToReb} \right)} \end{split}$$

Los balances correspondientes al líquido de fondo de columna que se evapora se consideraron oportunamente cuando se describieron las etapas de equilibrio en forma individual. Se define como carga de dióxido de carbono a la relación de fracción molar del mismo en función a la correspondiente a la amina:

$$\alpha_{CO_2} = \frac{x_{CO_2}}{x_{A\min a}}$$

Y si lo hubiera, para el sulfuro de hidrógeno se define en forma equivalente:

$$\alpha_{H_2S} = \frac{x_{H_2S}}{x_{A\min a}}$$

Para el caso de la columna recuperadora, una vez planteadas las ecuaciones precedentes hay 2 grados de libertad, esto implica que dos de sus parámetros deben ser fijados a fin de garantizar que el sistema pueda resolverse. Algunas de las variables más importantes pueden ser: relación de reflujo, temperatura en el condensador o rehervidor y carga de CO₂ en el fondo de la columna. De la bibliografía y simulaciones propias, a fin de asegurar una mejor convergencia para un amplio rango de condiciones de operación a cubrir durante cada corrida de optimización, se optó por fijar la temperatura del condensador y la carga de CO₂ en el fondo de la columna.

Un detalle a considerar es el número de etapas adoptado. Del estudio bibliográfico oscilan entre 6 y 10 el número de etapas teóricas. Debido a que en Hysys® la topología no puede ser modificada durante la optimización se adoptó un valor tal que garantice separación y convergencia para un amplio espectro de condiciones de entrada. Con respecto a la carga de dióxido de carbono se adoptó un valor típico (0,2) y 50 °C para la temperatura del condensador.

Para la estimación del diámetro de la columna se empló una de las utilidades del Hysys® (Tray Sizing). Para el detalle de los internos se adoptaron platos con campanas de burbujeo y para el cálculo del área el método $Minimum\ C_{sb}$ basado en velocidades de inundación. Esto tanto para la columna absorbedora como para la regeneradora.

Corriente de entrada a la planta de recuperación

"gas-ex-pre"		
Variable	Valor	Unidad
Temperatura	149.468	°C
Presión	8.5	atm
Flujo másico	Valor	Kg/h
Oxígeno	0.13960	Fracción molar
Dióxido de Carbono	0.0318519	Fracción molar
Agua	0.0637038	Fracción molar
Metano	$0.000\overline{0000}$	Fracción molar
Nitrógeno	0.764836	Fracción molar

III.2.4 Modelo de Enfriador primario

Los gases provenientes de la caldera deben enfriarse antes de ser enviados al sistema de absorción. Esto se consigue mediante agua de enfriamiento. Al mismo tiempo que el enfriamiento de los gases se produce la condensación parcial del vapor de agua en forma líquida. Esta agua líquida arrastra además, algo de gas disuelto, en especial al CO₂.

Este equipo puede modelarse como una etapa de equilibrio (flash) o bien sólo considerar al agua adoptando al resto de los componentes como incondensables y establecer su equilibrio a través de las constantes de Henry.

El equipo se representa en la figura III-7. Un perfil indicativo de la evolución de las temperaturas puede verse en la figura III-8.

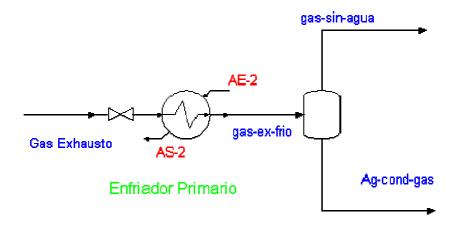


Figura III-7: Esquema del Enfriador Primario

El gas se enfría hasta su temperatura de operación (30 °C) con agua de enfriamiento a contracorriente que ingresa a 25 °C y sale a 60 °C. Con estas temperaturas queda definido el valor (UA) del equipo. El recipiente solo tiene la función de la separación de ambas fases y de dar tiempo suficiente a que las burbujas de gas y las gotas de líquido se separen. El conjunto es equivalente a un modelo de flash con calor definido (en este caso el cedido al agua de enfriamiento). Del balance se deduce el consumo de agua necesario. En la figura III-8 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura.

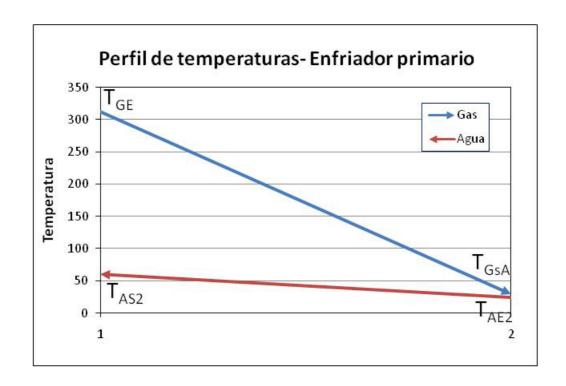


Figura III-8: Perfil de Temperaturas en Enfriador Primario

Los balances de materia y energía, como así las relaciones de equilibrio que definen este modelo son las siguientes:

Separador Flash
$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_{i,EP} - 1) \times x_{i,GE}}{\theta_{EP} \times (k_{i,EP} - 1) + 1} = 0$$

$$F_{ACG} - (1 - \theta_{EP}) \times F_{GE} = 0$$

$$F_{GSA} - \theta_{EP} \times F_{GE} = 0$$

$$x_{i,ACG} - \frac{x_{i,GE}}{\theta_{EP} \times (k_{i,EP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para i} = 1 \text{ a NC}$$

$$x_{i,GSA} - \frac{x_{i,GE} \times k_{i,EP}}{\theta_{EP} \times (k_{i,EP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para i} = 1 \text{ a NC}$$

Intercambiador

$$\begin{split} H_{GE} * F_{AG} - H_{GSA} \times F_{GSA} - H_{ACG} \times F_{ACG} - Q_{EP} &= 0 \\ Q_{Ep} - (UA)_{EP} \frac{(T_{GE} - T_{AS2}) - (T_{GSA} - T_{AE2})}{Ln \frac{(T_{GE} - T_{AS2})}{(T_{GSA} - T_{AE2})}} &= 0 \\ Q_{EP} - ma_{AE2} \times Cp_{AE2} \times (T_{AS2} - T_{AE2}) &= 0 \end{split}$$

Siendo además:

$$\begin{aligned} k_{i,EP} &= f \big(P_{EP}, T_{GsA} \big) & \text{para i} = 1 \text{ a NC} \\ T_{GsA} &= T_{ACG} & \text{por condición de equilibrio} \\ H_{GE} &= H \big(x_{GE}, T_{GE} \big) \\ H_{GsA} &= H \big(x_{GsA}, T_{GsA}, P_{GsA} \big) \\ H_{ACG} &= H \big(x_{ACG}, T_{ACG} \big) \end{aligned}$$

III.2.5 Modelo de Separador

En este equipo se produce la despresurización que existe entre las columnas absorbedora y recuperadora. En la despresurización, una fracción de CO₂ gaseoso se desprende. Para el modelado se asume un flash adiabático. Los balances de materia y energía, como así las relaciones de equilibrio que los definen se describen a continuación.

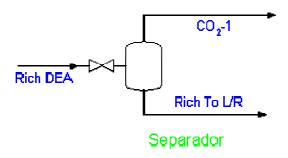


Figura III-9: Esquema del Separador

La presión de operación de la columna absorbedora es una variable optimizable (etapa 1), la etapa 10 se estima como 0,2 atm mayor (se asume una pérdida de carga en el equipo). Desde esa presión hasta la atmosférica se produce la descompresión inicial (la 2º en el ingreso a la propia columna recuperadora). El modelo es el de un flash adiabático que opera a presión atmosférica.

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{(k_{i,SEP} - 1) \times x_{i,RDEA}}{\theta_{SEP} \times (k_{i,SEP} - 1) + 1} = 0$$

$$F_{RL/R} - (1 - \theta_{SEP}) \times F_{RDEA} = 0$$

$$F_{CO2-1} - \theta_{SEP} \times F_{RDEA} = 0$$

$$x_{i,RL/R} - \frac{x_{i,RDEA}}{\theta_{SEP} \times (k_{i,SEP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para i} = 1 \text{ a NC}$$

$$x_{i,CO2-1} - \frac{x_{i,RDEA} \times k_{i,SEP}}{\theta_{SEP} \times (k_{i,SEP} - 1) + 1} = 0 \quad \text{para i} = 1 \text{ a NC}$$

$$H_{RDEA} * F_{RDEA} - H_{RL/R} \times F_{RL/R} - H_{CO2-1} \times F_{CO2-1} = 0$$

Siendo además:

$$k_{i,SEP} = f(P_{SEP}, T_{RL/R})$$
 para i = 1 a NC
 $T_{RL/R} = T_{CO2-1}$ por condición de equilibrio
 $H_{RDEA} = H(x_{RDEA}, T_{RDEA})$
 $H_{RL/R} = H(x_{RL/R}, T_{RL/R})$
 $H_{CO2-1} = H(x_{CO2-1}, T_{CO2-1}, P_{CO2-1})$

III.2.6 Modelo de Intercambiador recuperador

La etanolamina proveniente de la columna recuperadora se debe recircular a la columna absorbedora. Antes de hacer eso se debe enfriar, primero, precalentando la alimentación de la columna regeneradora (de esta forma se recupera energía). Esta operación se realiza en este equipo. Se asume que no hay cambio de estado.

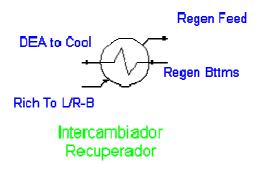


Figura III-10: Esquema Intercambiador Recuperador

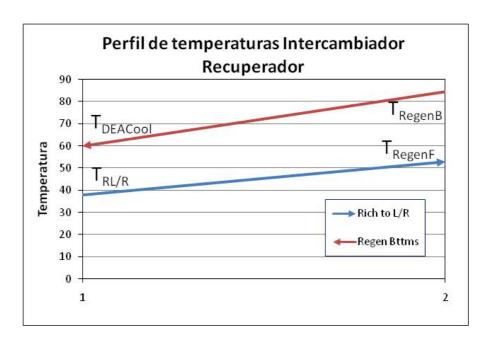


Figura III-11: Perfil de Temperaturas Intercambiador Recuperador

Los caudales de ambas corrientes ya están determinados por equipos aguas arriba, fijándose la temperatura de entrada de la columna recuperadora (Regen Feed) en 70 °C. La otra temperatura de salida y el *UA* quedan así definidos. En la figura III-11 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura.

Los balances de materia y energía así como la ecuación de transferencia de calor resultan:

$$\begin{split} F_{DEACool} - F_{\text{Re}\,gnB} &= 0 \\ F_{\text{Re}\,genF} - F_{RL/R} &= 0 \\ \left[H_{\text{Re}\,genB} - H_{DEACool} \right] \times F_{\text{Re}\,genB} - Q_{IR} &= 0 \\ \left[H_{RL/R} - H_{\text{Re}\,genF} \right] \times F_{RL/R} + Q_{IR} &= 0 \\ Q_{IR} - \left(UA \right)_{IR} \times \frac{\left(T_{DEACool} - T_{RL/R} \right) - \left(T_{\text{Re}\,genB} - T_{\text{Re}\,genF} \right)}{Ln \frac{\left(T_{DEACool} - T_{RL/R} \right)}{\left(T_{\text{Re}\,genB}} - T_{\text{Re}\,genF} \right)} &= 0 \end{split}$$

Donde
$$H_{\text{RegenB}} = H(x_{\text{RegenB}}.T_{\text{RegnB}})$$

$$H_{DEACool} = H(x_{DEACool}.T_{DEACool})$$

$$H_{RL/R} = H(x_{RL/R}.T_{RL/R})$$

$$H_{\text{RegenF}} = H(x_{\text{RegenF}}.T_{\text{RegenF}})$$

III.2.7 Modelo de Inter enfriador

La corriente de reciclo de etanolamina una vez enfriada parcialmente en el equipo anterior se acondiciona mediante agua de enfriamiento antes de su ingreso a la columna absorbedora. A modo de simplificación se estimará el cambio entálpico del agua de enfriamiento través de su Cp. En la figura se muestra un esquema del equipo. Los balances de materia y energía que lo representan se describen a continuación.

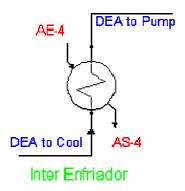


Figura III-12: Esquema del Inter Enfriador

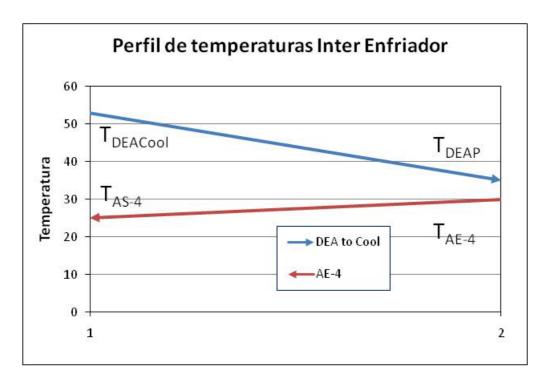


Figura III-13: Perfil de Temperaturas Inter Enfriador

La corriente de reciclo de amina se acondiciona a su temperatura de entrada a la columna regeneradora llevándola a 35 °C con agua de enfriamiento que ingresa a 25 °C y sale a 30 °C a fin de proveer una moderada diferencia de temperatura. De este modo tanto el UA como el caudal de agua quedan definidos. En la figura III-13 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura.

$$\begin{split} F_{DEACool} - F_{DEAP} &= 0 \\ F_{AE-4} - F_{AS-4} &= 0 \\ \left[H_{DEAP} - H_{DEACool} \right] \times F_{DEACool} - Q_{IE} &= 0 \\ Q_{IR} - ma_{AE4} \times Cp_{AE4} \times \left(T_{AS-4} - T_{AE-4} \right) &= 0 \\ Q_{IE} - \left(UA \right)_{IE} \times \frac{\left(T_{DEACool} - T_{AS-4} \right) - \left(T_{DEAP} - T_{AE-4} \right)}{Ln \frac{\left(T_{DEACool} - T_{AS-4} \right)}{\left(T_{DEAP} - T_{AE-4} \right)}} &= 0 \end{split}$$

Donde

$$H_{DEAP} = H(x_{DEAP}.T_{DEAP})$$

$$H_{DEACool} = H(x_{DEACool}.T_{DEACool})$$

III.2.8 Modelo de Bomba de reflujo

La función de esta bomba es la de proveer la recirculación de la etanolamina ya que la misma forma parte de un circuito cerrado. La figura ilustra el diagrama del mismo mientras que las ecuaciones que lo representan son:



Figura III-14: Esquema Bomba de Reciclo

Con una eficiencia adiabática de 75 %, caudal definido y diferencia de presión conocida la potencia queda definida.

$$W_{BR} - \frac{1}{\eta_{BR}} * q * (P_{DEAC} - P_{DEAP}) = 0$$

$$P_{DEAC} - P_{DEAP} - \Delta P_{BR} = 0$$

$$F_{DEAC} - F_{DEAP} = 0$$

III.2.9 Modelo de Deshumidificador (incluye sumador y knockout pot)

Las corrientes de CO₂ provenientes del separador y de la columna regeneradora se unen en un sumador. Esta nueva corriente contiene agua que debe separarse en este equipo antes de enviarse al blower (compresor) a fin de evitar líquido en la corriente gaseosa.

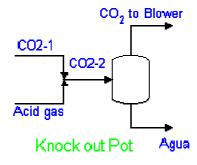


Figura III-15: Esquema Deshumidificador

 $F_{CO} = -F_{CO} = -F_{AG} = 0$

La corriente gaseosa "CO2-1" está más fría que la proveniente del condensador de la columna regeneradora por lo que puede producir algo de condensación del vapor de agua. A fin de evitar enviar líquido al compresor se intercala este equipo que tiene por misión separar dicha agua condensada. Se modela como un simple flash adiabático unido a la salida de un sumador de corrientes. El único parámetro definido es, entonces, que el calor intercambiado es nulo siendo el resto de las variables definidas por el sistema de ecuaciones que surgen de los balances de materia y energía que se indican a continuación. En la figura III.15 se visualiza el esquema del equipo.

$$\begin{split} F_{CO2-2} \times x_{i,CO2-2} - F_{CO2-1} \times x_{i,CO2-1} - F_{AG} \times x_{i,AG} &= 0 \\ F_{CO2-2} \times H_{CO2-2} - F_{CO2-1} \times H_{CO2-1} - F_{AG} \times H_{AG} &= 0 \\ Donde \\ H_{CO2-2} &= H \left(x_{CO2-2}, T_{CO2-2}, P_{CO2-1} \right) \\ H_{CO2-1} &= H \left(x_{CO2-1}, T_{CO2-1}, P_{CO2-1} \right) \\ H_{AG} &= H \left(x_{AG}, T_{AG} \right) \\ \\ \sum_{i=1}^{NC} \frac{\left(k_{i,KOP} - 1 \right) \times x_{i,CO} \cdot 2 - 2}{\theta_{KOP} \times \left(k_{i,KOP} - 1 \right) + 1} &= 0 \\ F_{Agua} - \left(1 - \theta_{KOP} \right) \times F_{CO} \cdot 2 - 2 &= 0 \\ F_{CO} \cdot 2 \cdot B - \theta_{KOP} \times F_{CO} \cdot 2 - 2 &= 0 \\ x_{i,RL + R} - \frac{x_{i,CO} \cdot 2 - 2}{\theta_{KOP} \times \left(k_{i,KOP} - 1 \right) + 1} &= 0 \\ para \quad i = 1 \text{ a NC} \\ x_{i,CO} \cdot 2 - 1 - \frac{x_{i,CO} \cdot 2 - 2}{\theta_{KOP} \times \left(k_{i,KOP} - 1 \right) + 1} &= 0 \\ H \left(x_{CO} \cdot 2 - 2, T_{CO} \cdot 2 - 2 \right) * F_{CO} \cdot 2 - 2 - H \left(x_{Agua} \cdot T_{Agua} \right) \times F_{Agua} - H \left(x_{CO} \cdot 2 \cdot B, T_{CO} \cdot 2 \cdot B, T_{CO} \cdot 2 \cdot B \right) \times F_{CO} \cdot 2 \cdot B} = 0 \end{split}$$

Siendo además:

$$k_{i,KOP} = f(P_{KOP}, T_{Agua})$$
 para i = 1 a NC
 $T_{Agua} = T_{CO2-2}$ por condición de equilibrio

III.2.10 Modelo de Blower (compresor, enfriador)

Para disponer el CO₂ para su despacho (por ejemplo para ser bombeado a la profundidad del mar) se debe aumentar la presión del mismo. Al mismo tiempo, puesto que la alta compresión implica altas temperaturas se dispone de equipos refrigeradores. Ambos se presentan en la figura siguiente que representa al esquema del equipo. En la figura III-17 se indica un perfil típico de la evolución de la temperatura. De los balances de materia y energía se simula el comportamiento del mismo:

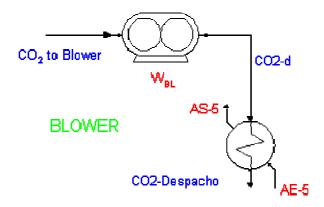


Figura III-16: Esquema Blower

Hipótesis:

El compresor (eficiencia adiabática de 75 % y politrópica de 83 %) eleva la presión hasta unas 100 atm, adecuadas tanto para su transporte a larga distancia como para su inyección profunda en el mar para su disposición final en forma de hidratos estables. Esta fuerte compresión se ve acompañada por un elevado aumento de temperatura. Para acondicionar

la temperatura y proteger al blower se lo enfría con agua de enfriamiento que ingresa a 25 °C.

$$\begin{split} T_{CO2d} - T_{CO2B} & \left\{ 1 + \frac{1}{\eta_{Bl}} \left[\frac{P_{CO2d}}{P_{CO2B}} \right]^{\frac{\gamma_a - 1}{\gamma_a}} - 1 \right\} = 0 \\ \dot{W}_{Bl} - \dot{m}_{CO2B} * Cp_a \left(T_{CO2d} - T_{CO2B} \right) = 0 \\ F_{CO2d} - F_{CO2B} = 0 \\ P_{CO2d} + \Delta P_{Bl} - P_{CO2B} = 0 \end{split}$$

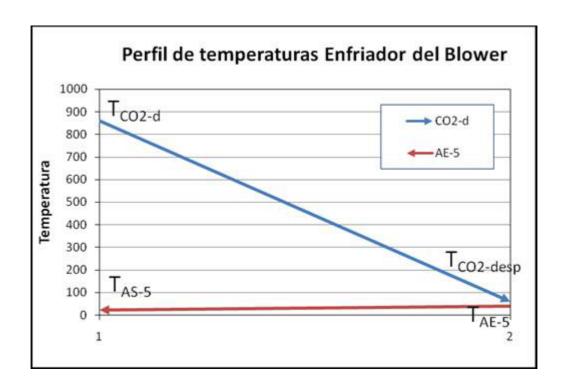


Figura III-17: Perfil de Temperaturas Enfriador Blower

$$\begin{split} F_{CO2-d} - F_{CO2-desp} &= 0 \\ F_{AE-5} - F_{AS-5} &= 0 \\ \left[H(x_{CO2-d}.T_{CO2-d}, P_{CO2-d}) - H(x_{CO2-desp}.T_{CO2-desp}, P_{CO2-desp}) \right] \times F_{CO2-d} - Q_{EB} &= 0 \\ Q_{EB} - ma_{AE5} \times Cp_{AE5} \times (T_{AS-5} - T_{AE-5}) &= 0 \\ Q_{Bl} - (UA)_{Bl} \times \frac{(T_{CO2-d} - T_{AS-5}) - (T_{CO2-desp} - T_{AE-5})}{(T_{CO2-desp} - T_{AE-5})} &= 0 \\ Ln \frac{(T_{CO2-desp} - T_{AE-5})}{(T_{CO2-desp} - T_{AE-5})} \end{split}$$

III.2.11 Componentes químicos

La siguiente tabla lista los componentes que forman parte del sistema de absorción. Incluye al gas combustible (asumido como metano puro pero se agrega además hidrógeno y sulfuro de hidrógeno), los componentes del aire (oxígeno y nitrógeno), y los productos finales e intermedios de la combustión (monóxido y bióxido de carbono y agua) y la solución absorbente (dietanolamina):

Sistema de absorción				
##	Compuesto	Formula		
1	Nitrógeno	N ₂		
2	Sulfuro de Hidrógeno	H_2S		
3	Dióxido de carbono	CO ₂		
4	Metano	CH ₄		
5	Agua	H ₂ O		
6	Dietanolamina	DEA		
7	Oxígeno	O_2		
8	Monóxido de Carbono	CO		
9	Hidrógeno	H ₂		

Tabla III-1

III.3 Modelos de costos

Los costos correspondientes a la planta de absorción se calculan

según las ecuaciones típicas publicadas en la bibliografía basadas en el

Método de Guthrie y adaptadas por Turton [16].

Los modelos de costos de los equipos comunes a ambos procesos no

se describen ya que se han expuesto en el capítulo 2. Aquí se detalla el

cálculo de las columnas: absorbedora y regeneradora.

El costo de las columnas se calcula según el siguiente esquema, que

resulta riguroso, en comparación con otros trabajos reportados en la

bibliografía. Para ello se calculan las partes que conforman ambas

columnas. Se incluye también el costo que representa el inventario inicial o

carga inicial de dietanolamina para ambas columnas dadas las magnitudes

involucradas.

Debido a que la columna podría exceder el tamaño máximo

correlacionado en las ecuaciones correlacionadas para el costo, haremos

uso del escalado en función de la potencia 0,6. Esto es, sabiendo el costo

para una columna de un área determinada, se extrapolará a un área mayor

en función de la siguiente expresión:

 $C_{A2} = C_{A1} * \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^{0.6}$

Donde:

A₁: área de costo conocido (D= 4 m)

C_{A1}: costo para el área anterior (230622.775 u\$s)

132

A₂: área de la columna que se desea calcular (dada por la utilidad tray sizing del Hysys®)

C_{A2}: costo de la columna de área A₂

Como mencionamos en el costo de la columna se incluye la carga inicial de etanolamina contemplando el hold-up de las columnas y equipos asociados. Los recambios posteriores pueden asimilarse como un costo operativo distribuido uniformemente a lo largo de la vida útil del solvente. Debe tenerse en cuenta que dada la magnitud de las columnas, el costo puede ser mayor si se consideran aspectos de basamento, fundaciones, estructura de sostén, entre otros aspectos que no son tenidos estrictamente en cuenta en las ecuaciones consideradas. [14]

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

$$\begin{split} V_{Etapas} &= \frac{\pi \times D_{ET}^{2}}{4} \times 0.05 \times N_{ET} \\ V_{DC} &= \left(\frac{\pi \times D_{ET}^{2}}{4} - A_{U}\right) \times 0.5 \times (N_{ET} - 1) \\ V_{total} &= V_{Etapas} + V_{DV} \end{split}$$

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

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

En la ecuación anterior se asume 1,300 u\$s/Kg el costo de la etanolamina.

Por lo que el costo total de la columna es:

$$C_{A2} = C_{DEA} + C_{A1} * \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^{0.6}$$

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

III.4 Optimización del proceso de Captura de CO2.

A continuación se muestran algunos resultados para diferentes puntos de operación del sistema. Por ejemplo se adoptan valores típicos de los gases de escape de la planta de generación, para valores de producción de 45, 85, 335 y 495 MW como entrada a la planta de captura de CO₂.

Flujo gas ex	DEA	fracción	Presión	Carga rehervidor	Flujo de CO2	Blower
[Kg/h]	[Kg/h]	masica DEA	[atm]	[MW]	[Kh/h]	[MW]
$4.00\ 10^5$	1.377 10 ⁷	0.301507	1.2036	224.651	18335.675	6.442
9.00 10 ⁵	1.808 10 ⁷	0.218971	5.9802	318.068	39548.097	13.644
$4.00 \ 10^6$	$2.029 \ 10^8$	0.206940	1.7990	3668.401	178279.850	64.975
6.00 10 ⁶	3.496 10 ⁸	0.211150	4.1250	6291.917	268786.109	99.037

Tabla III-2 resultados para 4 simulaciones distintas

Una vez validado el modelo de simulación y logrando resultados satisfactorios en distintos puntos operativos que cubren un amplio rango de operación, se procede a la optimización del proceso de captura de CO₂, al

igual que en el capítulo II se lo hiciera con el sistema de generación de potencia. Debe notarse que en este caso el modelo es fuertemente no lineal, en particular debido a las ecuaciones que modelan las dos columnas de destilación y las estimaciones de las propiedades fisicoquímicas correspondientes.

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

El proceso de captura del dióxido de carbono contiene un conjunto de variables susceptibles de ser optimizadas. En este caso se consideran solo dos: *la presión de operación de la columna absorbedora* y el *caudal de DEA (dietanolamina) al 30 % P/P*, por ser las más importantes con respecto al resto. El número de etapas, la temperatura del condensador, y la carga de dióxido de carbono se fijan como se ha ya expresado, a fin de satisfacer los grados de libertad del sistema.

Como se ha expresado anteriormente, se adopta una corriente cuya composición es representativa de las condiciones de operación de los gases provenientes de la planta de generación de potencia, según la siguiente tabla:

Componente	Fracción molar
O2	0.13961
СО	0.00000
CO2	0.03185
H2	0.00000
H2O	0.06370
CH4	0.00000
N2	0.76484

Tabla III-3: Composición de los gases de entrada

A fin de cubrir los grados de libertad de la columna recuperadora se fijó la temperatura de tope y la carga de CO₂ en la corriente de fondo. La carga es la fracción de CO₂ que aún permanece en la corriente de DEA que se recircula a la torre absorbedora.

La siguiente tabla resume las restricciones impuestas al proceso.

Restricción	Objeto	Operador	Valor	Unidad
$T_{\scriptscriptstyle DEACool} - T_{\scriptscriptstyle RL/R}$	Intercambiador Recuperador	>	30	° C
$T_{\mathrm{Re}\mathrm{gen}B}-T_{\mathrm{Re}\mathrm{gen}F}$	Intercambiador Recuperador	>	30	° C
$\frac{\left(F_{CO2}^{CO2} + F_{CO2}^{Agua}\right)}{F_{CO2}^{gas-ex-pre}} * 100$		>	valor	%
$\frac{\left(F_{CO2}^{CO2} + F_{CO2}^{Agua}\right)}{F_{CO2}^{gas-ex-pre}} * 100$		<	Valor+1	%
$lpha_{\scriptscriptstyle CO2}^{^{}}$ To Reboiler	Columna recuperadora	=	0.2	$\frac{Moles\ CO_2}{Moles\ DEA}$
Temperatura	Condensador Columna	=	50	° C

Las restricciones que se imponen al modelo son: la diferencia de temperatura de entradas y salidas del intercambiador recuperador son tales que nunca sean inferior a los 30 °C:

El grado de recuperación de CO₂ se fija con una banda de 1%, a fin de evitar restricciones de igualdad que el método BOX no admite.

El agua de enfriamiento del condensador tiene fijadas tanto su temperatura de entrada como la de salida, en cambio la del vapor que calefacciona al rehervidor se ajusta para que siempre sea 15 °C más caliente que el líquido que calienta.

En la figura III.18 se presenta un conjunto de soluciones óptimas para una condición de operación que implique una recuperación del 90% del CO₂ que ingresa desde la planta de generación de potencia.

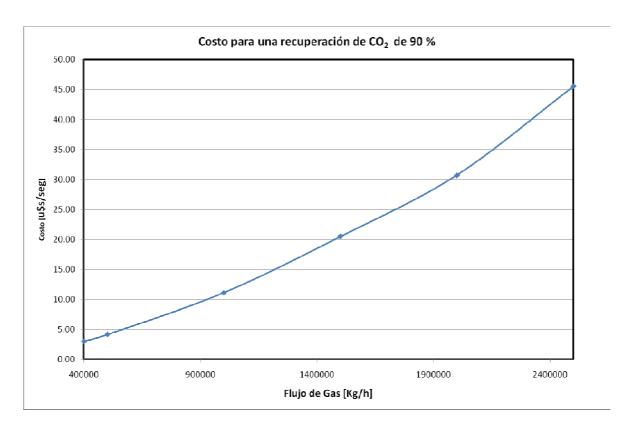


Figura III-18: Curva de costo total en función del flujo de gases de combustión

Los problemas de convergencia surgen principalmente de la columna absorbedora a fin de que pueda cubrir una amplia gama de flujos a tratar. Para la especificación de la columna se fijaron los valores de temperatura del condensador en 323,1 °K y una carga de CO₂ en el fondo de 0,200 (valor típico adoptado de bibliografía y verificado mediante simulación).

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

La figura III.19 representa los casos optimizados correspondientes a diversos porcentajes de recuperación de dióxido de carbono (fijando un caudal de gases que entra a la planta) que va desde el 50 al 99 %. Vemos como el mismo se "dispara" a partir del 95 %.

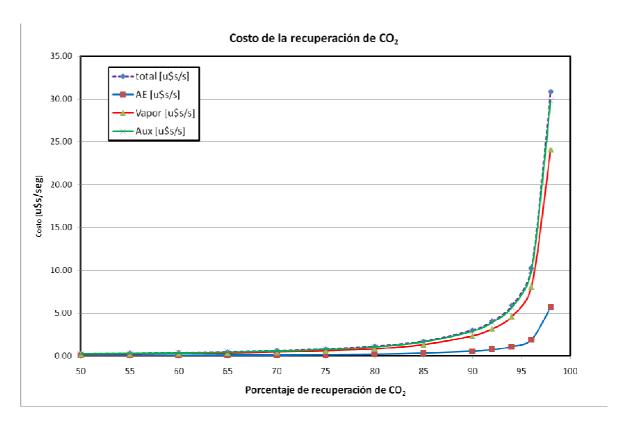


Figura III-19: Curva de costo total en función del porcentaje de CO2 recuperado

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

CAPITULO IV

Plantas de Generación de Potencia Acopladas a Sistemas de recuperación de CO₂.

IV.1 Descripción del Proceso. Modelado

En los capítulos precedentes se han descrito por separado ambos procesos involucrados en la planta de generación acoplada a un sistema de captura de dióxido de carbono post-combustión.

Por un lado se ha optimizado la planta de generación de potencia mediante ciclo combinado (capítulo II) utilizando como combustible la combustión de gas natural. Los gases calientes se aprovechan para generar vapor que es empleado para más generación de potencia (con lo que se mejora el rendimiento de todo el proceso). Estos gases contienen: nitrógeno (casi inerte), el oxígeno de exceso, el vapor de agua (aportado por la combustión del hidrógeno del gas natural) y el dióxido de carbono proveniente del Carbono del metano. Este último es uno de los gases generadores del efecto invernadero. Como se verá en este capítulo, el exceso de aire utilizado en la combustión no solo tiene impacto en la planta de generación, ya que además impacta fuertemente en la composición de los gases que entran a la planta de captura (dilución del dióxido de carbono).

A fin de reducir el impacto ambiental del emprendimiento se procede al anexado de un proceso de tratamiento de efluentes gaseosos cuya finalidad es absorber parte del dióxido de carbono generado en la combustión (capítulo III).

Mediante el mismo se logra un cierto nivel de recuperación introduciendo además algunas problemáticas importantes a tener en cuenta.

Por un lado, el destino que se reservará a dichos gases. Si bien el dióxido de carbono es materia prima de numerosos procesos, el incremento de oferta al mercado implica una marcada reducción de su valor. También el mercado puede crecer si se lo utiliza en la recuperación secundaria de petróleo, de todas formas siempre la oferta superará a la demanda.

Se han sugerido procesos de captura en minerales, minas subterráneas o su disolución en el mar. De todas estas, quizás la más prometedora sea la última en donde el gas carbónico puede ser retenido durante mucho tiempo y mediante la intervención de algas en su transformación en biomasa.

Como alternativa es interesante el fenómeno de hidratación que hace que el CO₂ en presencia de agua a alta presión se transforme en un hidrato sólido permaneciendo de esta manera encapsulado en el fondo del mar. Para que esto ocurra se requiere grandes presiones de compresión para poder llevar el gas a las condiciones necesarias para su hidratación.

En resumen, el CO₂ capturado puede ser concentrado en una corriente líquida o gaseosa que podría ser transportada e inyectada en el fondo del océano o en formaciones geológicas subterráneas como reservorios de petróleo y gas, yacimientos de carbón y acuíferos profundos. Si bien resulta costosa cualquier alternativa, la tecnología de secuestro de carbón es la opción que puede proveer la mitigación a largo plazo de los gases del efecto invernadero mientras se consuman los recursos de energía fósil disponibles. En nuestro caso, como se ha expresado, no tenemos en cuenta el costo final de deposición, solo se calcula la energía necesaria para comprimirlo a una presión que permita su transporte a su destino final. Esto puede reducir bastante el costo calculado para la generación de energía, según donde se ubique la planta real a construir.

No obstante, puesto que el proceso de absorción requiere grandes equipos y un importante consumo en servicios auxiliares se debe plantear cual es el grado de recuperación aceptable. Si bien ecológicamente sería deseable un 100 % de recuperación esto haría oneroso al proceso e inviable al emprendimiento.

Una alternativa a tener en cuenta es el potencial beneficio a través de la operatoria de los bonos de carbono en función del grado de minimización de vertido de dicho gas a la atmósfera.

Si bien un mayor nivel de recuperación implica una reducción importante en el grado de vertido a la atmósfera, y un mayor ingreso en valores de bonos de carbono, los costos operativos y fijos serán mayores (recordar la variación de costo exponencial analizada en el capítulo anterior).

El proceso integrado puede apreciarse en la figura IV-1 donde queda claro que resulta de la disposición en serie de los dos procesos mencionados con antelación. Por lo tanto, el modelo correspondiente resulta de integrar ambos modelos ya vistos, mediante una ecuación que iguale el flujo de gas que sale de la planta de generación con el ingreso a la planta de captura de CO₂

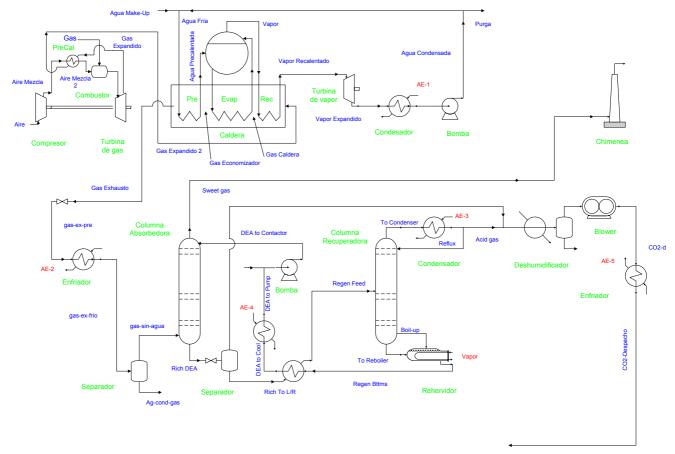


Figura IV-1 : Flowsheet de la planta de potencia con circuito de absorción

Tanto los modelos como las ecuaciones de costo correspondientes al sistema de generación ya fueron explicadas y desarrolladas en el capítulo II. Lo mismo se ha realizado en el capítulo III para la planta de captura de dióxido de carbono.

Dado el modelo de la planta global así obtenido, la tarea de simulación resulta relativamente sencilla en comparación con la simulación de ambos procesos por separado, dado que no existen nuevos reciclos adicionados al grafo que representa a la planta completa, en comparación con ambas plantas por separado. No obstante, si se definen puntos de operación extremos en cada una de las plantas, la convergencia de la otra

resulta más difícil, debido a las condiciones de operación extremas definidas según el acople de las mismas.

El problema de optimización resultante crece en magnitud y complejidad, con respecto al problema de ambas por separado, ya que se acoplan ecuaciones y modelos fuertemente no lineales; y además, las condiciones de operación reflejan diversos balanceos entre costos fijos y operativos según las condiciones de operación de ambas plantas, y las interacciones resultantes entre distintos sectores de las mismas.

Por lo tanto, para definir una estrategia de optimización, en primer lugar es interesante analizar los resultados obtenidos en forma parcial para cada planta, y luego realizar la optimización del sistema acoplado.

En el capítulo II se realizaron optimizaciones de la planta de generación de potencia, asumido un valor de potencia neta entregada y las diferencias de temperaturas en los diferentes equipos de intercambio térmico como restricciones. Así planteado el problema, nos quedan como variables de optimización: *las presiones de descarga de las turbinas, tanto la de gas como la de vapor, y los flujos operativos de los fluidos principales, gas, agua y aire*.

A fin de reducir el número de variables de optimización, se optó por fijar en valores típicos para este tipo de plantas las presiones de operación de las turbinas. Además, en el caso de la gas se ha fijado una presión tal que los gases de escapes tengan la suficiente fuerza impulsora para ingresar a la planta de absorción. En otras palabras, una menor presión de descarga en la turbina de gas tambien implicaría potencia generada adicional, pero cuando se la integra con la planta de absorción, de no tener la presión suficiente se requeriría el uso de un compresor lo que implica mayores costos.

En principio nada impide que la turbina de vapor opere con descarga al vacío con lo que se obtendría una potencia adicional pero implicaría menor fuerza impulsora en el condensador y por lo tanto se encarecería dicho equipo aumentando tambien el flujo de agua de enfriamiento (por la misma disminución de la diferencia de temperaturas). Además, se pretende conservar cierto nivel térmico para poder analizar una potencial integración energética con respecto a la planta de captura de CO₂.

Por las consideraciones anteriores, fijadas las presiones de operación, resultan como variables de optimización los flujos anteriormente mencionados. Los acercamientos térmicos en cada equipo de intercambio se restringen mediante una ecuación que se incorpora al programa de optimización. En general, se toma como acercamiento mínimo permitido 30 grados a un intercambio donde participa una corriente líquida y una de gas y 10 grados a una con intercambio entre corrientes líquidas.

Se ha visto en el Capítulo II que el costo total está fuertemente asociado al costo del combustible, que es el dominante, por lo cual sigue su tendencia. Esto se aprecia en la figura IV-2.

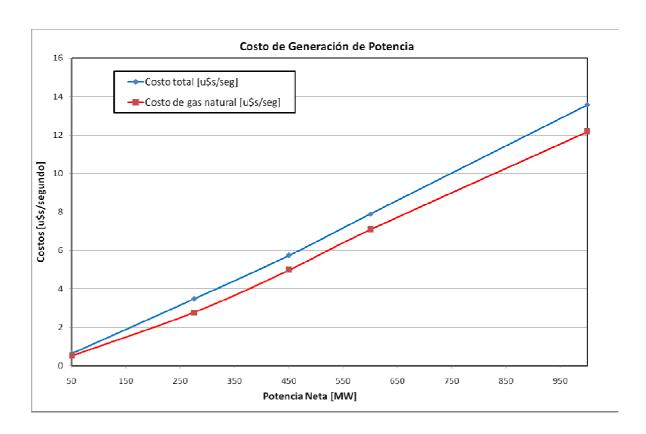


Figura IV-2 Costo de Generación de Potencia.

Cada punto representa un caso de simulación. Como vimos la función objetivo se expresa en "velocidad de costo", es decir, el costo en dólares por segundo. Sabiendo entonces el costo total y la potencia generada se puede calcular el valor unitario de la energía, parámetro fundamental ya que determinará el monto mínimo al que se deberá vender el [KW-hr] de energía.

Se demostró en el capítulo II que el valor del precio unitario en la planta de generación es prácticamente constante, dado que el costo dominante es el costo del combustible y no los costos de inversión (por lo que el factor de escala no incide) según los valores asumidos para el cálculo del factor de recupero de capital (tasa de interés y vida útil de la planta, en el modelo de costos adoptado). Si se realizan cambios en dichos valores, tomando en cuenta valores típicos en proyectos de inversión, el comportamiento descrito se mantiene.

La potencia neta de la turbina de gas es la diferencia entre la energía provista por el expansor y la consumida por el compresor. La turbina de vapor suministra una potencia proporcional al flujo de agua y al salto de presión (fijo).

La potencia neta de la planta (sin considerar pequeños consumos en bombas) es la suma de las aportadas por las turbinas y este valor puede obtenerse de diferentes maneras mostrando el alto nivel de acople que existe entre las variables. En otras palabras, una misma potencia neta se podría conseguir con un arreglo diferente de potencias aportadas por ambas turbinas. Esta característica complica sobremanera la tarea de optimización. Más aun cuando se debe optimizar el proceso acoplado.

Por otra parte, una operación de la turbina de gas en condiciones cercanas a la relación estequeométrica suministraría mayor potencia pero también gases a altas temperauras, que desde el punto de vista técnico lleva a la posibilidad de destrucción de la turbinas de gas; y en lo económico dispara los precios exponencialmente. Un exceso de aire considerable evita esto pero genera otro tipo de problemas que veremos al tratar la planta de absorción.

Del análisis de las soluciones obtenidas en el capíutlo II se observa que cuando el flujo de agua es bajo los equipos tienen mucha diferencia de temperaturas (menores costos de areas) pero la potencia generada por la turbina de vapor se reduce. En general, la solución óptima lleva a las restricciones a ser activas, es decir, la solución óptima fuerza a que la mínima diferencia de temperatura sea de 30 °C para los intercambios térmicos en donde esta restricción es impuesta.

Siendo el gas natural la única fuente de energía, para cierta potencia el mismo queda fijado al momento de imponer restricciones al circuito de agua según lo explicado. Entonces, ¿qué cantidad de aire conviene emplear?. Un cierto exceso de aire beneficia la operación del ciclo de potencia pero afecta negativamente a la planta de absorción ya que le impone mayor carga.

A una mayor potencia instalada, no solo le corresponde un mayor flujo de gas natural (con su subsecuente costo) sino tambien un flujo de gas exhausto mayor. Esto incide directamente en el costo de recuperación o captura del dióxido de carbono, en forma proporcional (capítulo III).

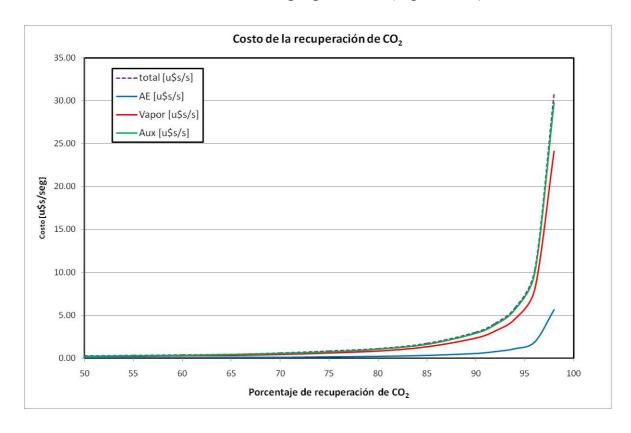


Figura IV-4 Costo de Recuperación del Dióxido de Carbono

En la figura IV-4 además del costo total en función de la recuperación de CO₂ se aprecia el aporte que al mismo hacen los costos operativos (vapor y agua de enfriamiento). Vemos que éstos forman parte sustancial del costo total. En particular, el flujo de vapor, que aporta la energía para la evaporación en el rehervidor.

En la figura IV-5 se observa con mayor claridad la discriminación entre costos operativos, ya que se muestra el aporte del costo de agua de enfriamiento y del vapor como porcentaje del costo operativo total. Se aprecia que el vapor es el que más incide en casi un 80 % mientras que el agua de enfriamiento lo hace con el 20 % restante.

Para la planta de recuperación de dióxido de carbono se tomó como función objetivo la minimización de la velocidad de costo (igual que en el capítulo II para la planta de generación), y como variables de optimización se adoptaron la presión de operación de la columna absorbedora y el caudal de amina. Las diferencias de temperatura en el intercambiador que calienta la alimentación de la columna recuperadora y la cantidad de CO₂ recuperada se restringen mediante desigualdades incorporadas al problema de optimización, según se explicó en el capítulo anterior.

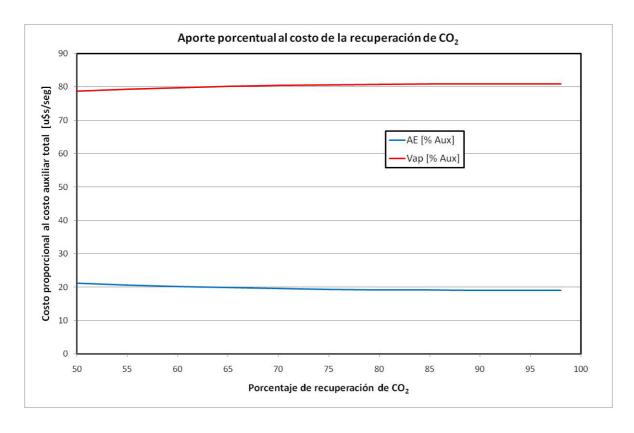


Figura IV-5 Aporte porcentual al costo de recuperación

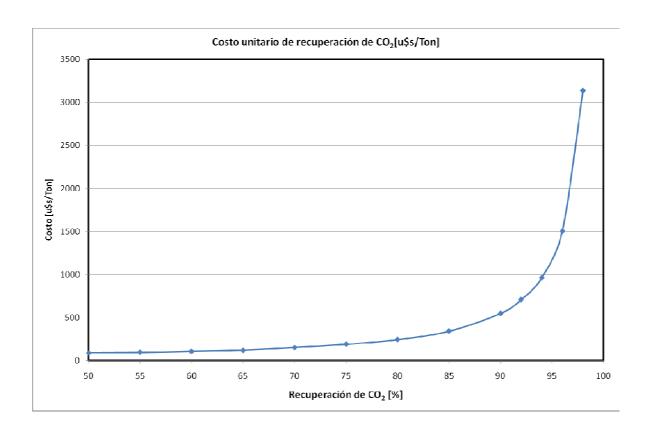


Figura IV-6 Costo Unitario de la recuperación de CO2

Las curvas se obtuvieron para un caudal de gas exhausto de 400.000 [Kg/h] equivalente al producido por una planta de 30 [MW]. En la figura IV.6 se concluye que el costo de recuperación se dispara exponencialmente a partir de una recuperación elevada del CO₂ que ingresa desde la planta de generación de potencia. Esta funcionalidad, como veremos en el punto siguiente, es fuertemente dependiente de la dilución del dióxido de carbono en la corriente de gases a tratar.

IV.2 Optimización de la planta de generación de potencia acoplada a un sistema de captura de dióxido de carbono mediante un esquema de post-combustión

Las soluciones obtenidas previamente (capítulo II) para la planta de recuperación de dióxido de carbono asumen una condición de entrada de los gases provenientes de la planta de generación. Vimos que el costo de la planta es proporcional al caudal de gases a tratar, si se adopta un porcentaje de recuperación del CO₂ que ingresa a la planta de captura. Más aún, el costo crece en forma exponencial si se pretenden recuperaciones mayores al 95%. No obstante, la corriente de gas alimentada adoptada para el análisis en el capítulo anterior se caracteriza por una dilución importante del CO₂. Esto se debe a que se ha adoptado una situación representativa de una condición de operación que se caracteriza por un exceso de aire holgado en la combustión en la turbina de gas.

En el otro extremo, si se asume una corriente de gas típica correspondiente a una condición de operación con exceso de aire mínimo en la turbina de gas, es decir, cercano a las condiciones estequiométricas, se aprecia que niveles de recuperación del 98 % son posibles sin implicar costos tan elevados y el comportamiento marcadamente exponencial mostrado en la figura IV.6 y el capítulo anterior, se atempera fuertemente.

Esta condición operativa, que puede considerarse en este sentido opuesta a la anterior, se caracteriza (ver Figuras IV. 7 a IV.9) por una sustancial diferencia en el costo unitario de captura de CO₂, mientras que los porcentajes de costos relativos se mantienen aproximadamente iguales al caso de estudio previamente analizado con concentración de CO₂ mas diluida.

La figura IV.10 muestra claramente la diferencia de costos entre ambas condiciones "extremas" de operación. Nuevamente conviene aclarar que dichas figuras se obtienen de optimizar la planta de captura de CO₂, en forma aislada, asumiendo condiciones particulares de la corriente de gas que se alimenta a planta, mientras que las variables de optimización y restricciones utilizadas son las mismas, según lo explicado en el capítulo anterior.

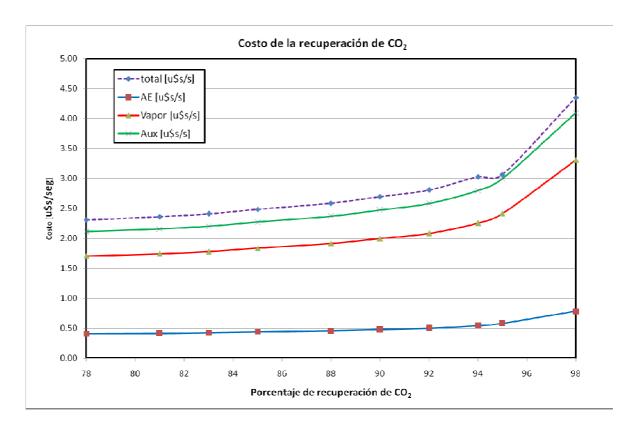


Figura IV-7 Costo Recuperación de CO2 en un flue gas concentrado

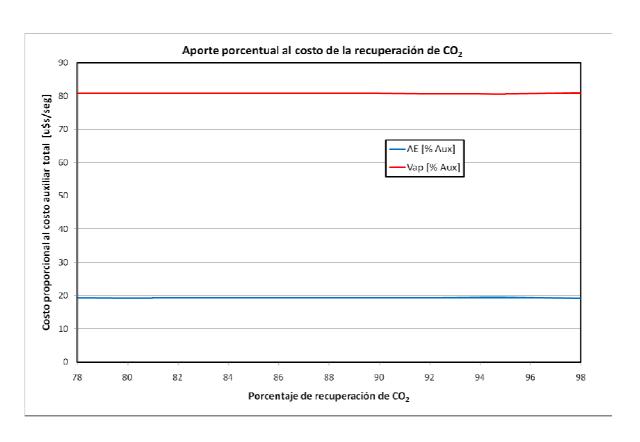


Figura IV-8 Aporte porcentual al costo en flue gas concentrado

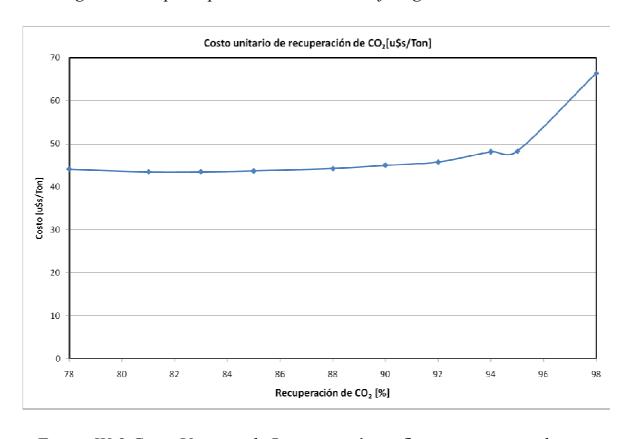


Figura IV-9 Costo Unitario de Recuperación en flue gas concentrado

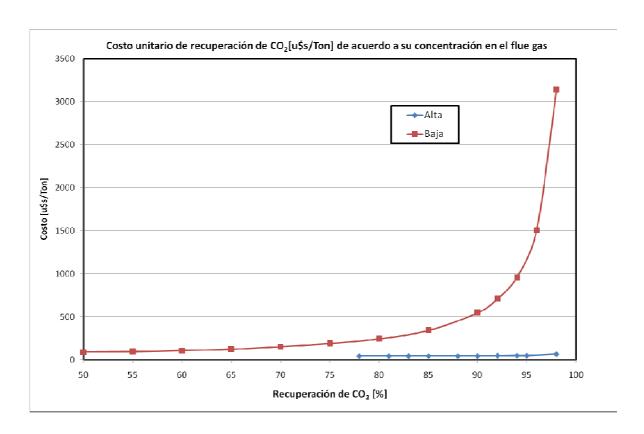


Figura IV-10 Comparación de costos unitario para flue gas concentrado y diluido

Si se pretende optimizar la planta completa, esto es la de generación de potencia acoplada a la de captura de dióxido de carbono, resulta claro que el exceso de aire utilizado en la turbina de gas resulta una variable crítica para la optimización del sistema. Basta con observar la fuerte diferencia de precios en la captura de una tonelada de CO₂ según las condiciones del gas de entrada a planta.

En el problema o modelo de optimización, se mantienen las restricciones y variables de optimización establecidas en los capítulos anteriores, remarcando que la corriente de aire, según lo explicado en el capítulo anterior, ya se incluía como variable de optimización.

Aquí resulta evidente que cuando se optimizan las plantas por separado, se obtienen soluciones específicas para cada una, ya que no existe el acople y los balanceos o contrapuntos entre los modos de operación y costos asociados, explicados más arriba.

Las siguientes tablas resumen los resultados de la optimización de la planta completa incluyendo el ciclo de potencia y su acople a un proceso de absorción de dióxido de carbono. Se trata de una planta que genera una potencia neta de 427 [MW] y captura el 98 % del dióxido de carbono que produce en la combustión del combustible. El combustible empleado es, como se ha venido estudiando a lo largo de este trabajo, el gas natural y la absorción se realiza a través de un esquema *post combustión* con solución de Dietanolamina (DEA).

A continuación se muestran los resultados en forma de tabla incluyendo flujos, parámetros principales de los equipos más importantes, costos operativos, costos de generación de electricidad y de captura, perfiles de temperatura y composición de CO₂ entre otros.

En la tabla IV.1 y IV.2 se muestran las condiciones asumidas para las corrientes de entrada a la planta.

Tabla IV.1 Datos de las Corrientes de entrada

	Unidades	Gas	Aire	Agua	DEA
Fracción Vaporizada		1.000	1.000	0.000	0.000
Temperatura	[°K]	298.15	298.15	373.471533	308.15
Presión	[atm]	8.5	1	30	1.000001
Flujo Molar	[Kgmol/h]	5.44315 10 ³	$1.2415 \ 10^5$	5.75425 10 ⁴	$8.837 ext{ } 10^5$
Flujo Másico	[Kg/s]	24.25679409	994.976713	288	5000

Tabla IV.2 Composición de la corriente de DEA

DEA :	Fracción Másica
CO_2	0.01100
H ₂ O	0.85754
DEA	0.13146

En la tabla IV.3 se muestra un resumen de los costos de capital para los principales equipos de la planta en las condiciones óptimas, mientras que en la Tabla IV.4 se muestran los costos operativos.

Tabla IV.3 Costos de Capital (costos fijos)

Operaciones Unitarias	Cost [u\$s]	Operaciones Unitarias	Cost [u\$s]
Compresor Turbina de Gas	1.34383 10 ⁷	Blower	$2.46675 \ 10^7$
Precalentador de Aire	2.67984 10 ⁴	Enfriador primario	$2.37196 \ 10^6$
Combustor Turbina de Gas	8.43105 10 ⁷	Columna Absorbedora	1.69374 10 ⁶
Expansor Turbina de gas	1.33752 10 ⁷	Intercambiador LR-HEX	5.80014 10 ⁶
Precalentador de agua	9.40148 10 ⁴	Columna Recuperadora	1.86580 10 ⁶
Caldera (incluye recalentador)	8.69879 10 ⁶	Enfriador de gas	$1.49592 \ 10^6$
Turbina de Vapor	$2.87671 \ 10^7$	Bomba de reciclo de DEA	1.15577 10 ⁴
Condensador	$6.22102 \ 10^4$	Condensador de la Columna	7.81906 10 ⁴
Bomba de reciclo de agua	8.46967 10 ⁵	Rehervidor de la Columna	5.03094 10 ⁵
		Enfriador final	8.30929 10 ⁴
<u>Total</u>	1.49620 10 ⁸	Total	3.85710 10 ⁷

En la siguiente tabla se indican los porcentajes correspondientes a cada planta, respecto de la inversión total.

Potencia	Absorción	Total	
$1.50 \ 10^8$	3.86 10 ⁷	$1.88 \ 10^8$	[u\$s]
79.504	20.496	100.000	[%]

Tabla IV.4 Costos Operativos (costos variables)

Ciclo de Potencia	[u\$s/seg]
Gas Natural	4.85136
Servicios Auxiliares	0.33712

Planta de Absorción	[u\$s/seg]
Servicios Auxiliares	4.09301

En las tablas IV.5 y IV.6 se muestran el costo unitario de captura de dióxido de carbono (por tonelada capturada) y el costo de generación en la planta de potencia. Por último, en la tabla IV.7 se muestra la potencia neta obtenida por el sistema acoplado.

Tabla IV.5 Costo de la captura del Dióxido de Carbono

Captura	98.46	[%]
Flujo Másico de CO ₂	$2.35855 ext{ } 10^5$	[Kg/h]
Costo Unitario	66.418	[u\$s/Ton

Tabla IV.6 Costo de Generación de la Electricidad

	[u\$s/seg]	[u\$s/KW h]
Ciclo de Potencia	6.19072	0.05214
Planta de Absorción	4.35138	0.03665
Total	10.54211	0.08879

Tabla IV.7 Valores de Potencia obtenida

POTENCIA		
Parámetro	Valor	Unidades
Turbina de Gas – Compresor	344	[MW]
Turbina de Vapor	137	[MW]
Blower	54	[MW]
Potencia Neta	427	[MW]

Con respecto a las propiedades o características de la solución óptima encontrada, se indican en la tabla IV.8 las condiciones de operación y propiedades de la caldera, y en la Figura IV.11 un perfil de temperaturas en dicho equipo y el precalentador.

Tabla IV.8 Caldera

CALDERA		
Parámetro	Valor	Unidades
Presión de Operación	30	[atm]
Mínimo ΔT	30	[°K]
Temperatura del Vapor recalentado	578	[°K]

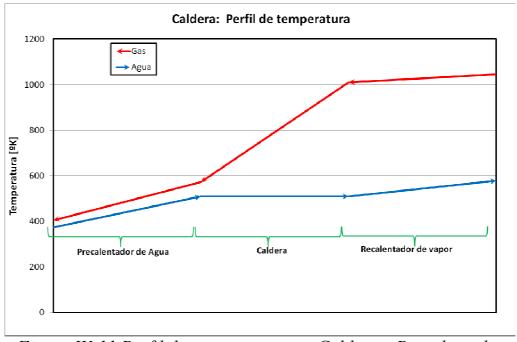


Figura IV-11 Perfil de temperaturas en Caldera y Precalentador

En la tabla IV.9 se muestran las características de la columna absorbedora, mientras que en la Figura IV.12 y IV.13 se muestran los perfiles internos de composición de dióxido de carbono y de temperaturas respectivamente, en dicha columna.

Tabla IV.9 Columna Absorbedora

COLUMNA ABSORBEDORA			
Parámetro	Valor	Unidades	
Numero of Etapas	10	[adim]	
Presión de tope de Columna	1.000	[atm]	
Presión en fondo de Columna	1.200	[atm]	
Diámetro	19.66	[m]	
Altura	6.096	[m]	
Tipo de Internos	Campanas de burbujeo		

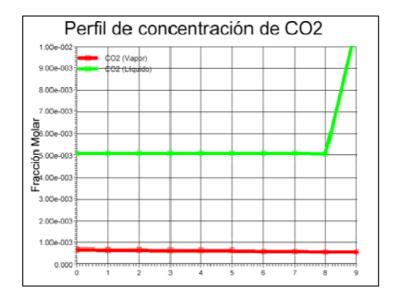


Figura IV-12 Perfil de Concentración de CO₂ en Columna Absorbedora

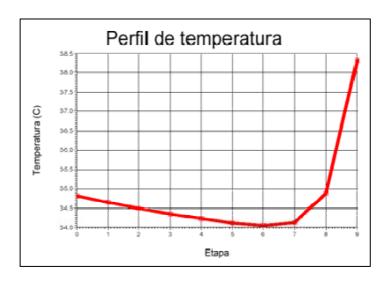


Figura IV-13 Perfil de Temperatura en Columna Absorbedora

Finalmente, En la tabla IV.10 se muestran las características de la columna recuperadora, mientras que en la Figura IV.14 y IV.15 se muestran los perfiles internos de composición de dióxido de carbono y de temperaturas respectivamente, en dicha columna.

Tabla IV. 10 Columna Recuperadora

COLUMNA RECUPERADORA				
Parámetro	Valor	Unidades		
Número de etapas	10	[adim]		
Presión en Condensador	0.400	[atm]		
Presión en Rehervidor	0.600	[atm]		
Tipo de Condensador	Reflujo Total			
Tipo de Rehervidor	Kettle			
Carga en el Condensador	$2.42689 \ 10^8$	[KJ/h]		
Carga en el Rehervidor	$1.76514 \ 10^9$	[KJ/h]		
Diámetro	19.81	[m]		
Altura	6.096	[m]		
Tipo de Internos	Campanas de			
Relación de Reflujo	0.71083	[adim]		

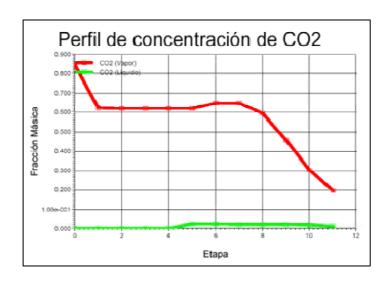


Figura IV-14 Perfil de Concentración de CO2 en Columna Recuperadora

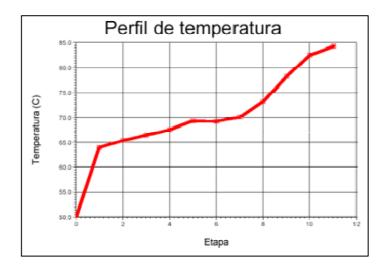


Figura IV-15 Perfil de Temperatura en Columna Recuperadora

Para una comparación de los resultados obtenidos en esta tesis, y los que corresponden a planta reales de generación, conviene realizar una comparación con plantas que se construyen en la actualidad. Por ejemplo, los grupos Siemens (Alemania), Alstom (Francia) y General Electric (Estados Unidos) se encuentran involucrados en la construcción de una usina de generación térmica de ciclo combinado. La planta termoeléctria, "General San Martín", se instalará en Timbúes, con una inversión de 473 millones de dólares. El valor consiste en el diseño, fabricación, suministro, transporte, construcción, montaje, puesta en marcha, ensayos y pruebas

finales de una central termoeléctrica de ciclo combinado. La obra está destinada a la generación de energía eléctrica de una potencia neta mínima de 800 megavatios.

En la tabla siguiente se muestran comparativamente los costos de inversión mencionados en dicha obra y los estimados en esta tesis para el caso de estudio analizado. Resulta claro que el valor (escalado asumiendo comportamiento lineal) a la potencia de 800 MW resulta inferior en la inversión estimada. Esto se debe seguramente a que en la inversión mencionada para la planta Gral San Martín se tienen en cuenta otros costos que aquí no se han incorporado a la función objetivo; tales como suministro, transporte, construcción, montaje, puesta en marcha, ensayos y pruebas finales. Por último, dado que el esquema de la planta de generación en nuestro caso es simple (un solo nivel de presión y una sola turbina de gas y de vapor), el costo de capital resultaría menor y el de operación mayor, respecto de una planta más compleja (no se tienen detalles precisos de diseño respecto a la planta de Timbúes).

Tabla IV.11 Tabla Comparativa de los valores obtenidos en el trabajo en comparación con datos reales.

	[MW]	[MM u\$s]	[u\$s/W]
Timbúes	800	473.000	0.5913
tesis Potencia	481	149.620	0.3111
tesis Pot+Abs	427	188.191	0.4407

Si escalamos el valor de la planta aquí analizada a un nivel de 800 MW, tendríamos una inversión de u\$s 2.49 10⁸. La diferencia entre dicho valor y el que figura en la tabla de comparación puede atribuirse a los costos no tenidos en cuenta en este trabajo.

En (Poggi, y col., 2004) se analiza una planta de cogeneración quemando gas natural, de 600 MW. La planta de captura responde a una filosofía pre-combustión. En ese caso, el costo total estimado para los equipos de dicha planta resulta de u\$s 3.01 10⁸, que los autores mencionan de una magnitud significativa comparada con la inversión real que demandó la instalación de la central térmica de referencia -u\$s 5.90 10⁸- (planta perteneciente al sistema de generación nacional). Reportan además que el costo de la unidad de reformado (u\$s 2.29 10⁸) equivale al 76% del costo total de compra e instalación del equipamiento mayoritario en la plata de tratamiento pre-combustión. Este resultado refleja que la producción de H2 en la unidad de reformado es el componente más demandante en los procesos de captura de CO₂ previa a la combustión. El costo de todos los intercambiadores de calor (u\$s 6.9 10⁷) es el segundo en importancia y representa casi el 23% del costo total calculado. Este costo está dominado por la batería de intercambiadores requerida para la recuperación de calor entre las corrientes de solvente en la unidad de remoción de CO₂. El costo del absorbedor y de la columna de destilación (u\$s 2 10⁶) es relativamente bajo cuando se lo compara con el resto del equipamiento detallado. Los autores mencionan la baja incidencia de este costo con respecto al caso de la captura de CO2 posterior a la combustión (post combustión) reportado por Amadeo et al (2004), que considera el mismo caudal de gas natural alimentado a la central de referencia analizada en (Poggi, y col., 2004). Se concluye allí que en la opción de captura post-combustión el costo del equipamiento de separación representa la contribución mayoritaria. Esta tendencia también puede afirmarse al analizar los resultados obtenidos en esta tesis.

En primer lugar, de la cita se desprende que la central de referencia, para la producción de 600 MW, tiene un costo (año 2000) de 5.9 10⁸, que comparado con los costos arriba mencionados para la central de Timbúes, coincide relativamente bien. Para nuestro caso, vuelve a manifestarse la discrepancia en el costo de inversión, que puede ser atribuido al factor de corrección ya mencionado (los costos no considerados en la función objetivo). Por otra parte, de los datos extraídos de (Poggi, y col., 2004), se muestra que el costo de la planta de pre-combustión es aproximadamente el 30% de la planta total (captura + generación). En nuestro caso, la planta de post combustión resulta de aproximadamente un 21% del costo de la planta total. Es decir, de los trabajos citados y del nuestro se concluye que la inversión relativa de una planta de precombustión o bien de post-combustión, respecto del total de la planta integrada resulta de entre un 20 al 30%, siendo menor para nuestros parámetros de costos utilizados, la inversión que corresponde a una planta de post-combustión.

Por último, el costo de las columnas de separación reportados por Amadeo *et al* (2004), para la planta post-combustión es de u\$s 5.10⁷. En nuestro caso y escalando a 600 MW, obtenemos un costo de u\$s 1.8 10⁷, que resulta del mismo orden de magnitud. Esto refuerza la observación en (Poggi, y col., 2004), acerca que el costo dominante en las plantas post-combustión es el de separación del CO2, mientras que en las plantas precombustión el costo dominante es el de los reactores respectivos para la obtención del H₂ combustible.

En un reporte realizado para el Departamento de Energía, USA, Kevin S. Fisher y col (2005) reportan para una planta termoeléctrica alimentada a carbón, de 500 MW, y una captura de 95% del CO₂ , una

producción neta de potencia de 260 MW, una recuperación de 430 toneladas de CO₂ /hr (una emisión de 23 tn/hr de CO₂), un costo anualizado de la planta de generación de u\$s 8.4326 10⁷ (para nuestro caso y escalado es de u\$s 1.55 10⁸), un costo para la planta de recuperación de CO₂ de u\$s 5.247 10⁷ (en nuestro trabajo, y escalado es de u\$s 4 10⁷). El costo de la electricidad generada es de 0.07075 u\$s /Kw (nuestro estudio y escalado 0.08879 u\$s /Kw). Se aprecia una coincidencia importante, aunque la planta de generación citada quema carbón bajo otra tecnología.

Esto implica un costo total de la planta con sistema de captura de u\$s 1.368 10⁸ (Fisher y col 2005), con un porcentaje respecto al total del costo, atribuible a la planta de captura de 38% aproximadamente, mayor a nuestro caso que representa el 21%. Aunque aquí el hecho de la quema de carbón como combustible tiene un impacto mayor sobre la inversión necesaria en la planta de captura.

IV.3 Discusión de resultados. Implicancia del valor de los bonos de carbono

Uno de los puntos esperados es el hecho que la solución de la planta de generación acoplada con la de captura es marcadamente diferente de ambas soluciones por separado. En efecto, si se considera fija la corriente de gas de la planta de generación de potencia que se alimenta a la planta de captura, y ésta se optimiza en forma independiente, los parámetros de operación no resultan los mismos; igualmente sucede con la optimización de la planta de generación de potencia, fijando la producción correspondiente, pero eliminando la planta de captura de dióxido de carbono.

Lo anterior es importante ya que, tal como describimos, condiciones operativas favorables del ciclo de potencia podrían hacer que la planta de absorción fuera excesivamente costosa dado que el caudal de flue gas resultaría con concentraciones de CO₂ muy bajas.

Así vimos que una planta que genera 491 [MW] implicaría un costo de inversión 1.50 10⁸ [u\$s] esto es 149.62 millones de dólares para un costo unitario de 5.21 centavos de dólar por cada kilowatio hora. Para obtener el requerimiento impuesto de captura de CO₂ en un valor importante (98 %) se requiere una inversión en costo de capital significativo.

Consecuencia de ello es que el costo unitario de generación se eleva en un 70 % (8.879 centavos de dólar por cada KW h). Para hacer atractiva esta inversión adicional se deberá recurrir a un manejo más eficiente de la energía, servicios adicionales (ver capítulo V), al incentivo de mercado de bonos de carbono o a regulaciones gubernamentales que así lo exijan.

Debe tenerse en cuenta que se puede considerar capturas de dióxido de carbono menores al 98% aquí impuesto en el caso de estudio, y por lo tanto lograr costos de operación e inversión menores, aunque debe compatibilizarse dicha situación con las emisiones potencialmente permitidas por la legislación de referencia a considerar.

Bonos de Carbono

Un punto a considerar es, dependiendo del valor de los bonos de carbono en el mercado, si un proyecto que utilice la certificación y el potencial beneficio resultante se constituya en un factor de reducción de costos significativo o un simple paliativo.

En los capítulos III y IV vimos como los costos se incrementan con un mayor nivel de captura de dióxido de carbono. En forma tabular por ejemplo, para una corriente de gas concentrada en dióxido de carbono (en el sentido que es representativa de una condición de operación cercana a la

combustión estequiométrica), se tiene la siguiente tabla de costos por tonelada recuperada (ver figuras IV.9 y IV.10).

Absorción	Costo Unitario		
[%]	[u\$s/Ton]		
78	44.093		
81	43.483		
83	43.483		
85	43.691		
88	44.228		
90	45.017		
92	45.771		
94	48.109		
95	48.260		
98	66.418		

IV-11 Costo unitario de la absorción de dióxido de carbono

En una forma muy simplificada, pero que sirve como una primera aproximación para obtener un panorama de la incidencia de tal instrumento, se concluye que el valor de cada CER debería representar un beneficio equivalente a los 66.42 [u\$s/CER] para hacer neutro el costo de la absorción si se pretende una reducción del 98%.

Por otra parte, vemos de la tabla IV.11 que para una captura de 95 % (solo un 3 % menos) se lograría neutralizar el costo incremental con un valor del CER de 48.26 [u\$s/CER] mientras que para capturas de 85 % (10 puntos menos) la reducción solo sería de 5 [u\$s/CER], necesitándose un valor para el CER para lograr equilibrio en 43.7 dólares/CER.

Debe considerarse que los valores utilizados en este análisis están basados en una tabla de costos que proviene de la optimización de la planta de captura funcionando en forma independiente, es decir, no del sistema integrado. No obstante, como una primera aproximación resulta válido el análisis para realizar un estudio de magnitudes e impactos relativos entre distintas opciones.

Se concluye entonces, que existe un interesante conjunto de variables que pueden ser consideradas en una política pública apropiada. En principio, y dado el estado actual de reducción en las emisiones casi nulo, resultaría importante avanzar hacia un estadio tecnológico de reducciones parciales, aunque significativas; por ejemplo del orden del 80 al 90 %, dado que el precio del bono de carbono necesario para mejorar sustancialmente la viabilidad económica del proyecto resulta 4 veces mayor al valor actual, en promedio. Esto implica un valor en el umbral de emisión permitido, para una planta de generación de potencia que permita cierta tolerancia en la reducción de los niveles de emisión, sin llegar a la eliminación total en una primera etapa.

Un segundo punto es la intervención del estado en una magnitud igual a la del mercado en la asignación de subsidios por CER, es decir, asignar por cada 10 dólares la tonelada obtenidos del mercado, suponiendo ese como precio en el mismo, otros tantos por subsidio público. Esto cubriría la mitad del costo estimado como necesario para lograr una primera compensación al costo involucrado en la eliminación por tonelada de CO₂ según los parámetros de costos considerados aquí (recuérdese que luego debe añadirse el costo de la disposición final).

Si volvemos al caso de estudio del punto analizado en la sección anterior, asumiendo en función del análisis realizado en el capítulo I, un valor de 10 dólares por cada CER (1 tonelada de CO₂ capturado) se reduce la velocidad de costo en 0.65515 [u\$s/seg] lo que llevaría el costo unitario de 0.08879 [u\$s/ KW h] a 0.0834 [u\$s/ KW h], esto es una reducción de

solamente 6.12 % (si se especifica una captura del 98% del dióxido que se genera) para este caso. Esto concuerda con el análisis realizado en los párrafos anteriores, dado que si se pretende reducciones significativas (llegar a un punto próximo al equilibrio) habría que considerar recuperaciones menores (85%) y un valor del CER al menos de 45 dólares.

Tabla IV.12 Valores comparativos con dos potencias

	Variable	Unidades	Caso de 435 [MW]	Caso de 870 [MW]	870 (escalado lineal [MW]	Error [%]
Completa	Costo	[u\$s/seg]	8.11186	16.66079	16.22371	2.69
	Potencia	[MW]	434.654	870.486	869.308	0.14
	Costo Unitario	[u\$s/KW]	0.06719	0.06890		
Potencia	Costo	[u\$s/seg]	6.18845	12.25461	12.37690	0.99
	Potencia Neta	[MW]	481.030	962.894	962.059	0.09
	Costo Unitario	[u\$s/KW]	0.04631	0.04582		
Absorción	Costo	[u\$s/seg]	1.92341	4.40618	3.84681	14.54
	CO ₂ recuperado	[Kg/h]	2.03609 10 ⁵	4.05708 10 ⁵	4.07219 10 ⁵	0.37
	Costo Unitario	[u\$s/Ton]	34.00758	39.09770		
Costos Fijos	Potencia	[u\$s]	$1.49505 \ 10^8$	2.82136 10 ⁸	2.99011 10 ⁸	5.64
	Absorción	[u\$s]	2.93981 10 ⁷	5.53148 10 ⁷	5.87962 10 ⁷	5.92
	Completo	[u\$s]	$1.78904 \ 10^8$	$3.37451 \ 10^8$	$3.57807 \ 10^8$	5.69
Costos Operativos	Calefacción	[u\$s/seg]	1.32609	3.24767	2.65218	22.45
	Enfriamiento	[u\$s/seg]	0.73600	1.44933	1.47201	1.54
	total de servicios	[u\$s/seg]	2.06209	4.69701	4.12418	13.89
	Gas	[u\$s/seg]	4.85136	9.70333	9.70272	0.01
	Gas	[Kg/h]	$8.73245 \ 10^4$	$1.74660 \ 10^5$	1.74649 10 ⁵	0.01
Flujos	Aire	[Kg/h]	$3.58192 \ 10^6$	$7.16383 \ 10^6$	$7.16383 \ 10^6$	0.00
	Agua	[Kg/h]	$1.03200 \ 10^6$	$2.07000 \ 10^6$	2.06400 10 ⁶	0.29
	Solución DEA	[Kg/h]	9.59471 10 ⁶	1.91894 10 ⁷	1.91894 10 ⁷	0.00

En la tabla IV.12 se aprecian los principales valores para dos plantas equivalentes en cuanto al porcentaje de captura de CO₂ siendo, en cambio, la potencia de una exactamente el doble de la otra. En la última columna se aprecian los errores tomados como la diferencia entre los valores obtenidos en la optimización de la planta en comparación con los resultados calculados simplemente multiplicando la primera por dos (asumiendo linealidad).

Vemos que en el caso de potencia el comportamiento es casi lineal, mientras que en la planta de absorción existen diferencias de cierta magnitud en la energía de calefacción del rehervidor de la columna recuperadora.

La tabla IV.13 muestra los valores comparativos para el caso en que la planta de potencia se encuentre amortizada (costo fijo igual a cero). Como es lógico vemos una reducción en el costo de operación (con respecto a la optimización considerando la función objetivo total) y por ende en el costo unitario de la electricidad de un 12.35 %. La relativamente baja reducción se debe a que el principal componente en el costo final es el costo operativo. Este punto tiene importancia cuando se analiza la integración de una planta de captura a una planta de generación existente, dado que en general puede asumirse a la planta de generación termoeléctrica amortizada en su costo de capital.

Tabla IV.32 Valores comparativos para plantas de igual potencia (una amortizada)

	Variable	Unidades	Optimización 435 [MW]	Optimización (Planta Generación Amortizada)	Diferencia [%]
Completa	Costo	[u\$s/seg]	8.11186	7.11038	12.35
	Potencia	[MW]	434.654	434.654	0.00
S	Costo Unitario	[u\$s/KW]	0.06719	0.05889	12.35
е	Costo	[u\$s/seg]	6.18845	5.18697	16.18
Potencia	Potencia Neta	[MW]	481.030	481.030	0.00
PC	Costo Unitario	[u\$s/KW]	0.04631	0.03882	16.18
Absorción	Abs solo	[u\$s/seg]	1.92341	1.92341	0.00
	CO2 rec	[Kg/h]	2.03609 10 ⁵	2.03609 10 ⁵	0.00
	Costo Unitario	[u\$s/Ton]	34.00758	34.00758	0.00
Costos Fijos	Potencia	[u\$s]	1.49505 10 ⁸	0.000000	100.00
	Absorción	[u\$s]	$2.93981 \ 10^7$	2.93981 10 ⁷	0.00
	Completo	[u\$s]	1.78904 10 ⁸	$2.93981 \ 10^7$	83.57
80/	Calefacción	[u\$s/seg]	1.32609	1.32609	0.00
perati	Enfriamiento	[u\$s/seg]	0.73600	0.73600	0.00
Costos Operativos	total de servicios	[u\$s/seg]	2.06209	2.06209	0.00
Cos	Gas	[u\$s/seg]	4.85136	4.85136	0.00
	Gas	[Kg/h]	8.73245 10 ⁴	8.73245 10 ⁴	0.00
Flujos	Aire	[Kg/h]	3.58192 10 ⁶	3.58192 10 ⁶	0.00
	Agua	[Kg/h]	1.03200 10 ⁶	1.03200 10 ⁶	0.00
	Solución DEA	[Kg/h]	9.59471 10 ⁶	9.59471 10 ⁶	0.00

CAPITULO V

V.1 Conclusiones Finales de la tesis

Dentro del marco de esta tesis, nuestra principal tarea fue el desarrollo de un modelo riguroso de una planta de cogeneración representativa de una operación estándar, acoplada a una planta de captura de dióxido de carbono según tecnologías probadas y factibles tecnológicamente; y la optimización de la planta para lograr costos representativos a valores actuales de parámetros de operación y de costos fijos acordes a la práctica ingenieril aceptada en la bibliografía más relevante, a los efectos de estudiar su viabilidad tecnológica y económica.

Es sabido que existen posibilidades de optimizar el costo de la energía obtenida por cogeneración utilizando estructuralmente más niveles de presión (aquí se considera solo uno), o bien adoptando más turbinas de gas o de vapor; y optimizando además otras variables de operación que aquí se adoptaron fijas (acercamiento de temperaturas en los intercambiadores de calor). En este sentido, de realizar tal optimización, aumentarían los costos fijos y se reduciría el costo operativo de la planta de generación, aunque el gas producido y que debe tratarse en la planta de captura sería similar. En otras palabras, si bien la optimización mencionada reduciría el costo de generación, en general no tendría mayor impacto en el volumen y composición de los gases que se producen y deben ser tratados en la planta de captura de CO₂.

Puede admitirse entonces que el costo asumido para la generación sin captura es un costo ligeramente sobredimensionado, ya que podría aún optimizarse.

El objetivo principal en nuestro caso es analizar la relación entre ambas plantas y el incremento de costos que se produce al acoplar un proceso de captura de CO₂. El mayor esfuerzo de modelado para obtener rigurosidad en los modelos se ha centrado en la planta de captura, a los efectos de asegurar en lo posible la representación adecuada de los fenómenos físico-químicos relevantes del proceso. Se ha adoptado además un modelo de costos realista, riguroso, que nos brinde información veraz para juzgar entonces la viabilidad técnica y económica de este tipo de plantas.

Se ha concluido que el costo de la energía producida se incrementa sustancialmente al acoplar la planta de tratamiento de gases. Por lo tanto, si se pretende invertir más capital en equipamiento para reducir los costos, sería interesante plantearse la pregunta acerca de la conveniencia de incrementar la complejidad e inversión de la planta de generación, versus la posibilidad de invertir más en la planta de captura, reduciendo el costo de dicha operación. En otras palabras, si se requiere una reducción importante en el precio de la energía suministrada, es importante la optimización del complejo en forma global, y para ello, el analizar con detenimiento las relaciones entre ambas plantas, y en particular, la planta de captura y su consumo energético, y por lo tanto, su potencial integración energética para tratar de minimizar el costo operativo. Estos temas serán abordados en futuros trabajos de investigación, a la luz de la experiencia y conclusiones aquí obtenidas.

Se concluyó además, que una herramienta promocionada a través del Protocolo de Kyoto, los bonos de carbono, puede ser una importante contribución a la hora de evaluar el incremento en el costo de generación de una planta de absorción acoplada a una central de generación eléctrica. Al estar la cotización de dichos bonos sujetos a valores de mercado, su impacto será variable, e incluso impredecible en el tiempo. Quizás regulaciones gubernamentales que desgraven los emprendimientos que contemplen a las tecnologías limpias y penalicen a aquellas que no lo son puedan incentivar emprendimientos de este tipo.

No obstante, de no mediar otras medidas para la reducción de costos es evidente que el costo de generación "ecológica" se vería incrementado sustancialmente. Surge entonces una duda, ¿está el cliente dispuesto a pagar más por una electricidad más "limpia"?. Más aún si se tiene en cuenta que no se ha considerado el costo final de deposición del dióxido de carbono, el cual dependerá lógicamente de la zona geográfica en donde se realice el emprendimiento, pero que seguramente implicará un incremento sustancial en el precio final de la energía entregada. Existirán otras alternativas tecnológicas que permitan aún más reducir el costo de la de generación?

Como discutiremos a continuación, existen soluciones técnicas al problema expuesto que como ingenieros podemos afrontar (al contrario de las medidas del tipo de políticas administrativas). Estas se basan en minimizar el consumo de servicios auxiliares a través de la integración energética (aunque para ser efectivas al mismo tiempo deben lograr que el incremento de capital en equipamiento sea mínimo).

V.1.1 La estrategia de modelado

A modo de resumen, en este trabajo, a través de convenientes herramientas de simulación y optimización se evaluó la factibilidad técnica y económica de la captura del dióxido de carbono generado durante la combustión de gas natural en una planta generadora de potencia de ciclo combinado con el fin de evitar la emisión de uno de los principales gases generadores del efecto invernadero. Para ello se estudiaron ambos procesos por separado evaluando la sensibilidad de algunas de sus variables más importantes y su impacto en el aspecto económico a través de modelos apropiados. Luego se integraron los modelos para generar el modelo de simulación y optimización de la planta global.

Como resultado de la tesis, en cuanto a lo metodológico, de lo expuesto en el capítulo IV, se concluye que es factible el modelado de procesos acoplados para generación de potencia y captura de CO₂ postcombustión utilizando simuladores comerciales. El desarrollo de modelos en un entorno de un simulador comercial es relativamente sencillo y ágil, permitiendo utilizar modelos rigurosos y ecuaciones de costos muy completas y rigurosas. Además, las condiciones de operación de los equipos tanto de intercambio como de separación pueden chequearse solución a solución al variar parámetros de operación, dado que se pueden calcular por ejemplo los factores geométricos de los equipos de intercambio, el número de pasos por tubos y carcasa, entre otros aspectos que permiten una estimación de costos efectiva. Para las columnas, se pueden chequear las condiciones de operación de los platos, si existe potencial inundación, llorado o arrastre, etc. También los costos pueden estimarse en una forma bastante rigurosa. En general, si bien debieron desarrollarse modelos específicos dado que ciertos equipos no se encontraron en la biblioteca de módulos del simulador HYSYS; el trabajo

de modelado resulta mínimo frente a la tarea de desarrollar un modelo global para el proceso aquí estudiado, en forma rigurosa.

Por otra parte, y como se expuso en el punto anterior, uno de los aspectos a tener en cuenta en futuros trabajos es la utilización de nuevos niveles de presión y potencialmente nuevas turbinas tanto de gas como de vapor. Esto puede hacerse fácilmente en un simulador comercial, aunque no tanto la optimización estructural del sistema. Este punto será uno de los primeros a abordar en próximos trabajos.

Si bien la optimización del proceso no resulta tan sencilla como la simulación, se ha mostrado que es posible definir un conjunto de variables importantes de optimización y otro de restricciones, para resolver el problema tanto de cada planta en particular como el proceso global. Si bien es cierto que en un modelo orientado a ecuaciones (por ejemplo si se desarrolla uno en GAMS) resultará relativamente mas fácil definir un conjunto de variables de restricción y de optimización y luego intentar obtener una solución al problema matemático resultante; además de implicar un tiempo muy importante de desarrollo, seguramente los modelos de los equipos deberán ser más simplificados que los aquí utilizados, en una primera aproximación al problema, si se quieren obtener resultados en un tiempo prudencial.

A partir de la solución de diversos casos de estudio a lo largo de los capítulos II, III y IV, se mostró la utilidad de la herramienta de optimización a través de los resultados obtenidos; en particular, curvas de valores óptimos utilizando varios parámetros para su análisis. Esto puede realizarse con relativa facilidad una vez lograda la convergencia del modelo para algún punto operativo, dado que los valores iniciales (inicialización) para los sucesivos problemas son obtenidos de la solución óptima anterior. Resulta interesante aquí remarcar que en algunos casos, dado que el proceso de optimización conlleva numerosas iteraciones, el proceso de convergencia se dificulta por imposibilidad de convergencia en la solución de algunos equipos, debido a que las condiciones de operación resultaban "extremas" para los mismos. Es por ello que debió desarrollarse una serie de estrategias de simulación y de restricción de los grados de libertad de cada uno de los equipos del proceso para facilitar el proceso de

convergencia aludido, en un rango importante de variables de operación. Es decir, hacer el proceso de simulación y optimización robusto y flexible.

Otro problema a considerar es la estructura del proceso. Como se ha mencionado en el capítulo I y II, resulta difícil utilizando un simulador de procesos, la optimización de problemas con variables binarias. No obstante, estas son necesarias al considerar opciones estructurales. En nuestro problema, este punto es importante, ya que el consumo energético en el hervidor de la columna en la planta de captura es el factor más importante en el costo de operación. Por lo tanto, si se encuentran variantes de operación que minimicen dicho costo, se da un paso importante en la reducción de costos y por lo tanto en la factibilidad económica.

Un campo útil para resolver este problema es la síntesis de procesos, brinda serie de herramientas ya que nos una que permiten metodológicamente encontrar estructuras óptimas que minimicen el consumo energético a la vez que la inversión. En particular, las herramientas para la síntesis de sistemas de intercambiadores de calor, o bien los métodos de diseño de secuencias de separación óptimas son muy útiles en este problema, dado que es importante estudiar el potencial de integración energética entre ambos procesos, y además, la operación óptima de las columnas de destilación, recurriendo a herramientas apropiadas.

En general, como hemos comentado ya, la implementación de tales modelos resulta en problemas de optimización MINLP, los cuales son más viables de resolver en un entorno de programación orientado a ecuaciones, y no en simuladores secuenciales tales como HYSYS. No obstante, si se dispone de un simulador, es posible explorar variantes estructurales de operación simplemente por simulaciones sucesivas V posterior comparación. Una alternativa, es proponer una metodología, que si bien no resulte tan efectiva como el planteo y una solución de un programa MINLP, nos brinde soluciones adecuadas y además, explote el hecho de resolver fácilmente modelos muy complejos y rigurosos, según hemos explicado y realizado a lo largo de este trabajo.

Sin embargo, estos problemas se plantean como una futura tarea, en base a la experiencia ganada en el desarrollo de la tesis en cuanto a lo metodológico y lo conceptual respecto del modelo de la planta, y sus posibles soluciones óptimas. La concreción de estos objetivos exceden largamente el problema central aquí planteado, acorde con una tesis de maestría.

V.2 Futuros trabajos

V.2.1 Integración energética

Analizando las corrientes de proceso y su potencial de integración energética (planta de potencia y absorción) puede llegarse a la conclusión que hay energía excedente en algunas de sus corrientes que deben enfriarse (corrientes calientes) con respecto a otras que deben calentarse (corrientes frías).

Las tablas VI.2-1 y VI.2-2 muestran las corrientes calientes y frías y sus correspondientes cambios térmicos, correspondientes al caso de estudio explicado en primer lugar en el capítulo IV.

Corrientes Calientes	Temperaturas [°K]		Calor [KJ/h]
Correntes Canentes	Entrada	Salida	
Gas Expandido	1255.07	1045.15	$9.65273 \ 10^8$
Gas Expandido 2	1045.15	1009.63	$6.72650 \ 10^8$
Gas Caldera	1009.63	571.76	1.87469 10 ⁹
Gas Economizador	571.76	403.56	$6.72650 \ 10^8$
gas-ex-pre	403.497	303.150	$6.85119 \ 10^8$
Vapor expandido	373.15	373.15	2.21862 10 ⁹
Regen Bttms	357.52	326.28	2.31807 10 ⁹
To condenser	337.22	323.15	2.42689 10 ⁸
CO2-d	1014.20	303.15	$2.68031 \ 10^8$
DEA to Cool	326.25	308.14	1.30217 10 ⁹

Tabla VI.2-1 Corrientes Calientes

Corrientes Frías	Temperaturas [°K]		Calor [KJ/h]
	Salida	Entrada	Caloi [KJ/II]
aire-mezcla	836.55	588.52	$9.65273 \ 10^8$
vapor	578.150	509.324	1.59988 10 ⁸
Ag-precalentada	509.323	509.323	1.87469 10 ⁹
Agua fría	509.323	373.471	$6.72650 \ 10^8$
to reboiler	357.524	355.753	1.76514 10 ⁹
Rich to L/R	343.150	311.480	2.31807 10 ⁹

Tabla VI.2-2 Corrientes Frías

Una visualización gráfica de cada corriente se muestra en las siguientes figuras (Fig V.2.1 y V.2.2), tanto las calientes como las frías, respectivamente.

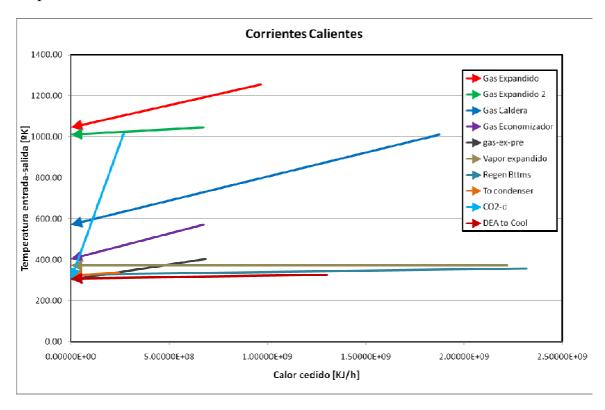


Figura V.2-1 Corrientes Calientes

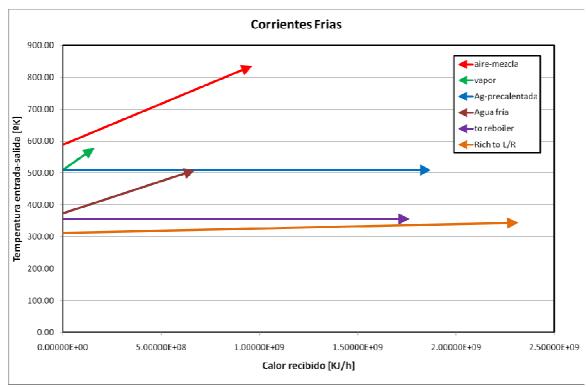


Figura V.2-2 Corrientes Frías

Es interesante estudiar el potencial de integración energética ya que el 80 % del costo operativo de la planta de absorción lo constituye el vapor de calefacción del rehervidor, según los resultados obtenidos previamente.

Según los datos de las corrientes descritas más arriba, la cantidad de energía aportada por todas las corrientes calientes es de 1.12200 10¹⁰ [KJ/h] mientras que la requerida por las corrientes frías es de 7.75580 10⁹ [KJ/h] lo que da una diferencia de 3.46416 10⁹ [KJ/h]. En un proceso perfectamente integrado energéticamente ese sería el único consumo en servicios auxiliares. En cambio en nuestro caso, según la solución óptima hallada en el capítulo anterior es la indicada en la tabla IV.2-3.

Servicio Auxiliar	Carga térmica [KJ/h]
Vapor	1.76514 10 ⁹
AE-1	$2.21862 \ 10^9$
AE-2	$6.85119 \ 10^8$
AE-3	$2.42689 \ 10^8$
AE-4	$1.30217 \ 10^9$
AE-5	$2.68031 \ 10^8$
Total	6.48177 10 ⁹

Tabla IV.2-3 Consumo de servicios auxiliares

Vemos pues que se consume casi el doble. Pero este no es el único problema. Según los datos anteriores, el proceso contiene excedente de energía, por lo que no requeriría calentamiento. No obstante, como vimos, el consumo de vapor en el rehervidor es el más importante en el costo de la planta de captura de CO₂.

Un estudio exhaustivo permitiría integrar energéticamente a las corrientes, esto es, aprovechar a las corrientes calientes (corrientes que deben enfriarse) para calentar a las corrientes frías y de esta manera reducir los costos operativos. Obviamente, lo expresado anteriormente solo es válido si se realiza la integración a través de intercambiadores de calor, por lo cual eventualmente podrían requerirse nuevos equipos en el proceso, y por lo tanto, un mayor costo de inversión. Además, dado que para la transferencia de calor debe considerarse una diferencia de temperaturas, el potencial de integración anterior puede no ser totalmente viable.

Con la reducción de costos operativos se haría más atractiva la opción de la captura de dióxido de carbono ya que su impacto en el costo unitario final de la energía eléctrica sería mucho menor, si los costos de inversión necesarios resultaran adecuados.

Existen técnicas que permiten a través de las lógicas restricciones termodinámicas, calcular el mínimo de servicios auxiliares (enfriamiento y calefacción) dadas el conjunto de corrientes frías y calientes. Por ejemplo, el llamado método Pinch (Linhoff, 1979). También es posible estudiar la red de intercambiadores más conveniente que logre dicho objetivo, esto es, minimizar los costos operativos mediante la integración y recuperación energética.

Una vez obtenida dicha red, es fácil llevarla al flowsheet original (modelo de simulación en HYSYS) para evaluar el nuevo esquema logrado y poder realizar una nueva optimización y estimación económica. Aquí es importante remarcar que al permitir nuevas variables de optimización, por ejemplo las presiones de operación de las columnas, pueden cambiar las temperaturas de las corrientes en el proceso, y por ende, definir luego de la convergencia (optimización en HYSYS), un nuevo problema de síntesis de redes de intercambio. En otras palabras, se define un procedimiento iterativo que debe ser estructurado de tal manera de lograr convergencia,

considerando como variables de iteración las estructuras que define el problema de síntesis de redes de intercambio y los valores para las variables de operación que define el problema de optimización cada vez que se introduce la estructura del proceso al incorporar la red de intercambiadores definida iteración a iteración por el proceso de síntesis. Además, resulta obvio que dado que el problema de síntesis define un acercamiento de temperaturas mínimo permitido (para definir el punto pinch) y el proceso de simulación optimiza costos, teniendo las temperaturas como variable, iteración a iteración se definen sucesivos problemas de *síntesis y simulación –optimización del proceso global*, hasta encontrar una solución de costos satisfactoria.

Si bien en simuladores como el Hysys® no se puede modificar la topología durante la optimización, como expresamos anteriormente, esto se puede hacer en entornos de programación orientados a ecuaciones, como por ejemplo con GAMS®. No obstante, esto implica, además de modelar el proceso completo, modelar el problema de síntesis de la red de intercambiadores acoplada y resolver todo en forma simultánea, si se pretende una metodología rigurosa (empleando además los modelos rigurosos aquí planteados).

Este problema será resuelto en futuros trabajos, en particular se tratará de definir una metodología de trabajo iterativa que defina sucesivos problemas que puedan resolverse adecuadamente con herramientas comerciales tales como simuladores (HYSYS por ejemplo) y de integración energética (comerciales o desarrolladas en forma específica para tal fin).

Hemos remarcado en varios puntos en esta tesis, que la planta de captura debe ser optimizada desde el punto de vista de los costos operativos, a los efectos de minimizar el precio de la energía eléctrica final. También hemos visto que el estudio del sistema de destilación (captura de CO₂) ha sido identificado en numerosos trabajos publicados como un sistema que puede optimizarse según diversas propuestas. Este punto será también analizado en futuros trabajos. Por ejemplo, aquí hemos utilizado como solvente DEA, ya que se consideró que es uno de los más seguros y utilizados en la industria petroquímica hasta el presente. No obstante, existen numerosas publicaciones que describen experiencias utilizando MEA (otra amina) para la absorción. Los resultados parecen ser

promisorios, en cuanto a que el costo operativo en la columna disminuye. También existen trabajos en los cuales se optimiza una mezcla de aminas para utilizarlas como solventes. Esto define un problema de optimización MINLP o bien NLP, si se plantea una mezcla de distintas aminas, en una proporción óptima, para lograr minimizar los costos operativos del sistema de captura y regeneración. Este trabajo será realizado definiendo un problema NLP a optimizar en HYSYS.

Por otra parte, dado que las columnas pueden operarse a distintas presiones, y el consumo de vapor en el hervidor es importante, parece promisorio el estudio de distribuir el aporte de vapor en distintos platos, en vez de entregarlo todo en el hervidor. Por otra parte, dado que la compresión del CO₂ para su entrega final al sistema de transporte o disposición exige sucesivas operaciones de enfriamiento, puede acoplarse esta operación a la de calentamiento en el hervidor. Resumiendo, pueden analizarse distintas alternativas estructurales en cuanto a la integración energética del sistema de absorción de CO₂, definiendo a su vez distintos problemas de optimización y la necesidad de generar modelos y herramientas adecuadas para resolverlos.

V2.2 Desalinización de aguas de mar por procesos Duales. Plantas de cogeneración acopladas a procesos de captura de CO_2

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

En la figura V.3-1 vemos un diagrama de flujo de un dispositivo denominado Evaporador Múltiple Etapa (EME) o más bien de múltiples etapas de equilibrio. La figura V.3-2 representa una de dichas etapas de equilibrio. El flujo de agua salada que ingresa (en el esquema desde la izquierda y en la parte inferior), se descomprime y vaporiza parcialmente. La parte vaporizada atraviesa un demister que tiene por objeto retener las gotas de salmuera que pudieran haberse arrastrado. El vapor se condensa en

la parte externa de los tubos y se recoge en una bandeja que separa el destilado y lo mezcla con los obtenidos en las otras etapas.

El fluido que produce la condensación y al mismo tiempo se precalienta es la propia alimentación de agua de mar.

De este modo el agua de mar (salmuera) se va concentrando mientras que por otro lado el destilado suministra el agua dulce.

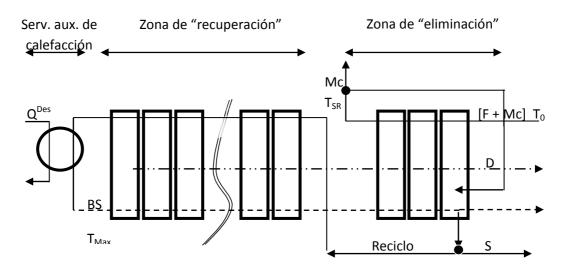


Figura V.3-1 Evaporador flash múltiple etapa convencional" EFME-BR

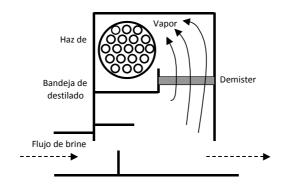


Figura V.3-2 Etapa de equilibrio individual

De esta manera se recupera el calor que de otro modo se desperdiciaría en agua de enfriamiento (en los tubos condensadores) o en calor sensible del destilado. De esta manera, la energía externa a proveer es la necesaria en el calentador principal (Q^{des}) .

De esta manera una planta desalinizadora está compuesta por tres secciones principales: de "recuperación de calor", de "eliminación de calor" y el calentador principal. Las secciones de recuperación y eliminación de calor se dividen en un número desigual de etapas.

- a) la zona de "rechazo de calor", llamada así porque en ella se necesita una corriente refrigerante adicional para lograr la condensación del vapor producido,
- b) la zona de "recuperación de calor", en la cual la alimentación que surge de mezclar la fracción de desecho reciclada y la alimentación externa propiamente dicha se precalientan con el vapor condensante producido en esta zona.
- c) El calentador principal. Este puede ser alimentado con vapor o bien con el calor que entrega alguna fuente de energía, por medio de integración a otros procesos. Por ejemplo, en las llamadas plantas duales, esta fuente es el condensador de una planta de generación de energía eléctrica, por caso de cogeneración, como la descrita en esta tesis.

Por lo tanto, en las plantas de doble propósito, se acoplan una planta de generación de potencia con una de desalación de agua de mar, o sea, se produce energía eléctrica y agua potable para satisfacer a la población correspondiente. Si se piensa en la alternativa de generación limpia, es evidente que además, se deberá acoplar una planta de captura de CO₂. Por lo tanto, desde el punto de vista de la optimización o síntesis de procesos, ahora se tiene un complejo que simultáneamente produce energía eléctrica, agua potable y dióxido de carbono. Esto hace que el problema crezca en forma importante desde el punto de vista de todas las variantes estructurales, y define entonces no solo un problema de importancia tecnológica sino académico, ya que los desafíos tanto en el modelado como en la metodología de resolución son muy importantes.

V.2.3 Nuevas herramientas informáticas

Como hemos resaltado, la comodidad de usar un simulador como el Hysys® resulta de la disponibilidad de toda una biblioteca de módulos que representan operaciones unitarias básicas o parte de las mismas y además de una biblioteca para la estimación de propiedades fisicoquímicas.

Un software como el GAMS® (General Algebraic Modeling System), en cambio, exige del usuario la escritura completa del modelo en un lenguaje simbólico entendible por el programa. Esto es, se deben ingresar todas las ecuaciones que representan a cada operación unitaria como así también las expresiones que estiman las propiedades fisicoquímicas y de equilibrio de todos los componentes que intervienen en el proceso.

Una vez realizado esta tarea ardua, es el mismo programa el que se encarga de calcular las variables que no solo resuelven al sistema sino que lo hacen cumpliendo las restricciones impuestas a las mismas, optimizando la función objetivo de interés. Como ventaja, el GAMS® puede optimizar no solo sobre las variables operativas sino también en variables estructurales, como por ejemplo, en el número de etapas de las columnas. En Hysys® esto es más difícil ya que el mismo no admite modificación de la topología del flowsheet durante la optimización (puede realizarse mediante el cálculo de una "eficiencia" ficticia que se anula cuando el plato es eliminado de la columna durante el proceso de optimización). No obstante, debe en general brindarse un punto factible para iniciar el proceso de optimización. Como hemos visto, esto es difícil si el sistema de ecuaciones es muy grande y con fuertes no linealidades, como lo es el caso que nos ocupa. Pensando en una estrategia híbrida o combinada, el trabajo previo en Hysys® permitiría usar los valores de la simulación-optimización como una buena aproximación a los valores de arranque del optimizador GAMS®. De este modo se combina las ventajas de ambas herramientas, si se tiene en cuenta que también es posible generar modelos tabulares (esto es, correlaciones obtenidas a través de numerosas simulaciones de HYSYS para los equipos más importantes y dificultosos de modelar, y utilizarlos en GAMS).

V.2.4 Otras opciones para la captura de CO₂

En (Poggi, J. A, 2004)[20], se analiza la recuperación de CO₂ previa a la combustión en centrales de generación termoeléctrica. Además se realizan ciertas comparaciones entre ésta y la opción de post combustión. Se tomó como base de estudio un ciclo combinado de gas natural por considerarla la tecnología más competitiva del mercado (coincidiendo con el estudio aquí realizado). Como se ha expresado en el capítulo IV, para el análisis dichos autores tomaron una planta de 600 MW y desarrollaron el diseño conceptual de este proceso que involucra la producción de un combustible rico en hidrógeno (H₂) a partir de gas natural. Se consideraron especialmente la unidad de reformado de gas natural con vapor y la unidad de remoción de CO₂. Se evaluaron comparativamente cinco procesos de separación de CO₂ del combustible rico en H₂. Se eligieron las condiciones de proceso más convenientes dentro del rango estudiado de variables de operación. Se concluye que el costo estimado para la compra e instalación del equipamiento mayoritario representa el 51% de la inversión originalmente realizada para la instalación de la planta de ciclo combinada de referencia. El 75,9% del costo corresponde a la unidad de reformado, mientras la unidad de remoción de CO2 representa sólo el 24%.

Una alternativa es explorar las condiciones de operación o el diseño de una planta híbrida, que explote las ventajas comparativas de los procesos pre y post combustión.

Glosario

BUNDLING: Mecanismo que permite agrupar bajo un solo proyecto, varias unidades distintas de reducción de emisiones y lograr importantes ahorros.

CER: reducciones de emisiones certificadas (según su sigla en inglés).

CMNUCC: Convención Marco de las Naciones Unidas para el Cambio Climático.

COP: Conferencia de las Partes, se refiere a las Conferencias anuales organizadas por las CMNUCC.

Co2e: Unidad de medida de las reducciones/permisos de emisión, equivalente a 1 tonelada de dióxido de carbono.

EOD: entidad operacional designada.

ERPA: contrato estándar por el cual se celebran las operaciones de compraventa de CER's.

GEI: Gases de Efecto Invernadero

IC: Implementación Conjunta.

LULUCF: sector correspondiente al secuestro de carbono a través de actividades forestales.

MDL: Mecanismo para un Desarrollo Limpio.

OTC: (Over The Counter), denominación que reciben los mercados que no se encuentran regulados.

PDD: Proyecto De Diseño, se refiere al diseño del documento del MDL a presentar.

PK: Protocolo de Kyoto.

RCE: Reducciones Certificadas de Emisiones, (CER, en inglés) son unidades generadas a partir de proyectos en el Mecanismo para un Desarrollo Limpio (Art. 12, PK).

VER: Reducciones de emisiones resultantes de acciones voluntarias para reducir emisiones de GEI que han sido verificadas por una tercera parte independiente.

UCA: Unidades de Cantidad Atribuida, (AAU, en inglés) son unidades generadas por los países Anexo I a partir de sus inventarios nacionales en el año base y sus cantidades atribuidas.

UCN: Unidades de Cumplimiento Nacional, son créditos que pueden ser utilizados para cumplimiento de una obligación en el orden nacional que limita la emisión de GEI. Las unidades son emitidas por el responsable del programa. Por ejemplo, la Unión Europea (UE) ha establecido un mercado doméstico de permisos de emisión con sus propias unidades.

UCK: Unidades de Cumplimiento Kyoto, unidades que pueden ser utilizadas por una de las Partes del PK para el cumplimiento de su compromiso de limitación de emisiones bajo el PK. Estas incluyen: AAU, ERU, RMU y CER.

UDA: Unidades De Absorción, (RMU, en inglés) son unidades generadas por actividades domésticas de secuestro de carbono en el sector LULUCF (Art. 3.3 y 3.4, PK).

URE: Unidades de Reducción de Emisiones, (ERU, en inglés) son unidades generadas a partir de proyectos de Implementación Conjunta (Art. 6, PK).

Bibliografía

- [1] Perossa, Mario Luis (2006). "Una oportunidad para los mercados y proyectos de desarrollo limpio", diario Infobae, 29/11/2006, Pág. 38.
- [2] Datos suministrados por la BCBA.
- [3] Nota extraída del PDD presentado por Aluar Aluminio Argentino SAIC ante la JE-MDL (validado) para su aprobación.
- [4] Nota extraída del PDD presentado por Sociedad Cooperativa Popular Limitada Popular de Comodoro Rivadavia ante la JE-MDL para su aprobación.
- [5] Nota extraída del PDD presentado por" Energía del Sur S.A." ante la JE-MDL para su aprobación
- [6] Nota extraída del PDD presentado por Aceitera General Deheza S. A. aprobado por la JE-MDL.
- [7] El margen de error para rectificar una solicitud de certificación es del 5%. Cuando los resultados difieren más de ese porcentaje, la EOD está obligada a rechazar el informe, con los retrasos y mayores costos que esto supone.
- [8] España tiene un severo esquema de multas para aquellas empresas que no cumplen en tiempo y forma con sus obligaciones de entregar los certificados correspondientes: € 40.- para el primer incumplimiento, € 100.- cuando se es reincidente, llegando a la clausura del local en la tercera reincidencia, Estas multas no eximen a la compañía de la obligación de entregar los certificados adeudados.
- [9] "How to Estimate Utility Costs" from the "Chemical Engineering" magazine april 2006.

- [10]](Allam y Spilsbury, 1992; Suda et al., 1992; Bolland y Sather, 1993; Erga et al., 1995; Chakma, 1995; Meisen y Shuai, 1997; Feron y Jansen, 1997; Falk-Pedersen y Dannstrom, 1997; Mimura et al., 1999; Undrum et al., 2000).
- [11] (Hendriks y Blok, 1992; De Ruyck, 1992; Bolland y Sather, 1993; Bolland y Mathieu, 1998).
- [12] Manual del Constructor de Máquinas H. Dubbel 1952
- [13] Yeomans y Grossmann, 1999; Grossmann et al., 1999; Grossmann et al., 2000; Westerberg, 2004; Biegler, Grossman y Westerberg, 1997.
- [14] Colin F. Alie, "CO₂ Capture With MEA: Integrating the Absorption Process and Steam Cycle of an Existing Coal-Fired Power Plant" A thesis presented to the University of Waterloo in fulfillment of the thesis requirement for the degree of Master of Applied.
- [15] ANTONIO VALERO, MIGUEL A, LOZANO and LUIS SERRA; GEORGE TSATSARONIS and JAVIER PISA; CHRISTOS FRANGOPOULOS; MICHAEL R. VON SPAKOVSKY; "CGAM PROBLEM: DEFINITION AND CONVENTIONAL SOLUTION"
- [16] Carlos A. Henao, "Simulación y Evaluación de Procesos Químicos", Universidad Pontificia Bolivariana- 2005
- [17] Manual del Usuario del HYSYS® "Steady state modeling chapter 11: Optimizer"
- [18] Dr. Nicolás José SCENNA et al., "MODELADO, SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS" -1999
- [19] Manual del Usuario del HYSYS®; "Simulation Basis Apendix C: Amines Property package"

[20] "Poggi, J. A. y Gómez, D. R.; CAPTURA DE CO2 PRE-COMBUSTIÓN. EVALUACIÓN CUANTITATIVA PARA EL SECTOR ELÉCTRICO ARGENTINO"