

Estudio técnico, económico y de impacto ambiental del proceso de absorción química de CO₂ mediante el uso de aminas (MEA y MDEA) y amoníaco (NH₃).

Fabiana Andrea Mesa Niño y Angie Melissa Rodríguez Montes

Trabajo de grado para optar por el título de Ingeniero Químico

Director

Gustavo Emilio Ramírez Caballero

Doctor en ingeniería de materiales

Codirector

Ariel Uribe Rodríguez

Magister Ing. Sistemas e Informática

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2023

Dedicatoria.

*Dedico mi trabajo de grado a mi familia, les agradezco todo su apoyo, motivación
Y esfuerzo; a mi madre Ross Neira Niño y a mi padre Juvenal Mesa por hacerme la
persona que soy hoy en día y a enseñarme que siempre es posible superarse,
a mi hermana Diana Mesa, mi hermano Bryan Mesa y a mi prima hermana Melanny
Niño; sin todos ellos nada de esto hubiese sido posible.*

*A mi mejor amiga de la infancia Leandra Caseres y a mi amigo Andrés Felipe Sánchez
por todo el apoyo desinteresado.*

*A mis amigos y compañeros de carrera Silvia Marcela Rodríguez, Melissa Rodríguez y
Harvey Criado,
Quienes siempre estuvieron para mí y fueron mi segunda familia a lo largo de
Toda mi estadía por Bucaramanga y me han acompañado a la distancia con su
Amor y paciencia.*

*En mi corazón siempre estarán todos aquellos que han contribuido en la
Realización de este sueño que finalmente es real.*

Fabiana Andrea Mesa Niño

Dedicatoria.

De manera especial y fraternal, dedico mi trabajo de grado primeramente a Dios por ayudarme a lograrlo, por darme la fuerza y el ímpetu para no desfallecer.

A mis papitos Luis Rodríguez y Esperanza Montes; mis hermanos Javier y Andrés, de no ser por su desinteresado apoyo esto no hubiera sido posible y aunque he pasado por momentos difíciles siempre han estado brindándome su comprensión, paciencia, cariño y amor.

A mi novio y compañero de vida, Nicolás Leguizamo por su amor único e incondicional, su comprensión, consejos y demás cosas que me soportaron para poder terminar este gran logro, sin su constante motivación e inspiración para poder superarme esto no lo hubiera logrado.

A mis amigos más cercanos, Angie Suarez, Mateo Suarez, Daisy Caro, Sofía Villamil, Miller Zambrano, Lorena Galeano y los que me faltaron nombrar, por estar para mí y quererme.

A mis amigos de la Universidad, Dana Sierra, Majo Barbosa, Daniela Santis, Fabiana Mesa, David Ramírez que se convirtieron en mi segunda familia durante toda mi carrera, por explicarme los temas que para mí eran complejos y tenerme paciencia, por creer en mí y en que podía.

Esta dedicatoria es un golpe en la mesa a la vida y a todo lo negativo, si se puede, siempre todo tiene solución, no se rindan sin importar la incertidumbre.

Angie Melissa Rodríguez Montes.

Agradecimientos.

Un agradecimiento acompañado de mucho aprendizaje, dirigido a la ingeniera Claudia Marcela Valderrama Ríos y a el ingeniero Ariel Uribe por todo el acompañamiento, la doctrina, la orientación, el profesionalismo y claramente la paciencia en todo este proceso.

Este trabajo tan elaborado y perfeccionado no hubiera sido posible sin ustedes.

A Gustavo Ramírez por confiar en nosotras, a la escuela de ingeniería química por habernos formado como profesionales y personas.

Por todo lo aprendido en este proceso fundamental de nuestras vidas tanto profesional como académico, agradecemos al convenio 3043921: “Generar y transferir conocimiento por medio del modelado de tecnologías para la captura y uso de CO₂, valorización de gas tea y generación de hidrógeno azul y verde, con el fin de evaluar su viabilidad técnica, económica y sostenible, que permita reducir la incertidumbre de su posible adopción como alternativas tecnológicas de descarbonización en la industria de petróleo y gas”; brindado por la empresa Ecopetrol por la valiosa oportunidad otorgada.

Finalmente, agradecemos a todos nuestros compañeros, familiares y profesores quienes, a lo largo de todo nuestro crecimiento profesional, contribuyeron de manera activa

Para cumplir nuestra meta de ser ingenieras químicas.

Fabiana Andrea Mesa Niño y Angie Melissa Rodríguez.

Tabla de contenido.

Introducción.....	13
1. Objetivos.....	15
1.1 Objetivo general.....	15
1.2 Objetivos específicos.....	15
2. Marco conceptual.....	16
2.1 Procesos de captura.....	16
3.1.1 <i>Absorción química con aminas.</i>	16
3.1.2 <i>Absorción química con amoníaco.</i>	17
3.2 Evaluación económica.....	18
3.2.1 <i>Costo de captura.</i>	18
3.2.2 <i>Costo total anualizado.</i>	19
3.3 Evaluación ambiental.....	19
3.3.1 <i>Costo de dióxido de carbono evitado.</i>	19
3.3.2 <i>Intensidad de carbono.</i>	20
3. Estado del arte.....	21
4.1 Estudios basados en el modelado y simulación	21
5 Metodología.....	23
5.1 Configuración conceptual del proceso.....	23
5.2 Simulación y estudio técnico.....	24

5.3	Estudio económico.....	25
5.3.1	<i>Costos de capital</i>	25
5.3.2	<i>Costos operativos</i>	26
5.4	Estudio de impacto Ambiental.....	26
6	Resultados.....	26
6.1.1	<i>Simulación del proceso de absorción con MEA</i>	26
6.1.2	<i>Validación</i>	31
6.1.3	<i>Estudio económico MEA</i>	33
6.1.4	<i>Estudio de impacto ambiental MEA</i>	36
6.2.1	<i>Configuración conceptual del proceso de MEA+MDEA</i>	37
6.2.2	<i>Estudio técnico</i>	38
6.2.3	<i>Estudio económico MEA+MDEA</i>	42
6.2.4	<i>Estudio ambiental</i>	44
6.3	Casos de estudio de diferentes concentraciones de CO ₂ en “fluegas”.....	45
7	Conclusiones.....	50
8	Recomendaciones.....	52
	Referencias Bibliográficas.....	53
	Apéndices.....	58

Lista de tablas

Tabla 1. Composiciones de MEA+MDEA	26
Tabla 2. Componentes usados en el modelo de simulación para monoetanolamina	29
Tabla 3. Condiciones de ingreso para fluegas y leanin.	30
Tabla 4. Condiciones de operación para la captura de CO ₂ con MEA	31
Tabla 5. Reacciones cinéticas	32
Tabla 6. Condiciones para leanin y leanout	33
Tabla 7. Porcentaje de captura	33
Tabla 8. CaPex y AIC	36
Tabla 9. OpEx y TAC MEA	37
Tabla 10. CO ₂ evitado e intensidad de carbono	38
Tabla 11. Reacciones cinéticas mezcla de aminas	40
Tabla 12. Caso de estudio para el porcentaje de absorción	41
Tabla 13. Caso de estudio para el calor en el reboiler	41
Tabla 14. Caso de estudio para la intensidad de carbono	43
Tabla 15. Costos operacionales	43
Tabla 16. Indices economicos	45
Tabla 17. Emisiones totales	46
Tabla 18. CO ₂ evitado e intensidad de carbono	46
Tabla 19. Caso de estudio de composición molar de “fluegas”	46

Lista de figuras.

Figura 1. Esquema generico de captura con aminas.....	20
Figura 2. Fases de la metodología	23
Figura 3. Diagrama de proceso para la absorción química de CO ₂ con MEA.	30
Figura 4. Perfil de temperatura de líquido y vapor en el absorbedor.....	35
Figura 5. Perfil de temperatura de líquido y vapor en el desorbedor.....	35
Figura 6. Costos capitales MEA	36
Figura 7. Costos operativos MEA.....	37
Figura 8. Diagrama de proceso para la absorción química con MEA+MDEA	40
Figura 9. Grafica composición de MDEA vs porcentaje de absorción	42
Figura 10. Gráfica composición de MDEA vs calor en el rehervidor	43
Figura 11. Costo de captura en los casos de estudio.....	48
Figura 12. Casos de estudio CO ₂ evitado	49
Figura 13. Casos de estudio intensidad de carbono	51

Lista de apéndices.

Apéndice A. Cálculo del CAPEX para cada unidad de proceso.....	58
Apéndice B. Cálculo de los costos operativos	64
Apéndice C. Cálculo de emisiones, intensidad de carbono y CO2 evitado.....	68
Apéndice D. Cierre del reciclaje mediante bloques calculadores.	70
Apéndice E. Resultados costos Capitales y operativos MEA.....	71
Apéndice F. Emisiones generadas MEA.	72
Apéndice G. Costos capitales y operativos mezcla de aminas (MEA+MDEA).....	72
Apéndice H. Emisiones generadas mezcla de aminas (MEA+MDEA).....	73

Glosario

Amina: son compuestos químicos orgánicos que se consideran derivados del amoníaco (NH_3), se clasifican según el número de iones alquilo (CH_3^-) denominados (R). Cuando la amina se encuentra unida a un ion nitrógeno con dos hidrógenos se considera primaria, si se unen dos alquilo con un nitrógeno e hidrógeno es secundaria y si se unen tres alquilo a un nitrógeno es terciaria. (Marroig Martínez, 2015)

Dióxido de carbono (CO_2): es un gas incoloro, inodoro y altamente soluble en agua cuyas moléculas se componen por un átomo de carbono y dos de oxígeno, unidos por enlaces dobles covalentes. Su presencia es sumamente importante para el funcionamiento de los ecosistemas ya que este hace parte del proceso de fotosíntesis donde se produce oxígeno O_2 . El dióxido de carbono es un gas de efecto invernadero, dado que contribuye a formar una capa gaseosa en la atmósfera que impide la radiación del calor y aumenta la temperatura de la superficie del planeta, lo cual conduce a cambios climáticos (Ondarse Álvarez, 2021)

Metildietanolamina (MDEA): es un solvente líquido claro e incoloro con olor amoniacal; es miscible en agua, alcohol y benceno cuya fórmula es $\text{CH}_3\text{N}(\text{C}_2\text{H}_4\text{OH})_2$. La MDEA es una amina terciaria y es usada principalmente como agente absorbente de gases ácidos. (Lira Teco, 2016)

Monoetanolamina (MEA): es un solvente líquido tóxico, inflamable, corrosivo, incoloro y viscoso, con un olor amoniacal. Es tanto amina primaria como un alcohol primario. La MEA es muy usada en la industria por sus cualidades surfactantes, purificadora de gases y de base débil. (Pantelis & Tsiourva, 2017)

Resumen

Título: Estudio técnico, económico y de impacto ambiental del proceso de absorción química de CO₂ mediante el uso de aminas (MEA y MDEA) y amoníaco (NH₃). *

Autor: Fabiana Andrea Mesa Niño, Angie Melissa Rodríguez Montes. **

Palabras clave: Captura de CO₂, costo de captura de CO₂, planta piloto, simulación, monoetanolamina (MEA), metildietanolamina (MDEA)

Descripción: En esta investigación se realizó una evaluación técnico-económica y ambiental mediante un modelo de simulación desarrollado en Aspen plus, con el fin de determinar la composición ideal del solvente basado en MEA y MDEA para la captura de dióxido de carbono por absorción química. La metodología para el desarrollo de esta investigación se dividió en cuatro fases, se inició con la construcción de un modelo base que representara el proceso de captura de CO₂ con MEA, considerando un gas efluente de una planta de generación de energía eléctrica. El modelo fue validado con respecto a los datos operacionales de planta, obteniendo desviaciones en los perfiles de temperatura del absorbedor y desorbedor menores al 10%. En la siguiente etapa de la investigación, se realizó el análisis técnico-económico y de impacto ambiental, obteniendo costos de captura y de abatimiento de CO₂ de $29,3 \frac{USD}{t CO_2}$ y $61,6 \frac{USD}{t CO_2}$ respectivamente, con una intensidad de carbono (IC) de 0,524. Estos indicadores se encuentran dentro de los rangos reportados para esta tecnología de captura de carbono. A partir de la simulación del caso base, usando MEA como solvente, se investigó cuál debería ser la composición de la mezcla de aminas (MEA + MDEA) que cumpliera con una IC de 0,524, es decir el mismo indicador ambiental que la MEA. Para ello, se realizaron simulaciones a diferentes composiciones del solvente y variando la carga de CO₂. Se encontró una composición 70% (MEA) y 30% (MDEA) como la composición cercana al target de IC. Adicionalmente, esta mezcla de solventes disminuye el porcentaje de captura con respecto a MEA; reduce en un 25.38% el OpEx debido a menor requerimiento de calor en la regeneración; e incrementa el costo de captura en 3.7% y el costo de abatimiento en 6.4% comparado con el solvente basado en MEA.

Por último, se realizó un análisis de sensibilidad a la composición del gas efluente, con el fin de simular el proceso de captura de CO₂ usando corrientes típicas de la industria de la refinación de petróleo. Este ejercicio es fundamental para analizar el comportamiento a escala piloto en particular para concentraciones diluidas de dióxido de carbono.

* Trabajo de Grado

** Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Escuela de ingeniería química. Director: Gustavo Emilio Ramírez Doctor en ingeniería de materiales. Codirector: Ariel Uribe Rodríguez. Magister en ingeniería de sistemas e informática.

Abstract

Title: Technical economic and environmental assessment of the amines-based- CO₂ chemical absorption process. *

Author: Fabiana Andrea Mesa Niño and Angie Melissa Rodríguez. **

Keywords: CO₂ capture, CO₂ capture cost, pilot plant, simulation, monoethanolamine (MEA), methyldiethanolamine (MDEA)

Description: In this research, a technical-economic and environmental evaluation was carried simulation model developed in Aspen plus, in order to determine the ideal composition of the solvent based on MEA and MDEA for carbon dioxide capture by chemical absorption. The methodology for the development of this research was divided into four phases, starting with the construction of a base model to represent the CO₂ capture process with MEA, considering an effluent gas from an electric power generation plant. The model was validated with respect to plant operational data, obtaining deviations in the absorber and desorber temperature profiles of less than 10%. In the next stage of the research, the technical-economic and environmental impact analysis was carried out, obtaining CO₂ capture and abatement costs of 29.3 USD/(t CO₂) and 61.6 USD/(t CO₂) respectively, with a carbon intensity (CI) of 0.524. These indicators are within the reported ranges for this carbon capture technology. From the base case simulation, using MEA as solvent, it was investigated what should be the composition of the amine mixture (MEA + MDEA) that would meet a CI of 0.524, the same environmental indicator as MEA. For this purpose, simulations were performed at different solvent compositions and varying CO₂ loading. A composition of 70% (MEA) and 30% (MDEA) was found to be close to the target CI composition. Additionally, this solvent mixture decreases the capture percentage with respect to MEA; reduces the OpEx by 25.38% due to lower heat requirement in regeneration; and increases the capture cost by 3.7% and the abatement cost by 6.4% compared to the MEA-based solvent.

Finally, a sensitivity analysis to the effluent gas composition was performed to simulate the CO₂ capture process using typical streams from the oil refining industry. This exercise is fundamental to analyze the behavior at pilot scale for dilute concentrations of carbon dioxide.

* Degree work

** Faculty of physicochemical engineering. Chemical engineering school. Director: Gustavo Emilio Ramírez PhD in materials engineering. Co-director: Ariel Uribe Rodríguez. Master's in systems Engineering and Computer Science.

Introducción.

El calentamiento global del planeta está directamente asociado a la concentración de los gases de efecto invernadero, como el dióxido de carbono (CO_2); el cual su incremento ha sido impulsado gradualmente por la actividad humana, principalmente, a través del empleo de combustibles fósiles. La magnitud y el impacto de este gas ha sido evaluado por el Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático (IPCC, 2005) constatando que desde la revolución industrial existe una tendencia exponencial de emisión en los gases de efecto invernadero, siendo el dióxido de carbono el responsable de cerca del 50% de este incremento.

Una opción para reducir estos niveles de CO_2 en la atmósfera es utilizar tecnologías de captura postcombustión; una de estas tecnologías es la absorción química que hasta la fecha ha sido de las más investigadas ya que a nivel industrial utiliza el empleo de aminas o mezclas de ellas; siendo la monoetanolamina (MEA) la más usada, dada su alta velocidad de reacción con el CO_2 y su operación estable; sin embargo, el requerimiento energético para su regeneración es alto, además de presentar problemas de degradación y corrosión. De manera similar, la metildietanolamina (MDEA) reacciona con el CO_2 , no obstante, su velocidad de reacción es menor que con la MEA, pero con la ventaja de una aparente inmunidad a ambos problemas operativos y una necesidad de calor para su regeneración menor. Es por esta razón que, los investigadores han tornado su atención a la formulación de disolventes mediante la mezcla de una variedad de aminas individuales con el fin de combinar las características favorables de diferentes disolventes, suprimiendo a la vez sus características desfavorables; es decir, lograr obtener un solvente que consuma menos energía en su regeneración, sin sacrificar la eficacia de captura de carbono. Por tal motivo, en el presente trabajo se propone a partir de una simulación en Aspen plus de una planta a escala piloto de captura de CO_2 basada en aminas, responder la siguiente pregunta de

investigación: ¿Cuál es la composición ideal del solvente basado en MEA y MDEA que tiene el mejor desempeño técnico, económico y ambiental?

1. Objetivos

1.1 Objetivo general.

Evaluar el proceso de absorción química de CO₂ con aminas (MEA, MDEA) y amoníaco (NH₃) determinando su viabilidad técnica, económica y ambiental mediante un modelo de simulación en Aspen plus.

1.2 Objetivos específicos

- Establecer la configuración del proceso de manera conceptual identificando requerimientos másicos, condiciones de operación de los equipos principales y reacciones involucradas a partir de la búsqueda del estado actual de las tecnologías de captura usando aminas.
- Estudiar técnicamente un modelo de simulación en Aspen plus para la absorción química de CO₂ con aminas (MEA Y MDEA) y amoníaco
- Realizar un estudio económico a cada proceso según el agente absorbente.
- Hacer un estudio de impacto ambiental para cada caso analizando cual tiene mayor viabilidad.

2. Marco conceptual.

2.1 Procesos de captura

Los procesos de captura son una alternativa para disminuir la concentración de los gases de efecto invernadero, los cuáles requieren estrategias eficaces como la captura y el almacenamiento de carbono “Carbon Capture and Storage” (CCS). Este es un proceso que consiste en la separación del dióxido de carbono de fuentes industriales, el transporte para su almacenamiento y el aislamiento a largo plazo de la atmósfera, los tres principales enfoques del CCS son: la captura posterior a la combustión (post-combustión), la captura previa a la combustión (precombustión) y el proceso de oxidación (IPCC, 2005; Wang et al., 2011)

En los procesos de postcombustión se reduce la mayor cantidad de dióxido de carbono por su eficiencia y mayor maduración tecnológica; las diferentes tecnologías para la captura de CO₂ en la postcombustión son: la absorción química o física, adsorción, separación criogénica y separación por membrana (Sreedhar et al., 2017). La absorción química implica la reacción de CO₂ con un disolvente químico para formar un compuesto intermedio débilmente enlazado, que puede regenerarse con la aplicación de calor produciendo el disolvente original y una corriente de CO₂ (IPCC, 2005)

3.1.1 Absorción química con aminas.

La absorción química con alcanolaminas, es uno de los métodos más eficaces para la captura de CO₂. Existen diferentes aminas adecuadas para este proceso, como la monoetanolamina (MEA), la dietanolamina (DEA), la diglicolamina (DGA), la metildietanolamina (MDEA) y el 2-amino-2-metil-1-propanol (AMP). La selección de una determinada amina viene dada por su

capacidad de absorción, la cinética de reacción, requerimiento de calor para su regeneración, resistencia a la degradación, corrosividad, volatilidad, precio, toxicidad y facilidad de operación.

La monoetanolamina (MEA) ha sido el absorbente de referencia para la captura postcombustión, por su capacidad para capturar CO_2 a presiones parciales bajas; teniendo como ventajas su peso molecular bajo y su rápida reactividad debido a la formación de carbonatos estables, sin embargo, cuenta con la desventaja de tendencia a la degradación durante su operación y un requerimiento de calor relativamente alto para su regeneración.

La metildietanolamina (MDEA) tiene una baja reactividad con respecto al CO_2 , debido a la formación excluyente de bicarbonatos por hidrólisis de CO_2 , sin embargo, el requerimiento de calor para su regeneración es menor.

3.1.2 Absorción química con amoníaco.

El amoníaco (NH_3) es un posible absorbente de CO_2 en la captura post- combustión, comparado con la MEA necesita menor calor para su regeneración, se degrada menos, es menos corrosivo y es más barato, sin embargo, presenta precipitación de sólidos y además por su alta volatilidad requiere de un sistema de regeneración.

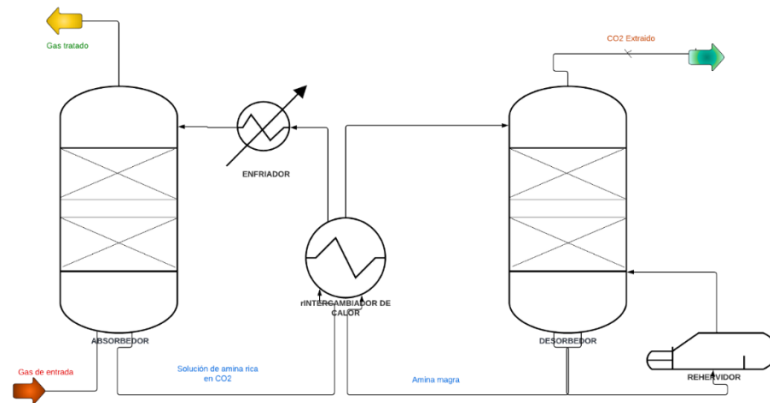
3.1.3 Esquema general de procesos de absorción química.

La configuración general del proceso de absorción con aminas se muestra en la figura 1. El gas de entrada se pone en contacto en contracorriente con el disolvente pobre, produciendo un disolvente rico, este disolvente rico se calienta en un intercambiador de calor cruzado mediante disolvente pobre regenerado procedente del regenerador. A continuación, la solución rica se bombea a la parte superior del regenerador en que el calor se suministra a través del rehervidor.

El solvente regenerado se bombea de nuevo al absorbedor a través de un intercambiador de calor cruzado para reducir la temperatura.

Figura 1.

Esquema genérico de captura con aminas.



3.2 Evaluación económica.

3.2.1 Costo de captura.

Uno de los dos indicadores evaluativos que resume los costos implementados a nivel económico de aquellas tecnologías cuyo fin es la captura de dióxido de carbono; es el costo de captura. Este es un método directo que se obtiene dividiendo el costo total anualizado en todo el proceso de captura por la cantidad total de CO₂ capturado; sin embargo, este índice no tiene en cuenta las emisiones generadas de dióxido de carbono para el funcionamiento de los equipos o algunos fluidos involucrados en la planta (Moch et al., 2022)

$$\text{Costo de captura} \left(\frac{\$}{t\text{CO}_2} \right) = \frac{\text{Costo total anualizado (TAC)}}{\text{flujo de emisiones de CO}_2 \text{ capturadas}} \quad (\text{Ec.1})$$

El costo de captura representa la funcionabilidad que tiene la planta mediante el costo de instalación junto con todos los requerimientos energéticos implementados para su funcionamiento y la capacidad de captura que tiene a partir de una corriente de gas de entrada; por lo tanto, en base a la ecuación 1 entre más pequeño sea este indicador más factible es el proceso a nivel de costos.

3.2.2 Costo total anualizado

El costo total anualizado es la suma de todos los costos que son implementados al invertir, teniendo en cuenta los costos operativos involucrados en un periodo de un año y se encuentra definido de la siguiente manera:

$$TAC \left(\frac{\$}{\text{año}} \right) = AIC + AO \quad (\text{Ec.2})$$

Donde AIC y AO son los costos de inversión y operación anualizados. La determinación del AO depende de los servicios industriales utilizados en la planta y demás costos operativos (OpEx (Hasan et al., 2012) ; el AIC debe ser calculado así:

$$AIC \left(\frac{\$}{\text{año}} \right) = \emptyset * (\text{Costo total de la planta}) + \text{Costo anual de mantenimiento} \quad (\text{Ec.3})$$

El costo total de la planta (TPC) representa el costo total de la planta (CaPex) donde va multiplicado por \emptyset que es el factor de recuperación del capital y AMC es el costo anual de mantenimiento. (Hasan et al., 2012)

3.3 Evaluación ambiental.

3.3.1 Costo de dióxido de carbono evitado

El costo de CO₂ evitado es la asignación de un valor económico a un parámetro ambiental el cual se enfoca en todas las emisiones vinculadas en la producción y puesta en marcha de una

planta, teniendo en cuenta las emisiones capturadas por la misma; de tal manera que representa el costo relacionado para generar una tonelada del neto de las emisiones de CO₂ resultante de todos los servicios industriales directamente vinculados en el proceso de captación. (Roussanaly, 2019).

Este indicador se calcula teniendo en cuenta el costo total anualizado, mostrado en la ecuación 4:

$$CO_2 \text{ evitado} \left(\frac{\$}{tCO_2} \right) = \frac{\text{Costo total anualizado (TAC)}}{\text{Flujo de emisiones evitadas (Emisiones capturadas - Emisiones generadas)}} \quad (\text{Ec.4})$$

El costo de CO₂ evitado puede dar resultados negativos y esto indica que la planta genera más emisiones que las que captura; lo tanto no sería viable ambientalmente. Este índice económico (Ec.4) comparado con el costo de captura (Ec.1) siempre será mayor, debido a que las emisiones capturadas siempre serán mayores que las evitadas. (Moch et al., 2022).

3.3.2 Intensidad de carbono

Los indicadores de intensidad de carbono (IC) son herramientas importantes de seguimiento de factibilidad en estudios energéticos y climáticos, que se han utilizado para el contemplar el rendimiento energético a nivel mundial (Sou et al., 2022).

La intensidad de carbono se define como la cantidad de emisiones de CO₂ por unidad de actividad; la actividad se puede medir de diversas maneras para diferentes sectores (Sou et al., 2022). Su fin principal es cuantificar las emisiones de CO₂ de cualquier industria para poder evaluar su impacto a nivel ambiental (REPSOL, n.d.) y su método de cálculo se indica en la ecuación 5:

$$\text{Intensidad de carbono} = \frac{\text{Flujo de emisiones de CO}_2 \text{ generadas}}{\text{flujo de emisiones de CO}_2 \text{ capturadas}} \quad (\text{Ec.5})$$

3. Estado del arte

4.1 Estudios basados en el modelado y simulación

(Aroonwilas & Veawab, 2004a) estudiaron el rendimiento de distintas aminas, como la MEA, la MDEA y la mezcla de MEA+MDEA, para la captura de CO₂; descubriendo que cuando la MEA y la MDEA se mezclan en la proporción adecuada el consumo de energía para regenerar la mezcla se reduce significativamente en comparación con la MEA sola, sin embargo, este estudio se hizo a una planta piloto de laboratorio, con dimensionamientos de hasta un metro de diámetro.

(Chalmers & Gibbins, 2007) estudiaron la captura postcombustión de CO₂ con MEA para centrales eléctricas de carbón. En él se señalaba que es necesario seguir trabajando para comprender mejor el comportamiento transitorio de las centrales eléctricas con captura de CO₂, especialmente cuando se varía la carga de CO₂.

4.2 Estudios basados en simuladores de procesos comerciales.

Aspen plus proporciona dos modelos rigurosos de separación multietapa para modelar el absorbedor y el regenerador; el primero es el modelo basado en el equilibrio y el segundo es el modelo “Rate-Based”; este considera las transferencias reales de calor y masa de múltiples componentes.

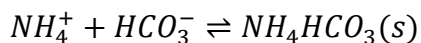
(Freguia, 2002) utilizó el modelo “Rate-Based” para simular el absorbedor y el desorbedor; estos se enlazaron con el intercambiador de calor para formar un proceso completo de captura de CO₂. Se estudiaron los efectos del diseño del proceso y de las variables operativas (como el flujo de la solución de amina, la altura del absorbedor, la altura del desorbedor y la presión del separador) en las necesidades energéticas.

(Zhang et al., 2009) volvieron a usar el modelo “Rate-Based” de Aspen plus para el estudio de simulación; utilizaron los datos experimentales de las pruebas de la planta piloto de la Universidad de Texas en Austin para validar el modelo del absorbedor.

(Dugas et al., 2009) usaron el modelo “Rate-Based” para simular el absorbedor, para la validación del modelo utilizaron los datos experimentales de las pruebas de la planta piloto del proyecto (CASTOR); afirmaron que el modelo representa con éxito tanto la temperatura en fase gaseosa como los perfiles de CO₂ en el absorbedor.

4.3 Amoniacó.

(Jilvero, 2014) en sus investigaciones evaluó al amoniacó como una posible alternativa al solvente MEA, destacando su capacidad para absorber CO₂ con un bajo calor de reacción que hace que los requisitos de calor para su regeneración sean bajos. Sin embargo, el amoniacó presenta dos desventajas importantes, la primera es que hay precipitación de sólidos en el absorbedor, es decir hay formación de lodos lo que a nivel de diseño y operación hace que esta tecnología sea compleja; la segunda es que el amoniacó al ser más volátil que las aminas requiere de un proceso de recuperación que según el Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el trabajo (The National Institute for Occupational Safety and Health & Ammonia, 1992) el amoniacó no puede ser liberado a la atmósfera a más de 25 ppm. El autor demostró que el costo de regeneración del amoniacó puede resultar más costoso que el proceso de absorción de CO₂; por estas razones en nuestro trabajo de investigación no se realizó el estudio técnico, económico y ambiental del proceso de captura de CO₂ con amoniacó y el estudio se enfocó en las aminas MEA y MDEA.

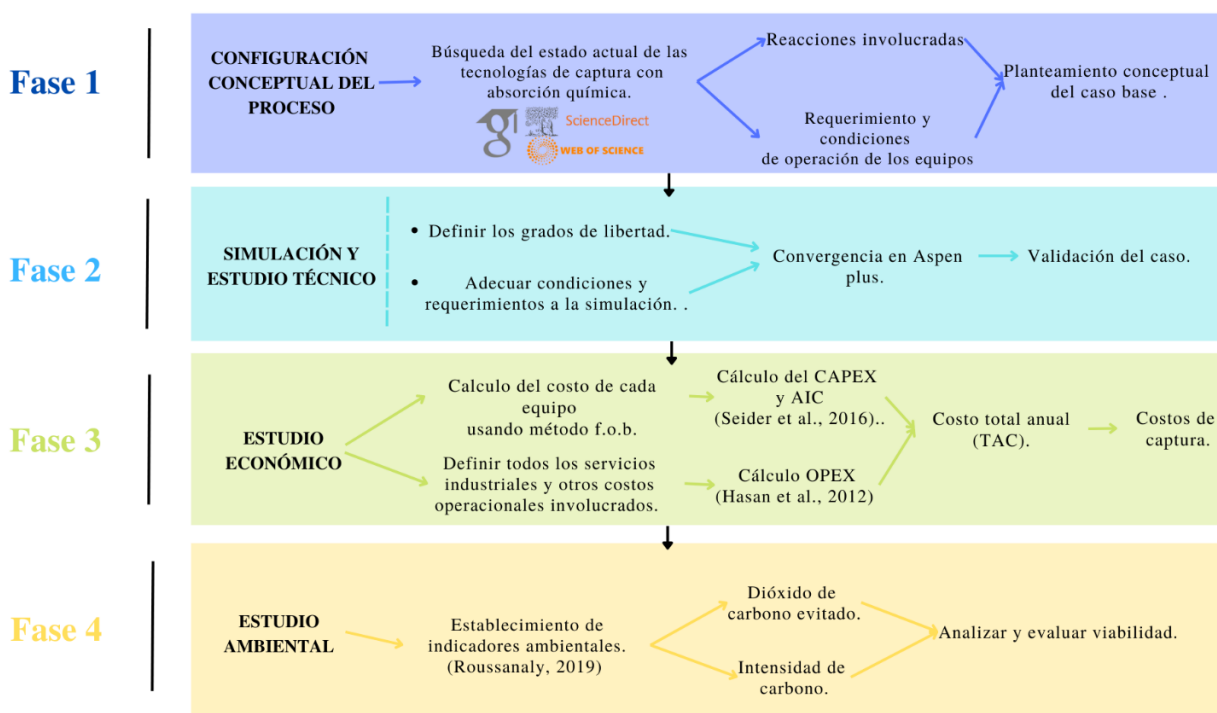


5 Metodología.

El presente trabajo consideró la evaluación técnico-económica y ambiental de dos esquemas de captura de carbono: el primero fue conformado por MEA, el segundo como un caso de mezclas de MEA+MDEA de diferentes composiciones y el caso del amoniaco. En el desarrollo de cada uno de los casos se planteó la misma metodología; compuesta por cuatro fases consecutivas cuyo fin fue generar índices evaluativos para cada agente absorbente. En la figura 2 se resume todo el proceso de elaboración de las cuatro etapas involucradas:

Figura 2.

Fases de la metodología



5.1 Configuración conceptual del proceso.

Se realizó una búsqueda bibliográfica en bases de datos especializadas como Scopus, Web of science, Google académico y ACSpublications; identificando como palabras clave: chemical absorption, amine, carbon capture y monoethanolamine.

Se seleccionó el caso base teniendo en cuenta la disponibilidad de datos de planta piloto, las condiciones de operación de los equipos, las reacciones involucradas; para lograr la simulación; y perfiles de temperatura que permitieran la validación del caso.

5.2 Simulación y estudio técnico

Una vez definido el caso base se realizó la simulación en Aspen plus para la MEA; la convergencia del reciclo se hace mediante bloques calculadores, para luego ser validada mediante parámetros como el porcentaje de absorción y perfiles de temperatura en ambas torres, teniendo como criterio que estas desviaciones no superen el 10%.

Se utilizó el diseño que representó la planta piloto de la MEA para simular la mezcla de aminas MEA+MDEA haciendo una evaluación a diferentes concentraciones de MEA y MDEA, partiendo de la composición molar del caso base de la MEA (0,1123); se asignaron porcentajes para la composición de MDEA y la MEA comenzando con el 20% de MDEA 60% de MEA como se muestra en la tabla 1; este estudio se hizo a diferentes cargas de CO₂ (ecuación 6): 0,11; 0,15; 0,19, 0,2 y 0,21 para también evaluar como la carga impacta en el porcentaje de absorción y el calor en la regeneración.

$$Carga\ de\ CO_2 = \frac{molCO_2}{molMEA + molMDEA} [=] \frac{kmol}{kmol} \quad (Ec.6)$$

Tabla 1.

Composiciones de MEA+MDEA.

Concentración total: 0,1123	20%	30%	40%	50%	60%
Concentración molar MDEA	0,02246	0,03369	0,04492	0,05615	0,06738
Concentración molar MEA	0,08984	0,07861	0,06738	0,05615	0,04492

Posterior al estudio, se seleccionó una composición y carga ideal teniendo como criterio un valor de intensidad de carbono cercano o igual al calculado para la MEA.

5.3 Estudio económico.

El estudio económico de toda la planta se dividió en costos capitales (CaPex) y costos operativos (OpEx), con estos costos se determinaron los costos de inversión (AIC) que se utilizaron para calcular el costo total anualizado (TAC), esto fue con el fin de obtener el costo de captura (ver Ec.1).

5.3.1 Costos de capital.

En el CaPex se realizó el cálculo correspondiente a todas las unidades de proceso involucradas; se utilizó el método de costo factorizado que se basa en el costo de compra “free on board” (f.o.b), este brindó factores para estimar los costos directos de materiales y de mano de obra junto con los costos indirectos que implicaron todo el proceso de instalación. (Seider et al., 2016).

El método de Lang y Guthrie utilizado para estimar la inversión del capital total requirió el uso de costos de compra f.o.b donde la aplicación de todos estos factores se representó con un costo final denominado C_P ; el procedimiento, las variables y correlaciones consideradas para el cálculo del costo de cada unidad de proceso utilizando el método de Lang y Guthrie se detalla en el apéndice A. Sumados los costos totales de cada equipo y multiplicados por los factores de contingencia e ingeniería se obtuvieron los CaPex.

Una vez definidos los CaPex se multiplicaron por la suma entre el costo de equipos instalados y el costo anual de mantenimiento, generando como resultado los costos de inversión (AIC), la explicación de tallada de este procedimiento se encuentra en el apéndice A.

5.3.2 Costos operativos.

Para el cálculo de los OpEx fue necesario tener en cuenta las siguientes variables involucradas para cada caso: los servicios industriales utilizados y materia prima principal (MEA, MDEA); se utilizaron factores que relacionen el costo en dólares con energía o masa con el fin de calcular el costo para cada uno. Se realizó una sumatoria de los costos involucrados para obtener el OpEx que junto con los costos de inversión dio como resultado el costo total anualizado (TAC), cuyo método de cálculo se describe en el Apéndice B.

5.4 Estudio de impacto Ambiental.

El estudio del impacto ambiental se llevó a cabo estableciendo los indicadores: costo de CO₂ evitado e intensidad de carbono; los cuales se calcularon cuantificando todas las emisiones generadas a partir de todos los servicios industriales que estuvieron directamente relacionados en todo el proceso de captura, el método de cálculo junto con los datos que se tuvieron en cuenta para el estudio se resume en el apéndice C. (Roussanaly, 2019).

6 Resultados.

6.1.1 Simulación del proceso de absorción con MEA.

El caso base seleccionado para la captura postcombustión con absorción química de CO₂ con MEA se describe en (Freguia, 2002), este cumplía con los datos de la planta piloto de la central eléctrica comercial de Bellingham Massachusetts, las condiciones de operación y las reacciones involucradas, así como perfiles de temperatura para la validación.

Los compuestos considerados en la simulación se presentan en la tabla 2.

Tabla 2.

Componentes usados en el modelo de simulación para monoetanolamina (MEA)

Fórmula	Nombre del componente	Alias
MEA	Monoetanolamina	C2H7NO
H2O	Agua	H2O
CO2	Dióxido de carbono	CO2
H3O+	H3O+	H3O+
OH-	OH-	OH-
HCO3-	HCO3-	HCO3-
CO3-2	CO3--	CO3-2
MEAH+	MEA+	C2H8NO+
MEACOO-	MEACOO-	C3H6NO3-
N2	Nitrógeno	N2
O2	Oxígeno	O2

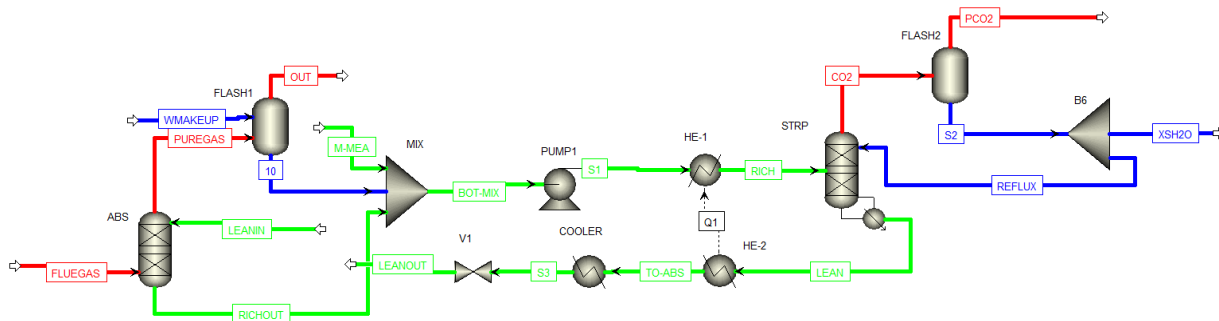
Nota. Adaptado de (Aspen Technology, 2014)

El método NRTL del electrolito y la ecuación de estado RK se utilizaron para calcular las propiedades del líquido y del vapor respectivamente tomadas de Aspen Technology (Aspen Technology, 2014), dado que se trabajó con mezclas orgánicas en presencia de agua; y se seleccionaron CO₂, N₂ y O₂ como componentes de Henry a los que se le aplica la ley de Henry.

La figura 3 presenta el diagrama de proceso simulado en Aspen plus V12. A su vez, la tabla 3 presenta las condiciones de ingreso reportadas del caso base en las corrientes de fluegas y leanin.

Figura 3.

Diagrama de proceso para la absorción química de CO₂ con MEA.



Nota: Tomado de Aspen plus V.12 ®

Tabla 3.

Condiciones de ingreso para fluegas y leanin.

Corriente	Fluegas	Leanin
Temperatura [°C]	55	40
Presión [kPa]	111,325	137,9
Flujo total[ton/año]	2,84E+06	8,98E+06
Composición molar CO ₂	0,1257	-
Composición molar H ₂ O	0,077	0,8877
Composición molar N ₂	0,748	-
Composición molar O ₂	0,0486	-
Composición molar MEA	-	0,1123
Carga: molCO ₂ /molMEA	-	0,21

Nota: Tomado de (Freguia, 2002)

Las condiciones de operación para cada equipo del proceso se muestran en la tabla 4:

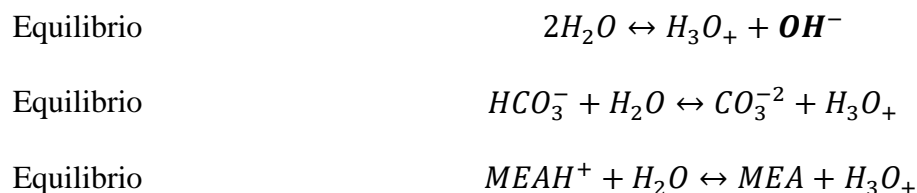
Tabla 4.

Condiciones de operación para la captura de CO₂ con MEA.

Unidad de proceso	Tag	Grados de libertad
Absorbedor	Abs	Tipo de cálculo: Rate-Based Número de etapas: 20 Condensador: No Reboiler: No Presión: 1 atm Empaque: "Cascade mini rings" #2 Altura: 15 m Diámetro: 7,2 m
Flash	Flash1	Temperatura: 48,15 °C Presión: 1 atm Temp-Wmakeup: 37,75°C Pres-Wmakeup: 1,70146 atm Flujo-Wmakeup: 1,9088 kg/s Comp-Wmakeup H ₂ O: 1
Bomba	Pump 1	Presión de descarga: 1,6 atm
Intercambiador de calor	He-1	Cambio de temperatura: 108,65 °C
Desorbedor	Strp	Tipo de cálculo: Rate-Based Número de etapas: 20 Condensador: No Reboiler: Kettle Presión: 1,6 atm Empaque: "Cascade mini rings" #2 Altura: 10 m Diámetro: 5 m Calor en el rehervidor: 69992,5 kW
Flash	Flash2	Temperatura: 50 °C Presión: 1,6 atm
Divisor	B6	Flujo-XSH ₂ O: 0,0783387
Intercambiador de calor	He-2	Presión: 1,69869 atm Calor: -65335,9 kW
Intercambiador de calor	Cooler	Temperatura: 40°C Presión: 1,69869 atm
Válvula	V1	Presión de descarga: 1,36097 atm

Nota: Tomado de (Freguia, 2002)

Teniendo en cuenta tres reacciones en equilibrio y cuatro reacciones cinéticas presentadas en la tabla 5.

**Tabla 5.**

Reacciones cinéticas.

Reacción	K	E[cal/mol]	Referencia
$CO_2 + OH_- \rightarrow HCO_3^-$	4,32E+13	13249	(Pinsent et al., 1956)
$HCO_3^- \rightarrow CO_2 + OH_-$	2,38E+17	29451	
$MEA + CO_2 + H_2O \rightarrow MEACOO^- + H_3O_+$	9,77E+10	9855,8	(Hikita et al., 1977)
$MEACOO^- + H_3O_+ \rightarrow MEA + CO_2 + H_2O$	3,23E+19	15655	

Donde k y E vienen dadas de la ley de potencia reducida:

$$r = ke^{-E/RT} \quad (\text{Ec.7})$$

6.1.1.1 Reciclo.

La simulación se finalizó haciendo el reciclo del desorbedor al absorbedor figura 3, adecuando la corriente leanout a las condiciones de temperatura y presión de la corriente leanin y mediante la herramienta de bloques calculadores mostrados en el apéndice D; se estimaron los flujos de agua y MEA, haciendo que leanin y leanout fueran similares, en la tabla 6 se evidencia los resultados para ambas corrientes.

Tabla 6.

Condiciones para leanin y leanout.

Corriente	Leanin	Leanout	Desviación
Temperatura [°C]	40	40,0259	0,06
Presión [kPa]	137,9	137,9	0,00
Flujo de MEA [ton/h]	299,549	299,549	0,00
Flujo de H ₂ O [ton/h]	679,793	679,793	0,00
Flujo de CO ₂ [ton/h]	45,3223	45,2886	0,07

6.1.2 Validación

La validación del caso se hizo comparando el porcentaje de absorción reportado por el caso base con el calculado en la simulación; teniendo en cuenta que el porcentaje de absorción viene dado por la ecuación 8; en la tabla 7 se reporta los resultados de los porcentajes de absorción; el criterio clave que se tuvo en cuenta para la validación es que las desviaciones no pasaran del 10%.

$$\%ABS = \frac{molCO_{2FLUEGAS} - molCO_{2PUREGAS}}{molCO_{2FLUEGAS}} \quad (Ec.8)$$

Tabla 7.

Porcentaje de captura.

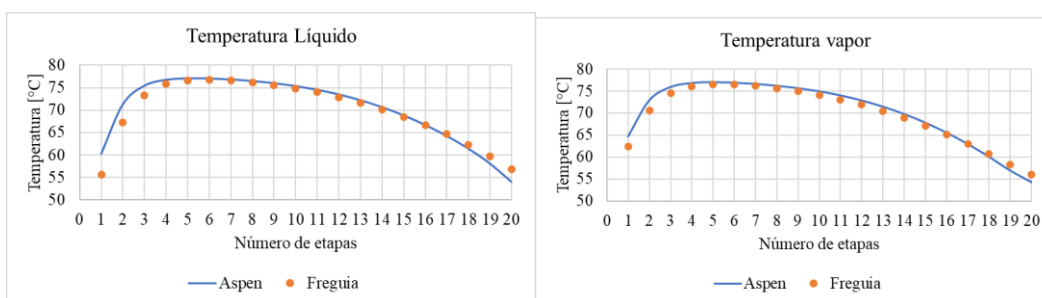
	(Freguia, 2002)	Simulación	Desviación
Porcentaje de absorción	90	95	5,56

La diferencia del 5,56% entre el caso base y la simulación se debe a la cinética de las reacciones, dado que estas constantes cinéticas no se reportaban con claridad en el caso base; por lo tanto, se tomaron las constantes cinéticas de (Aspen Technology, 2014).

Por último, la validación del caso es confiable dado que como se observa en las figuras 4 y 5 los perfiles de temperatura del líquido y el vapor en ambas torres no tienen desviaciones mayores al 10% con respecto a Freguia.

Figura 4.

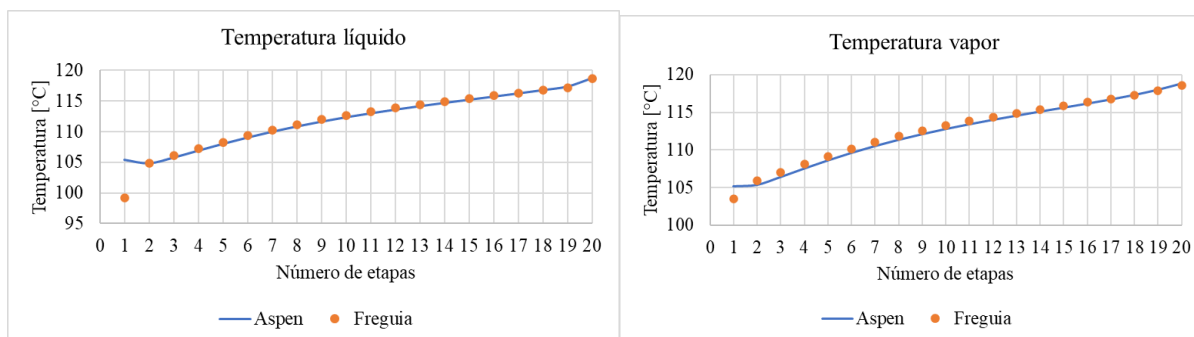
Perfil de temperatura del líquido y vapor en el absorbedor.



El aumento de la temperatura en las primeras etapas es debido a la reacción exotérmica, pero la temperatura disminuye cuando el calor de reacción y el efecto de enfriamiento del gas actúan sobre el solvente que baja por la columna.

Figura 5.

Perfil de temperatura del líquido y vapor en el desorbedor.



El aumento de la temperatura a lo largo de las etapas del desorbedor se debe al calor suministrado por el reboiler para lograr la separación.

6.1.3 Estudio económico MEA

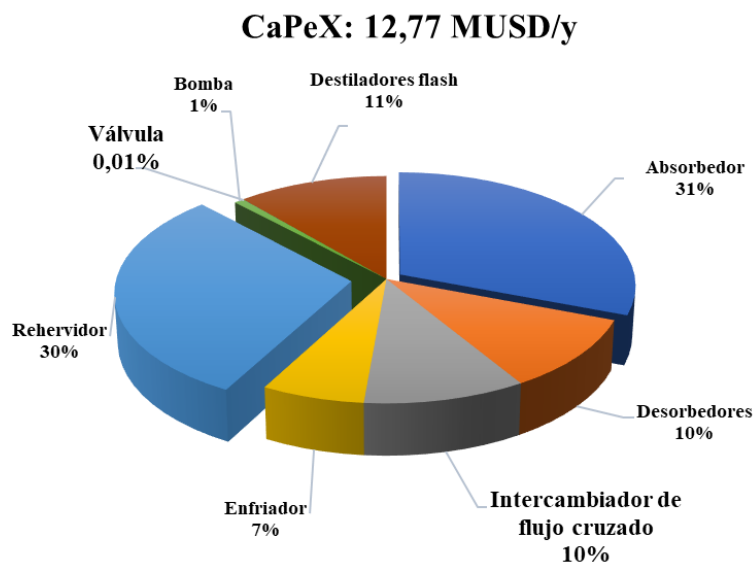
En el cálculo de todos los costos se utilizó el “índice de costo de la planta de ingeniería química” o CEPCI del año 2022 con el fin de traer el valor a tiempo presente, este dato correspondió a 815,7. (Moch et al., 2022)

6.1.3.1 CaPex

Una vez calculado el costo final (C_P) de cada equipo se representaron los costos capitales mediante la figura 6:

Figura 6.

Costos capitales MEA.



Principalmente se consideró acero al carbono y acero inoxidable debido a que son materiales que toleran la corrosión provocada por la MEA. Se evidenció según la figura 6 que los equipos que más generaron costos son el absorbedor y el rehervidor, esto debido al proceso de

captura de dióxido de carbono y regeneración de amina. Los datos usados para la estimación del CaPex se describen en el apéndice E.

Tabla 8.

CaPeX y AIC.

COSTO	UNIDAD	VALOR
Costo total equipos	MUSD/y	7,99
CaPex	MUSD/y	12,77
AIC	MUSD/y	2,60

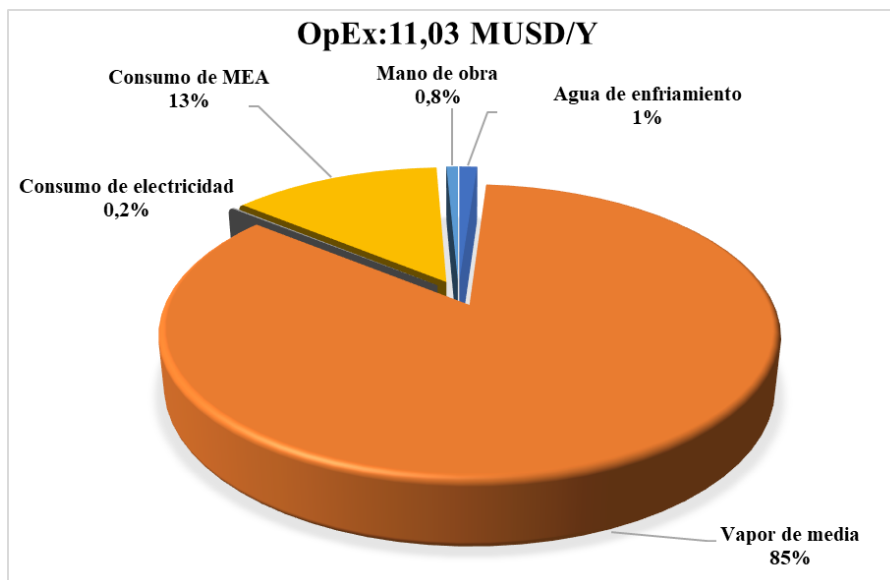
Para el cálculo de los CaPeX contemplados en la tabla 8 se plantearon mediante el costo total de equipos, los cuales se multiplicaron por los factores de ingeniería y contingencia correspondiente a 1,5982, obteniendo así los costos capitales. (Hasan et al., 2012)

6.1.3.2 OpEx

En los costos operativos se tuvieron en cuenta los servicios industriales usados en el rehervidor y el enfriador, correspondiente a vapor de media y agua de enfriamiento; también se incluyó el consumo de electricidad y el costo por la cantidad de operarios requeridos en la planta. El proceso de ejecución y los coeficientes involucrados se encuentran explícitos en el apéndice A5 y resumidos en la figura 7:

Figura 7.

Costos operativos MEA.



Se contempló en la figura 8 que la variable que más influyó significativamente en los costos operativos correspondió al vapor de media requerido en el rehervidor, esto debido al gran consumo energético que requiere la torre para la regeneración.

Teniendo los costos de capital y operativos se calculó el costo total anualizado, representado en la tabla 9:

Tabla 9.

OpEx y TAC MEA

COSTO	VALOR (MUSD/y)
OpEx	11,03
TAC	13,63

6.1.3.3 Costo de captura.

Una de las consideraciones que se tuvieron en cuenta en el planteamiento, es que los gases de efluente del presente estudio provienen de una planta de regeneración de energía y la literatura reportó unos rangos ideales de funcionamiento que oscilaron entre 20-132 $\frac{USD}{t CO_2}$ M. Moch et al.

(2022). Así, una vez calculado el costo total anual (TAC) se definió un costo de captura de 29,3059 $\frac{USD}{t CO_2}$ que teniendo en cuenta la información anterior la planta se encuentra dentro de estos intervalos.

6.1.4 Estudio de impacto ambiental MEA.

Se observó que el flujo de emisiones generadas en el rehervidor fueron las que más reportaron impacto sobre las emisiones totales con un valor 263036,2 t CO₂ /año, que correspondieron a un 98.4 % de las emisiones totales de la planta, lo que indica que el consumo energético en el rehervidor es un factor altamente significativo en el análisis de impacto ambiental. El resto de las emisiones están distribuidos entre servicios industriales, consumo de electricidad y consumo de MEA cuyo valor se encuentra reportado en el apéndice F.

6.1.4.1 Costo de CO₂ evitado e intensidad de carbono.

Una vez fueron definidas todas las emisiones generadas en toda la planta, se calculó el neto de las emisiones evitadas respecto al flujo de CO₂ capturado y por ende a partir de estas obteniendo el costo de CO₂ evitado y la intensidad de carbono reportados en la tabla 10:

Tabla 10.

CO₂ evitado e intensidad de carbono.

INDICADOR	UNIDADES	VALOR
Flujo de emisiones evitadas	t/y	242291,4
CO ₂ evitado	USD/ t CO ₂	61,6
Intensidad de carbono	Emisiones totales generadas/emisiones capturadas	0,5

Para el proceso de captura considerado en el presente trabajo se comparó el costo de CO₂ evitado obtenido en la tabla 10 con los rangos ideales de funcionabilidad reportados en la literatura,

que estuvieron entre 40-150 USD/t CO₂ Kazemi et al.(2016) dejando ver que el esquema simulado (61,6 USD/t CO₂) se encuentra dentro de lo establecido. Por otro lado, se obtuvo una intensidad de carbono de 0,524 y teniendo en cuenta que la escala de este índice oscila entre 0-1, lo que indica que el proceso propuesto captura más emisiones de CO₂ que las que genera; siendo así, un proceso operativo a nivel de impacto ambiental.

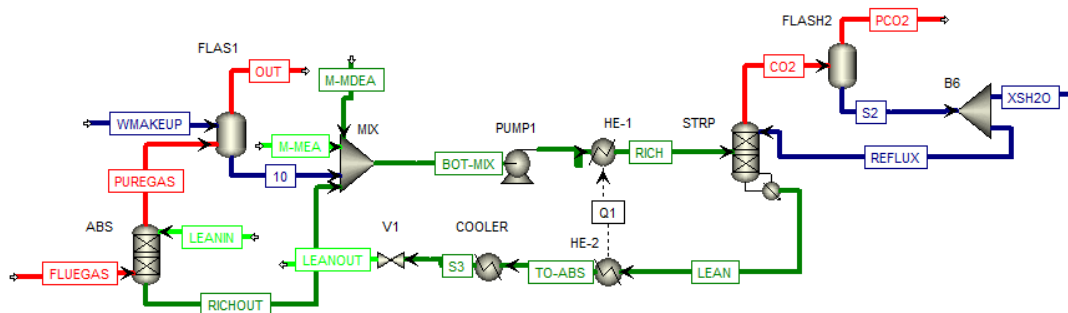
6.2.1 Configuración conceptual del proceso de MEA+MDEA

El proceso de absorción química con MEA+MDEA se llevó a cabo adaptando el esquema de procesamiento usando solo MEA, dado que en la literatura científica solo se reportan pruebas de planta piloto con “fluegas” pequeños. Idem et al.(Idem et al., 2005)

El diagrama de proceso se muestra en la figura 8, donde se adicionó una corriente de reposición de MDEA.

Figura 8.

Diagrama de proceso para la absorción química de CO₂ con MEA+MDEA.



Nota: Tomado de Aspen plus V.12 ®

6.2.2 Estudio técnico

6.2.2.1 Simulación

Los componentes involucrados en la simulación son los mismos que el caso de la MEA añadiéndole MDEA y MDEAH+.

Las condiciones de operación para la mezcla de aminas fueron las mismas que se reportaron en la tabla 4; diferenciándose en la composición de amina y la carga que se evidencia en la tabla 1 en la metodología.

Similar al proceso de captura con MEA se tuvo en cuenta el modelo genérico “Rate-Based” para la simulación de ambas columnas, teniendo en cuenta cuatro reacciones en equilibrio y seis reacciones cinéticas mostradas en la tabla 11.

Equilibrio	$MEAH^+ + H_2O \leftrightarrow MEA + H_3O_+$
Equilibrio	$2H_2O \leftrightarrow H_3O_+ + OH^-$
Equilibrio	$HCO_3^- + H_2O \leftrightarrow CO_3^{2-} + H_3O_+$
Equilibrio	$MDEAH^+ + H_2O \leftrightarrow MDEA + H_3O_+$

Tabla 11.

Reacciones cinéticas mezcla de aminas.

Reacción	K	E[cal/mol]	Referencia
$CO_2 + OH^- \rightarrow HCO_3^-$	4,32E+13	13249	(Pinsent et al., 1956)
$HCO_3^- \rightarrow CO_2 + OH^-$	2,38E+17	29451	
$MEA + CO_2 + H_2O \rightarrow MEACOO^- + H_3O_+$	9,77E+10	9855,8	(Hikita et al., 1977)
$MEACOO^- + H_3O_+ \rightarrow MEA + CO_2 + H_2O$	2,80E+20	17230	
$MDEA + CO_2 + H_2O \rightarrow MDEAH^+ + HCO_3^-$	2,21E+08	7432	(Ramachandran et al., 2006)
$MDEAH^+ + HCO_3^- \rightarrow MDEA + CO_2 + H_2O$	8,89E+11	15334	

6.2.2.2 Validación.

El presente trabajo es una propuesta de un esquema de captura de CO₂ usando mezcla de aminas MEA y MDEA a escala planta piloto, puesto que la literatura científica no reporta pruebas a escala planta piloto. La validación del proceso se hizo considerando lo mencionado por (Aroonwilas & Veawab, 2004) e (Aroonwilas & Veawab, 2004b; Idem et al., 2005), quienes afirman que la mezcla de aminas consume menos calor durante su regeneración que las aminas individuales y, sin embargo, proporcionan un porcentaje de absorción satisfactorio. Los datos del caso de estudio se reportan en las tablas 12 y 13; y a su vez las figuras 9 y 10 que evidencian las tendencias.

Tabla 12.

Caso de estudio para el porcentaje de absorción.

molCO₂/molMEZCLA	0,11	0,15	0,19	0,2	0,21
Concentración molar MDEA			% Absorción		
0,02246	95,1	90,33	81,26	78,47	77,22
0,03369	91,62	83,92	73,08	70,1	67,06
0,04492	85,39	75,37	63,64	60,58	57,5
0,05615	76,48	65,18	53,17	50,19	47,26
0,06738	65,41	53,64	44,36	39,87	37,19

Tabla 13

Caso de estudio para el calor en el reboiler.

molCO₂/molMEZCLA	0,11	0,15	0,19	0,2	0,21
Concentración molar MDEA			Reboiler duty		
0,02246	90008,2	89178,1	67560,9	59961	52879,65
0,03369	89391,7	79940,4	54313,1	49160,4	46910,4
0,04492	81341,1	64669,2	45514,7	41755,3	40096,1
0,05615	80494,9	48345,7	43004,2	35869,4	34934,9

0,06738

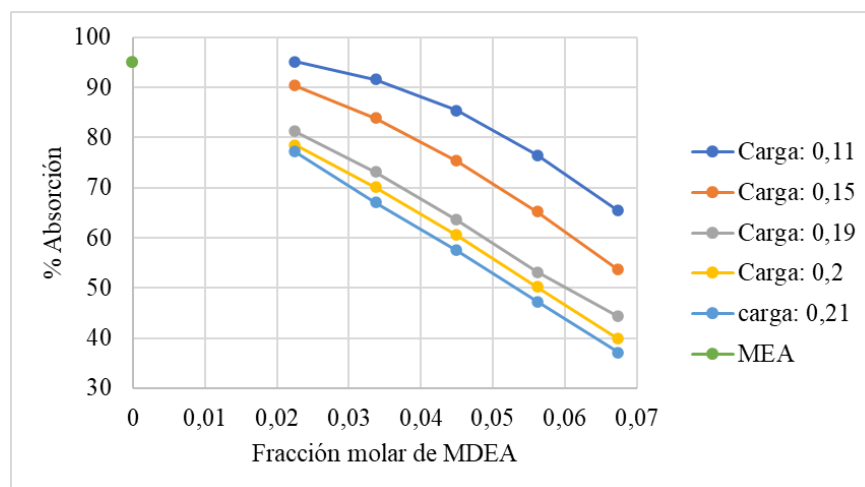
56428,8

40902,9

31981,1

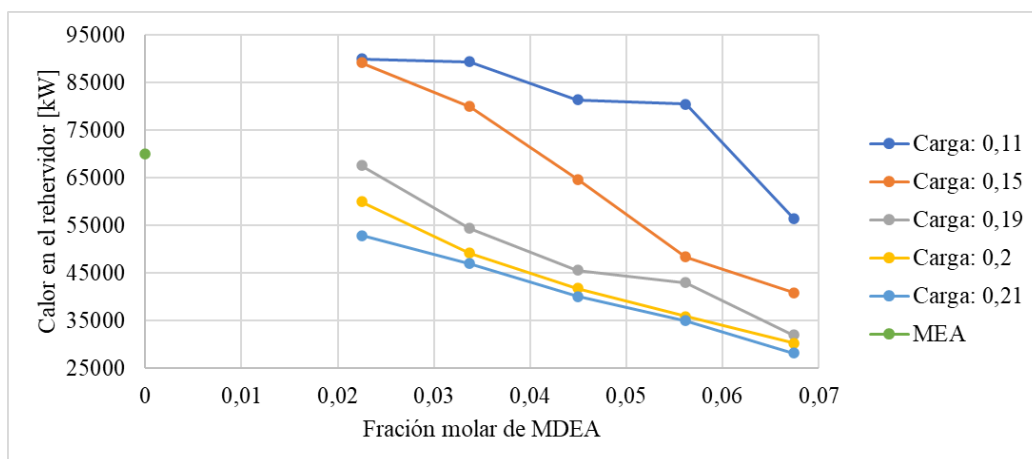
30294,3

28157,6

Figura 9.*Grafica composición MDEA vs porcentaje de absorción.*

La figura 10 muestra como a medida que la fracción molar de MDEA aumenta el porcentaje de absorción disminuye esto debido a que la MDEA reacciona lentamente con el CO_2 , también se evidencia que a medida que las moles de CO_2 /moles de mezcla de aminas aumenta el porcentaje de absorción disminuye que según (Idem et al., 2005) se debe a la estabilidad química del disolvente.

Figura 10.*Grafica composición MDEA vs calor en el rehervidor.*



La figura 10 muestra el efecto de la fracción molar de la MDEA en el calor del rehervidor; en el que a medida que la concentración de MDEA aumenta, el calor en el rehervidor disminuye, demostrando que la MDEA necesita menor calor para su regeneración y con respecto a las moles de CO_2 /moles de mezcla de aminas se observa que a cargas pequeñas la necesidad de calor para la regeneración es mayor que usando únicamente como solvente MEA.

El foco para la selección de las condiciones ideales de operación para el caso de la mezcla de aminas fue obtener una intensidad de carbono similar que con el solvente MEA, por consiguiente, se analizó la variación de este índice respecto a la composición y carga. En la tabla 14 se contempla este proceso teniendo en cuenta que los espacios en blanco son aquellos en los que la simulación no convergió. La celda resaltada en amarillo corresponde a la intensidad de carbono para la mezcla de MEA+MDEA que es más cercana a la calculada únicamente con MEA.

Tabla 14

Caso de estudio para la intensidad de carbono.

mol CO_2 /mol MEZCLA	0,11	0,15	0,19	0,2	0,21
Concentración molar MDEA	Intensidad de carbono				
0,02246	0,84	0,74	0,59	0,55	-
0,03369	0,8	0,69	0,53	0,51	0,5

0,04492	0,74	0,61	0,51	0,5	0,5
0,05615	0,76	0,54	0,51	0,51	0,51
0,06738	0,63	0,53	-	0,54	0,55

6.2.3 Estudio económico MEA+MDEA

La composición de 70% MEA y 30% MDEA con una carga de 0,19 fue la que se acercó al valor de intensidad de carbono de solo la MEA (0,52) y fue la que menos generó pérdidas en la captura con respecto a los otros casos planteados; que además era la que representaba una reducción significativa en el calor del rehervidor (54313,1kW) de 22,4%; no obstante, el porcentaje de absorción (73,98%) también disminuye en un 22,4%, como consecuencia de añadir MDEA al proceso, reportados en la tabla 12 y 13.

6.2.3.1 Costos capitales (CaPex)

Se plantearon todos los costos de los equipos teniendo en cuenta las mismas consideraciones de diseño, factores y tipo de material utilizados en el caso de la MEA, definidos detalladamente en el [apéndice G](#).

Se contempló un incremento del 2,44% en la torre de absorción respecto a la MEA, esto debido a la poca afinidad que tiene la MDEA con el dióxido de carbono en el proceso de absorción, ocasionando que cambien los requerimientos en el funcionamiento del equipo dando como resultado un aumento en los costos capitales en el absorbedor.

6.2.3.2. Costos operativos (OpEx)

El consumo energético reportado en el rehervidor ha ocasionado que los costos involucrados en su funcionamiento representen entre el 83-85% de los OpEx; por lo tanto, una alternativa de validación de la mezcla de aminas fue la disminución de estos costos ya que la presencia de la MDEA favorece la desorción en todo el proceso de regeneración.

Tabla 15.*Costos operacionales*

COSTO	VALOR (Millones de dolares/año)
Agua de enfriamiento	0,10
Vapor de media	7,25
Consumo de electricidad	0,02
Consumo de MEA	0,78
Consumo de MDEA	0,53
Mano de obra	0,08
OPEX	8,23

Se observó en la tabla 15 que el costo involucrado en el consumo de vapor de media generado en el rehervidor correspondió a un 85% de los costos operativos, lo que representa una diferencia porcentual significativa del 22,4% respecto al costo de vapor de media de la MEA el cual fue el foco principal de los OpEx. El resto de los costos operacionales implementados se encuentran explícitos en el apéndice A7.

6.2.3.3 Costo de captura y otros índices.

Una vez obtenidos los CaPex y OpEx se calculan los otros indicadores económicos implicados en el costo de captura.

Tabla 16.*índices económicos.*

Indicador	UNIDAD	MEA	MEA+MDEA	% de diferencia
Requerimiento energético	GJ/t CO ₂	4,33	4,49	+3,69
CAPEX	MUSD/y	12,77	13,21	+3,44
OPEX	MUSD/y	11,03	8,23	-25,38
AIC	MUSD/y	2,60	2,70	+3,84
TAC	MUSD/y	13,63	10,93	-19,81
Costo de captura	Dólar/ t CO ₂	29,31	30,75	+4,91

Se puede evidenciar la tabla 16 que a pesar de que los costos operativos de la mezcla de aminas son inferiores de manera significativa en un 25,38% con respecto al resto de costos; aun así, la MEA tiene un mejor costo de captura; eso es debido a que el porcentaje de absorción de la MEA es superior al de la mezcla de aminas lo que ocasionó que hubiera más flujo de CO₂ capturado, esto se vio reflejado en el favorecimiento del costo de captura y en el requerimiento energético por tonelada de CO₂.

6.2.4 Estudio ambiental

Se realizó un análisis respecto a las emisiones generadas en la mezcla de aminas; detalladas de manera explícita en el apéndice H, donde se evidenció que la variable principal es el flujo de dióxido de carbono generado en el rehervidor, esto está principalmente relacionado con la gran cantidad de consumo energético y el requerimiento de vapor de media en el mismo.

Tabla 17.

Emisiones totales

EMISIONES	Valor (Kg/h)
Emisiones en el rehervidor	204111,0
Emisiones en el enfriador	168,8
Emisiones por electricidad	137,2
Emisiones por consumo de MEA	1968,0
Emisiones por consumo de MDEA	197,8
Emisiones totales	267114,0

Se observó en la tabla 17 que el resto de las emisiones resultantes fueron poco significativas en un 1.2% en contraste a las producidas en el rehervidor (98,8%). Se contempló una variación porcentual del 45.6% con respecto a las emisiones en el consumo de MEA esto debido a que disminuyó su composición en la corriente principal de gas de efluentes.

Una vez calculadas todas las emisiones involucradas en la planta, se definieron el neto de las emisiones con respecto al flujo de CO₂ capturado y se representó en la tabla 16 un resumen del análisis económico y ambiental junto con todas las variables que afectaron el proceso.

Tabla 15.

CO₂ evitado e intensidad de carbono.

INDICADOR	UNIDAD	MEA	MEA+MDEA	% de diferencia
CO ₂ capturado	Mt CO ₂ /año	0,51	0,39	23,53
% de absorción	%	95	73,08	23,07
Emisiones totales	Mt CO ₂ /año	0,27	0,21	22,22
Emisiones evitadas	Mt CO ₂ /año	0,24	0,18	25
CO ₂ evitado	USD/t CO ₂	61,61	65,54	6,37
Intensidad de carbono	Emisiones totales/CO ₂ capturado	0,52	0,53	1,92

La tabla 18 muestra como el porcentaje de absorción afecta el flujo de CO₂ capturado, esto se ve reflejado mediante los indicadores ambientales; ya que, a pesar de que el caso de la mezcla de aminas (MEA+MDEA) dio resultados favorables respecto a las emisiones evitadas involucradas en la planta de hasta un 25% hubo mejor viabilidad en el costo del CO₂ evitado y la intensidad de carbono para el caso de la MEA.

A pesar de que para este diseño de proceso el caso con más viabilidad ambiental fue la MEA, ambos estudios reportaron resultados favorables en todos los indicadores evaluativos respecto a los rangos mencionados anteriormente. (Kazemi et al., 2016).

6.3 Casos de estudio de diferentes concentraciones de CO₂ en “fluegas”.

Se realizó un análisis de sensibilidad para calcular los tres indicadores utilizados en el estudio (costo de captura, CO₂ evitado e intensidad de carbono) usando como variable la

composición de dióxido de carbono de “fluegas” en composiciones representativas de la industria de la refinación desde 7,8 hasta 16 % mol presentadas en la tabla 19.

Tabla 19.

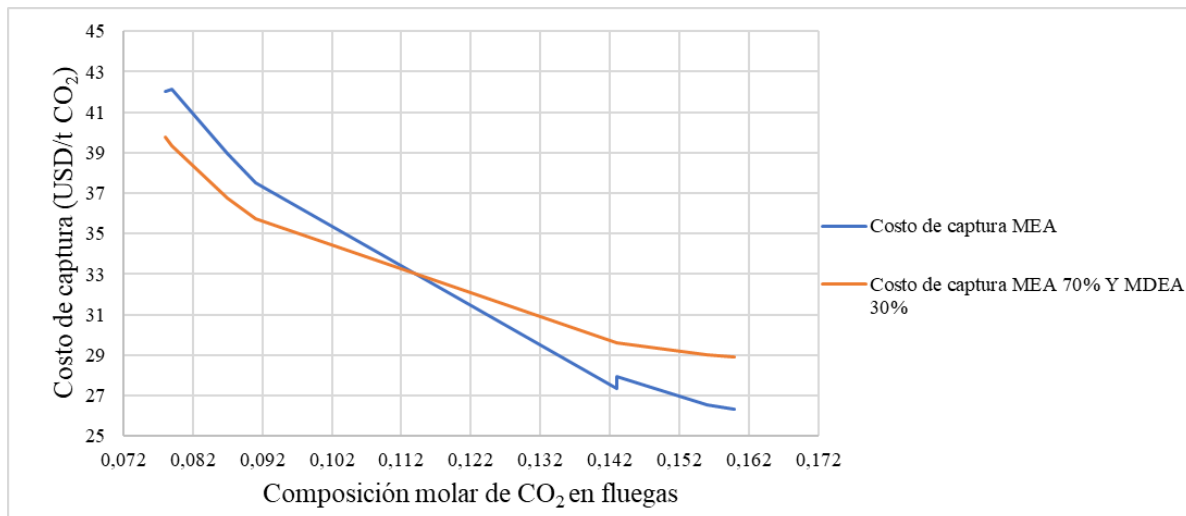
Caso de estudio de composición molar de “Fluegas”.

Composición “Fluegas”	Unidades	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6	Caso 7	Caso 8
N ₂	% mol	79,4	78,2	77	74,9	71,7	73,2	70,7	68,4
CO ₂	% mol	7,8	7,9	8,7	9,1	14,3	14,3	15,6	16
O ₂	% mol	2,4	2,2	2,7	2,5	3,4	3,9	4,3	3,8
H ₂ O	% mol	10,4	11,7	11,6	13,5	10,6	8,6	9,4	11,8

Se analizó el costo de captura respecto a la variación que hay entre cada caso de la composición de dióxido de carbono y se observó la tendencia resultante.

Figura 11.

Costo de captura en los casos de estudio

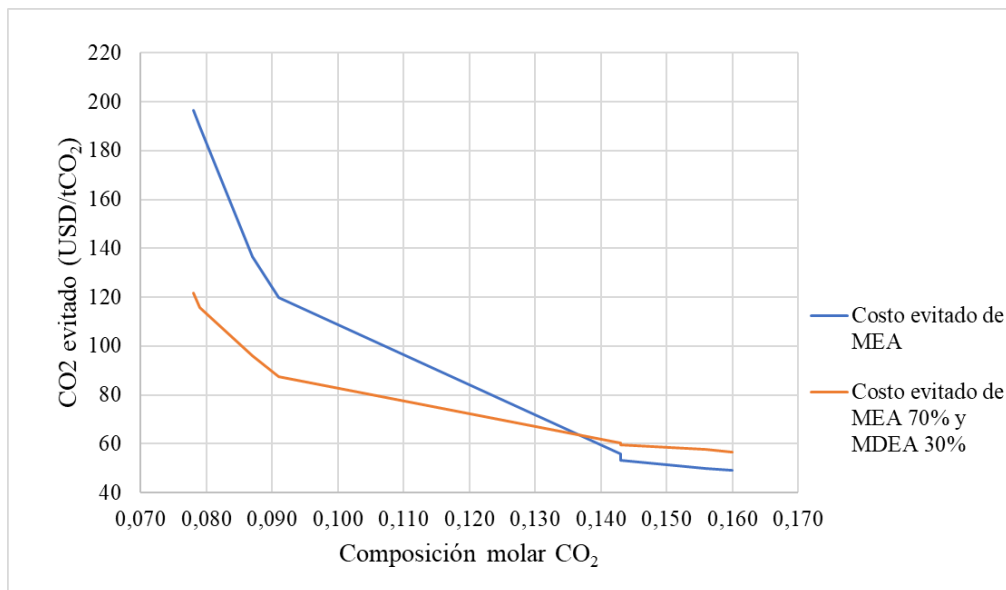


Teniendo en cuenta que la composición molar inicial de “fluegas” que se usó para el análisis económico y ambiental realizado en incisos anteriores fue de 0,1257, el cual arrojó resultados más favorables para el caso de la MEA, se evaluó la viabilidad de ambos a medida que iba variando la composición de dióxido de carbono inicialmente en el costo de captura.

Se evidenció según la figura 12 que hay un punto de inflexión en el cual se cruzan ambas funciones que corresponden a una composición de dióxido de carbono de 0,1066, antes de esta concentración el costo de captura es considerablemente mejor para la mezcla de aminas y para composiciones superiores a 0,1066 hay más viabilidad para el caso de la MEA.

Figura 12.

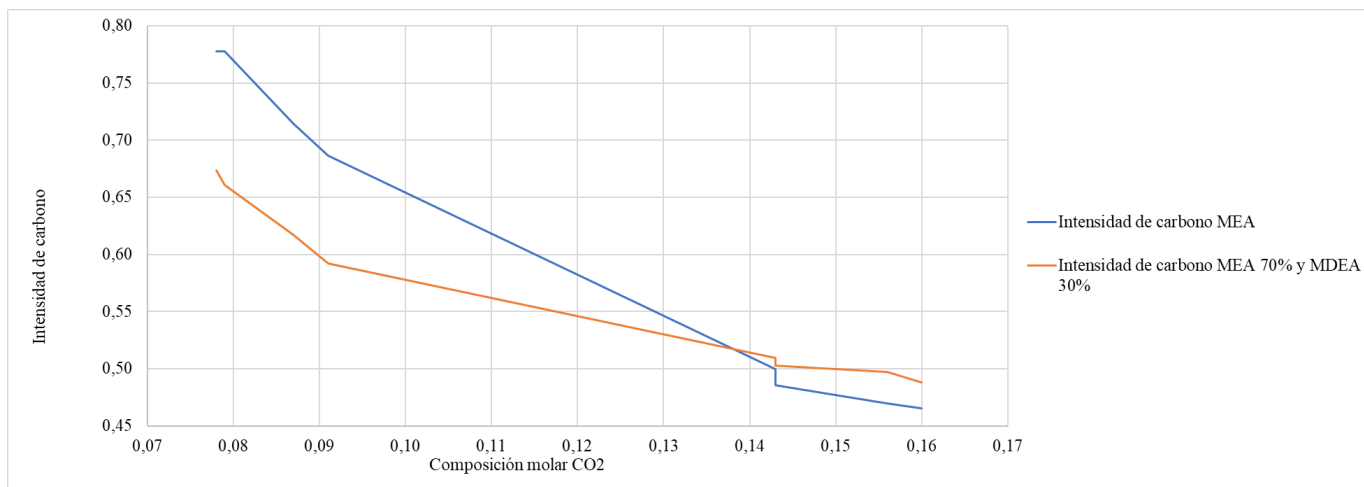
Casos de estudio de CO₂ evitado



Al igual que la tendencia observada en el costo de captura se analizó un comportamiento similar para el CO₂ evitado de dióxido de carbono, a excepción que el punto de inflexión es una composición molar de CO₂ ligeramente elevada que corresponde a 0,1357; antes de este valor hay más viabilidad tanto económica como ambiental para el caso de la mezcla de aminas (MEA+MDEA) y a partir de una composición de 0,0858 el CO₂ evitado supera los 150 USD/tCO₂ en el caso de la MEA volviéndose inadecuado a partir desde punto, mientras que para composiciones mayores a 0,1357 fracción molar se contempló una mayor rentabilidad para el caso de la MEA.

Figura 13.

Casos de estudio intensidad de carbono



Para este indicador la intensidad de carbono fue inferior a 1 para todos los casos; por lo tanto, según la figura 13 hay viabilidad ambiental en todas las concentraciones; sin embargo, el criterio evaluativo fue enfocado en cual tiene un menor índice y esto a partir de composiciones inferiores al punto de inflexión de 0,1384 fracción molar que corresponde a la mezcla de aminas mientras que después del mismo se evidencia que es mejor para el caso de la MEA.

7 Conclusiones.

Se logra simular el caso base de una planta piloto para captura de CO₂ de un gas efluente de una planta de generación de energía eléctrica.

El modelo Rate-Based mediante la cinética de las reacciones y el modelado de propiedades de transporte que incorpora correlaciones de transferencia de calor y masa, permite calcular una aproximación real del porcentaje de captura de CO₂ comparado con el modelo en equilibrio.

Se sintonizaron los perfiles de temperatura para el absorbedor y el desorbedor obteniendo errores menores al 10% con respecto a los datos de planta piloto.

Se estimó para el caso de la MEA, un costo de captura ($29,31 \frac{USD}{t CO_2}$), el cual está dentro de los rangos establecidos por la literatura ($20-132 \frac{USD}{t CO_2}$). El caso de referencia no tenía estudio económico, por lo que este análisis es un aporte de la investigación con respecto al estado del arte.

El costo evitado de CO₂ para el caso de la MEA fue de $61,60 \frac{USD}{t CO_2}$ con una intensidad de carbono de 0,524. De manera tal que el diseño de la planta aporta en la reducción de emisiones de CO₂.

A partir de la simulación que representó la planta piloto de la MEA se hizo un análisis variando la composición de mezcla de aminas (MEA+MDEA) y la relación molar de CO₂/moles de mezcla de aminas con el fin de encontrar las condiciones que permitieran obtener un índice de intensidad de carbono de cercano a 0,52, el cual corresponde a una composición del solvente de solo MEA. Se encontró una composición 70 – 30% para la MEA y MDEA respectivamente y un nivel de carga de 0,19. Nótese que este ejercicio podría formularse como un problema de optimización por medio de programación matemática, el cual requeriría metodologías avanzadas

como machine learning y programación no lineal. Sin embargo, los resultados encontrados en este análisis podrían considerarse como un primer paso en esa dirección. Recomendación.

Se analizó el impacto sobre el porcentaje de absorción y el calor en la regeneración; encontrando que para cargas mayores a 0,19, a medida que la composición de MDEA aumenta, el porcentaje de absorción disminuye.

La mezcla de aminas obtuvo una reducción en los OpEx del 25,38% con un costo de captura de $30,75 \frac{USD}{t CO_2}$; no obstante, hubo un aumento del 3,69% en comparación del costo de captura de la MEA.

En el análisis ambiental la mezcla de aminas obtuvo un CO₂ evitado del 6,37% por encima de la MEA, a pesar de ello, la MEA generó más emisiones que la mezcla de aminas.

Teniendo en cuenta los indicadores evaluados se concluyó de los ocho casos analizados que corrientes de entrada de gas de efluente “fluegas”, que contenían concentraciones diluidas de dióxido de carbono la mejor alternativa era la mezcla de MEA+MDEA y para composiciones superiores a 0,1357 la opción conveniente era la MEA. No obstante, hay que considerar que la mezcla de solventes tiene un porcentaje de captura menor que la MEA, para lo cual debe establecerse un equilibrio entre el desempeño de la mezcla de solventes y el requerimiento de CO₂ para posterior uso (e.g., productos bajos en carbono, inyección en campos de producción de crudo o almacenamiento geológico).

8. Recomendaciones

Dado que en esta investigación se realizó un diseño a escala de planta piloto para el proceso de absorción química con aminas, se recomienda analizar métodos de escalado a nivel de planta industrial, considerando la relación entre la altura y el diámetro de las torres, es decir si se varía la altura, el diámetro también debe variar, restringiendo que el porcentaje de inundación no pase del 80%.

Si el requerimiento de porcentaje de absorción es por encima del 90%, no es recomendable el proceso de captura de CO₂ por absorción química con aminas usando la mezcla MEA + MDEA.

El uso final del CO₂ capturado hacia otros productos como almacenamiento geológico o inyección para recobro mejorado de crudo, es un factor de decisión importante para determinar el porcentaje de captura de CO₂. De tal manera que, si el porcentaje de absorción no es una limitante, a concentraciones de dióxido de carbono diluidas o medias en el gas efluente, es recomendable usar como solvente mezcla de aminas, con porcentajes de captura del 73%. Si los requerimientos de captura son superiores al 90% se recomienda el uso de solvente basado en MEA.

Referencias Bibliográficas.

- Aroonwilas, A., & Veawab, A. (2004a). Characterization and Comparison of the CO₂ Absorption Performance into Single and Blended Alkanolamines in a Packed Column. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 43(9), 2228–2237. <https://doi.org/10.1021/IE0306067>
- Aroonwilas, A., & Veawab, A. (2004b). Characterization and Comparison of the CO₂ Absorption Performance into Single and Blended Alkanolamines in a Packed Column. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 43(9), 2228–2237. <https://doi.org/10.1021/IE0306067>
- Aspen Technology. (2014). *Rate-Based Model of the CO₂ Capture Process by MEA using Aspen Plus* (7.1; pp. 1–37).
- Chalmers, H., & Gibbins, J. (2007). Initial evaluation of the impact of post-combustion capture of carbon dioxide on supercritical pulverised coal power plant part load performance. *Fuel*, 86(14), 2109–2123. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2007.01.028>
- Dugas, R., Alix, P., Lemaire, E., Broutin, P., & Rochelle, G. (2009). Absorber model for CO₂ capture by monoethanolamine — application to CASTOR pilot results. *Energy Procedia*, 1(1), 103–107. <https://doi.org/10.1016/J.EGYPRO.2009.01.016>
- Freguia, S. (2002). *Modeling of CO₂ Removal from Flue Gases with Monoethanolamine Modeling of CO₂ Removal from Flue Gases with Monoethanolamine APPROVED BY SUPERVISING COMMITTEE* [The University of Texas at Austin]. [https://sites.utexas.edu/rochelle/files/2015/02/Freguia-2002-Modeling-of-CO₂-Removal-from-Flue-Gases-with-Monoethanolamine.pdf](https://sites.utexas.edu/rochelle/files/2015/02/Freguia-2002-Modeling-of-CO2-Removal-from-Flue-Gases-with-Monoethanolamine.pdf)
- Hasan, M. M. F., Baliban, R. C., Elia, J. A., & Floudas, C. A. (2012). Modeling, Simulation, and Optimization of Postcombustion CO₂ Capture for Variable Feed Concentration and Flow

- Rate. 2. Pressure Swing Adsorption and Vacuum Swing Adsorption Processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 51(48), 15665–15682. <https://doi.org/10.1021/IE301572N>
- Hikita, H., Asai, S., Ishikawa, H., & Honda, M. (1977). The kinetics of reactions of carbon dioxide with monoethanolamine, diethanolamine and triethanolamine by a rapid mixing method. *The Chemical Engineering Journal*, 13(1), 7–12. [https://doi.org/10.1016/0300-9467\(77\)80002-6](https://doi.org/10.1016/0300-9467(77)80002-6)
- Idem, R., Wilson, M., Tontiwachwuthikul, P., Chakma, A., Veawab, A., Aroonwilas, A., & Gelowitz, D. (2005). Pilot Plant Studies of the CO₂ Capture Performance of Aqueous MEA and Mixed MEA/MDEA Solvents at the University of Regina CO₂ Capture Technology Development Plant and the Boundary Dam CO₂ Capture Demonstration Plant. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45(8), 2414–2420. <https://doi.org/10.1021/IE050569E>
- IPCC. (2005). *Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC)*.
- Jilvero, H. (2014). *Ammonia as an Absorbent of Carbon Dioxide in Post-Combustion Capture-an Experimental, Technical and Economic Process Evaluation*. Chalmers University of Technology.
- Jordano, A. de T., Gomera Martínez, A., Aguilar Moreno, J. E., Guijarro Jiménez, C., Artúnez López, M., & Vaquero Abellán, M. (2016). *La huella de carbono de la Universidad de Córdoba*.
- Kazemi, A., Kazemi Jaujili, A., Mehrabani-Zeinabad, A., Hajian, Z., & Salehi, R. (2016). Influence of CO₂ Residual of Regenerated Amine on the Performance of Natural Gas Sweetening Processes Using Alkanolamine Solutions. *Energy and Fuels*, 30(5), 4263–4273. <https://doi.org/10.1021/ACS.ENERGYFUELS.6B00295>

- Lira Teco, J. E. (2016). Regeneración vía electroquímica de aminas utilizadas en el proceso de endulzamiento de gas amargo. In *CIDETEQ. CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO TECNOLÓGICO EN ELECTROQUÍMICA, S.C.*
- Marroig Martínez, G. (2015). *UNIDAD DE SEPARACIÓN DE GASES ÁCIDOS DE LA PLANTA GORGON LNG EN BARROW ISLAND (AUSTRALIA)*. ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS DE MINAS Y ENERGÍA.
- Moch, J. M., Xue, W., & Holdren, J. P. (2022). Carbon Capture, Utilization, and Storage: Technologies and Costs in the U.S. Context. *Environment and Natural Resources Program*, 1–14.
- Ondarse Álvarez, D. (2021, July 15). *Dióxido de Carbono - Concepto, usos, ciclo y cambio climático*. <https://concepto.de/dioxido-de-carbono-co2/>
- Pantelis, D. I., & Tsiourva, T. E. (2017). Corrosion of weldments. *Trends in Oil and Gas Corrosion Research and Technologies: Production and Transmission*, 249–270. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-101105-8.00010-3>
- Pinsent, B. R. W., Pearson, L., & Roughton, F. J. W. (1956). The kinetics of combination of carbon dioxide with hydroxide ions. *Transactions of the Faraday Society*, 52(0), 1512–1520. <https://doi.org/10.1039/TF9565201512>
- Ramachandran, N., Aboudheir, A., Idem, R., & Tontiwachwuthikul, P. (2006). Kinetics of the Absorption of CO₂ into Mixed Aqueous Loaded Solutions of Monoethanolamine and Methyl-diethanolamine. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45(8), 2608–2616. <https://doi.org/10.1021/IE0505716>

REPSOL. (n.d.). *Indicador de intensidad del carbono*. Retrieved January 24, 2023, from <https://www.repsol.com/content/dam/repsol-corporate/es/sostenibilidad/indicador-intensidad-carbono.pdf>

Roussanaly, S. (2019). Calculating CO₂ avoidance costs of Carbon Capture and Storage from industry. *Https://Doi.Org/10.1080/17583004.2018.1553435*, 10(1), 105–112. <https://doi.org/10.1080/17583004.2018.1553435>

Seider, W. D., Lewin, D. R., Seader, J. D., Widagdo, S., Gani, R., & Ming Ng Ka. (2016). *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation* (4th ed.). Willey. <https://www.wiley.com/en-us/Product+and+Process+Design+Principles%3A+Synthesis%2C+Analysis+and+Evaluatio+n%2C+4th+Edition-p-9781119282631>

Sou, W. S., Goh, T., Lee, X. N., Ng, S. H., & Chai, K. H. (2022). Reducing the carbon intensity of international shipping – The impact of energy efficiency measures. *Energy Policy*, 170, 113239. <https://doi.org/10.1016/J.ENPOL.2022.113239>

Sreedhar, I., Nahar, T., Venugopal, A., & Srinivas, B. (2017). Carbon capture by absorption – Path covered and ahead. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 76, 1080–1107. <https://doi.org/10.1016/J.RSER.2017.03.109>

The National Institute for Occupational Safety and Health, O. S. and, & Ammonia, H. G. for. (1992). *No Title*.

Wang, M., Lawal, A., Stephenson, P., Sidders, J., & Ramshaw, C. (2011). Post-combustion CO₂ capture with chemical absorption: A state-of-the-art review. *Chemical Engineering Research and Design*, 89(9), 1609–1624. <https://doi.org/10.1016/J.CHERD.2010.11.005>

Zhang, Y., Chen, H., Chen, C.-C., Plaza, J. M., Dugas, R., & Rochelle, G. T. (2009). *Rate-Based Process Modeling Study of CO₂ Capture with Aqueous Monoethanolamine Solution*.

<https://doi.org/10.1021/IE900068K>

Apéndices

Apéndice A. Cálculo del CAPEX para cada unidad de proceso.

Una vez calculado el costo final C_P de cada unidad de proceso es necesario traer ese valor al año presente y para ello se debe tener en cuenta dos correlaciones de tiempo, la primera correspondiente al CEPCI reportado por el (Seider et al., 2016) respecto al año de publicación del libro que fue de 567 y la segunda es el CEPCI del 2022 que es 815.7; por lo tanto, el coeficiente de estos multiplicado a cada costo genera el C_P actual.

Bomba. Se escogió una bomba centrífuga de tipo radial, hecha en acero inoxidable que tiene un factor de material (F_M) de 2.0 la cual opera con un caudal de 4332,98 gpm correspondiente a un factor de tamaño (F_T) de 2.0.

Para el cálculo del costo base f.o.b (C_B) y el costo final (C_P), fue necesario hacer cálculos de dimensionamiento, con el fin de determinar el factor de tamaño S que se encuentra descrito por la siguiente ecuación:

$$S=Q(H)^{0.5} \quad (\text{Ec.1})$$

Donde Q =caudal de trabajo, (gpm). y H = Cabeza de la bomba, (ft).

De tal manera que para dimensionar H se utilizó:

$$H = \frac{P * 2.31}{SG} \quad (\text{Ec.2})$$

Donde P=presión de diseño y SG=gravedad específica.

Una vez dimensionado todo el equipo y calculado la correlación S, se utiliza la ecuación de costo base f.o.b:

$$C_B = \exp (12.1656 - 1.1448[\ln(S)] + 0.0862[\ln(S)]^2) \quad (\text{Ec.3})$$

Ya definidos el resto de variables relacionados con factor de material y de tamaño, se calcula el costo final C_P .

$$C_P = F_T F_M C_B \quad (\text{Ec.4})$$

Válvulas. Para los costos de la válvula, se calcula el factor de dimensionamiento S con la misma metodología de la bomba y se define el costo total de la siguiente manera:

$$C_p = 370(S)^{0.54} \quad (\text{Ec.5})$$

Absorbedor y desorbedor. Para el cálculo del costo de estas dos torres se empleó la misma metodología; ambas están hechas de acero al carbono, material que está definido con las siguientes propiedades implementadas en las diferentes correlaciones:

Tabla 1.*Propiedades del acero al carbono.*

Propiedad	Valor
F_M	1.0
S (Tensión máxima permisible, lb/in ²)	15000
ρ (Densidad del material, lb/ in ³)	0.284

Nota: Tomado del libro (Seider et al., 2016)

Ambos equipos se consideraron como torres y recipientes a presión (“pressure vessels”), cuyo f.o.b está representado como C_V que se encuentra definido de la siguiente manera:

$$C_V = \exp (10.5449 - 0.4672[\ln(W)] + 0.05482[\ln(W)]^2) \quad (\text{Ec.6})$$

Donde el peso W (lb), está definido así:

$$W = \pi(D + t_s)(L + 0.8D) t_s \rho \quad (\text{Ec.7})$$

Donde D y L corresponde al diámetro y longitud de la torre en pulgadas, ρ es la densidad del material en libra por pulga al cubo y t_s es el espesor de la unidad.

Ya que ambas torres operaron a bajas presiones se utilizó el mismo método de cálculo para el espesor t_s de la unidad:

$$t_v = t_w + t_p \quad (\text{Ec.8})$$

Ya que ambos equipos operaron a presiones inferiores a 10 psig, fue necesario definir el espesor t_p mediante una correlación que está en función del diámetro de la torre; generando como resultado un $t_{p(\text{absorbedor})} = 0.8125$ y $t_{p(\text{desorbedor})} = 0.625$. t_w se define como el espesor para resistir la carga del viento en pulgadas, de la siguiente manera:

$$t_w = \frac{0.22(D + 18)L^2}{SD^2} \quad (\text{Ec.9})$$

Donde S, corresponde a la tensión máxima permisible en libra por pulgada cuadrada del material. Una vez definido este espesor se calcula el t_s en pulgadas:

$$t_s = \frac{t_p + t_v}{2} \quad (\text{Ec.10})$$

Una vez calculado el C_V , se definen el costo adicional para plataformas y escaleras C_{PL} :

$$C_{PL} = 341(D)^{0.63316}(L)^{0.80161} \quad (\text{Ec.11})$$

Donde el diámetro y la longitud deben estar en pies y se calcula un costo final por torre:

$$C_P = F_M C_V + C_{PL} + V_P C_{PK} + C_{DR} \quad (\text{Ec.12})$$

Donde V_P corresponde al volumen de la torre en ft^3 , C_{PK} es el costo instalado de empaque que corresponde a 80 \$/ ft^3 y C_{DR} que se define como el área de la torre por el costo instalado de los distribuidores cuyo valor es 140 \$/ ft^2 .

Destilador Flash. Los dos destiladores flash se tomaron como “pressure vessel”; por lo tanto, el cálculo de sus costos es muy similar a las torres de absorción y desorción excluyendo los costos de empaque y de distribuidores.

$$C_P = F_M C_V + C_{PL} \quad (\text{Ec.13})$$

Donde F_M corresponde a 1.0 debido a que se utilizó acero al carbono, C_V se define como “vertical vessels” mediante la siguiente ecuación:

$$C_V = \exp(7.1390 + 0.18255[\ln(W)] + 0.02297[\ln(W)]^2) \quad (\text{Ec.14})$$

W se calcula con la misma metodología implementada en las torres y el costo adicional por plataformas y escaleras se encuentra definido así:

$$C_{PL} = 410(D)^{0.73960}(L)^{0.70684} \quad (\text{Ec.15})$$

Donde D, L están en pies y deben ser dimensionados mediante la siguiente correlación:

$$L=3D \quad (\text{Ec.16})$$

Intercambiador de calor. Para los intercambiadores se calculó un costo f.o.b, C_B diferente para cada uno de los tres equipos usados en la planta:

Tabla 2.

Propiedades del acero al carbono.

Tipo de intercambiador	Ecuación, C_B .
Tubo y carcasa	$C_{B(\text{Cabeza flotante})} = \exp(12.0310 + 0.8709[\ln(A)] + 0.09005[\ln(A)]^2)$
Rehervidor del strip.	$C_{B(\text{hervidor})} = \exp(11.4185 + 0.9228[\ln(A)] + 0.09861[\ln(A)]^2)$
Cooler.	$C_{B(\text{tubo en U})} = \exp(11.4185 + 0.9228[\ln(A)] + 0.09861[\ln(A)]^2)$

Nota: Tomado del libro (Seider et al., 2016)

Donde A corresponde al área de transferencia en pies cuadrados, para el cálculo de esta variable se tuvo en cuenta un coeficiente de transferencia de calor de 140 BTU/ft²hrF.

Para el cálculo del factor de material de los intercambiadores, se utilizó la siguiente ecuación:

$$F_M = a + \left(\frac{A}{100}\right)^b \quad (\text{Ec.18})$$

Donde el área de transferencia está en pies cuadrados y se utilizaron los siguientes coeficientes de a y b:

Tabla 3.

Correlaciones del factor de material.

Intercambiador	Tipo de material	a	b
Intercambiador de tubo y carcaza, Rehervidor.	Acero al carbono/ acero inoxidable.	1.75	0.13
Cooler	Acero inoxidable/ Acero inoxidable.	2.7	0.07

Nota: Tomado del libro (Seider et al., 2016)

El costo total para el intercambiador de tubo y carcaza quedo expresado así:

$$C_P = F_L F_M C_B \quad (\text{Ec.19})$$

Donde F_L corresponde al factor de longitud, que en este caso es de 1.0. No se tuvo en cuenta ningún factor por presión para ningún intercambiador debido a que esta correlación es para presiones superiores a 100 psig.

El costo total para el cooler y el rehervidor es muy similar pero no se tiene en cuenta el factor por longitud ya que esta correlación se aplica solamente para intercambiadores de tubo y carcaza.

$$C_P = F_M C_B \quad (\text{Ec.20})$$

Costos de inversión (AIC). Una vez obtenidos los costos totales se calculan los CAPEX multiplicando el costo total de los equipos con un factor de ingeniería y contingencia correspondiente a 1.5982.

Ya obtenidos los CAPEX se calculan los costos de inversión AIC que están planteados de la siguiente manera:

$$AIC = \phi TPC + AMC \quad (\text{Ec.21})$$

Donde TPC es el costo de los equipos instalados correspondientes a 0.05 y AMC representa el costo anual de mantenimiento que es 0.154, aplicado estos coeficientes, la ecuación quedaría de la siguiente manera:

$$AIC = (0.05 + 0.154) * CAPEX \quad (\text{Ec.22})$$

Teniendo en cuenta que:

$$TPC = \gamma * BEC \quad (\text{Ec.23})$$

$$BEC = \beta * PEC \quad (\text{Ec.24})$$

Donde $\gamma = 1$, por lo tanto, TPC=BEC

Apéndice B. Cálculo de los costos operativos

Costos operativos

Agua de enfriamiento.

Para el determinar el costo energético del cooler junto con el fluido de trabajo correspondiente al agua de enfriamiento se determinó una correlación de costo definida de la siguiente manera:

$$\text{Costo de consumo energetico (CCU)} = \frac{0.027}{C_P(T_F - T_o)} \quad (\text{Ec.25})$$

Una vez calculado el costo de consumo energético se define el costo por el agua de enfriamiento en el enfriador.

$$\text{Costo de agua de enfriamiento} = \text{CCU} * \text{Calor} * \text{top} \quad (\text{Ec.26})$$

Vapor de calentamiento.

Determinando el costo de vapor de media es necesario tener la correlación de costo en \$/t del vapor de media que ya se encuentra definido en la tabla de correlaciones de costos operativos.

$$\text{Costo de vapor de media} = \frac{Q_{reb} * \text{top} * \text{costo de vapor de media}}{\text{calor latente del vapor de media}} \quad (\text{Ec.27})$$

Costos por electricidad.

Se calculan los costos por consumo eléctricos para aquellas unidades de operación que requieran trabajo para su funcionamiento, que para esta planta corresponde netamente a la bomba de la siguiente manera:

$$\text{Costo por electricidad} = \text{CE} * \text{Trabajo neto} * \text{top} \quad (\text{Ec.28})$$

Donde el trabajo neto esta e KW y CE se encuentra en la tabla de correlaciones de costos operativos.

Costos MEA

Se determina el costo de la MEA, teniendo en cuenta la tabla de correlaciones de costos operativos.

$$\text{Costo MEA} = \frac{\text{Factor de makeup de MEA} * \text{Costo MEA} * \text{FM de CO2 evitado}}{t_{op}} \quad (\text{Ec.29})$$

Donde el factor de makeup hace referencia a la relación MEA por tonelada de CO₂ capturado, correspondiente a 2.1, el costo de la MEA USD/Kg MEA es 1.5 y FM es el flujo masico del dióxido de carbono evitado.

Costos MDEA.

Se determina el costo de la MDEA, de la misma manera que el costo operativo de la MEA:

$$\text{Costo MEA} = \frac{\text{Factor de makeup de MDEA} * \text{Costo MDEA} * \text{FM de CO}_2 \text{ evitado}}{t_{op}} \quad (\text{Ec.30})$$

Donde el factor de makeup hace referencia a la relación MDEA por tonelada de CO₂ capturado, correspondiente a 1.62 y el costo de la MDEA USD/Kg MDEA 3.09.

Costos de Mano de obra.

Costos de la mano de obra (COL). Este costo se calculó teniendo en cuenta el número de equipos que hay en la planta y con las correlaciones correspondientes de cada uno, se determinó la cantidad de operarios contratados con un tiempo de operación al día de 24h.

Tabla 4.

Número de operarios.

Equipos			
Equipos	Numero Eq	Factor Und	Factor Total
Torre	2	0,35	0,7
Mezclador	2	0	0
Tanques	2	0	0
Bombas	2	0	0
Intercambiador	3	0,1	0,3

Total	11	1
Operarios generales	3,65	
por año		
No. de operarios	3,65	4
totales en planta		

Una vez determinados el número de operarios en la planta se determina el salario y otros costos correspondientes a el talento humano requerido; como esta planta es para una empresa ya constituida los gastos de gerente, subgerente, abogado y contador se omiten.

Tabla 5.

Costos por mano de obra

Personal de trabajo											
Cargo	No. personas	Salario base por persona [COP]	Salario base [COP]	Auxilios y otros [COP]	Salario mensual [COP]	Salario total anual [COP]	Salario total [US]	Salario total	Salario total	Salario total	Salario total
Encargados del aseo	3	\$ 1.000.000	\$ 3.000.000	\$ 1.819.284	\$ 4.819.284	\$ 57.831.411	\$ 13.869				
Celadores	4	\$ 1.000.000	\$ 4.000.000	\$ 2.425.712	\$ 6.425.712	\$ 77.108.548	\$ 18.492				
Laboratorista	1	\$ 3.652.801	\$ 3.652.801	\$ 1.711.532	\$ 5.364.333	\$ 64.371.997	\$ 15.437				
Secretaria	1	\$ 1.000.000	\$ 1.000.000	\$ 606.428	\$ 1.606.428	\$ 19.277.137	\$ 4.623				
Operarios	4	\$ 1.538.527	\$ 6.154.108	\$ 3.670.606	\$ 9.824.714	\$ 117.896.568	\$ 28.273				
Total	13	\$ 9.521.199	\$11.652.801	\$6.562.957	\$ 18.215.758	\$ 336.485.660	\$ 80.693				

Dentro de los costos por mano de obra se contempla el salario del personal involucrado junto con las obligaciones totales de las prestaciones por ley.

En la siguiente tabla están representados todos los cálculos operativos junto con un total de sus OPEX

Costo total Anualizado

Una vez calculado el OPEX se calcula el costo total anualizado de la siguiente manera:

$$TAC = AIC + OPEX \quad (\text{Ec.31})$$

Costo de captura.

Estos costos se calculan con el fin de estimar el costo de captura de dióxido de carbono, que este dado de la siguiente manera:

$$\text{Costo de captura} = \frac{TAC}{m_{CO_2} * t_{op}} \quad (\text{Ec.32})$$

Donde m_{CO_2} corresponde al flujo masico de dióxido de carbono evitado (Kg/h) y t_{op} son la cantidad de horas al año que opera la planta.

Apéndice C. Cálculo de emisiones, intensidad de carbono y CO2 evitado

La cuantificación de todas las emisiones generadas en la planta se hace mediante el cálculo de evitación de dióxido de carbono, “CO₂ avoidance” es un costo que indica la viabilidad de la planta respecto a todo su estudio ambiental definido de la siguiente manera:

$$\text{Costo de evitación de } CO_2 = \frac{TAC \text{ (Costo total anualizado)}}{\text{Cantidad de emisiones de } CO_2 \text{ evitadas}} \quad (\text{Ec.33})$$

La cantidad de emisiones de CO₂ evitadas se determina como el producto entre el flujo de dióxido de carbono evitado por el tiempo de operación de la planta en horas (Roussanaly, 2019).

Para realizar los cálculos correspondientes al flujo masico de CO₂ evitado se determinan las huellas de carbono involucradas en las diferentes emisiones involucradas en los costos operativos (OPEX (Jordano et al., 2016)

$$\text{Emisión de } CO_2 = \text{Actividad} * \text{Factor de emisión} \quad (\text{Ec.34})$$

- Se calcula la emisión de CO₂ generada por el cooler teniendo en cuenta como factor de emisión el fluido de trabajo del equipo correspondiente al agua de enfriamiento:

$$Emisión\ de\ CO_2 = 0.429 * Q_{cooler} \quad (Ec.35)$$

Donde el calor está en KW y el factor de emisión KJ/Kg.

- La emisión generada por el rehervidor se define de una manera muy similar, en este caso el factor de emisión está definido por el vapor de media.

$$Emisión\ de\ CO_2 = 0.00243 * Q_{reboiler} \quad (Ec.36)$$

- Entre las emisiones indirectas se encuentra el consumo de electricidad generado por aquellos equipos que consuman potencia (Jordano et al., 2016), su método de cálculo se mantiene solo que es necesario tener en cuenta la cantidad de tiempo en horas que van a estar operando las unidades de proceso involucradas en la planta. Se calcula el consumo energético en KW/año mediante el costo operativo y la correlación de costos CE de la siguiente manera:

$$Emisión\ de\ CO_2\ por\ consumo\ electrico = \frac{costo\ por\ electricidad}{CE} * \frac{0.7420}{8000} \quad (Ec.37)$$

Donde el costo por electricidad está en \$/año y CE en \$/KQ

- Para el cálculo de emisión de la MEA es necesario calcular el flujo masico de MEA requerido según la cantidad de dióxido de carbono extraído del proceso y multiplicado por su factor de emisión

$$Emisión\ de\ CO_2 = Factor\ de\ makeup\ de\ la\ MEA * Flujo\ masico\ de\ CO_2 * 3.44 \quad (Ec.38)$$

Donde el factor de makeup esta Kg MEA/ t CO₂ y el flujo masico de CO₂ en Kg/h.

Una vez calculadas las emisiones de las diferentes actividades involucradas en los costos operativos se suman todas:

Flujo de emisiones totales (Ec.39)

$$= \text{Emisión de CO}_2(\text{cooler}) + \text{Emisión de CO}_2(\text{reboiler}) \\ + \text{Emisión de CO}_2(\text{electricidad}) + \text{Emisión de CO}_2(\text{MEA})$$

Donde el flujo de emisiones totales está en Kg/h.

calcula el flujo másico del CO₂ evitado, así:

$$\text{CO}_2 \text{ evitado} = \text{CO}_2 \text{ extraído del proceso} - \text{flujo de emisiones totales.} \quad (\text{Ec.40})$$

Apéndice D. Cierre del reciclo mediante bloques calculadores.

El bloque calculador permite calcular la reposición de agua y de amina en las corrientes WMAKEUP, M-MEA y M-MDEA.

El primer paso es crear las variables como se muestra en la ilustración 1 y 2.

Ilustración 1.

Variables para la corriente de reposición de agua.

Variable	Information flow	Definition
H2OFLUEG	Import variable	Mole-Flow Stream=FLUEGAS Substream=MIXED Component=H2O Units=kmol/hr
H2OWMAKE	Export variable	Mole-Flow Stream=WMAKEUP Substream=MIXED Component=H2O Units=kmol/hr
H2OOUT	Import variable	Mole-Flow Stream=OUT Substream=MIXED Component=H2O Units=kmol/hr
H2OPCO2	Import variable	Mole-Flow Stream=PCO2 Substream=MIXED Component=H2O Units=kmol/hr
H2OXH2O	Import variable	Mole-Flow Stream=XSH2O Substream=MIXED Component=H2O Units=kmol/hr
*		

Nota: Tomado de Aspen plus V.12 ®

Ilustración 2.

Variables para la corriente de reposición de MEA.

Variable	Information flow	Definition
MMEA	Export variable	Mole-Flow Stream=M-MEA Substream=MIXED Component=MEA Units=kmol/hr
MEAOUT	Import variable	Mole-Flow Stream=OUT Substream=MIXED Component=MEA Units=kmol/hr
MEAPCO2	Import variable	Mole-Flow Stream=PCO2 Substream=MIXED Component=MEA Units=kmol/hr
MEAXH2O	Import variable	Mole-Flow Stream=XSH2O Substream=MIXED Component=MEA Units=kmol/hr
*		

Nota: Tomado de Aspen plus V.12 ®

Una vez creadas las variables se escribe el balance correspondiente para cada corriente en la pestaña de fortran, que se muestra en la tabla 6.

Tabla 6.

Balance para WMAKEP y M-MEA.

Corrientes	BALANCE
WMAKEUP	$H2OWMAKE = H2OOUT + H2OPCO2 + H2OXH2O - H2OFLUEG$
M-MEA	$MMEA = MEAOUT + MEAPCO2 + MEAXH2O$

Apéndice E. Resultados costos Capitales y operativos MEA.

En el presente apéndice se encuentra todos los costos individuales correspondientes a las tablas implementadas en la realización de los diagramas de torta y barras del análisis económico de la MEA.

Tabla 7.

Costos capitales equipos.

EQUIPO	MATERIAL	COSTO FINAL (CP) (USD)
Absorbedor	Acero al carbono	2,46E+06
Desorbedor		8,35E+05
Intercambiador de tubo y carcaza	Acero inoxidable/ acero al carbono	8,15E+05
Enfriador		5,18E+05
Rehervidor		2,40E+06
Bomba	Acero inoxidable	5,94E+04
Válvula		9,42E+02
Destiladores flash	Acero al carbono	9,04E+05

Tabla 8.*Costos operativos MEA*

COSTO	VALOR (Millones de dolares/año)
Agua de enfriamiento	0,12
Vapor de media	9,34
Consumo de electricidad	0,02
Consumo de MEA	1,47
Mano de obra	0,08
OPEX	11,03

Apéndice F. Emisiones generadas MEA.

A continuación, se presentan las emisiones generadas en la planta usando el solvente MEA para el cálculo de dióxido de carbono evitado.

Tabla 9.*Emisiones generadas MEA*

EMISIONES	Valor (Kg/h)	Valor (t/año)
Emisiones en el Rehervidor	30027,0	263036,2
Emisiones en el enfriador	31,0	271,6
Emisiones por electricidad	14,4	126,3
Emisiones por consumo de MEA	420,1	3679,9
Emisiones totales	30492,5	267114,0

Apéndice G. Costos capitales y operativos mezcla de aminas (MEA+MDEA).

Aquí se evidencian los costos capitales y operativos utilizados para la realización de los diagramas en el estudio económico y ambiental.

Tabla 10.*Costos capitales (CAPEX)*

EQUIPO	MATERIAL	COSTO FINAL (CP) (Millones de dólares)
Absorbedor	Acero al carbono	2,516
Desorbedor		0,835
Intercambiador de tubo y carcaza	Acero inoxidable/ acero al carbono	0,929
Enfriador		0,668
Rehervidor		2,377
Bomba	Acero inoxidable	0,063
Válvula		0,001
Destiladores flash	Acero al carbono	0,878
Costo total equipos.		8,27E+06

Tabla 11.

Costos Operativos

COSTO	VALOR (Millones de dólares/año)
Agua de enfriamiento	0,10
Vapor de media	7,25
Consumo de electricidad	0,02
Consumo de MEA	0,78
Consumo de MDEA	0,53
Mano de obra	0,08
OPEX	8,23

Apéndice H. Emisiones generadas mezcla de aminas (MEA+MDEA)

Aquí se evidencia los resultados de todas las emisiones implementadas que se tuvieron en cuenta para el cálculo de evitación de dióxido de carbono y la intensidad de carbono.

Tabla 12.

Emisiones generadas para MEA+MDEA

EMISIONES	Valor (Kg/h)	Valor (t/año)
Emisiones en el rehervidor	204111,0	1788012,0
Emisiones en el enfriador	168,8	1478,4
Emisiones por electricidad	137,2	1201,6
Emisiones por consumo de MEA	1968,0	17239,4
Emisiones por consumo de MDEA	197,8	1733,1
Emisiones totales	267114,0	2339919,1

