

Estudio técnico, económico y de impacto ambiental del proceso de absorción química con carbonatos y piperazinas en pro de la descarbonización de la industria de hidrocarburos.

Vivian Salomé Escallón Burgos y Erik Santiago Rincón Orjuela

Trabajo de Grado para optar el título de Ingeniero Químico

Modalidad trabajo de investigación

Director

Gustavo Emilio Ramírez Caballero (PhD en Ingeniería Química)

Codirector

Ariel Uribe Rodríguez (PhD en Ingeniería Química)

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2024

Dedicatoria

A mis padres, quienes me han brindado toda la ayuda posible para hacer de este objetivo
una meta cumplida.

Erick Santiago Rincón Orjuela

A mi familia: mi mamá Gladys Burgos Fonseca, mi papá Jorge Enrique Escallón Castro y
mi hermano Jorge Alejandro Escallón Burgos. A mis amigos y a mis gatos.

Vivian Salomé Escallón Burgos

Agradecimientos

Principalmente a Claudia Valderrama, quien fue una recurrente apoyo y compañía durante la mayor parte del proyecto.

Agradecemos a Gustavo Ramirez y Ariel Uribe por la oportunidad de participar en el 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”.

Al Decanato de la Facultad de Fisicoquímicas por el apoyo en la participación de IV Encuentro Internacional de Experiencias Significativas que se realizó en la ciudad de Cartagena.

Tabla de contenido

	Pág.
Introducción.....	13
1. Objetivos	15
1.1 Objetivo general.....	15
1.2 Objetivos específicos.....	15
2. Marco conceptual.....	15
3. Estado del arte.....	19
4. Metodología.....	21
4.1 Definición de casos base.....	21
4.2 Simulación y validación de los casos base	22
4.3 Escalado	23
4.4 Estudio económico	24
4.5 Indicadores.....	25
4.6 Análisis de sensibilidad	25
5. Resultados.....	26
5.1 Resultados de definición del proceso	26
5.2 Resultados de simulación y validación de casos base.....	27
5.3 Resultados de escalado	30
5.4 Resultados del estudio económico e indicadores.....	31

5.5 Resultados del análisis de sensibilidad.....	35
5 Conclusiones.....	41
Referencias bibliográficas	44

Lista de tablas

Tabla 1. Medidas de torres empacadas de planta en Bellingham.....	23
Tabla 2. Casos para análisis de sensibilidad	26
Tabla 3. Condiciones de operación en las torres.....	27
Tabla 4. Validación de parámetros principales de caso PZ.....	29
Tabla 5. Validación de parámetros principales de caso PC-PZ.....	30
Tabla 6. Resultados de escalado.....	31
Tabla 7. Resultados totales de CAPEX	32
Tabla 8 Resultados de los principales indicadores económicos y ambientales	35
Tabla 10. Resultados análisis de sensibilidad de algunos parámetros para PZ.....	37
Tabla 11. Resultados de análisis de sensibilidad de algunos parámetros para PC-PZ	37
Tabla 12. Resultados de análisis de sensibilidad de principales parámetros de estudio económico para PZ	41
Tabla 13. Resultados de análisis de sensibilidad de principales parámetros de estudio económico para PC-PZ	41
Tabla 14. Parámetros requeridos para el modelo ELECNRTL.....	50
Tabla 15. Especificación de cálculo en torres RadFrac	52
Tabla 16. Propiedades de empaques.....	52
Tabla 17. Especificaciones de Rate-Based y convergencia en torres de absorción	53
Tabla 18. Especificaciones de Rate-Based y convergencia en torres de regeneración	53
Tabla 19. Parámetros del modelo PZ 5 m.....	54
Tabla 20. Parámetros del modelo 5 m K+ / 2.5 m PZ.....	55
Tabla 21. Factores cinéticos de ecuaciones para 5 m PZ.....	58

Tabla 22. Factores cinéticos de ecuaciones directas para 5 m K+/ 2.5 m PZ	58
Tabla 23. Factores cinéticos de ecuaciones inversas para 5M K+/ 2.5M PZ	59
Tabla 24. Condiciones de la corriente FLUEGAS para cada caso.....	61
Tabla 25. Condicione la corriente LEANIN para cada caso.....	61
Tabla 26. Condiciones del fluegas del caso de la planta en Bellingham.....	62
Tabla 27. costos de sustancias para cálculo del solvente inicial	72
Tabla 28. Factores de emisión.....	76

Lista de figuras

Figura 1. Especiación y mecanismos de captura de MEA y PZ17

Figura 2. Diagrama de flujo de la metodología empleada21

Figura 3. Diagrama de flujo de la planta piloto en J.J. Pickle22

Figura 4. Diagrama de flujo de simulación27

Figura 5. Validación de perfil de temperatura de torre de absorción de PZ28

Figura 6. Validación de perfil de temperatura de torre de absorción de PC-PZ29

Figura 7. Distribución de CAPEX33

Figura 8. Resultados de OPEX33

Figura 9. Emisiones de CO₂ asociadas al rehervidor34

Figura 10. Emisiones de CO₂ asociadas a otros equipos35

Figura 11. Análisis de sensibilidad en porcentaje de captura36

Figura 12. Análisis de sensibilidad en parámetro L/G37

Figura 13. Análisis de sensibilidad de indicador energético.38

Figura 14. Análisis de sensibilidad de los CAPEX38

Figura 15. Análisis de sensibilidad de los OPEX39

Figura 16. Análisis de sensibilidad para el costo de captura y abatimiento para PZ40

Figura 17. Análisis de sensibilidad para el costo de captura y abatimiento para PC-PZ40

Figura 18. Arbol de decisión de modelo de propiedades49

Figura 19. Ejemplo de ingreso de variable controlada en bloque calculador77

Figura 20. Ejemplo de ingreso de variable controlada en Design Specs78

Figura 21. Ejemplo de ingreso de variable manipulada en Design Specs78

Lista de apéndices

Apéndice A: Modelo de Aspen499

Apéndice B: Parámetros del modelo53

Apéndice C: Reacciones de la torre de absorción.....56

Apéndice D: Reacciones de la torre de regeneración.....59

Apéndice E: Condiciones operativas de las corrientes61

Apéndice F: Estudio económico62

Apéndice F.1: Cálculo del CAPEX para cada unidad de proceso62

Apéndice F.2: Cálculo de los costos operativos OPEX73

Apéndice G: Indicadores ambientales.....75

Apéndice H: Bloques calculadores y Design Specs de parámetros.....77

Apéndice I: Código de FORTRAN para estudio económico e indicadores.....78

Glosario

AIC: Inversión anualizada. Acrónimo en inglés de ‘annualized investment’.

AMC: Costo de mantenimiento anual. Acrónimo en inglés de ‘annual maintenance cost’

AOC: Costos operativos. Acrónimo en inglés de ‘annual operating costs’.

CAPEX: Costos de capital. Acrónimo en inglés de ‘capital expenditure’.

CO₂T: Emisiones evitadas de CO₂.

FLUEGAS: Gas de chimenea

FOB: Acrónimo en inglés de ‘free on board’. Término que valora bienes cuando en su precio no se incluyen los costos de exportación.

GEI: Gases de efecto invernadero.

LEAN: Empobrecido

MEA: Monoetanolamina

OPEX: Costos operativos. Acrónimo en inglés de ‘operational expenditure’.

PC: Carbonato de potasio. Acrónimo en inglés de ‘Potassium Carbonate’.

PZ: Piperazina

RICH: Enriquecido

TAC: Costo total anualizado. Acrónimo en inglés de ‘total annualized cost’.

Resumen

Título: Estudio técnico, económico y de impacto ambiental del proceso de absorción química con carbonatos y piperazinas en pro de la descarbonización de la industria de hidrocarburos. ¹

Autor: Vivian Salomé Escallón Burgos, Erik Santiago Rincón Orjuela ²

Palabras Clave: Captura de carbono, simulación, Aspen PLUS, piperazina, carbonato de potasio, Rate-Based, absorción química, estudio económico

Descripción: En el presente trabajo se realizó una validación a través de Aspen PLUS V12.1, la cual proporcionó una descripción precisa de plantas piloto, con resultados consistentes para los solventes PZ y PC-PZ. Los errores de validación fueron del 4,33 % y del 4,23 %, respectivamente. Al escalar el proceso a dimensiones industriales, se encontró que el CAPEX total está principalmente representado por el costo capital de las torres, mientras que el OPEX por el gasto energético del rehervidor. Las plantas de captura de carbono se catalogaron por el requerimiento energético, siendo 51,73 MW para PZ y 96,10 MW para PC-PZ; este último es más alto debido a la naturaleza de la mezcla. Los costos de abatimiento obtenidos difieren notoriamente entre los solventes, con valores de \$87,13 y \$353,04 USD/ton CO₂ para PZ y PC-PZ, respectivamente. La PZ sobresale por su eficiencia global, mientras que el PC-PZ, por el contrario, se ve limitado por sus costos operativos elevados y emisiones asociadas a estos. Los análisis de sensibilidad indican mejoras en el rendimiento de ambos solventes al tratar gases con concentraciones más altas de CO₂. En comparación con la MEA, la PZ demuestra mejoras económicas y ambientales, mientras que el PC-PZ no muestra tales mejorías. La PZ se destaca como una opción prometedora para la captura de carbono, mientras que se espera que el desempeño del PC-PZ mejore con una integración energética más eficiente y optimización en futuras aplicaciones.

¹ Trabajo de grado

² Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Ingeniería Química. Director Gustavo Emilio Ramirez Caballero. PhD en Ingeniería Química.

Abstract

Title: Technical, Economic, and Environmental Impact Study of Chemical Absorption Process with Carbonates and Piperazines for Decarbonization of the Hydrocarbon Industry.

Authors: Vivian Salomé Escallón Burgos, Erik Santiago Rincón Orjuela

Keywords: Carbon capture, simulation, Aspen PLUS, piperazine, potassium carbonate, Rate-Based, chemical absorption, economic assessment.

Description: This study conducted validation through Aspen PLUS V12.1, providing a precise description of pilot plants, yielding consistent results for the solvents PZ and PC-PZ. Validation errors were 4.33% and 4.23%, respectively. Upon scaling the process to industrial dimensions, total CAPEX was found to be primarily represented by the capital cost of towers, while OPEX was dominated by the energy expenditure of the reboiler. Carbon capture plants were categorized by energy requirement, with 51.73 MW for PZ and 96.10 MW for PC-PZ; the latter being higher due to the mixture's nature. Abatement costs differed notably between solvents, with values of \$87.13 and \$353.04 USD/ton CO₂ for PZ and PC-PZ, respectively. PZ stands out for its overall efficiency, whereas PC-PZ, on the contrary, is limited by its high operating costs and associated emissions. Sensitivity analyses indicate improvements in the performance of both solvents when treating gases with higher concentrations of CO₂. Compared to MEA, PZ demonstrates economic and environmental improvements, while PC-PZ does not show such enhancements. PZ emerges as a promising option for carbon capture, while it is expected that the performance of PC-PZ will improve with more efficient energy integration and optimization in future applications.

Introducción

Las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) y sus consecuencias en el calentamiento global constituyen una emergencia mundial que ha implicado la búsqueda de soluciones mediante la cooperación de todos los países. A partir del Acuerdo de París donde se establece como objetivo limitar el aumento de la temperatura global entre 1.5-2 °C, Colombia se comprometió a reducir las emisiones de GEI en un 51% para el año 2030 y en un 90% para el año 2050 balanceando el 10 % restante con absorciones nacionales, alcanzando de esta manera la carbono-neutralidad (LEY 2169, 2021; Gobierno de Colombia, 2021).

En Colombia la producción de energía representa históricamente el 28,4% de las emisiones nacionales, cuya participación ha aumentado gradualmente teniendo 22% en 1990 y 31% en 2018. De este módulo de energía el 90% de emisiones son por actividades de quema de combustibles y el 10% emisiones fugitivas de las cadenas de carbón, petróleo y gas natural, siendo el dióxido de carbono el gas mayormente emitido con un 88,9% en el módulo (IDEAM et al., 2022).

Si bien es incuestionable la búsqueda de fuentes de energía renovables, resulta poco realista poner fin abruptamente al uso de combustibles fósiles (Madeddu et al., 2019). La Captura y Almacenamiento de Carbono (CCS por sus siglas en inglés) se muestra entonces como una opción viable para separar el CO₂ de gases de chimenea y almacenarlo bajo tierra de forma permanente o utilizarlo en procesos industriales (Madejski et al., 2022). Entre las técnicas de CCS, la absorción química es la más madura, usada y prometedora por su alta capacidad de procesamiento a gran escala y por su trayectoria de más de 70 años de estudio y aplicación (Chen, 2007; Ochedi et al., 2021).

Aun así, la absorción química presenta algunos retos actualmente como la alta corrosión, toxicidad y degradación del solvente, y el requerimiento energético para la regeneración de este mismo, siendo este último factor un determinante para el costo de captura (Ochedi et al., 2021). Estas características están mayormente asociadas al solvente de uso común, la monoetanolamina (MEA). Por ello, otros solventes como la piperazina (PZ) y el carbonato de potasio (PC) han surgido como alternativas; esta primera por su alta estabilidad térmica y baja viscosidad (Chen et al., 2019; Plaza, 2012; Yuan & Rochelle, 2019); y la segunda por su bajo costo, toxicidad y susceptibilidad a la degradación y corrosión (Ochedi et al., 2021).

Al resaltar la relevancia de su desempeño, este proyecto busca esclarecer si la piperazina y el carbonato de potasio representarían una opción viable económica y ambientalmente como proceso de captura de CO₂.

1. Objetivos

1.1 Objetivo general

Realizar el análisis preliminar técnico, económico y ambiental del proceso de absorción química de CO₂ con carbonatos y piperazinas para el tratamiento de efluentes gaseosos en la industria de hidrocarburos.

1.2 Objetivos específicos

I. Definir el proceso de absorción química de CO₂ con carbonatos y piperazinas, precisando las condiciones de operación termodinámicas y másicas mediante una revisión bibliográfica del estado del arte.

II. Realizar un estudio técnico del proceso de absorción química de CO₂ con carbonatos y piperazinas por medio de un modelado, haciendo uso del software de simulación Aspen PLUS para su aplicación en el contexto colombiano.

III. Determinar los costos de operación y los gastos de inversión asociados al proceso de absorción química de CO₂ con carbonatos y piperazinas.

IV. Evaluar el desempeño ambiental del proceso determinando indicadores asociados con la captura y abatimiento de CO₂ y su consumo energético.

2. Marco conceptual

2.1 Captura de Carbono y Absorción química

Las tecnologías de Captura y Almacenamiento de Carbono (CCS) son métodos de mitigación de emisiones de CO₂, comúnmente generadas por plantas industriales que emplean procesos de combustión (Madeddu et al., 2019). El CO₂ capturado puede almacenarse

permanentemente en pozos de petróleo y gas agotados, como lo que ocurre en la recuperación mejorada de petróleo donde la gran mayoría del CO₂ se retiene en el yacimiento; o también puede ser usado comercialmente para la producción de urea y bebidas carbonatadas como una manera de almacenamiento temporal (IEA, 2020).

La absorción química representa el método de CCS con más experiencia operacional y eficiencia para la captura de dióxido de carbono, fundamentándose en la reacción entre el CO₂ y un solvente químico específico (Madejski et al., 2022; Zhang et al., 2018). En una típica planta de absorción se pueden identificar dos partes principales: la absorción, donde el dióxido de carbono se transfiere de la fase vapor/gas a la fase líquida, y la regeneración del solvente donde el CO₂ es obtenido como producto (Madeddu et al., 2019).

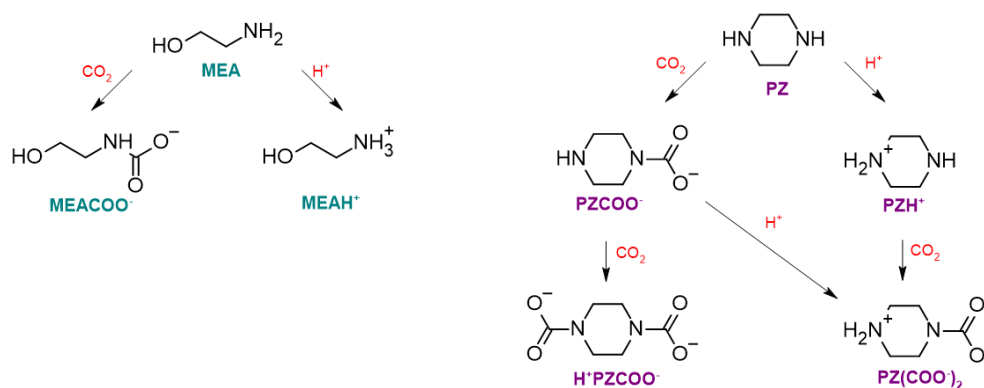
Monoetanolamina (MEA): Es una amina primaria y alcohol primario con fórmula molecular C₂H₇NO, también conocida como Etanolamina. Actualmente es la sustancia más utilizada para endulzamiento de gases de combustión mediante absorción, en soluciones acuosas de 15-40% peso. Su alta demanda energética para regeneración del solvente y su baja resistencia a la degradación son unas de las razones principales por las cuales se buscan alternativas a este solvente (Plaza, 2012).

Piperazina (PZ): Es un compuesto orgánico de forma cíclica con fórmula molecular C₄H₁₀N₂. La PZ es utilizada en soluciones acuosas en concentraciones usualmente de 30-40% peso o como promotor de otros solventes, para captura de CO₂. Ya que tiene dos grupos amino secundarios posee una ventaja al poder reaccionar con dos moléculas de CO₂, a diferencia de la MEA que solo tiene uno (**Figura 1**). Además de eso, la PZ tiene una alta velocidad y capacidad de

absorción, alta estabilidad térmica y baja viscosidad (Chen et al., 2019; Frailie, 2014; Plaza, 2012; Yuan & Rochelle, 2019).

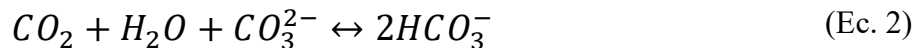
Figura 1.

Especiación y mecanismos de captura de MEA y PZ



Nota: Izquierda – MEA ; Derecha – PZ. Estructuras químicas dibujadas por los autores utilizando ACD/ChemSketch (Versión 2022) [Software].

Carbonato de Potasio (PC): Es uno de los carbonatos más comúnmente usados en captura de CO₂. Su fórmula molecular es K₂CO₃. Así como otros carbonatos este tiene como ventaja su bajo costo, toxicidad y susceptibilidad a la degradación y corrosión; y se destaca entre ellos por su mayor capacidad de absorción. Debido a su baja velocidad de reacción suele utilizarse junto con promotores (Ochedi et al., 2021). El mecanismo de captura del PC es representado globalmente como la **Ec. 1**, pero debido a que el PC y el bicarbonato de potasio son electrolitos fuertes, se puede inferir que el metal está presente únicamente en forma de iones K⁺, por lo cual la reacción suele representarse como en la **Ec. 2** (Mumford et al., 2012).



Carga de CO₂

La carga de CO₂ (loading), es una medida que indica la cantidad de dióxido de carbono que tiene almacenado un solvente. La carga de CO₂ para aminas está definida por la cantidad de grupos amino que tiene, en este caso la PZ tiene dos (ver Ec. 3). En el caso del K₂CO₃, la carga está definida por su ion K⁺, teniendo un factor de 1 (ver Ec. 4) (Plaza, 2012).

$$\text{Carga de } CO_2 = \frac{\text{moles aparentes } CO_2}{2 \text{ moles aparentes } PZ} \quad (\text{Ec. 3})$$

$$\text{Carga de } CO_2 = \frac{\text{moles aparentes } CO_2}{\text{moles aparentes } K^+ + 2 \text{ moles aparentes } PZ} \quad (\text{Ec. 4})$$

Costo de captura y costo de CO₂ evitado

Estos dos costos se presentan como indicadores ambientales que proporcionan una visión general del proceso, puesto que evalúan el desempeño económico de cada solvente mediante variables como los costos de capital (CAPEX), los costos operativos (OPEX) y la cantidad total de CO₂ capturado y emitido (Roussanaly, 2019; Seider, 2017). En consecuencia, ofrecen una valoración que facilita el análisis de alternativas para la captura de carbono. Al ser medidores globales, orientan la toma de decisiones a la hora de buscar sustitutos para la MEA, permitiendo una preferencia hacia un solvente sobre otro debido a una mayor viabilidad económica.

Aspen PLUS[®]

Es un simulador de procesos de estrategia secuencial; esto quiere decir que está compuesto por un grupo de unidades representadas a través de bloques o íconos a los cuales debe ingresarse información pertinente. Los simuladores en general sirven para prever el comportamiento de un proceso y analizar diferentes casos de este (Gil Chaves et al., 2011). Aspen PLUS® cuenta con calculadoras que funcionan a través del lenguaje de programación de FORTRAN, y especificaciones de diseño. Estas son esenciales para incorporar ecuaciones no contempladas por el simulador y ajustar parámetros mediante la variación de datos de entrada (Finlayson, 2012).

3. Estado del arte

El equipo dirigido por Gary Rochelle en la Universidad de Texas en Austin ha dedicado más de 42 años a la investigación y desarrollo de tecnologías para el tratamiento de gases de chimenea. Durante este tiempo, han supervisado la elaboración de 87 tesis de doctorado y maestría, y han publicado más de 100 artículos científicos en relación con este campo de estudio (Rochelle, 2023). Este grupo ha desarrollado modelos cinéticos y termodinámicos para la descripción de los sistemas $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2-\text{K}_2\text{CO}_3-\text{PZ}$ y $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2-\text{PZ}$, tanto a partir de estudios en laboratorio como en su planta piloto ubicada en el campus de investigación J.J. Pickle de la Universidad de Texas en Austin (Oexmann & Kather, 2009).

En 2005 Cullinane propuso la mezcla de PC y PZ como solvente para captura de CO_2 (Cullinane, 2005). En su investigación llevó a cabo experimentos en una columna de pared mojada y, al utilizar concentraciones de 5 m K^+ /2.5 m PZ, reportó velocidades de absorción 1-1,5 veces superiores a las obtenidas con MEA. Además, Cullinane demostró que la solución de PC-PZ tiende a no precipitar a 40°C , por lo cual el proceso de captura debería ser trabajado a esta temperatura. Con base en estos hallazgos, desarrolló modelos termodinámicos utilizando NRTL y modelos

cinéticos para describir el comportamiento de la mezcla en presencia de CO₂. Posteriormente, Hilliard implementó el modelo termodinámico en Aspen PLUS[®] utilizando ELECNRTL (Hilliard, 2005).

Eric Chen (Chen, 2007) describió cómo la planta piloto del campus, que originalmente se utilizaba para llevar a cabo experimentos de destilación y extracción para empresas industriales, así como para colaborar en proyectos de estudiantes de posgrado, fue extensivamente modificada para convertirse en un sistema de absorción/regeneración destinado a la captura de CO₂ de centrales eléctricas de carbón. Allí se emplearon solventes en concentraciones de 5 m K⁺/2.5 m PZ y 6.4 m K⁺/1.6 m PZ ya que eran las concentraciones que no solían generar precipitación de sólidos o presencia de dos fases en el líquido. Los resultados indicaron que el solvente 5 m K⁺/2.5 m PZ exhibía una velocidad tres veces mayor que 6.4 m K⁺/1.6 m PZ y 7 veces mayor que la MEA, obteniendo un porcentaje de captura de hasta un 90%. Sin embargo, observó requerimientos energéticos un poco mayores a la MEA. Sumado a esto, Chen realizó ajustes a los modelos termodinámicos y cinéticos de Cullinane y Hilliard en una simulación de Aspen PLUS[®], reportando que el balance de CO₂ nunca cerró consistentemente.

En 2012 Jorge Plaza desarrolló un modelo termodinámico en Aspen PLUS[®] llamado “5deMayo” a partir de la actividad que se realizó en la planta con el uso de PZ concentrada (Plaza, 2012). En estas actividades se utilizaron las concentraciones 5 m PZ y 8 m PZ, donde la concentración más alta generó precipitación de sólidos (Chen et al., 2019). Asimismo, David Van Wagener realizó el modelamiento de la torre de regeneración a partir de estos datos (Wagener, 2011). En general el solvente 5 m PZ obtuvo un porcentaje de captura alrededor del 90% con un requerimiento energético menor que el de MEA.

La revisión exhaustiva del estado del arte respalda el fundamento del interés en investigar estos solventes, al mismo tiempo que resalta la viabilidad de simular datos disponibles al público mediante el programa Aspen PLUS®. En este contexto, las concentraciones de 5 m K⁺/2.5 m PZ y 5 m PZ destacan como las más notables y prometedoras para el estudio en cuestión.

4. Metodología

La metodología que fue llevada a cabo en el presente proyecto, se indica de manera resumida en la **Figura 2**.

Figura 2.

Diagrama de flujo de la metodología empleada



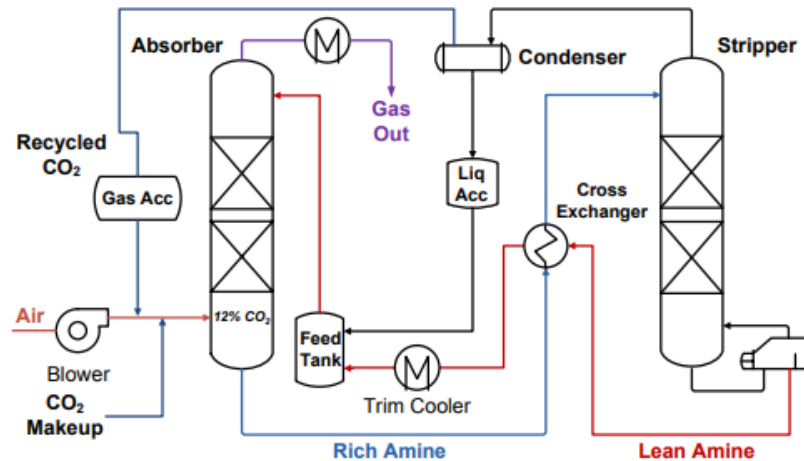
4.1 Definición de casos base

La definición del proceso fue basada en la planta piloto de captura de carbono ubicada en el campus de investigación J.J. Pickle de la Universidad de Texas en Austin (**Figura 3**).

Las condiciones de operación del caso de absorción utilizando PZ, fueron tomadas de aquellas registradas en las tesis de doctorado “Modeling of carbon dioxide absorption using aqueous monoethanolamine, piperazine and promoted potassium carbonate” del autor Jorge Plaza (Plaza, 2012) y “Stripper modeling for CO₂ removal using monoethanolamine and piperazine solvents” del autor David Van Wagener (2011).

Figura 3.

Diagrama de flujo de la planta piloto en J.J. Pickle



Nota: Adaptado de (Plaza, 2012)

Por otro lado, la información para el caso de PC promovido por PZ se obtuvo de la tesis de doctorado “Carbon Dioxide Absorption into Piperazine Promoted Potassium Carbonate using Structured Packing” del autor Eric Chen (2007). Los casos específicos que se definieron fueron los de 5 m PZ y 5 m K⁺ / 2.5 m PZ, teniendo en cuenta la revisión del estado del arte.

4.2 Simulación y validación de los casos base

La simulación se realizó en Aspen PLUS[®] V12.1. Se eligió el modelo de propiedades ELECNRTL y las torres se modelaron como Rate-Based (ver Apéndice 1).

En la torre de absorción fue utilizado el modelo cinético de reacciones, mientras que para la torre regeneradora fueron consideradas las reacciones en equilibrio. Esta consideración se basó en la metodología aplicada por David Van Wagener (Wagener, 2011). El modelamiento de las reacciones químicas se explica detalladamente en el Apéndice 3 y Apéndice 4.

Se realizaron calculadoras y especificaciones de diseño (Design Specs) dentro de la simulación mediante el lenguaje interno FORTRAN para la reposición del solvente, la captura dentro de la torre de absorción, el requerimiento energético de la torre regeneradora y todos los cálculos del estudio económico e indicadores (ver Apéndice 8 y Apéndice 9).

La validación fue realizada a través de la comparación con datos en la literatura según la disponibilidad de estos para cada solvente.

4.3 Escalado

El escalado, si bien no fue un objetivo dentro del proyecto, se hizo con el fin de que los cálculos del estudio económico estuviesen en magnitudes industriales. Las dimensiones de los casos base fueron llevadas a la escala de la planta industrial de captura en Bellingham presentada en la tesis de maestría “Modeling of CO₂ Removal from Flue Gases with Monoethanolamine” del autor Stefano Freguia, donde se utilizaba como solvente la MEA (ver *Tabla 1*) (Freguia, 2002). Esta se escogió como referencia debido a la disponibilidad de los datos para comparación, y a la similitud de la planta al ser una configuración SS.

La planta estaba diseñada para tratar un flujo de la corriente FLUEGAS de 11000 kmol/h con 13% vol. de CO₂. En el **Apéndice 5** se encuentra más información sobre las corrientes. Las demás condiciones de operación permanecieron como temperaturas, presiones permanecieron iguales a los casos base.

Tabla 1.

Medidas de torres empacadas de planta en Bellingham

Parámetro	Absorbedor	Regenerador
Altura (m)	15	10
Diámetro (m)	7,2	4,8

Nota: Adaptado de (Freguia, 2002)

4.4 Estudio económico

El análisis económico del proyecto se desglosa en dos partes principales: los costos de capital (CAPEX) y los costos de operación (OPEX). Estos fueron calculados a partir de la metodología descrita en el capítulo 16 del libro ‘Product and process design principles’, (Seider, 2017).

Para calcular el CAPEX, se aplicó el método de Lang y Guthrie a cada uno de los equipos de la planta. Este método se basa en el costo de compra ‘free on board’ (FOB), que implica que el vendedor se encarga de los costos de transporte de la mercancía hasta que esté a bordo de la embarcación designada por el comprador (DANE, 2006). Además, es un método de costo factorizado, lo que significa que para obtener el costo capital total, considera un costo base determinado por las dimensiones de los equipos y las condiciones operativas y del mismo modo, diferentes factores generalmente asociados al material de construcción.

Con el fin de presentar los resultados en una escala de tiempo uniforme, se lleva a cabo el cálculo del costo de inversión anualizada (AIC) y del costo total anualizado (TAC) (Ec. 5). La descripción rigurosa de este proceso se muestra en el **Apéndice F.1**.

$$TAC = AIC + OPEX \quad (\text{Ec. 5})$$

Por otro lado, el cálculo del OPEX se llevó a cabo mediante de la suma de cuatro variables consideradas como los principales costos de operación: la demanda de energía eléctrica, vapor de calentamiento, agua de enfriamiento y la cantidad necesaria de solvente para reposición. Cada uno de estos fue determinado a partir de correlaciones que vinculan una cantidad específica de masa o energía con un costo directo asociado (Chen et al., 2019; Seider, 2017). La descripción rigurosa de este proceso se muestra en el apéndice **Apéndice F.2**.

4.5 Indicadores

El desempeño ambiental se basó en una serie de factores de emisión que establecen una relación entre la producción de elementos o el suministro de servicios con una cantidad de CO₂ liberado. Para estimar las emisiones totales de la planta, se consideraron las mismas variables representativas que se emplearon en el procedimiento de los costos operativos, multiplicando el flujo de masa o energía por el factor de emisión asociado a cada actividad. Después de esto, la totalidad las emisiones de la planta fueron restadas a la cantidad de CO₂ capturada, lo que resultó en las emisiones evitadas (CO₂T). Posteriormente, para obtener el indicador de costo de CO₂ evitado, el TAC fue dividido entre el CO₂T anualizado (Ec. 6). Por otro lado, el costo de captura se determinó mediante la división del TAC entre la cantidad total de CO₂ capturado (Ec. 7) (Pedrozo et al., 2023). Finalmente, se procedió a evaluar la eficiencia energética del proceso y del solvente, considerando la energía total requerida para capturar una tonelada de CO₂ (Ec. 8) (Chuenphan et al., 2022). La descripción rigurosa de este proceso se muestra en el **Apéndice G**.

$$\text{Costo de } CO_2 \text{ evitado} = \frac{TAC}{CO_2 \text{ capturado} - CO_2 \text{ emitido por la planta}} \quad (\text{Ec. 6})$$

$$\text{Costo de Captura} = \frac{TAC}{CO_2 \text{ Capturado}} \quad (\text{Ec. 7})$$

$$\text{Indicador energético} = \frac{Q_{reb}}{CO_{2prod}} \quad (\text{Ec. 8})$$

4.6 Análisis de sensibilidad

Este análisis se hizo mediante casos de simulación, en los cuales realizó una variación en la composición del gas de entrada a partir de datos obtenidos de Ecopetrol. Esto con el fin de estudiar los cambios en los parámetros más significativos en un escenario colombiano. Dichas composiciones se muestran en la **Tabla 2**

Tabla 2.

Casos para análisis de sensibilidad

Compuesto	Concentraciones % vol.			
	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
N2	79,4	78,2	73,1	71,7
CO2	7,8	7,9	14,3	14,3
O2	2,4	2,2	3,9	3,4
H2O	10,4	11,7	8,6	10,6

Nota: Datos obtenidos de reportes internos propiedad de ECOPETROL S.A.

5. Resultados

Por facilidades en la comprensión se hará referencia a los solventes de concentraciones 5 m PZ y 5 m K+ / 2.5 m PZ, como PZ y PC-PZ respectivamente.

5.1 Resultados de definición del proceso

La planta cuenta con una torre de absorción y una torre regeneradora, ambas con un diámetro de 0,427 m y 6,1 m de altura empacada. El gas de chimenea es ingresado por el fondo de la torre de absorción, encontrándose en contracorriente con el solvente ingresado por la cima. El gas de esta manera asciende limpio, y el solvente rico en CO₂ es llevado a la torre regeneradora (stripper), siendo acondicionado previamente. En el stripper el CO₂ se obtiene como producto en la cima, y el solvente empobrecido es regenerado por el fondo, aprovechando su calor en un intercambiador cruzado para el acondicionamiento de la corriente de solvente enriquecido. Esta configuración de integración energética para el stripper se le conoce como Simple Stripper (SS).

Las condiciones de operación mostradas en la **Tabla 3** corresponden a las torres empacadas de los casos PZ y PC-PZ, las cuales utilizaban Mellapak 2X y Flexipac AQ Style 20 como relleno respectivamente (Chen, 2007; Plaza, 2012).

Tabla 3.

Condiciones de operación en las torres.

Parámetro	Especificación	PZ	PC-PZ
Presión (bar)	Absorbedor	1,01	1,01
	Regenerador	3,4	1,6
Temperatura (°C)	Gas de chimenea	5*	40
	Solvente	40	40

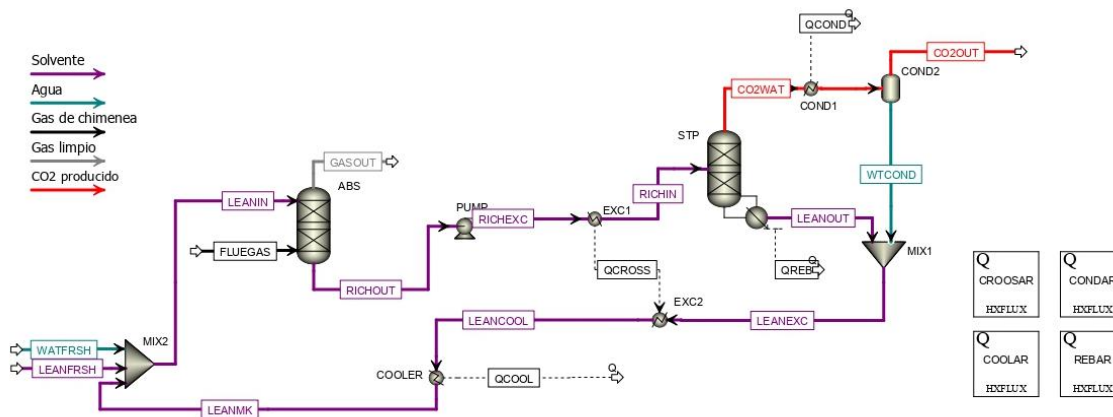
Nota: * La temperatura de entrada del gas de chimenea en el caso de la PZ es bastante baja debido a condiciones ambientales en el lugar donde se situaba la planta puesto que, de noche, la temperatura solía descender abruptamente. Adaptado de (Chen, 2007; Plaza, 2012).

5.2 Resultados de simulación y validación de casos base

El esquema de simulación (**Figura 4**) se hizo de acuerdo con la definición expuesta anteriormente.

Figura 4.

Diagrama de flujo de simulación



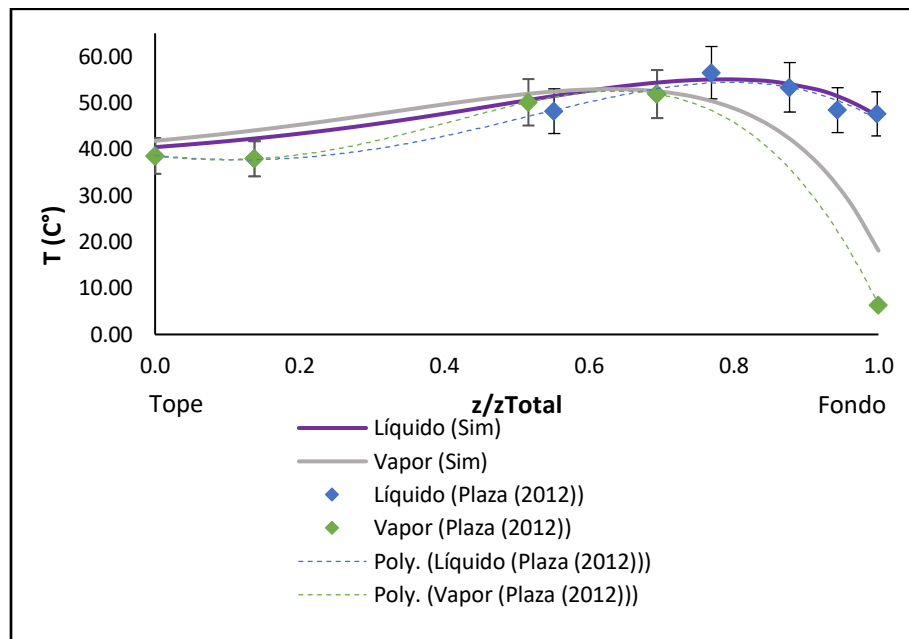
Nota: Simulación realizada con Aspen PLUS® V12.1

La validación del perfil de temperatura de las torres de absorción arrojó un error general del 5,3% para el caso de PZ y un 6,9% (**Figura 5**) para el de PC-PZ (**Figura 6**). Es pertinente

aclarar que la temperatura de la corriente de Fluegas, que generaba un error del 19,0%, fue tomada como un dato atípico debido a las condiciones ambientales mencionadas anteriormente.

Figura 5.

Validación de perfil de temperatura de torre de absorción de PZ



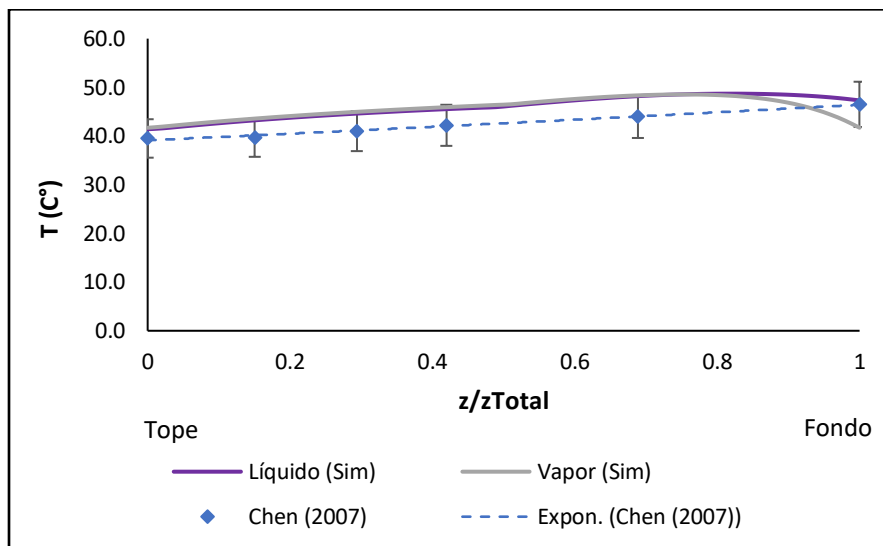
Nota: Los corchetes representan un error del 10%. Los rombos representan los datos de planta piloto adaptados de (Plaza, 2012).

El perfil de temperatura para el caso PZ tiene un comportamiento característico de torre de absorción, con una cresta cercana al fondo de la torre. En el caso de PC-PZ la curva es aplanada debido a que la relación L/G es mucho mayor (7,2 para PZ y 10,4 para PC-PZ).

La validación de los parámetros principales tuvo un error promedio de 4,3% para PZ (*Tabla 4*) y 4,2% para PC-PZ (*Tabla 5*).

Figura 6.

Validación de perfil de temperatura de torre de absorción de PC-PZ



Nota: Los corchetes representan un error del 10%. Los rombos representan los datos de planta piloto adaptados de (Chen, 2007).

Tabla 4.

Validación de parámetros principales de caso PZ

Propiedad	Especificación	Van (2011), Plaza (2012)	Simulación	Error
Flujo (kg/s)	RICHOUT	1,28	1,277	0,20%
	LEANIN	1,22	1,241	1,80%
	CO2OUT	0,032	0,0318	0,50%
T (°C)	RICHOUT	44,8	47,8	6,60%
	LEANCOOL	48,6	52,6	8,30%
	Rehervidor	127,6	113,7	10,90%
	Cima de regeneradora	112,1	93,8	16,30%
Carga de CO ₂	LEANIN	0,274	0,272	0,90%
	RICHOUT	0,362	0,362	0,10%
Requerimiento energético (kW)	Rehervidor	134,6	134,0	0,40%
L/G (mol/mol)	Absorbedor	7,2	7,14	0,80%
Captura (kg/kg)	General	0,884	0,838	5,10%

Tabla 5.

Validación de parámetros principales de caso PC-PZ

Propiedad	Especificación	Chen (2007)	Simulación	Error
Flujo (gpm)	Enriquecido	23,86	24,16	1,25%
	Empobrecido	23,38	23,94	2,38%
Flujo (ft ³ /min)	CO ₂ producido	18,78	23,37	24,45%
T (°F)	RICHEXC	113,32	112,82	0,44%
	Cima de regeneradora	222,20	234,37	5,48%
	LEANOUT	240,60	244,12	1,46%
Carga de CO ₂ (mol/mol)	LEANIN	0,39-0,45	0,40	---
Requerimiento energético (MMBTU/h)	Rehervidor	0,884	0,884	0,00%
L/G (kg/kg)	Absorbedor	10,4	10,7	2,48%
Captura (mol/mol)	General	0,881	0,882	0,16%

Cabe reiterar que los datos de referencia para la validación fueron obtenidos de acuerdo con la relevancia y disponibilidad de estos en la literatura. La diferencia en la temperatura de la cima de la regeneradora, ligeramente más elevada en el caso de PC-PZ, influyó significativamente en un aumento del volumen de CO₂ producido.

5.3 Resultados de escalado

Las herramientas de simulación de bloques calculadores y Design Specs, arrojaron los resultados registrados en la **Tabla 6**- El flujo másico de LEANIN generó resultados del factor L/G ligeramente más bajos que en los casos base, obteniendo una captura del 87%. El requerimiento del rehervidor, el cual suele ser utilizado para catalogar las plantas, fue de 51 MW para PZ y 96 MW para PC-PZ. Por último, los resultados de la reposición del solvente fueron satisfactorios para cerrar de manera efectiva el ciclo, pero en el caso PC-PZ la reposición de PC fue casi nula. Es apropiado recalcar que las demás condiciones de operación y dimensiones de equipos se dejaron de acuerdo con la naturaleza de los solventes y de la planta en Bellingham, respectivamente.

Tabla 6.

Resultados de escalado

Parámetro	PZ	PC-PZ	MEA
Requerimiento energético del rehervidor (MW)	51,73	96,10	69,99
Captura (% en masa)	0,87	0,87	0,90
L/G (kg/kg)	6,44	9,61	2,68
LEANIN (ton/h)	653,07	750,52	327,95
LEANFRSH (kg/h) *	35,85	104,77	6,12
CO2 producido (ton CO2/h)	53,07	53,12	53,88

Nota: * La reposición del solvente para los casos PZ y PC-PZ está solo representada por la cantidad de piperazina. Los datos de referencia de la MEA fueron adaptados de (Freguia, 2002)

Se destaca principalmente que el requerimiento energético del rehervidor en el caso PZ es inferior al de MEA, mientras que ocurre lo contrario en el caso PZ-PC. Además, para los dos casos estudiado los flujos máxicos LEANIN y LEANFRSH fueron considerablemente más altos que para la MEA.

5.4 Resultados del estudio económico e indicadores

El desarrollo de la metodología para el cálculo del CAPEX dio como resultado que el caso PC-PZ posee un valor total del CAPEX mayor que PZ, como se muestra en la **Tabla 7**.

De acuerdo con esto, se obtuvo en su distribución, para ambos casos, que más del 80% está representado por el costo capital de las torres. En el caso PZ, la porción del total que corresponde a los intercambiadores es menor que en el caso PC-PZ (**Figura 7**). Esto es debido a que, en la configuración de la torre de absorción, existe una relación L/G mayor para PC-PZ que para PZ, la cual sugiere que el área de transferencia en los intercambiadores debe ser mayor para lograr el mismo intercambio entre fluidos, es decir, equipos de mayor tamaño, y conjunto a ello, de mayor costo.

Por otro lado, Esta variable L/G influye directamente tanto en el costo de los intercambiadores como en el costo del solvente inicial, puesto que cuanto mayor sea, indica que más líquido será necesario para operar. En el caso PZ la cantidad de solvente que ingresa es mayor que en el caso PC-PZ, dado a su valor comercial elevado, cualquier aumento o disminución en la cantidad de ingreso representa un incremento directo en el costo capital del solvente inicial. Por esta razón, a pesar de contar con dos solventes en el caso PC-PZ, el costo total es inferior. Esto se debe a que el solvente PC tiene un valor comercial significativamente menor en comparación con el solvente PZ.

Tabla 7.

Resultados totales de CAPEX

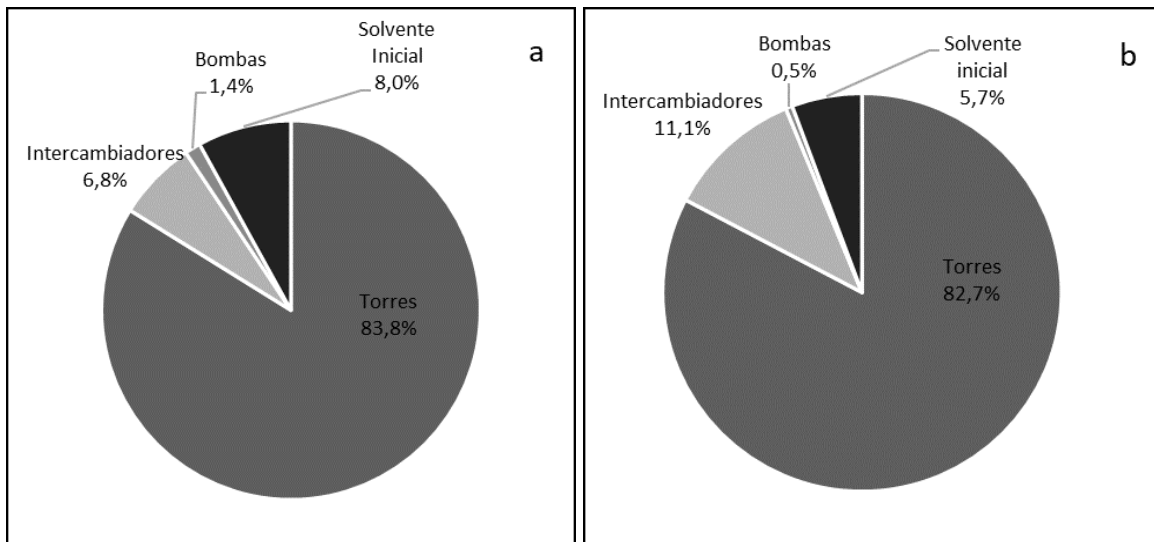
Solvente	PZ	PC-PZ
CAPEX (MMUSD/año)	\$56,96	\$57,32

Para los OPEX, el costo más representativo se atribuye al vapor de calentamiento requerido por el rehervidor, que demanda un gasto energético alto en la torre regeneradora (**Figura 8**). En el caso PC-PZ este requerimiento es aún más elevado por el hecho de que el PC presenta baja reactividad, lo cual implica una demanda de energía superior para lograr activarlo y conseguir así su separación de la mezcla.

El costo de reposición de la PZ es mayor en el caso PC-PZ, ya que su operación precisa una mayor cantidad de solvente para alcanzar la concentración sugerida. Esto también incide en el aumento del costo de agua de enfriamiento en el caso PC-PZ; dado que el sistema alberga una mayor cantidad de solvente, demandará que la cantidad de fluido de enfriamiento sea proporcionalmente mayor.

Figura 7.

Distribución de CAPEX

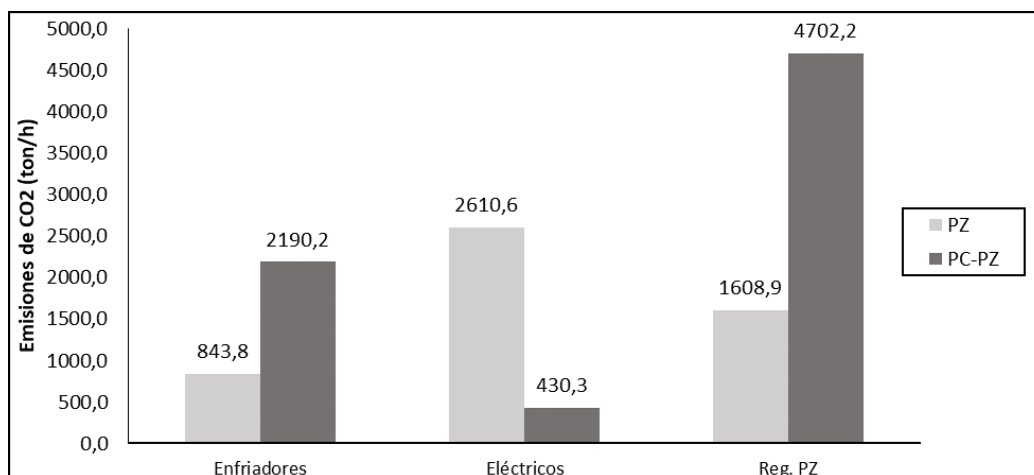


Nota: Resultados de distribución de CAPEX para: a) PZ b) PC-PZ

Finalmente, el costo de suministro eléctrico es mayor en el caso PZ por el hecho de que la torre regeneradora opera a una presión más alta que en el caso paralelo. En otras palabras, la resistencia al flujo que debe vencer la bomba es mayor para PZ que para PC-PZ.

Figura 8.

Resultados de OPEX

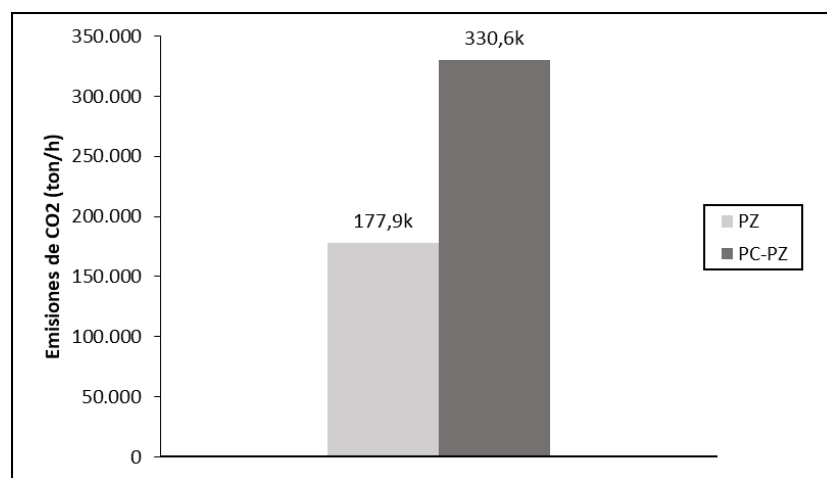


Emisiones

Del mismo modo que en el apartado anterior, la mayor cantidad de emisiones son atribuidas al rehervidor, teniendo en cuenta que las emisiones son proporcionales a cada actividad. Por consecuencia, el grafico de emisiones del rehervidor se muestra de manera separada (**Figura 9**).

Figura 9.

Emisiones de CO₂ asociadas al rehervidor



En el caso PZ se observa que, aunque el requerimiento de agua de enfriamiento sea mayor en magnitud que el suministro eléctrico asociado, las emisiones son más bajas para la misma actividad. Esto se explica porque el factor de emisión asociado al suministro eléctrico es mucho mayor que el del agua (generar un kilovatio-hora para electricidad emite más CO₂). Por otro lado, la piperazina conserva su tendencia de proporcionalidad entre emisiones y actividad (**Figura 10**).

Finalmente, se presentan en la **Tabla 8** los resultados de los indicadores más significativos para la evaluación económica y ambiental de los casos, allí se puede observar un mejor desempeño económico para el caso PZ y una menor cantidad de emisiones totales. El solvente PC-PZ muestra un costo de captura y abatimiento bastante alto.

Figura 10.

Emisiones de CO₂ asociadas a otros equipos

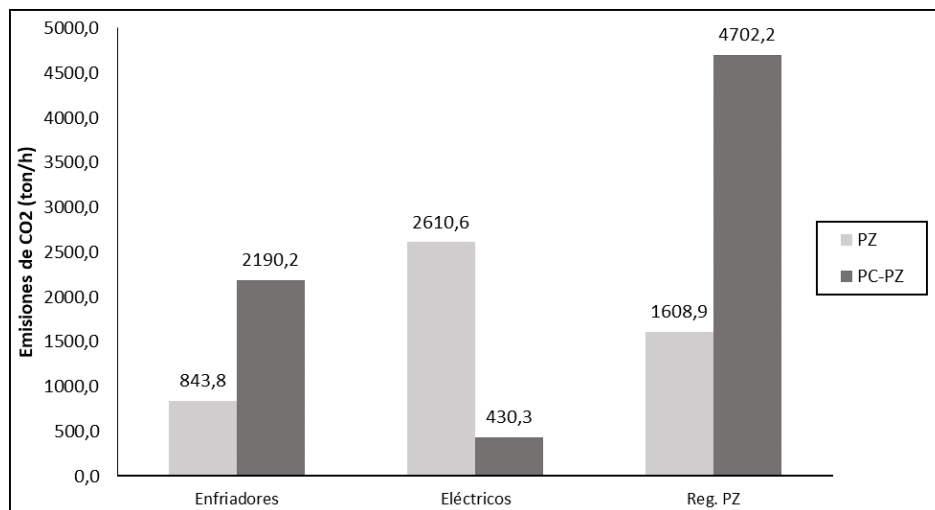


Tabla 8

Resultados de los principales indicadores económicos y ambientales

Indicador	PZ	PC-PZ	MEA (literatura)
Costo de captura (US\$/ton CO ₂)	\$49,57	\$72,33	--
Costo de CO ₂ evitado (US\$/ton CO ₂)	\$87,13	\$353,04	\$91,10 (Pedrozo et al., 2023)
Indicador energético (GJ/ton CO ₂)	3,51	6,51	4,68 (Freguia, 2002)
CAPEX (MMUS\$/año)	\$56,96	\$57,32	--
OPEX (MMUS\$/año)	\$9,42	\$19,05	--
Emisiones totales (ton CO ₂ /año)	183004,21	337919,45	--

5.5 Resultados del análisis de sensibilidad

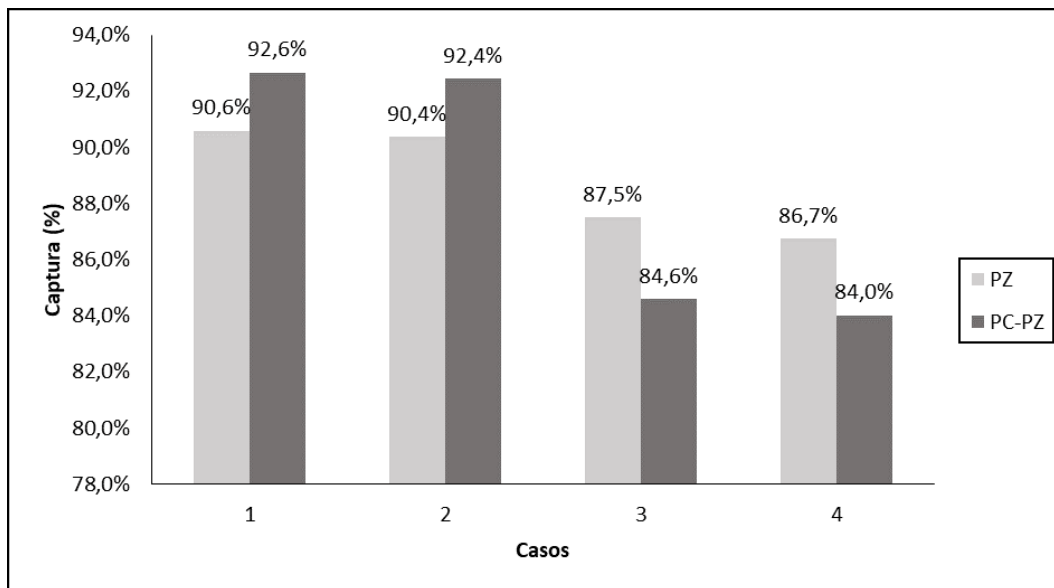
Es adecuado volver a mencionar que los escenarios 1 y 2 corresponden con un gas de chimenea bajo en CO₂, mientras que 3 y 4 representan un gas de chimenea rico en CO₂.

Las capturas de los casos están ligadas a la convergencia de la simulación. Los resultados muestran entonces un porcentaje de captura bajo para los casos 3 y 4 y alto en los casos 1 y 2 (**Error! Reference source not found.**). Además, la cantidad de CO₂ en las corrientes de FLUEGAS es un factor importante debido a que en los casos de baja captura se produce una gran

cantidad de CO₂ en términos másicos. Para el solvente PC-PZ la captura no pudo converger en el rango propuesto de 90% con un error de 3%, por lo cual fue necesario ampliar el margen de error.

Figura 11.

Análisis de sensibilidad en porcentaje de captura



En el caso PZ, la variable L/G aumentó en los casos ricos en CO₂ para mantener un porcentaje cercano al fijado en los bloques calculadores. Para lograr esto, fue requerida una mayor cantidad de líquido al ingreso de la torre, mientras que en PC-PZ tuvo ligeras variaciones porque el cambio en la captura fue significativo, es decir, la caída del porcentaje de captura hizo que no fuera necesario tanto solvente (ver **Figura 12**).

Para el solvente PC-PZ el requerimiento energético del rehervidor muestra un aumento muy leve para los casos 3 y 4, pero la producción de CO₂ aumenta casi al doble (**Tabla 9**), es por esto que el indicador energético disminuye (**Figura 13**). Mientras tanto, el solvente PZ presenta un requerimiento del rehervidor que aumenta el doble en los casos 3 y 4 pero, asimismo, la

producción de CO₂ también se duplica en menor proporción (**Tabla 10**), por lo que se ve un aumento de forma suavizada.

Figura 12.

Análisis de sensibilidad en parámetro L/G

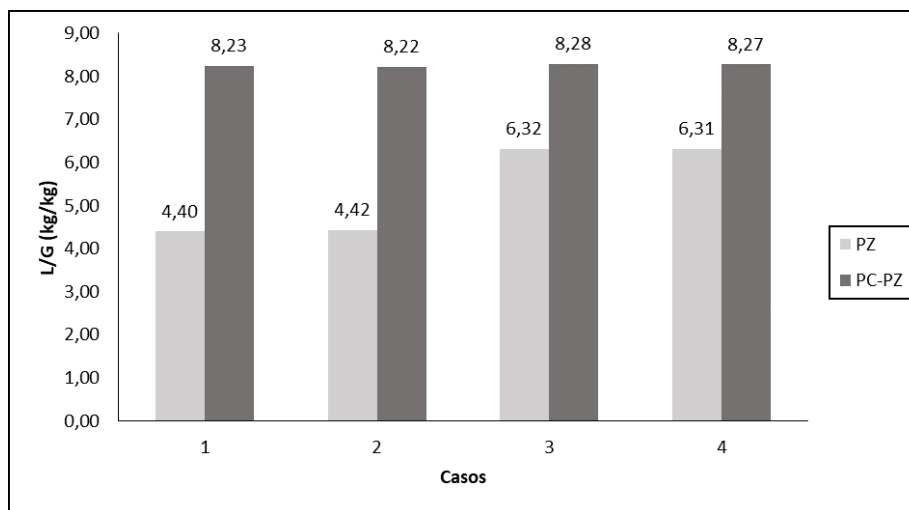


Tabla 9.

Resultados análisis de sensibilidad de algunos parámetros para PZ

Variable	Casos			
	1	2	3	4
Captura (%)	90,6%	90,4%	87,5%	86,7%
Requerimiento del rehervidor (MWh)	31,96	33,54	59,34	60,92
CO ₂ producido (ton/h)	35,57	36,40	61,46	62,32
Indicador energético (GJ/ton)	3,23	3,32	3,48	3,52
L/G (kg/kg)	4,40	4,42	6,32	6,31

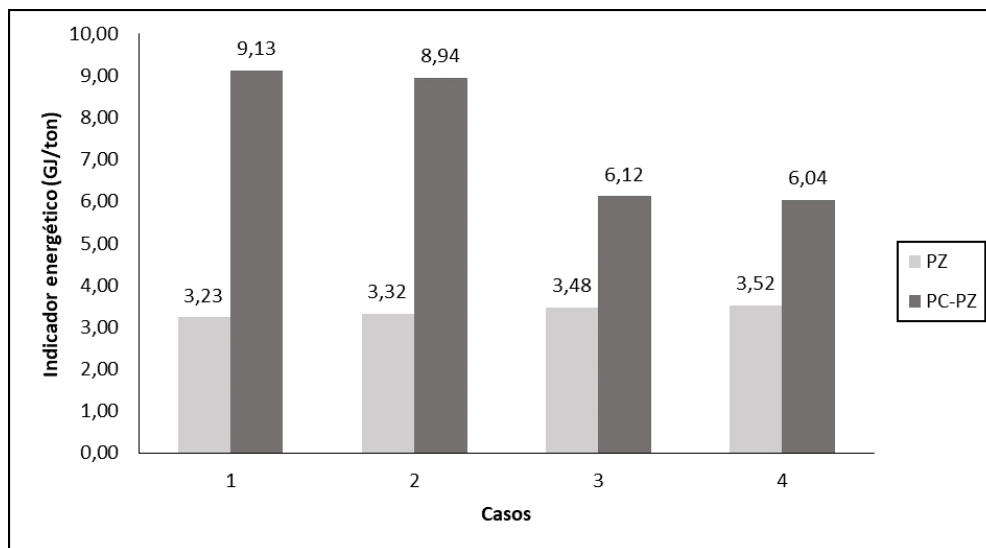
Tabla 10.

Resultados de análisis de sensibilidad de algunos parámetros para PC-PZ

Variable	Casos			
	1	2	3	4
Captura (%)	92,6%	92,4%	84,6%	84,0%
Requerimiento del rehervidor (MW)	92,35	92,58	101,08	101,26
CO ₂ producido (ton/h)	36,41	37,26	59,45	60,38
Indicador energético (GJ/ton)	9,13	8,94	6,12	6,04
L/G (kg/kg)	8,23	8,22	8,28	8,27

Figura 13.

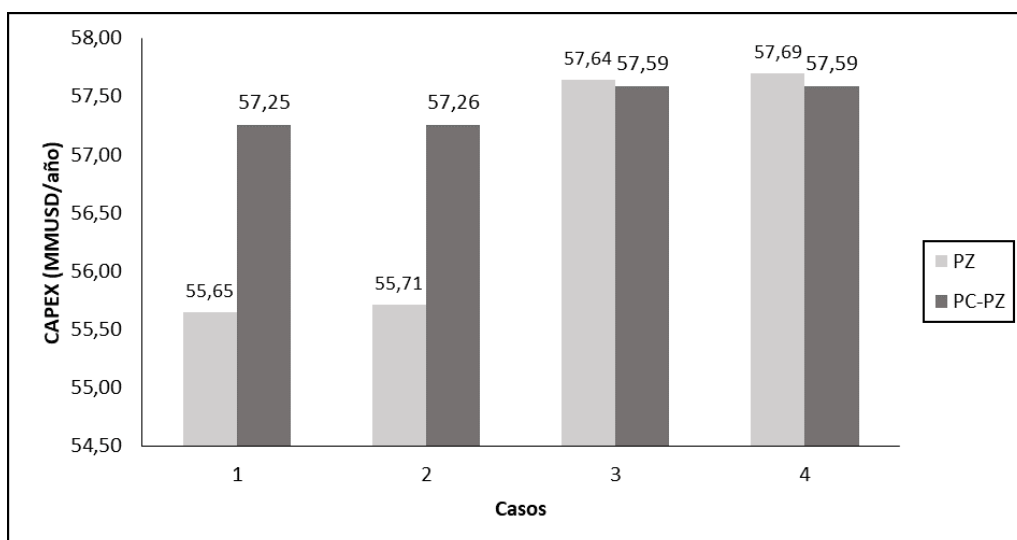
Análisis de sensibilidad de indicador energético.



El análisis de sensibilidad del CAPEX muestra un ligero incremento para los casos en los que la cantidad de CO₂ presente en el gas es mayor, debido a equipos de intercambio de calor de mayor capacidad. Este incremento también se ve influenciado por el costo de solvente inicial que como ya se ha explicado, es mayor en el escenario donde solo hay presencia de PZ (**Figura 14**).

Figura 14.

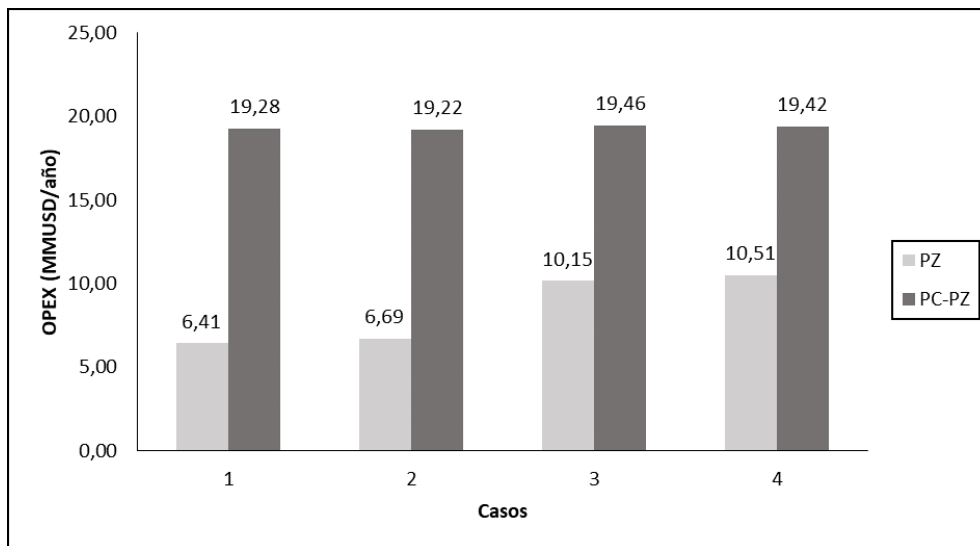
Análisis de sensibilidad de los CAPEX



En el caso de los OPEX, los costos se mantuvieron casi invariables para el solvente PC-PZ donde el incremento en el requerimiento energético del rehervidor fue muy ligero. Mientras que para el solvente PZ, esta demanda de energía se duplicó, hecho que se ve reflejado en la **Figura 15**.

Figura 15.

Análisis de sensibilidad de los OPEX



A continuación, se muestran los resultados de la evaluación económica en los diferentes escenarios tanto para el solvente PZ como el PC-PZ. Cada uno se muestra en un gráfico diferentes (**Figura 16** y **Figura 17**) por consecuencia de que el PC arrojó resultados poco favorables para aquellos escenarios en los que se tiene baja presencia de CO₂ en el gas de entrada. En estos, se muestran valores negativos en los costos de abatimiento de CO₂, lo cual significa que la cantidad de CO₂ que emite la planta es mayor que la cantidad capturada.

Por otro lado, es favorable destacar que para los casos en los que gas de chimenea es rico en CO₂ los costos de captura y abatimiento tuvieron una reducción considerable en comparación con los casos originales presentados en el estudio económico, donde se utilizó el gas de chimenea que administraba la planta en Bellingham. El costo de abatimiento de CO₂ para PZ tuvo una

disminución de 87.13 USD/ton CO₂ hasta 77.53 USD/ton CO₂ lo cual representa una reducción del 11%. Mientras tanto, para PC-PZ se redujo en un 29% desde 353,04 USD/ton CO₂ hasta 250,49 USD/ton CO₂. Los datos económicos para los distintos casos se muestran en la **Error! Reference source not found.** y **Error! Reference source not found.**.

Figura 16.

Análisis de sensibilidad para el costo de captura y abatimiento para PZ

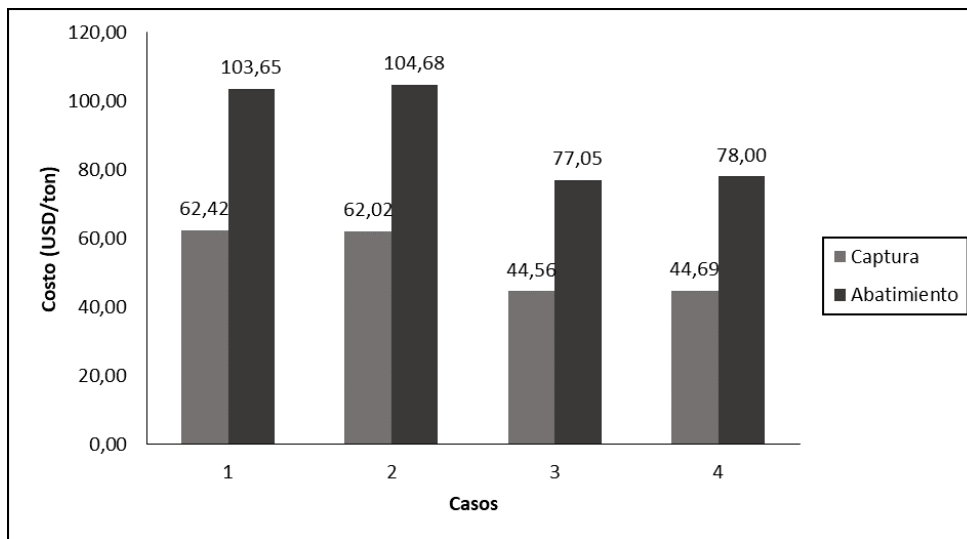


Figura 17.

Análisis de sensibilidad para el costo de captura y abatimiento para PC-PZ

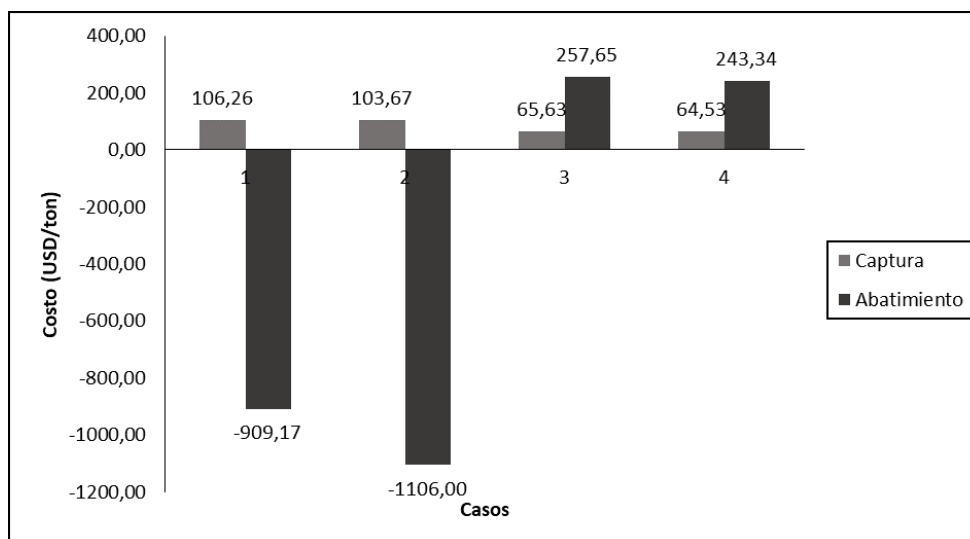


Tabla 11.

Resultados de análisis de sensibilidad de principales parámetros de estudio económico para PZ

Variable	Casos			
	1	2	3	4
Costo de captura (USD/ton)	62,42	62,02	44,56	44,69
Costo de abatimiento (USD/ton)	103,65	104,68	77,05	78,00
CAPEX (MMUSD/año)	55,65	55,71	57,64	57,69
OPEX (MMUSD/año)	6,41	6,69	10,15	10,51

Tabla 12.

Resultados de análisis de sensibilidad de principales parámetros de estudio económico para PC-PZ

Variable	Casos			
	1	2	3	4
Costo de captura (USD/ton)	106,26	103,67	65,63	64,53
Costo de abatimiento (USD/ton)	-909,17	-1106,00	257,65	243,34
CAPEX (MMUSD/año)	57,25	57,26	57,59	57,59
OPEX (MMUSD/año)	19,28	19,22	19,46	19,42

5 Conclusiones.

La validación mediante Aspen PLUS® V12.1 describió de manera precisa las características de las plantas piloto estudiadas, exhibiendo resultados consistentes con los informados en diversas investigaciones. Se observaron errores del 4,33 % para PZ y del 4,23 % para PC-PZ para los datos generales de validación.

Escalando el proceso a dimensiones industriales, el valor total del CAPEX está directamente vinculado con el costo capital de las torres y el del OPEX con el gasto energético en

el rehervidor. El requerimiento energético cataloga las plantas de acuerdo con su tamaño en 51,73 MW para PZ y 96,10 MW y PC-PZ. La naturaleza del solvente PC-PZ hace que su requerimiento energético sea más alto, teniendo un 3,51 GJ/ton CO₂ para PZ y 6,51 para PC-PZ, en comparación con 4,68 GJ/ton CO₂ para MEA.

Tanto el costo de captura como el costo de CO₂ abatido muestran una diferencia notable para cada solvente con respecto del OPEX. Se obtuvo un costo de captura de 49,57 y 72,33 USD/ton CO₂ para PZ y PC-PZ respectivamente, obteniendo una captura del 87% para ambos casos. Fue reportado un rendimiento superior por parte de PZ, puesto que sus costos operativos disminuyen a la par que logra capturar gran parte del CO₂ presente en el gas de entrada. A su vez, el PC-PZ no muestra ser una alternativa viable ya que su baja reactividad eleva los costos operativos de manera sustancial, haciendo que, por ejemplo: al tratar gases con baja concentración de CO₂, la cantidad de gas capturado es tan baja que la emisión resultante de la actividad de la planta es incluso mayor.

Los análisis de sensibilidad han servido de prueba para evaluar el desempeño de los solventes en suelo colombiano. Teniendo esto en cuenta, fue posible observar que su comportamiento mejora significativamente cuando el gas de entrada posee altas concentraciones de CO₂. De acuerdo con ello, los valores iniciales obtenidos para el costo de abatimiento fueron de 87,13 USD/ton CO₂ para PZ y 353,04 USD/ton CO₂ para PC-PZ; estos costos se redujeron en un 11% y un 29% para cada caso, respectivamente. Adicionalmente, cabe destacar que en relación con la MEA, cuyo costo de abatimiento es de 91,10 USD/ton CO₂, se observa que la PZ presenta mejoras tanto desde un punto de vista económico como ambiental, en contraste con el PC-PZ, el cual no exhibe tales mejorías.

En resumen, la PZ emerge como una elección propicia como solvente para la captura de carbono, en contraste con el PC, cuyos resultados no se presentan como una opción atractiva para este propósito. Sin embargo, se anticipa que, mediante una integración energética más eficiente y una optimización adecuada, el rendimiento del PC podría mejorar significativamente en futuras aplicaciones de captura de carbono.

Referencias bibliográficas

- AspenTech. (2013). *Aspen Physical Property System*. Cambridge.
- Carlson, E. C. (1996). Don't Gamble With Physical Properties For Simulations. *Chemical Engineering Progress*. <https://www.semanticscholar.org/paper/Don%27t-Gamble-With-Physical-Properties-For-Carlson/fe54e7374b25ced213604bae94378a8c355b1a6b>
- Chen, E. (2007). *Carbon Dioxide Absorption into Piperazine Promoted Potassium Carbonate using Structured Packing* [Tesis de doctorado, The University of Texas at Austin]. <https://sites.utexas.edu/rochelle/files/2015/02/Chen-Dissertation.pdf>
- Chen, E., Fulk, S., Beaudry, M., Lin, Y.-J., Sachde, D., Zhang, Y., Stevens, K., Nielsen, P., Walters, M., Liu, C.-T., Wu, Y., Akinpelumi, K., Gao, T., Selinger, J., Suresh, A., Rochelle, G. T., Fisher, K., Sexton, A., Dombrowski, K., ... Bernau, M. (2019). *Evaluation of Concentrated Piperazine for CO₂ Capture from Coal-Fired Flue Gas (Final Report, REV0)*. <https://doi.org/10.2172/1512446>
- Chuenphan, T., Yurata, T., Sema, T., & Chalermssinsuwan, B. (2022). Techno-economic sensitivity analysis for optimization of carbon dioxide capture process by potassium carbonate solution. *Energy*, 254, 124290. <https://doi.org/10.1016/J.ENERGY.2022.124290>
- Cullinane, J. T. (2005). *Thermodynamics and Kinetics of Aqueous Piperazine with Potassium Carbonate for Carbon Dioxide Absorption*.
- DANE. (2006). *Preguntas frecuentes, comercio exterior*. https://www.dane.gov.co/files/faqs/faq_comex.pdf
- LEY 2169, (2021). <https://acmineria.com.co/sitio/wp-content/uploads/2022/01/Ley-N0002169-de-2021-1.pdf>

- Finlayson, B. A. (2012). Appendix C: Hints when Using Aspen Plus®. En *Introduction to Chemical Engineering Computing* (pp. 321–334). John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1002/9781118309599.app3>
- Frailie, P. T. (2014). *Modeling of carbon dioxide absorption/stripping by aqueous methyldiethanolamine/piperazine* [Tesis de doctorado, The University of Texas at Austin]. <https://repositories.lib.utexas.edu/handle/2152/25019>
- Freguia, S. (2002). *Modeling of CO₂ Removal from Flue Gases with Monoethanolamine* [Tesis de maestría, 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>
- Gil Chaves, I., Guevara, J., Leguizamón Robayo, A., & García, J. (2011). *Análisis y Simulación de Procesos en Ingeniería Química* (Primera edición). Universidad Nacional de Colombia.
- Gobierno de Colombia. (2021). *Estrategia Climática de Colombia de Largo Plazo E2050 para cumplir con el Acuerdo de París*. MinAmbiente, DNP, Cancillería, AFD, Expertise France, WRI. <https://carbononeutral.minambiente.gov.co/wp-content/uploads/2021/06/E2050-.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. 1. Chemical Absorption and Membrane Processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(48), 15642–15664. <https://doi.org/10.1021/ie301571d>
- Hilliard, M. D. (2005). *A Predictive Model for Aqueous Potassium Carbonate/Piperazine/Ethanolamine for Carbon Dioxide Removal from Flue Gas*. <https://www.ut-ie.com/s/samples/marcus.pdf>

- ICARUS corporation. (1998). *ICARUS reference: Vol. tercer volumen*.
<https://instruct.uwo.ca/engin-sc/cbe497/Doc/Icarus/ir10.pdf>
- IDEAM, Fundación Natura, PNUD, MADS, DNP, & CANCELLEERÍA. (2022). *Informe del Inventario Nacional de Gases Efecto Invernadero 1990—2018 y Carbono Negro 2010—2018 de Colombia* (Tercer informe bienal de actualización de cambio climático, BUR3. Dirigido a la convención Marco de las Naciones unidas sobre Cambio Climático, IDEAM, Fundación Natura, PNUD, MADS, DNP, CANCELLEERÍA, FMAM).
<https://unfccc.int/sites/default/files/resource/Annex%20BUR3%20COLOMBIA.pdf>
- IEA. (2020). *Energy Technology Perspectives 2020*. <https://www.iea.org/reports/energy-technology-perspectives-2020>
- Jordano, A. de T., Martínez, A. G., Moreno, J. E. A., Jiménez, C. G., López, M. A., & Abellán, M. V. (2013). *Servicio de Protección Ambiental (SEPA) Vicerrectorado de Coordinación Institucional e Infraestructuras Universidad de Córdoba Septiembre 2.014*.
- Madeddu, C., Errico, M., & Baratti, R. (2019). *Co2 capture by reactive absorption-stripping*. Springer Berlin Heidelberg.
- Madejski, P., Chmiel, K., Subramanian, N., & Kuś, T. (2022). Methods and Techniques for CO2 Capture: Review of Potential Solutions and Applications in Modern Energy Technologies. *Energies*, 15(3), Article 3. <https://doi.org/10.3390/en15030887>
- Mumford, K. A., Smith, K. H., Anderson, C. J., Shen, S., Tao, W., Suryaputradinata, Y. A., Qader, A., Hooper, B., Innocenzi, R. A., Kentish, S. E., & Stevens, G. W. (2012). Post-combustion Capture of CO2: Results from the Solvent Absorption Capture Plant at Hazelwood Power Station Using Potassium Carbonate Solvent. *Energy & Fuels*, 26(1), 138–146.
<https://doi.org/10.1021/ef201192n>

- Ochedi, F. O., Yu, J., Yu, H., Liu, Y., & Hussain, A. (2021). Carbon dioxide capture using liquid absorption methods: A review. *Environmental Chemistry Letters*, *19*(1), 77–109. <https://doi.org/10.1007/s10311-020-01093-8>
- Oexmann, J., & Kather, A. (2009). Post-combustion CO₂ capture in coal-fired power plants: Comparison of integrated chemical absorption processes with piperazine promoted potassium carbonate and MEA. *Energy Procedia*, *1*(1), 799–806. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.106>
- Otitoju, O., Oko, E., & Wang, M. (2021). Technical and economic performance assessment of post-combustion carbon capture using piperazine for large scale natural gas combined cycle power plants through process simulation. *Applied Energy*, *292*, 116893. <https://doi.org/10.1016/J.APENERGY.2021.116893>
- Palacios, N. S. (2023). *Process and techno-economic analysis of a compact CO₂ capture technology*.
- Pedrozo, A., Valderrama-Ríos, C. M., Zamarripa, M., Morgan, J., Osorio, J. P., Uribe, A., Díaz, M. S., & Biegler, L. T. (2023). *Equation-Oriented Optimization Applied to the Optimal Design of Carbon Capture Plants Using Rigorous Models*. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c04668>
- Plaza, J. M. (2012). *Modeling of carbon dioxide absorption using aqueous monoethanolamine, piperazine and promoted potassium carbonate* [Tesis de doctorado, The University of Texas at Austin]. <https://repositories.lib.utexas.edu/handle/2152/ETD-UT-2012-05-4952>
- Rochelle, G. (2023). *Texas Carbon Management Program*. The University at Texas Austin. <https://sites.utexas.edu/rochelle/>

- Roussanaly, S. (2019). Calculating CO₂ avoidance costs of Carbon Capture and Storage from industry. *Carbon Management*, 10(1), 105–112.
<https://doi.org/10.1080/17583004.2018.1553435>
- Seider, W. D. (2017). *Product and process design principles: Annual Costs, Earnings, and Profitability Analysis* (3rd ed.). John Wiley.
- Wagener, D. H. V. (2011). *Stripper modeling for CO₂ removal using monoethanolamine and piperazine solvents* [Tesis de doctorado, The University of Texas at Austin].
<https://repositories.lib.utexas.edu/handle/2152/ETD-UT-2011-08-4302>
- Yuan, Y., & Rochelle, G. T. (2019). CO₂ absorption rate and capacity of semi-aqueous piperazine for CO₂ capture. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 85, 182–186.
<https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2019.03.007>
- Zhang, L., Xie, J. L., & Fu, D. (2018). Corrosion behavior of carbon steel in the CO₂ absorption process using MEA activated K₂CO₃ aqueous solutions. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 199, 042041. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/199/4/042041>

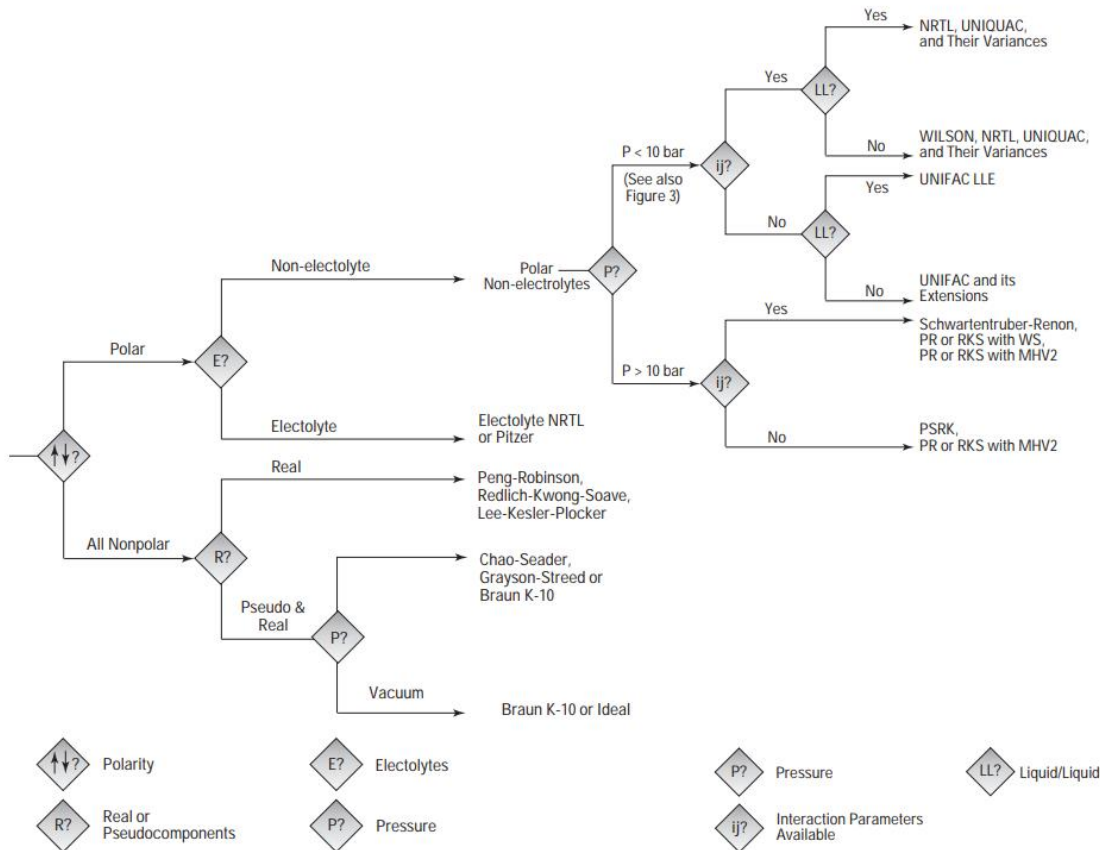
Apéndices

Apéndice A: Modelo de Aspen

El modelo de propiedades escogido fue el ELECNRTL (electrolyte non-random two-liquid), siguiendo el árbol de decisión mostrado en la **Figura 18**.

Figura 18.

Arbol de decisión de modelo de propiedades



Nota: Adaptado de (Carlson, 1996)

El ELECNRTL es el método de propiedades de electrolitos más versátil. Puede manejar concentraciones muy bajas y muy altas en sistemas acuosos y de solventes mixtos. Es importante

mencionar que ELECNRTL mantiene total coherencia con el método NRTL-RK: los cálculos de las interacciones moleculares siguen el mismo procedimiento y ambos aplican la ecuación de estado de Redlich-Kwong para las propiedades en fase de vapor, pero tienen una ligera diferencia en los cálculos de las reglas de mezcla (AspenTech, 2013). Se optó por el modelo ELECNRTL por su común uso en la literatura referenciada.

Este modelo para electrolitos requiere de los parámetros mostrados en la **Tabla 13**.

Tabla 13.

Parámetros requeridos para el modelo ELECNRTL

Thermodynamic Properties	Models	Parameter Requirements
Vapor mixture		
Fugacity coefficient, Density	Redlich-Kwong	TC,PC
Enthalpy, Entropy, Gibbs energy	General pure component ideal gas heat capacity correlation	CPIG or CPIGDP or CPIXP1,CPIXP2,CPIXP3
	Redlich-Kwong	TC,PC
Liquid mixture		
Fugacity coefficient, Gibbs energy	Electrolyte NRTL	Mol.: CPDIEC Ion: RADIUS Mol.-Mol.: NRTL Mol.-Ion, Ion-Ion: GMELCC, GMELCD, GMELCE,GMELCN PLXANT
	General Pure Component Liquid Vapor Pressure	
	Henry's constant	Solvent: VC, Mol.solute-solvent: HENRY
	Brelvi-O'Connell	Solvent: TC, PC, (ZC or RKTZRA), Mol.solute: (VC or VLBROC)
Enthalpy, Entropy	General pure component ideal gas heat capacity	CPIG or CPIGDP
	General Pure Component Heat of Vaporization	Solvent: TC, (DHVLWT or DHVLDP)

Thermodynamic Properties	Models	Parameter Requirements
	Infinite dilution heat capacity / Criss-Cobble ElectrolyteNRTL	Ions: CPAQ0 or Ions: IONTYP, S025C Mol.:CPDIEC
		Ion:RADIUS Mol.-Mol.:NRTL Mol.-Ion,Ion-Ion:GMELCC, GMELCD GMELCE, GMELCN
Density	Rackett/Clarke	Mol.: TC, PC, (VC or VCRKT), (ZC or RKTZRA) Ion-ion: VLCLK
Solid pure (and mixture)		
Enthalpy, Entropy	General Pure Component Solid Heat Capacity	CPSP01 or CPSXP1 to CPSXP7
Density	General Pure Component Solid Molar Volume	VSPOLY

Nota: Adaptado de (AspenTech, 2013)

Para el modelado de las columnas se utilizó el método riguroso RadFrac. Los métodos rigurosos modelan las columnas como un grupo de ecuaciones MESH (Material, Equilibrium, Summation and Heat equations), las cuales son resueltas para calcular las condiciones de operación. RadFrac™ es el módulo más comúnmente utilizado por su capacidad para simular todo tipo de operación de fraccionamiento vapor-líquido (Gil Chaves et al., 2011).

En el modelo RadFrac se presentan dos metodologías distintas: el modo de etapas en equilibrio y el modo Rate-Based Para absorción reactiva el modo más usado es el Rate-Based. El modo Rate-Based se basa en la teoría de la doble película de Lewis y Whitman, teniendo en cuenta la cinética y la transferencia de masa que ocurre en la interfase del líquido y el gas (Madeddu et al.,

2019). En la **Tabla 14** se encuentra la especificación de cálculo dentro de RadFrac se hizo a partir de lo expuesto por Otitoju (Otitoju et al., 2021).

Tabla 14.

Especificación de cálculo en torres RadFrac

Parámetro	Elección
Cálculo en torres	Rate-Based
Flujo	VPlug-Pavg
Transferencia de masa	Hanley-St10
Factor de área interfacial	Hanley-St10
Transferencia de calor	Chilton and Colburn
Fase líquida	Discretize film (20)
Fase vapor	Consider film
Holdup	Brf-92

Nota: Adaptado de (Otitoju et al., 2021)

Tabla 15.

Propiedades de empaques

Parámetro	PZ	PC-PZ
Nombre de empaque	Mellapak 2X	Flexipac SQ Style 20
Area de superficie (m ³ /m ²)	240	213
Void Fraction	0,92	0,91
Ángulo de corrugación	60°	50°

Nota: El empaque Flexipac SQ Style 20 no se encuentra en Aspen PLUS[®], así que se utilizó el empaque Flexipac 1Y, modificando sus propiedades. Adaptado de (Chen, 2007; Plaza, 2012)

Tabla 16.

Especificaciones de Rate-Based y convergencia en torres de absorción

Parámetro	PZ	PC/PZ
Etapas teóricas	28	50
Factor de área interfacial	1	2,5
Parámetro de homotopía	1	2
Iteraciones de homotopía	5	2
Eqrnx-form	Standard	Logarithmic
Var-trans	Standard	Exponential
Damping level	Severe	Severe

Tabla 17.

Especificaciones de Rate-Based y convergencia en torres de regeneración

Parámetro	PZ	PC/PZ
Etapas teóricas	30	21
Factor de área interfacial	1,17	0,37
Parámetro de homotopía	1	2
Iteraciones de homotopía	0	2
Eqrnx-form	Standard	Standard
Var-trans	Standard	Standard
Damping level	None	None

Apéndice B: Parámetros del modelo

La simulación se realizó a partir de la base de datos de Aspen (Aspen Physical Property System databanks), que cuenta con una extensa variedad de parámetros para componentes puros, interacciones binarias y pares de electrolitos (AspenTech, 2013). No obstante, este banco de datos presentaba un elevado margen de error durante el proceso de validación, dado que las propiedades no se ajustaban adecuadamente a los casos estudiados. En este sentido, algunos de los parámetros se extrajeron de la literatura (ver **Tabla 18** y **Tabla 19**).

Tabla 18.

Parámetros del modelo PZ 5 m

Parámetro ASPEN	Unidades	Compuesto	Valor
NRTL 1		PZ-H2O	-0,34
NRTL 1		H2O-PZ	-8,23
NRTL 3		PZ-H2O	0,17
HENRY 1	N/sqm	PZ-H2O	28,2
HENRY 2 / 313	N/sqm	PZ-H2O	-24,6
CPIG 1	J/kmol.K	PZ	-5,29E+05
CPIG 2 * 313	J/kmol.K	PZ	1,10E+06
IONMUB 1	cum/kmol	PZH+	3,29
IONMUB 1	cum/kmol	PZCOO-2	-11,7
MUKIJ 1		H2O-PZ	714
MULIJ 1		H2O-PZ	430
MULIJ 1		H2O-PZ	659
MUKIJ 1		H2O-HPZCOO	91,9
MUKIJ 2		H2O-HPZCOO	-78,8
MULIJ 1		H2O-HPZCOO	98
MULIJ 2		H2O-HPZCOO	-81,2
RKTZRA 1		PZ	0,265
RKTZRA 1		CO2	0,168
RKTZRA 1		HPZCOO	0,194
VCRKT 1	cum/kmol	PZ	0,31
VLCLK	cum/kmol	PZH+-PZCOO-	0,134
VLCLK	cum/kmol	PZH+-HCO3-	0,427
VLCLK	cum/kmol	PZH-PZCOO-2	0,47
VLCLK	cum/kmol	PZH+-PZCOO-	0,153
VLCLK	cum/kmol	PZH+-HCO3-	-2,34
VLCLK	cum/kmol	PZH-PZCOO-2	-0,967
DGAQFM	J/kmol	HPZCOO	-2,73E+08
DHAQFM	J/kmol	HPZCOO	-5,20E+08
DGFORM	J/kmol	HPZCOO	-2,16E+08
DHFORM	J/kmol	HPZCOO	-5,20E+08
CPIG 1	J/kmol.K	HPZCOO	77,3
CPIG 2	J/kmol.K	HPZCOO	-2,49E-05
DGAQFM	J/kmol	PZH+	9,48E+07
DHAQFM	J/kmol	PZH+	-1,00E+08
CPAQ0 1	J/kmol.K	PZH+	-4,80E+05
CPAQ0 2	J/kmol.K	PZH+	2120,00

Nota: Adaptado de (Frailie, 2014)

Tabla 19.
Parámetros del modelo 5 m K⁺ / 2.5 m PZ

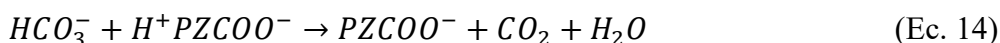
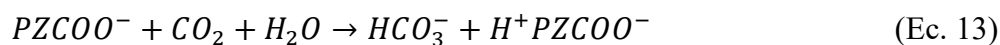
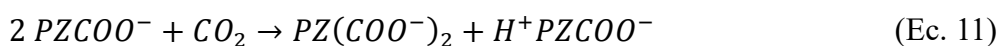
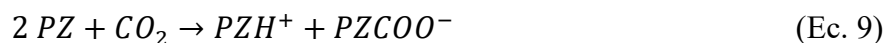
Parámetro ASPEN	Unidades	Compuesto	Valor
DHFORM	kcal/mol	H ₂ O	-57,8
DHFORM	kcal/mol	PZ	3,917
DHFORM	kcal/mol	H+PZCOO	-135,066
DHVLB	kcal/mol	H ₂ O	9,717
DHVLB	kcal/mol	PZ	9,999
DHVLB	kcal/mol	H+PZCOO	0
DHAQFM	kcal/mol	H ₃ O ⁺	-68,269
DHAQFM	kcal/mol	HCO ₃	-165,279
DHAQFM	kcal/mol	PZH ⁺	-30,943
DHAQFM	kcal/mol	PZCOO	-123,797
DHAQFM	kcal/mol	PZ(COO) ₂	-226,947
CPAQ0/1	J/kmol-K	K ⁺	-342374,53
RKTZRA 1		PZ	0,2665
VLCLK/1	cum/kmol	PZH ⁺ OH ⁻	-0,4289
VLCLK/1	cum/kmol	PZH ⁺ CO ₃ ²⁻	0,1963
VLCLK/1	cum/kmol	PZH ⁺ HCO ₃ ⁻	-1,3256
VLCLK/2	cum/kmol	PZH ⁺ HCO ₃ ⁻	7,4769
VLCLK/1	cum/kmol	PZH ⁺ PZCOO ⁻	0,4545
VLCLK/1	cum/kmol	K ⁺ OH ⁻	0,2616
VLCLK/2	cum/kmol	K ⁺ OH ⁻	-1,9636
VLCLK/1	cum/kmol	K ⁺ CO ₃ ²⁻	0,0104
VLCLK/2	cum/kmol	K ⁺ CO ₃ ²⁻	0,1246
VLCLK/1	cum/kmol	K ⁺ HCO ₃ ⁻	0,0174
VLCLK/2	cum/kmol	K ⁺ HCO ₃ ⁻	0,0996
VLCLK/1	cum/kmol	K ⁺ PZCOO ⁻	0,0011
VLCLK/1	cum/kmol	K ⁺ PZ(COO ⁻) ₂	0,1210
ANDKIJ/1		PZ H ₂ O	-198,4
ANDKIJ/2		PZ H ₂ O	69824
ANDKIJ/1		PZ H ₂ O	4269
ANDKIJ/2		PZ H ₂ O	-1399414
IONMUB/1	cum/kmol	PZCOO ⁻	0,7494
IONMUB/1	cum/kmol	PZ(COO ⁻) ₂	2,1693
IONMUB/1	cum/kmol	HCO ₃ ⁻	0,1892
IONMUB/1	cum/kmol	OH ⁻	3,0562
IONMUB/1	cum/kmol	PZH ⁺	-0,7385
IONMUB/1	cum/kmol	CO ₃ ²⁻	0,6199

Nota: Adaptado de (Chen, 2007)

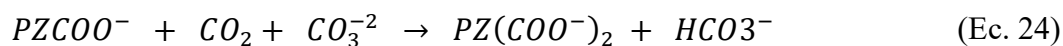
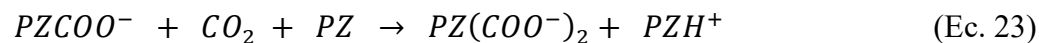
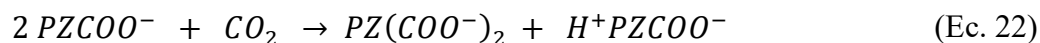
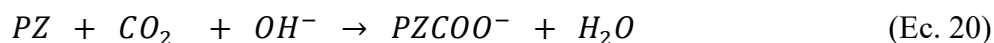
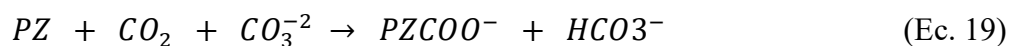
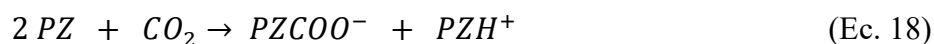
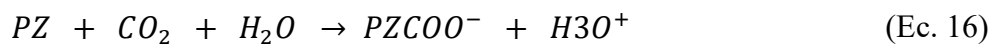
Apéndice C: Reacciones de la torre de absorción

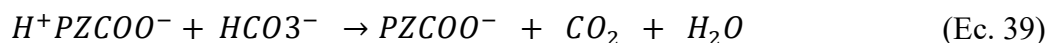
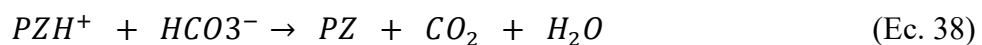
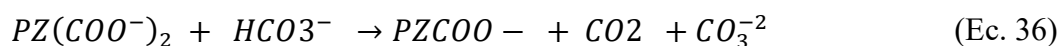
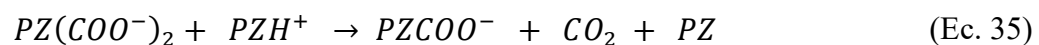
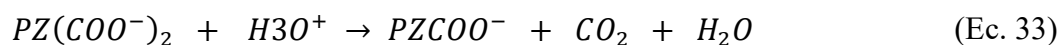
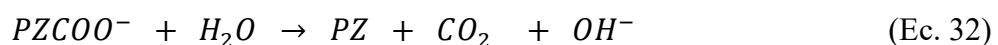
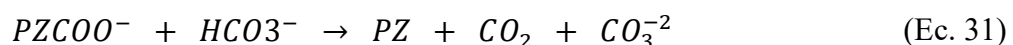
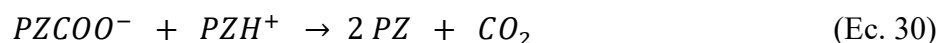
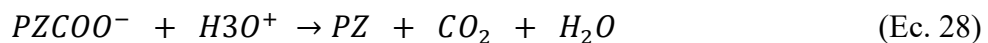
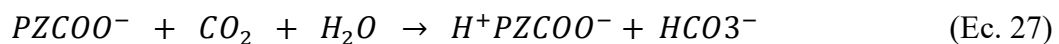
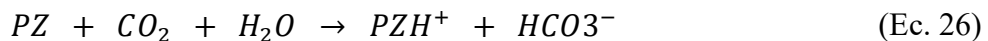
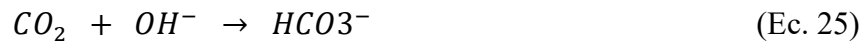
El modelamiento de las reacciones cinéticas fue desarrollado por Cullinane para ambos casos (Cullinane, 2005), y fueron modificadas por Plaza para el caso de PZ (ver Ec. 9-15) y por Chen para el caso de PC-PZ (ver Ec. 16-39) ((Chen, 2007; Plaza, 2012)).

PZ



PC-PZ





La **ecuación 40** muestra la forma en la que se expresa la velocidad de cada reacción.

$$\text{Kinetic factor} = ke^{-\left(\frac{E}{R}\right)\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_0}\right)} \quad (\text{Ec. 40})$$

Donde k es el factor propio de la reacción cuyas unides dependen de las concentraciones involucradas, T_0 corresponde a la temperatura de referencia de 298,15 K, E es la energía de activación en (J/kmol) y R es la constante de gases ideales en (J/mol.K). Los valores de k y E se encuentran registrados en la **Tabla 20**,

Tabla 21 y Tabla 22.

Tabla 20.

Factores cinéticos de ecuaciones para 5 m PZ

Ecuación	<i>k</i>	<i>E</i> (J/kmol)
9	3,00E+09	32042
10	1843	102455
11	2,85E+09	32042
12	1854	940594
13	21951,76	49000
14	947,54	84471

Nota: Adaptado de (Plaza, 2012)

Tabla 21.

Factores cinéticos de ecuaciones directas para 5 m K+/ 2.5 m PZ

Ecuación	Reacción	$K_f \cdot 10^{10}$	E_f (KJ/kmol)	n_f	$E_A, 40^\circ\text{C}$ (KJ/kmol)
16	PZ - H ₂ O	0.84	-17619	17.25	26202
17	PZ - PZCOO	1.87	-35394	25.70	29898
18	PZ - PZ	3.62	-116263	44.43	-3407
19	PZ - CO ₃ ²⁻	39.33	-54002	36.07	37626
20	PZ - OH	46.75	-31303	23.83	29229
21	PZCOO - H ₂ O	0.41	63251	-1.47	59507
22	PZCOO - PZCOO	1.87	45476	6.98	63202
23	PZCOO - PZ	3.63	-35394	25.70	29898
24	PZCOO - CO ₃ ²⁻	19.36	26868	17.35	70931
25	CO ₂ - OH (HCO ₃ ⁻)	9.30*10-4	77495	-3.05	69746
26	PZ-CO ₂ (HCO ₃ ⁻)	2.68*10-6	-5086	17.55	39490
27	PZCOO - CO ₂ (HCO ₃ ⁻)	1.98*10-6	75784	-1.18	72794

Nota: Adaptado de (Chen, 2007)

Tabla 22.

Factores cinéticos de ecuaciones inversas para 5M K+/ 2.5M PZ

Ecuación	Reacción	Kr * 10 ¹⁰	Er (KJ/kmol)	nr	E _{A,40°C} (KJ/kmol)
28	PZ - H ₂ O	1.94*10 ¹⁴	185406	-33.04	101474
29	PZ - PZCOO	2411	214987	-24.59	152526
30	PZ - PZ	682	364854	-75.65	172698
31	PZ - CO ₃ ²⁻	7623	252380	-49.70	126125
32	PZ - OH	3.52*10 ⁻²	283511	-48.94	159194
33	PZCOO - H ₂ O	2.37*10 ¹⁵	79780	-1.47	76035
34	PZCOO - PZCOO	59954	109361	6.98	127088
35	PZCOO - PZ	16960	259228	-44.08	147260
36	PZCOO - CO ₃ ²⁻	93182	146755	-18.14	100687
37	CO ₂ - OH (HCO ₃ ⁻)	3.84*10 ⁻³	88750	11.25	117337
38	PZ-CO ₂ (HCO ₃ ⁻)	2.77	172473	-15.45	133221
39	PZCOO - CO ₂ (HCO ₃ ⁻)	14.04	22606	35.61	113048

Nota: Adaptado de (Chen, 2007).

Las concentraciones para estas reacciones están de la forma mole gamma a_i , que está dada por la **Ec. 41**.

$$a_i = \gamma_i x_i \tag{Ec. 41}$$

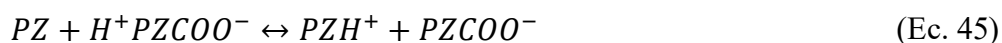
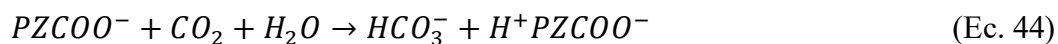
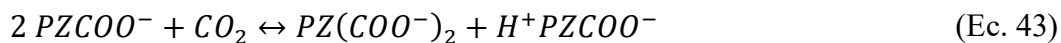
Donde γ_i es el coeficiente de actividad la especie i y x es la fracción molar del líquido de la especie i.

Apéndice D. Reacciones de la torre de regeneración

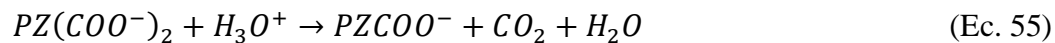
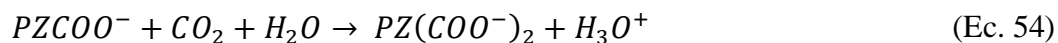
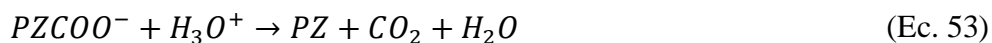
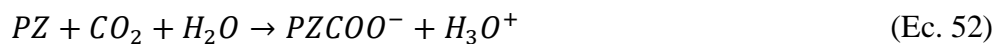
En la torre de regeneración el sistema llega al equilibrio casi de manera instantánea, por ellos las reacciones que ocurren allí se modelan en su mayoría como reacciones en equilibrio (Wagener, 2011).

En el caso de 5 m PZ se tomó el sistema de reacciones desarrollado por Plaza (Ec. 42-45), el cual reduce las reacciones en equilibrio que se llevan a cabo, removiendo especies que están en

concentraciones muy bajas (Plaza, 2012), las cuales se encuentran dentro de la base de datos de Aspen.



Las reacciones del caso de 5 m K⁺ / 2.5 m PZ se tomaron del paquete de reacciones que tiene Aspen Ec. 46-55, en las cuales las Ec 46-49 son consideradas por Chen (Chen, 2007).



Apéndice E: Condiciones operativas de las corrientes

Las condiciones operativas de las corrientes fueron ingresadas a la simulación como se muestran a continuación. La temperatura de entrada del gas de chimenea en el caso 5 m PZ de la planta en J.J. Pickle es bastante baja debido a condiciones ambientales en el lugar donde se situaba la planta puesto que, de noche, la temperatura solía descender abruptamente (ver *Tabla 23*). Aun así, la temperatura se ingresó de esta manera ya que se necesitaba una validación del comportamiento.

Tabla 23.

Condiciones de la corriente FLUEGAS para cada caso

Parámetro	PZ	PC-PZ
Flujo (m ³ /h)	527	535
Temperatura (°C)	40	40
Presión (bar)	1,01	1,01
Composición % vol.		
H ₂ O	0,070	0,067
CO ₂	0,126	0,159
N ₂	0,751	0,774
O ₂	0,049	0*

Nota: *El fluegas que se utilizaba en el caso de 5 m K+ / 2.5 m PZ no contenía nitrógeno. Adaptado de (Chen, 2007; Plaza, 2012).

Tabla 24.

Condiciones la corriente LEANIN para cada caso

Parámetro	PZ	PC-PZ
Flujo (kg)	1,245	1,846
Temperatura (°C)	41	40,5
Presión (bar)	1,01	1,01
Composición % masa		
PZ	0,2761	0,1256
H ₂ O	0,6473	0,6233
CO ₂	0,0766	0,0386
K ₂ CO ₃	--	0,2125

Nota: Adaptado de (Chen, 2007; Plaza, 2012).

En el caso de la planta en Bellingham el fluegas entraba a 55°C, no obstante, para simularlo se utilizó una temperatura de 40°C. Se decidió seguir la temperatura estándar del proceso ya que esta planta solo fue una referencia para comparar los datos en una escala industrial.

Tabla 25.

Condiciones de la corriente FLUEGAS del caso de la planta en Bellingham

Parámetro	Valor
Temperatura (°C)	55
Presión (kPa)	111,325
Flujo (kmol/h)	11000
Composición % vol.	
H ₂ O	0,0777
CO ₂	0,1257
N ₂	0,748
O ₂	0,0486

Nota: Composiciones en base molar. Adapataado de (Freguía, 2002).

Apéndice F. Estudio económico

Apéndice F.1 Cálculo del CAPEX para cada unidad de proceso

Antes de presentar el procedimiento detallado para cada equipo, es necesario señalar que los valores derivados de las ecuaciones de Costo capital C_P están asociados temporalmente al año 2013. Para actualizar estos valores al contexto temporal actual, se multiplican por el cociente entre el índice de costos de plantas de ingeniería química (CEPCI) correspondiente al año de cálculo (2013, con un valor de 567) y el índice actual (2022, con un valor de 816).

En aras de la practicidad y para evitar la repetición, se tomarán en cuenta los dos casos evaluados según la siguiente numeración:

- (1) 5 m PZ

(2) 5 m K+/ 2.5 m PZ

De ese modo, se procede con la explicación:

Bombas. En la estimación del costo capital para este equipo, se considera que la bomba es centrífuga. Esta elección se fundamenta en el texto de Seider (Seider, 2017), el cual sugiere que este tipo de bomba es la opción más adecuada para el caso de estudio en cuestión. Esto se debe a que el flujo de operación se mantiene por debajo de los 5000 gpm, la cabeza de la bomba se sitúa entre 50 y 3200 ft y la viscosidad cinemática es inferior a 100 centistokes.

Generalmente, el costo incluye la bomba, una placa base y un acoplamiento de transmisión directa. Sin embargo, las bombas centrífugas son generalmente impulsadas por un motor eléctrico cuyo costo se suma al costo de la bomba. Por consecuencia, el costo capital total resultará de la adición de ambos.

Una vez considerado esto, se tiene que el costo base para bombas centrífugas será dado por la ecuación 56.

$$C_B = \exp\{12.1656 - 1.1448[\ln(S)] + 0.0862 [\ln(S)]^2\} \quad (\text{Ec. 56})$$

La cual depende de un factor de tamaño S , el cual está dado por la ecuación 57.

$$S = Q(H)^{0.5} \quad (\text{Ec. 57})$$

Donde Q representa el caudal de operación de la bomba en galones por minuto (gal/min) y H en pies (ft) indica el cabezal de esta. Ambos valores se obtuvieron a partir de resultados de simulación, los cuales varían según el caso de estudio, ya sea piperazina o carbonato promovido

por piperazina. Aunque los valores específicos para el cálculo puedan cambiar, el procedimiento y las consideraciones son las mismas.

Adicionalmente, se tiene que, para el costo capital, dado por la ecuación 58, el costo base se debe multiplicar por dos diferentes factores: F_T con un valor de 2, asociado al material de construcción y F_M con un valor de 1.35, asociado al tipo de bomba (Seider, 2017).

$$C_P = F_T F_M C_B \quad (\text{Ec. 58})$$

Por otro lado, el parámetro de diseño para el motor es su consumo de energía P_C , el cual se determina a partir de la potencia teórica de la bomba P_T , su eficiencia η_P y la eficiencia del motor η_M , relacionados a partir de la ecuación 59.

$$P_C = \frac{P_T}{\eta_P \eta_M} = \frac{P_B}{\eta_M} = \frac{QH\rho}{33000\eta_P \eta_M} \quad (\text{Ec. 59})$$

Donde Q representa el caudal a través de la bomba en galones por minuto (gal/min), H el cabezal de esta en pies (ft), P_B es la potencia de frenado de la bomba y ρ es la densidad del fluido de trabajo en libras por galón (lb/gal).

Por otro lado, se tiene que η_M es dado como función de la potencia de frenado en la ecuación 61 y η_P como función del flujo volumétrico en la ecuación 60.

$$\eta_P = -0.316 + 0.24015(\ln Q) - 0.01199(\ln Q)^2 \quad (\text{Ec. 60})$$

$$\eta_M = 0.80 + 0.0319(\ln P_B) - 0.01199(\ln P_B)^2 \quad (\text{Ec. 61})$$

De ese modo, se procede con el cálculo de η_P a partir del flujo volumétrico; este último es obtenido mediante resultados de simulación. Una vez obtenido este dato, se realiza el cálculo de P_B al despejar la ecuación 62, quedando de la siguiente manera:

$$P_B = \frac{QH\rho}{33000\eta_P} \quad (\text{Ec. 62})$$

Seguido a ello, se hizo uso de la ecuación 61 para obtener el valor de η_M , el cual depende únicamente de P_B . Finalizado este procedimiento, se utiliza por última vez la ecuación 62 para poder así calcular P_C mediante el cociente entre P_B y η_M .

Finalmente, se tiene que el costo base para el motor eléctrico está dado por la ecuación 61 y su costo capital por la ecuación 64.

$$C_B = \exp\{5.9332 + 0.16829[\ln(P_C)] - 0.110056 [\ln(P_C)]^2 + 0.071413 [\ln(P_C)]^3 - 0.0063788 [\ln(P_C)]^4\} \quad (\text{Ec. 63})$$

$$C_P = C_B F_T \quad (\text{Ec. 64})$$

Donde, F_T es un factor asociado al tipo de motor y toma un valor de 1 (Seider, 2017).

Torres empacadas. Considerando el diagrama de flujo elaborado para este estudio, se cuenta con la presencia de dos torres empacadas: una destinada a la absorción del gas en la fase líquida y la otra encargada de la recuperación del solvente y la desorción del gas. Para estimar el costo de cada una, se aplicó la misma metodología. No obstante, se realizaron consideraciones particulares debido a las diferencias tanto en dimensiones como en condiciones de operación

entre ambas torres.

Para iniciar con el procedimiento, el primer parámetro para tener en cuenta es la presión de operación P_O , la cual sirve de base para calcular la presión de diseño P_d ; cuando P_O se encuentra entre 0 y 5 psig se sugiere utilizar una P_d de 10 psig. Por otro lado, si P_O indica un valor mayor que 10 psig, debe recurrirse a la ecuación 65 para el cálculo de P_d .

$$P_d = \exp\{0.60608 + 0.91615[\ln(P_O)] + 0.0015655[\ln(P_O)]^2\} \quad (\text{Ec. 65})$$

Para la torre de absorción, tanto en el caso (1) como en el (2), se establece que P_O es de 0 psig, por lo que P_d será de 10 psig. En paralelo, la torre de regeneración opera con una P_O de 35 psig para el caso (1) y una P_O de 11 psig para el caso (2). De esta manera, P_d será de 49 y 17 psig, respectivamente, mediante el uso de la ecuación 65.

A continuación, se establecen varios parámetros relacionados con el material utilizado, que en este caso es acero al carbono (Chen, 2007). Estos parámetros incluyen la densidad del material (ρ), con un valor de 0.284 (lb/in³) y la eficiencia de la soldadura (E), fijada en 0.85, asumiendo un espesor de pared menor de 1.25 in. Además, se define el máximo estrés permitido por el material (S), con un valor de 13750 psi. Este valor se elige de acuerdo con la temperatura de diseño, que es de 160°F. La temperatura de operación es de 110°F, y para obtener la de diseño, se le adiciona un incremento de 50°F. Se utiliza acero al carbono SA-285 grado C para un rango de temperatura de diseño que va desde -20°F hasta 650°F, con el máximo estrés permitido indicado.

El diámetro interno (D_i) se determina según las condiciones iniciales para la simulación de cada torre, pero se realiza una conversión para expresar su valor en pulgadas (in).

Ahora bien, se tiene que, en ausencia de corrosión, viento y terremotos, el espesor de la pared para la cubierta cilíndrica de cada torre vendría dada por la ecuación 66:

$$t_p = \frac{P_d D_i}{2SE - 1.2P_d} \quad (\text{Ec. 66})$$

Sin embargo, la ecuación 66 es adecuada para el cálculo de espesores de torres horizontales, por lo que, para una vertical, sería la suma entre el espesor calculado como si fuese horizontal y un adicional necesario para resistir la velocidad del viento o el impacto de un terremoto en el fondo de la torre t_w , el cual está dado por la ecuación 67:

$$t_w = \frac{0.22(D_o + 18) L^2}{SD_o^2} \quad (\text{Ec. 67})$$

Donde, D_o es el diámetro externo de la torre, indicado en pulgadas (in), el cual se describe como la suma entre el diámetro interno y dos veces el espesor de pared t_s , L la altura tangente a tangente de la torre y S el estrés máximo permitido, el cual ya ha sido explicado anteriormente.

Para la altura tangente a tangente de la torre se tiene que mantiene una relación con el diámetro, la cual es de 3:1 (ICARUS corporation, 1998). Es pertinente aclarar que la altura empacada es diferente de la altura total de la torre.

De ese modo, se establece un espesor para la parte superior de la torre t_p y un espesor para el fondo de la torre $t_p + t_w$, a partir de los cuales se calculará el espesor promedio t_v . Una vez obtenido, se le suma 1/8 in de tolerancia a la corrosión. Por último, para el rango que va desde 3/16 in hasta 1/2 in, se incrementa en pasos de 1/16 in, eligiendo el valor más cercano del resultado

que sea superior. Por ejemplo, para un valor *de t_v* de 0,268 in, el valor superior más cercano es de 5/16, por lo que este se toma como el valor de *t_s*.

Una vez establecidos todos los parámetros anteriores, se procede con el cálculo del factor de tamaño que, en el caso de torres verticales será el peso *W* en (lb), a partir de la ecuación 68.

$$W = \pi(D_i + t_s)(L + 0.8D_i)t_s\rho \quad (\text{Ec. 68})$$

El factor de tamaño *W* será la variable de la cual dependerá la estimación del costo de la carcasa *C_V* para las torres, el cual viene dado por la ecuación 69:

$$C_V = \exp\{10.5449 - 0.4672[\ln(W)] + 0.05482[\ln(W)]^2\} \quad (\text{Ec. 69})$$

El costo de la carcasa debe multiplicarse por un factor de material *F_M* asociado con el tipo de material de construcción, para el caso de acero al carbono, se tiene que es de 1 (Seider, 2017).

Adicionalmente, se considera un costo agregado *C_{PL}* dado por la ecuación 70 para plataformas y escaleras. Este costo depende del diámetro interno *D_i* y de la longitud tangente a tangente *L*, ambas variables deben expresarse en unidades de pies (ft).

$$C_{PL} = 341(D_i)^{0.63316}(L)^{0.80161} \quad (\text{Ec. 70})$$

Para estimar el costo total del empaque mediante la ecuación 71, se multiplica su costo unitario *C_U* de \$285/ft³ (Seider, 2017) por el volumen total empacado *V_P*, calculado a partir de los datos iniciales para el diámetro y la altura empacada, ambos en pies (ft).

$$C_{PK} = V_P C_U \quad (\text{Ec. 71})$$

Seguido a ello, se agrega un último costo relacionado con los distribuidores al interior de la torre C_{DR} . De acuerdo con el texto guía, los distribuidores se ubican en cada punto de alimentación y los redistribuidores cada 20 pies, una estimación muy aproximada para el costo instalado de un distribuidor de líquido sería de \$140/ft² por sección de área transversal de la columna. Teniendo en cuenta esto, habría un distribuidor en el punto de alimentación de la torre y dos redistribuidores debido a que la altura empacada es de 49 ft. De este modo, el costo vendría dado por la multiplicación entre el número de distribuidores, el costo de instalación y el área transversal de la torre, calculada a partir de los datos iniciales para el diámetro interno en pies (ft).

Finalmente, el costo capital total de cada torre vendría dado por la ecuación 72:

$$C_P = F_M C_V + C_{PL} + V_P C_{PK} + C_{DR} \quad (\text{Ec. 72})$$

Intercambiadores de calor. De acuerdo con las especificaciones detalladas en el texto guía (Chen, 2007) se establece que el intercambiador de flujo cruzado, el enfriador y el condensador siguen una configuración de cabeza fija. Por otro lado, para el rehervidor se corresponderá con una disposición tipo “tetera”. Esta información resulta fundamental, ya que la fórmula para calcular el costo base dependerá del tipo de estructura; sin embargo, el costo se estima principalmente a partir del área total de intercambio de cada equipo.

Es pertinente aclarar que todos los equipos mencionados forman parte de una familia más grande de intercambiadores conocida como “intercambiadores de tubos y carcaza”.

En este contexto, para calcular el costo base de un intercambiador de cabeza fija, se utiliza la ecuación 73:

$$C_B = \exp\{11.4185 - 0.9228[\ln(A)] + 0.09861[\ln(A)]^2\} \quad (\text{Ec. 73})$$

Del mismo modo, para calcular el costo base del rehervidor tipo tetera, se utiliza la ecuación 74:

$$C_B = \exp\{12.3310 - 0.8709[\ln(A)] + 0.09005[\ln(A)]^2\} \quad (\text{Ec. 74})$$

Donde A representa el área total de intercambio de calor, es decir, la superficie exterior de los tubos expresada en pies cuadrados (ft^2), el valor de dicha variable para cada intercambiador, tanto en el caso (1) como en el (2), se obtuvo a partir de los resultados de simulación en ASPEN PLUS V12.1.

Así pues, el costo capital vendría dado por la ecuación 75:

$$C_P = F_P F_M F_L C_B \quad (\text{Ec. 75})$$

Donde se demuestra que vendría dado por la multiplicación de tres diferentes factores asociados por el costo base ya calculado.

El factor de presión (F_p) está basado en la presión del lado de la carcasa (P) en psig, la cual es dada por la ecuación 76, para un rango de 100 a 2000 psig, si la presión es menor, se asumirá un F_p de 1.

$$F_p = 0.9803 + 0.018\left(\frac{P}{100}\right) + 0.0017\left(\frac{P}{100}\right)^2 \quad (\text{Ec. 76})$$

El factor de material (F_M) es función del área superficial A y de dos factores, a y b , como se expresa en la ecuación 77. Estos factores están vinculados al tipo de material utilizado en cada parte de la estructura del intercambiador, es decir, los tubos y la carcasa. De este modo, ambas partes están fabricadas en acero inoxidable 316, según lo indicado por Chen (2007), y para este material en particular, a tiene un valor de 2.7 y b de 0.07.

$$F_M = a + \left(\frac{A}{100}\right)^b \quad (\text{Ec. 77})$$

El factor de longitud F_L es una corrección a la longitud de los tubos, la cual es de 1 para el caso de los intercambiadores dados.

Cálculo de solvente inicial. Para iniciar la operación en la planta, es necesario disponer de los equipos y de la materia prima necesaria para completar un ciclo antes de que el proceso comience a reponer pérdidas. Por esta razón, se debe determinar la cantidad inicial de solvente tanto para el caso 1 como para el 2. En este sentido, se calcula el volumen de la torre (V_{tor}) mediante la ecuación 78:

$$V_{tor} = \pi \frac{D_{in}^2}{4} L_{en} \quad (\text{Ec. 78})$$

Dónde D_{in} es el diámetro de la torre y L_{en} es la altura empacada de la misma.

Luego, se realiza el producto entre la densidad de la solución (ρ_{sln}) (extraída de los resultados de simulación) y V_{tor} para calcular así la cantidad de masa al interior del equipo (M_{sln}), haciendo uso de la ecuación 79:

$$M_{sln} = \rho_{sln} V_{tor} \tag{Ec. 79}$$

Después de haber calculado la masa total del solvente, este se multiplica por la fracción másica de cada sustancia presente en la mezcla (X_n), siendo piperazina y agua en el caso 1 y piperazina, carbonato de potasio y agua en el caso 2, para luego multiplicar la cantidad propia de cada sustancia de acuerdo con su costo unitario C_u como se muestra en la ecuación 80 (Chen et al., 2019), es de esta manera que se determina el valor del solvente inicial S_{in} para cada caso. Los costos de las sustancias se listan en la **Tabla 26**.

costos de sustancias para cálculo del solvente inicial:

$$S_{in} = M_{sln} X_n C_u \tag{Ec. 80}$$

Tabla 26.

costos de sustancias para cálculo del solvente inicial

Costo unitario	Valor	Unidades	Fuente
Piperazina	5.5	USD/kg PZ	(Chen et al., 2019)
Carbonato de Potasio	1300	USD/ton PC	(Palacios, 2023)
Agua	0.27	USD/m ³ H ₂ O	(Seider, 2017)

Finalmente, para obtener el valor total del CAPEX, se procede multiplicando la suma de los costos de capital de cada unidad por dos factores: uno vinculado a la instalación de los equipos F_{ins} con un valor de 2.3768 y otro F_{cont} a posibles contingencias con un valor de 1.5982 (Hasan et al, 2012), mostrado en la ecuación 81:

$$CAPEX = F_{ins} F_{cont} \sum C_p \tag{Ec. 81}$$

Apéndice F.2 Cálculo de los costos operativos OPEX

Agua de enfriamiento. Este costo depende directamente de la cantidad de agua requerida en el enfriador y en el condensador, para ello, se determinó una correlación de requerimiento por intercambiador R_{wt} (Pedrozo et al., 2023) la cual está dada por la ecuación 82:

$$R_{wt} = \frac{0.027V_{esp}Q_s}{C_p(T_I - T_E)} \quad (\text{Ec. 82})$$

Donde se tiene que el costo del agua es de 0.0027 \$/m³ (Seider, 2007), V_{esp} es el volumen específico del agua en metros cúbicos por kilogramo (m³/kg) a la temperatura dada, Q_s es el calor sensible en kilowatts (kW) requerido por cada intercambiador para disminuir la temperatura del fluido de trabajo, C_p es la capacidad calorífica del agua en (kJ/kg°C), T_i es la temperatura de entrada del fluido de enfriamiento y T_E su temperatura de salida, ambas expresadas en grados Celsius (°C).

Vapor de calentamiento. El rehervidor es el único equipo que depende de este servicio para su funcionamiento. Por consiguiente, el costo de vapor R_{st} está directamente vinculado con el calor latente necesario para esta unidad, tal como se expresa en la ecuación 83:

$$R_{st} = \frac{Q_{reb}}{(C_{st}/Q_{lat})} \quad (\text{Ec. 83})$$

Donde Q_{reb} es el calor requerido por el rehervidor en kilowatts (kW), C_{st} es el costo unitario del vapor en USD por tonelada (\$/ton) y Q_{lat} es el calor latente de vaporización del agua.

Suministro eléctrico. Estimar el coto de esta utilidad depende directamente de la potencia necesaria para el funcionamiento de la bomba. Teniendo esto en cuenta, el consumo eléctrico C_{elect} se calcula utilizando la ecuación 84:

$$C_{elect} = C_e P_{pmp} \quad (\text{Ec. 84})$$

Donde C_e es el costo unitario de la electricidad, expresado en USD por kWh (\$/kWh) y P_{pmp} es el trabajo neto de la bomba en kilowatts (kW).

Reposición de Solvente. De acuerdo con los resultados obtenidos en ambos casos, se tiene que hay únicamente pérdidas de piperazina, por lo que esta reposición estará ligada únicamente a la renovación periódica de este solvente, así, el cálculo de R_{pz} vendría dado por la ecuación 85:

$$R_{pz} = C_b PZ_{flw} \quad (\text{Ec. 85})$$

Donde C_b es el costo de piperazina dado en USD por kg de solvente (\$/kgPZ) y PZ_{Flow} es el flujo de reposición de piperazina, obtenido a partir de resultados de simulación.

Por consiguiente, el valor final del OPEX será dado por la sumatoria de los cuatro costos operativos considerados anteriormente.

$$OPEX = \sum R_n \quad (\text{Ec. 86})$$

Finalmente, los resultados operativos están dados en términos de horas, de modo que para obtener el valor anual se tendría en cuenta que un año tiene 8000 horas y hacer las respectivas conversiones, considerando un correcto análisis dimensional.

Posteriormente, con el fin de presentar los resultados en una escala de tiempo uniforme, se lleva a cabo el cálculo del costo de inversión anualizada (AIC) y del costo total anualizado (TAC). El AIC depende del costo total de la planta (TPC), considerado como el valor del CAPEX, multiplicado por un factor de retorno de capital (ϖ) y sumado al costo anual de mantenimiento (AMC), que se estima en un 5% del TPC,(Hasan et al., 2012). Finalmente, el TAC se obtiene sumando el AIC y el costo anual de operación (AOC), donde este último se toma como el valor del OPEX.

$$TAC = AIC + AOC \quad (\text{Ec. 87})$$

$$AIC = \varpi TPC + AMC \quad (\text{Ec. 88})$$

Apéndice G. Indicadores ambientales

La estimación de las emisiones generadas por la actividad de la planta se realiza mediante el cálculo de CO₂ evitado (Roussanaly, 2019), ecuación 89, un indicador que relaciona el costo total anualizado (TAC), la cantidad de emisiones producidas por la planta (CO_{2T}) y la cantidad de emisiones retenidas (CO_{2prod}) por la misma, es decir, el CO₂ capturado.

$$CO_{2evit} = \frac{TAC}{(CO_{2prod} - CO_{2T})} \quad (\text{Ec. 89})$$

En consecuencia, con el TAC ya calculado, el valor de CO_{2prod} se extrae de los resultados de simulación, y el CO_{2T} se determina multiplicando el factor de emisión correspondiente a cada actividad (F_e) por su variable representativa (AT) (Jordano et al., 2013). Por ejemplo, las emisiones del agua de enfriamiento requerida en el caso de los intercambiadores se calculan a partir del calor retirado por estos equipos, las emisiones del vapor de baja en el caso del rehervidor por el calor

requerido por la unidad, las emisiones eléctricas a partir de la potencia requerida en el caso de la bomba y las emisiones por reposición del solvente a partir de la cantidad de sustancia a restituir.

Por consiguiente, se tiene el factor de emisión para cada actividad en la **Tabla 27**:

Tabla 27.

Factores de emisión

Factor	Valor	Unidades
Vapor de baja	0.43	kg CO ₂ eq/kWh
Electricidad	0.74	kg CO ₂ eq/kWh
Agua de enfriamiento	0.002	kg CO ₂ eq/kWh
Piperazina	5.61	kg CO ₂ eq/kg piperazina

Nota: Adaptado de (Pedrozo et al., 2023)

El cálculo de emisiones se hace mediante la ecuación 90:

$$Emisiones\ de\ CO_2 = F_e A T_n \tag{Ec. 90}$$

Seguido a ello, se procede a calcular la eficiencia energética del proceso (EI) mediante el cociente entre el gasto energético total de la torre regeneradora (el cual se toma como el más representativo debido a que es el de mayor magnitud comparado con los demás, Q_{reb}) y la cantidad total de CO₂ capturado por la planta (CO_{2prod}) (Chen et al., 2019; Chuenphan et al., 2022), la expresión para el cálculo se muestra en la ecuación 91, en unidades de giga-Joule por tonelada de CO₂ (GJ/ton CO₂):

$$EI = \frac{Q_{reb}}{CO_{2prod}} \tag{Ec. 91}$$

Finalmente, el costo de captura se determina mediante el cociente entre el costo total anualizado (TAC) sobre la cantidad total de CO₂ producido por la planta (CO₂OUT) extraído a partir de resultados de simulación (Pedrozo et al, 2022).

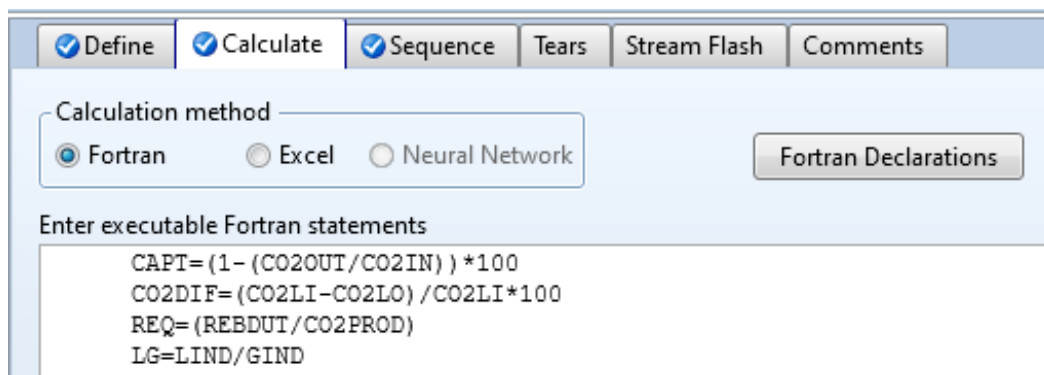
$$\text{Costo de Captura} = \frac{TAC}{CO_{2prod}} \quad (\text{Ec. 92})$$

Apéndice H. Bloques calculadores y Design Specs de parámetros

Los bloques calculadores y Design Specs definitivos dentro de la simulación fueron tres: en el primero se hizo una variación del flujo másico de la corriente de LEANIN para obtener una captura de 90% en la torre de absorción, con un error permitido del 3%; en el segundo fue variado el valor del requerimiento energético de la torre regeneradora para disminuir la diferencia de CO₂ entre la corriente de LEANOUT y LEANIN a 0; y por último, el bloque de reposición buscaba obtener una diferencia de cero entre las corrientes LEANMK y LEANIN para así calcular el valor requerido de solvente fresco. Los bloques de variación del requerimiento energético y de solvente de reposición fueron hechos con el fin de cerrar el reciclo de la planta. Cabe aclarar que los valores iniciales y los rangos para las variables manipuladas se basaron en la definición del proceso, utilizando factores como el L/G, y el indicador energético. En la **Figura 19**, **Figura 20** y **Figura 21** se muestra el ejemplo de ingreso en Aspen PLUS®.

Figura 19.

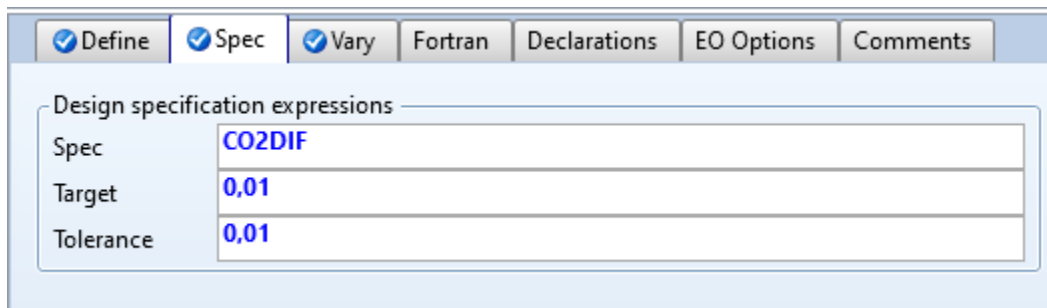
Ejemplo de ingreso de variable controlada en bloque calculador



Nota: Ambiente de simulación en Aspen PLUS®

Figura 20.

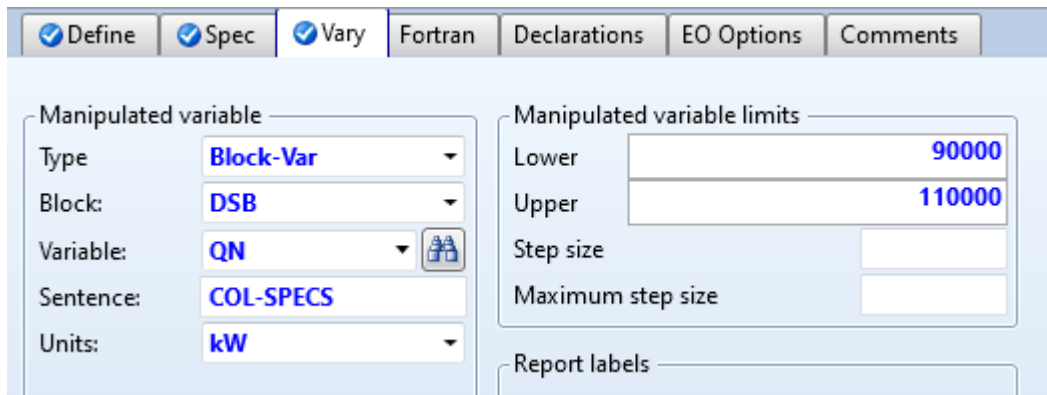
Ejemplo de ingreso de variable controlada en Design Specs



Nota: Ambiente de simulación en Aspen PLUS®

Figura 21.

Ejemplo de ingreso de variable manipulada en Design Specs



Nota: Ambiente de simulación en Aspen PLUS®

Apéndice I. Código de FORTRAN para estudio económico e indicadores

El código de FORTRAN utilizado para el cálculo de los parámetros del estudio económico e indicadores se muestra a continuación:

```

1  c costos de capital CAPEX
2      CEPCI=816
3
4  c costo capital de la bomba, la variable debe insertarse en kW.
5      S1=QPUMP*HEADPMP**0.5
6      CBC=EXP(12.1656-1.1448*(LOG(S1))+0.0862*(LOG(S1)**2))
    
```

```

7 c factor de material asociado
8     FmPMP=1.35
9 c factor de motor asociado
10    FtPMP=2
11    CPS=CBC*FtPMP*FmPMP
12    NP=-0.316+0.24015*LOG(QPUMP)-0.01199*LOG(QPUMP)**2
13    PB=(QPUMP*HEADPMP*DENS LIQ)/(33000*NP)
14    NM=0.8+0.0319*LOG(PB)-0.00182*LOG(PB)**2
15    PC=PB/NM
16    KR=LOG(PC)
17    KR1=0.16829*KR
18    KR2=-0.110056*KR**2
19    KR3=0.071413*KR**3
20    KR4=-0.0063788*KR**4
21    CBM=EXP(5.9332+KR1+KR2+KR3+KR4)
22    CPPUMP=(CEPCI/567)*(CBM+CPS)
23
24 c costo capital del absorbedor
25 c Presión de diseño [psig]
26    PDABS=10
27 c S: Máximo estrés permitido [psi]
28    S=13750
29 c E: Eficiencia de soldadura
30    E=0.850
31    TPABS=(PDABS*DINABS)/(2*S*E-1.2*PDABS)
32    DOABS=DINABS+0.25*2
33    LENABS=3*DOABS
34    TWABS=(0.22*(DOABS+18)*LENABS**2)/(S*DOABS**2)
35    TWABS BOT=TPABS+TWABS
36    TVABS=(TPABS+TWABS BOT)/2
37    TSABS=TVABS+0.125+0.045
38 c DENSTEEL: Densidad del material [lb/cuin]
39    DENSTEEL=0.284
40    WABS=3.1416*(DINABS+TSABS)*(LENABS+0.8*DINABS)*TSABS*DENSTEEL
41    AUX=LOG(WABS)
42    CVABS=EXP(10.5449-0.467*AUX+0.05482*AUX**2)
43    AUX1=(DINABS/12)**0.63316
44    AUX2=(LENABS/12)**0.80161
45    CPLABS=341*AUX1*AUX2
46    VOLEMPAQ=(3.1416/4)*(DINABS/12)**2*(LEMPABS*2)/12)
47 c CPK: Costo de empaque por pie cúbico [$/Ft3)
48    CPK=285
49    ATRANSAB=(3.1416/4)*(DINABS/12)**2
50 c CDR: Costo de montura de distribuidores [$/Ft2]
51    CDR=140
52    CPABS=(CEPCI/567)*(CVABS+CPLABS+(CPK*VOLEMPAQ)+(ATransAB*3*CDR))
53
54 c costo capital del desorbedor
55    PDES=EXP(0.60608+0.91615*LOG(PODES)+0.0015655*LOG(PODES)**2)
56    TPDES=(PDES*DINDES)/(2*S*E-1.2*PDES)
57    DODES=DINDES+0.5*2
58    LENDES=3*DODES

```

```

59     TWDES= (0.22* (DODES+18) *LENDES**2) / (S*DODES**2)
60     TWDESBOT=TPDES+TWDES
61     TVDES= (TPDES+TWDESBOT) /2
62     TSDDES=TVDES+0.125+0.039
63     WDES=3.1416* (DINDES+TSDDES) * (LENDES+0.8*DINDES) *TSDDES*DENSTEEL
64     AUX=LOG (WDES)
65     CVDES=EXP (10.5449-0.467*AUX+0.05482*AUX**2)
66     AUX1= (DINDES/12) **0.63316
67     AUX2= (LENDES/12) **0.80161
68     CPLDES=341*AUX1*AUX2
69     VOPAQ= (3.1416/4) * (DINDES/12) **2* ( (LEMPDES*2) /12)
70     ATRANSDB= (3.1416/4) * (DINDES/12) **2
71     CPDES= (CEPCI/567) * (CVDES+CPLDES+ (CPK*VOPAQ) + (ATransDB*2*CDR) )
72
73 c costo capital del intercambiador de flujo cruzado
74     AUX6=LOG (ACROSS)
75     CBCROSS=EXP (11.4185-0.9228*AUX6+0.09861*AUX6**2)
76 c factores a y b para el cálculo de FM, factor asociado al material
77     ACS=2.7
78     BCS=0.07
79     Fms=ACS+ (ACROSS/100) **BCS
80 c factor de presión
81     Fps=1
82     CPCROSS=CEPCI/567*CBCROSS*Fms*Fps
83
84 c costo capital del intercambiador "cooler"
85     AUX7=LOG (ACOOOL)
86     CBCOOL=EXP (11.4185-0.9228*AUX7+0.09861*AUX7**2)
87 c factores a y b para el cálculo de FM, factor asociado al material
88     ACL=2.7
89     BCL=0.07
90     Fml=ACL+ (ACOOOL/100) **BCL
91 c factor de presión
92     Fpl=1
93     CPCOOL=CEPCI/567*CBCOOL*Fml*Fpl
94
95 c costo capital del condensador
96     AUX8=LOG (ACOND)
97     CBCOND=EXP (11.4185-0.9228*AUX8+0.09861*AUX8**2)
98 c factores a y b para el cálculo de FM, factor asociado al material
99     ACD=0
100    BCD=0
101    Fmd=ACD+ (ACOND/100) **BCD
102 c factor de presión
103    Fpd=1
104    CPCOND=CEPCI/567*CBCOND*Fmd*Fpd
105
106 c costo capital del rehervidor
107    AUX9=LOG (AREB)
108    CBREB=EXP (12.331-0.8709*AUX9+0.09005*AUX9**2)
109 c factores a y b para el cálculo de FM, factor asociado al material
110    ARB=0

```

```

111     BRB=0
112     Fmr=ARB+ (AREB/100) **BRB
113 c factor de presión
114     Fpr=1
115     CPREB=CEPCI/567*CBREB*Fmr*Fpr
116
117 c cálculo de solvente inicial
118     VOLTOR=3.1416* ((DINABS/12) **2) /4* ((LEMPABS*2) /12)
119     MASLN=(VOLTOR*DENSLN) *1/2.2046
120     MASPZ=MASLN*0.1256
121     COSTINPZ=MASPZ*5.5
122     MASPC=MASLN*0.2125
123     COSTINPC=(MASPC/1000) *1300
124     MASH2O=MASLN*0.6619
125     COSTINWT=MASH2O*0.27
126
127 c costos operativos OPEX
128 c costo de electricidad $/kWh, cálculo asociado a equipos eléctricos
129     ce=0.124
130     CELECT=POWERPMP*ce*8000
131
132 c costo de vapor $/ton, cálculo de equipos de calentamiento
133     csteam=10.02
134 c calor latente del vapor de agua [kJ/kg]
135     Qlat=2260
136     RREB=QREB*3600*8000*(csteam/(Qlat*1000))
137
138 c costo de agua de enfriamiento [$/m3]
139     watct=0.027
140 c factor de costo de agua cwt[$kg/m^3kj]
141     cwt=watct/(4186*(25-15))
142 c volumen específico del agua [m3/Kg]
143     Vespec=0.001
144 c costo operativo de equipos de enfriamiento
145     RCOND=-cwt*QCOND*3600*8000
146     RCOOL=-cwt*QCOOL*3600*8000
147
148 c costo de piperazina [$/kgPZ]
149     cpz=5.5
150 c costo de reposición de solvente
151     REPZ=cpz*PZFRESH*8000
152
153 c costos operativos totales
154     OPEX=RCOND+RCOOL+RREB+REPZ+CELECT
155
156 c costos capitales
157     AUXSUM1=(CPPUMP+CPABS+CPDES+CPCROSS+CPCOOL)
158     AUXSUM2=(CPCOND+CPREB+COSTINWT+COSTINPZ+COSTINPC)
159     Costins=2.3768*(AUXSUM1+AUXSUM2)
160     CAPEX=1.5982*Costins
161     AIC=(0.05+0.154)*CAPEX
162     TAC=AIC+OPEX

```

```

163      CAPCOST=TAC/((CO2PROD*8000)*1/1000)
164
165 c emisiones de CO2
166
167 c factor de emisión de vapor de baja [kGCO2/kWh], emisiones de equipos de
168 calentamiento
169      fst=0.43
170      CO2H=QREB*fst
171
172 c factor de emisión de suministro eléctrico [kGCO2/kWh], emisiones de
173 equipos eléctricos
174      flc=0.742
175      CO2E=POWERPMP*flc
176
177 c factor de emisión de agua de enfriamiento [kGCO2/kWh], emisiones de
178 equipos de enfriamiento
179      fcl=0.002
180      CO2C=(-QCOND-QCOOL)*fcl
181
182 c factor de emisión de producción de pz [kGCO2/KGPZ], emisiones de
183 reposición
184      fpz=5.610
185      CO2MK=PZFRESH*fpz
186
187 c emisiones totales
188      CO2M=CO2H+CO2E+CO2C+CO2MK
189      CO2T=CO2PROD-CO2M
190      CO2EVIT=TAC/((CO2T*8000)*1/1000)
191
192 c carga de CO2 en solvente enriquecido y empobrecido
193      LOADRIC=FCO2RIC/(2*FPZRIC+FPCRIC/2)
194      LOADREC=FCO2RE/(2*FPZRE+FPCRE/2)

c cálculo de indicador energético GJ/Ton Co2
      INDIC=(QREB/1000000)/(CO2PROD*1/3600*1/1000)

```