

**SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE CAPTURA DE DIÓXIDO
DE CARBONO VÍA ABSORCIÓN CON MONOETANOLAMINA**

JORGE ARMANDO TRUJILLO AMARIZ

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2013

**SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE CAPTURA DE DIÓXIDO
DE CARBONO VÍA ABSORCIÓN CON MONOETANOLAMINA**

JORGE ARMANDO TRUJILLO AMARIZ

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de
Ingeniero Químico**

Director

M.Sc. OMAR JOSÉ GUERRA FERNÁNDEZ

Co-Directora

Ph. D. VIVIANA SANCHEZ TORRES

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS**

ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA

BUCARAMANGA

2013

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	
2. CONCEPTOS TEÓRICOS	16
2.1 TIPOS DE CAPTURA DE DIÓXIDO DE CARBONO	16
2.1.1 Captura Post-Combustión	16
2.1.2 Captura Pre-Combustión	17
2.1.3 Oxy-Combustión	17
2.2 PROCESO DE ABSORCIÓN CON AMINAS	17
2.2.1 Generalidades de las aminas	17
2.2.2 Descripción del proceso	20
3. METODOLOGÍA	22
3.1 PRIMERA ETAPA: SIMULACIÓN Y ANÁLISIS ECONÓMICO	23
3.1.1 Definición de las variables de independientes y sus límites	23
3.1.2 Generación de condiciones operación	24
3.1.3 Simulación del proceso de absorción de CO ₂ con MEA	25
3.1.4 Análisis económico y estimación del costo de captura	27
3.2 SEGUNDA PARTE: OPTIMIZACIÓN	29
3.2.1 Regresiones para costo y recuperación	29
3.2.2 Modelo de optimización	31
3.2.3 Validación del modelo	32
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	34
4.1 DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS DE LA PRIMERA ETAPA	34
4.2 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DE LA SEGUNDA ETAPA	35
4.2.1 Resultados de las regresiones	35
4.2.2 Resultados del modelo de optimización	37
4.2.3 Análisis del error	38
5. CONCLUSIONES	39
6. RECOMENDACIONES Y TRABAJOS FUTUROS	40
BIBLIOGRAFÍA	41

ANEXOS	47
ANEXO A. Condiciones de operación en la simulación	47
ANEXO B. Aspectos básicos del análisis económico	48
ANEXO C. Estadísticos	49
ANEXO D. Resultados de las simulaciones y análisis económico	51
ANEXO E. Detalles de las iteraciones	59
ANEXO F. Reportes de las correlaciones	60

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Emisiones de CO₂ por sector (2010). Datos de 1.	11
Figura 2. Enfoques tecnológicos para la captura de CO₂. Adaptado de 22. ..	16
Figura 3. Clasificación de las aminas. Adaptado de 24.	17
Figura 4. Diagrama de flujo del proceso de absorción con aminas.	19
Figura 5. Etapas de la metodología de simulación y optimización	22
Figura 6. Superestructura de la absorción con MEA.	23
Figura 7. Simulación del proceso de captura con MEA.	26
Figura 8. Gráfica de paridad del costo de captura.	35
Figura 9. Gráfica de paridad de la recuperación	36
Figura 10. Influencia de las variables de regresión en el costo de captura. ...	36
Figura 11. Suma del error relativo en cada iteración.	38

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Límites de las variables de entrada	24
Tabla 2. Condiciones del gas de combustión. Caso de estudio.....	25
Tabla 3. Resultados de las simulaciones y estimación de costo de captura del conjunto básico de datos.	34
Tabla 4. Costo de inversión fija de cada estructura	34
Tabla 5. Resultados de costo de captura y recuperación óptimos	37
Tabla 6. Condiciones óptimas de operación	37
Tabla 7. Comparación de resultados con la literatura.....	38
Tabla A. 1. Límites de las variables de entrada.....	51
Tabla A. 2. Resultados simulaciones y costo - Estructura 1	51
Tabla A. 3. Resultados Simulaciones y costo - Estructura 2	53
Tabla A. 4. Resultados simulaciones y costo - Estructura 3	55
Tabla A. 5. Resultados simulaciones y costo - Estructura 4	57
Tabla A. 6. Resultados de las correlaciones por estructura por iteración	59
Tabla A. 7. Resultados de la optimización por iteración	59
Tabla A. 8. Reporte de Ms Excel de la regresión de costo óptima	60
Tabla A. 9. Reporte de Ms Excel de la regresión de recuperación óptima	61

RESUMEN

TITULO: SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE CAPTURA DE DIÓXIDO DE CARBONO VÍA ABSORCIÓN CON MONOETANOLAMINA*

AUTOR: JORGE ARMANDO TRUJILLO AMARIZ**

PALABRAS CLAVE: Simulación, Optimización, Absorción, CO₂, Monoetanolamina

DESCRIPCIÓN

El CO₂ es el mayor responsable del calentamiento global debido a las grandes emisiones que se hacen de este gas de efecto invernadero a la atmósfera. Dada la necesidad de mitigar dichas emisiones se han planteado varias alternativas tecnológicas, siendo la captura y secuestro de carbono (CCS) la de mayor aceptación. Para la etapa de captura del CO₂ el proceso más estudiado es la absorción con aminas, pero la implementación de este proceso es altamente costoso, por eso la simulación y optimización del proceso es indispensable para minimizar los costos de inversión de capital fijo y los costos operacionales.

En este trabajo el proceso de absorción de CO₂ se simuló en Aspen HYSYS para cuatro configuraciones, fijando el número de etapas en el absorbedor y en el regenerador en 10 o 15. Utilizando monoetanolamina como solvente, y tomando como variables independientes: el flujo del solvente, la concentración del solvente y requerimiento energético del rehedidor. Con los resultados de las simulaciones se estimó el costo de captura de CO₂ (\$/tCO₂) y la recuperación, estos datos sirvieron para hacer regresiones que fueron implementadas en un modelo de optimización. Este modelo de optimización fue implementado en GAMS V23.5 y solucionado utilizando el solver global BARON. Los resultados muestran que para recuperaciones de 85, 90 y 95% el costo de captura mínimo es 50.1, 53.6 y 54.6 \$/tCO₂, respectivamente.

*Proyecto de grado

**Facultad de Ingenierías Físico Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Director M.Sc Omar J. Guerra. Codirectora Ph.D. Viviana Sanchez.

ABSTRACT

TITLE: SIMULATION AND OPTIMIZATION OF CARBON DIOXIDE CAPTURE PROCESS VIA ABSORPTION WITH MONOETHANOLAMINE

AUTHOR: JORGE ARMANDO TRUJILLO AMARIZ**

KEYWORDS: Simulation, Optimization, Absorption, CO₂, Monoethanolamina

DESCRIPTION

CO₂ is the main responsible of global warming due to large emissions of this greenhouse gas to the atmosphere. Given the need to mitigate such emissions some technological alternatives have raised, being carbon capture and sequestration (CCS) the most widely accepted. For CO₂ capture step the most studied process is absorption with amines, but the implementation of this process is highly expensive, so the simulation and optimization of the process is essential to minimize the costs of fixed capital investment and operational costs.

In this work the CO₂ absorption process was simulated in Aspen HYSYS for four configurations fixing the number of stages in the absorber and the regenerator in 10 or 15. Using monoethanolamine as solvent, and taking as independent variables: solvent flowrate, solvent concentration and reboiler duty. With simulation results were estimated CO₂ capture cost (\$ / tCO₂) and recovery, these data served to regressions that were implemented in an optimization model. This optimization model was implemented in General Algebraic Modeling System (GAMS) 23.5 and solved using the global solver Branch-And-Reduce Optimization Navigator (BARON) The results show that for recoveries of 85, 90 and 95% the minimum capture cost is 50.1, 53.6 and 54.6 \$ / tCO₂ respectively.

*Degree Project

**Faculty of Physical-Chemical Engineering. Department of Chemical Engineering. Director M.Sc Omar J. Guerra. Codirector Ph.D. Viviana Sanchez.

1. INTRODUCCIÓN

El dióxido de carbono (CO₂) es uno de los componentes más importantes de los gases de efecto invernadero y mayor responsable del calentamiento global. En el 2010 las emisiones totales de CO₂ a la atmósfera debido a la combustión superaron las 30.2 Gt, siendo los sectores energético e industria responsables de más del 60% de las emisiones mundiales(IEA, 2012) (Figura 1). Algunos estudios estiman que con la infraestructura energética actual, las emisiones acumuladas de CO₂ a la atmósfera serán de 496 Gt entre 2010 y 2060, lo que conllevaría a un calentamiento promedio de 0.4°C mayor que el de la época actual(Davis, Caldeira, & Matthews, 2010). Debido a esto, varias tecnologías para la mitigación y reducción de las emisiones de CO₂ a la atmósfera han sido propuestas, siendo la captura y secuestro de carbono (CCS por sus siglas inglés) una de las de mayor aceptación debido a lo rápido que puede ser implementada en el periodo de transición a alternativas energéticas de bajo-carbón(Rackley, 2010; Yang et al., 2008).

Actualmente existen diferentes procesos físicos y químicos para la captura de carbono: absorción, adsorción, separación con membranas, destilación criogénica y tratamiento con microorganismos son algunos de ellos(Benemann, 1997; Wang, Lawal, Stephenson, Sidders, & Ramshaw, 2011; Yang et al., 2008). De estos procesos, la absorción con aminas ha sido ampliamente estudiado en trabajos que

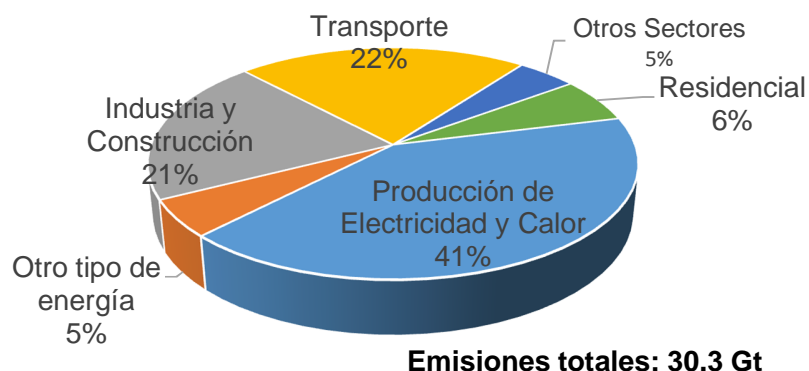


Figura 1. Emisiones de CO₂ por sector (2010). Datos de 1.

abarcen condiciones de proceso(Seungmoon Lee, Sanjeev Maken, Jin-Won Park, Ho-Jun Song, Jong Jin Park, Jae-Goo Shim, Jun-Han Kim, 2008; Zhou, Chan, & Tontiwachiwuthikul, 2008), mejoramiento y selección de solventes(Mangalapally et al., 2009), simulación y optimización de condiciones de operación y minimización de costos(Husebye, Brunsvold, Roussanaly, & Zhang, 2012; Klemeš, Bulatov, & Cockerill, 2007).

El proceso de captura de CO₂ vía absorción con aminas, además de ser usado en el secuestro de carbono, es también utilizado para el recobro mejorado de crudo, como materia prima para producción de químicos, en la industria alimenticia y para ventas de CO₂ en general. Actualmente, el proceso de Fluor® con Econamina FG PlusSM ha sido implementado en más de 23 plantas alrededor del mundo. Éste proceso utiliza MEA al 30% en peso como solvente, y en su formulación incluye inhibidores que previenen la degradación de la amina con el oxígeno y a su vez protege a los equipos contra la corrosión(Reddy, Scherffius, & Freguia, 2003). Otro proceso que ha sido implementado comercialmente en más de diez plantas de producción de energía utiliza el solvente KS-1TM de Mitsubishi Heavy Industries (MHI)(IJIJIMA, NAGAYASU, KAMIJYO, & NAKATAN, 2011). Ambos procesos fueron comparados por la International Energy Agency (IEA) con datos de plantas operativas, los resultados muestran que el costo de la energía en termoeléctricas de gas con captura de CO₂ pueden aumentar entre un 37.06% (MHI) y un 40.58% (Fluor), y entre un 42.14% (Fluor) y un 47.19% (MHI) si el proceso es a partir de carbón pulverizado(IEA Greenhouse Gas R&D Programme, 2004). De lo anterior se puede ver la importancia del mejoramiento y la optimización de dichos procesos como incentivo para aumentar su implementación a bajo costo en el sector energético e industrial.

La implementación a gran escala de un proceso de CCS vía absorción con aminas es costoso, por eso, la simulación y el modelamiento de dicho proceso surge como una alternativa útil, con el objetivo de realizar análisis económico y optimización del mismo. Existe numerosa literatura al respecto. Chakma, Mehrotra y

Nielsen(Chakma, Mehrotra, & Nielsen, 1995) estudiaron los efectos de algunas variables de operación sobre el costo de captura de CO₂. Evaluando aminas primarias, secundarias y terciarias, variaron la composición y presión del gas de entrada, número de etapas en el absorbedor y el regenerador, y el requerimiento energético del rehervidor. Los resultados mostraron que con Monoetanolamina (MEA) acuosa al 20 y 30% en peso se tenía el menor costo, teniendo como restricción una recuperación del 95% del CO₂. Debido a la alta no-linealidad del proceso de absorción con aminas, Alie, Backham, Croiset y Douglas(Alie, Backham, Croiset, & Douglas, 2005) propusieron un método de descomposición del diagrama de flujo para facilitar la convergencia de las simulaciones en Aspen Plus, utilizando MEA como solvente, obtuvieron resultados similares con el diagrama de flujo acoplado y desacoplado, además el estudio muestra que el menor requerimiento energético se obtiene con una carga (mol CO₂/mol de solvente) de 0.25. Halim y Srinivasan(Halim & Srinivasan, 2007) utilizaron simulación en Aspen Hysys y optimizaron el costo de operación utilizando optimización estocástica multi-objetivo para evaluar la viabilidad del proceso de absorción con dietanolamina (DEA) acuosa como solvente. Los resultados obtenidos muestran costos entre 52 y 68 \$/tCO₂ capturado para remociones de CO₂ entre el 80 y 93%. Nuchiprasittichai y Cremaschi(Nuchitprasittichai & Cremaschi, 2011) evaluaron el impacto de las condiciones de operación en el costo de captura de CO₂ con varias aminas, para esto utilizaron simulación en Aspen Hysys y optimización por la metodología de superficie de respuesta, encontrando que el menor costo de operación se obtenía utilizando diglicolamina (DGA) con un valor de costo de captura de 43 \$/tCO₂. Mores, Scenna y Mussati(Mores, Scenna, & Mussati, 2010) desarrollaron un modelo riguroso (de más de tres mil variables) para la optimización de variables operativas del proceso de absorción de CO₂ con MEA, utilizando GAMS (General Algebraic Modelling System) y CONOPT (un optimizador local), para la implementación y solución del modelo de optimización respectivamente, encontraron que el modelo se ajusta bien a los datos experimentales encontrados en la literatura, además, el modelo no solo sirve como optimizador sino como simulador al cambiar los grados

de libertad del mismo. Bernier, Maréchal y Samson(Bernier, Maréchal, & Samson, 2010) optimizaron las dimensiones de las columnas de absorción y desorción, el consumo de energía y el flujo de solvente, teniendo como objetivo minimizar el costo de la electricidad y el potencial de calentamiento global de una termoeléctrica a gas con proceso de captura de CO₂ implementado. Bernier et al.(Bernier et al., 2010) aplicando optimización multiobjetvo encontraron un costo de captura de \$60.2/tCO₂ en base al ciclo de vida. Hasan, Baliban, Elia y Floudas(Hasan, Baliban, Elia, & Floudas, 2012) modelaron, simularon y optimizaron el proceso de absorción con MEA, incluyendo la integración energética de la etapa compresión del CO₂, además compararon este proceso con la separación con membranas, obteniendo como resultado que el proceso de absorción es más viable económicamente a concentraciones bajas de CO₂ en la alimentación (1-20%mol), mientras que el proceso con membranas es más económico a concentraciones altas (>30% mol). Los costos obtenidos para el proceso de absorción oscilaron entre los 35 y 105 \$/tCO₂ capturado, dependiendo de la concentración del gas. Hasan et al.(Hasan et al., 2012) dicen haber tenido problemas para la convergencia y optimización del proceso utilizando Aspen Plus como simulador y optimizador, esto debido a las no-convexidades de la función objetivo (costo de captura), la presencia de muchos electrolitos en fase líquida, reacciones de absorción/desorción y la corriente de reciclo.

De la literatura se puede observar que el proceso de absorción con aminas para la captura de carbono es bastante complejo, por eso en este trabajo se buscó generar modelos simplificados, a partir de simulaciones en Aspen Hysys, para estimar el costo de captura (\$/tCO₂) y la recuperación del proceso de captura de CO₂ vía absorción con MEA. Dichos modelos simplificados serían implementados en un modelo de optimización que permita encontrar las condiciones de operación del proceso absorción con MEA que minimicen costo de captura para determinados porcentajes de recuperación. La metodología planteada tomó como caso de estudio los gases de combustión provenientes de una termoeléctrica a gas. El modelo

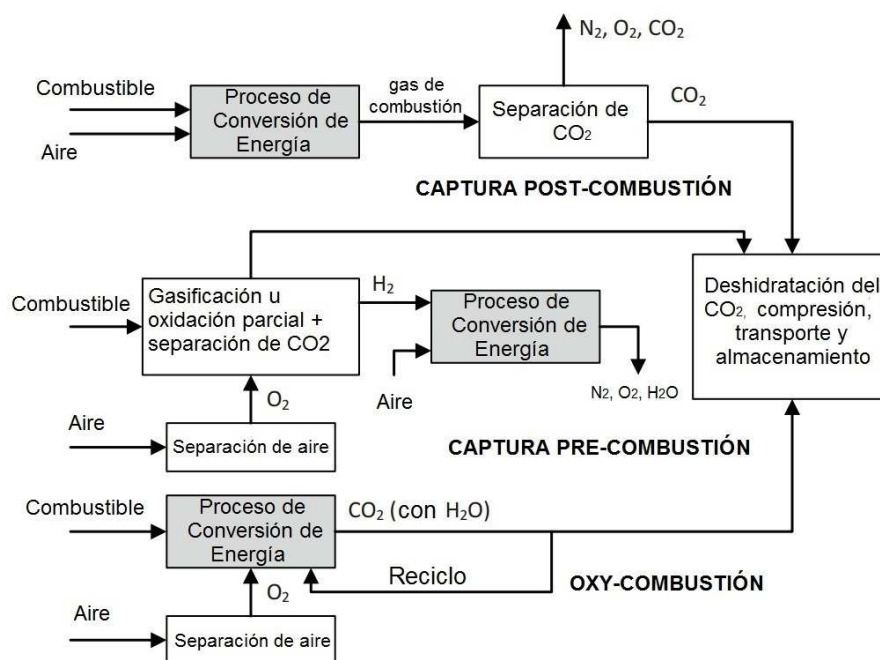
obtenido predice el costo de captura ($\$/\text{tCO}_2$ capturado) de manera comparable a otros trabajos realizados con metodologías diferentes a la aquí propuesta.

2. CONCEPTOS TEÓRICOS

2.1 TIPOS DE CAPTURA DE DIÓXIDO DE CARBONO

Actualmente existen tres enfoques tecnológicos para la captura de CO₂: captura post-combustión, captura pre-combustión y oxy-combustión (Figura 2). A continuación se presenta una breve descripción de cada enfoque.

Figura 2. Enfoques tecnológicos para la captura de CO₂.



2.1.1 Captura Post-Combustión

La captura post-combustión consiste en tomar los gases de combustión, generalmente en concentraciones bajas de CO₂ (1-20% mol), y tratarlos con procesos como la absorción, adsorción, separación con membranas o destilación criogénica para obtener una corriente de CO₂ de producto de alta pureza, que luego pasará a una etapa de compresión, transporte y almacenamiento (Pires, Martins, Alvim-Ferraz, & Simões, 2011; Rackley, 2010).

2.1.2 Captura Pre-Combustión

El objetivo de la captura pre-combustión es convertir el combustible a base de carbono en hidrógeno. Esta tecnología consiste en reformar el combustible (gas natural o biomasa), con vapor u oxígeno, para formar una mezcla de H₂ y CO₂ que ha de ser separada por absorción, adsorción o membranas. Posteriormente el H₂ es utilizado para generar energía, mientras el CO₂ es comprimido, transportado y almacenado (Pires et al., 2011; Rackley, 2010).

2.1.3 Oxy-Combustión

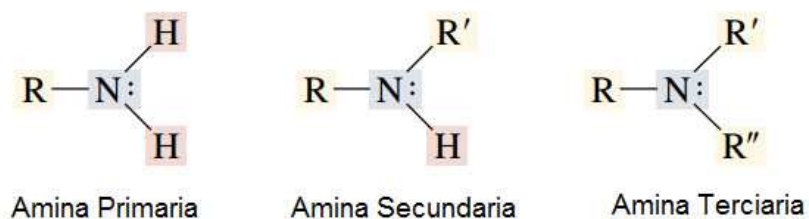
La oxy-combustión consiste en llevar a cabo la combustión con oxígeno puro, el cual debe ser separado del aire, lo que acarrea altos costos. Los productos de combustión con este proceso son H₂O y CO₂, éstos pueden ser separados fácilmente por condensación. Debido a que la combustión con oxígeno puro conlleva a altas temperaturas, se recicla parte del CO₂ para que actúe como portador de calor (*heat carrier*) (Gibbins & Chalmers, 2008; Pires et al., 2011; Rackley, 2010).

2.2 PROCESO DE ABSORCIÓN CON AMINAS

2.2.1 Generalidades de las aminas

Las aminas son compuestos orgánicos derivados del amoníaco y se caracterizan por tener un átomo de nitrógeno enlazado a uno, dos o tres grupos alquilo (alcanolaminas primarias, secundarias y terciarias, respectivamente) (Carey, 2000)

Figura 3. Clasificación de las aminas.



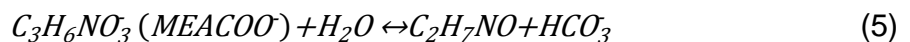
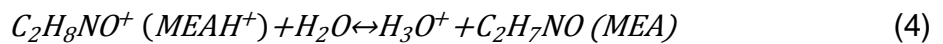
como se ve en la Figura 3. Las aminas primarias y secundarias son bastante reactivas en comparación con las aminas terciarias, sin embargo la cantidad de energía requerida para la regeneración cuando son utilizadas como solventes es mucho menor cuando se utilizan aminas terciarias. Las aminas más utilizadas como solventes son las aminas primarias MEA y DGA, las aminas secundarias DEA y diisopropanolamina (DIPA), y las aminas terciarias metildietanolamina (MDEA) y trietanolamina (TEA)(Carey, 2000; Mofarahi, Khojasteh, Khaledi, & Farahnak, 2008; Nuchitprasittichai & Cremaschi, 2011; Rinker, Ashour, & Sandall, 2000). De las alcanolaminas anteriores, la MEA es la más estudiada para el proceso de absorción de CO₂ y posee varias ventajas sobre las demás(Kothandaraman, 2010; Liu, Zhang, & Watanasiri, 1999):

- a) Entre las alcanolaminas, es la base más fuerte con la velocidad de reacción más alta, llevando a la obtención de CO₂ de alta pureza.
- b) Tiene un bajo peso molecular y una alta capacidad de absorción en base peso, además su costo es bajo.
- c) Soporta una carga relativamente alta, de hasta 0.5 mol de CO₂/mol de MEA, es decir que se necesitan dos moles de MEA para reaccionar con una mol de CO₂.
- d) Es térmicamente estable a temperaturas relativamente altas (125°C).

Algunas de las desventajas de la MEA son:

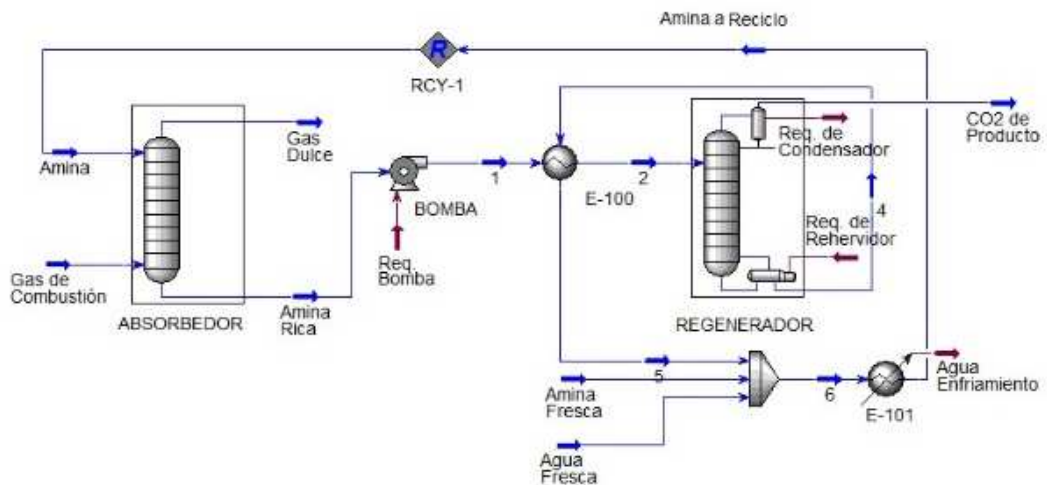
- a) El calor de reacción con CO₂ es alto, lo que lleva a altos consumos de energía para realizar la etapa de desorción.
- b) Sufre de más pérdida por vaporización que otras alcanolaminas.
- c) Es altamente corrosiva.

En el proceso de captura de CO₂ por absorción/desorción con MEA se llevan a cabo las siguientes reacciones reversibles(Austgen, Rochelle, Peng, & Chen, 1989):



La primera reacción (1) es la ionización del agua. En la segunda reacción (2) se presenta la hidrólisis e ionización del CO₂ disuelto. La tercera reacción (3) es la disociación del bicarbonato, seguida de (4) la disociación de la MEA hidrogenada

Figura 4. Diagrama de flujo del proceso de absorción con aminas.



(MEA H⁺) y por último se presenta la reversión del carbamato de MEA (MEACOO⁻) a bicarbonato. Otras reacciones no reversibles en las que se forman compuestos heterocíclicos se pueden presentar(Kohl & Nielsen, 1997), sin embargo para el proceso de captura de CO₂ con MEA éstas no son consideradas importantes(Austgen et al., 1989).

2.2.2 Descripción del proceso

El proceso de captura de CO₂ vía absorción con aminas (Figura 4) es un proceso de absorción/desorción convencional (Couper, Penney, Fair, & Walas, 2005). La etapa de absorción se lleva a cabo generalmente en una torre empacada, donde los gases de combustión son alimentados por el fondo y entran en contacto a contracorriente con la solución de amina, que es alimentada por el tope de la torre. Una vez que la amina ha reaccionado químicamente con el CO₂, ésta deja el absorbedor por el fondo como una corriente de amina rica, y el gas limpio sale por el tope. La amina rica es bombeada y calentada para ser alimentada al regenerador. El regenerador, es una torre empacada equipada con un condensador y un rehervidor. En esta torre la amina rica entra en contacto a contracorriente con los vapores generados en el rehervidor propiciando la separación del CO₂ de la fase líquida. Por el tope de la torre sale H₂O y CO₂, que son enviados al condensador para separarlos mediante la condensación del agua, y así obtener una corriente de CO₂ de producto de alta pureza. El agua condensada es retornada al tope de la torre, mientras que el CO₂ de producto es enviado a una etapa de compresión y almacenamiento. El solvente recuperado sale por el fondo de la torre y es enfriado para ser recirculado hacia el absorbedor. Amina y agua fresca son inyectadas al proceso para mantener las condiciones de concentración y flujo en la corriente de amina que entra al absorbedor (Kothandaraman, 2010; Nuchitprasittichai & Cremaschi, 2013).

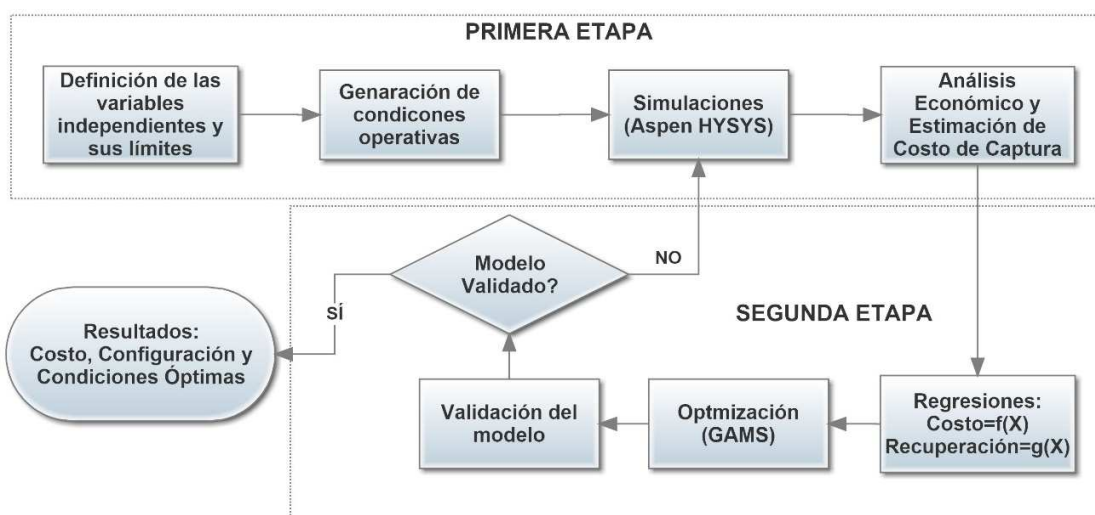
La mayor desventaja de este proceso es el alto requerimiento de calor en el rehervidor para la regeneración del solvente, lo que hace que, además de aumentar el costo de captura, se presente una disminución en la eficiencia de los procesos de conversión de energía cuando se implementa el proceso captura de CO₂ vía absorción con aminas (Davison, 2007; IEA Greenhouse Gas R&D Programme, 2004). Este requerimiento calórico es alto debido a que (Kothandaraman, 2010):

- Se requiere suministrar el calor sensible para igualar la temperatura del solvente en la alimentación del regenerador con la temperatura del solvente dentro del regenerador.
- El calor necesario para revertir la absorción es alto.
- Se debe suministrar el calor para producir el vapor para mantener la fuerza motora de la transferencia del CO₂ de la fase líquida a la fase gaseosa.

3. METODOLOGÍA

La metodología seguida en este trabajo se dividió en dos etapas (Figura 5): la primera fue la simulación, el análisis económico, la estimación del costo de captura y recuperación de CO₂ para diferentes condiciones y estructuras (número de etapas en el absorbedor y el regenerador) del proceso, éstas condiciones fueron generadas perturbando aleatoriamente las variables de entrada, cumpliendo siempre con los límites definidos para cada variable, dichos límites fueron determinados con base en trabajos anteriores y el análisis del proceso; la segunda etapa es la generación de modelos de regresión a partir de los resultados obtenidos en la primera etapa, con estos modelos se estimó el costo de captura por tonelada de CO₂ (\$/tonCO₂) y el porcentaje de recuperación de CO₂, teniendo como variables de entrada las mismas variables utilizadas en la primera etapa. En la segunda etapa además se planteó un modelo de optimización, que utilizó la regresión del costo de captura de CO₂ como función objetivo, teniendo un porcentaje fijo de recuperación como restricción. Al final de la aplicación de la metodología se obtuvo como resultado el costo y las condiciones óptimas de operación para el caso de estudio.

Figura 5. Etapas de la metodología de simulación y optimización

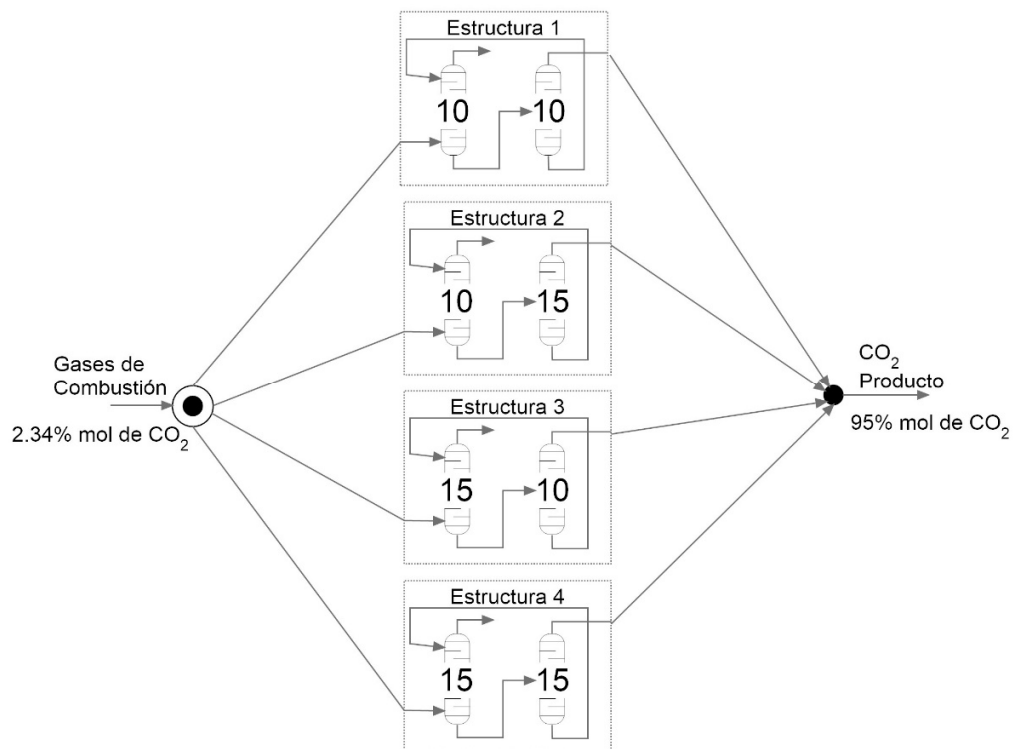


3.1 PRIMERA ETAPA: SIMULACIÓN Y ANÁLISIS ECONÓMICO

3.1.1 Definición de las variables de independientes y sus límites

Numerosos estudios muestran que las variables que más influyen en el costo de captura de CO_2 vía absorción con aminas son el requerimiento energético del rehervidor para la regeneración del solvente, la concentración y flujo del solvente, y el número de etapas en el absorbedor y el regenerador (Alie et al., 2005; Chakma et al., 1995; Halim & Srinivasan, 2007; Mofarahi et al., 2008; Nuchitprasittichai & Cremaschi, 2011; Zhou et al., 2008). En este trabajo se seleccionaron el requerimiento energético del rehervidor, la concentración y el flujo de solvente en la alimentación al absorbedor como las variables independientes del proceso. Adicionalmente se consideraron cuatro configuraciones de las torres, en las cuales el número de etapas fueron fijadas en 10 ó 15, dando como resultado una superestructura con cuatro configuraciones posibles (Figura 6).

Figura 6. Superestructura del proceso de absorción con MEA.



Los límites de las variables independientes se resumen en la Tabla 1. Estos límites fueron fijados basados en la literatura y adaptados a nuestro caso de estudio. Aunque muchos de los solventes comerciales a base de MEA trabajan con una concentración del 30% p/p(IIJIMA et al., 2011; Reddy et al., 2003), el manual básico de Aspen HYSYS recomienda trabajar con concentraciones de MEA entre 15 y 25% en peso, no obstante el paquete de fluidos especial para aminas soporta una concentración máxima de 30% peso(Basis, n.d.).

Tabla 1. Límites de las variables independientes

VARIABLE	LÍMITE INFERIOR	LÍMITE SUPERIOR
Concentración MEA (% peso)	15%	25%
Flujo MEA (kmol/h)	40000	200000
Requerimiento del Rehervidor (MW)	93.3	750

Los límites del flujo de MEA a la entrada del absorbedor se fijaron teniendo en cuenta el flujo de CO₂ en los gases de combustión, de tal manera que la carga (moles de CO₂/moles de MEA) variara entre 0.05 y 0.4. Los límites del calor requerido en el rehervidor fueron fijados basados en el trabajo realizado por Alie et al.(Alie et al., 2005) y adaptados a nuestro caso de estudio. Mediante simulaciones de prueba se realizó la corrección y validación de los límites anteriormente mencionados.

3.1.2 Generación de condiciones operación

Una vez fijados los límites de las variables independientes, se procedió a la generación de las condiciones de operación a las cuales sería simulado el proceso. Estas condiciones de operación se obtuvieron formando combinaciones aleatorias de las variables independientes, cuyos valores fueron generados mediante la siguiente ecuación(Guerra Fernandez, 2009; Guerra & Le Roux, 2011):

$$X_{i,j} = X_{i,j}^{min} + Aleatorio. (X_{i,j}^{max} - X_{i,j}^{min}) \quad \text{Ec. 1}$$

Donde el subíndice i representa la variable 1, 2 ó 3 (concentración del solvente, flujo de solvente y requerimiento del rehervidor, respectivamente), y el subíndice j representa la estructura 1, 2, 3 ó 4. Se puede notar que cuando el número aleatorio toma el valor de 0 la variable $X_{i,j}$ se encuentra sobre el límite inferior, y en el límite superior cuando el aleatorio vale 1. El conjunto básico de datos constó 20 condiciones de operación: 18 condiciones aleatorias, la condición de las variables en el límite superior y, la condición de las variables en el límite inferior.

3.1.3 Simulación del proceso de absorción de CO₂ con MEA

Las simulaciones del proceso se llevaron a cabo utilizando Aspen HYSYS V7.2. Se utilizó 'Amine Pkg' como paquete de fluidos, y se seleccionó Li-Mather como modelo de equilibrio (Basis, n.d.).

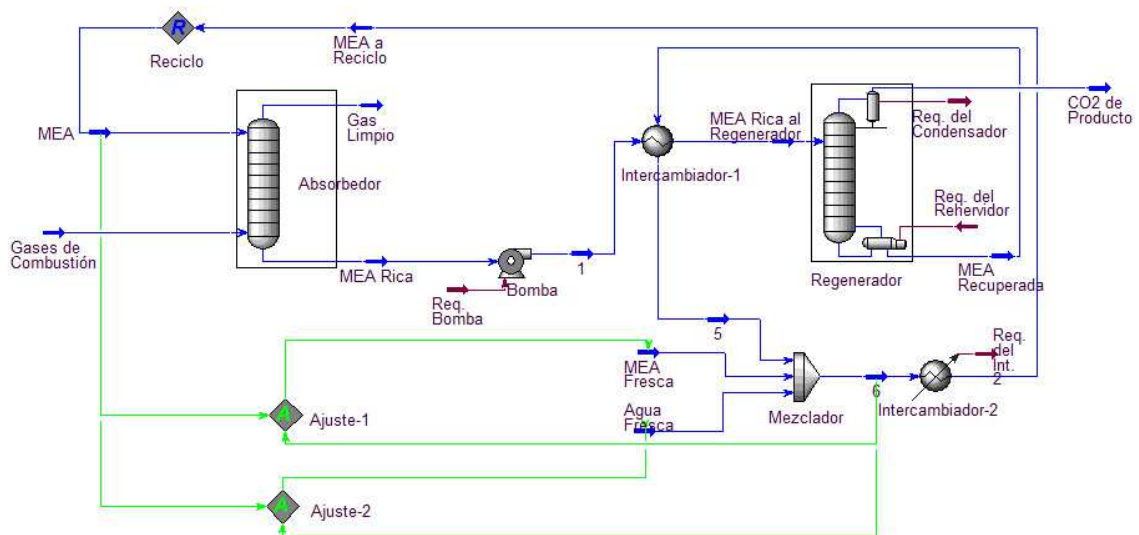
La composición, flujo, presión y temperatura de los gases de combustión a la entrada del absorbedor fueron fijadas, constituyendo estas condiciones el caso de estudio (Tabla 2). Estas condiciones de flujo y composición son típicas de gases de combustión de plantas de generación energía eléctrica a partir de gas (Hasan et al., 2012; Mofarahi et al., 2008) con una generación de aproximadamente 45 MWh (Estrategia Aragonesa de cambio climático y energías limpias, 2013). En Colombia las termoeléctricas a gas generan alrededor del 15% del total de energía demandada (Ministerio de Minas, 2013).

Tabla 2. Condiciones del gas de combustión. Caso de estudio.

Componente	% mol
H ₂ O	8.95
CO ₂	2.34
N ₂	76.27
O ₂	12.44
Flujo = 20000 kmol/h	
T= 40°C	P=110 kPa

El proceso de absorción fue simulado como un absorbedor adiabático, y el regenerador fue simulado como una torre de destilación con un condensador con reflujo total y un rehervidor tipo *kettle* (Figura 7). Para la convergencia del absorbedor se especificaron el número de etapas y la caída de presión (Karpe & Aichele, 2013), y siguiendo las recomendaciones del manual básico de Hysys (Basis, n.d.) se fijaron la eficiencia de cada etapa en 0.15 y el factor de amortiguamiento (*damping factor*) en 0.4. En el regenerador se especificó el número

Figura 7. Simulación del proceso de captura de CO₂ con MEA.



de etapas, la caída de presión (Karpe & Aichele, 2013), la pureza de la corriente de CO₂ de producto (95% mol de CO₂) y el requerimiento calórico en el rehervidor. Otros equipos utilizados en la simulación fueron: una bomba, dos intercambiadores de calor, un mezclador (para la alimentación de amina y agua fresca), un reciclo y dos operaciones de ajuste. Las operaciones de ajuste calcularon el flujo de alimentación de amina y agua fresca de tal manera que el flujo y composición de la corriente 'MEA a reciclo' fueran iguales a las del solvente que entra al absorbedor, y así facilitar la convergencia del reciclo, y por ende, de toda la simulación.

Para el dimensionamiento de las torres se utilizó la herramienta 'Tray Sizing' de Hysys, la cual calculó la altura por etapa y el diámetro de las torres especificándolas

como torres empacadas(Aspentech, 2010). Un resumen de otras condiciones y parámetros utilizados para las simulaciones se encuentran en el Anexo A.

La información que se obtuvo de cada simulación fue: la recuperación, el requerimiento de agua de enfriamiento (requerimiento del condensador + requerimiento del intercambiador- 2), flujo de alimentación de MEA y agua fresca (kg/h), consumo de electricidad (requerimiento de la bomba), y la cantidad de CO₂ recuperado (kg/h). Los resultados de las simulaciones fueron tabulados en Microsoft Excel y fueron utilizados para el análisis económico y la estimación del costo de captura a las condiciones de operación simuladas.

3.1.4 Análisis económico y estimación del costo de captura

Con los datos obtenidos de las simulaciones se hizo un análisis económico que incluyó la estimación de los costos de inversión (CAPEX) y los costos operativos (OPEX). La estimación del costo de los equipos se hizo utilizando la herramienta CAPCOST V2(Turton, Bailie, Whiting, & Shaeiwitz, 2009), la cual utiliza la técnica de costo del módulo desnudo de Guthrie, para dicha versión, el costo de adquisición de los equipos tiene como año base el 2006(Turton et al., 2009), y fueron ajustados usando el CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*) de 2011, que tiene un valor de 585.7(Chemical Engineering, 2013). El análisis económico también incluyó el costo de los servicios requeridos y el análisis de flujo de caja.

Las siguientes consideraciones fueron tenidas en cuenta para el análisis económico:

- El CO₂ producido no tiene precio de venta. Se captura para cumplir con normas ambientales o políticas empresariales.
- El tiempo de vida de la planta de es de 20 años, sin valor de salvamento.
- La planta de captura de CO₂ se añade a una planta de energía existente.
- El factor de funcionamiento (días de operación al año/ días totales del año) es de 0.95.

- El costo de supervisión directa y trabajo de oficina es igual al 18% del costo de la mano de obra operativa.
- El costo de mantenimiento y reparación es igual al 6% de la inversión fija.
- El costo de los suministros operativos es del 0.9% de la inversión fija.
- Los cargos de laboratorio son del 15% del costo de mano de obra.
- Se necesitan 3 operadores por turno (8 horas) con salarios de US\$35000 al año, incluidos beneficios.
- Los impuestos y seguros representan el 3.2% de la inversión fija.
- Los gastos generales de la planta son iguales al 70.8% del costo de mano de obra.
- Los gastos administrativos son 17% del costo mano de obra.
- El costo de venta y distribución, y de investigación y desarrollo son el 11% y el 5% del costo de producción respectivamente.
- El método de depreciación usado fue el de la disminución del doble saldo (*Double declining balance, DDB*)(Turton et al., 2009), para un tiempo de retorno de 10 años.
- Se asumió una inflación de 3% anual y una tasa de oportunidad del 10%.
- El costo de la MEA es de US\$1.3/kg(Kohl & Nielsen, 1997; Rao & Rubin, 2002).
- El costo del agua de enfriamiento, agua del proceso, vapor de baja, y electricidad es de US\$0.0506/m³, US\$0.3/m³, US\$3/1000kg, US\$0.07/kg(Peters & Timmerhaus, 1991).

Para la estimación de costo de captura se dividió el Valor Presente Neto (VPN) entre la cantidad total capturada de CO₂ durante la vida útil del proyecto(Nuchitprasittichai & Cremaschi, 2011):

$$\text{Costo de Captura } (\$/tCO_2) = \frac{\text{Valor Presente Neto}}{CO_2 \text{ capturado durante la vida del proyecto } (tCO_2)} \quad \text{Ec. 2}$$

El costo de captura fue tabulado en MS Excel, junto a los resultados de las simulaciones. Más detalle sobre el análisis económico se puede encontrar en el ANEXO B.

3.2 SEGUNDA PARTE: OPTIMIZACIÓN

3.2.1 Regresiones para costo y recuperación

Se realizaron regresiones para el costo de captura y la recuperación en función de las variables independientes $X_{i,j}$, que se pueden representar en forma vectorial, así:

$$X_{i,j} = \begin{bmatrix} X_{1,j} \\ X_{2,j} \\ X_{3,j} \end{bmatrix}$$

Donde para una estructura j , $X_{1,j}$ es la concentración (%p/p) del solvente en la alimentación al absorbedor, $X_{2,j}$ es el flujo de solvente (kmol/h) y $X_{3,j}$ es el requerimiento de calor del rehervidor (MW). Antes de hacer las regresiones, estas variables fueron normalizadas de tal manera que estuvieran en el intervalo [0,1] utilizando la siguiente expresión:

$$x_{i,j} = \frac{X_{i,j} - X_{i,j}^{min}}{X_{i,j}^{max} - X_{i,j}^{min}} \quad \text{Ec. 3}$$

Donde $x_{i,j}$ (minúscula) es el valor que toma la variable normalizada y, $X_{i,j}^{min}$ y $X_{i,j}^{max}$ son los límites inferior y superior de la variable sin normalizar $X_{i,j}$, respectivamente. El motivo de normalizar las variables fue asegurar que las regresiones no fueran a estar sesgadas debido a la gran diferencia en el orden de magnitud de las variables independientes originales. El modelo de regresión planteado fue de la forma:

$$C_j = \alpha_{0,j} + \sum_{i=1}^3 \alpha_{i,j} x_{i,j} + \sum_{i=1}^3 \beta_{i,j} x_{i,j}^2 + \sum_{k=1}^3 \sum_{i < k} \delta_{i,j} x_{i,j} x_{k,j} \quad \text{Ec. 4}$$

donde C_j es el costo de captura (\$/tCO₂) para una estructura j , $\alpha_{i,j}$, $\beta_{i,j}$ y $\delta_{i,j}$ son los coeficientes de regresión que acompañan a los términos lineales, cuadráticos y productos bilineales ($x_{1,j}x_{2,j}$, $x_{1,j}x_{3,j}$ y $x_{2,j}x_{3,j}$), respectivamente. El modelo de regresión

para la recuperación en una estructura j (**rec $_j$**) tuvo la misma forma de la ecuación Ec. 4. Cada correlación puede tener máximo nueve variables regresoras.

El procedimiento de selección del modelo de regresión que se utilizó en el modelo de optimización constó los siguientes pasos:

- Se ordenaron las 9 variables de regresión según su grado de relación con la variable dependiente (costo o recuperación). El criterio utilizado para esto fue el coeficiente de correlación de Pearson (ρ), cuyos valores varían entre -1 y 1. Si el coeficiente de correlación toma valor de 1, la relación entre la variable de entrada y salida es directa y perfecta, en cambio si toma un valor de -1, la relación entre las variables es inversa y perfecta, si el valor es 0, significa que no existe una relación lineal entre las variables (Montgomery & Runger, 2003). Como se ve, el signo del coeficiente de correlación ρ indica si la relación entre variables es directa o inversa, así que las variables de regresión fueron ordenadas de mayor a menor valor absoluto del coeficiente de correlación de Pearson.
- Una vez ordenadas las variables, se hicieron regresiones con 9 variables de regresión, luego se eliminó la variable regresora con menor valor del coeficiente de correlación y se hizo la regresión, y así sucesivamente hasta que no se pudieran eliminar más variables de regresión. Para dichas regresiones se utilizó el método de los mínimos cuadrados, que viene implementado como herramienta de análisis de datos en Microsoft Excel.
- Del punto anterior obtuvimos varios posibles modelos de regresión para incluir en el modelo de optimización, así que el criterio que se utilizó para la selección de dicho modelo fue el coeficiente de determinación múltiple ajustado $\overline{R^2}$, la regresión con mayor valor de $\overline{R^2}$ fue seleccionada.

Una vez seleccionadas las regresiones de costo y recuperación, las ecuaciones para el modelo se pueden resumir como:

$$\mathbf{a)} \quad COSTO = \sum_{j=1}^4 C_j \qquad \mathbf{b)} \quad R = \sum_{j=1}^4 rec_j \qquad \text{Ec. 5}$$

Este proceso se realizó para cada estructura j en cada iteración. Más información sobre los estadísticos utilizados se encuentra en el ANEXO C.

3.2.2 Modelo de optimización

El planteamiento del problema de optimización se resume de la siguiente forma:

Dado el flujo, presión, temperatura y composición de una corriente de gases de combustión, determinar las condiciones de operación y la configuración del proceso de absorción con MEA que minimice el costo de captura de CO₂ para una recuperación dada.

Dado que la función objetivo $COSTO$ y la restricción sobre la recuperación R son funciones no lineales, y que se deben definir variables binarias para la selección de una de las cuatro configuraciones de la superestructura, el problema de optimización resultante es un MINLP (Mixto Entero No Lineal), cuyas variables de decisión son:

- $\mathbf{x}_{i,j}$: La concentración del solvente, el flujo de solvente y el requerimiento del rehervidor (12 variables, 3 por estructura).
- \mathbf{y}_j : La variable binaria que selecciona entre las configuraciones de la superestructura (4 variables, 1 por estructura).
- \mathbf{R} : La recuperación.

Los parámetros del modelo son:

- Los coeficientes de regresión de la función de $COSTO$ y recuperación R para las estructuras j (representados con letras griegas).
- El límite inferior de la recuperación r_{req} .

Matemáticamente el modelo queda planteado de la siguiente manera:

$$\min COSTO = \sum_{j=1}^4 \alpha_{0,j} \cdot y_j + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=1}^3 \alpha_{i,j} x_{i,j} y_j + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=1}^3 \beta_{i,j} x_{i,j}^2 y_j + \sum_{j=1}^4 \sum_{k=1}^3 \sum_{i < k} \delta_{i,j} x_{i,j} x_{k,j} y_j \quad \text{Ec. 6}$$

Sujeto a:

$$R = \sum_{j=1}^4 \vartheta_{0,j} \cdot y_j + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=1}^3 \vartheta_{i,j} x_{i,j} y_j + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=1}^3 \mu_{i,j} x_{i,j}^2 y_j + \sum_{j=1}^4 \sum_{k=1}^3 \sum_{i < k} \varphi_{i,j} x_{i,j} x_{k,j} y_j \quad \text{Ec. 7}$$

$$x_{i,j}^{\min} \cdot y_j \leq x_{i,j} \leq x_{i,j}^{\max} \cdot y_j \quad \text{Ec. 8}$$

$$\sum_{j=1}^4 y_j = 1 \quad \text{Ec. 9}$$

$$r_{req} \cdot y_j \leq rec_j \leq 1 \cdot y_j \quad \text{Ec. 10}$$

Donde Ec. 6 es la función objetivo (forma completa de Ec. 5.a), la ecuación Ec. 7 es la restricción de recuperación (forma completa de Ec. 5.b). Ec. 8 es la restricción que define la existencia de la estructura j . La ecuación Ec. 9 restringe la selección de la estructura a solo una y con Ec. 10 se definen los límites de la recuperación.

El modelo resultante tiene 17 variables y 2 ecuaciones (Ec.7 y Ec.9), es decir 15 grados de libertad. Este modelo fue implementado en GAMS V23.5 y solucionado utilizando el *solver* BARON (*Branch-And-Reduce Optimization Navigator*) (Sahinidis, 2013) para hallar el óptimo global en la zona comprendida por recuperaciones entre 0.85 y 0.95. Debido a la no-linealidad de las ecuaciones que comprenden este problema de optimización, es altamente probable que existan mínimos locales entre las soluciones, y al utilizar un *solver* global como BARON, aseguramos que la solución obtenida sea el mínimo global.

3.2.3 Validación del modelo

En este trabajo el modelo de optimización fue validado para tres puntos de la recuperación r_{req} . 0.85, 0.9 y 0.95. Una vez solucionado el modelo para cada punto, se hicieron simulaciones con las condiciones óptimas en las estructuras que predijo el modelo de optimización, es decir con las que se obtenía el menor costo de captura. Se calculó el error relativo entre los datos proporcionados por el modelo de

optimización en GAMS y los obtenidos por simulación en HYSYS para el costo y la recuperación, si este error era mayor al 5%, se simuló con las mismas condiciones en las otras estructuras y los datos obtenidos se agregaron al conjunto de simulaciones iniciales, para generar nuevas regresiones de costo y recuperación. Una vez se alcanzó un error relativo menor al 5% se detuvo el proceso iterativo y se obtuvieron las condiciones, estructura y costo óptimos para el proceso de captura de CO₂ vía absorción con MEA.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS DE LA PRIMERA ETAPA

Los resultados de las simulaciones y el análisis económico muestran que el número de etapas influyen significativamente en el desempeño del proceso, obteniendo en promedio menores recuperaciones en las estructuras 1 y 2, donde el absorbedor tiene 10 etapas. El costo de captura también se vio afectado por el número de etapas en la estructura, mostrando menor costo en promedio las estructuras 3 y 4. En la Tabla 3 se muestran los resultados para las simulaciones y la estimación del costo de captura para el conjunto básico de simulaciones (entre $x_{i,j}=0$ y $x_{i,j}=1$):

Tabla 3. Resultados de las simulaciones y estimación de costo de captura del conjunto básico de datos.

Estructura (j)	rec _j (x _{i,j} =0)	rec _j (x _{i,j} =1)	rec _j promedio	C _j (\$/tCO ₂) (x _{i,j} =0)	C _j (\$/tCO ₂) (x _{i,j} =1)	C _j (\$/tCO ₂) promedio
1	65.45%	94.15%	84.59%	78.581	243.559	165.558
2	69.08%	83.33%	83.28%	74.430	273.844	167.809
3	81.10%	88.94%	92.03%	64.902	255.346	140.909
4	82.16%	98.09%	93.21%	65.465	222.232	128.275

Los resultados de todas las simulaciones se encuentran en el Anexo D.

El costo de inversión fija (CAPEX), como era de esperarse, aumentó con el número de etapas, pero, aunque las estructuras 3 y 4 tuvieron mayor CAPEX, el costo de captura en promedio fue menor para dichas estructuras, esto se debe a que el costo de captura también depende de los costos operativos (OPEX).

Tabla 4. Costo de inversión fija de cada estructura

Estructura	CAPEX*
1	US \$1'730.000
2	US \$1'750.000
3	US \$1'910.000
4	US \$1'960.000

**El costo de los equipos excluye equipo menor como bombas y tubería*

Como se puede ver de la Tabla 3 y la Tabla 4, el costo de captura de CO₂ por tonelada en promedio es bastante alto, y la correcta selección de la estructura y las condiciones operativas puede llevar a un ahorro significativo en la inversión fija y los costos operativos, lo que refuerza la importancia de optimizar el proceso de captura de CO₂.

4.2 DISCUSIÓN DE RESULTADOS DE LA SEGUNDA ETAPA

4.2.1 Resultados de las regresiones

Los modelos de regresión del costo de captura se ajustaron muy bien a los datos obtenidos mediante la simulación y estimación del costo, obteniendo $\overline{R^2}$ siempre por encima de 0.95, mientras que para la recuperación el comportamiento entre el modelo y los datos de las simulaciones fueron más dispersos. Aun así, el modelo de optimización convergió rápidamente con 4 iteraciones y 32 simulaciones en total (ANEXO E). En la Figura 8 y Figura 9 se muestran las gráficas de paridad para costo de captura y la recuperación, respectivamente, para la estructura 3, la cual fue asociada con el menor costo de captura por el modelo de optimización.

Figura 8. Gráfica de paridad del costo de captura.

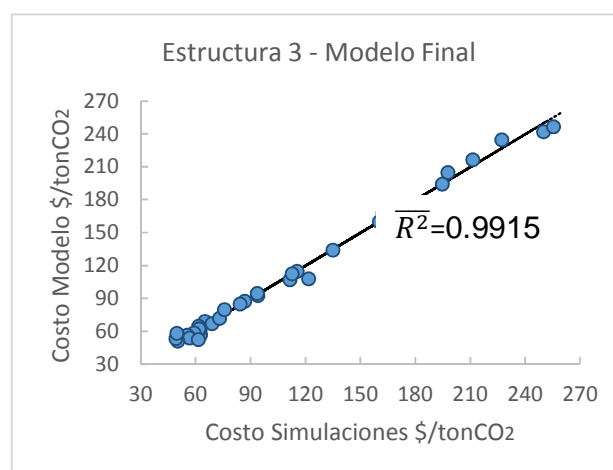
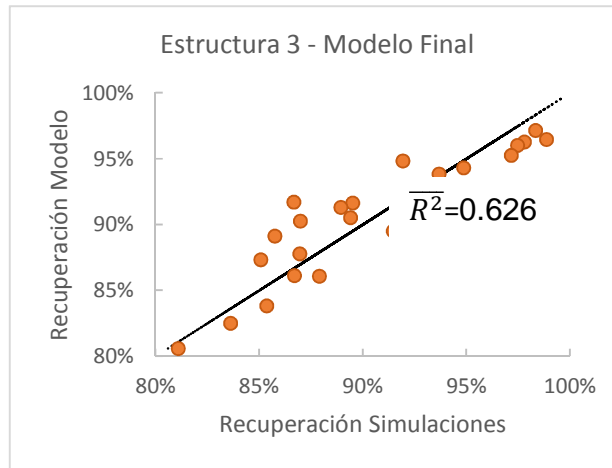
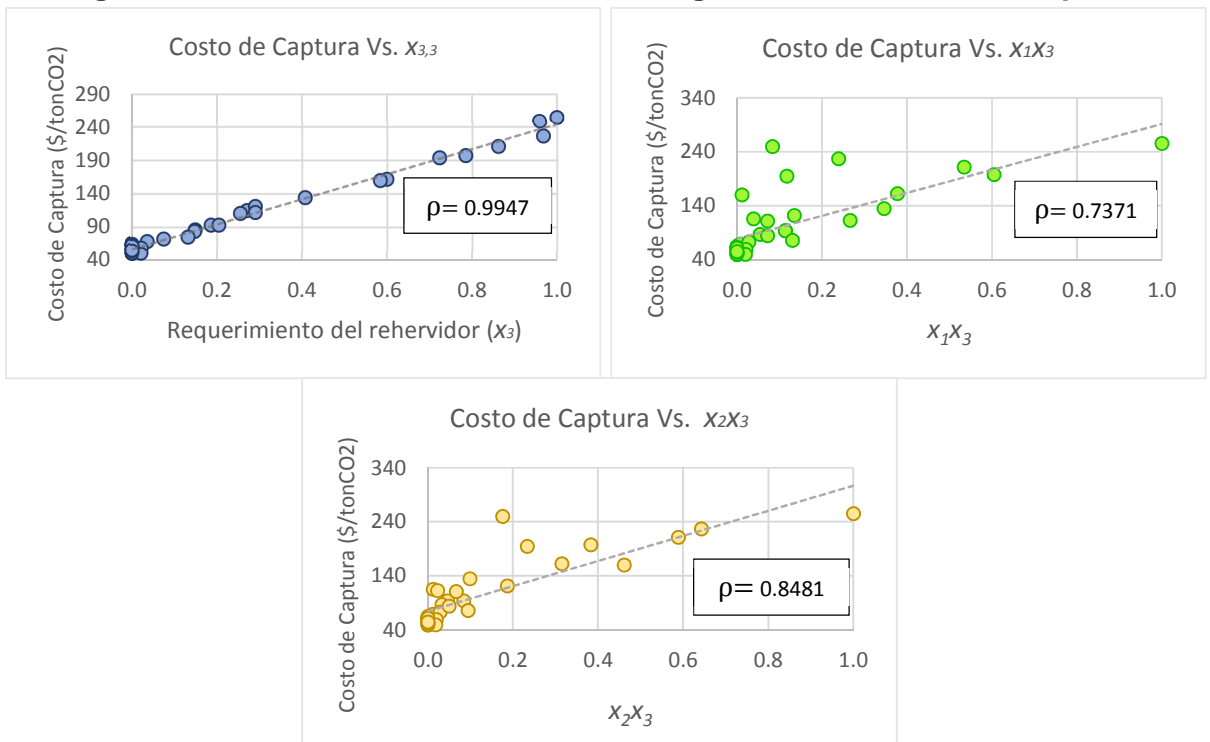


Figura 9. Gráfica de paridad de la recuperación



Las variables de regresión que más influyeron en el costo en la estructura 3 (subíndice $j=3$) según el coeficiente de correlación de Pearson (ρ) fueron el requerimiento del rehedidor x_3 , y los productos bilineales x_1x_3 y x_2x_3 (Figura 10).

Figura 10. Influencia de las variables de regresión en el costo de captura.



Se observa que en todos los casos la relación fue directa, mostrándose lineal en el caso del requerimiento del rehervidor.

Los resultados de $\overline{R^2}$ para cada estructura en cada iteración y de ρ se encuentran en los ANEXOS E y F.

4.2.2 Resultados del modelo de optimización

El modelo de optimización seleccionó a la estructura 3, de 15 etapas en el absorbedor y 10 en el regenerador, como la que proporcionó menor costo de captura para recuperaciones de 85%, 90% y 95%, se observó una tendencia del costo a aumentar con la recuperación. En la Tabla 5 se resumen los resultados y el error relativo entre los valores de simulación y del modelo de la optimización luego de 4 iteraciones:

Tabla 5. Resultados de costo de captura y recuperación óptimos

Costo Modelo (\$/tonCO ₂)	Costo Simulación (\$/tonCO ₂)	Error relativo costo (%)*	Recuperación requerida r_{req} (%)	Recuperación simulación (%)	Error relativo recuperación (%)*
51.639	50.050	3.17%	85%	85.36%	0.42%
53.283	53.551	0.50%	90%	91.83%	1.99%
55.170	54.617	1.01%	95%	94.11%	0.94%

*Valor absoluto del error relativo

Las condiciones de operación óptimas para cada caso se listan en la Tabla 6, donde se puede observar que a mayores recuperaciones, la concentración de solvente es mayor, pero el flujo disminuye, mientras el requerimiento del rehervidor permanece constante en el extremo inferior del intervalo fijado.

Tabla 6. Condiciones Óptimas de Operación

Recuperación=	Valor de la variable			Valor normalizado		
	85%	90%	95%	85%	90%	95%
Conc. de solvente (%p/p)	20.45	22.12	24.51	0.546	0.712	0.951
Flujo de solvente (kmol/h)	193600	173600	147200	0.960	0.835	0.670
Req. Del rehervidor (MW)	93.3	93.3	93.3	0	0	0

Aunque en la mayoría de trabajos encontrados en la bibliografía se abordan casos de estudio diferentes y varían las consideraciones iniciales, los resultados encontrados en este trabajo son comparables con otros encontrados en la literatura para casos de estudio similares, como se muestra en la Tabla 7:

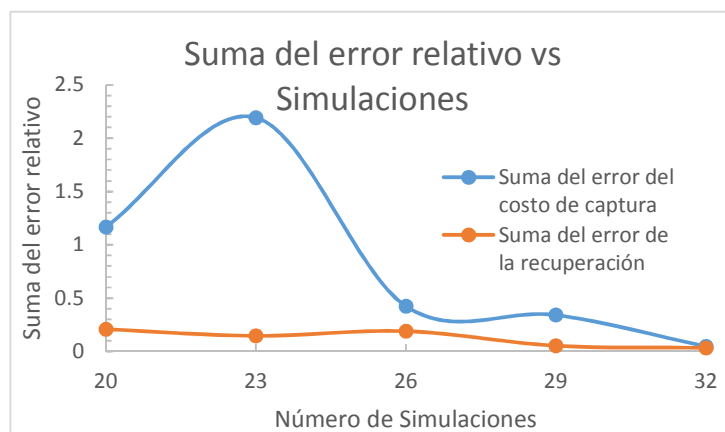
Tabla 7. Comparación de resultados con la literatura

	Bernier et al. (2010)	Nuchitprasittichai et al (2011)	Este trabajo
Costo (\$/tCO₂)	62.43	49.17	53.551
Recuperación	90%	96%	90%
Etapas (Abs.-Reg.)	11-16	20-9	15-10

4.2.3 Análisis del error

En cada iteración se calculó el error relativo para el costo de captura y la recuperación (ANEXO E), mostrando que en general, el error disminuyó al añadir simulaciones con las condiciones predichas como óptimas en cada iteración (Figura 11). Esto se pudo deber a que el aumento de datos en la zona de interés (recuperaciones de 85%-95%) mejoró los modelos de regresión, y por ende facilitó la convergencia del proceso de simulación y optimización.

Figura 11. Suma del error relativo en cada iteración



5. CONCLUSIONES

En este trabajo se simuló y optimizó el proceso de captura de CO₂ vía absorción con MEA, variando la concentración de MEA en la alimentación al absorbedor, el flujo de solvente y el requerimiento calórico en el proceso de regeneración, para cuatro estructuras del proceso definidas con 10 o 15 etapas para el absorbedor y el regenerador. De los resultados obtenidos en este trabajo se concluye que:

- La metodología seguida en este trabajo es una alternativa que facilita el análisis tecno-económico del complejo proceso de absorción con aminas, disminuyendo el número de simulaciones necesarias para obtener resultados con tolerancias aceptables.
- Las variables de regresión con mayor valor del coeficiente de correlación ρ para el costo de captura fueron el requerimiento del rehervidor, y los productos bilineales de ésta con la concentración y con el flujo de solvente, afectando en forma directa el costo de captura de CO₂.
- Para recuperaciones del 85, 90 y 95% la estructura con la que se alcanza el menor costo de captura tiene 15 etapas en el absorbedor y 10 en el regenerador. Los costos óptimos de captura en este trabajo fueron de 50.1, 53.6, 54.6 \$/tonCO₂ para recuperaciones de 85, 90 y 95% respectivamente. Estos resultados son comparables con los encontrados en la literatura.
- Las condiciones óptimas de operación (Tabla 6), muestran que el costo de captura mínimo se obtiene manteniendo bajo el calor suministrado para la regeneración del solvente, y es más viable obtener mayores recuperaciones a bajo costo variando la concentración y el flujo de solvente.
- Con la utilización del *solver* global BARON, se asegura que la solución del problema de optimización sea un óptimo global, lo que hace que esta metodología pueda ser extendida en la selección de solventes.

6. RECOMENDACIONES Y TRABAJOS FUTUROS

Se comprobó con un caso de estudio que la metodología de simulación y optimización seguida en este trabajo facilita el modelamiento y análisis económico del proceso de absorción con aminas, por lo que se recomienda:

- Extender esta metodología a la evaluación de varias aminas como solvente aplicado a varios casos de estudio, como gases de combustión provenientes de la producción de energía a partir del carbón, refinerías de petróleo o de la producción de cemento.
- Aunque las variables tomadas en este trabajo como variables de decisión son las que más afectan el costo según la literatura, el modelamiento se puede hacer más robusto si se incluyen otras variables de proceso, por ejemplo, la presión y temperatura de operación de las torres.
- Dada la urgencia de mitigar las emisiones de gases de efecto invernadero a la atmósfera, es necesario seguir desarrollando trabajos de investigación relacionados con el desarrollo de procesos más limpios y estrategias para la disminución de las emisiones de contaminantes a la atmósfera.

BIBLIOGRAFÍA

- Alie, C., Backham, L., Croiset, E., & Douglas, P. L. (2005). Simulation of CO₂ capture using MEA scrubbing: a flowsheet decomposition method. *Energy Conversion and Management*, 46, 475–487.
- Aspentech. (2010). *Aspen HYSYS: Unit Operations Guide*.
- Austgen, D. M., Rochelle, G. T., Peng, X., & Chen, C. C. (1989). Model of vapor-liquid equilibria for aqueous acid gas-alkanolamine systems using the electrolyte-NRTL equation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 28, 1060–1073.
- Basis, S. (n.d.). Aspen HYSYS.
- Benemann, J. R. (1997). CO₂ mitigation with microalgae systems. *Energy Conversion and Management*, 38, 475–479.
- Bernier, E., Maréchal, F., & Samson, R. (2010). Multi-objective design optimization of a natural gas-combined cycle with carbon dioxide capture in a life cycle perspective. *Energy*, 35, 1121–1128.
- Carey, F. A. (2000). *ORGANIC CHEMISTRY* (4th ed.). McGraw Hill.
- Chakma, A., Mehrotra, A. K., & Nielsen, B. (1995). Comparison of chemical solvents for mitigating CO₂ emissions from coal-fired power plants. *Heat Recovery Systems and CHP*, 15, 231–240.
- Chemical Engineering. (2013). Chemical Engineering Plant Cost Index.
- Couper, J. R., Penney, W. R., Fair, J. R., & Walas, S. M. (Eds.). (2005). Distillation and Gas Absorption. In *Chemical Process Equipment* (2nd ed., pp. 397–482). Burlington: Gulf Professional Publishing.

- Davis, S. J., Caldeira, K., & Matthews, H. D. (2010). Future CO₂ Emissions and Climate Change from Existing Energy Infrastructure. *Science*, 329, 1330–1333.
- Davison, J. (2007). Performance and costs of power plants with capture and storage of CO₂. *Energy*, 32, 1163–1176.
- Estrategia Aragonesa de cambio climático y energías limpias. (2013). Calculadora de emisiones de CO₂. Retrieved from <http://calcarbono.servicios4.aragon.es/>
- Gibbins, J., & Chalmers, H. (2008). Carbon capture and storage. *Energy Policy*, 36, 4317–4322.
- Guerra Fernandez, O. J. (2009). *Formulacao de modelos de processo para o planejamento da producao em refinarias de petróleo*. Escola Politécnica da universidade de Sao Paulo.
- Guerra, O. J., & Le Roux, G. a. C. (2011). Improvements in Petroleum Refinery Planning: 2. Case Studies. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50, 13419–13426.
- Halim, I., & Srinivasan, R. (2007). A Simulation-Optimization Framework for Efficient CO₂ Capture Using Amine Absorption.
- 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.
- Husebye, J., Brunsvold, A. L., Roussanaly, S., & Zhang, X. (2012). Techno Economic Evaluation of Amine based CO₂ Capture: Impact of CO₂ Concentration and Steam Supply. *Energy Procedia*, 23, 381–390.
- IEA. (2012). *CO₂ Emissions from fuel combustion: Highlights*.

- IEA Greenhouse Gas R&D Programme. (2004). *Improvement in power generation with post-combustion capture of CO₂. Proceedings of GHGT*. Retrieved from [http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:IMPROVEMENT+IN+POWER+GENERATION+WITH+POST-COMBUSTION+CAPTURE+OF+CO₂#0](http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:IMPROVEMENT+IN+POWER+GENERATION+WITH+POST-COMBUSTION+CAPTURE+OF+CO2#0)
- IJIMA, M., NAGAYASU, T., KAMIJYO, T., & NAKATAN, S. (2011). MHI 's Energy Efficient Flue Gas CO₂ Capture Technology and Large Scale CCS Demonstration Test at Coal-fired Power Plants in USA. *Mitsubishi Heacy Industries Techincal Review*, 48, 26–32.
- Karpe, P., & Aichele, C. P. (2013). Amine modeling for CO₂ capture: internals selection. *Environmental science & technology*, 47, 3926–32.
- Klemeš, J., Bulatov, I., & Cockerill, T. (2007). Techno-economic modelling and cost functions of CO₂ capture processes. *Computers & Chemical Engineering*, 31, 445–455.
- Kohl, A. L., & Nielsen, R. B. (1997). Alkanolamines for Hydrogen Sulfide and Carbon Dioxide Removal. In *Gas Purification* (5th ed., pp. 40–186). Houston: Gulf Professional Publishing.
- Kothandaraman, A. (2010). *Carbon Dioxide Capture by Chemical Absorption: A Solvent Comparison Study. Carbon*.
- Liu, Y., Zhang, L., & Watanasiri, S. (1999). Representing Vapor–Liquid Equilibrium for an Aqueous MEA–CO₂ System Using the Electrolyte Nonrandom-Two-Liquid Model. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 38, 2080–2090.
- Mangalapally, H. P., Notz, R., Hoch, S., Asprion, N., Sieder, G., Garcia, H., & Hasse, H. (2009). Pilot plant experimental studies of post combustion CO₂ capture by reactive absorption with MEA and new solvents. *Energy Procedia*, 1, 963–970.

- Ministerio de Minas. (2013). Informe mensual de variables de generación y del mercado eléctrico Colombiano :Marzo 2013. Retrieved from <http://www.siel.gov.co/portals/0/boletin-marzo 2013.pdf>
- Mofarahi, M., Khojasteh, Y., Khaledi, H., & Farahnak, A. (2008). Design of CO₂ absorption plant for recovery of CO₂ from flue gases of gas turbine. *Energy*, 33, 1311–1319.
- Montgomery, D. C., & Runger, G. C. (2003). *Applied Statistics and Probability for Engineers* (3rd ed.). Jhon Wiley and Sons Inc.
- Mores, P., Scenna, N., & Mussati, S. (2010). Post-combustion CO₂ capture process: Equilibrium stage mathematical model of the chemical absorption of CO₂ into monoethanolamine (MEA) aqueous solution. *Chemical Engineering Research and Design*, 89, 1–13.
- Nuchitprasittichai, A., & Cremaschi, S. (2011). Optimization of CO₂ capture process with aqueous amines using response surface methodology. *Computers & Chemical Engineering*, 35, 1521–1531.
- Nuchitprasittichai, A., & Cremaschi, S. (2013). Sensitivity of amine-based CO₂ capture cost: The influences of CO₂ concentration in flue gas and utility cost fluctuations. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 13, 34–43.
- Peters, M. S., & Timmerhaus, K. D. (1991). *Plant Design and Economics For Chemical Engineers* (4th ed.).
- Pires, J. C. M., Martins, F. G., Alvim-Ferraz, M. C. M., & Simões, M. (2011). Recent developments on carbon capture and storage: An overview. *Chemical Engineering Research and Design*, 89, 1446–1460.
- Rackley, S. A. (2010). *Carbon Capture and Storage*. Elsevier.

- Rao, A. B., & Rubin, E. S. (2002). A technical, economic, and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plant greenhouse gas control. *Environmental science & technology*, 36, 4467–75.
- Reddy, S., Scherffius, J., & Freguia, S. (2003). Fluor ' s Econamine FG Plus SM Technology: An Enhanced Amine-Based CO₂ Capture Process. In *Second National Conference on Carbon Sequestration* (pp. 1–11). Alexandria, VA.
- Rinker, E. B., Ashour, S. S., & Sandall, O. C. (2000). Absorption of Carbon Dioxide into Aqueous Blends of Diethanolamine and Methyldiethanolamine. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 39, 4346–4356.
- Sahinidis, N. (2013). GAMS solvers manual: BARON.
- Seungmoon Lee, Sanjeev Maken, Jin-Won Park, Ho-Jun Song, Jong Jin Park, Jae-Goo Shim, Jun-Han Kim, H.-M. E. (2008). A study on the carbon dioxide recovery from 2 ton-CO₂/day pilot plant at LNG based power plant. *Fuel*, 87, 1734–1739.
- Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., & Shaeiwitz, J. A. (2009). *Analysys, Sintesis, and Design of Chemical Processes-* (3rd ed.). Prentice Hall. Retrieved from <http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:Prentice+Hall+PTR+International+Series+in+the+Physical+and+Chemical+Engineering+Sciences#0>
- Wang, M., Lawal, A., Stephenson, P., Sidders, J., & Ramshaw, C. (2011). Post-combustion CO₂ capture with chemical absorption: A state-of-the-art review. *Chemical Engineering Research and Design*, 89, 1609–1624.
- Yang, H., Xu, Z., Fan, M., Gupta, R., Slimane, R. B., Bland, A. E., & Wright, I. (2008). Progress in carbon dioxide separation and capture: a review. *Journal of environmental sciences (China)*, 20, 14–27.

Zhou, Q., Chan, C. W., & Tontiwachiwuthikul, P. (2008). Regression Analysis Study on the Carbon Dioxide Capture Process, *47*, 4937–4943.

ANEXOS

ANEXO A. Condiciones de operación en la simulación.

Presión de operación del absorbedor	110 kPa
Temperatura de operación de absorbedor	40°C
Caída de presión en el absorbedor	0.8 kPa/m (Karpe & Aichele, 2013)
Presión de operación del regenerador	200 kPa
Temperatura de operación de regenerador	100 °C
Caída de presión en el regenerador	0.8 kPa/m (Karpe & Aichele, 2013)
Eficiencia por etapa	0.15 para el absorbedor y el regenerador

La caída de presión en la tubería y los intercambiadores se consideró despreciable.

ANEXO B. Aspectos básicos del análisis económico.

El costo de producción (\$/año) (*COM, cost of manufacture*) es la suma de los costos directos de producción, más los costos fijos más los gastos generales. El *COM* se puede calcular una vez se halla estimado (Turton et al., 2009):

- La inversión fija (*FCI, fixed capital investment*), que se puede asumir igual a costo de los equipos.
- Costo de mano de obra (C_{OL})
- Costo de servicios (C_{UT})
- Costo de materias primas (C_{RM})

Siguiendo las suposiciones hechas para el análisis económico (Sección 3.1.4), el *COM* se calcula así (Turton et al., 2009):

$$COM = 0.180FCI + 2.73C_{OL} + 1.23(C_{UT} + C_{RM})$$

Los costos de los servicios (\$/año) (vapor, agua de proceso, agua de enfriamiento y electricidad) se calculan a partir de balances de masa y energía. Ejemplo: Se conoce el requerimiento de vapor (Q en kJ/hr), su poder calorífico (kJ/kg) y su costo (\$/kg) y se desea conocer el costo anual de este servicio (Turton et al., 2009):

$$Q = \dot{m}_{vapor} \Delta H_{vap} \rightarrow \dot{m}_{vapor} = \frac{Q}{\Delta H_{vap}} \text{ (kg/h)}$$

Entonces, el costo anual del vapor es:

$$\text{Costo Anual} = \dot{m}_{vapor} \left(\frac{kg}{hr} \right) * \text{costo} \left(\frac{\$}{kg} \right) * 24 \left(\frac{hr}{día} \right) * 365 \left(\frac{días}{año} \right) * 0.95$$

Donde 0.95 es el factor de funcionamiento (días de operación de la planta/días totales del año). El procedimiento es análogo para calcular el costo anual de todos los servicios, que al final se suman para dar el valor de C_{UT} .

Al *COM* se le debe sumar la depreciación, que se calculó por el método *Double Declining Balance* (Capítulo 9 de la referencia 40).

ANEXO C. Estadísticos.

El coeficiente de correlación de Pearson se calcula así(Montgomery & Runger, 2003):

$$\rho = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y}$$

Donde σ_{XY} es la covarianza, σ_X es la desviación estándar de la variable x, y σ_Y es la desviación estándar de la variable y. En Microsoft Excel se calcula mediante la función COEF.DE.CORREL(X,Y).

El coeficiente de determinación ajustado $\overline{R^2}$ se calcula de la siguiente forma(Montgomery & Runger, 2003):

$$\overline{R^2} = 1 - \frac{SS_E/(n - p)}{SS_T/(n - 1)}$$

Donde n es el número de observaciones, p es el número de parámetros del modelo, SS_E es la suma de los errores explicados al cuadrado y SS_T es la suma de los cuadrados totales (es decir, la suma de los cuadrados de los residuos más SS_E).

Como $SS_E/(n - p)$ es el cuadrado medio del error, y $SS_T/(n - 1)$ es una constante, entonces el $\overline{R^2}$ solo aumentará su valor al agregar una variable regresora que disminuya el cuadrado medio del error(Montgomery & Runger, 2003), eso hace que este criterio sea mejor que el R^2 , el cuál siempre aumenta al agregar variables regresoras. En otras palabras, el $\overline{R^2}$ muestra el equilibrio entre el ajuste y la complejidad del modelo.

ANEXO D. Resultados de las simulaciones y análisis económico

Tabla A. 1. Límites de las variables de entrada

VARIABLE	Límite Inferior	Límite Superior	Unidades
Conc. MEA	15%	25%	% p/p
Flujo MEA	40000	200000	kmol/h
Req. Del Rehervidor	93.33	750.00	MW

Tabla A. 2. Resultados simulaciones y costo - Estructura 1

RESULTADOS SIMULACIONES Y ESTIMACIÓN DE COSTOS - ESTRUCTURA 1 (10-10)									CAPEX=	US\$1,730,000
s	Conc. MEA (%p/p)	Flujo MEA (kmol/h)	Req. Del Rehervidor (MW)	Recuperación	Req. Agua Enfriamiento (MW)	Amina Fresca (g/h)	Agua del Proceso (kg/h)	Req. Energía Eléctrica (kW)	CO2 recuperado (t/h)	Costo CO2 (\$/tCO2)
1	15.0%	40000	93.33	65.45%	84.31	468.43	2755.97	26.69	13.48	78.58
2	17.8%	87014	398.37	80.23%	391.08	464.94	405.17	59.87	16.52	167.11
3	21.4%	78495	207.07	81.22%	199.92	466.27	508.23	56.07	16.73	101.47
4	18.2%	82681	570.86	77.70%	563.95	462.35	0.00	57.27	16.00	232.56
5	16.8%	75780	680.53	81.31%	672.47	457.65	1788.48	51.72	16.75	258.53
6	20.7%	186793	538.93	90.10%	532.33	457.10	0.00	131.70	18.56	191.21
7	18.3%	121381	637.58	81.39%	631.17	455.46	0.00	83.92	16.76	244.30
8	24.3%	65274	477.76	79.71%	470.28	456.99	691.32	47.54	16.42	195.03
9	19.1%	142374	128.16	88.49%	121.02	466.15	899.54	98.91	18.23	69.15
10	22.7%	174011	332.04	88.60%	325.66	459.27	22.83	123.82	18.25	131.35

Continuación de la Tabla A.2

s	Conc. MEA (%p/p)	Flujo MEA (kmol/h)	Req. Del Rehervidor (MW)	Recuperación	Req. Agua Enfriamiento (MW)	Amina Fresca (kg/h)	Agua del Proceso (kg/h)	Req. Energía Eléctrica (kW)	CO2 recuperado (t/h)	Costo CO2 (\$/tCO2)
11	15.6%	137316	298.29	78.82%	291.86	459.49	22.83	92.62	16.23	135.99
12	22.4%	127855	486.41	89.83%	479.58	468.44	135.29	91.57	18.50	175.85
13	22.1%	92668	194.60	82.17%	187.98	460.02	0.00	66.25	16.92	96.25
14	19.7%	163012	702.88	92.43%	695.79	456.41	288.71	114.16	19.04	234.19
15	24.6%	189687	550.53	90.53%	544.52	456.70	288.71	138.50	18.65	193.81
16	17.1%	103156	323.51	79.45%	316.84	456.91	288.71	70.71	16.36	143.36
17	24.4%	188717	290.77	96.27%	283.97	464.99	288.71	137.58	19.83	109.28
18	18.5%	186613	148.72	86.69%	142.08	461.95	288.71	128.89	17.85	77.07
19	22.9%	145452	653.50	87.37%	647.19	460.24	288.71	104.65	17.99	232.50
20	25.0%	200000	750.00	94.15%	743.71	466.71	0.00	147.17	19.39	243.56
21	25.0%	68160	93.33	77.86%	86.39	464.18	23.96	50.11	16.04	66.38
22	15.0%	76480	93.33	74.44%	85.56	464.72	1112.73	51.38	15.33	69.31
23	15.0%	100800	93.33	78.71%	85.97	456.16	927.68	67.45	16.21	65.66
24	19.2%	40000	93.33	71.35%	84.05	458.99	3159.08	27.77	14.70	72.03
25	25.0%	184960	107.33	92.54%	100.64	462.32	211.00	135.92	19.06	60.17
26	24.9%	155520	179.36	90.87%	172.98	461.98	235.16	114.07	18.72	82.66
27	20.5%	113120	93.33	83.32%	86.60	461.31	206.54	79.61	17.16	62.10
28	20.2%	152160	93.33	86.28%	86.58	462.94	206.83	106.79	17.77	60.04
29	22.7%	194720	93.33	78.82%	87.38	458.52	0.00	139.94	16.23	65.93
30	20.5%	199582	93.33	82.28%	86.81	466.61	23.96	140.25	16.95	63.08
31	23.2%	181384	93.33	86.62%	86.84	467.26	206.45	130.99	17.84	59.90
32	24.5%	177042	107.12	90.70%	100.71	456.23	231.53	129.38	18.68	61.32

- s es el número de simulaciones y las líneas de división horizontales representan cambios de iteración

Tabla A. 3. Resultados Simulaciones y costo - Estructura 2

RESULTADOS SIMULACIONES Y ESTIMACIÓN DE COSTOS - ESTRUCTURA 2 (10-15)									CAPEX=	US\$1,750,000
s	Conc. MEA (%p/p)	Flujo MEA (kmol/h)	Req. Del Rehervidor (MW)	Recuperación	Req. Agua Enfriamiento (MW)	Amina Fresca (kg/h)	Agua del Proceso (kg/h)	Req. Energía Eléctrica (kW)	CO2 recuperado (t/h)	Costo CO2 (\$/tCO2)
1	15.0%	40000	93.33	65.45%	84.31	468.09	2755.97	26.69	13.48	78.58
2	21.3%	103105	584.30	86.46%	577.39	493.50	367.06	72.94	17.81	214.56
3	23.8%	53551	175.08	78.40%	166.39	500.14	2299.36	38.72	16.15	95.73
4	18.2%	92504	583.31	82.36%	576.15	468.97	408.53	63.83	16.96	223.60
5	17.0%	109699	468.72	84.37%	461.52	439.39	598.29	74.86	17.38	179.99
6	20.0%	147236	119.58	89.54%	112.51	440.07	763.60	103.18	18.44	64.36
7	18.7%	171876	233.05	86.14%	226.36	415.74	1468.21	119.06	17.74	101.29
8	15.9%	123058	632.72	84.39%	625.63	438.71	579.17	83.79	17.38	232.49
9	23.1%	44450	425.90	75.64%	416.63	438.20	3077.39	31.95	15.58	185.08
10	19.8%	188357	377.18	93.37%	370.06	440.03	862.05	131.20	19.23	136.30
11	21.2%	114105	347.72	81.69%	341.56	437.39	0.00	80.89	16.82	146.01
12	20.2%	55198	161.92	77.41%	152.98	437.89	2772.03	38.75	15.94	88.76
13	18.1%	198401	573.65	94.07%	566.35	437.38	1109.58	136.84	19.38	191.68
14	20.0%	124179	618.62	87.25%	611.67	439.34	2577.78	87.21	17.97	220.52
15	23.2%	181351	594.13	89.42%	588.04	440.00	0.00	130.83	18.42	207.95
16	17.3%	56634	133.29	75.93%	124.17	414.72	3039.15	38.66	15.64	78.80
17	18.4%	133273	741.83	88.17%	734.78	412.52	575.22	92.24	18.16	254.67
18	17.0%	186637	339.55	77.72%	333.92	413.01	0.00	127.29	16.01	149.38
19	23.6%	75449	619.79	80.88%	612.86	415.44	109.66	54.48	16.66	236.75
20	25.0%	200000	750.00	83.33%	744.63	439.02	0.00	143.75	17.16	273.84

Continuación de la Tabla A.3

s	Conc. MEA (%p/p)	Flujo MEA (kmol/h)	Req. Del Rehervidor (MW)	Recuperación	Req. Agua Enfriamiento (MW)	Amina Fresca (kg/h)	Agua del Proceso (kg/h)	Req. Energía Eléctrica (kW)	CO2 recuperado (t/h)	Costo CO2 (\$/tCO2)
21	25.0%	68160	93.33	77.54%	86.42	499.04	0.00	50.11	15.97	68.57
22	15.0%	76480	93.33	75.80%	85.30	498.68	1623.42	51.19	15.61	69.99
23	15.0%	100800	93.33	74.74%	86.55	497.04	0.00	67.51	15.39	71.20
24	19.2%	40000	93.33	70.77%	84.10	476.56	3139.54	27.77	14.58	73.17
25	25.0%	184960	107.33	94.95%	100.41	475.52	855.53	135.90	19.56	59.02
26	24.9%	155520	179.36	93.02%	172.74	473.22	878.15	114.07	19.16	81.12
27	20.5%	113120	93.33	84.47%	86.45	473.82	22.75	79.61	17.40	61.65
28	21.4%	152160	93.33	86.73%	86.54	473.78	22.75	106.81	17.86	60.13
29	22.7%	194720	107.33	82.94%	101.43	472.94	22.75	139.91	17.08	67.64
30	20.6%	200000	100.17	83.17%	93.71	474.66	24.37	140.76	17.13	65.08
31	23.2%	181384	93.33	82.14%	87.25	472.54	24.37	132.04	16.92	63.67
32	24.5%	177042	107.12	79.65%	101.98	474.17	24.37	129.32	16.40	70.45

- s es el número de simulaciones y las líneas de división horizontales representan cambios de iteración

Tabla A. 4. Resultados simulaciones y costo - Estructura 3

RESULTADOS SIMULACIONES Y ESTIMACIÓN DE COSTOS - ESTRUCTURA 3 (15-10)									CAPEX=	US\$1,910,000
s	Conc. MEA (%p/p)	Flujo MEA (kmol/h)	Req. Del Rehervidor (MW)	Recuperación	Req. Agua Enfriamiento (MW)	Amina Fresca (kg/h)	Agua del Proceso (kg/h)	Req. Energía Eléctrica (kW)	CO2 recuperado (t/h)	Costo CO2 (\$/tCO2)
1	15.0%	40000	93.33	81.10%	82.71	494.59	4938.26	26.66	16.70	64.90
2	23.5%	78812	360.41	93.68%	353.77	519.04	0.00	56.80	19.29	134.85
3	17.0%	92792	116.40	85.76%	110.06	488.96	0.00	63.78	17.66	68.90
4	17.5%	146334	728.23	98.86%	721.11	488.96	593.42	100.95	20.36	226.97
5	21.1%	79488	215.04	92.52%	208.24	513.41	69.47	57.26	19.06	93.80
6	20.6%	105697	227.13	94.86%	220.49	483.57	0.00	74.26	19.54	93.56
7	18.7%	75203	190.41	92.10%	182.81	508.02	1002.53	52.56	18.97	86.65
8	16.4%	47333	270.44	86.70%	259.49	483.47	5387.53	31.85	17.86	115.29
9	21.2%	149460	658.66	97.79%	652.10	507.97	0.00	105.50	20.14	211.18
10	18.7%	100551	141.92	93.20%	135.05	531.86	34.95	70.45	19.20	72.86
11	22.7%	118128	608.48	97.47%	601.99	502.11	0.00	84.63	20.08	197.65
12	15.9%	69287	723.00	89.40%	714.35	502.11	2303.81	46.93	18.41	249.77
13	17.8%	81610	260.32	89.51%	253.41	526.56	15.42	56.06	18.44	111.28
14	19.6%	143239	283.45	87.25%	277.96	526.56	0.00	99.93	17.97	121.60
15	21.3%	124175	486.61	98.34%	479.87	496.76	32.39	88.89	20.26	162.16
16	19.9%	93987	189.70	92.54%	183.09	466.88	204.86	66.52	19.06	84.13
17	24.2%	52411	283.29	91.46%	273.38	472.12	4060.87	37.89	18.84	112.63
18	15.2%	166549	476.50	97.17%	469.36	472.12	761.11	113.17	20.01	160.17
19	16.6%	91733	567.73	91.93%	560.90	441.99	215.98	62.79	18.93	194.51
20	25.0%	200000	750.00	88.94%	745.12	412.33	0.00	145.90	18.32	255.35

Continuación de la Tabla A.4

s	Conc. MEA (%p/p)	Flujo MEA (kmol/h)	Req. Del Rehervidor (MW)	Recuperación	Req. Agua Enfriamiento (MW)	Amina Fresca (kg/h)	Agua del Proceso (kg/h)	Req. Energía Eléctrica (kW)	CO2 recuperado (t/h)	Costo CO2 (\$/tCO2)
21	25.0%	68160	93.33	86.66%	86.70	519.34	0.00	50.16	17.85	62.51
22	15.0%	76480	93.33	87.90%	85.42	519.04	1405.21	51.22	18.11	61.49
23	15.0%	100800	93.33	86.96%	86.73	519.04	0.00	67.48	17.91	62.35
24	19.2%	40000	93.33	83.62%	82.82	470.44	4656.89	27.73	17.22	61.64
25	25.0%	184960	107.33	94.91%	101.48	470.44	83.07	135.93	19.55	59.02
26	24.9%	155520	179.36	99.64%	173.08	470.14	83.07	114.12	20.52	75.64
27	20.5%	113120	93.33	94.19%	86.71	469.84	22.72	79.65	19.40	55.20
28	21.4%	152160	93.33	92.04%	87.22	469.84	0.00	108.01	18.96	56.62
29	22.7%	194720	93.33	85.07%	87.73	469.84	0.00	140.00	17.52	61.41
30	20.5%	200000	93.33	85.36%	87.41	262.07	0.00	140.57	17.58	50.05
31	23.4%	181384	93.33	86.99%	87.79	261.77	0.00	131.25	17.92	49.12
32	24.5%	177042	107.12	93.51%	101.40	261.77	25.11	129.40	19.26	49.65
33	20.5%	193600	93.33	85.36%	87.41	262.07	0.00	140.57	17.58	50.05
34	22.1%	173600	93.33	91.83%	87.29	405.07	0.00	113.92	18.91	53.55
35	24.5%	147200	93.33	94.11%	87.42	453.88	0.00	107.14	19.38	54.62

- s es el número de simulaciones y las líneas de división horizontales representan cambios de iteración.
- Las simulaciones **33**, **34** y **35** son las simulaciones de validación del óptimo para recuperaciones de 85, 90, y 95%, respectivamente.

Tabla A. 5. Resultados simulaciones y costo - Estructura 4

RESULTADOS SIMULACIONES Y ESTIMACIÓN DE COSTOS - ESTRUCTURA 4 (15-15)									CAPEX=	US\$1,960,000
s	Conc. MEA (%p/p)	Flujo MEA (kmol/h)	Req. Del Rehervidor (MW)	Recuperación	Req. Agua Enfriamiento (MW)	Amina Fresca (kg/h)	Agua del Proceso (kg/h)	Req. Energía Eléctrica (kW)	CO2 recuperado (t/h)	Costo CO2 (\$/tCO2)
1	15.0%	40000	93.33	82.16%	82.54	519.15	5061.48	26.62	16.92	65.47
2	19.7%	127856	588.71	96.05%	582.13	543.60	0.00	89.23	19.78	197.04
3	15.8%	67436	109.64	88.47%	100.67	568.05	2756.23	45.38	18.22	68.53
4	16.3%	92350	320.40	91.95%	313.40	592.50	180.20	62.61	18.94	129.31
5	18.7%	134164	498.60	96.45%	491.86	616.95	0.04	92.86	19.87	174.44
6	16.7%	40974	272.42	85.69%	261.25	124.08	5998.99	27.43	17.65	98.14
22	17.5%	140669	496.79	96.14%	489.92	246.33	498.24	96.40	19.80	156.89
8	19.3%	122501	646.39	97.39%	639.53	172.98	540.53	85.22	20.06	192.92
24	18.0%	139235	399.31	97.87%	392.28	273.53	733.17	95.76	20.16	128.47
23	23.1%	86878	287.27	95.00%	280.71	270.78	0.00	62.34	19.57	100.32
11	16.5%	89717	370.35	91.85%	363.34	246.33	567.32	60.97	18.92	126.92
12	20.6%	79977	243.94	94.38%	236.81	270.85	747.52	56.24	19.44	88.51
13	23.5%	112853	325.81	97.39%	319.35	242.26	0.00	81.40	20.06	107.26
14	20.6%	97106	337.03	94.15%	330.44	212.42	0.00	68.32	19.39	112.68
15	23.7%	116776	619.76	97.76%	613.35	182.71	0.00	84.31	20.14	185.31
16	20.4%	46782	173.24	87.78%	162.69	158.20	5184.29	32.84	18.08	67.13
17	15.1%	100281	448.29	92.45%	441.25	196.75	533.47	67.46	19.04	146.44
18	21.6%	41878	322.75	87.73%	311.91	189.71	5339.99	29.70	18.07	114.81
19	20.1%	98089	236.19	95.44%	229.30	214.22	485.69	68.48	19.66	82.68
20	25.0%	200000	750.00	98.09%	744.04	214.22	0.00	146.44	20.20	222.23

Continuación de la Tabla A.5

s	Conc. MEA (%p/p)	Flujo MEA (kmol/h)	Req. Del Rehervidor (MW)	Recuperación	Req. Agua Enfriamiento (MW)	Amina Fresca (kg/h)	Agua del Proceso (kg/h)	Req. Energía Eléctrica (kW)	CO2 recuperado (t/h)	Costo CO2 (\$/tCO2)
21	25.0%	68160	93.33	88.45%	86.51	544.20	0.00	50.16	18.22	62.57
22	15.0%	76480	93.33	88.05%	85.42	543.90	1438.96	51.20	18.14	62.73
23	15.0%	100800	93.33	86.47%	86.74	543.90	0.00	67.50	17.81	64.06
24	19.2%	40000	93.33	82.05%	82.96	493.50	4444.21	27.73	16.90	64.17
25	25.0%	184960	107.33	95.41%	101.45	493.50	2.65	135.93	19.65	59.86
26	24.9%	155520	179.36	100.38%	172.96	404.70	2.65	114.11	20.68	72.13
27	20.5%	113120	93.33	93.96%	86.82	404.40	0.00	79.65	19.35	52.21
28	21.4%	152160	93.33	91.50%	87.25	404.40	0.00	108.01	18.85	53.74
29	22.7%	194720	102.67	89.07%	97.01	404.40	0.00	139.97	18.34	56.42
30	20.5%	200000	93.33	87.21%	87.28	404.40	0.00	140.65	17.96	56.48
31	23.4%	200000	93.33	88.10%	87.48	404.40	0.00	144.81	18.15	55.95
32	25.0%	159858	107.12	95.57%	101.24	404.40	0.00	117.46	19.68	55.40

- s es el número de simulaciones y las líneas de división horizontales representan cambios de iteración.

ANEXO E. Detalles de las iteraciones

Tabla A. 6. Resultados de las correlaciones por estructura por iteración

RESULTADOS REGRESIONES								
	$\overline{R^2}$ Regresiones de costo				$\overline{R^2}$ Regresiones de recuperación			
<i>i</i>	E-1	E-2	E-3	E-4	E-1	E-2	E-3	E-4
0	0.9923	0.9899	0.9969	0.9706	0.8651	0.7059	0.7401	0.9773
1	0.9938	0.9917	0.9976	0.9735	0.8723	0.7247	0.7488	0.9388
2	0.9949	0.9921	0.9920	0.9768	0.8992	0.7840	0.6159	0.9314
3	0.9949	0.9926	0.9931	0.9792	0.7964	0.7181	0.6254	0.9167
4	0.9954	0.9929	0.9915	0.9915	0.8036	0.6137	0.6265	0.9825

Tabla A. 7. Resultados de la optimización por iteración

<i>i</i>	r_{req}	$E_{\text{óptima}}$	Condiciones Óptimas (normalizadas)			Error costo (%)	Error recup. (%)
			x_1	x_2	x_3		
0	85%	E-1	1	0.176	0	17.73%	9.17%
	90%	E-3	0.787	0	0	37.30%	2.38%
	95%	E-3	1	0.127	0	61.64%	9.24%
1	85%	E-4	0.423	1	0	80.64%	3.59%
	90%	E-4	1	0.906	0	101.36%	5.67%
	95%	E-4	0.993	0.722	0.131	37.26%	5.36%
2	85%	E-2	0.546	0.457	0	7.95%	0.63%
	90%	E-2	0.639	0.701	0	11.22%	3.77%
	95%	E-2	0.773	0.967	0	23.31%	14.54%
3	85%	E-4	0.552	1	0	6.02%	2.53%
	90%	E-4	0.851	1	0	15.85%	2.16%
	95%	E-4	1	0.888	0.021	12.28%	0.60%
4	85%	E-3	0.552	0.96	0	3.17%	0.42%
	90%	E-3	0.712	0.835	0	0.50%	1.99%
	95%	E-3	0.951	0.67	0	1.01%	0.94%

* El porcentaje de error es el valor absoluto del error relativo. El proceso iterativo se detuvo cuando el máximo error fue menor que 5%.

ANEXO F. Reportes de las correlaciones

Tabla A. 8. Reporte de Ms Excel de la regresión de costo óptima

<i>Estadísticas de la regresión</i>	
Coefficiente de correlación múltiple	0.996857086
Coefficiente de determinación R ²	0.99372405
R ² ajustado	0.991541111
Error típico	5.826968163
Observaciones	32

ANÁLISIS DE VARIANZA

	<i>Grados de libertad</i>	<i>Suma de cuadrados</i>	<i>Promedio de los cuadrados</i>
Regresión	8	123651.5203	15456.44003
Residuos	23	780.9318333	33.95355797
Total	31	124432.4521	

	<i>Coefficientes</i>	<i>Error típico</i>	<i>Inferior 95%</i>	<i>Superior 95%</i>
Intercepción	68.98775	3.49216	61.76366	76.21184
Variable x_1	-18.54548	12.68038	-44.77684	7.68588
Variable x_2	-17.61614	10.42156	-39.17477	3.94249
Variable x_3	179.21760	14.44228	149.34147	209.09373
Variable x_1^2	7.03152	11.77605	-17.32910	31.39213
Variable x_3^2	5.96680	15.36913	-25.82668	37.76027
Variable x_1x_2	14.53924	13.36250	-13.10319	42.18168
Variable x_1x_3	10.24994	13.41807	-17.50746	38.00733
Variable x_2x_3	-3.38989	15.71294	-35.89457	29.11480

Tabla A. 9. Reporte de Ms Excel de la regresión de recuperación óptima

<i>Estadísticas de la regresión</i>	
Coeficiente de correlación múltiple	0.857270875
Coeficiente de determinación R ²	0.734913353
R ² ajustado	0.626468815
Error típico	0.029691271
Observaciones	32

ANÁLISIS DE VARIANZA

	<i>Grados de libertad</i>	<i>Suma de cuadrados</i>	<i>Promedio de los cuadrados</i>
Regresión	9	0.05376858	0.005974286
Residuos	22	0.01939457	0.000881572
Total	31	0.07316315	

	<i>Coefficientes</i>	<i>Error típico</i>	<i>Inferior 95%</i>	<i>Superior 95%</i>
Intercepción	0.80589	0.01849	0.76754	0.84424
Variable x ₁	0.03583	0.06638	-0.10182	0.17349
Variable x ₂	0.31595	0.07912	0.15186	0.48003
Variable x ₃	0.18413	0.07474	0.02913	0.33912
Variable x ₁ ²	0.02227	0.06079	-0.10380	0.14834
Variable x ₂ ²	-0.33378	0.07557	-0.49050	-0.17706
Variable x ₃ ²	-0.14842	0.07877	-0.31177	0.01494
Variable x ₁ x ₂	0.04405	0.07196	-0.10519	0.19328
Variable x ₁ x ₃	-0.11819	0.06867	-0.26062	0.02423
Variable x ₂ x ₃	0.10528	0.08082	-0.06234	0.27290