

Uso de algoritmos en OpenSource para el diseño y optimización de procesos intensificados (captura CO₂)

Algorithms use in OpenSource for the design and optimization of intensified processes (CO₂ Capture)

Muñoz Aranda Luis Felipe

Alumno

lf.munozaranda@ugto.mx

Pelayo Ortiz de Zárate Rodrigo

Alumno

r.pelayoortizdezarate@ugto.mx

Rodriguez Castro Irving Adair

Alumno

ia.rodriguezcastro@ugto.mx

Sámamo Saucedo Saul Iván

Alumno

si.samanosaucedo@ugto.mx

Viveros Zayas Diego

Alumno

d.viveroszayas@ugto.mx

Cabrera Ruiz Julián

Profesor

j.cabrera Ruiz@ugto.mx

Resumen

En respuesta a la creciente preocupación por los problemas ambientales y la necesidad urgente de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero. Industrialmente una de las formas actuales para minimizar los impactos de la industria es la creación de procesos intensificados, nuestro equipo ha desarrollado una investigación centrada en la optimización del proceso de captura de dióxido de carbono (CO₂). Utilizando un algoritmo genético y el software de simulación Aspen Plus, diseñamos una planta que permite la absorción eficiente de CO₂ mediante soluciones acuosas de monoetanolamina (MEA). Este enfoque busca mitigar los altos costos energéticos asociados con los métodos convencionales de captura de CO₂, proporcionando una solución más viable desde el punto de vista técnico y económico.

Nuestro trabajo se basa en la implementación de dos columnas de destilación, una para la absorción y otra para la desorción del CO₂, optimizando cada etapa del proceso para maximizar la eficiencia de captura y minimizar el consumo energético. La metodología aplicada incluyó la especificación detallada de los componentes y reacciones involucrados, así como la configuración de los equipos principales en la simulación. Los resultados obtenidos demuestran una mejora en la eficiencia energética del proceso, subrayando la relevancia de la investigación en el contexto de las políticas ambientales actuales y su potencial aplicación industrial.

Palabras clave: Captura de dióxido de carbono (CO₂); de gases de efecto invernadero; Optimización; Algoritmo genético; Aspen Plus; Monoetanolamina (MEA); Absorción; Desorción; Eficiencia energética; Aplicación industrial

Objetivos

- Utilizar un software de simulación de procesos para diseñar la planta de captura de CO₂.
- Utilizar un algoritmo de optimización para analizar un proceso de captura de dióxido de carbono localizando el conjunto de variables que minimice el gasto energético y los costos.

Marco Teórico

Es común en la industria que se requiera remover el dióxido de carbono con distintos fines. Esta práctica se lleva realizando muchos años, sin embargo, en estos últimos ha cobrado una importancia mucho mayor debido a que cada vez somos más conscientes de los problemas ambientales y es necesario remover el CO₂ para reducir las emisiones de gases de efecto invernadero. Con el protocolo de Kioto de 1997, 41 países acordaron reducir un 5% las emisiones de CO₂ en el periodo de 2008 a 2012 (Freguia y Rochelle, 2003); este tipo de tratados y acuerdos para solventar problemas de contaminación han hecho que la captura de dióxido de carbono sea un problema económico para la mayoría de los países además de un problema ambiental para todos, ya que la temperatura global ha aumentado de forma preocupante en las últimas décadas (Zhang y col., 2009).

El mayor de los problemas que se enfrenta en la remoción de dióxido de carbono es el alto consumo de energía de la planta utilizada para ello, así como sus altos costos de producción. Debido a esto, actualmente hay mucha investigación en este campo para reducir costos energéticos y lograr un proceso más eficiente. Actualmente se cuentan con tecnologías de absorción de CO₂ como la Precombustión^[1], Oxidación^[2] y Postcombustión^[3], siendo esta última la más utilizada a nivel industrial, aquí es donde entra en uso la monoetanolamina (MEA), así como otros solventes que cumplen el mismo objetivo.

Aunque el dióxido de carbono tenga varios usos en la industria, por ejemplo, la producción de bebidas carbonatadas no es viable ya que existen bastantes procesos de producción que generan CO₂ como un producto secundario para poder utilizarlo posteriormente. Además de que con la remoción de CO₂ de los gases de combustión se recupera mayores cantidades que las que son necesarias para los demás procesos (Freguia y Rochelle, 2003).

Reacciones de Alcanolaminas con CO₂

Para captura de CO₂ el procedimiento más comúnmente utilizado en la industria es la absorción mediante soluciones acuosas de alcanolaminas. El procedimiento permite reacciones ácido base entre las sustancias diluidas en el agua y el dióxido de carbono. La alcanolamina utilizada para este trabajo es la monoetanolamina (MEA), la cual es una amina primaria (debido a que solo tiene un grupo orgánico enlazado al nitrógeno de la amina). La estructura de la amina utilizada se puede observar en la figura 1. Para el proceso de absorción de dióxido de carbono también es posible utilizar aminas secundarias o terciarias modificando el mecanismo de reacción con el CO₂ y los productos generados.

La ventaja que se cuenta al utilizar aminas primarias (o secundarias) es que reaccionan rápidamente, lo que ocasiona que el tamaño del absorbedor a utilizar para realizar la separación sea menor (Freguia y Rochelle, 2003). Sin embargo, estas aminas también cuentan con mayor calor de reacción, por lo que la energía requerida para revertir la reacción sea mayor. Aquí es donde radica el mayor problema de este proceso, ya que, para recuperar el solvente, es necesario que ocurra la reacción inversa y esto conlleva altos gastos en energía.

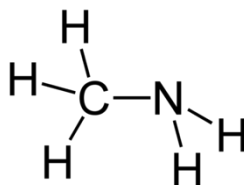
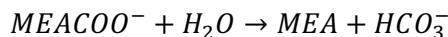
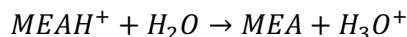
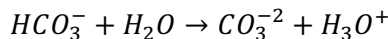
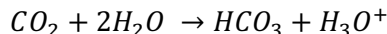
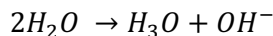


Figura 1 - Estructura de la Monoetilamina

Las reacciones importantes de este procedimiento se pueden observar a continuación:



Actualmente se está investigando mucho para facilitar la elección del solvente a utilizar para llevar a cabo el proceso de absorción de CO₂. Para este trabajo se utilizará MEA debido a que se conoce que permite una buena capacidad de absorción de CO₂ en el solvente, además de reducir el calor necesario para recuperar el solvente (Mangalapally y col., 2009).

Proceso de captura de CO₂

Para remover el dióxido de carbono de los gases de combustión se lleva a cabo un proceso que cuenta con dos columnas de destilación. El esquema básico (Figura 2) para este proceso son dos entradas que llegan a una columna de absorción, la primera se alimenta en la parte superior de la columna y consta de la solución acuosa de alcanolaminas. A su vez, al absorbedor se alimenta una segunda corriente en la parte inferior, la cual transporta los gases de combustión. Al alimentar gas por arriba y líquido por debajo, estamos forzando el contacto entre las dos fases y propiciando la transferencia de masa y el proceso de separación. El propósito de la columna de absorción es capturar el dióxido de carbono, recordemos que el CO₂ reacciona con estas soluciones de alcanolaminas por lo cual, también hay que considerar que es una columna reactiva. La presencia de las aminas hace que el solvente no se sature rápidamente de CO₂ y aumentan la capacidad de absorción, ya que el CO₂ entra en fase líquida debido a la reacción. Por arriba de la columna sale el gas purificado (sin prácticamente CO₂) que se puede descargar a la atmósfera sin riesgo y por debajo sale la amina rica en dióxido de carbono.

La segunda columna realiza un proceso de rectificación con la función de regenerar el solvente que estamos utilizando para recircularlo hacia la columna de absorción. Este proceso es lo contrario a la columna de absorción, es decir, una desorción del dióxido de carbono. La única entrada a esta columna es del solvente rico en CO₂ y no es necesario contar con las dos fases ya que esta columna utiliza un rehervidor en la parte superior y un condensador en la parte inferior; estos equipos hacen que las dos fases se encuentren presentes dentro de nuestra columna para propiciar el intercambio de materia y posteriormente la separación, además de que esta columna también es reactiva para poder remover el carbón y recuperar el solvente. Sin embargo, entre mayor pureza queramos para el solvente regenerado, mayor será el costo energético. Las salidas de esta columna son el solvente pobre en CO₂ y por arriba sale nuestro producto: una mezcla de dióxido de carbono y agua.

En ambas columnas se suele utilizar empaques para propiciar la transferencia de masa al aumentar el área de contacto entre las dos fases. La columna de absorción se suele operar a una presión poco superior a la atmosférica, mientras que la presión del proceso de agotamiento se suele configurar en dos atmósferas.

^[1] En estos sistemas se usa el combustible primario transformándolo en gas mediante calentamiento con vapor y aire/oxígeno, produciendo un gas compuesto de hidrógeno y CO₂, pudiendo ser separados.

^[2] Se utiliza el oxígeno puro para quemar combustible en lugar de usar el aire, resultando en un gas mixto compuesto de agua y CO₂ mediante el enfriamiento y la compresión del flujo de gas. Este proceso resulta bastante complicado.

^[3] Los gases resultantes de la combustión del carburante en el aire tan sólo contienen pequeñas fracciones de CO₂, que se captura por la inyección de los gases de combustión en un líquido que absorbe únicamente el CO₂, que después es liberado del líquido, al calentarlo o liberar la presión.

Además, se utiliza un intercambiador de calor para aprovechar el calor que trae la corriente que sale de la columna de agotamiento al calentar la corriente de solvente rico en dióxido de carbono. Normalmente la corriente de solvente que entra a la columna de agotamiento debe tener 110 °C mientras que la otra debe

enfriarse a aproximadamente 40°C (Ferguia y Rochelle, 2003). Esto ayuda a reducir la energía necesaria en el rehervidor, ya que suele ser el equipo más demandante debido a la necesidad de vapor de agua a altas temperaturas.

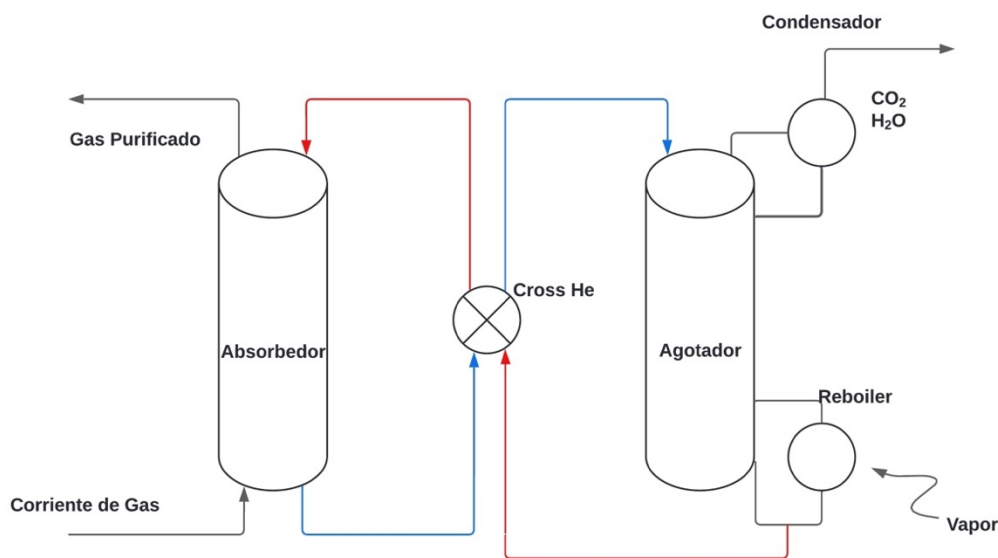


Figura 2 - Proceso de remoción de CO₂

Muchos modelos termodinámicos han sido creados a lo largo de los años para obtener los datos experimentales del sistema, y se sigue buscando un modelo ideal para el proceso de absorción y agotamiento usando MEA. Para esto utilizamos Aspen Plus 11, con el modelo [modelo utilizado en aspen], con el cual podemos [describir las características y usos del modelo].

El objetivo de este modelo es el de optimizar el proceso de captura de CO₂, el cual se traduce en un coste de energía menor al comúnmente usado por otros sistemas con modelos distintos.

Existen algunos parámetros de operación que son clave para determinar la viabilidad técnica y económica del proceso de absorción de CO₂, tales como:

- La concentración de CO₂ a tratar en la corriente de gas del sistema, así como la corriente de gas que pasa por la misma corriente. Esto último determinará el tamaño del absorbedor.
- El CO₂ separado y el solvente que pasa por la corriente, que es donde se busca un alto porcentaje de remoción de CO₂, siendo alrededor de 80 a 90% lo que se busca remover, esto está relacionado con la altura de la torre de absorción.
- Consumo energético. Se necesita energía para poder reabastecer el solvente y también para poder utilizar las bombas y el ventilador.
- Temperatura. Es necesario enfriar los gases de entrada, así como el solvente y la amina inicial hasta los niveles de temperatura requeridos para que la absorción del gas sea eficiente.
- La pureza del CO₂ obtenido. Se tiene registrado que una pureza de al menos 98% haría posible llevar la corriente de CO₂ a una calidad suficiente para usarse en la industria alimenticia. Se requiere una purga constante de la amina inicial para poder reabastecerla en el mismo proceso.

Algoritmo de optimización GA

El algoritmo genético GA se basa en la teoría evolutiva de selección natural de Darwin. Otro tipo de algoritmo de optimización, el PSO (enjambre de partículas), se basa en la capacidad de adaptación de los individuos

dentro de un cúmulo. Para este trabajo, se utilizó un algoritmo GA que se encargue de encontrar el conjunto de valores óptimos para la solución de un problema utilizando distintos operadores: selección, cruce y mutación. Este paso es repetido mediante iteraciones hasta cumplir un criterio de parada.

La teoría de Darwin nos dice que los individuos de una población se reproducen generando descendientes con características combinadas de sus progenitores y con ciertas mutaciones. Únicamente sobreviven los mejores individuos para poder reproducirse repitiendo el ciclo (Lorbes, 2019). En el caso del algoritmo GA se siguen los pasos de la Figura 3, mostrada a continuación:

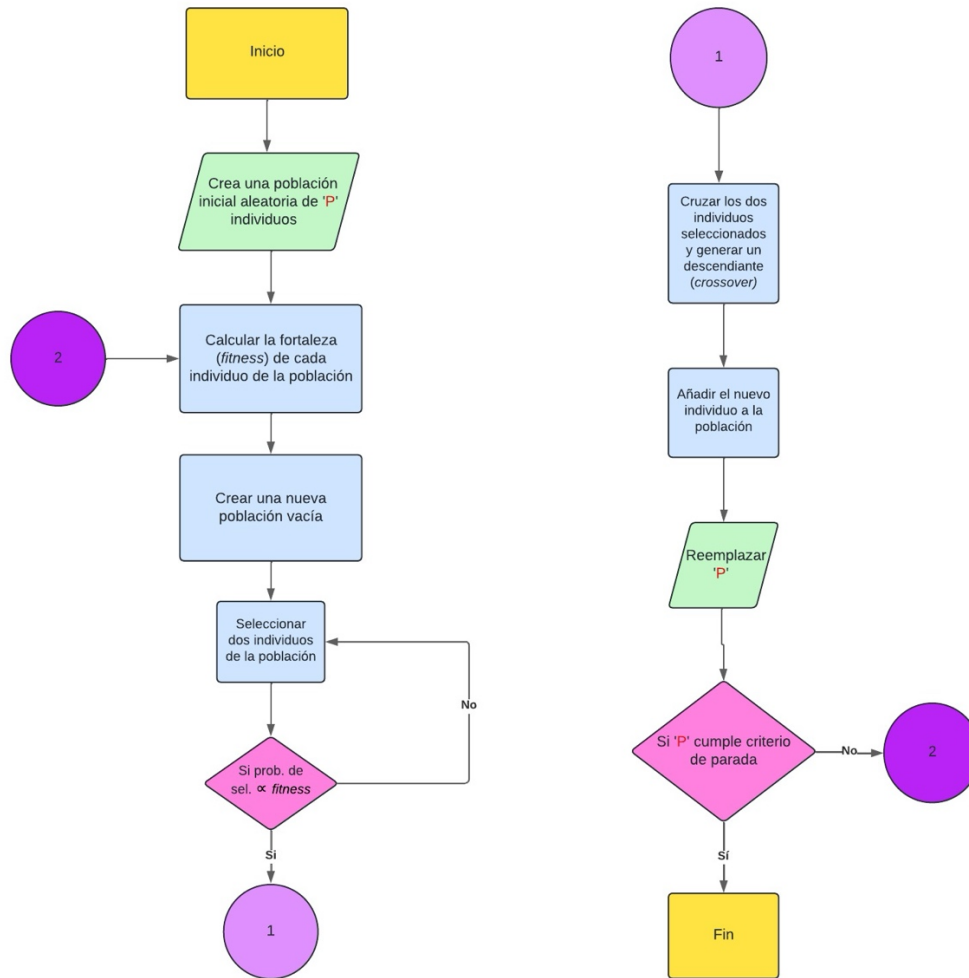


Figura 3 - Diagrama de Flujo Algoritmo GA

Procesos intensificados

Este proceso consiste en el desarrollo de aparatos y técnicas novedosas que, comparadas con las que se usan comúnmente en la actualidad, pretenden generar mejorías sustanciales en fabricación y procesamiento. Se enfoca principalmente en mejorar la relación entre el tamaño de los equipos y su capacidad de producción (Stankiwicz y Moulijn, 2000).

Esta intensificación se relaciona con nuestras columnas de absorción a través de la misma optimización y mejora de la eficiencia de estos equipos. Algunas de las “mejoras” que nos ofrecen estos procesos son:

- **La optimización del flujo:** La intensificación de procesos puede incluir la optimización del flujo de los gases y líquidos en la columna, asegurando una mejor distribución y contacto entre las fases, lo que puede aumentarla eficiencia de la absorción y reducir el tamaño de la columna necesaria.

Aquí puede haber ramificaciones como lo son la optimización por medio de distribuidores de líquido avanzados, esto para asegurar una distribución uniforme del absorbente, lo que provoca una mejora de la eficiencia de captura, así como también un mejor control del flujo de gas, que maximiza el tiempo de contacto y la transferencia de masa.

- **El uso de absorbentes avanzados:** El emplear nuevos materiales absorbentes con mejores propiedades de absorción y selectividad puede mejorar significativamente el rendimiento de las columnas de absorción. Los materiales avanzados, como líquidos iónicos o absorbentes químicos específicos, pueden aumentar la capacidad y velocidad de absorción.
- **Operar en condiciones extremas:** Operar las columnas de absorción bajo condiciones de presión y temperatura optimizadas puede mejorar la eficiencia del proceso. Por ejemplo, operar a altas presiones puede aumentar la solubilidad de los gases en el líquido absorbente.
- **Mejora del diseño de las columnas:** Se pueden desarrollar y utilizar diseños innovadores de las columnas de absorción, como columnas de empaques estructurados o columnas de platos avanzados, que mejoran el área de contacto entre las fases gas y líquido, aumentando la eficiencia de la absorción.
- **Uso de energías alternativas:** Aplicar tecnologías emergentes como la absorción con ayuda de energía (por ejemplo, microondas o ultrasonido) puede mejorar la transferencia de masa y reducir el tiempo de residencia requerido en la columna.

Viendo más a fondo estas tecnologías de ejemplo, aplicar microondas o ultrasonido para acelerar la desorción del CO₂, permitiendo una regeneración más rápida y eficiente del absorbente. También se puede hablar sobre la energía solar térmica, la cual utiliza colectores solares térmicos para proporcionar calor al agotador, reduciendo el uso de combustibles fósiles.

- **Integración de otros procesos:** Integrar las columnas de absorción con otros procesos de separación o reacción puede aumentar la eficiencia general del sistema. Por ejemplo, combinar la absorción con la reacción química en una columna de absorción reactiva puede intensificar el proceso al realizar dos operaciones simultáneamente.

Es esto último lo que trae a tema este tipo de procesos, ya que al tratarse de una columna de absorción y un agotador que realiza la función de decoración, se puede llegar a optimizar y mejorar la eficiencia de ambos equipos para lograr una separación más eficaz y sostenible.

Metodología

Metodología en Aspen

Se crea una simulación en el programa de Aspen v.11 dónde se plasmó el proceso de captura de CO₂ a partir de gases de combustión mediante la utilización de una columna de absorción y una columna de stripping. Lo primero que se realiza dentro del Aspen es especificar los componentes con los que vamos a trabajar, se pueden observar en la Tabla 1.

Tabla 1. Componentes utilizados en la simulación.

Nombre Componente	Fórmula Química
Dióxido de Carbono	CO ₂
CO ₃ --	CO ₃ ⁻²
Agua	H ₂ O
H ₃ O+	H ₃ O ⁺
HCO ₃ -	HCO ₃ ⁻
Monoetanolamina	C ₂ H ₇ NO

MEA+	C ₂ H ₈ NO ⁺
MEACOO-	C ₃ H ₆ NO ₃ ⁻
Nitrógeno	N ₂
Oxígeno	O ₂
OH-	OH ⁻

Posteriormente se especifican las reacciones explicadas en la sección anterior. Se debe tomar en cuenta que las constantes de equilibrio dependen de la temperatura mediante la siguiente relación:

$$\ln K = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT$$

Dónde los parámetros utilizados se expresan en la tabla 2.

Tabla 2. Parámetros para constante de equilibrio

Parámetro	Reacción 1	Reacción 2	Reacción 3	Reacción 4	Reacción 5
A	-0.52	231.46	216.05	-3.038	132.89
B	-2545.53	-12092.1	-12431.7	-7008.3	-13445.9
C	0	-36.78	-35.48	0	-22.47
D	0	0	0	-0.00313	0

Posteriormente se realiza la simulación, agregando los equipos principales, es decir, las dos columnas. Para la de absorción con 15 etapas se especifica una presión de 16.7 psia y al tener ya ambas fases (gas y líquido) no se necesita tener rehervidor ni condensador. Este equipo tendrá dos alimentaciones, una entrada de líquido en la etapa 1 con un flujo proveniente de un mixer que ayuda a juntar la corriente de entrada al proceso de solución de aminas junto con la recirculación del solvente regenerado en el proceso de desorción. Y la entrada de los gases de combustión en la etapa 15. Las salidas de esta columna son el gas puro sin CO₂ y por debajo la solución rica en dióxido de carbono.

Para la columna de agotamiento igual se usan 15 etapas y una presión de 30 psia. En este caso si se utiliza un condensador parcial-vapor y un rehervidor tipo Kettle. Las especificaciones que se completan son 11000 lb/mol de flujo de destilado y 15 en la relación de reflujo. La única alimentación de este equipo es la salida de solvente rico en CO₂ que sale como líquido de la columna de absorción. De este equipo sale una mezcla de dióxido de carbono con agua y la solución de aminas pobre en CO₂. Cabe resaltar que ambas columnas tienen especificadas las reacciones propuestas en todas sus etapas.

La salida de solución de la columna de agotamiento es tratada en un divisor para poder purgar una fracción de esta solución de aminas y evitar el colapso de la simulación debido a que se está alimentando constantemente solución fresca.

Metodología optimización

Para esta sección se modificaron dos programas de optimización utilizando el software libre de Python. Lo destacable de esta parte es que se optó por elegir tres variables de optimización (en base a un análisis de sensibilidad realizado en Excel).

- Número de etapas de la columna de absorción.
- Número de etapas de la columna de agotamiento.
- Etapa de alimentación de la columna de agotamiento.

Al principio se optó por cuatro variables de optimización, incluyendo el flujo de líquido fresco alimentado, sin embargo, se encontró que la simulación era muy sensible a cambios en esta variable ocasionando problemas de convergencia. Por esta razón se redujo a 3 variables de optimización.

$$\min(TAC, Q_H) = f(N_{TA}, N_{TAG}, N_{FAG})$$

El programa utiliza la optimización mediante GA, y en este caso se eligió una población de 100 individuos con 20 generaciones, por lo cual se realizó de 2000 iteraciones.

Se hicieron dos optimizaciones distintas, primero una que calcula la energía mínima requerida para el rehervidor de la columna de agotamiento, y luego otro que nos dice el costo mínimo total al año de la planta propuesta en la simulación. Estos dos programas juegan con las 3 variables de optimización, buscando el conjunto de datos que minimiza la función objetivo de cada caso.

Resultados

Estos son los resultados que obtuvimos en la optimización del calor del rehervidor en la columna de agotamiento donde es la comparación de datos iniciales contra los datos obtuvimos a la hora de optimizar el proceso

Tabla 3. Resultados iniciales vs óptimos

Variable	Datos Iniciales	Datos Óptimos
Etapas Absorbedor	18	16
Etapas Agotador	18	28
Etapas Alimentación	3	1
Rehervidor (MW)	433.6961	432.6255

Posteriormente se realizó la optimización de los costos de la planta dándonos un costo de 19,141 MUSD/año.

Cabe destacar para la obtención de estos resultados se corrieron dos optimizaciones de 2000 iteraciones cada una.

Conclusiones

Se observa en los resultados obtenidos que nuestro proceso es extremadamente costoso, ya que tanto el consumo energético del rehervidor como los costos totales anuales son muy altos para esta planta. Incluso considerando que estamos utilizando dos columnas de gran altura, un compresor y un alto requerimiento de vapor a altas temperaturas, nos damos cuenta de que el costo de dicha planta simulada en Aspen es muy alto.

Los exagerados requerimientos de energía (MW) se deben a los flujos que se están utilizando, ya que también son de dimensiones considerables, por ejemplo, la cantidad de dióxido de carbono en la entrada de gases de combustión es de 750 lb-mol por hora o aproximadamente 15,000 kg por hora. Remover esta alta cantidad de dióxido de carbono es extremadamente exigente en términos de costos, es por ello que se han obtenido equipos de grandes dimensiones con costos de mantenimiento absurdos.

Además, se suma lo ya conocido antes de esta investigación: los costos energéticos de una planta para remover dióxido de carbono a partir de gases de combustión son muy altos. En este trabajo hemos comprobado esta parte de la investigación.

Aun así, el objetivo de la optimización se ha logrado, ya que con ayuda de las herramientas disponibles se ha podido encontrar la combinación de nuestras variables que representen una minimización de la energía y de los

costos. En el caso de la energía del rehervidor podemos incluso observar la diferencia de energía de los datos iniciales con los datos óptimos y aunque pueda una pequeña diferencia, en este caso se habla de un orden de magnitud de mega por lo que son ahorros muy grandes.

Finalmente, se puede concluir que la optimización es un campo con una utilidad increíble que puede presentarnos propuestas muy interesantes que nos mejoren la eficiencia de nuestra planta industrial. Sin embargo, hay que tener los cuidados necesarios ya que suelen ser programas sensibles que presentan problemas si se les exige cambios muy drásticos. Además, se debe tener en cuenta que se trata de una herramienta, que, aunque sea muy útil, se debe conocer cómo utilizarla para poder resolver los problemas de manera correcta.

Referencias

- Freguia, S., & Rochelle, G. T. (2003). Modeling of CO₂ capture by aqueous monoethanolamine. *AIChE Journal*, 49(7), 1676-1686. <https://doi.org/10.1002/aic.690490708>
- Zhang, Y., Chen, H., Chen, C. C., Plaza, J. M., Dugas, R., & Rochelle, G. T. (2009). Rate-based process modeling study of CO₂ capture with aqueous monoethanolamine solution. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 48(20), 9233-9246. <https://doi.org/10.1021/ie900068k>
- Mangalapally, H. P., Notz, R., Hoch, S., Aspiron, 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(1), 963-970. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.128>
- Lorbes, M. (2019). Metodología basada en algoritmos genéticos y optimización por enjambre de partículas para definir las matrices de peso del regulador lineal cuadrático. *Universidad Ciencia y Tecnología*, 23(95), 95-102. Recuperado de <https://uctunexpo.autanabooks.com/index.php/uct/article/view/252>
- Stankiwicz, A. I., & Moulijn, J. A. (2000). Process Intensification: Transforming Chemical Engineering. *Chemical Engineering Progress* (22-34).
- Utem, A. (2022, 22 diciembre). ¿Qué es la intensificación de procesos en la Ingeniería Química? Admisión UTEM. Recuperado de <https://admision.utem.cl/2022/12/22/que-es-la-intensificacion-de-procesos-en-la-ingenieria-quimica/>