



Universidad de Cantabria

**Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales y de
Telecomunicación**

Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica

**“Optimización multi-objetivo para la evaluación de la
sostenibilidad de tecnologías de generación de electricidad
a partir del carbón”**

**“Multi-objective optimization for the sustainability assessment of coal
based electricity generation technologies”**

Memoria de Tesis Doctoral presentada para optar al título de
Doctor por la Universidad de Cantabria

Programa Oficial de Doctorado en Ingeniería Química y de Procesos
(BOE núm. 36, de 10 de febrero de 2010. RUCT: 5311209)
con Mención hacia la Excelencia
(BOE núm. 253, de 20 de octubre de 2011. Referencia: MEE2011-0031)

Jorge Cristóbal García

Directores de Tesis:

Prof. Dr. Ángel Irabien Gulías
Dr. Gonzalo Guillén Gosálbez

Santander, Julio 2013

La Tesis Doctoral se presenta como un resumen de trabajos previamente publicados o aceptados para su publicación en revistas científicas de carácter internacional incluidas en el *Journal of Citation Reports-Science Edition (JCR)*, cumpliendo con la normativa existente en la Universidad de Cantabria y en el Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica referente a la elaboración de Tesis Doctorales por compendio de artículos.

A continuación se listan las publicaciones que forman parte de la presente Tesis:

Compendio de artículos publicados/aceptados:

1. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal. *Appl. Energ.* **2012**, 92:369-378.
2. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Multi-objective optimization of coal-fired electricity production with CO₂ capture. *Appl. Energ.* **2012**, 98:266-272.
3. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. MINLP model for optimizing electricity production from coal-fired power plants considering carbon management. *Energ. Policy.* **2012**, 51:493-501.
4. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Kraslawski A., Irabien A. Stochastic MILP model for optimal timing of investments in CO₂ capture technologies under uncertainty in prices. *Energy.* **2013**, 54:343-351.

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (actualmente Ministerio de Economía y Competitividad) de España a través de los proyectos CTM2006-00317 *"Sostenibilidad de la Producción: Intensificación e integración de procesos en la industria química y transformadora"* y ENE2010-14828 *"Desarrollo de un proceso de captura y reciclado de CO₂"*.

Durante la ejecución del presente trabajo, su autor, Jorge Cristóbal García, ha disfrutado de una subvención del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte para impulsar la excelencia en el programa de doctorado y la obtención de la Mención Internacional en el título de Doctor concedida por Orden ECD/3628/2011 de 26 de Diciembre (BOE de 14 de Enero de 2012). Con ello se ha realizado una estancia predoctoral de tres meses -de Abril a Julio 2012- en la *Faculty of Technology – Lappeenranta University of Technology (LUT) - Finland*, bajo la supervisión del Prof. Dr. Andrzej Kraslawski.

Nuestro más sincero agradecimiento hacia dichas instituciones.

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría expresar mi más sincero agradecimiento a las dos personas, aparte del firmante, que han hecho posible este documento de tesis y que considero un ejemplo a seguir en la profesión de investigador. Al Prof. Dr. Angel Irabien porque sin duda es el artífice primigenio de este trabajo, por confiar en mí desde el principio sin apenas conocerme y brindarme constantes oportunidades de aprendizaje tanto dentro como fuera del departamento. Y al Dr. Gonzalo Guillén que, tras la estancia breve en la Universidad Rovira i Virgili (Tarragona), aceptó a ser mi codirector de tesis y siempre ha tenido constantes palabras de apoyo y ánimo, ha dedicado incondicionalmente su tiempo y esfuerzo a mi supervisión y le considero un amigo. A ambos, muchísimas gracias.

I am also very grateful to Prof. Andrzej Kraslawski and the rest of researchers and students of the Department of Chemical Technology of the Lappeenranta University of Technology, for making me feel like home during my three months stage in the "not so cold" Finland.

Agradecer a todas las personas que conocí en la URV, que me acogieron en el Departament d'Enginyeria Química y me dieron un puesto en el Aula Pont donde aprender y disfrutar de la optimización, en especial al Dr. Laureano Jiménez por tener siempre un momento para resolver mis dudas tanto animicas como técnicas y al reciente Dr. Robert Brunet que es posiblemente la persona más motivada de la Ingeniería Química a nivel mundial con el mérito adicional de conseguir contagiario al resto (demostrado en el PASI2011).

Por supuesto, a todos los compañeros del Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica de la Universidad de Cantabria, que de una forma u otra han influido en este trabajo. Me gustaría agradecer a Jonathan, Antonio, Enrique, Manuel y María Margallo, con los que he compartido inquietudes y risas además de despacho. Y muy especialmente a Elia, Gema P, Antia, Virginia, Noelia, Rosa, Vanesa, Raquel, Marcos, Javier P, Ruben, Juan S y Axel, porque en estos 4 años hemos sido muchas cosas además de investigadores (actores, Brokers, piratas, discrepantes, frutas, princesas,...), pero sobretodo hemos sido amigos y habéis conseguido que ir al trabajo no fuese un esfuerzo sino una motivación. No me olvido de agradecer a las mujeres que administran el Departamento con mano de hierro y buen humor: Pili e Inma y a Beatriz por ayudarme con las gestiones difíciles. Muchas gracias a TOD@S.

Al CSJ – Eva, Sergio, Ruben C, Soraya, D.J., Toñete, Laurita, Kiko, Laura, Juanjo, Héctor, Nuria, Ruben S, Mónica, Luis, Rubio, Ongar, Copazo, Oscar C, Patri, Rebeca, Ventura, Cañueto y Juanín. En Ávila encontramos la válvula de escape a cualquier preocupación y quiero agradecerles que como buen comando están en los momentos buenos y malos pero sobretodo en los difíciles y me han enseñado lo fácil que es hacer las cosas bien (y bonitas).

A esta larga lista de nombre me gustaría añadir el de todos los amigos que han estado a mi lado durante esta etapa de mi vida y me han apoyado con la tesis: la Dra. Nina Salau que cree en mí más que yo mismo; mis amigos Daniel Pablo, Daniel Pérez, Carlitos, Javi Lopetz y

Clara M; mi familia de Cantabria: Patricia, Santi, mi querida Francisca Javiela, Coral, MariCruz; y a mi cumpa chileno Juan Canales que se le echa en falta.

Y por último a las personas más importantes e imprescindibles en mi vida, que no se cansan jamás de alentarme y que son los que siempre están ahí para lo que necesito, mis padres Paulita y Frank-Frank, y mis hermanos David y Javier, que me demuestran su cariño día a día.

¡GRACIAS!

Índice

RESUMEN / ABSTRACT	1
CAPÍTULO 1. PLANTEAMIENTO – La Ingeniería de Procesos para la toma de decisiones	7
1.1. Antecedentes y motivación	9
1.2. SÍNTESIS: análisis de las etapas del proceso de combustión limpia del carbón	11
1.2.1. Tecnologías para el control ambiental	13
1.2.2. Tecnologías para la mitigación del cambio climático	15
1.2.3. Diagrama de flujo de los procesos de combustión más limpia del carbón	20
1.3. SIMULACIÓN y OPTIMIZACIÓN del proceso de combustión más limpia del carbón	23
1.3.1. Modelos técnico-económicos de las tecnologías limpias	27
1.4. Objetivos y estructura de la tesis	31
1.5. Referencias del Capítulo 1	32
CAPÍTULO 2. DESARROLLO	39
2.1. Técnicas y métodos: fundamentos matemáticos y de computación	41
2.1.1. Fundamentos matemáticos	41
2.1.2. Optimización multi-objetivo	44
2.1.3. Programación estocástica	47
2.1.4. Ingeniería asistida por ordenador (CAPE)	49
2.2. Identificación e influencia de la función objetivo en la Ingeniería de Procesos de la combustión más limpia del carbón: objetivos económico y ambiental.	50
2.3. Selección del proceso de captura de CO ₂ y estudio de su influencia en los objetivos económico y ambiental	60

2.4. Influencia del mercado de emisiones de CO ₂ en la economía de la combustión más limpia del carbón.	68
2.5. Influencia de la incertidumbre en el precio de CO ₂ .	79
2.6. Nomenclatura del Capítulo 2	93
2.7. Referencias del Capítulo 2	96
CAPÍTULO 3. CONCLUSIONES / CHAPTER 3. CONCLUSIONS	101
3.1. Conclusiones y progreso de la investigación	103
<i>3.1. Conclusions and on-going research</i>	105
CAPÍTULO 4. ARTÍCULOS CIENTÍFICOS / CHAPTER 4. SCIENTIFIC ARTICLES	107
4.1. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien, A. Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal. <i>Appl. Energ.</i> 2012 , 92:369-378.	109
4.2. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Multi-objective optimization of coal-fired electricity production with CO ₂ capture. <i>Appl. Energ.</i> 2012 , 98:266-272.	121
4.3. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien, A. MINLP model for optimizing electricity production from coal-fired power plants considering carbon management. <i>Energ. Policy.</i> 2012 , 51:493-501.	131
4.4. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Kraslawski A., Irabien A. Stochastic MILP model for optimal timing of investments in CO ₂ capture technologies under uncertainty in prices. <i>Energy.</i> 2013 , 54:343-351	143
ANEXO I: MODELOS TÉCNICO-ECONÓMICOS DE LAS TECNOLOGÍAS LIMPIAS	155
ANEXO II: DIFUSIÓN DE RESULTADOS	171

RESUMEN / *ABSTRACT*

Resumen

La generación de energía eléctrica a partir de combustibles fósiles, concretamente a partir del carbón, debe responder a las demandas de un Desarrollo Sostenible que concilie la rentabilidad económica con las prioridades sociales y ambientales. Las plantas de carbón existentes deben adaptarse para cumplir las restricciones en materia de emisiones que desde los años 70 se han impuesto en los contaminantes principales de la combustión (i.e., PM, NO_x, SO₂) y que han culminado con el protocolo de Kioto cuyo propósito es reducir las emisiones de CO₂ para la mitigación del cambio climático.

En centrales termoeléctricas de carbón existentes, la utilización de "tecnologías limpias de final de línea" aparece como la práctica más extendida para lograr controlar las emisiones producidas. Sin embargo su instalación conlleva un coste de inversión y operación que en muchos casos limita su uso. En este contexto, el objetivo de este trabajo es desarrollar una metodología basada en programación matemática que permita resolver problemas de optimización multi-objetivo, proporcionando herramientas que faciliten la toma de decisiones en cuanto a priorización y planificación de inversiones en tecnologías limpias con objetivos económicos y ambientales.

En esta tesis, en primer lugar se identifican las funciones objetivo y su influencia en la Ingeniería de los Procesos de la combustión más limpia del carbón, logrando, mediante el uso de diagramas de Pareto con la función objetivo económica y ambiental, un procedimiento para priorizar las inversiones a realizar en tecnologías limpias.

En segundo lugar se estudia la toma de decisión con objetivos ambientales y económicos en la selección del proceso de captura de CO₂ entre las tecnologías disponibles (i.e., absorción química post-combustión con aminas y oxidación) permitiendo una valoración de las diferentes alternativas.

En tercer lugar se amplía el estudio con la gestión del carbono, donde se incluye el mercado de emisiones, para ver su influencia en la economía de la combustión más limpia del carbón. Como resultado se obtienen los precios indicadores de las diferentes tecnologías de captura que permiten valorar el precio del CO₂ al cual dichas tecnologías serán económicamente rentables en el mercado actual.

Finalmente, se introduce un enfoque dinámico al estudio en el que se tiene en cuenta la incertidumbre en los precios futuros del mercado de carbono con el fin de analizar su influencia en el objetivo económico de la captura. Así aparecen nuevos elementos de riesgo a considerar, como por ejemplo el riesgo financiero, que habrá que tener en cuenta a la hora de tomar decisiones acerca de la inversión en tecnologías de captura.

Abstract

Electricity generation processes from fossil fuel combustion, and especially those from coal combustion, must respond to the demands of a Sustainable Development that would reconcile economic profitability with social and environmental priorities. Existing coal-based power plants all over the world must be retrofitted to comply with the emission constraints that since the 70s have been imposed on the main combustion pollutants (i.e., PM, NO_x, SO₂); and, recently, they must comply with the Kyoto protocol that tries to reduce the CO₂ emissions in order to mitigate climate change.

The most used strategy to control emissions in existing coal-based plants is to place pollution control devices downstream the burner ("end of pipe" technologies). However, their installation involves high investment and operation costs which, in certain cases, could limit its use. In this context, the objective of this work is developing a methodology based on mathematical programming that allows solving multi-objective optimization problems, providing tools that help in the decision making process of prioritizing and planning clean technology investments taking into account economic and environmental objectives.

To that end, first of all, the objective functions and their influence on the Process Engineering of the cleaner coal combustion are identified, giving as a result a procedure for prioritizing clean technology investments through the use of Pareto diagrams with the economic and the environmental objectives.

Secondly, the decision making of the CO₂ capture process selection between the available technologies (i.e., post-combustion chemical absorption with amines and oxy-fuel combustion) is studied. It enables an assessment of the different capture options taking into account the economic and environmental objectives.

Thirdly, the scope of the study is enlarged considering explicitly carbon management along with CO₂ emissions trading in order to see its influence on the cleaner coal combustion economy. In addition, the indicator prices of the different capture technologies are obtained showing the level of market price that should be given to the CO₂ allowance such that the abatement measure becomes profitable.

Finally, a dynamic approach is introduced considering the uncertainty in future CO₂ prices in order to study its influence on the selected economic objective. Thus, associated risks appear along with the stochastic parameters, such as the financial risk, that must be considered in the CO₂ capture technology investment decision making process.

PLANTEAMIENTO

- La Ingeniería de Procesos para la toma de decisiones -



1.1. Antecedentes y motivación

El carbón es el combustible fósil mundialmente más utilizado para la producción de energía eléctrica. Actualmente, del total de la electricidad producida (i.e., 21431 TWh), el 40.6% proviene de la combustión de carbón (IEA, 2012a). Además, las crecientes necesidades energéticas de los países en desarrollo aseguran que el carbón será una pieza clave en el mix energético en el siglo XXI. Un ejemplo claro es el crecimiento de capacidad instalada de esta tecnología de combustión en países de economías emergentes como China e India. La abundancia de la materia prima (estimada en 1000 billones de toneladas (IEA, 2011)), el precio competitivo del carbón en el mercado y la madurez y accesibilidad de la tecnología son las razones principales para su uso.

Sin embargo, la producción de electricidad a partir del carbón evidencia inconvenientes ambientales en comparación con otras fuentes primarias de energía. El uso del carbón conlleva unos efectos ambientales significativos como por ejemplo el consumo de recursos naturales no renovables y la emisión de contaminantes locales y globales con repercusión en la salud humana y en los ecosistemas, entre los que destacan: partículas en suspensión (PM, por sus siglas en inglés, Particulate Matter), dióxido de azufre (SO₂), óxidos de nitrógeno (NO_x) y dióxido de carbono (CO₂).

La creciente preocupación por la protección ambiental ha hecho que la sociedad demande procesos y productos más sostenibles. Así, desde los años 70 se han adoptado políticas y tomado medidas para la limitación y el control de los contaminantes principales en la combustión del carbón. Primeramente se limitó el nivel de emisión de PM por su relación con efectos sobre la salud humana. Mas tarde el control se centró en los SO₂ y NO_x por ser causantes de la acidificación atmosférica y de la lluvia ácida. Actualmente el Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático (IPCC, por sus siglas en inglés, Intergovernmental Panel on Climate Change) puso de manifiesto el aumento de temperatura del planeta debido al aumento de emisiones antropogénicas de gases de efecto invernadero (GHG, por sus siglas en inglés, Greenhouse Gases), principalmente el CO₂. A través del Protocolo de Kioto en 1992 y de sucesivas cumbres internacionales se ha acordado una reducción de las emisiones de estos gases para disminuir su concentración en la atmósfera antes de que se produzcan cambios globales irreversibles en el planeta.

En este contexto surge el concepto de “tecnologías limpias del carbón”, referido a nuevos procesos de generación de energía a partir del carbón que mejoran la eficiencia y/o que reducen las emisiones de contaminantes con el fin de mitigar los impactos ambientales derivados. Algunos de estos procesos suponen un cambio en la tecnología de combustión y en el ciclo termodinámico (i.e., ciclos combinados con gasificación integrada (IGCC), combustión en lecho fluidizado (FCB)), opción que en muchas ocasiones es inviable para los más de 1600 GW de capacidad instalada que utilizan carbón pulverizado como combustible (IEA, 2012b). Por tanto, las alternativas más utilizadas son las tecnologías de control y reducción de contaminantes sin modificaciones estructurales del ciclo termodinámico. Estas se clasifican en: (i) medidas primarias, que eliminan

la fuente de los contaminantes directamente del carbón antes de quemarlo o evitan su generación durante la combustión (medidas dentro de la caldera); y (ii) medidas secundarias o también llamadas medidas de “final de línea”, que permiten el acoplamiento de un equipo (retrofit) antes de la salida de los gases de combustión a la atmósfera por chimenea con el fin de reducir la cantidad de uno o varios contaminantes. Su instalación conlleva un aumento del coste que en ocasiones limita su uso (Cristóbal et al., 2012a,b).

Además de estas tecnologías, en el caso del CO₂, se ha habilitado el mercado de derechos de emisión (ETS, por sus siglas en inglés, Emission Trading System) basado en el sistema de fijación de límites máximos (“cap and trade”). Este mercado permite la compra-venta de emisiones de CO₂ entre diferentes actividades emisoras, fomentando la implantación de acciones para alcanzar el límite de emisiones establecido al mínimo coste (Cristóbal et al., 2012c)

Por lo tanto, en el contexto de un mercado de la energía cada vez más concienciado ambientalmente y competitivo económicamente, esta tesis busca desarrollar nuevas metodologías y herramientas de toma de decisión que ayuden a elegir el diseño y operación óptimos en la producción de electricidad a partir del carbón teniendo en cuenta múltiples objetivos como la minimización del impacto ambiental, de la inversión o del coste del producto (Grossmann y Westerberg, 2000). Además, la consideración de la incertidumbre en ciertas variables, como en el precio del CO₂ en el ETS, hace imprescindible el uso de criterios estadísticos en la planificación óptima de la inversión en tecnologías de captura y gestión de compra-venta de derechos de emisión con el objetivo de minimizar el riesgo financiero y maximizar el beneficio económico obtenido con la venta de la electricidad (Cristóbal et al., 2013).

Para facilitar la comprensión de esta tesis, que está encuadrada en el campo de la Ingeniería Química y de Procesos, la Fig. 1.1 muestra un esquema del planteamiento y de los apartados que se abordarán en este capítulo:

- El apartado 1.2 tratará la etapa de SÍNTESIS, que consiste en un análisis de las etapas del proceso de combustión limpia del carbón para identificar las tecnologías a utilizar y su interconexión.
- El punto 1.3 aborda la etapa de SIMULACIÓN y OPTIMIZACIÓN que tiene en cuenta el modelado y diseño de los equipos seleccionados para cada etapa del proceso global así como la definición del problema matemático para identificar las mejores soluciones.
- Finalmente en el apartado 1.4 se concretan los OBJETIVOS específicos de esta tesis, cuyos resultados más relevantes se presentan resumidos en ella (Capítulo 2 – DESARROLLO y Capítulo 3 - CONCLUSIONES) y en las publicaciones realizadas (Capítulo 4).

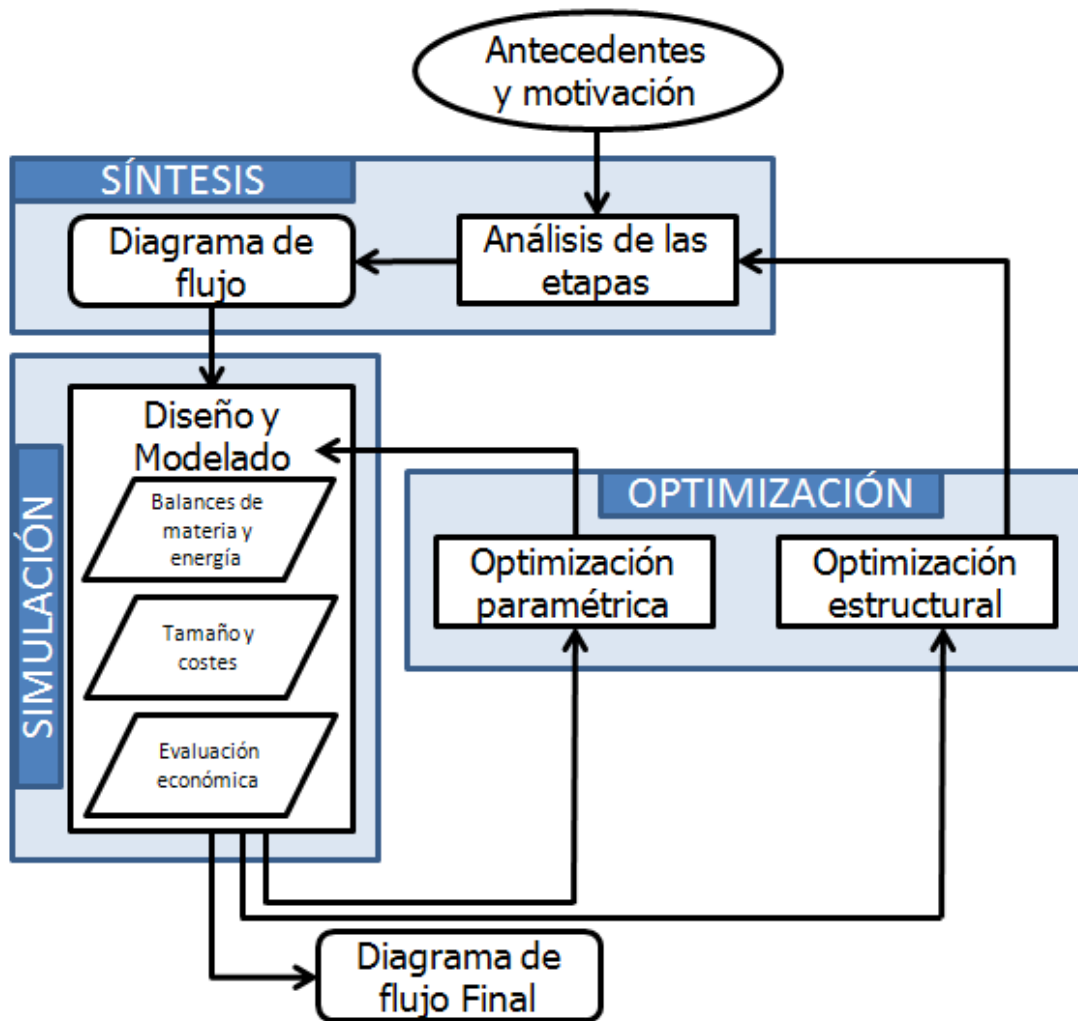


Figura 1.1: Etapas del diseño de procesos

1.2. SÍNTESIS: análisis de las etapas del proceso de combustión limpia de carbón

La etapa de síntesis tiene como objetivo estudiar las posibilidades técnicas en cada una de las etapas en las que se puede dividir el proceso de combustión limpia del carbón (Figura 1.2): combustión, desnitrificación, eliminación de partículas, desulfuración y captura de CO₂. Su finalidad es facilitar una selección óptima de las unidades o equipos que van a usarse y de cómo deberían interconectarse (Nishida et al., 1981).

En esta tesis se tienen en cuenta las tecnologías que han sido descritas en el documento de referencia en las mejores técnicas disponibles (MTD) para plantas de combustión (CE, 2006). En el caso de la captura y almacenamiento de carbono (CCS, por sus siglas en inglés Carbon Capture and Storage), las opciones aparecen mencionadas en el anexo de dicho documento como tecnologías en fase de investigación o desarrollo y disponibles en el futuro, por lo que han sido ampliadas teniendo en cuenta el estado del arte. A continuación se presenta un breve resumen todas ellas.

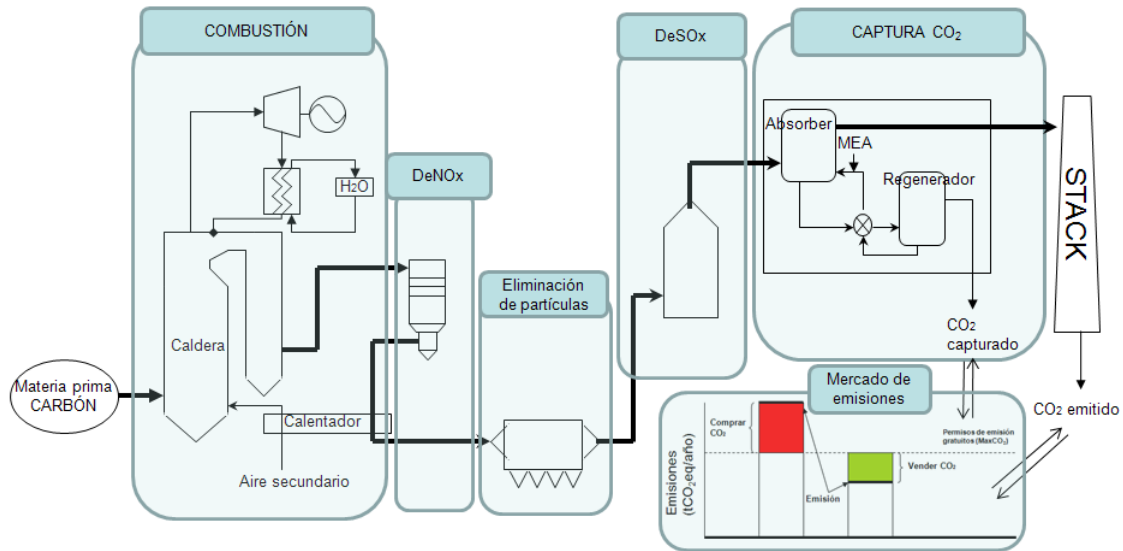


Figura 1.2: Etapas en el proceso de la combustión limpia del carbón

El rendimiento energético y la generación de contaminantes dependen en gran medida del combustible, del ciclo termodinámico y de la tecnología de combustión utilizada en la planta. Las tecnologías que aparecen como MTD para la combustión de carbón son la de combustible pulverizado, la de lecho fluidizado y la de gasificación (ver Fig. 1.3).

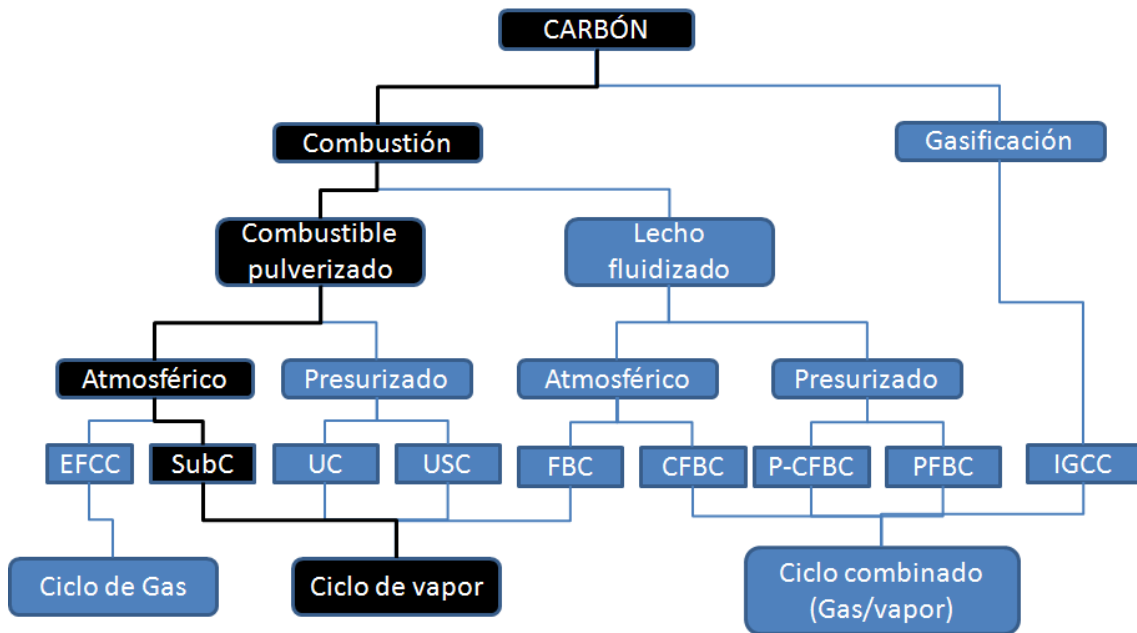


Figura 1.3: Tecnologías para la combustión del carbón. Adaptado de Franco y Diaz, 2009. Abreviaciones: EFCC, Ciclo combinado combustión externa; SubC, Subcrítico; UC, Ultracrítico; USC, Ultra-supercrítico; FBC, Combustión de lecho fluidizado; CFBC, Combustión de lecho fluidizado circulante; P-CFBC, Combustión de lecho fluidizado circulante presurizado; PFBC, Combustión de lecho fluidizado presurizado; IGCC, Ciclo combinado con gasificación integrada.

Esta tesis se centra en la tecnología de carbón pulverizado con generación de vapor subcrítico (marcada en negro en la Fig. 1.3) ya que es la más utilizada mundialmente (i.e. 71% aprox.) y se ha estado instalando durante décadas. Además, un alto porcentaje de la capacidad futura

programada seguirá utilizando dicha tecnología (IEA, 2012b). Cabe destacar que ha habido un gran esfuerzo en investigación para aumentar la eficiencia en la generación de electricidad a base de diseñar unidades que operan con vapor a mayor temperatura y presión (i.e., supercríticas y ultra-supercríticas) aunque aún existe una considerable diferencia en la madurez de estas tecnologías. Actualmente el número de plantas supercríticas ha aumentado debido al creciente interés que suscita en U.S.A, Europa y Japón, pero sigue siendo un número muy limitado. En cuanto a plantas ultra-supercríticas se han construido una docena durante la última década (Viswanathan et al., 2005). Las condiciones de cada tecnología están expuestas en la Tabla 1.1, aunque no hay unos límites aceptados internacionalmente para los intervalos de cada una de ellas. Como se puede observar, de subcrítica a ultrasupercrítica se aumenta la eficiencia y por tanto se reducirá el consumo de carbón (estimado en un 20%) y a su vez la emisión de contaminantes por unidad de electricidad generada. Gracias a la investigación en nuevos materiales se alcanzan valores de temperatura de 700-720 °C y de presión de 365-385 bares que pueden aumentar la eficiencia hasta el 44-46% (MIT, 2007).

Tabla 1.1. Condiciones de vapor en plantas de carbón pulverizado según la tecnología

TECNOLOGÍA	Temperatura (°C)		Presión (bar)		Típica eficiencia máxima	
					PCI (%)	PCS (%)
	IEA	MIT	IEA	MIT	IEA	MIT
Subcrítica	538	550	167	220	39	33-37
Supercrítica	540-566	565	250	243	42	37-40
Ultra-supercrítica	580-620	>565	270-290	320	47	44-46

PCI: Poder Calorífico Inferior; *PCS*: Poder Calorífico Superior; *Fuente*: IEA, 2012b; MIT, 2007

1.2.1 Tecnologías para el control ambiental

Durante la combustión de carbón se producen emisiones de polvo y partículas procedentes, en su mayor parte, de la fracción mineral del combustible. Su composición y nivel de emisión es función de las propiedades del carbón, la configuración y operación de la caldera y la presencia de diferentes medidas de control antes de su emisión. Suelen clasificarse por su tamaño, es decir por el diámetro. Las partículas de más de 10 µm de diámetro se detienen con bastante rapidez y generan un mayor impacto cerca de la fuente de emisión. En cambio, las partículas con un diámetro menor a 10 µm (PM₁₀), en especial las inferiores a 2.5 µm, pueden recorrer largas distancias, de hasta cientos de kilómetros, antes de depositarse. Son estas últimas, conocidas como PM_{2.5}, las más perjudiciales para la salud humana y el medio ambiente ya que debido a su reducido tamaño pueden quedar suspendidas en la atmósfera durante días e incluso semanas y penetran más fácilmente en los conductos respiratorios de las personas. La mayoría de partículas

que emiten las plantas de carbón presentan tamaños de entre 0.1 y 10 μm , ya que para diámetros mayores las técnicas de control de emisiones son muy eficientes y consiguen eliminar hasta un 99.8% del peso de las partículas emitidas en el gas sin depurar.

Para el control de la emisión de partículas (PM_{10}) en plantas de combustión de carbón se dispone de los precipitadores electrostáticos (ESP), filtros de tejido, ciclones/multiciclones y procesos de depuración húmeda, cuyos potenciales de reducción aparecen en la Tabla 1.2 (USEPA, 2001).

Tabla 1.2. Eficiencia de eliminación de las tecnologías de control de partículas

TECNOLOGÍA	Eficiencia de eliminación de PM_{10} (%)
Precipitadores electrostáticos	>99
Filtros de tejido	99.7 – 99.9
Ciclones/multiciclones	90 - 95
Depuración húmeda	95 – 99.89

La causa de las emisiones de óxidos de azufre (SO_x) en la combustión es la presencia de azufre en el carbón. Estas emisiones son, en su mayor parte, en forma de SO_2 y producen daños a la salud humana (dificultad en la respiración, enfermedades respiratorias y agravante de enfermedades cardiovasculares) y en el medio ambiente (deposición ácida y acidificación de lagos y ríos, además de dañar el follaje vegetal y contribuir al smog fotoquímico). Para su eliminación existen gran cantidad de tecnologías de desulfuración de gases (FGD) que pueden ser clasificadas según sean húmedas o secas. Todas ellas están ampliamente descritas en la literatura (Srivastava et al., 2001). En la Tabla 1.3 aparecen las principales tecnologías y sus capacidades potenciales de reducción de SO_2 (USEPA, 2001). De la capacidad instalada de FGD en el mundo, aproximadamente el 90% es húmeda.

Tabla 1.3. Eficiencia de eliminación de las tecnologías de desulfuración

TECNOLOGÍA	Eficiencia de eliminación de SO_2 (%)
Depuración húmeda con cal/caliza	80 – 95
Oxidación forzada con caliza (LSFO)	80 – 98
Depuración seca por pulverización	70 – 90
Inyección de sorbente en conducto/caldera	25 – 50

Como bien es sabido, NO_x es el nombre genérico que engloba la emisión de dióxido de nitrógeno (NO_2) y de óxido nítrico (NO), además de óxido nitroso (N_2O) en pocas partes por millón. Su formación depende de la temperatura de la llama en la caldera, el tiempo de residencia de la mezcla combustible/aire, del contenido de nitrógeno del carbón y de la cantidad de exceso de aire. Así, los NO_x se forman durante la combustión por uno o más de los siguientes mecanismos: (i) “ NO_x térmicos” como resultado de la oxidación del nitrógeno molecular presente en el aire que entra a la combustión; (ii) “ NO_x puntuales” como resultado de la reacción entre el nitrógeno molecular y los radicales hidrocarbonados; y (iii) “ NO_x estructurales o del combustible”, que se dan como resultado de la oxidación del nitrógeno presente en el combustible. Los NO_x están asociados a impactos ambientales (como el aumento de ozono troposférico, la formación de lluvia ácida y contribuyendo al calentamiento global como GHG) y daños a la salud humana.

Las tecnologías para control de NO_x se dividen en primarias y secundarias, según reduzcan la cantidad de este contaminante en el proceso de combustión o en el los gases de combustión una vez ya producidos, respectivamente. En la Tabla 1.4 se detallan las tecnologías y sus eficiencias (USEPA, 2001). Estas tecnologías están explicadas con mayor detalle en Srivastava et al., (2005).

Tabla 1.4. Eficiencia de eliminación de las tecnologías de desnitrificación

TECNOLOGÍA	Eficiencia de eliminación de NO_x (%)
Quemadores de baja emisión de NO_x (LNB)	35 – 55
Aire por fases (OFA)	20 – 30
LNB + OFA	40 – 60
Re-combustión	50 – 60
Reducción no catalítica selectiva (SNCR)	30 – 60
Reducción catalítica selectiva (SCR)	80 – 90
LNB + SCR	50 – 80
LNB + OFA + SCR	85 – 95

1.2.2. Tecnologías para la mitigación del cambio climático

El proceso de captura y almacenamiento de carbono (CCS) está considerado como uno de los más prometedores para lograr reducciones significativas en las emisiones de CO_2 , que es el principal componente de los gases de efecto invernadero, y así alcanzar los niveles de reducción acordados en el Protocolo de Kioto (UN, 1998). El concepto de CCS agrupa tres etapas diferenciadas (Steneveldt et al., 2006):

- Captura de CO₂: el CO₂ se captura para evitar que alcance la atmósfera, separándolo de los otros componentes y concentrándolo para facilitar las siguientes etapas. El gas purificado se comprime hasta los 100-150 bares (Rao y Rubin, 2002) alcanzando las condiciones deseadas para su transporte y almacenamiento.
- Transporte de CO₂: etapa necesaria en la mayoría de los casos ya que el almacenamiento final del producto debe conectarse con la captura. El transporte se lleva a cabo por medio de barco, tren, camión o tuberías, siendo esta última opción la única solución técnicamente viable para gestionar grandes cantidades de CO₂.
- Almacenamiento de CO₂: el aislamiento de la atmósfera durante largos periodos de tiempo es necesario para evitar su impacto en el calentamiento global. Las opciones son principalmente en el subsuelo en formaciones geológicas apropiadas (reservas de gas y petróleo agotadas, profundos yacimientos de carbón o acuíferos) o bajo el mar.

Todas las etapas del CCS han sido demostradas hasta cierto nivel comercial pero pocos sitios están almacenando cantidades significativas de CO₂ (Page et al., 2009). La mayor parte de los proyectos de Investigación y Desarrollo a escala industrial y de demostración están enfocados a la etapa de captura de CO₂ ya que esta contribuye en torno al 75% de los costes totales y en un 50% de incremento en el precio de producción de la electricidad. (Feron y Henriks, 2005).

Las tres principales vías para la captura de CO₂ (ver Fig. 1.4) son las siguientes:

- Post-combustión: Es la vía más utilizada a nivel mundial tanto para plantas de nuevo diseño como para plantas existentes gracias a que es bien conocida su eficiencia y los costes asociados a su operación. Tras la combustión en presencia de aire en exceso se crea una corriente de gases a alta temperatura y presión atmosférica con una concentración de CO₂ de entre 4 – 14% diluida en N₂ y con la presencia de pequeñas cantidades de otros contaminantes como NO_x, SO₂ y partículas (Olajire, 2010). Se separa el CO₂ de esta corriente para concentrarlo y su posterior transporte. Existe una amplia gama de tecnologías para llevar a cabo esta separación CO₂/N₂: absorción química, adsorción, criogenia y membranas (Feron y Hendriks, 2005). La eficiencia de esta vía de captura está entre 85 – 95% (Steenefeldt et al., 2006). La tecnología disponible comercialmente es la absorción química con aminas, principalmente la monoetanolamina (MEA) o mezclas.
- Oxidación: Esta vía también es utilizada tanto en plantas de nuevo diseño como en plantas existentes (retrofit). Es una opción que puede competir con la vía post-combustión. En realidad es una variación de la anterior que requiere una modificación en la caldera y una recirculación de gases ya que la combustión se produce a temperaturas excesivamente altas (Buhre et al., 2005). Está basado en una combustión casi estequiométrica donde el combustible es quemado en presencia de oxígeno de elevada pureza (mayor del 95%) producido en la unidad de separación de aire (ASU). La cantidad de gases que se producen es mucho menor (alrededor del 80%) ya que se evita

la dilución en N_2 y el resultado es una corriente compuesta principalmente por CO_2 (en torno al 75%) y H_2O (Wall et al., 2009). La corriente de CO_2 concentrado se obtiene por condensación del agua. Además se reducen la presencia de otros contaminantes como NO_x y SO_2 comparado con el proceso de combustión con aire. La tecnología comercial utilizada actualmente para la producción de grandes cantidades de oxígeno de alta pureza es la destilación criogénica (Darde et al., 2009). En condiciones ideales, por medio de esta vía se podría capturar todo el CO_2 presente en los gases de combustión. Sin embargo, durante el proceso de secado y purificación de la corriente concentrada de CO_2 ocurren ciertas emisiones. Teniendo en cuenta estas emisiones la eficiencia de este proceso de captura está entre 90 – 98% (Rubin et al., 2007)

- Pre-combustión: esta vía busca capturar el CO_2 antes de la etapa de combustión. El combustible es gasificado o reformado (según sea carbón o gas natural, respectivamente) para dar gas de síntesis (H_2 y CO) y tras la transformación del CO en CO_2 y H_2 , la corriente resultante presenta un contenido medio de CO_2 (15-40%) a elevada presión y temperatura (Page et al., 2009). El CO_2 es separado del H_2 y enviado a la unidad de compresión para su posterior transporte. La tecnología convencional para realizar la separación H_2/CO_2 es un proceso de absorción física utilizando un solvente como Selexol, Purisol o Rectisol (Olajire, 2010). La eficiencia de este proceso está entre 85 – 90% (Damen et al., 2006). A diferencia de las otras dos vías propuestas anteriormente, ésta no puede usarse como opción de retrofit en plantas ya existentes. Sólo es útil para plantas de nuevo diseño por lo que no se valorará en esta tesis.

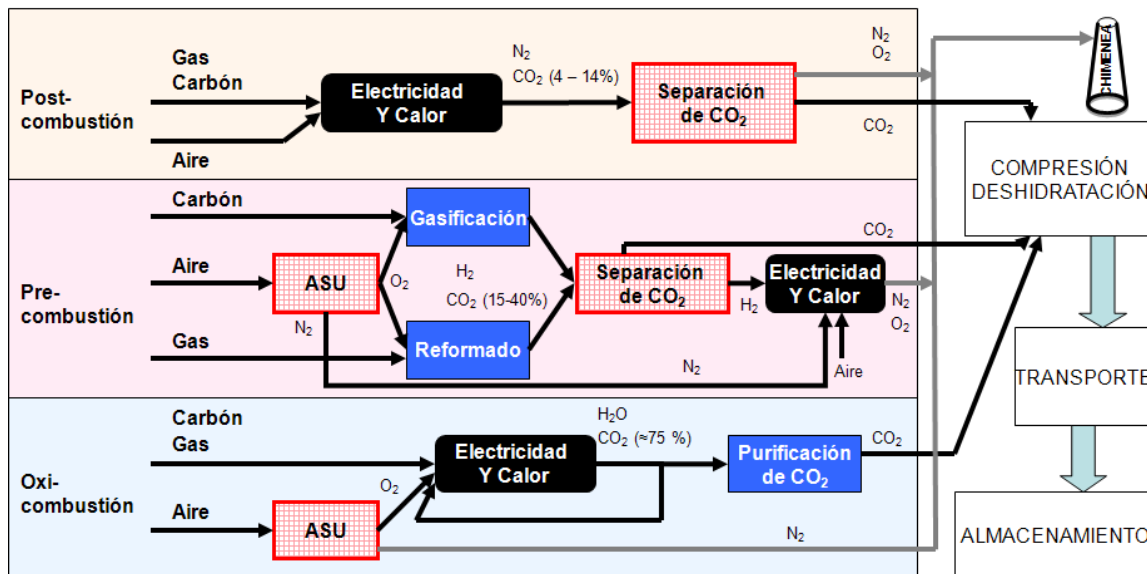


Figura 1.4: Principales vías para la captura de CO_2 en la combustión de combustibles fósiles.

Adaptado de Kanniche et al., 2010

En la Fig. 1.5 se puede observar un resumen del presente y futuro de las tecnologías para los diferentes tipos de separación. En cuanto a la captura post-combustión, reciben gran atención los procesos de separación con membranas (Zhao et al., 2008) por su bajo impacto ambiental y alta

eficiencia (Iribarren et al., 2013) y la absorción utilizando líquidos iónicos (Wappel et al., 2010; Albo et al., 2011). En cuanto a la pre-combustión, otras tecnologías de separación se están estudiando para esta vía como la adsorción con sólidos o el uso de membranas. Esta última alberga gran potencial, tanto con el uso de membranas selectivas al H_2 como al CO_2 , aunque todavía es necesario un gran esfuerzo en investigación para que esta tecnología sea competitiva (Scholes et al., 2010). Para oxidación, como el proceso de combustión requiere de una corriente de oxígeno puro en lugar de aire, la mejora de la tecnología de separación de O_2/N_2 que tiene lugar en el ASU puede suponer una disminución considerable del coste en este proceso de captura de CO_2 . El uso de membranas aparece como la tecnología más prometedora a medio plazo, utilizando tanto materiales poliméricos como cerámicos (también conocidas como ITM (ion transport membranes)) dependiendo de las condiciones de operación (Burdyny y Struchtrup, 2010). Recientemente han surgido otros conceptos para el proceso de oxidación como son la recuperación cerámica autotérmica (CAR) y el Chemical Looping que aplican procesos de combustión con transportadores de oxígeno (Adanez et al., 2012).

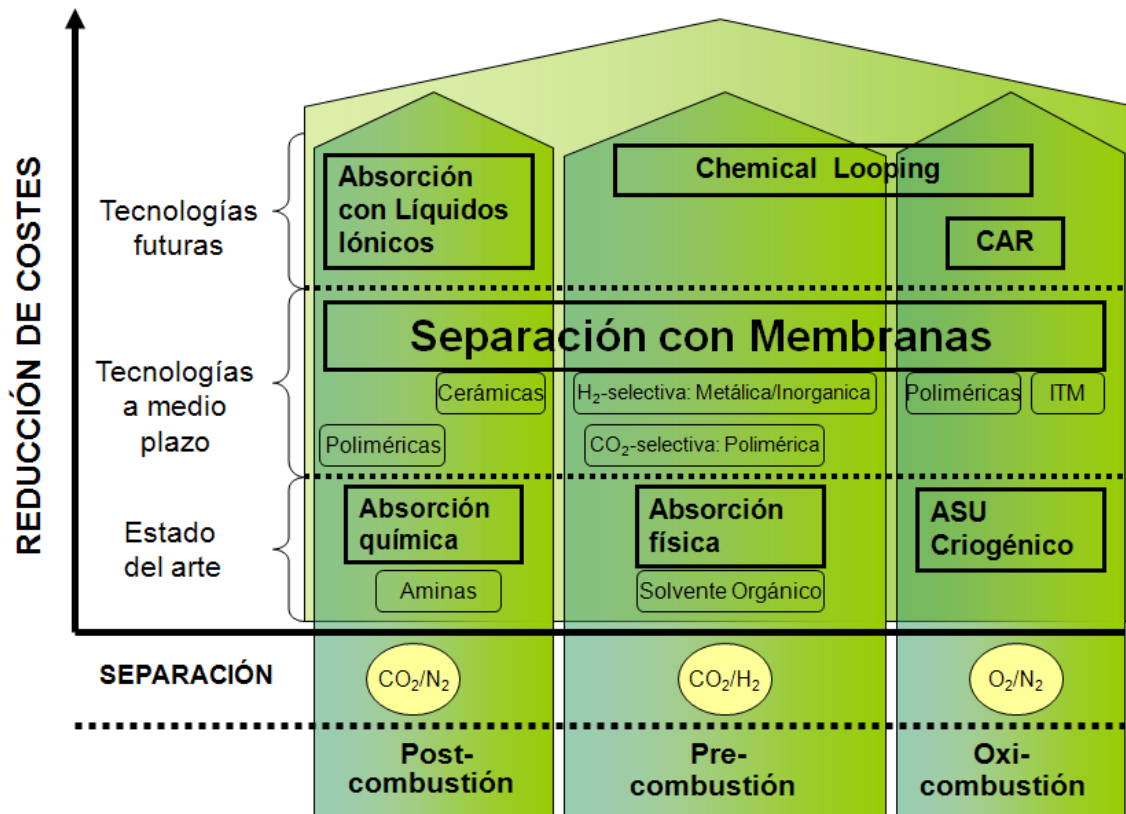


Figura 1.5: Tecnologías para la separación de CO_2 . Adaptado de Figueroa et al., 2008.

Con la ratificación del protocolo de Kioto, todos los estados miembros se comprometieron a reducir una cantidad de emisiones de CO_2 en 2020 tomando como base los niveles de 1990. Uno de los mecanismos propuestos para favorecer las reducciones estipuladas es el establecimiento y operación de un mercado de emisiones con fijación de límites previos ("cap and trade"). A nivel europeo se establece un tope máximo (i.e., "cap") de emisiones de gases de efecto invernadero que el estado miembro puede emitir en línea con los objetivos de Kioto. Las emisiones hasta este

tope están respaldadas por derechos de emisión entregados gratuitamente a los emisores a través de los Planes Nacional de Asignación (PNA). Un derecho de emisión se refiere a una licencia para emitir una tonelada equivalente de CO₂. Las emisiones que sobrepasan el tope dan lugar a penalizaciones. El esquema "cap and trade" permite que los derechos de emisión puedan ser intercambiados en un mercado como se puede ver en la Figura 1.6. La imposición de ese límite de derechos de emisión hará que haya escasez en el mercado y el precio dependerá del equilibrio entre la oferta y la demanda.

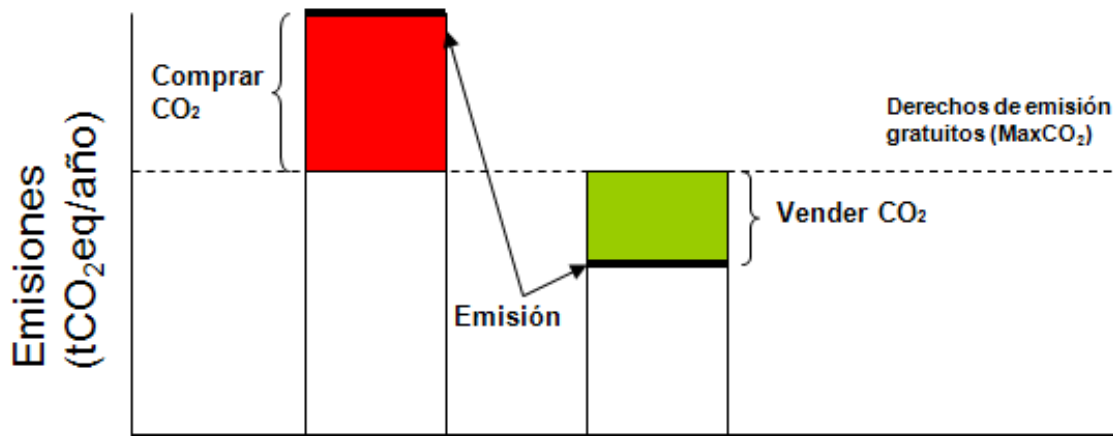


Figura 1.6: Esquema del mercado de emisiones con fijación de límites previos ("cap and trade")

Es un mecanismo efectivo para reducir las emisiones al mínimo coste para el conjunto de la sociedad, ya que incentiva a las industrias que pueden reducir emisiones a un menor coste a invertir en los equipos necesarios y a vender los derechos de emisión correspondientes a industrias cuyo coste de reducción de emisiones es mayor.

Según datos de la IEA (2010), actualmente se han establecido mercados de emisiones obligatorios que están operativos en diversas partes del mundo (Unión Europea, Noruega, Suiza y Nueva Zelanda). Otros sistemas de intercambio están en fase de planificación (Corea, Japón, Brasil y China) o diseño (Australia y Estados Unidos). La Unión Europea (UE) estableció su sistema de intercambio de emisiones basándose en la directiva 2003/87/EC (EP&EC, 2003) que define tres periodos de comercio con su propio PNA para la asignación gratuita de derechos de emisión.

Existen dos cuestiones importantes en cuanto a los derechos de emisión. La primera es el método usado para su asignación en el PNA. La metodología utilizada depende del país. La más extendida en el sector de grandes productores de electricidad está basada en benchmarks (i.e., el valor que refleja la media de emisiones de GHG del 10% de las plantas menos emisoras de la UE) o en la referencia de la MTD. Esta estrategia busca recompensar a las instalaciones eficientes y alentar a las que no alcanzan el valor de la MTD o el benchmark a invertir en tecnologías más limpias. Es utilizada en países como Reino Unido, Italia y España. Otra metodología alternativa consiste en asignar derechos gratuitos de acuerdo a las emisiones históricas en el sector. Con ello se beneficia a las instalaciones con mayores emisiones ya que afrontan más dificultades a la hora

de intentar adaptarse al mercado de emisiones. Países como Noruega, Dinamarca e Irlanda, asignan los derechos según esta metodología. Finalmente, existen otros países, como Alemania, que usan una mezcla de ambas metodologías en función de si la instalación es nueva o ya existente.

El segundo aspecto importante a tener en cuenta es la cantidad de derechos de emisión a asignar gratuitamente en cada país. En el PNA I, que cubría el periodo 2005 – 2007, prácticamente todos los derechos de emisión se distribuyeron gratuitamente por ser un periodo de prueba. En el PNA II (2008 - 2012) se acordó asignar por lo menos el 90% de los derechos gratuitamente (Delarue et al., 2008). Para el tercer periodo de comercio (2013 - 2020) la UE prevé que la mayoría de los derechos serán asignados por otros métodos como las subastas, siendo éste el único método establecido para el sector eléctrico (EU, 2008). No obstante, la UE ofrece la oportunidad a ciertos estados miembro de desviarse de esta regla en cuanto a instalaciones existentes, permitiendo la asignación gratuita del 70% de las emisiones en 2013 y con un objetivo de reducir progresivamente esta cantidad hasta 0% en 2020.

1.2.3. Diagrama de flujo de los procesos de combustión más limpia de carbón

La configuración en que se dispondrán los equipos de control de contaminantes seleccionados tiene gran influencia en el resultado del proceso, ya que según su elección pueden variar los parámetros que afectan a la eficiencia de captura de cada operación o el requerimiento de equipos adicionales para su óptimo funcionamiento. Dependerá normalmente de parámetros específicos de la planta como el espacio disponible si el equipo es diseñado como retrofit o la composición del gas de combustión a tratar. En muchos casos se utiliza la temperatura eficiente de operación como criterio para elegir la posición de cada equipo en la configuración ya que cada uno presenta un rango de temperaturas en la que la operación llevada a cabo es óptima.

En el caso del control de partículas, el ESP puede ser usado en varios rangos de temperaturas de forma óptima según su colocación en la planta. Si es cold-side ESP tiene un rango de temperaturas de alrededor de los 204 °C o menos, ya que se coloca detrás del precalentador, que intercambia calor con el aire que entra en la caldera enfriando los gases de combustión. En cuanto a los hot-side ESP se usan para gases de combustión cuya temperatura es 320 – 420 °C, ya que se sitúa antes del precalentador y el mencionado intercambio de calor no existe.

En el caso de la reacción de reducción de NO_x, ésta es efectiva solamente en un reducido rango de temperaturas debido al uso de un catalizador en la unidad de SCR. Este rango de temperaturas depende del tipo de catalizador utilizado y de la composición de los gases de combustión a tratar. Para la mayoría de catalizadores comerciales el rango óptimo de temperaturas está entre 250 – 427 °C (USEPA, 2002).

En la desulfuración, dependiendo si la tecnología utilizada es húmeda o seca, los rangos de temperatura varían. Cuando se utilizan sistemas de depuración húmeda el rango de temperaturas va de 150 – 370 °C. Con sistemas en seco de inyección de sorbente el rango de temperatura oscila entre 150 – 180 °C (FETC, 1996).

En la captura de CO₂ post-combustión (CCPC) la temperatura de los gases afecta a la reacción de absorción (la absorción de CO₂ en MEA es un proceso exotérmico que se ve favorecida por bajas temperaturas). El rango aceptable está entre 50 – 60 °C. En caso que los gases provengan directamente de la caldera (i.e., sin pasar por una etapa previa de depuración húmeda) se requiere de la instalación de un enfriador de contacto directo (Rubin y Rao, 2002).

Las configuraciones que se muestran en la Figura 1.7 vienen marcadas por la posición del SCR: configuración de alto contenido en partículas (high dust), configuración de bajo contenido en partículas (low dust) y configuración de gas de cola (tail end) (USEPA, 2002).

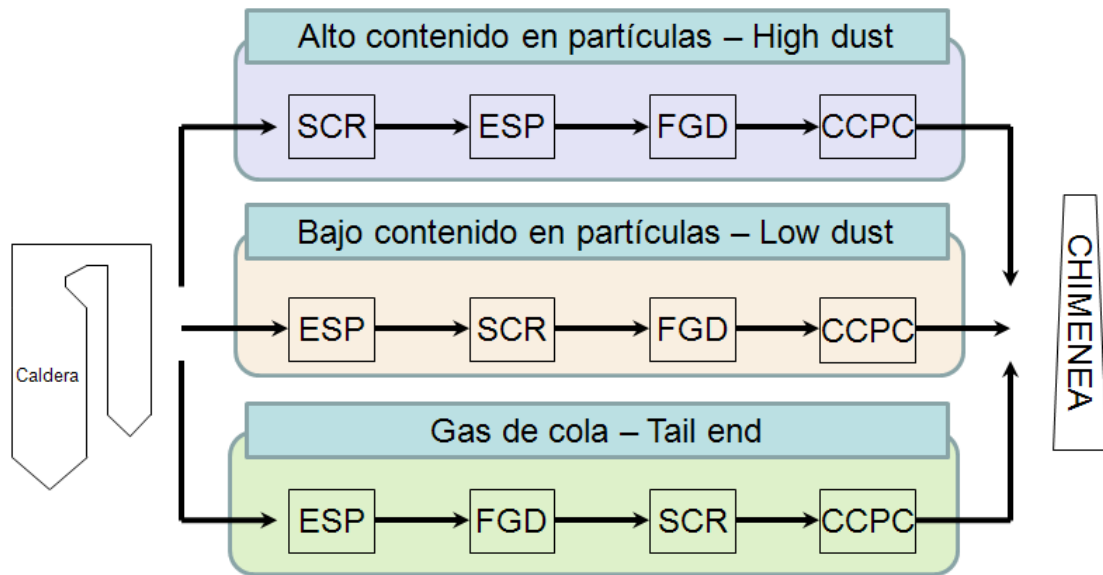


Figura 1.7: Configuraciones de los equipos de control de contaminantes

- En la configuración high dust, la unidad SCR se sitúa antes del precalentador de aire y el tratamiento de control de partículas. La gran ventaja de esta configuración es que los gases de combustión se encuentran en el rango óptimo de temperaturas para la reducción de los NO_x y por tanto no se requiere calentamiento adicional de los gases de combustión. Sin embargo, la corriente de gases presenta un contenido alto en partículas y SO₂ cuando entra en el SCR, lo que puede provocar la creación de compuestos que envenenan y degradan el catalizador disminuyendo su eficacia.
- En la configuración low dust, la unidad SCR se sitúa después del tratamiento de partículas y antes del tratamiento de desulfuración. En esta posición, la temperatura de los gases disminuye debido a su paso por el tratamiento de partículas, por lo que se requiere un calentamiento de los gases para alcanzar la temperatura óptima del catalizador. La ventaja es que la corriente de gases es más limpia lo que supone una vida más larga para el catalizador y por tanto una reducción de costes.
- La configuración tail end no es muy común en plantas de combustión de carbón. Se suele utilizar cuando las restricciones de espacio hacen de ella la única opción viable. La unidad de SCR se sitúa después del tratamiento de partículas y de desulfuración. La ventaja de

esta configuración es que la corriente de gases llega libre de SO_2 y partículas por lo que hay un menor grado de desactivación del catalizador. Sin embargo el recalentamiento de los gases es obligatorio ya que la temperatura de los gases disminuye por debajo del rango óptimo del catalizador.

La elección de la configuración y los equipos, necesaria para poder simular/diseñar el proceso de combustión limpia del carbón, se ha hecho siguiendo el marco propuesto en el IECM (IECM, 2001). El IECM (Integrated Environmental Control Model) es un programa de modelado por ordenador desarrollado por la Universidad Carnegie Mellon (Pittsburgh, USA) que permite realizar análisis de costes y funcionamiento de los equipos de control de emisiones en plantas de producción de energía a partir del carbón.

Para una planta de carbón pulverizado subcrítica se elige una configuración high dust, ya que es la más común, y en ella pueden intervenir los siguientes equipos: un precipitador electrostático cold-side para el control de partículas; un equipo de depuración húmeda con oxidación forzada para la desulfuración; un equipo de reducción catalítica selectiva para la desnitrificación; para la captura de CO_2 se contemplan las opciones de post-combustión (CCPC) (absorción con aminas) y oxicomustión (con el ASU, una unidad de purificación (CPU) y el sistema de recirculación).

En la Figura 1.8 se muestran los diagramas de flujo del proceso de combustión en la planta base (A) y las opciones de retrofit para el proceso de combustión con aire (B) y el proceso de oxicomustión (B y C, respectivamente).

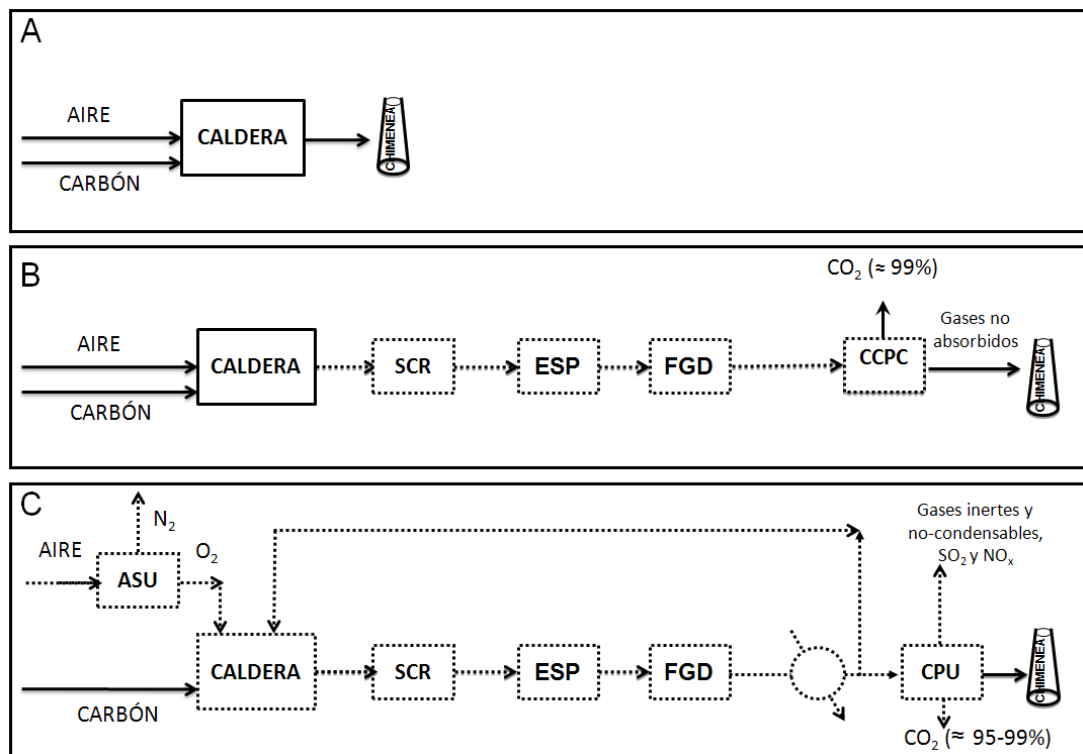


Figura 1.8: Diagramas de flujo del proceso de combustión para la planta base (A); las opciones de retrofit para el proceso de combustión con aire (B); y las opciones de retrofit para el proceso de oxicomustión (C).

1.3. SIMULACIÓN y OPTIMIZACIÓN del proceso de combustión más limpia del carbón

Para identificar la configuración del diagrama de flujo y/o las condiciones de operación que maximizan o minimizan la función objetivo seleccionada es necesario disponer de los modelos que permitan la simulación de las diferentes etapas conectadas y observar el resultado del proceso global. Una vez que se dispone de los instrumentos para la simulación de las etapas del proceso se aplican estrategias basadas en optimización. De entre las diversas técnicas de optimización (Rao, 2009) se ha seleccionado la programación matemática, que es una potente técnica usada en el proceso de toma de decisiones perteneciente a la rama de las matemáticas de Investigación Operativa. Sus raíces se remontan a los servicios militares prestados en la segunda guerra mundial, donde la necesidad de asignar los escasos recursos a distintas operaciones militares llevó a los equipos científicos a desarrollar métodos efectivos para ello. Más tarde en la década de los 50 se extendió su uso fuera del campo militar en operaciones en la industria, los negocios y el gobierno (Gill et al., 2008).

Esta estrategia requiere la identificación de una superestructura que incluya las etapas y el equipamiento que pueden intervenir en el diagrama de flujo final, así como sus interconexiones (Yeomans y Grossmann, 1999). La Figura 1.9 muestra la superestructura correspondiente a la combustión más limpia de carbón con los puntos de decisión.

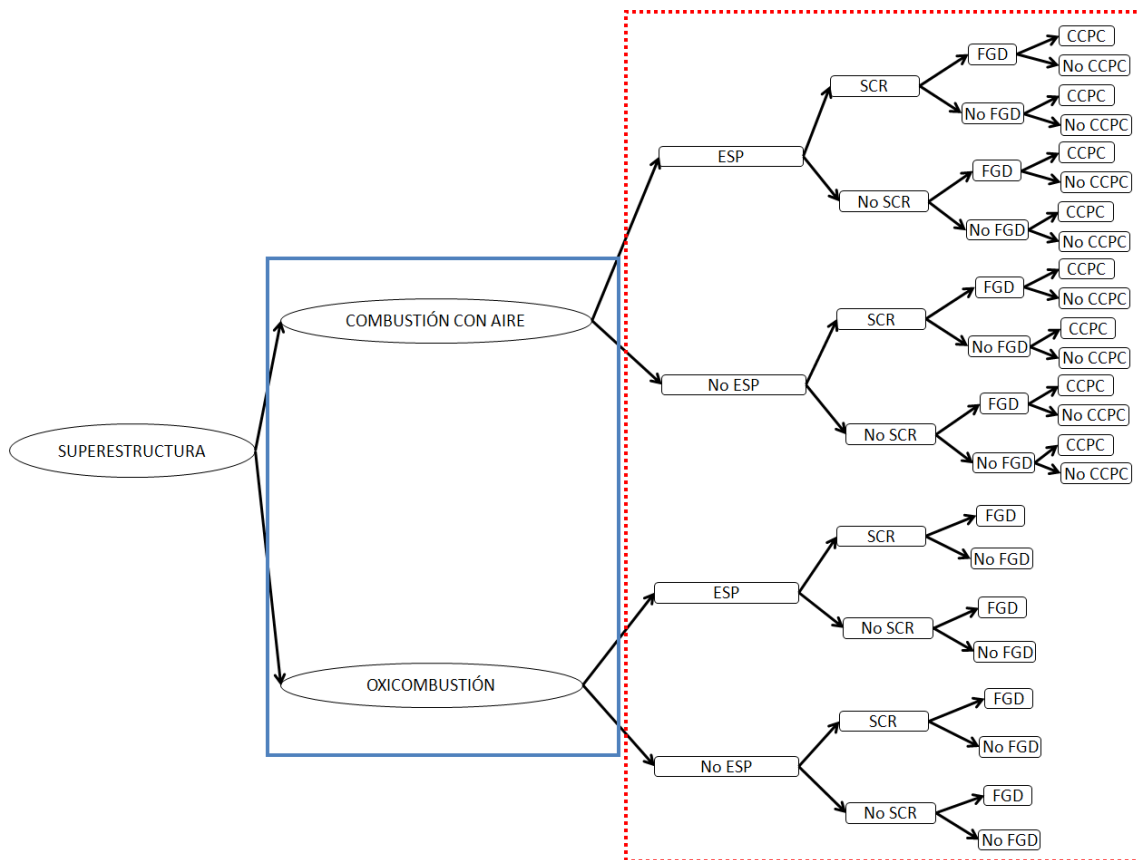


Figura 1.9: Superestructura correspondiente a la combustión más limpia de carbón. En azul la decisión del sistema de combustión (i.e. con aire o con oxígeno) y en rojo las decisiones de instalar las diferentes tecnologías limpias.

El objetivo es, a partir de la superestructura, derivar un modelo de programación matemática con variables continuas y discretas que ayuden a predecir el diseño óptimo del diagrama de flujo. Un problema general de programación matemática se representa de forma algebraica como se muestra en la Eq. 1.1.

$$\left. \begin{array}{l} \min_x \quad f(x) \\ \text{sujeto a} \quad h(x) = 0 \\ \quad \quad \quad g(x) \leq 0 \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \\ \quad \quad \quad h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \end{array} \right\} \quad (1.1)$$

Sus componentes principales son:

- **Función objetivo** – Es una medida cuantitativa del funcionamiento del sistema a estudiar (i.e., f). Tradicionalmente, los problemas de optimización en aplicaciones de Ingeniería Química y de Procesos se han centrado en funciones objetivo de carácter económico. Pero con la creciente preocupación de la sociedad por el medio ambiente, los criterios ambientales han evolucionado de ser condiciones o restricciones impuestas para su cumplimiento, a ser objetivos en sí mismos a incorporar en el problema de optimización junto con los criterios económicos (Azapagic y Clift, 1999a; Guillén-Gosálbez, 2011). Entre los criterios económicos más utilizados para cuantificar el funcionamiento de un sistema aparecen los utilizados en esta tesis, que son el coste total de inversión, el coste del producto, el beneficio neto y el riesgo financiero. En cuanto a los criterios ambientales, suelen centrarse en la cuantificación de cargas o impactos al medio ambiente (Azapagic y Clift, 1999b), aunque últimamente se están introduciendo variables que tienen en cuenta el uso de los recursos naturales (Aldaco et al., 2010; Martínez y Eliceche, 2011). Gran cantidad de estudios utilizan funciones objetivo ambientales con una única variable como la huella de carbono (Hashim et al., 2005) o la huella hídrica (Eslick y Miller, 2011). Sin embargo, cada vez existen más trabajos que incorporan funciones objetivo ambientales multivariadas, sobretodo a través del uso de diferentes metodologías como por ejemplo el Eco-indicator 99 (Guillén-Gosálbez et al., 2008; Gebreslassie et al., 2009). En esta tesis se proponen funciones objetivo multivariadas obtenidas utilizando las métricas de sostenibilidad introducidas por el IChemE (Institution of Chemical Engineers) (IChemE, 2002) y con un esquema de normalización basado en las políticas del IPPC para unificar las métricas en un solo valor (Irabien et al., 2009).
- **Variables** – Son las incógnitas cuyos valores deben ser determinados para estimar la función objetivo (i.e., x).
- **Restricciones** – Son las condiciones que deben cumplir las variables de decisión (i.e., $h \wedge g$). En aplicaciones de Ingeniería Química, las restricciones de igualdad (i.e., $h(x)=0$)

vienen de balances de masa, energía y cantidad de movimiento, y pueden ser ecuaciones algebraicas y/o diferenciales. En cuanto a las restricciones de desigualdad (i.e., $g(x) \leq 0$) se deben a consideraciones del material, equipo, seguridad, legislación, mercado u otras especificaciones.

La relación entre las entradas y salidas de los elementos de la superestructura vendrán descritas por modelos técnico-económicos que, como se puede ver en la Fig. 1.10, tendrán una serie de valores para las variables de entrada al modelo a partir de los cuales se estiman las variables de salida. Estas últimas, junto con las restricciones impuestas, se incorporan al problema de optimización donde se especifican una o varias funciones objetivo a ser maximizadas o minimizadas. La solución del modelo de optimización estará compuesta por los valores de las variables que controlan las decisiones que hacen óptima la función objetivo satisfaciendo el conjunto de restricciones. Esta solución, en definitiva, indicará qué tecnologías de la superestructura deben ser mantenidas en el diagrama de flujo, así como sus interconexiones y, en su caso los valores óptimos de las condiciones de operación.

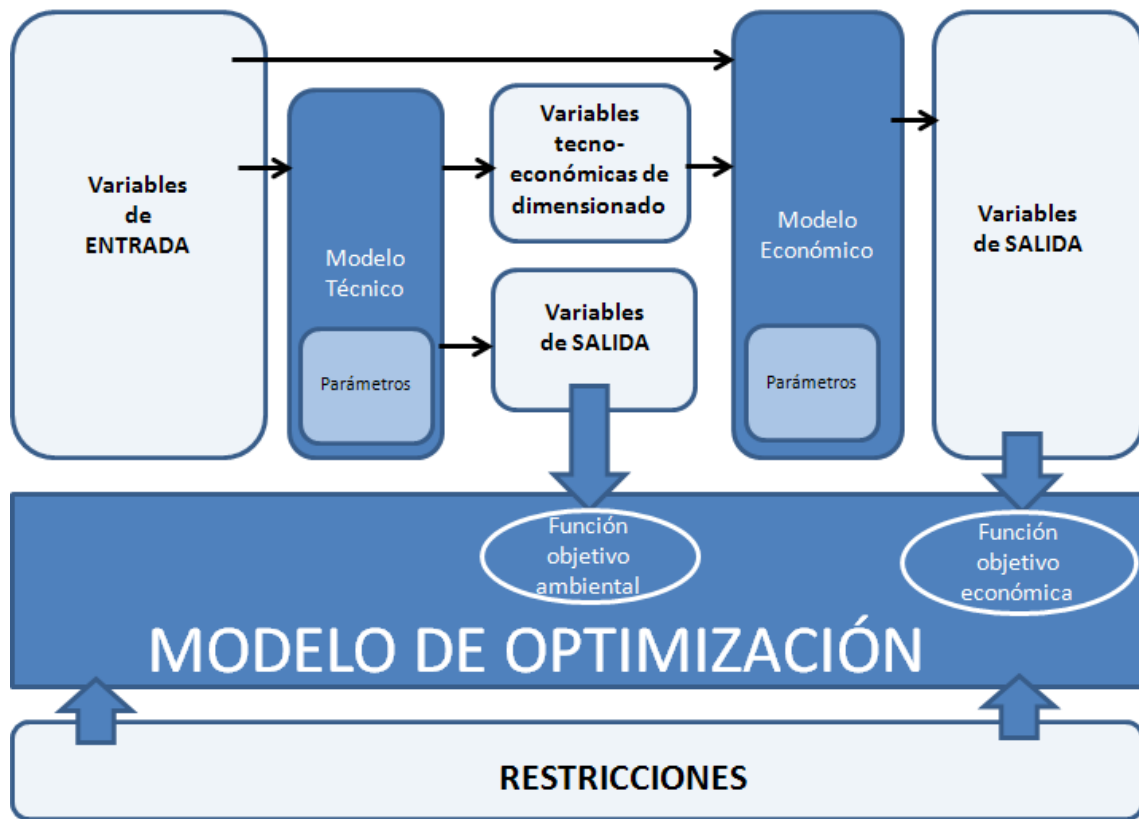


Figura 1.10: Esquema de relación de los elementos de la superestructura en la etapa de simulación/optimización

Los modelos técnico-económicos se pueden dividir en dos partes íntimamente relacionadas: la parte técnica, que permite calcular las variables de dimensionado y operación, y la parte económica que permite calcular el coste de inversión y operación de cada tecnología a partir de las variables de dimensionado y las condiciones de funcionamiento, respectivamente. En general los modelos se encuentran en la literatura existente o se desarrollan específicamente simulando

cada etapa del proceso (usando programas de simulación como ASPEN-Plus) para obtener unas correlaciones que, a través de técnicas de ajuste empírico (usando programas estadísticos como SAS), dan las ecuaciones lineales/logarítmicas usadas en esta tesis y que relacionan las variables de entrada con las de salida en cada etapa. En general, los modelos se simplifican fijando los valores de las variables que tienen menor impacto en el coste con valores obtenidos del IECM y de bases de datos históricas de proyectos instalados de esas tecnologías (como por ejemplo Keeth et al., (1991) para FGD o Rubin et al., (2002) y Fisher et al., (2005) para CCPC). Finalmente son validados con datos disponibles.

Los modelos de estimación de costes de cada equipo siguen la metodología propuesta por el EPRI (Electric Power Research Institute) (EPRI, 1993) y por la EPA (Yelverton, 2009). Además, para poder comparar los costes de las diferentes tecnologías se usa el CEPCI (índice de coste de plantas de Ingeniería Química (Chemical Engineering Plant Cost Index)) que equiparará la unidad de medida a un mismo año de referencia (Perry, 1997).

La metodología para la estimación de costes incorpora aproximaciones con un grado importante de incertidumbre, por lo que se considera una precisión del $\pm 30\%$ como típica de este nivel de estudio.

Algunas características de los modelos técnicos son:

- Los gases de combustión a tratar se comportan como un gas ideal.
- Las temperaturas de operación en cada etapa se consideran constantes.
- Se asume presión continua en los equipos durante la operación de los mismos, considerando las caídas de presión despreciables.
- Las variaciones de temperatura de los gases tienen lugar en las corrientes intermedias que unen las diferentes unidades de tratamiento.
- Cada tecnología elimina principalmente un contaminante.
- Las unidades en las que ha sido posible (i.e., ESP, SCR, FGD, CCPC; en OXI no es posible), se ha diseñado un bypass como se muestra en la Fig. 1.11. Es una estrategia para relacionar los costes con el dimensionado. Permite alcanzar la reducción de contaminantes que se desee controlando, o bien el tamaño del equipo a instalar o a través de la operación del mismo y la composición de las emisiones de salida (Rao y Rubin, 2006).

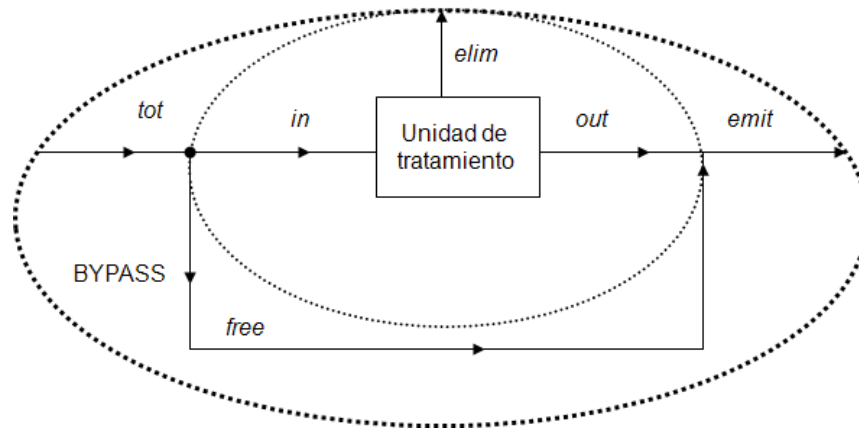


Figura 1.11: Flujograma del bypass en las unidades de tratamiento

A continuación se comentan brevemente el funcionamiento de los equipos y las entradas y salidas de sus modelos técnico-económicos. Para más detalle ver Anexo I.

1.3.1. Modelos técnico-económicos de las tecnologías limpias

➤ Precipitador electrostático

El precipitador electrostático utiliza fuerzas eléctricas para retirar las partículas del caudal de gases y para ello existen diferentes tipos que vienen descritos en Peavy et al., (1985). En este caso para su modelado se utiliza el de placas planas descrito por la EPA (Environmental Protection Agency) (USEPA, 2002) en el que la variable principal de dimensionado a calcular, como se observa en la Fig. 1.12, es el área específica de recolección (TSCA – total specific collection area). El TSCA es función de la temperatura de operación del equipo (T^{ESP}), de la eficiencia de eliminación que se requiere ($\eta_{PM_{10}}^{ESP}$), del caudal de gases que pasa por el equipo ($Vfg^{in,ESP}$) y de la cantidad de partículas ($X_{PM_{10}}^{in}$). Las salidas del modelo son los costes de inversión ($Cinv^{ESP}$) y operación ($Coper^{ESP}$), la energía consumida por el equipo (también conocida como Energy Penalty) (EPT^{ESP}) y las emisiones de PM_{10} a la atmósfera ($X_{PM_{10}}^{emit}$).

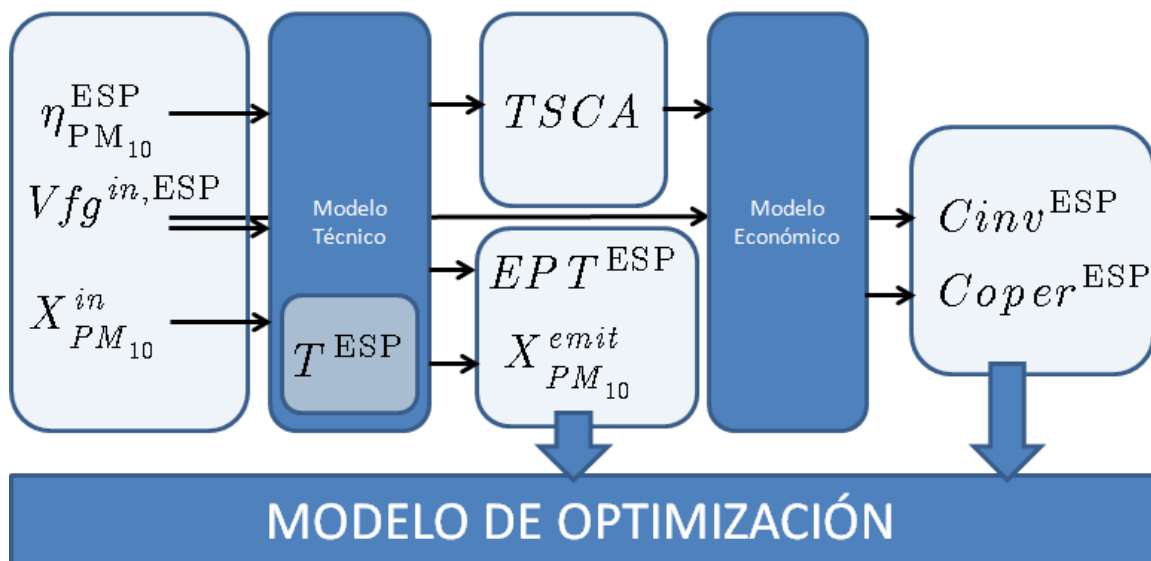


Figura 1.12: Modelo técnico-económico del precipitador electrostático

➤ Depuración húmeda - oxidación forzada

En el proceso de desulfuración por depuración húmeda, los gases de combustión que contienen el SO_2 entran en contacto con una solución alcalina o reactiva (normalmente cal o caliza) en el absorbedor. El SO_2 es absorbido en el líquido atomizado, reaccionando con la caliza disuelta y otras especies alcalinas presentes formándose sulfito. En presencia de oxígeno se oxida a sulfato de calcio (yeso) y cuando la solución satura, el sulfato de calcio precipita en forma de cristales. Cuando no se controla la oxidación de sulfito a sulfato, se conoce como oxidación natural. El control de esa etapa, inyectando aire en el tanque de reacción, aumenta la fiabilidad de la operación y se conoce como oxidación forzada (LSFO), que es la más utilizada en plantas de carbón.

En esta tesis usamos el modelo propuesto por Srivastava (2000). El escalado se hace en función de la cantidad de gases a tratar ($Vfg^{in,FGD}$), del SO_2 que entra en el sistema ($X_{SO_2}^{in}$) y de la eficiencia de eliminación ($\eta_{SO_2}^{FGD}$). Una variable de dimensionado importante a calcular (Fig. 1.13) es la cantidad necesaria de reactivo (X_{Reactivo}). Las salidas del modelo son los costes de inversión (C_{inv}^{FGD}) (cuyo cálculo está dividido en cinco áreas principales: la alimentación de la lechada alcalina, la eliminación del SO_2 (absorbedor, tanques y bombas), el sistema de gases de salida, el sistema de manejo de subproductos y equipos de soporte), los costes de operación (C_{oper}^{FGD}), la energía consumida por el equipo (EPT^{FGD}) y las emisiones de SO_2 a la atmósfera ($X_{SO_2}^{emit}$).

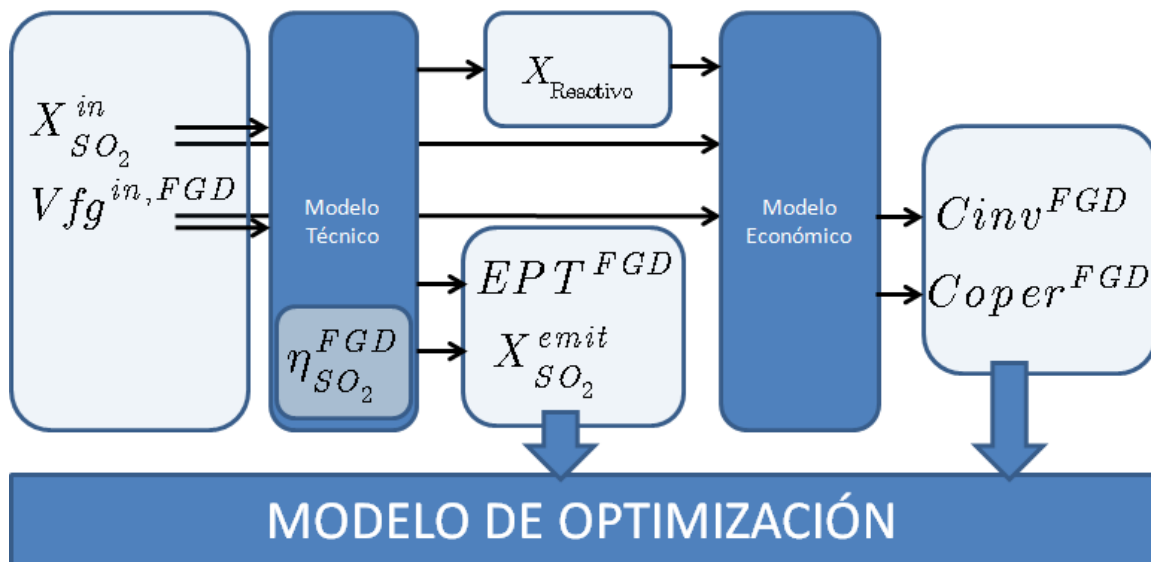


Figura 1.13: Modelo técnico-económico de la depuración húmeda con oxidación forzada

➤ Reducción catalítica selectiva

El proceso de SCR está basado en la reducción química de la molécula de NO_x . Se emplea un catalizador normalmente de base metálica con centros activos para incrementar la velocidad de la reacción de reducción. Se introduce un agente de base nitrogenada, como amonio o urea, junto con los gases de combustión a tratar. El agente reacciona selectivamente con los NO_x en un rango específico de temperatura y ambos entran en el reactor que contiene el catalizador. Allí,

difunden a través del catalizador y al entrar en contacto con los centros activos, y en presencia de oxígeno, se reducen los NO_x a nitrógeno molecular (N_2) y vapor de agua (H_2O).

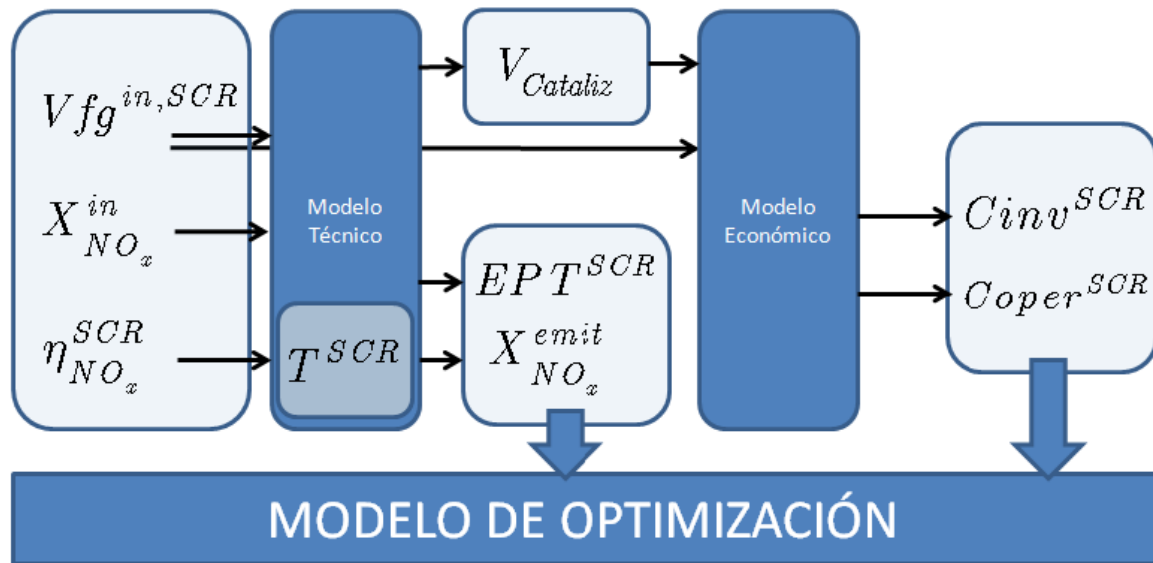


Figura 1.14: Modelo técnico-económico de la reducción catalítica selectiva

Para su modelado seguimos el propuesto por la EPA (USEPA, 2002). Las principales entradas al modelo técnico (Fig. 1.14) son la cantidad de gases a tratar en el equipo ($Vfg^{in,SCR}$), la cantidad de NO_x en los gases ($X_{NO_x}^{in}$) y el nivel de reducción deseado de NO_x ($\eta_{NO_x}^{SCR}$). La variable de dimensionado importante a calcular para hallar el coste del equipo es el volumen de catalizador a utilizar ($V_{Cataliz}$), ya que será una parte importante del mismo. Las salidas del modelo son los costes de inversión (C_{inv}^{SCR}) y operación (C_{oper}^{SCR}), la energía consumida por el equipo (EPT^{SCR}) y las emisiones de NO_x a la atmósfera ($X_{NO_x}^{emit}$).

➤ Captura de CO_2 post-combustión (absorción con aminas)

El sistema de CCPC consta de dos equipos principales que son el absorbedor y el regenerador. La operación se basa en que el MEA, en el absorbedor, reacciona químicamente formando un enlace débil con el CO_2 dando un producto intermedio estable (el carbamato). La solución rica en CO_2 deja el absorbedor, pasa por un intercambiador de calor donde es calentado y se dirige al regenerador donde el producto intermedio se destruye por la aplicación de calor, regenerando el MEA y produciendo una corriente concentrada de CO_2 . El producto se comprime a elevada presión para facilitar su transporte hasta el lugar de depósito final.

En esta tesis utilizamos el modelo propuesto por Rubin y Rao (2002). Como entradas aparecen variables como el caudal de gases a tratar ($Vfg^{in,CCPC}$) y el contenido de CO_2 en los gases de combustión ($X_{CO_2}^{in}$) (ver Fig. 1.15). Los parámetros a destacar en el modelo son la temperatura de operación (T^{CCPC}), la eficiencia de captura de CO_2 ($\eta^{CCPC}_{CO_2}$), la concentración de MEA (C_{MEA}), carga de CO_2 del solvente agotado (Φ_{lean}), la concentración de CO_2 en los gases de combustión (C_{CO_2}), calor contenido en el vapor utilizado en el regenerador (q_{steam}) y la cantidad de MEA perdida en la planta (m_{MEA}). Con ellos se calculan las variables de dimensionado usadas en el

modelo económico como son el flujo de solvente a utilizar (V_{solvente}), el caudal de vapor extraído de las turbinas (M_{steam}), el caudal de MEA a reponer por pérdidas (M_{MEA}) y el caudal de CO_2 producido (M_{CO_2}).

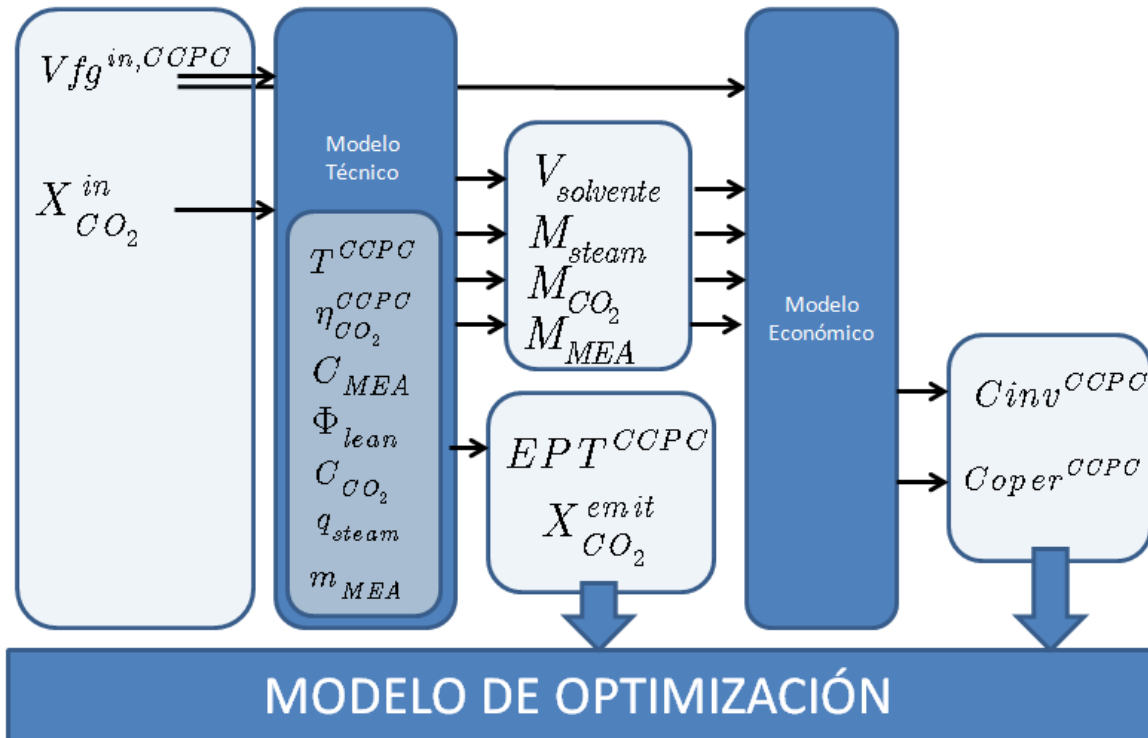


Figura 1.15: Modelo técnico-económico de la captura de CO_2 post-combustión

Las salidas del modelo son los costes de inversión ($C_{\text{inv}}^{\text{CCPC}}$) que viene calculado a través de sus ocho áreas principales (i.e., extractor de gases de combustión, absorbedor, intercambiador de calor, regenerador, recalentador (reboiler), recuperador (reclaimer), área de procesado del sorbente y unidad de compresión), los costes operación ($C_{\text{oper}}^{\text{CCPC}}$), la energía consumida por el equipo (EPT^{CCPC}) y las emisiones de CO_2 a la atmósfera ($X^{\text{emit}}_{\text{CO}_2}$).

➤ Captura de CO_2 oxicomcombustión

El sistema de oxicomcombustión (OXI) para la captura de CO_2 requiere equipamiento especial o unidades de proceso adicionales a los de la planta base de combustión de carbón. Como se ha comentado se basa en una combustión del carbón casi estequiométrica con oxígeno casi puro. Por tanto los principales equipos que habrá que incluir en la planta son una unidad de separación de aire (ASU) criogénica para producir el oxígeno, una unidad de purificación del CO_2 y una recirculación de los gases para controlar la temperatura de la caldera.

Para su modelado seguimos el propuesto por Rubin et al., (2007). En este caso consideramos que la recirculación alcanza el estado estacionario y los principales parámetros del modelo son el caudal de gases que se recicla a la caldera ($V_{\text{fgr}}^{\text{in,OXI}}$), la cantidad de CO_2 en el gas reciclado ($X^{\text{fgr}}_{\text{CO}_2}$), la eficiencia de eliminación de CO_2 ($\eta^{\text{OXI}}_{\text{CO}_2}$), la pureza del oxígeno procedente del ASU (ϕ), la temperatura ambiente (T^{Amb}) y la eficiencia de la caldera con el proceso de oxi-

combustión (η^{caldera}). Con ellos se calculan algunos factores de dimensionado usados en el modelo económico como el flujo CO_2 capturado (M_{CO_2}) y el flujo de oxígeno producido (M_{Ox}) (ver Fig. 1.16).

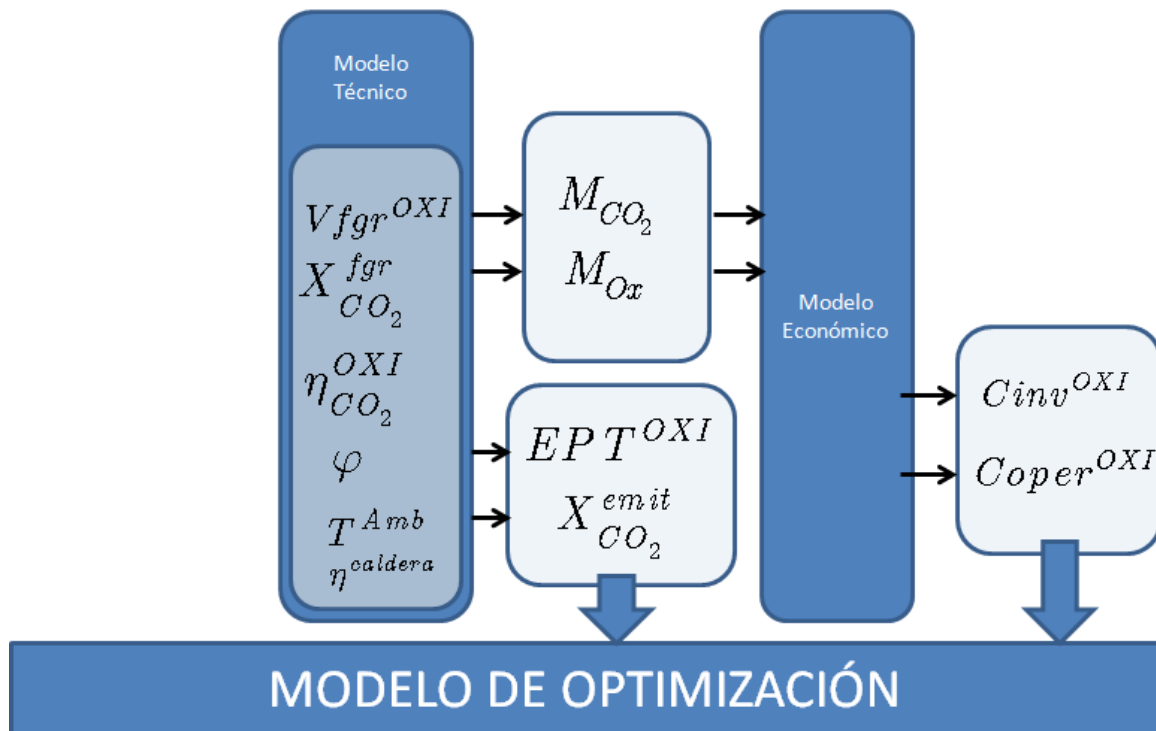


Figura 1.16: Modelo técnico-económico de la captura de CO_2 oxicomcombustión

Las salidas del modelo son los costes de inversión (C_{inv}^{OXI}) que viene calculado a través de sus ocho áreas principales (i.e., ASU, sistema de ventilación del flujo reciclado, sistema de conducción del flujo reciclado, sistema enfriamiento del gas, calentador de oxígeno, sistema de purificación de CO_2 , sistema de compresión y modificaciones en la caldera), los costes operación (C_{oper}^{OXI}), la energía consumida por el equipo (EPT^{OXI}) y las emisiones de CO_2 a la atmósfera ($X_{CO_2}^{emit}$).

Debido a la complejidad en los modelos anteriormente presentados, existe la necesidad de utilizar herramientas informáticas que faciliten la resolución de los problemas de optimización planteados en esta tesis. Existen gran cantidad de herramientas comerciales, como por ejemplo GAMS, LINDO, AIMMS, AMPL, GEMPACK y Microsoft EXCEL. En esta tesis se ha escogido GAMS – General Algebraic Modeling System (Brooke et al., 1998), ya que es la más utilizada para la resolución de este tipo de problemas.

1.4. Objetivos y estructura de la tesis

La presente Tesis se ha desarrollado en el marco de los proyectos CTM2006-00317 “Sostenibilidad de la Producción: Intensificación e integración de procesos en la industria química y transformadora” y ENE2010-14828 “Desarrollo de un proceso de captura y reciclado de CO_2 ”.

El objetivo general es contribuir al desarrollo de una metodología basada en la utilización de técnicas de programación matemática para diseñar procesos de generación de electricidad más

sostenibles teniendo en cuenta criterios múltiples de sostenibilidad, principalmente económicos y ambientales.

En este contexto, el objetivo final de esta Tesis Doctoral es **contribuir a la Ingeniería de Procesos de la obtención de energía eléctrica a partir de la combustión del carbón desarrollando aplicaciones de optimización por ordenador que faciliten la toma de decisiones, en cuanto a priorización y planificación de inversiones en tecnologías limpias, con objetivos económicos y ambientales.**

Este objetivo final puede descomponerse en los siguientes objetivos específicos cuya consecución permitirá alcanzar el objetivo general de la tesis:

- Identificar diferentes funciones objetivo, tanto económicas como ambientales, y estudiar su influencia en la priorización de la inversión en tecnologías limpias incluyendo la captura de carbono utilizando técnicas de optimización multi-objetivo.
- Estudiar la influencia de la tecnología utilizada de captura de CO₂ en el diseño del proceso de combustión limpia del carbón comparando las dos alternativas que contempla el estado del arte utilizando técnicas de optimización multi-objetivo.
- Estudiar la influencia de la introducción del mercado de emisiones y del precio del CO₂ en la elección de diferentes opciones tecnológicas para el proceso de captura de carbono teniendo en cuenta el precio del producto.
- Aplicar herramientas de decisión basadas en optimización estocástica multi-objetivo considerando explícitamente la incertidumbre en el precio de CO₂ en el mercado para evaluar su influencia en la inversión en tecnologías de captura de CO₂.

De acuerdo con estos objetivos específicos, y considerando la normativa de Tesis basada en un compendio de artículos, el trabajo se desarrolla en cuatro capítulos de la siguiente forma: el Capítulo 1 incluye el planteamiento de la Tesis. En el Capítulo 2 se incluye una descripción detallada de los procedimientos y materiales empleados para la realización de la Tesis, así como un resumen global de los resultados y la discusión de los mismos. El Capítulo 3 resume las conclusiones generales obtenidas y el progreso de la investigación. Y finalmente el Capítulo 4 supone el núcleo central de la Tesis, incluyendo copia de los artículos que la sustentan.

1.5. Referencias del Capítulo 1

Adanez J., Abad A., García-Labiano F., Gayan P., de Diego L.F. Progress in Chemical-looping Combustion and reforming technologies. Progress in Energy and Combustion science. **2012**, 38, 215 – 282.

Albo J., Luis P., Irabien A. Absorption of coal combustion flue gases in ionic liquids using different membrane contactors. Desalination and water treatment. **2011**, 27, 54 – 59.

Aldaco R., Margallo M., Irabien A. Environmental sustainability evaluation of foundry sand wastes using life cycle assessment. 3rd International Conference on Engineering for Waste and Biomass Valorisation. May 17 – 19, Beijing, China. **2010**.

Azapagic A., Clift R. The application of life cycle assessment to process optimization. *Computers & Chemical Engineering*. **1999a**, 23, 1509 – 1526.

Azapagic A., Clift R. Life cycle assessment and multiobjective optimisation. *Journal of Cleaner Production*. **1999a**, 7, 135 – 143.

Buhre B.J.P., Elliott L.K., Sheng C.D., Gupta R.P., Wall T.F. Oxy-fuel combustion technology for coal-fired power generation. *Progress in energy and combustion science*. **2005**, 31, 283 – 307.

Burdyny T., Struchtrup H. Hybrid membrane/cryogenic separation of oxygen from air for use in the oxy-fuel process. *Energy*. **2010**, 35, 1884 – 1897.

CE - Comisión Europea. Integrated pollution prevention and control reference document on best available techniques for large combustion plants. **2006**.

Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal burning. *Applied Energy*. **2012a**, 92, 369 – 378.

Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Multi-objective optimization of coal-fired electricity production with CO₂ capture. *Applied Energy*. **2012b**, 98, 266 – 272.

Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. MINLP model for optimizing electricity production from coal-fired power plants considering carbon management. *Energy Policy*. **2012c**, 51, 493 – 501.

Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Kraslawski A., Irabien A. Stochastic MILP model for optimal timing of investments in CO₂ capture technologies under uncertainty in prices. *Energy*. **2013**, 54, 343 – 351.

Damen K., van Troost M., Faaij A., Turkenburg W. A comparison of electricity and hydrogen production systems with CO₂ capture and storage. Part A: Review and selection of promising conversion and capture techniques. *Progress in Energy and Combustion Science*. **2006**, 32, 215-246.

Darde A., Prabhakar R., Tranier J.P., Perrin N. Air separation and the flue gas compression and purification units for oxy-coal combustion systems. *Energy Procedia*. **2009**, 1, 527 – 534.

Delarue, E., Voorspools, K., D'haeseleer W. Fuel switching in the electricity sector under the EU ETS: review and prospective. *Journal of Energy Engineering*. **2008**, 134 (2), 40 – 46.

EPRI – Electrical Power Research Institute. TAG – Technical Assessment Guide, EPRI TR 102276. Palo Alto, CA. **1993**.

EP&EC – European Parliament & European Council. European Directive 2003/87/EC of the European Parliament and of the European Council of 13 October 2003 Establishing a Scheme for

Greenhouse Gas Emission Allowance Trading within the Community and Amending Council Directive 96/61/EC. **2003**.

Eslick J.C., Miller D.C. A multi-objective analysis for the retrofit of a pulverized coal power plant with a CO₂ capture and compression process. *Computers & Chemical Engineering*. **2011**, 35, 1488 – 1500.

EU – European Union. Position of the European Parliament adopted on 17 December 2008 (EP-PE_TC1-COD(2008)0013). **2008**.

Feron P.H.M., Hendriks C.A. CO₂ capture process principles and costs. *Oil & gas science and technology*. **2005**, 60, 451 – 459.

FETC – Federal Energy Technology Center. Electric utility engineer's FGD manual, volume 1: FGD process design. Department of energy, Morgantown, WV. **1996**

Figueroa J.D., Fout T., Plasynski S., McIlvried H., Srivastava R.D. Advances in CO₂ capture technology – The U.S. Department of Energy's Carbon Sequestration Program. *International journal of greenhouse gas control*. **2008**, 2, 9 – 20.

Fisher K.S., Beitler C., Reuter C., Searcy K. Integrating MEA regeneration with CO₂ compression and peaking to reduce CO₂ capture cost. Final report DE-FG02-04ER84111 to U.S. DOE/NETL. Trimeric Corporation, Texas. **2005**.

Franco A., Diaz A.R. The future challenges for "clean coal technologies": joining efficiency increase and pollutant emission control. *Energy*. **2009**, 34, 348 – 354.

Gebreslassie B.H., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Boer D. Design of environmentally conscious absorption cooling systems via multi-objective optimization and life cycle assessment. *Applied Energy*. **2009**, 86, 1712 – 1722.

Gill P.E., Murray W., Saunders M.A., Tornlin J.A., Wright M.H. George B. Dantzig and systems optimization. *Discrete Optimization*. **2008**, 5, 151 – 158.

Guillén-Gosálbez G. A novel MILP-based objective reduction method for multi-objective optimization: application to environmental problems. *Computers & chemical engineering*. **2011**, 35, 1469 – 1477.

Guillén-Gosálbez G., Caballero J.A., Jiménez L. Application of life cycle assessment to the structural optimization of process flowsheets. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **2008**, 47, 777 – 789.

Grossmann I.E., Westerberg A.W. Research challenges in process systems engineering. *AICHE Journal*. **2000**, 46 (9), 1700-1703.

Hashim H., Douglas P., Elkamel A., Croiset E. Optimization model for energy planning with CO₂ emission considerations. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **2005**, 44, 879 – 890.

- IChemE – Institution of Chemical Engineers. The sustainability metrics: IChemE Sustainable development progress metrics recommended for use in the Process Industries. **2002**.
- IEA - International Energy Agency. Reviewing existing and proposed emissions trading systems, **2010**.
- IEA– International Energy Agency. Power generation from coal: ongoing development and outlook. **2011**.
- IEA– International Energy Agency. Key World Energy Statistics. **2012a**.
- IEA– International Energy Agency. CCS RETROFIT: Analysis of the globally installed coal-fired power plant fleet. **2012b**.
- IECM – Integrated Environmental Control Model. User documentation. Center for Energy and Environmental Studies, Carnegie Mellon University: Pittsburgh, PA. **2001**.
- Irabien A., Aldaco R., Dominguez-Ramos A. Environmental sustainability normalization of industrial processes. *Computer Aided Chemical Engineering*. **2009**, 26, 1105 – 1109.
- Iribarren D., Petrakopoulou F., Dufour J. Environmental and thermodynamic evaluation of CO₂ capture, transport and storage with and without enhanced resource recovery. *Energy*. **2013**, 50, 477 – 485.
- Kanniche M., Gros-Bonnivard R., Jaud P., Valle-Marcos J., Amann J.M., Bouallou C. Pre-combustion, post-combustion and oxy-combustion in thermal power plant for CO₂ capture. *Applied Thermal Engineering*. **2010**, 30, 53 – 62.
- Keeth R.J., Baker D.L., Tracy P.E., Ogden G.E., Ireland P.A. Economic evaluation of flue gas desulfurization systems. No. GS-7193, Research project 1601-6. EPRI. Palo Alto, CA. **1991**.
- Martinez P., Eliceche A.M. Bi-objective minimization of environmental impact and cost in utility plants. *Computers & Chemical Engineering*. **2011**, 35, 1478 – 1487.
- MIT – Massachusetts Institute of Technology. The future of coal: options for a carbon-constrained world. **2007**.
- Nishida N., Stephanopoulos G., Westerberg A.W. A review of process synthesis. *AIChE Journal*. **1981**, 27 (3), 321-351.
- Olajire A.A. CO₂ capture and separation technologies for end-of-pipe applications – A review. *Energy*. **2010**, 35, 2610 – 2628.
- Page S.C., Williamson A.G., Mason I.G. Carbon capture and storage: fundamental thermodynamics and current technology. *Energy Policy*. **2009**, 37, 3314-3324.
- Peavy H.S., Rowe D.R., Tchobanoglous G. *Environmental engineering*. Singapore: McGraw-Hill. **1985**.
- Perry R.H. *Perry's chemical engineering handbook*. 7th edition. New York: McGraw-Hill. **1997**.

Rao S.S. Engineering optimization: theory and practice. 4th edition. New Jersey: John Wiley & Sons. **2009**.

Rao A.B., Rubin E.S. A technical, economic, and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plant greenhouse gas control. Environmental Science & Technology. **2002**, 36, 4467 - 4475.

Rao A.B., Rubin E.S. Identifying cost-effective CO₂ control levels for amine-based CO₂ capture systems. Industrial & Engineering Chemistry Research. **2006**, 45, 2421 - 2429.

Rubin E.S., Rao A.B. A technical, economic and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plant greenhouse gas control. Report to DOE/NETL from Center for Energy and Environmental studies Carnegie Mellon University, DOE/DE-FC26-00NT40935. **2002**.

Rubin E.S., Rao A.B., Berkenpas M.B. Technical documentation: oxygen-based combustion systems (oxyfuels) with carbon capture and storage (CCS). Department of Engineering and Public Policy. Paper 75. **2007**. On line: <http://repository.cmu.edu/epp/75>

Scholes C.A., Smith K.H., Kentish S.E., Stevens G.W. CO₂ capture from pre-combustion processes – Strategies for membrane gas separation. International journal of greenhouse gas control. **2010**, 4, 739 – 755.

Srivastava R.K. Controlling SO₂ emissions: a review of technologies. EPA/600/R-00/093. **2000**.

Srivastava R.K., Jozewicz W., Singer C. SO₂ scrubbing technologies: a review. Environmental Progress. **2001**, 20 (4), 219 – 228.

Srivastava R.K., Hall R.E., Khan S., Culligan K., Lani B.W. Nitrogen oxides emission control options for coal-fired electric utility boilers. Journal of the air & waste management association. **2005**, 55, 1367 – 1388.

Steenefeldt R., Berger B., Torp T.A. CO₂ capture and storage: closing the knowing –doing gap. Chemical Engineering Research and design. **2006**, 84 (A9), 739 – 763.

UN – United Nations. Kyoto Protocol to the United Nations framework convention on climate change. **1998**. On line - <http://unfccc.int/resource/docs/convkp/kpeng.pdf>

USEPA – U.S. Environmental Protection Agency. External combustion sources. AP42, 5th ed., vol I, Chapter 1. **2001**. On line: <http://www.epa.gov/ttn/chief/ap42/ch01/index.html>

USEPA – U.S. Environmental Protection Agency. EPA air pollution control cost manual, 6th ed., EPA/452/B-02-001. **2002**. On line: http://www.epa.gov/ttn/catc1/dir1/c_allchs.pdf

Viswanathan R., Henry J.F., Tanzosh J., Stanko G., Shingledecker J., Vitalis B., Purget R. US program on materials technology for ultra-supercritical coal power plants. Journal of materials engineering and performance. **2005**, 14 (3), 281 – 292.

Wall T., Liu Y., Spero C., Elliott L., Khare S., Rathnam R., Zeenathal F., Moghtaderi B., Buhre B., Sheng C., Gupta R., Yamada T., Makino K., Yu J. An overview on oxyfuel coal combustion – State

of the art research and technology development. *Chemical Engineering Research and Design*. **2009**, 87, 1003 – 1016.

Wappel D., Gronald G., Kalb R., Draxler J. Ionic liquids for post-combustion CO₂ absorption. *International journal of greenhouse gas control*. **2010**, 4 (3), 486 – 494.

Yelverton W.H. CUECost workbook development documentation, V5.0. EPA/600/R-09/131. **2009**.

Yeomans H., Grossmann I.E. A systematic modeling framework of superstructure optimization in process synthesis. *Computers & Chemical Engineering*. **1999**, 23, 709 – 731.

Zhao L., Riensche E., Menzer R., Blum L., Stolten D. A parametric study of CO₂/N₂ gas separation membrane processes for post-combustion capture. *Journal of Membrane Science*, **2008**, 325, 284 – 194.

DESARROLLO



2

2.1. Técnicas y métodos: fundamentos matemáticos y de computación

En este apartado se explican las diferentes técnicas y métodos utilizados en el desarrollo e implementación de los diferentes modelos presentados a lo largo de este documento de tesis. Además se discuten algunos principios generales de programación matemática por ser la técnica de optimización utilizada.

2.1.1. Fundamentos matemáticos

A continuación se muestra la representación algebraica de un problema general de programación matemática:

$$\left. \begin{array}{l}
 \min_x \quad f(x) \\
 \text{sujeto a} \quad h(x) = 0 \\
 \quad \quad \quad g(x) \leq 0 \\
 \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \\
 \quad \quad \quad h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m
 \end{array} \right\} \quad (2.1)$$

Dependiendo de las propiedades de las funciones f , h , g y del set X , el problema (Eq. 2.1) puede ser:

- Lineal (PL) – si el set X es continuo y las funciones f , h y g son lineales. La aparición de una función no lineal, tanto en el objetivo como en las restricciones, es suficiente para descartar el problema como lineal.
- No lineal (PNL) – si el set X es continuo y al menos una de las funciones f , h y g es no lineal.
- Lineal entera-mixta (PLEM) – si el set X requiere que al menos una de las variables x tome valores solamente enteros; y las funciones f , h y g son lineales.
- No lineal entera-mixta (PNLEM) – si el set X requiere que al menos una de las variables x tome valores solamente enteros; y por lo menos una de las funciones f , h y g es no lineal.

El estudio de la convexidad tiene especial relevancia a la hora de buscar los óptimos de las funciones, así como en el desarrollo de los algoritmos de resolución de problemas de optimización, ya que una vez verificada la convexidad del conjunto de oportunidades se pueden desarrollar métodos de resolución eficientes para los problemas de optimización.

Un set X es convexo si para todo par de puntos (x_i, x_j) en el set, todo punto perteneciente a la línea recta que los conecta está dentro del set X como se muestra en la Fig. 2.1. Esta definición se expresa matemáticamente de la siguiente forma:

X es convexo $\Leftrightarrow \forall (x_i, x_j) \in X \wedge \theta \in [1, 0] : ((1 - \theta)x_i + \theta x_j) \in X$

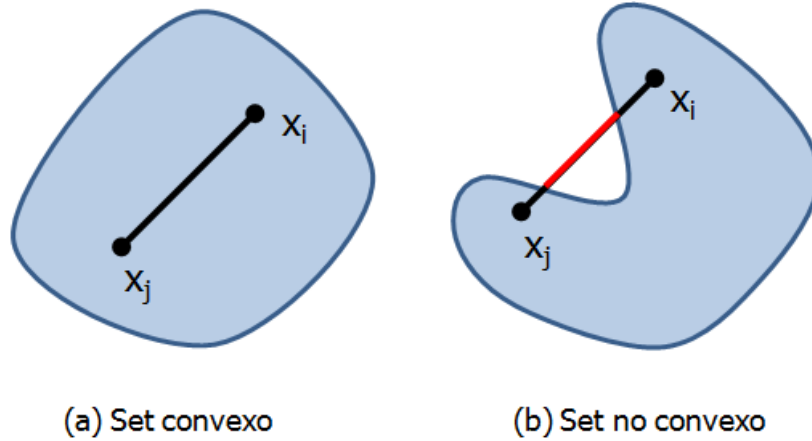


Figura 2.1: Representación gráfica de la convexidad

La convexidad juega un papel importante en la programación matemática ya que “si un problema de programación matemática es convexo, entonces cualquier mínimo local (i.e., relativo) es un mínimo global”. Cuando un problema es no convexo, muchos de los métodos utilizados para su resolución no garantizan encontrar el óptimo global. La optimización global se centra en encontrar la mejor solución global de los modelos en presencia múltiples óptimos locales (Grossmann y Biegler, 2004).

➤ *Programación lineal*

La principal característica de un problema de PL es que todas las funciones, tanto la función objetivo como las que expresan las restricciones, deben ser lineales. La región factible está definida por la intersección de los hiperplanos que representan cada una de las restricciones. El método estándar para resolver PL es el método simplex, aunque los métodos de punto interior son bastante competitivos para problemas con muchas restricciones. El estado del arte en cuanto a algoritmos de PL puede manejar millones de variables y restricciones, que sumado a la aplicación de métodos de descomposición, pueden solucionar problemas de dos o tres órdenes de magnitud mayores (Biegler y Grossmann, 2004). Para mayor detalle sobre algoritmos de PL referimos al lector a Dantzig y Tarpa (1997a,b).

➤ *Programación no lineal*

Como se ha mencionado anteriormente, si todas las variables x son continuas y la función objetivo f o cualquiera de las restricciones h, g son no lineales, entonces el problema de la Eq. 2.1 es PNL. Los algoritmos para resolver este tipo de problemas se suelen clasificar en métodos de optimización con restricciones o sin restricciones en función de la presencia o no de restricciones (i.e., h y g), respectivamente.

En la optimización sin restricciones todos los algoritmos utilizados requieren que el usuario aporte un punto de inicio o solución inicial viable (x_0) y a partir de ahí generan una secuencia de iteraciones $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ tratando de buscar una iteración x_{k+1} con un valor de la función f

menor que x_k . Termina cuando un mayor progreso no es posible o cuando se ha encontrado una solución aproximada con suficiente precisión. Existen dos estrategias fundamentales para decidir como moverse de una iteración x_k a la siguiente x_{k+1} que difieren en el orden en el que se elige la dirección (p_k) y la distancia de avance (α_k) en la que se mueven para hallar la siguiente iteración:

- Búsqueda lineal – el algoritmo fija una dirección e identifica una distancia de avance apropiada para buscar una mejor solución. Entre ellos destacan los métodos de máxima pendiente (steepest descent) y los métodos de tipo Newton y Quasi-Newton.
- Región de confianza – el algoritmo construye un modelo (m_k) cuyo comportamiento cerca del punto x_k es similar al de la función objetivo f . Luego elige una distancia máxima (el radio de la región de confianza Δ_k) y busca la dirección y la distancia de avance que supone la mejor solución posible en esa distancia máxima.

En cuanto a la optimización con restricciones, los métodos que se proponen buscan una solución aproximada reemplazando el problema original con restricciones por una secuencia de subproblemas sin restricciones y aplicarles los algoritmos explicados para la optimización sin restricciones. Estos métodos se dividen en dos: (i) los que no cumplen el teorema de los multiplicadores de Lagrange, y (ii) los que están basados en las condiciones Karush-Kuhn-Tucker (KKT).

Para mayor detalle sobre conceptos y algoritmos de PNL referimos al lector a Biegler (2010) y Nocedal y Wright (2006).

➤ *Programación entera-mixta (PEM)*

Muchos problemas de decisión involucran no sólo variables que pueden representarse por valores reales, sino decisiones de tipo discreto que están representadas de forma natural por variables enteras o binarias. Los problemas de programación que presentan alguna variable entera se denominan PEM. Estos pueden ser PNLEM o PLEM en función de si presentan o no alguna función no lineal, respectivamente.

Existen diferentes métodos para su solución. Uno de ellos es la enumeración exhaustiva, que enumera todas las combinaciones de variables enteras posibles y resuelve para cada una de ellas el problema de variables reales asociado. A posteriori se elige el de mejor solución ya que son un número finito. El inconveniente de este método es que el número de combinaciones crece exponencialmente con el número de variables enteras.

Los algoritmos más usados son los de ramificación y acotación (branch and bound) y el de planos de corte (cutting planes). El primero consiste en generar una secuencia continua de subproblemas, resolverlos y analizar y comparar las diferentes soluciones hasta alcanzar la solución óptima del problema original. El uso de cotas en la función a ser optimizada combinado con el valor de la mejor solución en ese momento permite al algoritmo buscar en el espacio de las soluciones posibles eliminando las que no pueden conducir al óptimo. Está

basado en tres ideas principales: (i) relajación, que proporciona las cotas del problema, (ii) ramificación, que examina las distintas alternativas de variables enteras en un punto dado del árbol de decisión, y (iii) poda, que permite eliminar determinados grupos de combinaciones de variables enteras simplificando la búsqueda. En cuanto al algoritmo de planos de corte, se basa en la idea de añadir restricciones, denominadas "cortes", al problema reduciendo el set factible de soluciones hasta dar con la solución óptima que tenga valores enteros para todas las variables. Por supuesto, cada "corte" que se añade a la solución fraccionaria debe asegurar que (i) toda solución entera factible del problema es factible para el corte y (ii) la vigente solución fraccionaria no es factible para el corte.

Para más detalles sobre PEM referimos al lector a Nemhauser y Wolsey (1999).

2.1.2. Optimización multi-objetivo

La optimización multi-objetivo (OMO), también conocida como optimización multi-criterio, tiene un papel importante en el campo del diseño en ingeniería, gestión y toma de decisiones. Prácticamente en cualquier área y en gran variedad de contextos existen problemas con diversos objetivos que deben ser considerados simultáneamente y que se contraponen entre sí. Esto significa que existe un compromiso (trade-off) entre ellos y alcanzar el óptimo para un objetivo requiere comprometer el valor de uno o más del resto de objetivos. A continuación se muestra la representación matemática de un problema OMO:

$$\left. \begin{array}{l}
 \min_x \quad \{ f_1(x), f_2(x), \dots, f_P(x) \} \quad (P \geq 2) \\
 \text{sujeto a} \quad h(x) = 0 \\
 \quad \quad \quad g(x) \leq 0 \\
 \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \\
 \quad \quad \quad h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m
 \end{array} \right\} \quad (2.2)$$

Cuando $P=2$, se conoce como optimización bi-objetivo. Si los dos objetivos, $f_1(x)$ y $f_2(x)$ son conflictivos entre sí, existirán varias soluciones óptimas para el problema de OMO de la Eq. 2.2. Todas esas soluciones son igualmente buenas en el sentido que cada una de ellas es mejor que el resto en al menos un objetivo. Esto implica que la mejora en un objetivo solo puede tener lugar a costa de un empeoramiento del otro objetivo. (Messac et al., 2003). Las soluciones de un problema OMO se denominan soluciones óptimas de Pareto (también conocidas como no-dominadas, no-inferiores, Pareto-eficientes) y pueden representarse en un frente de Pareto (representación espacial de $f_1(x)$ contra $f_2(x)$) como se puede ver en la Fig. 2.2. En esta también observamos los puntos Ideal (z^I) y Nadir (z^N), utilizados en la OMO y que a continuación explicamos brevemente. El punto Ideal $z^I=(z_1^I, z_2^I)$ se define con los valores óptimos de ambos objetivos hallados al optimizar individualmente cada uno de ellos sin tener en cuenta el otro. Obviamente es una solución imaginaria para dos objetivos en conflicto ya que

no se corresponde con ninguna solución factible, pero es la única solución para un problema OMO en el que los objetivos no estén en conflicto. El punto Nadir $z^N=(z_1^N, z_2^N)$ es la solución menos deseable. Se construye con los límites superiores (valores más pesimistas) de los objetivos en todas las soluciones del frente de Pareto y puede ser alcanzable o inalcanzable dependiendo de las restricciones. Así, z_1^N es el valor de $f_1(x)$ cuando se optimiza $f_2(x)$ individualmente y z_2^N es el valor de $f_2(x)$ cuando se optimiza $f_1(x)$ individualmente. Tanto el punto Ideal como Nadir son útiles para normalizar los objetivos en algunos métodos de OMO.

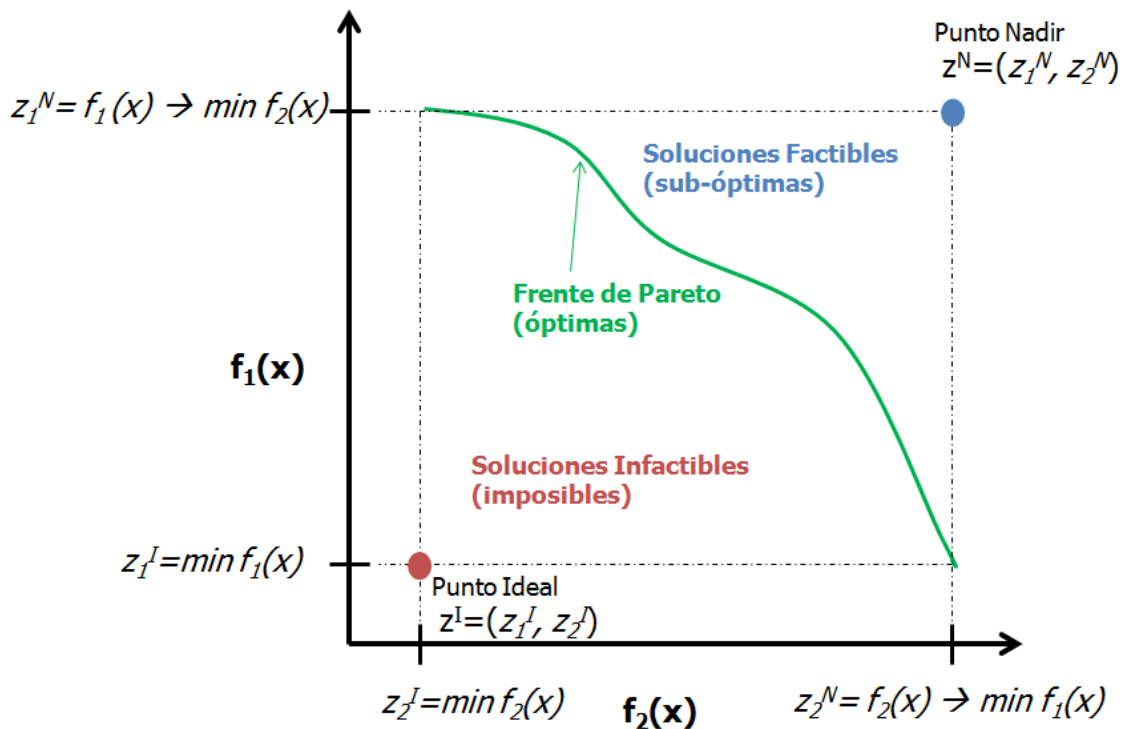


Figura 2.2: Representación del frente de Pareto

Existen varios métodos para resolver problemas de OMO, y la mayoría implican convertir dicho problema en uno o varios problemas de optimización con un solo objetivo (Grossmann y Guillén-Gosálbez, 2010). Se suelen dividir en métodos generadores y métodos basados en preferencias. Los primeros generan una o varias soluciones de Pareto sin influencia de la persona que decide y luego se le dan a esa persona para que elija (e.g., método de los coeficientes de peso y el método de restricción ϵ). En los segundos, como su nombre indica, las soluciones se obtienen utilizando las preferencias de la persona que decide en alguna etapa de la resolución del problema de OMO (e.g., método NIMBUS y método de optimización mediante metas (goal programming)).

Muchos de estos métodos se basan en escalarizar la función objetivo, que aunque es un concepto sencillo no significa que la resolución del problema de optimización con un solo objetivo sea fácil de resolver. Un ejemplo es el método de restricción ϵ , en el que se centra la siguiente sección ya que es el utilizado en esta tesis.

➤ *Método de restricción ε*

Este método fue propuesto por Haimes et al. (1971). Se basa en calcular la solución de una serie de problemas auxiliares con un solo objetivo, de tal forma que mientras uno de los objetivos se mantiene como función objetivo, el resto se transforman en restricciones a las cuales se les va imponiendo límites (i.e., ε), que van variando dentro de unos niveles permitidos (i.e., $[\underline{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}]$), para así ir obteniendo las soluciones y aproximar el frente de Pareto. El problema de optimización bi-objetivo puede ser representado de la siguiente forma (Eq. 2.3):

$$\left. \begin{array}{l} \min_x \quad \{ f_1(x) \} \\ \text{sujeto a} \quad f_2(x) \leq \varepsilon \\ \quad \quad \quad h(x) = 0 \\ \quad \quad \quad g(x) \leq 0 \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \\ \quad \quad \quad h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \end{array} \right\} \quad (2.3)$$

El procedimiento para aplicar este método se puede encontrar en Guillén-Gosálbez et al., (2008) y a continuación se resume brevemente. Primeramente se deben hallar los puntos extremos del intervalo al cual pertenece ε (i.e., $\varepsilon \in [\underline{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}]$), resolviendo las Eq. 2.4 y 2.5.

$$\left. \begin{array}{l} \underline{\varepsilon} = f_2(\bar{x}^*) \\ \bar{x}^* = \arg \min_x \{ f_2(x) \} \\ \text{sujeto a} \quad h(x) = 0 \\ \quad \quad \quad g(x) \leq 0 \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \\ \quad \quad \quad h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \end{array} \right\} \quad (2.4)$$

$$\left. \begin{array}{l} \bar{\varepsilon} = f_2(\bar{x}^*) \\ \bar{x}^* = \arg \min_x \{ f_1(x) \} \\ \text{sujeto a} \quad h(x) = 0 \\ \quad \quad \quad g(x) \leq 0 \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \\ \quad \quad \quad h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \end{array} \right\} \quad (2.5)$$

A continuación se hallan las soluciones de Pareto que no son extremos (Fig. 2.3), para lo cual se define el número N de soluciones de Pareto que se van a generar para aproximar el frente

de Pareto. El espacio consecutivo entre soluciones de Pareto ($\Delta\varepsilon$) a lo largo del eje se determina usando la Eq. 2.6.

$$\Delta\varepsilon = \frac{\bar{\varepsilon} - \varepsilon}{N + 1} \tag{2.6}$$

Así, cada solución de Pareto que no es extremo se obtiene resolviendo el problema de la Eq. 2.7.

$$\left. \begin{array}{l} \min_x \quad \{f_1(x)\} \\ \text{suje}to \ a \quad \begin{array}{l} f_2(x) \leq \bar{\varepsilon} - n\Delta\varepsilon \\ h(x) = 0 \\ g(x) \leq 0 \end{array} \end{array} \right\} \forall n \in \{1, 2, \dots, N\} \tag{2.7}$$

donde $x \in X \subset \mathbb{R}^n, f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R},$
 $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$

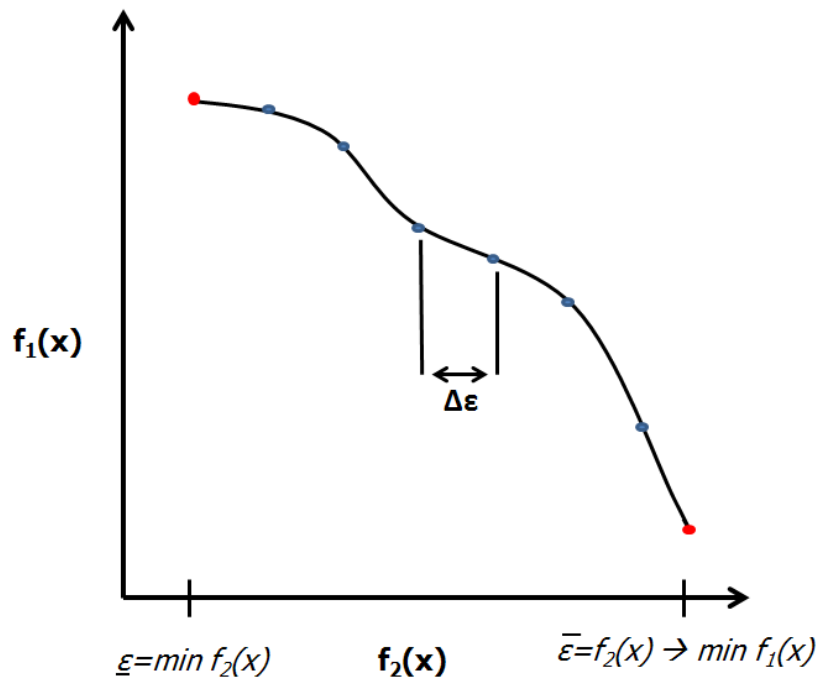


Figura 2.3: Método de restricción ε para un problema de optimización bi-objetivo

Para más detalles sobre técnicas y aplicaciones de OMO referimos al lector a Miettinen (1999) y Rangaiah (2009).

2.1.3. Programación estocástica

Hasta ahora, todas las secciones anteriormente tratadas han abordado problemas de optimización determinista, es decir, problemas en los que se supone que los parámetros son conocidos con certeza. Pero en los casos reales, los problemas presentan parámetros desconocidos o sus valores están dentro de unos rangos probables. En este apartado

trataremos la programación estocástica que permite la introducción de datos con incertidumbre. Los dos enfoques más usados en Ingeniería de Procesos para la representación formal de la incertidumbre asociada a parámetros y restricciones del modelo son los métodos probabilísticos y los números difusos.

Nos centraremos en los métodos probabilísticos basados en escenarios por ser los usados en esta tesis. Éstos incorporan la incertidumbre en el modelo usando un número finito de casos que plasman cuál es la evolución de la incertidumbre en el futuro; un escenario se define como una realización particular de todos los parámetros inciertos y tiene asociada un nivel de probabilidad que representa la expectación de su ocurrencia, aproximando así la función continua de probabilidad a una función discreta. Generalmente la resolución de estos modelos implica un proceso iterativo que consta de un loop de optimización que controla la búsqueda de las decisiones que mejoran el criterio probabilístico deseado y un loop interno que controla las características estocásticas del problema. Dentro del loop interno suelen estar incluidas las técnicas de muestreo para generar escenarios. Entre las técnicas de muestreo, la más utilizada es la técnica de Monte Carlo, que esta basada en un generador pseudo-aleatorio usado para aproximar a una distribución uniforme (i.e., que tiene igual probabilidad en el rango de 0 a 1) y los valores específicos para cada variable incierta se seleccionan por la transformación inversa de la distribución de probabilidad acumulativa (Diwekar, 2002). Finalmente se requieren de técnicas estadísticas para analizar los resultados.

En problemas de toma de decisión, podemos diferenciar dos tipos de decisiones (i.e., variables):

- Decisiones de primera etapa – también conocidas como “aquí y ahora” (i.e., here and now), que son tomadas previamente a la realización del proceso estocástico antes de que se desvele la incertidumbre.
- Decisiones de segunda etapa – también conocidas como “esperar y ver” (i.e., wait and see), son las decisiones que se toman una vez resuelta la aleatoriedad.

Normalmente los problemas de programación estocástica son bietapa, con la presencia de los dos tipos de decisiones anteriormente mencionados. Las decisiones relevantes en optimización estocástica son exclusivamente las de la primera etapa, representadas en las Eq. 2.8 – 2.10 por el vector x , puesto que son éstas las que hay que tomar de manera inmediata y no dependen del escenario que ocurra realmente en el futuro (propiedad de implantabilidad o no anticipatividad de las decisiones). Las decisiones de segunda etapa, representadas por el vector y , se denominan *recursos*, y son tomadas como acciones correctoras después de que haya sucedido el suceso aleatorio, mitigando los efectos de los mismos. El parámetro incierto está representado por ξ .

La función recurso Q (Eq. 2.8) contiene todas las ecuaciones con decisiones de segunda etapa y que son función de las decisiones de primera etapa x y del evento incierto ξ y minimiza el "coste" de la segunda etapa para un valor del parámetro incierto ξ

$$Q(x, \xi) = \left[\begin{array}{l} \min_y \quad f_2(y, \xi) \\ \text{sujeto a} \quad h_2(x, y, \xi) = 0 \\ \quad \quad \quad g_2(x, y, \xi) \leq 0 \\ \text{donde} \quad y \in Y \subset \mathbb{R}^{n_2}, f_2 : \mathbb{R}^{n_2} \rightarrow \mathbb{R}, \\ \quad \quad \quad h_2 : \mathbb{R}^{n_2} \rightarrow \mathbb{R}^{l_2}, g_2 : \mathbb{R}^{n_2} \rightarrow \mathbb{R}^{m_2} \end{array} \right] \quad (2.8)$$

En la Eq. 2.9 se calcula Q' , que es la esperanza de la función recurso Q (i.e., la representación matemática del valor esperado de Q):

$$Q'(x) = E[Q(x, \xi)] \quad (2.9)$$

El problema estocástico bietapa puede ser representado matemáticamente como se muestra en la Eq. 2.10, donde la función objetivo es de alguna manera incierta en la primera etapa, y generalmente se define como la suma del desempeño de la primera etapa y el valor esperado del desempeño de la segunda etapa.

$$\left. \begin{array}{l} \min_x \quad f_1(x) + Q'(x) \\ \text{sujeto a} \quad h_1(x) = 0 \\ \quad \quad \quad g_1(x) \leq 0 \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^{n_1}, f_1 : \mathbb{R}^{n_1} \rightarrow \mathbb{R}, \\ \quad \quad \quad h_1 : \mathbb{R}^{n_1} \rightarrow \mathbb{R}^{l_1}, g_1 : \mathbb{R}^{n_1} \rightarrow \mathbb{R}^{m_1} \end{array} \right\} \quad (2.10)$$

Para mayor información sobre programación estocástica, referimos al lector a Birge y Louveaux (1997).

2.1.4. Ingeniería asistida por ordenador (CAPE)

En el campo de la Ingeniería de Procesos se hace necesario el uso de potentes herramientas informáticas que ayudan a la simulación y optimización, y en definitiva a la resolución, de problemas reales que en el pasado era imposible resolver por su complejidad. Esta disciplina se conoce como ingeniería asistida por ordenador o CAPE (Computer Aided Process Engineering) (Braunschweig y Gani, 2002).

La herramienta más común para la resolución de este tipo de problemas es GAMS, que es un lenguaje de programación que permite desarrollar y trabajar con modelos complicados, cuyas principales características se comentan a continuación:

- Existe una independencia entre la formulación del modelo y los datos. GAMS permite formular el modelo sin hacer referencia directa a datos específicos de tal forma que el modelo puede ser utilizado con diferentes grupos de datos.
- El código es muy similar a su escritura con símbolos matemáticos, facilitando su comprensión y reduciendo el riesgo de errores.
- La tarea de modelado es independiente del proceso de resolución. Por tanto tras la formulación del modelo, se pueden probar diferentes algoritmos para resolverlo sin tener que cambiar nada.
- Puede usarse en combinación con otros programas informáticos para introducir datos, reportar o representar resultados como por ejemplo MATLAB, Microsoft Excel o GNUPlot.

Además, tiene acceso a un extenso número de algoritmos de solución y al estado del arte de los mismos. Cada uno de ellos suele estar desarrollado para resolver un tipo de problema de programación (i.e., PL, PNL, PLEM, PNLEM). Los utilizados en esta tesis son:

- CONOPT/CONOPT3: desarrollado por Drud (1992), este código se utiliza para resolver problemas PNL. Utiliza una estrategia de optimización con restricciones (nested and bound constrained approach), descomponiendo el problema en diferentes subproblemas (nested subproblems) que son resueltos con métodos de tipo Newton.
- CPLEX 12.2: diseñado inicialmente por Robert E. Bixby y actualmente comercializado por IBM, es utilizado para resolver problemas de PL y PEM, de gran dimensión y difíciles, rápidamente y con la mínima intervención del usuario (IBM, 2009). Utiliza variantes del método simplex o métodos de punto interior para PL. En cuanto a PEM requiere mayor computación matemática y utiliza ramificación y acotación para resolver una serie de subproblemas de PL.

2.2. Identificación e influencia de la función objetivo en la Ingeniería de Procesos de la combustión más limpia del carbón: objetivos económico y ambiental

En el contexto de la existencia a nivel mundial de gran cantidad de plantas de producción de electricidad a partir de carbón que no presentan equipos de control ambiental de desulfuración, desnitrificación y por supuesto de captura de CO₂ (MIT, 2009), se presenta un caso de estudio en el que se busca estudiar la influencia de la función objetivo en el diseño óptimo de la combustión más limpia del carbón y en la priorización de inversiones en tecnologías limpias.

El problema se plantea de la siguiente forma: dados un conjunto de contaminantes J presentes en la corriente de gases de combustión (i.e., NO_x, PM, SO₂ y CO₂), y un conjunto I de tecnologías que eliminan selectivamente cada uno de esos contaminantes (i.e., SCR, ESP, FGD, CCPC), el objetivo es determinar la configuración óptima (equipos y tamaños) que minimiza

simultáneamente el coste total de inversión junto con el impacto ambiental causado por las emisiones, medido a través de una función objetivo ambiental.

Para ello se desarrolla una superestructura que consta de cuatro equipos de control de contaminantes como se muestra en la Figura 2.4. En todos ellos se considera la opción de introducir un bypass que divide la corriente de gases en dos sub-corrientes, de las cuales sólo una de ellas pasará por el equipo, dando flexibilidad en el diseño, ya que los costes de inversión y la cantidad de contaminante emitido depende de la cantidad de gases que pasa por el equipo.

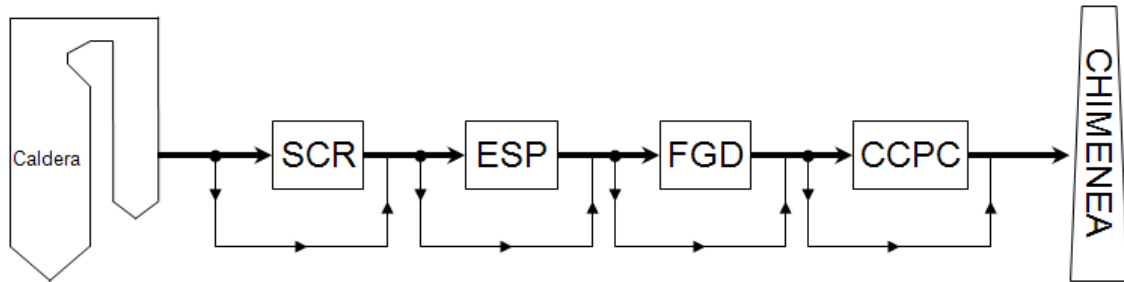


Figura 2.4: Superestructura con cuatro equipos de control de contaminantes y sus correspondientes bypasses.

2.2.1. Modelo matemático

A partir de la superestructura derivamos un modelo de programación matemática que se detalla a continuación, donde podemos distinguir tres conjuntos de ecuaciones:

➤ Balance de masas

El balance de masas para cada contaminante j debe cumplirse en todos los equipos de control de contaminantes i , así como en el sistema completo. Las ecuaciones para el balance de masas puede expresarse de la siguiente manera (Eq. 2.11-2.15):

$$X_{i,j}^{in} = X^{tot} Bypass_i \quad \forall i, j \quad (2.11)$$

$$X_{i,j}^{free} = X^{tot} - X_{i,j}^{in} \quad \forall i, j \quad (2.12)$$

$$X_{i,j}^{out} = X_{i,j}^{in} (1 - (\eta_j^i / 100)) \quad \forall i, j \quad (2.13)$$

$$X_{i,j}^{emit} = X_{i,j}^{out} + X_{i,j}^{free} \quad \forall i, j \quad (2.14)$$

$$Vfg_{i,j}^{in} = Vfg^{tot} Bypass_i \quad \forall i, j \quad (2.15)$$

➤ Restricciones

La principal restricción es el cumplimiento de la legislación vigente sobre limitación de emisiones a la atmósfera procedentes de grandes instalaciones de combustión (EP&EC, 2001). En la Unión Europea los valores límite de emisión para los distintos contaminantes j vienen expresados como concentraciones a la salida de la chimenea y los valores se muestran en la Tabla 2.1.

Tabla 2.1. Valores límite de emisión del contaminante j

Contaminante j	VLE_j (mg/Nm ³)
PM	50
SO ₂	400
NO _x	1200

El cumplimiento con la legislación es impuesto en el modelo a través de la ecuación 2.16:

$$\frac{X_{i,j}^{emit}}{Vfg^{emit}} \leq VLE_j \quad \forall i, j \quad (2.16)$$

➤ Funciones objetivo: económica y ambiental

La función objetivo económica es el coste total de inversión de la planta ($Cinv$), medido en \$, que se calcula como la suma de los costes de inversión de las diferentes unidades instaladas (Eq. 2.17).

$$Cinv = \sum_i TCI_{i,b} \frac{CEPCI_a}{CEPCI_b} \quad (2.17)$$

El coste de inversión de cada equipo (TCI) es determinado a partir de los costes totales directos (TDC_i), que consideran los costes de compra de los equipos (PEC_i) y los costes directos (DC_i) (Eq. 2.18), así como los costes indirectos (IC) (Eq. 2.19).

$$TDC_i = PEC_i + DC_i \quad \forall i \quad (2.18)$$

$$TCI_i = TDC_i + IC_i \quad \forall i \quad (2.19)$$

Para mayor detalle sobre los costes directos e indirectos referimos al lector a Cristóbal et al., (2012a). Los valores de TDC y/o PEC de las diferentes tecnologías se obtienen de los modelos descritos anteriormente (sección 1.2.) que presentan ecuaciones altamente no lineales. En general, como se puede ver en la Eq. 2.20, dependen de la cantidad de contaminante que entra en el equipo, la eficiencia del mismo en su eliminación, el caudal de gases a tratar y el bypass que se aplica, además de otros factores dependiendo de la tecnología como se puede ver en la sección 1.2.

$$TDC_i \text{ ó } PEC_i = f(X_i^{in}, \eta_i^j, Vfg^{in,i}, Bypass_i) \quad \forall i \quad (2.20)$$

Así, los costes directos suelen obtenerse como una factorización del PEC (Eq. 2.21) e incluyen principalmente la instalación y el acondicionamiento del equipo y edificios. En el caso de los

costes indirectos, que tienen en cuenta costes de ingeniería, construcción, contingencias entre otros, se calculan generalmente como un porcentaje de los TDC (Eq. 2.22).

$$DC_i = \alpha_i PEC_i \quad \forall i \quad (2.21)$$

$$IC_i = \beta_i TDC_i \quad \forall i \quad (2.22)$$

donde α y β son parámetros utilizados para determinar los costes directos e indirectos, respectivamente, cuyos valores se muestran en la Tabla 2.2.

Tabla 2.2. Composición de los parámetros de costes directos e indirectos

	SCR	ESP	FGD	CCPC
Costes directos (α_i)	- ^a	0.85	- ^a	1.04
Costes indirectos (β_i)	0.35	0.54 ^b	0.38	0.56

a. Los costes directos se integran en el cálculo del TDC en el caso de las unidades de SCR y FGD.

b. Este valor se factoriza a partir del PEC (eq. 2.21). Para el resto de tecnologías, los costes indirectos se factorizan a partir del TDC como se muestra en la eq. 2.22.

En cuanto a la función objetivo ambiental, consideramos dos indicadores diferentes, uno global y otro local. El impacto ambiental global (EIG) incluye tres categorías de impacto l : acidificación atmosférica, calentamiento global y agotamiento del ozono, que son consideradas globales debido a que el efecto potencial en el medio ambiente es independiente de donde o cuando se produzca la emisión. Para su cálculo, como se muestra en la Eq. 2.23, la cantidad de contaminante j emitido es multiplicado por un factor de potencia que expresa la emisión en base a una sustancia de referencia y para su normalización se usan los umbrales propuestos en el Anexo II del E-PRTR para esas sustancias de referencia (CE, 2006):

$$EIG = \sum_j \sum_l \frac{X_{i,j}^{emit} PF_{j,l} FT}{\theta_l^{REF}} \quad \forall i \quad (2.23)$$

El impacto ambiental local (EIL) tiene en cuenta sustancias que contribuyen a las categorías de impacto de efectos a la salud humana y formación de ozono fotoquímico. Se consideran locales porque los impactos dependen de variables temporales, espaciales y otras variables dependientes del lugar de emisión como las condiciones meteorológicas. En este caso no se usan factores de potencia para caracterizar el índice de impacto, ya que no existe ninguno aceptado internacionalmente (Diniz da Costa, 2006). Además, algunas sustancias como PM no están incluidas en el listado del IChemE y por tanto no tiene definido un factor de potencia para efectos a la salud humana. EIL se calcula según la Eq. 2.24, en la que el impacto se evalúa desde una perspectiva social donde la población está expuesta a sustancias potencialmente dañinas emitidas por encima de los umbrales establecidos en el E-PRTR.

$$EIL = \sum_j \frac{X_{i,j}^{emit} FT}{\theta_j} \quad \forall i \quad (2.24)$$

La tarea del diseño (modelo *CLEAM*) puede formularse en términos matemáticos como un problema de programación no lineal entera-mixta (PNLEM). En particular, presentamos dos formulaciones PNLEM que se diferencian en la función objetivo ambiental (i.e., global o local):

$$\left. \begin{array}{l} \min_{x,y} \quad Z(x,y) = \{Cinv(x,y), EIG(x,y)\} \\ \text{suje}to \quad a \quad h(x,y) = 0 \\ \quad \quad \quad g(x,y) \leq 0 \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, y \in Y \subset \{0,1\} \end{array} \right\} \quad (\text{CLEANG})$$

$$\left. \begin{array}{l} \min_{x,y} \quad Z(x,y) = \{Cinv(x,y), EIL(x,y)\} \\ \text{suje}to \quad a \quad h(x,y) = 0 \\ \quad \quad \quad g(x,y) \leq 0 \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, y \in Y \subset \{0,1\} \end{array} \right\} \quad (\text{CLEANL})$$

En el modelo *CLEAN*, las variables continuas x se corresponden con variables de decisión como caudales volumétricos de gases y eficiencias de eliminación de los equipos, mientras que las variables discretas y se emplean para decisiones de la estructura como la instalación de una tecnología o ciertas partes de ellas (e.g., número de secciones del ESP).

2.2.2. Método de resolución y resultados

Las soluciones al modelo *CLEAN* se generan vía el método de restricción ε , donde las soluciones de Pareto se calculan resolviendo un conjunto de problemas con un único objetivo en el que un criterio se mantiene como función objetivo y el resto son impuestos como restricciones. Los problemas con un único objetivo siguen la siguiente formulación:

$$\left. \begin{array}{l} \min_{x,y} \quad Cinv(x,y) \\ \text{suje}to \quad a \quad h(x,y) = 0 \\ \quad \quad \quad g(x,y) \leq 0 \\ \quad \quad \quad EIG(x,y) \leq \varepsilon^{EIG} \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, y \in Y \subset \{0,1\} \end{array} \right\} \quad (\text{CLEANG})$$

$$\begin{array}{l}
 \min_{x,y} \quad C_{inv}(x,y) \\
 \text{sujeto a} \quad \left. \begin{array}{l}
 h(x,y) = 0 \\
 g(x,y) \leq 0 \\
 EIL(x,y) \leq \varepsilon^{EIL}
 \end{array} \right\} \text{(CLEANL)} \\
 \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, y \in Y \subset \{0,1\}
 \end{array}$$

donde ε^{EIG} y ε^{EIL} son los parámetros auxiliares que imponen los límites al impacto ambiental global y local, respectivamente. El PNLEM se implementa en GAMS y los resultados numéricos se han obtenido en un ordenador CPU Intel(R) Core(TM) Duo con 3.00 GHz y 3.25 GB de RAM. Para simplificar, y debido al reducido número de variables binarias que presenta el problema, el modelo ha sido resuelto por enumeración exhaustiva, es decir, resolviendo un número de sub-PNLs que corresponden a todas las posibles combinaciones de las variables binarias y seleccionando la solución con el mejor valor de la función objetivo. Para cada sub-PNL se ha utilizado el algoritmo de solución CONOPT. Los puntos de Pareto se generan primero optimizando cada objetivo por separado y dividiendo el intervalo resultante en subintervalos. Entonces, el problema con un único objetivo se resuelve para los límites de esos subintervalos generando en cada resolución un punto de Pareto diferente (ver sección 2.1.2).

Tabla 2.3. Parámetros para el caso de estudio

Parámetro	Valor	Variable fijada/Parámetro	Valor
<i>Características planta base</i>		<i>Características equipos de control</i>	
Tamaño de la planta - MW (MW)	500	Eff. elimin. $SO_2 - \eta^{FGD}_{SO_2}$ (%)	95
Tiempo de operación - FT (h/year)	8000	Eff. elimin. $CO_2 - \eta^{CCPC}_{CO_2}$ (%)	90
Tasa de calor - HR (kJ/kWh)	11078	T^{ESP} (K)	480
Consumo de fuel - $mfuel$ (kg/h)	1.5×10^5	T^{SCR} (K)	616
Calor en el vapor - q_{steam} (MJ/ton)	2000	T^{CCPC} (K)	326
Concentración de $CO_2 - C_{CO_2}$ (mol %)	12.33		
<i>Características del carbón</i>		<i>Características CCPC</i>	
Poder calorífico - HHV (kJ/kg)	27680	Carga CO_2 del solvente agotado- Φ_{lean} (mol CO_2 /mol MEA)	0.22
Contenido en azufre - WtS (%)	1	Concentración de MEA en el solvente - C_{MEA} (%)	30
		Cantidad de MEA perdida - m_{MEA} (kg MEA/ton CO_2)	1.5

Los principales parámetros utilizados en el caso de estudio se muestran en la Tabla 2.3 e incluyen parámetros de la planta base, de la materia prima y de las características de las tecnologías de control ambiental.

Las soluciones se muestran en la Fig. 2.5 donde se representan los frentes de Pareto obtenidos para el problema que minimiza el coste y el impacto ambiental global (*CLEANG*) con línea verde continua y el que minimiza el coste y el impacto ambiental local (*CLEANL*) con línea azul discontinua.

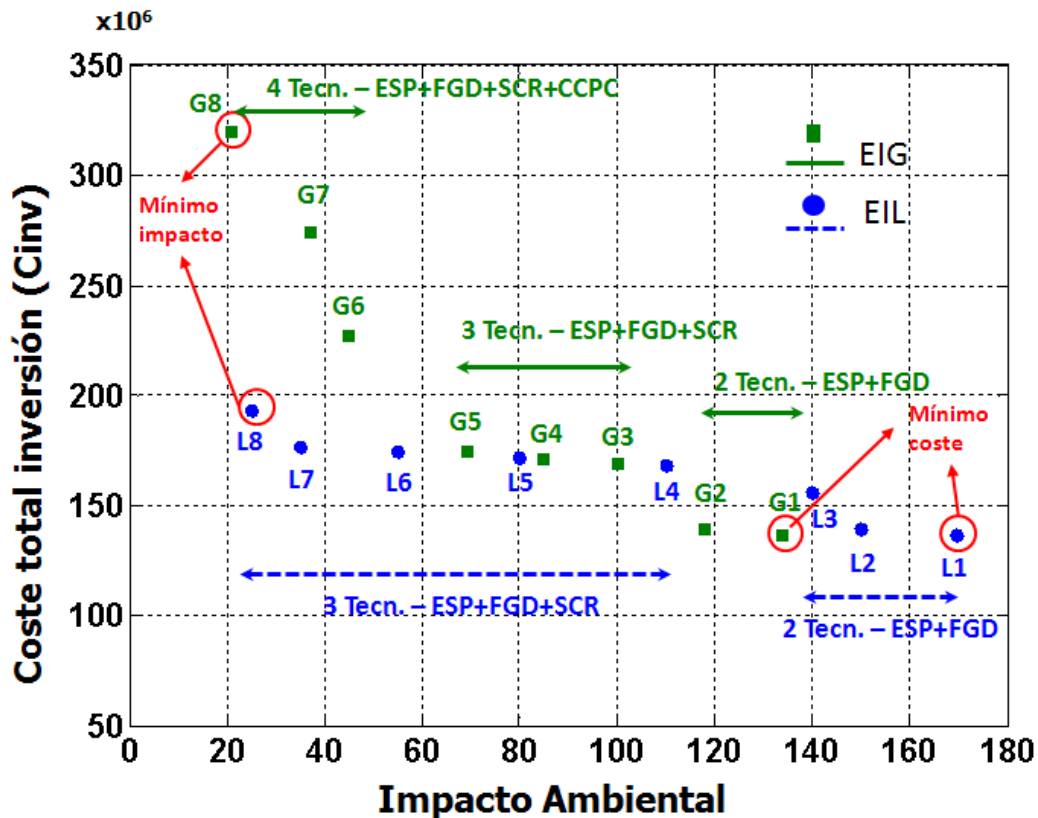


Figura 2.5: Conjunto de soluciones de Pareto para los objetivos económico y ambiental.

Para el problema *CLEANG*, la solución de mínimo coste (i.e., punto G1) implica la instalación del mínimo número de tecnologías necesarias para satisfacer los límites de emisiones impuestos por la legislación en SO_2 y PM. Así, como se puede ver en la Tabla 2.4, el ESP se instala para tratar todo el volumen de gases con una eficiencia del 99.93% a pesar de que las emisiones de PM no tienen influencia en el indicador *EIG*. El FGD se instala para tratar el 90% de la corriente de gases con una eficiencia de eliminación de la tecnología del 95%. Por otra parte, en la solución de mínimo impacto (i.e., punto G8) todas las tecnologías son implementadas en la planta, lo que permite reducir el valor del *EIG* en un 85% con un coste asociado de 320 M\$ aproximadamente. Como se puede apreciar, a medida que nos movemos desde la solución de mínimo coste a la de mínimo impacto, el modelo se centra primero en tratar todo el volumen de gases en el FGD, reduciendo el bypass en este equipo. Una vez que ha pasado todo el volumen de gases por el tratamiento de desulfuración, el SCR es instalado para eliminar los NO_x (i.e.,

punto G3). Para reducir en mayor medida el *FIG*, el modelo incrementa el caudal de gases tratados así como la eficiencia de reducción en el equipo de desnitrificación. Tras cierto punto en el frente de Pareto (i.e., punto G5), para mayores reducciones en el *FIG* es necesaria la instalación de la captura de CO_2 .

Tabla 2.4. Valores para optimizar el coste de inversión y el impacto ambiental global

Solución	Función objetivo		Variables de decisión					
			<i>BYPASS_i</i> (%)				η_j^i (%)	
	<i>Cinv</i> ($\times 10^6$ \$)	<i>FIG</i>	SCR	ESP	FGD	CCPC	$\eta_{\text{PM}}^{\text{ESP}}$	$\eta_{\text{NOx}}^{\text{SCR}}$
G1	136.71	133.90	-	0	10	-	99.93	70
G2	139.08	117.80	-	0	2	-	99.93	70
G3	168.63	100.00	69	0	0	-	99.93	70
G4	171.30	85.00	44	0	0	-	99.93	81
G5	174.25	69.41	23	0	0	-	99.93	90
G6	226.96	45.00	0	0	0	69	99.93	90
G7	273.45	37.15	0	0	0	46	99.93	90
G8	319.38	21.02	0	0	0	0	99.93	90

En cuanto al problema *CLEANL*, la solución de mínimo coste conlleva las mismas condiciones de operación para el ESP y el FGD que en el caso anterior del *CLEANG*, con un coste asociado de 137 M\$. En la siguiente solución del frente de Pareto (i.e., punto L2), el modelo propone tratar todo el volumen de gases en el FGD disminuyendo su bypass, mientras que en el punto L3 se incrementa también la eficiencia de eliminación de partículas en el ESP. Mayores reducciones del *EIL* se consiguen instalando el SCR para tratar los NO_x de la corriente de gases mientras se mantienen las condiciones iniciales de operación del ESP y el FGD como se muestra en la Tabla 2.5. Una vez que todo el volumen de gases ha pasado por la tecnología de desnitrificación (punto L6) el modelo propone reducir el bypass en el FGD hasta que todo el caudal de gases pasa por el equipo de desulfuración y posteriormente aumentar la eficiencia en el ESP hasta que alcanza su límite superior. En el punto L8 se alcanza el mínimo impacto ambiental local con una reducción del 85% y un coste total de 193 M\$. Como se puede ver, las inversiones en tecnología de captura de CO_2 no tienen influencia sobre el *EIL*, por lo que no están implementadas en las soluciones del frente de Pareto.

Tabla 2.5. Valores para optimiza el coste de inversión y el impacto ambiental local

Solución	Función objetivo		Variables de decisión					
			BYPASS _i (%)				η_j^i (%)	
	<i>Cinv</i> (x10 ⁶ \$)	<i>EIG</i>	SCR	ESP	FGD	CCPC	η_{PM}^{ESP}	η_{NOx}^{SCR}
L1	136.71	169.60	-	0	10	-	99.93	70
L2	139.62	149.82	-	0	0	-	99.93	70
L3	156.04	140.03	-	0	0	-	99.99	70
L4	168.58	110.00	43	0	10	-	99.93	82
L5	171.47	80.00	22	0	10	-	99.93	90
L6	174.25	55.00	0	0	10	-	99.93	90
L7	176.52	35.00	0	0	0	-	99.93	90
L8	192.93	25.09	0	0	0	-	99.99	90

Como muestran los resultados, es posible reducir los impactos ambientales globales y locales de similar manera eligiendo el correcto diseño y condiciones de operación. Esto lleva a un incremento del coste de inversión que es más significativo en el caso de los impactos globales. Además, las estrategias a seguir en ambos casos son similares, lo que nos lleva finalmente a realizar un estudio de visualización de datos para completar el análisis de los frentes de Pareto mostrados anteriormente. Para ello se utilizan los gráficos de coordenadas paralelas que ayudan a entender la estructura del problema ambiental mostrando la relación entre los indicadores usados en las funciones objetivo (Liebscher et al., 2009).

Las Figuras 2.6 y 2.7 muestran los gráficos de coordenadas paralelas para ambos frentes de Pareto. En el eje abscisas se muestran los diferentes criterios o funciones objetivo, mientras que el eje de ordenadas nos muestra los valores normalizados de cada función objetivo en cada solución. Los datos han sido normalizados dividiendo la función objetivo de cada solución entre el máximo valor obtenido de entre todos los puntos de Pareto. En la Fig. 2.6, donde se minimiza *EIG*, se observa que *EIG* y *EIL* se pueden reducir hasta un 85% y un 80% respectivamente a costa de doblar el valor del coste de inversión. De similar forma en la Fig. 2.7, cuando se minimiza *EIL*, se pueden conseguir reducciones del 85% y del 60% en *EIL* y *EIG* respectivamente, con un incremento del 30% desde el punto de mínimo coste. Esto demuestra que el objetivo económico y los objetivos ambientales se comportan de una manera opuesta (i.e., son en algún modo conflictivos), ya que la mejora en uno de ellos solo puede alcanzarse con el empeoramiento del otro. Sin embargo, revela que los indicadores ambientales global y local tienden a comportarse de una manera no-conflictiva, ya que al reducir el *EIG* se obtienen

valores más bajos del *EIL* y viceversa, haciendo posible la simplificación del análisis de las soluciones de Pareto.

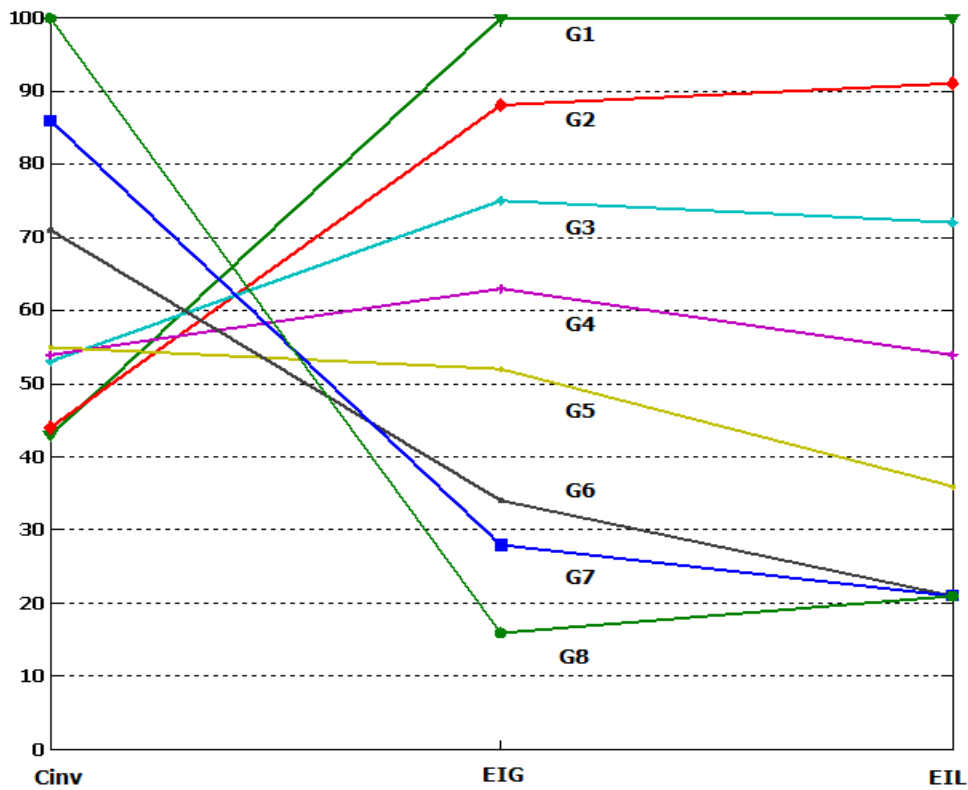


Figura 2.6: Gráfico de coordenadas paralelas cuando se minimiza *EIG*

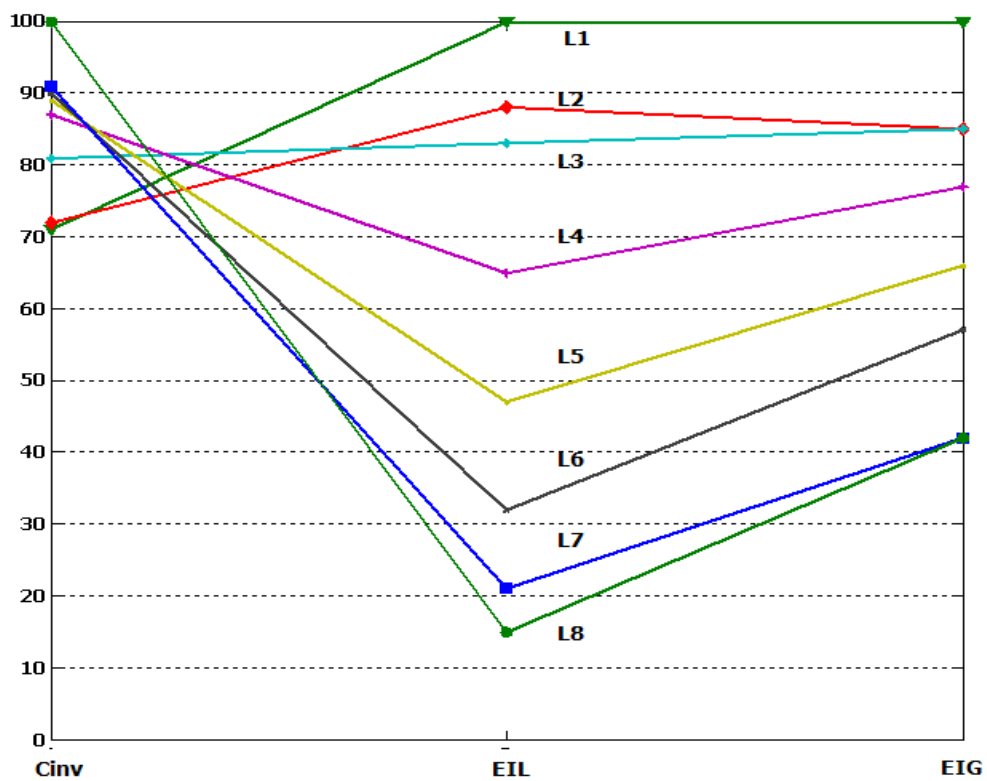


Figura 2.7: Gráfico de coordenadas paralelas cuando se minimiza *EIL*

2.3. Selección del proceso de captura de CO₂ y estudio de su influencia en los objetivos económico y ambiental

Una vez estudiada la influencia de la función objetivo en la decisión de equipar una planta de combustión de carbón existente con equipos de control de la contaminación, se observa que el proceso de captura de CO₂ con aminas presenta la peor relación efectividad-coste (i.e., el menor descenso marginal del impacto ambiental para un incremento de la inversión dado) comparado con el resto de tecnologías limpias. Por tanto, la decisión de actualizar la planta con la tecnología de captura de CO₂ se tomaría tras incorporar el control de partículas, la desulfuración y la desnitrificación (Cristóbal et al., 2012a). Sin embargo, escenarios de energía globales ponen de manifiesto que para una reducción importante en las emisiones de CO₂ que permitan alcanzar las cifras acordadas en el protocolo de Kioto, la instalación de tecnologías de captura de carbono en las plantas existentes es necesario (IEA, 2012c). En este contexto, se plantea un caso de estudio en el que se busca estudiar la influencia de la tecnología utilizada de captura de CO₂ en el diseño del proceso de combustión limpia del carbón comparando las dos alternativas que contempla el estado del arte en cuanto a opciones de actualización (retrofit): captura post-combustión con absorción química utilizando aminas (CCPC) y el proceso de oxidación (OXI).

En este caso se asume que el ESP es obligatorio y se instala en cualquiera de sus configuraciones. Así, el problema se plantea de la siguiente forma: dados un conjunto de contaminantes J presentes en la corriente de gases de combustión (i.e., NO_x, SO₂ y CO₂), y un conjunto I de tecnologías que eliminan selectivamente cada uno de esos contaminantes (i.e., SCR, FGD, CCPC y OXI), el objetivo es seleccionar la alternativa de diseño óptima a instalar en la planta y sus condiciones de operación de tal forma que se minimice simultáneamente el coste de la electricidad producida y el impacto ambiental.

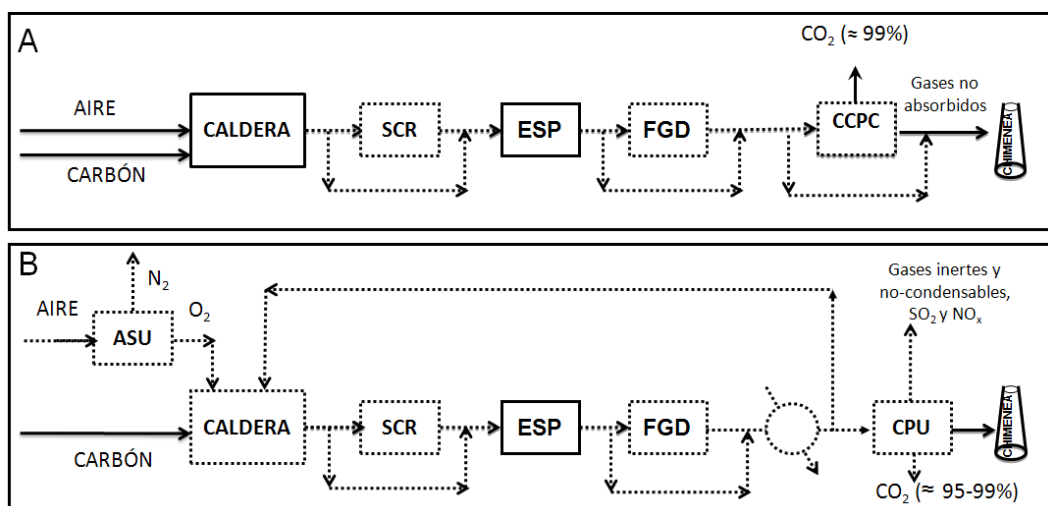


Figura 2.8: Diagrama de flujo del proceso con las tecnologías de control ambiental para (A) combustión con aire y (B) oxidación. En línea discontinua se representan los elementos que pueden ser añadidos.

La superestructura que proponemos se muestra en la Figura 2.8 y como se puede apreciar está dividida en dos diagramas de flujo. Esto se debe a que ambas tecnologías de captura de CO₂ son incompatibles en un mismo proceso ya que tienen diferentes tipos de combustión de la materia prima, siendo para CCPC en presencia de aire (Figura 2.8A) y para OXI en presencia de oxígeno casi puro (Figura 2.8B). Al igual que en el caso de estudio anterior, se considera la opción del bypass en las unidades en las que es posible (i.e., SCR, FGD y CCPC; en OXI no es posible).

2.3.1. Modelo matemático

A continuación se muestra el modelo matemático derivado de la superestructura presentada. Este modelo es una variación del mostrado en el caso de estudio anterior por lo que ésta sección se centrará en resaltar las principales novedades de la formulación original.

➤ Balance de masas

El balance de masas se define para todos los equipos de control ambiental i y debe cumplirse, tanto a nivel individual como a nivel general de proceso, para todo contaminante j .

➤ Restricciones

Al igual que en el caso de estudio anterior la principal restricción viene marcada por la cantidad máxima de emisiones permitidas de cada contaminante, medido en términos de concentración a la salida de la chimenea y cuyos límites vienen definidos en la legislación europea. Con respecto al caso de estudio anterior, se ha considerado un endurecimiento de los requisitos legales en cuanto a emisiones de NO_x que han pasado de 1200 a 500 mg/Nm³ como se muestra en la Tabla 2.6.

Tabla 2.6. Valores límite de emisión del contaminante j

Contaminante j	VLE_j (mg/Nm ³)
SO ₂	400
NO _x	500

➤ Funciones objetivo

La función objetivo económica a minimizar es el coste de la electricidad (COE), que se cuantifica en \$/MWh y se calcula como se muestra en la Eq. 2.25. Este indicador económico es importante ya que las plantas de producción de electricidad suelen internalizar los costes de las tecnologías limpias en el coste del producto. Así, una subida en el COE puede resultar en una subida en la factura de la electricidad pagada por el usuario final.

El COE tiene en cuenta el coste de inversión anualizado, los costes anuales de operación y mantenimiento, el coste del fuel consumido y la energía usada por cada tecnología de control de contaminantes instalada (que es descontada de la producción total de energía de la planta).

$$COE = \frac{\sum_i (TCI_i crf + TOM_i)}{\left(MW - \sum_i EPT_i \right) FT} + \frac{FC}{MWFT} \quad (2.25)$$

El coste de inversión de cada equipo (TCI_i) se calcula igual que en el caso de estudio anterior (Eq. 2.18 – 2.19) usando los modelos técnico-económicos no lineales expuestos en la sección 1.2. Para anualizar este coste se utiliza el factor de recuperación de capital (crf) que proporciona el pago equivalente uniforme sobre la vida útil de los equipos (n_i) instalados considerando una tasa de interés (i_{rate}) (Eq. 2.26).

$$crf = \frac{i_{rate}}{1 - (1 + i_{rate})^{-n_i}} \quad (2.26)$$

El coste total anual de operación y mantenimiento de cada equipo (TOM_i) se calcula sumando los costes de operación y mantenimiento fijos y variables (FOM_i y VOM_i , respectivamente) como se muestra en la Eq. 2.27. Los primeros aglutinan los costes administrativos, de mano de obra y de mantenimiento del equipo, mientras que los variables tienen en cuenta los costes de los productos químicos consumidos durante la operación (i.e., reagentes, inhibidores y/o catalizadores), consumibles (i.e., agua) y servicios generales (i.e., tratamiento de aguas y residuos). Los costes de la energía no se incluyen porque como se ha dicho anteriormente su consumo se gestiona internamente descontándolo de la producción bruta. Para mayor detalle sobre los valores tomados para los FOM y VOM de las diferentes tecnologías se refiere al lector a Cristóbal et al., (2012b).

$$TOM_i = FOM_i + VOM_i \quad \forall i \quad (2.27)$$

Para cuantificar el desempeño ambiental del sistema se utiliza el impacto ambiental global (EIG) como función objetivo, definido anteriormente en la Eq. 2.23. Se ha suprimido el uso del impacto ambiental local (EIL), debido a que, como se ha demostrado en el caso de estudio anterior, EIG y EIL eran no-conflictivos y por lo tanto el estudio de uno de ellos bastará para dar aproximadamente los mismos resultados reduciendo tiempos de computación y recursos.

Por tanto la tarea de diseño descrita (modelo $CAPTURE$) se formula matemáticamente como un problema de programación no lineal entera-mixta (PNLEM) bi-objetivo:

$$\left. \begin{array}{l}
 \min_{x,y} \quad Z(x,y) = \{COE(x,y), EIG(x,y)\} \\
 \text{suje}to \quad a \quad h(x,y) = 0 \\
 \quad \quad \quad \quad g(x,y) \leq 0 \\
 \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, y \in Y \subset \{0,1\}
 \end{array} \right\} \text{(CAPTURE)}$$

Las variables continuas x representan variables de operación y de diseño (como caudales de gases, capacidades de equipos y eficiencias de eliminación), mientras que las variables binarias y se emplean para modelar decisiones lógicas como la selección de la tecnología de combustión o la tecnología de control ambiental a instalar. Las variables enteras modelan la existencia de ciertos componentes de las tecnologías (como por ejemplo el número de capas de catalizador en el SCR). Las restricciones de igualdad $h(x,y)=0$ representan los balances de materia y los cálculos de costes. Finalmente las restricciones de desigualdad $g(x,y)\leq 0$ representan especificaciones de diseño imponiendo límites superiores e inferiores a las variables del proceso.

2.3.2. Método de resolución y resultados

Para resolver el PNLEM bi-criterio *CAPTURE* se utiliza el método de restricción ϵ , por el cual se calculan un conjunto de problemas auxiliares con una única función objetivo mientras que la otra pasa a ser una restricción a la cual se le imponen límites. Cada problema auxiliar lleva a un PNLEM con pobre desarrollo numérico debido a la presencia de variables binarias en conjuntos de ecuaciones altamente no-convexos difíciles de manejar usando incluso las reformulaciones del envolvente convexo (convex hull) y big-M (Grossmann, 2002). Para superar esta dificultad, el espacio PNLEM se descompone en una serie de sub-problemas PNLEM que representan las diferentes configuraciones estructurales (Fig. 2.9). A su vez, cada uno de estos sub-PNLEM se resuelve por enumeración exhaustiva, es decir, calculando una serie de PNL que corresponden a todas las posibles combinaciones de las variables binarias y seleccionando la solución con el mejor valor para la función objetivo.

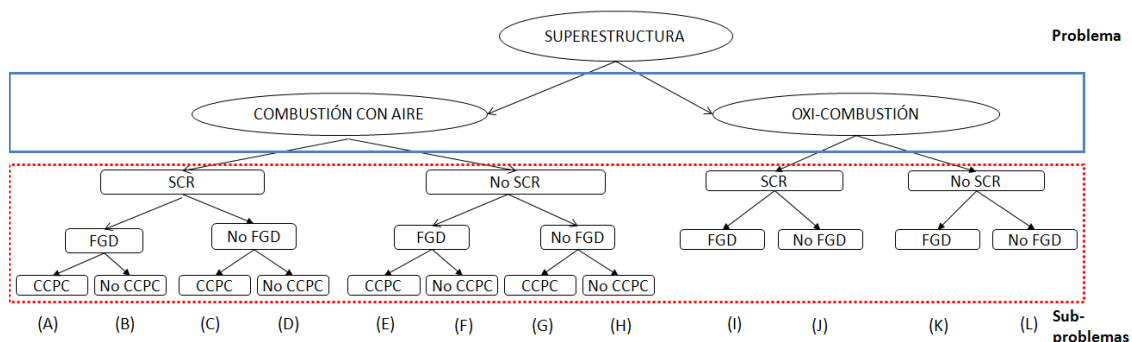


Figura 2.9: Descomposición del espacio PNLEM del modelo *CAPTURE*

El PNLEM se ha implementado en GAMS y todos los sub-problemas PNL se han resuelto usando CONOPT3 en un ordenador CPU Intel(R) Core(TM) Duo con 3.00 GHz y 3.25 GB de RAM.

Para poder comparar entre tecnologías, se han armonizado los valores de ciertos parámetros clave que tienen gran influencia en el COE , como el coste y las propiedades del fuel, el tamaño de la planta y su factor de capacidad entre otros (Rubin et al., 2007a). Para el estudio se ha utilizado un carbón bituminoso con contenido medio en azufre (i.e., Appalachian Medium Sulfur) (IECM, 2001) cuya composición y características se detallan en la Tabla 2.7 junto con los parámetros principales. La eficiencia de la caldera varía acorde con la tecnología de combustión (89.16% en combustión con aire y 94.03% en oxicomustión (Rubin et al., 2007b), lo que resulta en una eficiencia de conversión total de 32% y 34% respectivamente). Las eficiencias de captura de las diferentes tecnologías son fijadas con los valores nominales mostrados en literatura a excepción de la del SCR (η^{SCR}_{NOx}) que es variable entre (70% – 90%). Así para el CCPC (η^{CCPC}_{CO2}) y para OXI (η^{OXI}_{CO2}) es de 90%. Para el FGD (η^{FGD}_{SO2}) es 95%.

Para la tecnología OXI se ha considerado un sistema de reciclado seco por el cual una parte del total de los gases de combustión se recicla de nuevo a la caldera tras eliminar la mayor parte del agua por condensación. El ratio de reciclado ha sido fijado en 75% (Rubin et al., 2007b).

Tabla 2.7. Parámetros para el caso de estudio

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
<i>Características del carbón</i>		<i>Características de la planta</i>	
Poder calorífico - HHV (MJ/kg)	30.84	Tamaño de la planta - MW (MW)	500
Carbón – (wt%)	73.81	Tiempo de operación - FT (h/year)	8000
Hidrógeno – (wt%)	4.88	<i>Parámetros financieros</i>	
Oxígeno – (wt%)	5.41	Vida útil de los equipos - n_i (años)	20
Cloro – (wt%)	6×10^{-2}	Tasa de interés - i_{rate}	0.07
Azufre – (wt%)	2.13		
Nitrógeno – (wt%)	1.42		
Cenizas – (wt%)	7.24		
Humedad – (wt%)	5.05		
Coste del carbón (C_{coal}) (\$/t)	30		

En la Figura 2.10 se muestran los frentes de Pareto correspondientes a las configuraciones de combustión con aire (círculos azules) y oxicomustión (cuadrados rojos). Hay que destacar que el frente de Pareto global es la envoltura de los frentes de Pareto individuales.

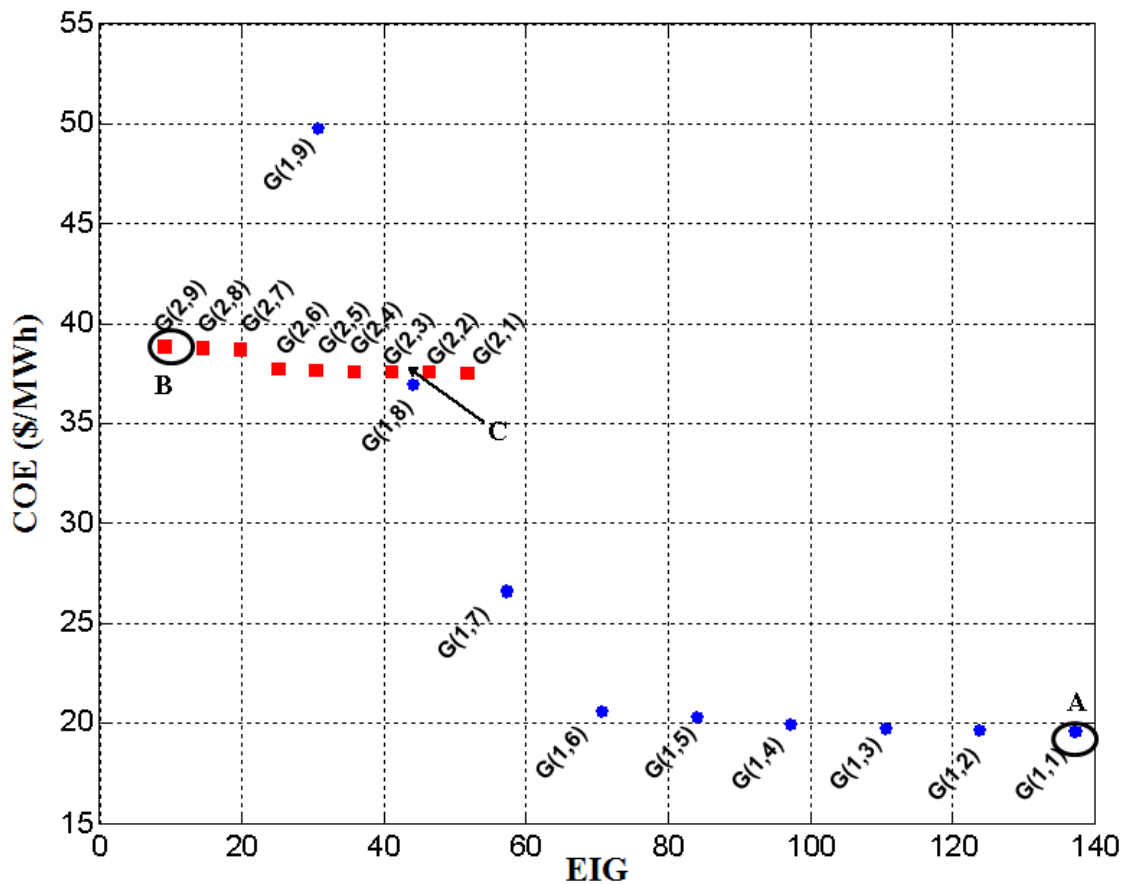


Figura 2.10: Curvas de Pareto para las configuraciones de combustión con aire (círculos azules) y oxicomustión (cuadrados rojos).

Cada punto en la figura es una solución de Pareto e implica un diseño con equipos de control de la contaminación diferente. Para describir esa solución se calcula el factor de recuperación del contaminante j (RR_j – Recovery ratio) definido como el porcentaje de contaminante en el gas de combustión que se elimina en el equipo instalado. Cabe destacar que este factor depende tanto de la eficiencia de eliminación de la tecnología como de la cantidad de gases que pasa por el bypass, por lo que es controlado modificando la variable $Bypass_j$.

Así en la Tabla 2.8 se muestran las soluciones de Pareto asociadas al proceso de combustión con aire. La solución de mínimo coste (i.e., $G_{1,1}$) conlleva la instalación de la unidad de FGD para tratar el 92% de los gases y la instalación del SCR para tratar el 29%. Las siguientes soluciones en la curva a medida que nos movemos hacia la izquierda desde la solución de mínimo coste deciden reducir el bypass en el FGD gradualmente hasta que alcanza el valor de 0 (aumentando el RR_{SO_2} hasta su límite superior) y posteriormente hacer lo mismo con el bypass del SCR. Alcanzado este punto, para mayores reducciones en el EIG es necesaria la instalación del CCPC. En la solución de mínimo impacto (i.e., $G_{1,9}$), donde las tecnologías de control ambiental están diseñadas para tratar todo el caudal de gases, el valor del EIG es de aproximadamente 31, y el COE de 50 \$/MWh.

Tabla 2.8. Soluciones de Pareto para la configuración de combustión con aire

Solución	COE (\$/MWh)	EIG	RR _{NOx} (%)	RR _{SO2} (%)	RR _{CO2} (%)
G _{1,1}	19.57	137.3	26.1	87.4	-
G _{1,2}	19.63	124	26.1	91.2	-
G _{1,3}	19.69	110.7	25.2	94	-
G _{1,4}	19.97	97.4	40.5	95	-
G _{1,5}	20.32	84.1	61.2	95	-
G _{1,6}	20.67	70.7	81.9	95	-
G _{1,7}	26.64	57.4	90	95	20.7
G _{1,8}	36.97	44.1	90	95	55.8
G _{1,9}	49.71	30.7	90	95	90

Las soluciones para el proceso con oxidación se muestran en la Tabla 2.9. Todas ellas presentan un RR_{CO2} del 90%. La solución de mínimo coste (i.e., G_{2,1}) requiere la instalación del FGD para tratar el 78% los gases de combustión y eliminar el 74.1% del SO₂ total. Para lograr mayores reducciones del EIG se reduce el bypass en el FGD hasta su límite inferior e instalando la unidad de SCR. En la solución de mínimo impacto las tecnologías están diseñadas para tratar el total de los gases producidos en la caldera con un COE de 39\$/MWh y un EIG de 9.

Tabla 2.9. Soluciones de Pareto para la configuración de oxidación

Solución	COE (\$/MWh)	EIG	RR _{NOx} (%)	RR _{SO2} (%)	RR _{CO2} (%)
G _{2,1}	37.51	51.8	-	74.1	90
G _{2,2}	37.54	46.5	-	76.9	90
G _{2,3}	37.57	41.2	-	81.7	90
G _{2,4}	37.6	35.8	-	85.5	90
G _{2,5}	37.63	30.5	-	90.2	90
G _{2,6}	37.73	25.2	-	95	90
G _{2,7}	38.67	19.9	11.2	95	90
G _{2,8}	38.78	14.6	32.2	95	90
G _{2,9}	38.86	9.3	90	95	90

Como se puede ver en la Fig. 2.10, las curvas individuales de Pareto para cada proceso de combustión se cortan en un punto. Cabe recordar que el frente de Pareto global es la envoltura de los frentes de Pareto individuales, por lo que la mejor solución tecnológica para la captura

de carbono depende de la elección del objetivo ambiental. Concretamente, en el punto de intersección C, ambas alternativas tienen el mismo valor del indicador ambiental y económico (ver Tabla 2.10). Así, la solución de mínimo coste (i.e., punto A) corresponde con un diseño que usa combustión con aire donde está instalado el FGD y el SCR con un bypass del 8% y el 71% del gas a tratar, para eliminar el 87% y el 26% de SO₂ y NO_x, respectivamente. En este punto el *EIG* es de 137.3 y el *COE* es 19.57 \$/MWh como se muestra en la Tabla 2.8 – punto G_{1,1}. Desde el punto A hasta el punto de intersección C, las soluciones que presentan combustión con aire dominan a las de oxicomustión (i.e., muestran mejor valor del *COE* para un objetivo ambiental dado). Después del punto C, las soluciones con oxicomustión dominan a las de combustión con aire que presentan CCPC. En la solución de mínimo impacto (i.e., punto B), la tecnología seleccionada es OXI y el valor de *EIG* ha sido reducido hasta 9.27 mientras que el *COE* es de 38.86 \$/MWh como se muestra en la Tabla 2.9 – punto G_{2,9}.

Tabla 2.10. Soluciones con igual optimalidad en el punto de intersección (punto C)

Tecnología de combustión	RR _{NOx} (%)	RR _{SO2} (%)	RR _{CO2} (%)	COE (\$/MWh)	EIG
Con aire	90	95	57.6	37.6	43.1
Con oxígeno	-	80	90		

Por tanto, como muestran los resultados, ambas estrategias para la captura de CO₂ compiten cuando se minimizan el *COE* y el *EIG*. El proceso de combustión con aire que usa CCPC es preferible cuando los límites ambientales son más permisivos (i.e., para altos impactos ambientales), mientras que el proceso de oxicomustión es el elegido cuando se consideran limitaciones ambientales más exigentes.

Finalmente, un análisis más a fondo de los valores del *COE* y el *EIG* (Fig. 2.11) en las soluciones de mínimo coste (A), de mínimo impacto (B) y la solución de igual optimalidad (C) permite ver la influencia de cada tecnología *i* y cada contaminante *j* en los valores de las funciones objetivo. Cabe destacar:

- que en el punto B, el coste de instalación y operación de la tecnología de captura de CO₂ tiene gran influencia (i.e., 54%). Concretamente el coste de inversión representa el 36% del coste total y una parte significativa es debido al ASU. Reemplazar el proceso convencional (i.e., criogénica) por uno más eficiente respecto al coste, como separación con membranas, puede reducir en gran medida el *COE*.
- que en el punto C, ambas estrategias conducen al mismo coste total pero la diferencia en el coste del SCR es significativa, siendo mayor en el caso de combustión con aire. Esto se debe a que el SCR no es necesario en el proceso de oxicomustión para cumplir con el mínimo exigido por la legislación ya que se producen menos cantidad de NO_x por la reducida presencia de N₂ en la combustión.

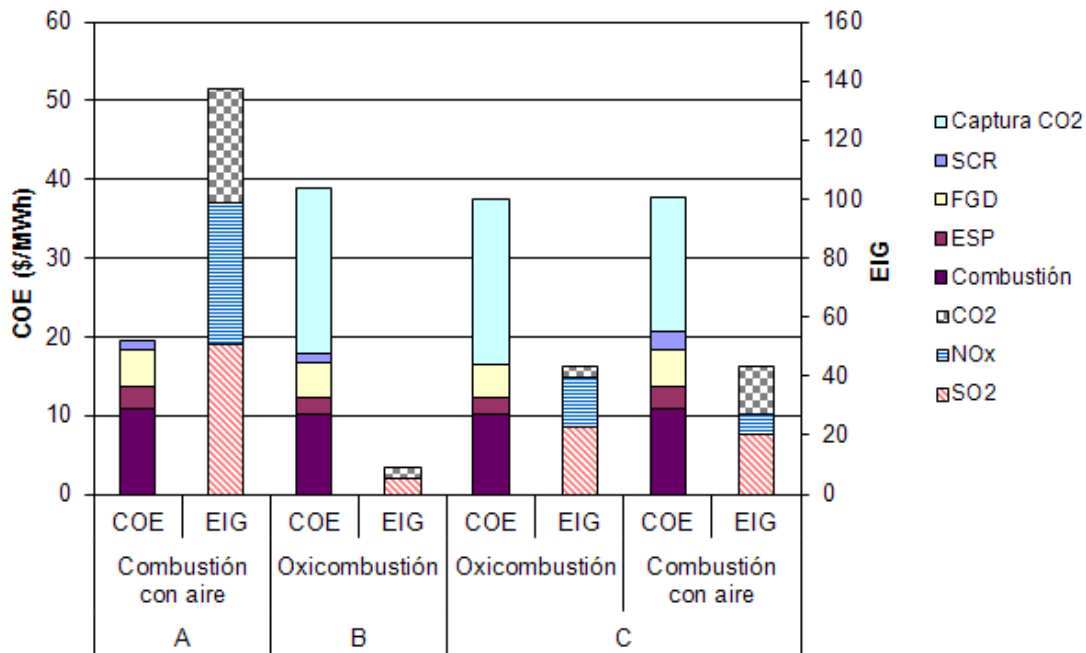


Figura 2.11: Análisis a fondo de los valores de *COE* y *EIG* en las soluciones de mínimo coste (A), de mínimo impacto (B) y la solución de igual optimalidad (C).

2.4. Influencia del mercado de emisiones de CO₂ en la economía de la combustión más limpia del carbón

Una vez estudiada la influencia de la tecnología de captura de CO₂ en el diseño óptimo del proceso de combustión limpia del carbón, es importante ampliar el estudio incluyendo el mercado de emisiones de CO₂ (ETS) que desde el 2005 tiene vigencia en la Unión Europea. Se trata de un sistema denominado "cap and trade" donde se fija un tope máximo de emisiones y se permite que los derechos de emisión de GHG sean comercializados en un libre mercado. Este mecanismo de intercambio permite la adopción, por parte de la planta de combustión, de varias estrategias que incluyen la compra/venta de emisiones en el ETS y la inversión en tecnologías limpias. Según el precio del CO₂, la planta puede, (i) decidir emitir más cantidad del límite impuesto, comprando en el ETS la cantidad de permisos de emisión que excede ese límite; o (ii) reducir sus emisiones invirtiendo en tecnologías limpias (con el incentivo de tener permisos de emisión sobrantes que puede vender) (Portney, 2003).

Así, en este apartado de la tesis se estudia la influencia del ETS y del precio del CO₂ en la elección de la estrategia óptima a seguir, que no es una tarea trivial. Por lo tanto se busca identificar el diseño óptimo en términos económicos de la producción de electricidad a partir del carbón, considerando explícitamente la gestión de carbono con el mercado de emisiones de CO₂.

El problema se plantea de la siguiente forma: dado un conjunto I de alternativas tecnológicas para la captura de gases de efecto invernadero (i.e., SCR, CCPC y OXI) a instalar en una planta de carbón existente y en el marco de un mercado de emisiones con un límite impuesto, y dado

también ese límite en forma de cantidad de emisiones gratuitas adjudicadas a la planta, el objetivo es identificar la estrategia óptima que combina inversión en tecnologías limpias e intercambio de derechos de emisión considerando un precio fijo del CO₂ en el ETS, tal que el coste total de la electricidad producida sea minimizado.

2.4.1. Modelo matemático

Para desarrollar el modelo matemático del caso de estudio es importante tener en cuenta el enfoque propuesto en la Figura 2.12, donde el modelo se dividirá en 5 bloques de ecuaciones: emisiones GHG, tecnologías limpias, mercado de emisiones, restricciones legales y función objetivo, que se explican a continuación.

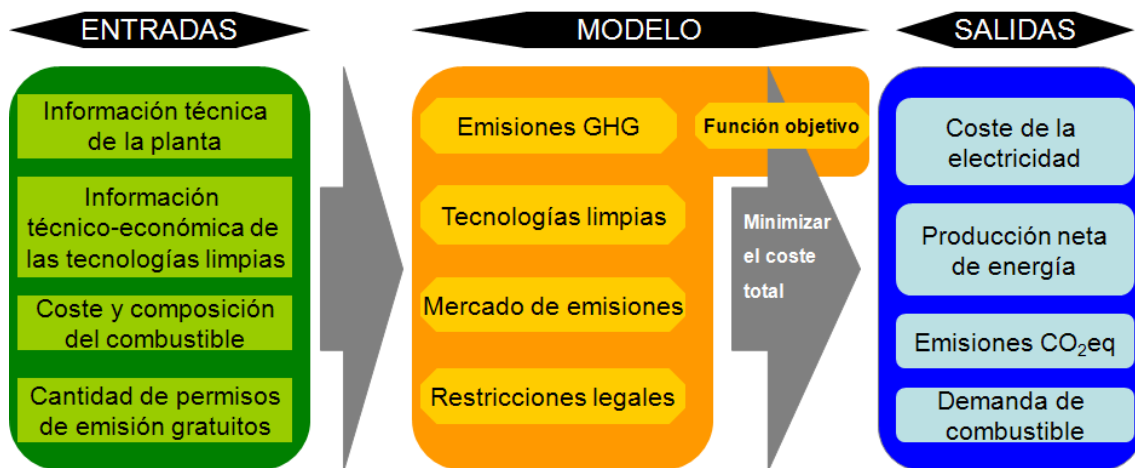


Figura 2.12: Enfoque del caso de estudio

➤ Emisiones GHG

La unidad utilizada para medir las emisiones de GHG es la tonelada de CO₂ equivalente (CO₂eq) que se describe para una mezcla de GHG como la cantidad de CO₂ que tendría el mismo potencial de calentamiento global. Los dos principales contaminantes responsables del calentamiento global presentes en los gases de combustión del carbón son el CO₂ y los NO_x. La cantidad emitida de CO₂eq se calcula según la Eq. 2.28, donde la cantidad de cada contaminante se multiplica por un factor que transforma el potencial de daño de cada contaminante a la base común expresada en CO₂eq. Por definición, el factor asociado al CO₂ es 1, mientras que para NO_x es 40 (IChemE, 2002).

$$X_{CO_2eq}^{emit} = X_{CO_2}^{emit} + 40X_{NO_x}^{emit} \quad (2.28)$$

➤ Tecnologías limpias

La superestructura que se propone en la Figura 2.13 sigue la línea de los casos de estudio anteriores. En este caso, el ESP y el FGD se consideran fijos en la planta en cualquier configuración. De nuevo la posibilidad de instalar un bypass en los equipos SCR y CCPC para realizar una captura parcial está contemplada. El balance de masas se define para todos los equipos de control ambiental *i* y debe cumplirse, tanto a nivel individual como a nivel general

de proceso. El coste de inversión y los costes de operación de cada equipo (TCI_i y TOM_i , respectivamente) se calculan igual que en los casos de estudio anteriores (Eq. 2.18 – 2.19 y 2.27, respectivamente) usando los modelos técnico-económicos no lineales expuestos en la sección 1.2. Para mayor detalle referimos al lector a Cristóbal et al., (2012c).

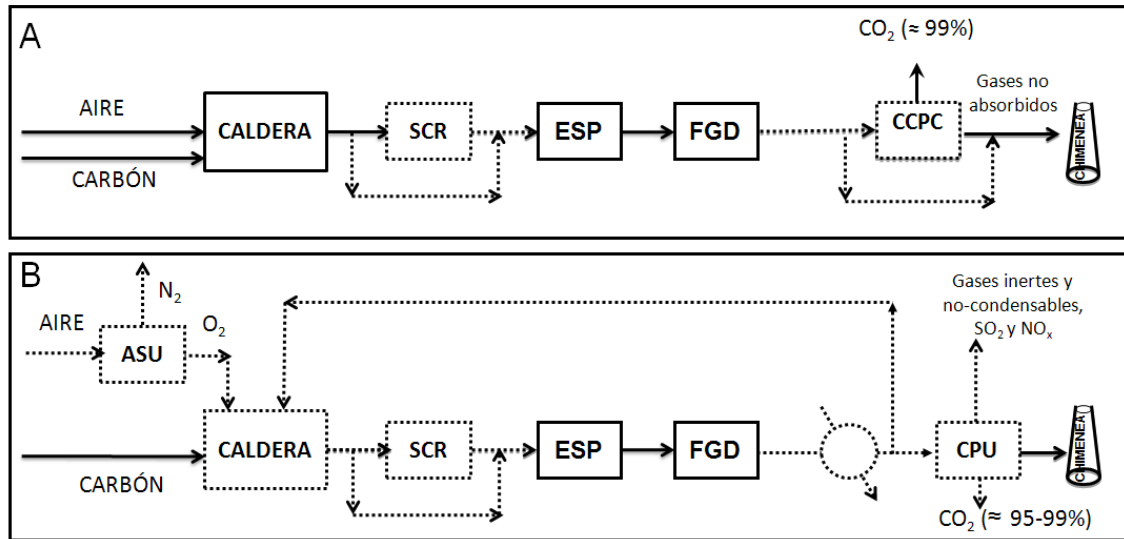


Figura 2.13: Diagrama de flujo del proceso con las tecnologías de control ambiental para (A) combustión con aire y (B) oxicomcombustión. En línea discontinua se representan los elementos que pueden ser añadidos.

➤ Mercado de emisiones

El mercado de emisiones con límite fijado (i.e., "cap and trade") es el sistema más extendido entre las políticas internacionales para controlar las emisiones de GHG. Cada país debe controlar y verificar que las fuentes de emisión cumplen los límites impuestos. Si la planta emite por encima del límite debe comprar permisos de emisión hasta igualar la emisión real y en caso de no cumplir, se le debe imponer una sanción proporcional al exceso de emisiones sin permiso. De esta manera se incita a los productores de energía a cumplir con el sistema impuesto.

$$X_{CO_2eq}^{emit} = Max^{CO_2} + Buy^{CO_2} - Sale^{CO_2} \quad (2.29)$$

El ETS se modela según la Eq. 2.29, siguiendo el trabajo de Bojarski et al. (2009), donde el límite es definido por el gobierno a través de la concesión de un máximo de permisos de emisión gratuitos (Max^{CO_2}) y la planta puede adquirir o vender permisos de emisión en el mercado (Buy^{CO_2} y $Sale^{CO_2}$, respectivamente).

➤ Restricciones legales

De nuevo la única restricción que se tiene en cuenta para el caso de estudio es el cumplimiento de la legislación europea en materia de emisión máxima permitida de NO_x en grandes plantas de combustión, tomando el valor límite de 500 mg/Nm³.

➤ Función objetivo

La función objetivo a minimizar es, al igual que en el caso de estudio anterior, el coste de la electricidad (COE), medido en \$/MWh. Este indicador (Eq. 2.30) incluye los términos anteriormente explicados del coste de inversión de las tecnologías limpias (TCI_i) anualizado con el factor de recuperación de capital (crf), los costes anuales de operación y mantenimiento (TOM_i), el coste del fuel consumido (FC), la energía usada por cada tecnología de control de contaminantes instalada, que es descontada de la producción total de energía de la planta ($MW - \sum EPT_i$) y un último término para el coste/ingreso de los permisos de emisión comercializados. Este último está afectado por el precio de los permisos de emisión en el mercado (P^{CO_2}), que consideramos igual tanto para la compra como para la venta, y que según Ehrhart et al. (2003) dependerá de la escasez de permisos más que de la cantidad inicialmente distribuida.

$$COE = \frac{\sum_i (TCI_i crf + TOM_i) + FC + (Buy^{CO_2} P^{CO_2} - Sale^{CO_2} P^{CO_2})}{\left(MW - \sum_i EPT_i \right) FT} \quad (2.30)$$

Con todo esto, el problema descrito (modelo *MARKET*) puede ser expresado matemáticamente como un problema de programación no lineal entera-mixta (PNLEM) con un único objetivo:

$$\left. \begin{array}{l} \min_{x,y} \quad Z(x,y) = \{ COE(x,y) \} \\ \text{suje}to \quad a \quad h(x,y) = 0 \\ \quad \quad \quad g(x,y) \leq 0 \\ \text{donde} \quad x \in X \subset \mathbb{R}^n, y \in Y \subset \{0,1\} \end{array} \right\} \quad (\text{MARKET})$$

2.4.2. Método de resolución y resultados

El modelo *MARKET* se ha implementado en GAMS. Al igual que en los casos anteriores, debido a la presencia de variables binarias en conjuntos de ecuaciones altamente no convexos, el PNLEM se ha dividido en sub problemas que se resuelven a su vez por enumeración exhaustiva utilizando CONPT3 para resolver los PNLs. La función objetivo COE se minimiza para las dos opciones de configuración (i.e., combustión con aire y oxicomustión) considerando diferentes valores del precio del permiso de emisión en el mercado (i.e., P^{CO_2}). Cabe destacar que dada la naturaleza no convexa del problema, no se puede ofrecer ninguna garantía teórica de convergencia al óptimo global. Por ello, las soluciones generadas en este caso de estudio deben ser considerados como óptimos locales.

Los parámetros básicos para el caso de estudio se muestran en la Tabla 2.10. El carbón utilizado es bituminoso con contenido medio en azufre (i.e., Appalachian Medium Sulfur) como

en el caso de estudio anterior (ver Tabla 2.7) con un coste de 45.24 \$/t. Para la configuración OXI se asume un sistema de reciclado de gases en seco con un reciclaje del 75% de los gases.

Tabla 2.10. Parámetros definidos para el caso de estudio

Parámetro	Valor
Tamaño de la planta - MW (MW)	500
Tiempo de operación - FT (h/year)	8000
Vida útil de los equipos - n_i (años)	20
Tasa de interés - i_{rate}	0.07
Eff. eliminación OXI - $\eta^{OXI}_{CO_2}$ (%)	90
Eff. eliminación CCPC - $\eta^{CCPC}_{CO_2}$ (%)	90
Eff. eliminación SCR - $\eta^{SCR}_{NO_x}$ (%)	90

Se han estudiado varios escenarios (Tabla 2.11) que cubren el amplio rango de posibles situaciones futuras con respecto al número de permisos de emisión gratuitos asignados a una planta de carbón. Para el cálculo la cantidad máxima posible de permisos de emisión se utiliza la referencia de la MTD, que supone para una planta de carbón pulverizado subcrítica una emisión de 0.92 tCO₂/MWh. Respecto a la cantidad de permisos gratuitos asignados, se consideran valores que van desde el 70%, que es el máximo esperado para países que pueden desviarse de la regla general de que la subasta será el único método para el sector eléctrico, al mínimo (i.e., 0%) que es el escenario más probable para los países desarrollados en 2013.

Tabla 2.11. Escenarios definidos para el caso de estudio

Escenario	Permisos de emisión asignados (%)	Permisos de emisión asignados (x10 ⁵ tCO ₂ eq/año)
1	0	0
2	25	9.2
3	50	18.4
4	70	25.8

Las Figuras 2.15–2.18 muestran los resultados obtenidos con el modelo *MARKET*. Concretamente, cada figura muestra para cada escenario y para cada estrategia de combustión (i.e., combustión con aire u oxicomustión), el coste de la electricidad resultante para diferentes precios del permiso de emisión de CO₂ en el ETS. Como se puede comprobar, las estrategias de gestión de carbono en la planta tienen similar comportamiento en todos los escenarios. Así, existe una zona de la curva donde la mejor estrategia es comprar los permisos de emisión en el mercado evitando la instalación de tecnologías limpias. A medida que aumenta

el precio de los permisos de emisión de CO₂ se alcanza un punto en el que el modelo decide capturar NO_x reduciendo el bypass en el SCR (incrementando el factor de recuperación RR_{CO_2eq}) y comprar a la vez el resto de permisos que exceden el límite establecido. Finalmente, con una mayor subida del precio de CO₂ llegamos a un tercer punto que conlleva la instalación de tecnologías de captura de CO₂.

En este punto, para poder seguir con la discusión, es importante introducir dos métricas ampliamente reconocidas: el coste de CO₂ evitado (*COA*) y el precio indicador (*IP*). El *COA* se usa a menudo para comparar tecnologías de captura instaladas en procesos con alta intensidad energética, y como se puede ver en la Figura 2.14, tiene en cuenta la reducción de emisiones de CO₂eq por unidad de energía neta producida.

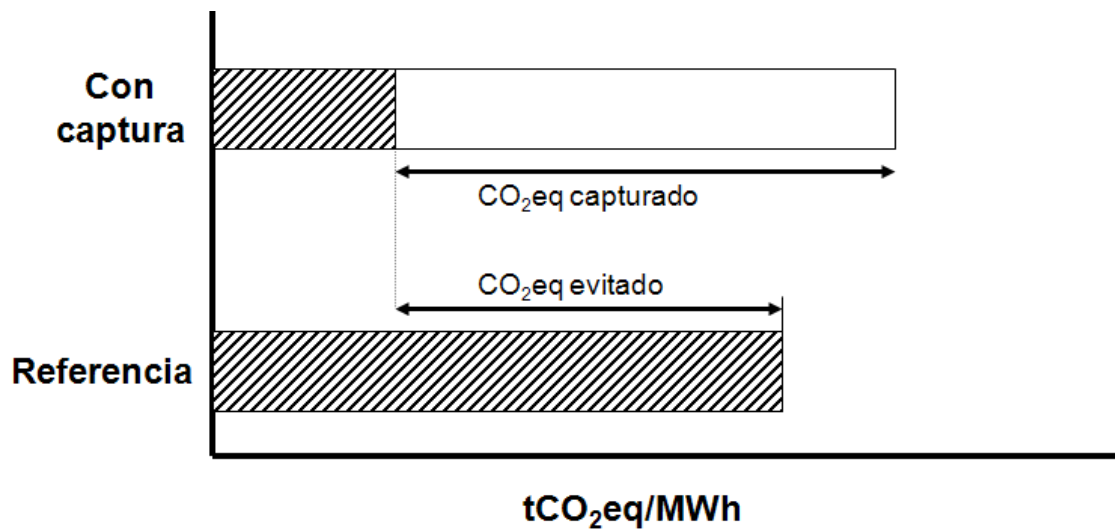


Figura 2.14: Cálculo del CO₂ evitado usando una tecnología de captura

Por tanto el *COA* se calcula como se muestra en la Eq. 2.31 y se mide en \$/tCO₂eq evitado:

$$COA = \frac{COE_{captura} - COE_{referencia}}{Emisiones_{referencia} - Emisiones_{captura}} \quad (2.31)$$

donde $COE_{captura}$ es el coste de la electricidad cuando la tecnología de captura de CO₂ está instalada y $COE_{referencia}$ es el coste de la electricidad de la planta de referencia, ambos medidos en \$/MWh. $Emisiones_{referencia}$ y $Emisiones_{captura}$ contabilizan las emisiones de CO₂eq por unidad de energía producida (i.e., tCO₂eq/MWh) en la planta de referencia y en la planta con captura, respectivamente. Para los cálculos, se considera como planta de referencia a la planta de carbón sin instalar el SCR y la captura de CO₂ (con un $COE_{referencia}$ y un $Emisiones_{referencia}$ de 16.27 \$/MWh y 1.09 tCO₂eq/MWh, respectivamente). En la Tabla 2.12 se muestran los valores calculados para cada tecnología.

Tabla 2.12. Coste de CO₂ evitado para cada tecnología de captura

Tecnología	COA (\$/tCO ₂ eq evitado)
CCPC	47
OXI	28

El precio indicador (IP_i), introducido por Ehrhart et al. (2003), es el nivel al que tienen que llegar los permisos de emisión en el mercado para que la tecnología limpia i sea rentable (es decir, que se instale en la planta).

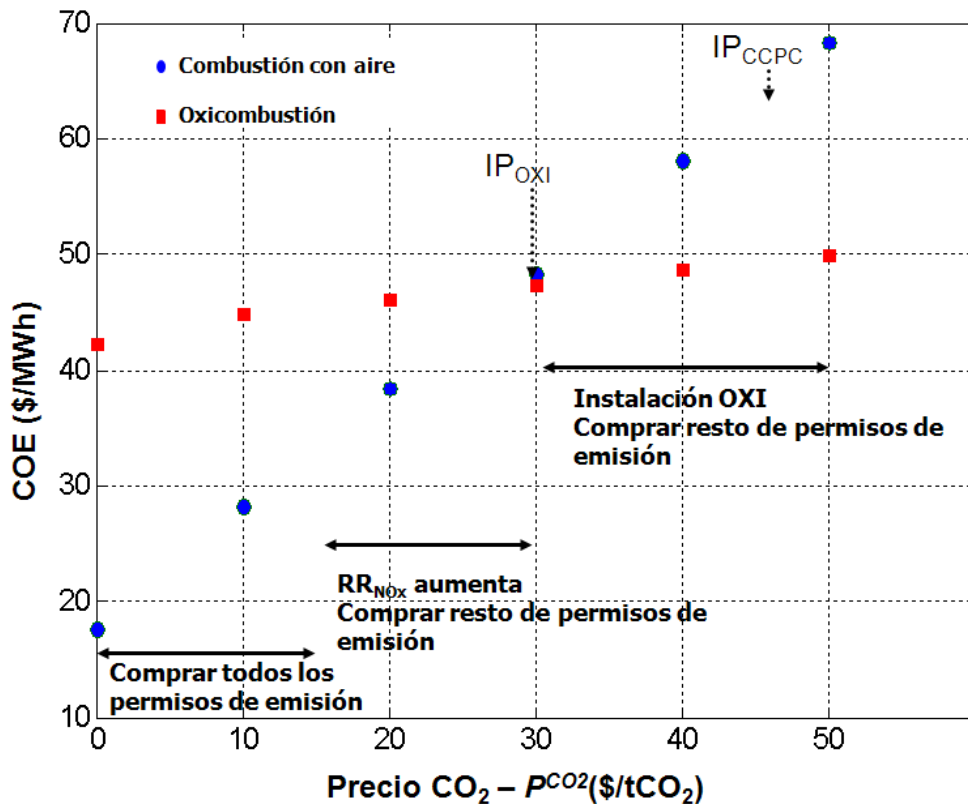


Figura 2.15: Implementación de estrategias de gestión de CO₂eq dependiendo del precio de CO₂ en el ETS para el escenario 1.

Así, para el escenario 1 (Fig. 2.15) donde no se distribuye ningún permiso de emisión gratuitamente, el IP de las dos tecnologías de captura concuerda con el valor mostrado en la Tabla 2.12. La planta será actualizada con la tecnología limpia cuando el coste de evitar una tonelada de CO₂eq usando esa tecnología iguale el valor del permiso de emisión en el mercado. Como se puede ver en la Tabla 2.13, la mejor opción cuando el precio de los derechos de emisión está por debajo de los 15 \$ es comprarlos en el mercado. En esa solución, el diseño de la configuración incluye la instalación del SCR para cumplir con la legislación impuesta en las emisiones de NO_x, pero solo está diseñado para tratar el 28% de la corriente de gases mientras que el resto pasa por el bypass. A partir de 15 \$, el modelo reduce la cantidad de permisos comprados ya que incrementa el factor de recuperación de NO_x (reduciendo el bypass en el

SCR). Finalmente, la tecnología OXI se instala para precios de aproximadamente 30 \$/tCO₂. La configuración en este caso, que es igual a la mostrada en la Fig. 2.13B, implementa las tecnologías de OXI y SCR. El cambio en la tasa de recuperación en las soluciones óptimas (celdas sombreadas) de 10.5% a 90% se debe a la instalación de la tecnología de captura que elimina el 90% del CO₂. Además, la cantidad de permisos adquiridos en el mercado disminuye de 39.17 a 3.72 (x10⁵) t/año ya que la tecnología de captura permite la reducción de ese número de emisiones. El *IP* del CCPC tiene un valor en torno a los 45 \$, lo que indica que esta tecnología nunca será preferida a la de OXI para la captura de CO₂.

Tabla 2.13. Soluciones óptimas para el escenario 1*

p ^{CO2} (\$/tCO ₂)	Combustión con aire				Oxicombustión			
	COE (\$/MWh)	Buy ^{CO2} (x10 ⁵ t/año)	Sale ^{CO2} (x10 ⁵ t/año)	RR _{CO2eq} (%)	COE (\$/MWh)	Buy ^{CO2} (x10 ⁵ t/año)	Sale ^{CO2} (x10 ⁵ t/año)	RR _{CO2eq} (%)
0	17.55	42.48	0	3	42.29	4.99	0	86.6
10	28.18	42.48	0	3	44.76	3.72	0	90
20	38.36	39.17	0	10.5	46.05	3.72	0	90
30	48.2	39.17	0	10.5	47.34	3.72	0	90
40	58.03	39.17	0	10.5	48.62	3.72	0	90
50	68.27	4.4	0	90	49.91	3.72	0	90

*Las soluciones óptimas del conjunto están sombreadas en la tabla

Para los escenarios 2, 3 y 4, en los que cierta cantidad de permisos de emisión son entregados gratuitamente a la planta, el *IP* para CCPC y OXI cambia. A mayor cantidad de permisos adjudicados, el *IP* de las tecnologías es menor. Así, para OXI, el *IP* pasa de 30 \$ en el escenario 1 a 22 \$ en el escenario 4 (donde el 70% de las emisiones son gratuitas). En el caso del CCPC, la bajada del *IP* es más pronunciada, pasando de 45 \$ en el escenario 1 a 31 \$ en el escenario 4. La instalación de las tecnologías de captura de CO₂ en los casos en que se asignan permisos gratuitos permite a la planta reducir las emisiones por debajo del límite impuesto y vender esa cantidad de permisos en el mercado. Esto conlleva valores del *COE* más bajos como se puede observar en las Tablas 2.14, 2.15 y 2.16.

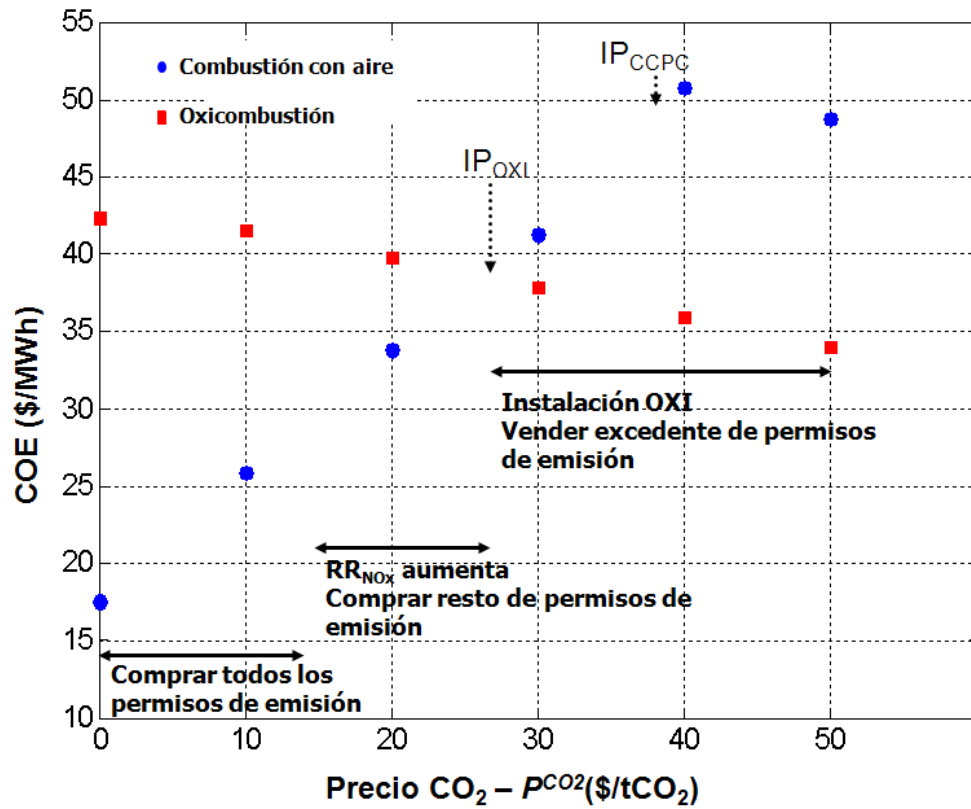


Figura 2.16: Implementación de estrategias de gestión de CO₂eq dependiendo del precio de CO₂ en el ETS para el escenario 2.

Tabla 2.14. Soluciones óptimas para el escenario 2*

P ^{CO₂} (\$/tCO ₂)	Combustión con aire				Oxidación			
	COE (\$/MWh)	Buy ^{CO₂} (x10 ⁵ t/año)	Sale ^{CO₂} (x10 ⁵ t/año)	RR _{CO₂eq} (%)	COE (\$/MWh)	Buy ^{CO₂} (x10 ⁵ t/año)	Sale ^{CO₂} (x10 ⁵ t/año)	RR _{CO₂eq} (%)
0	17.55	33.28	0	3	42.29	0	4.21	86.6
10	25.88	33.28	0	3	41.59	0	5.48	90
20	33.75	29.97	0	10.5	39.7	0	5.48	90
30	41.27	29.97	0	10.5	37.8	0	5.48	90
40	50.74	0	4.82	90	35.91	0	5.48	90
50	48.69	0	4.82	90	34.02	0	5.48	90

*Las soluciones óptimas del conjunto están sombreadas en la tabla

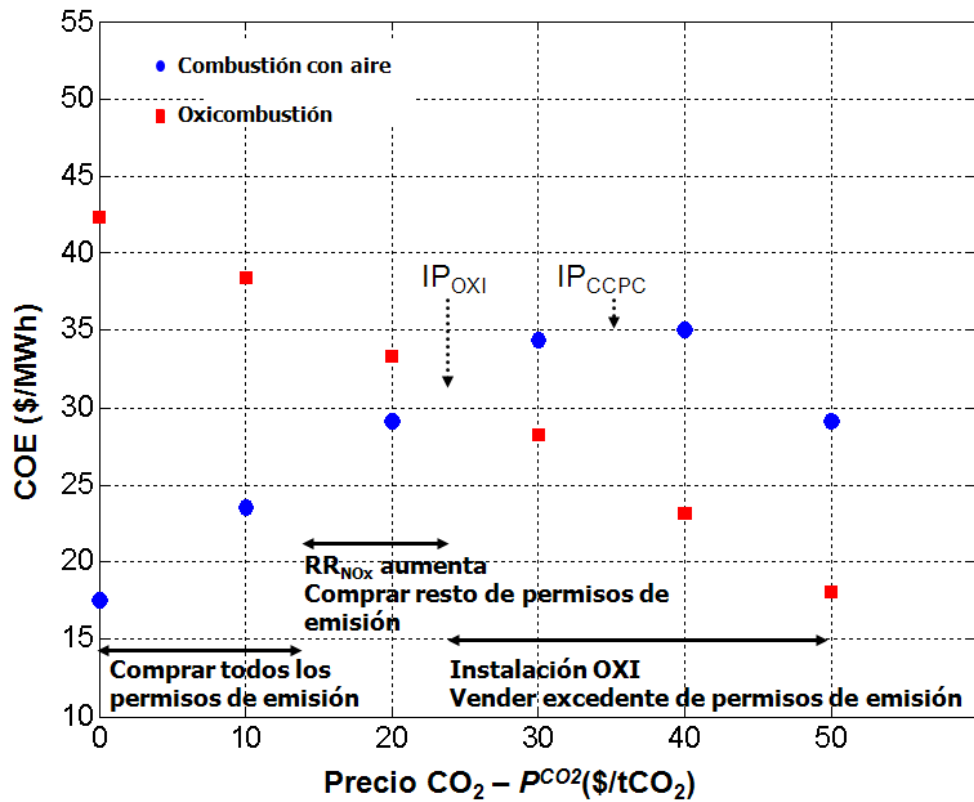


Figura 2.17: Implementación de estrategias de gestión de CO₂eq dependiendo del precio de CO₂ en el ETS para el escenario 3.

Tabla 2.15. Soluciones óptimas para el escenario 3*

p ^{CO2} (\$/tCO ₂)	Combustión con aire				Oxidación			
	COE (\$/MWh)	Buy ^{CO2} (x10 ⁵ t/año)	Sale ^{CO2} (x10 ⁵ t/año)	RR _{CO2eq} (%)	COE (\$/MWh)	Buy ^{CO2} (x10 ⁵ t/año)	Sale ^{CO2} (x10 ⁵ t/año)	RR _{CO2eq} (%)
0	17.55	24.08	0	3	42.29	0	13.41	86.6
10	23.58	24.08	0	3	38.41	0	14.68	90
20	29.13	20.77	0	10.5	33.34	0	14.68	90
30	34.34	20.77	0	10.5	28.27	0	14.68	90
40	35.08	0	14.02	90	23.2	0	14.68	90
50	29.11	0	14.02	90	18.13	0	14.68	90

*Las soluciones óptimas del conjunto están sombreadas en la tabla

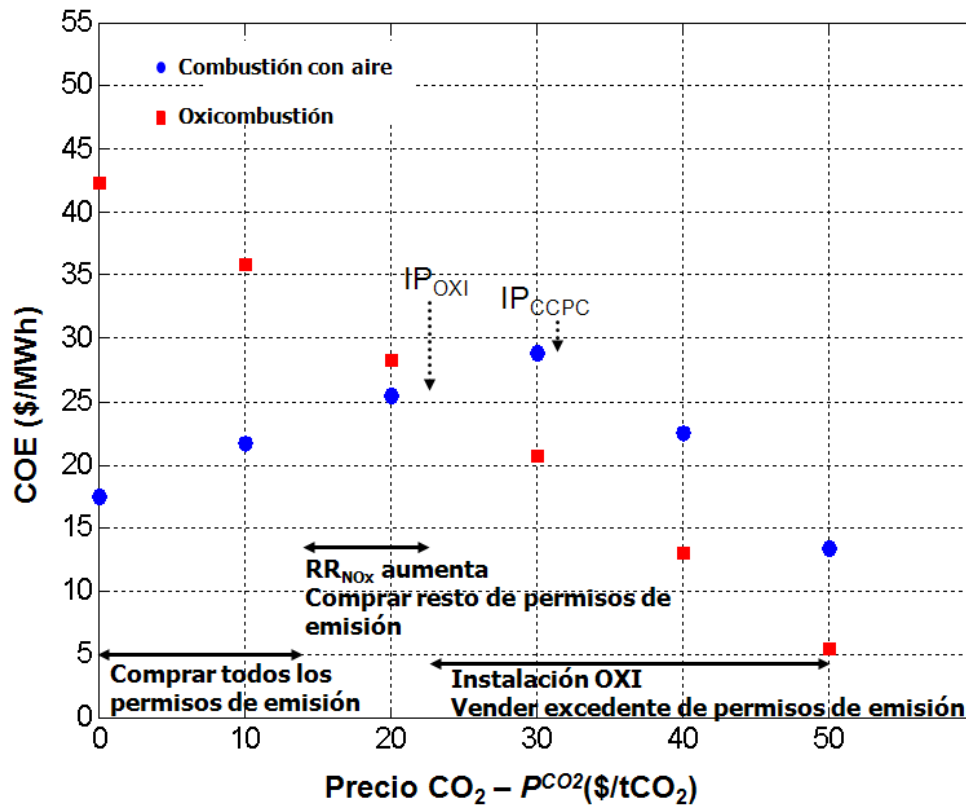


Figura 2.18: Implementación de estrategias de gestión de CO₂eq dependiendo del precio de CO₂ en el ETS para el escenario 4.

Tabla 2.16. Soluciones óptimas para el escenario 4*

p ^{CO₂} (\$/tCO ₂)	Combustión con aire				Oxidación			
	COE (\$/MWh)	Buy ^{CO₂} (x10 ⁵ t/año)	Sale ^{CO₂} (x10 ⁵ t/año)	RR _{CO₂eq} (%)	COE (\$/MWh)	Buy ^{CO₂} (x10 ⁵ t/año)	Sale ^{CO₂} (x10 ⁵ t/año)	RR _{CO₂eq} (%)
0	17.55	16.72	0	3	42.29	0	20.77	86.6
10	21.74	16.72	0	3	35.87	0	22.04	90
20	25.43	13.41	0	10.5	28.26	0	22.04	90
30	28.8	13.41	0	10.5	20.65	0	22.04	90
40	22.55	0	21.38	90	13.03	0	22.04	90
50	13.45	0	21.38	90	5.42	0	22.04	90

*Las soluciones óptimas del conjunto están sombreadas en la tabla

Como muestran los resultados, la selección de la estrategia óptima que minimiza el coste de la electricidad producida, en el contexto de un mercado de emisiones, depende del precio del permiso de emisión. Se ha visto que la tecnología de oxidación presenta un *IP* más bajo en

todos los escenarios, por lo que es más efectiva respecto al coste que la CCPC y por tanto será preferida por los inversores.

También cabe destacar que la cantidad de derechos de emisión emitidos gratuitamente en el PNA tiene gran influencia en el *IP* de las tecnologías de captura, siendo éste menor cuanto mayor es la cantidad de permisos asignada. Un menor *IP* puede facilitar la decisión de invertir en tecnologías limpias.

Los resultados mostrados en este apartado de la tesis no pretenden disuadir a posibles inversores en CCS, sino mostrar el precio que incentivará el uso de la captura de CO₂ (como contramedida a simplemente pagar el precio de emisión de CO₂ en el mercado) y que servirá como objetivo a alcanzar por la tecnología. Además, se debe resaltar el importante papel que las tecnologías de CCS juegan a nivel global en la mitigación del cambio climático. Así, un estudio de análisis de ciclo de vida del proceso de producción de electricidad a partir del carbón (incluyendo extracción de materias primas, transporte, combustión y tratamiento de aguas y residuos) revela que la etapa de combustión representa el 88% de las emisiones de tCO₂eq/MWh (Cristóbal et al., 2010). De acuerdo a esto, el uso de OXI y CCPC tiene el potencial de reducir las emisiones del ciclo de vida del proceso de 1.26 tCO₂eq/MWh a aproximadamente 0.26 tCO₂eq/MWh (lo que supone un 78.6% de reducción). Si vemos el dato de producción mundial de electricidad usando como materia prima el carbón, es de 8119 TWh. Por tanto, el uso de CCS en plantas de carbón podría evitar 8119 millones de toneladas de CO₂, lo que representa el 27.5% del total de las emisiones de CO₂ mundial (i.e., 29549.3 MtCO₂) (IEA, 2012d).

2.5. Influencia de la incertidumbre en el precio del CO₂

En el apartado anterior se analiza la influencia que tiene la inclusión del ETS y el precio del CO₂ en la elección de la tecnología de captura, así como el precio indicador que las hace económicamente viables usando un enfoque determinista y estático. La totalidad de los modelos presentados en nuestros trabajos (Cristóbal et al., 2012a,b,c) son deterministas, es decir, asumen que todos los parámetros se conocen previamente y no tienen variabilidad. Sin embargo, en la práctica, algunos parámetros presentan incertidumbre en sus valores debido a la imprecisión en la toma de datos o a que en parte son desconocidos. No tener en cuenta esa incertidumbre puede dar soluciones demasiado optimistas que subestiman el impacto negativo de escenarios no deseables (pero posibles).

Por tanto, para obtener soluciones más realistas, en este apartado de la tesis se estudia el impacto económico del ETS con un enfoque dinámico y teniendo en cuenta la incertidumbre en los futuros precios de los permisos de emisión. Este enfoque introduce nuevos elementos de riesgo, como por ejemplo el riesgo financiero, que habrá que tener en cuenta a la hora de tomar decisiones en cuanto a la inversión en tecnologías de captura.

Así, en este caso de estudio se trata el problema de actualizar una planta de carbón, en un horizonte temporal de 20 años dividido en 20 periodos t de 1 año (ΔT), que debe decidir entre comprar permisos de emisión de CO_2 en el ETS, considerando explícitamente la incertidumbre en su precio, o instalar una unidad de captura postcombustión (CCPC) para reducir las emisiones de GHG.

Como se puede observar en la Fig. 2.19 el problema se formula como un PLEM, donde el parámetro considerado incierto (i.e., precio del CO_2 (P^{CO_2})) se describe a través de escenarios s con una probabilidad de ocurrencia conocida y generados utilizando técnicas de Monte Carlo y con una dinámica estocástica de crecimiento de los precios basada en el movimiento Browniano geométrico (GBM). El principal objetivo del modelo estocástico multi-periodo es determinar el momento óptimo de inversión y las decisiones de operación que maximizan el valor esperado de las ganancias al vender el producto ($E[TNP]$) y que minimizan el riesgo asociado medido a través del riesgo de pérdida ($DRisk$), que permite controlar la probabilidad de escenarios desfavorables. Ambos objetivos son conflictivos (i.e., no se puede mejorar uno sin necesariamente empeorar el otro) y por tanto la solución al problema vendrá dada por un conjunto de soluciones de Pareto, que forman el frente de Pareto, de entre las cuales debe salir la mejor alternativa de acuerdo a las preferencias de la persona que toma la decisión.

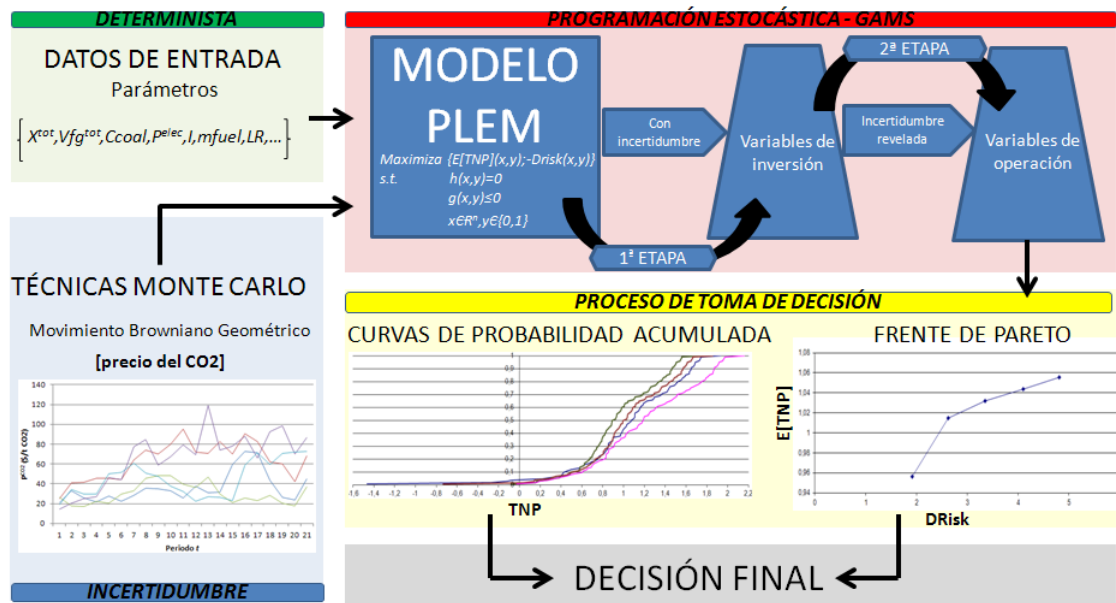


Figura 2.19: Enfoque general del caso de estudio

Como se ha comentado en la sección 2.1.3. y se muestra en la Fig. 2.19 las decisiones se clasifican en dos grupos: de primera y de segunda etapa. Las primeras, también llamadas decisiones "aquí y ahora", se toman antes de que la incertidumbre se resuelva, mientras que las segundas, decisiones "esperar y ver", se toman una vez la incertidumbre se materializa. En nuestro caso de estudio, todas las decisiones son de primera etapa excepto la cantidad de gas tratado en la unidad de captura de CO_2 y la cantidad de permisos de emisión que se compran o

venden en el ETS, que se deciden una vez que la incertidumbre ha sido revelada (i.e., cuando se sabe el precio del CO₂ en el ETS).

2.5.1. Modelo matemático

La formulación matemática del modelo se muestra en detalle en esta sección. Las ecuaciones están divididas en cuatro grupos: balance de masas, restricciones de capacidad, función objetivo y métrica de riesgo.

➤ Balance de masas

Para la unidad de captura CCPC, se considera la opción de un bypass que permite que, una vez instalada la unidad, se pueda utilizar a su capacidad completa o un porcentaje de acuerdo a las necesidades. El balance de masas para la unidad de captura para todo periodo t y escenario s se muestra en las Eq. 2.32 – 2.36. La variable continua $Bypass_{t,s}$ medida en % controla la cantidad de CO₂ y caudal de gases que entra en el equipo ($X_{t,s}^{in}$, $Vfg_{t,s}^{in}$, medidos en t/año y m³/año, respectivamente).

$$X_{t,s}^{in} = X^{tot} Bypass_{t,s} \quad \forall t, s \quad (2.32)$$

$$X_{t,s}^{free} = X^{tot} - X_{t,s}^{in} \quad \forall t, s \quad (2.33)$$

$$X_{t,s}^{out} = X_{t,s}^{in} (1 - (\eta_{CO_2}^{CCPC} / 100)) \quad \forall t, s \quad (2.34)$$

$$X_{t,s}^{emit} = X_{t,s}^{out} + X_{t,s}^{free} \quad \forall t, s \quad (2.35)$$

$$Vfg_{t,s}^{in} = Vfg^{tot} Bypass_{t,s} \quad \forall t, s \quad (2.36)$$

El balance de masa total de CO₂ debe satisfacerse para todo el sistema. Considerando el ETS, el balance total se muestra en la Eq. 2.37:

$$X_{CO_2,t,s}^{emit} = Max^{CO_2} + Buy_{t,s}^{CO_2} - Sale_{t,s}^{CO_2} \quad \forall t, s \quad (2.37)$$

➤ Restricciones de capacidad

La capacidad de la tecnología de captura, medida en m³/año, se representa por la variable continua CAP . La capacidad disponible en el periodo t para tratar los gases de combustión es igual a la capacidad instalada en el periodo previo sumada a la expansión en capacidad ejecutada en ese periodo (QE), como se muestra en la Eq. 2.38.

$$CAP_t = CAP_{t-1} + QE_t \quad \forall t \quad (2.38)$$

Es importante señalar que esta restricción no depende del escenario, ya que las decisiones que atañen a la capacidad deben tomarse previas a la resolución de la incertidumbre.

La Eq. 2.39 obliga a que el volumen de gas tratado (Vfg) no exceda la capacidad instalada en cada periodo:

$$Vfg_{t,s}^{in} \leq CAP_t \quad \forall t, s \quad (2.39)$$

La Eq. 2.40 limita la capacidad de expansión entre los límites superior e inferior definidos acorde a las Eq. 2.41 y 2.42, respectivamente, en caso que la tecnología sea finalmente instalada. La variable binaria Y_t usada en estas expresiones modela la instalación de la tecnología y toma el valor 1 en caso en que la unidad de captura sea instalada en el periodo t y 0 en caso contrario.

$$Y_t \underline{QE}_t \leq QE_t \leq Y_t \overline{QE}_t \quad \forall t \quad (2.40)$$

$$\underline{QE}_t = Vfg_t^{tot} \tau \quad \forall t \quad (2.41)$$

$$\overline{QE}_t = Vfg_t^{tot} \quad \forall t \quad (2.42)$$

donde τ indica el porcentaje mínimo deseado del total de la capacidad de la tecnología que debería ser instalado.

Se define la variable binaria $Z_{t,s}$ (Eq. 2.43) para modelar la operación de la tecnología en el periodo t y el escenario s . Esta variable binaria toma el valor de 1 en caso que la tecnología está operativa en un periodo y 0 en caso contrario.

$$Z_{t,s} Vfg^{tot} \lambda \leq Vfg_{t,s}^{in} \leq Z_{t,s} Vfg^{tot} \quad \forall t \quad (2.43)$$

donde λ indica el porcentaje mínimo deseado de la capacidad instalada de la tecnología que debería ser utilizada.

➤ Función objetivo

El modelo busca optimizar dos funciones objetivo económicas (ambas medidas en \$): el valor esperado de las ganancias ($E[TNP]$) y una métrica que contabiliza el riesgo. Para cada escenario s el modelo muestra un rendimiento económico diferente, por lo que el modelo busca maximizar el valor esperado de la distribución resultante que se determina según la ecuación 2.44:

$$E[TNP] = \sum_s pr_s TNP_s \quad (2.44)$$

donde pr_s es la probabilidad de ocurrencia del escenario s y TNP_s representa las ganancias totales que se consiguen en el mismo escenario. Este último término se calcula en la Eq. 2.45 como el sumatorio de las ganancias generadas en cada periodo t y que en cada escenario particular se calcula como la diferencia entre los beneficios (TNB) y los costes (TNC).

$$TNP_s = \sum_t \frac{TNB_{t,s} - TNC_{t,s}}{(1 + i_{rate})^t} \quad \forall s \quad (2.45)$$

Los beneficios vienen dados por dos términos como se muestra en la Eq. 2.46. El primero denota los ingresos obtenidos de vender la electricidad neta producida (MWh/año). Ésta se calcula como la energía producida (E_{gen}), Eq. 2.47, menos la energía consumida por la tecnología de captura (E_{pen}), Eq. 2.48, y multiplicado por el precio nominal de la electricidad en el mercado (P^{elec}) en \$/MWh. El segundo término contabiliza los ingresos debidos a la venta de derechos de emisión sobrantes en el ETS, cuando existen ($sale^{CO_2}$), multiplicados por el precio de CO₂ en el ETS (P^{CO_2}) que es incierto.

$$TNB_{t,s} = (E_{gen} - E_{pen_{t,s}})P^{elec} + sale_{t,s}^{CO_2} P_{t,s}^{CO_2} \quad \forall t, s \quad (2.46)$$

$$E_{gen} = MWFT \quad (2.47)$$

$$E_{pen_{t,s}} = (10.696Vfg_{t,s}^{in} + 0.0002Z_{t,s})FT \quad \forall t, s \quad (2.48)$$

En cuanto a los costes, son varios los considerados en el modelo como se muestra en la Eq. 2.49.

$$TNC_{t,s} = C_{inv_t} + C_{oper_{t,s}} + C_{fuel} + buy_{t,s}^{CO_2} P_{t,s}^{CO_2} \quad \forall t, s \quad (2.49)$$

C_{inv} representa el coste de inversión en el periodo t (siempre y cuando la tecnología de captura sea instalada y se realice una expansión de la capacidad (QE_t - medido en $\times 10^9$ m³/año)). Para determinar su valor en el CCPC, se ha utilizado una simplificación del modelo técnico-económico presentado en Rao y Rubin (2002). Además, se aplican curvas de aprendizaje para tener en cuenta la reducción de costes de la tecnología en el futuro, como se muestra en la Eq. 2.50.

$$C_{inv_t} = (3 \times 10^7 QE_t + 3 \times 10^7 Y_t) Cum_t^{-d_{inv}} \quad \forall t \quad (2.50)$$

donde Cum_t es la capacidad acumulada mundial de esta tecnología en el periodo t y d_{inv} es el parámetro específico de experiencia para costes de inversión en CCPC. Esta ecuación se discute en mayor detalle en siguientes secciones.

Los costes de operación y mantenimiento (C_{oper}) se calculan de forma similar a C_{inv} como se muestra en la Eq. 2.51, pero en este caso como función del volumen de gases que se tratan en el equipo (Vfg - medido en m³/año). El último término de la ecuación denota la curva de aprendizaje para los costes de operación de la tecnología CCPC como función de la capacidad acumulada mundial de esta tecnología en el periodo t (Cum_t) y el parámetro específico de experiencia para costes de operación ($d_{O\&M}$).

$$Coper_{t,s} = (1 \times 10^6 Vfg_{t,s}^{in} + 2 \times 10^6 Z_{t,s}) Cum_t^{-d_{O\&M}} \quad \forall t \quad (2.51)$$

El coste de fuel ($Cfuel$) se calcula como se muestra en la Eq. 2.52, y depende de la cantidad de fuel utilizado ($mfuel$) medido en t/h, las horas de funcionamiento de la planta (FT) en h/año y del coste de la materia prima ($Ccoal$) en \$/t, todos ellos considerados parámetros del problema.

$$Cfuel = mfuel Ccoal FT \Delta T \quad (2.52)$$

Finalmente, el esquema ETS fuerza a la planta a interactuar en el mercado de emisiones, por lo que el último término de la Eq. 2.49, se refiere al coste de los permisos de emisión que la planta necesite comprar en el ETS, calculado como la cantidad de permisos (Buy^{CO_2}) multiplicado por su precio (P^{CO_2}).

o *Modelo de costes de la tecnología de captura de CO₂*

La instalación y operación de la tecnología de captura CCPC conlleva unos requerimientos de inversión de capital (TCI) y unos gastos de operación (TOM), respectivamente. Además, una vez la tecnología está operando, el calor utilizado para la regeneración del solvente en el proceso de captura se obtiene de la propia planta por lo que se reduce la energía producida (EPT).

Como se ha comentado anteriormente, el modelo técnico-económico está basado en el presentado por Rao y Rubin (2002). Para simplificar el estudio se ha realizado una regresión lineal para obtener el TCI , TOM y EPT como función del tamaño de la planta, representado por la capacidad de expansión (QE) en el caso del coste de inversión (Eq. 2.53), y del volumen de gas tratado (Vfg^{in}) en el caso de las variables de operación (Eq. 2.54 – 2.55). Para estas aproximaciones se han obtenido coeficientes de regresión (R^2) mayores del 0.995.

$$TCI = 3 \times 10^7 QE + 3 \times 10^7 \quad (2.53)$$

$$TOM = 1 \times 10^6 Vfg^{in} + 2 \times 10^6 \quad (2.54)$$

$$EPT = 10.696 Vfg^{in} + 0.0002 \quad (2.55)$$

Cabe destacar que estas ecuaciones se han usado en nuestro modelo para calcular $Cinv$, $Coper$ y $Epen$ (Eq. 2.50, 2.51 y 2.48, respectivamente).

o *Curvas de aprendizaje*

Para la estimación de costes futuros, es importante tener en cuenta la mejora tecnológica que se produce con el paso del tiempo debido a la experiencia adquirida con la instalación de más unidades (“aprender haciendo”), y la consecuente reducción en los costes tanto de inversión como de operación, que se integra en el estudio a través del uso de curvas de aprendizaje (Rubin et al., 2007c; Li et al., 2012). Estas curvas se calculan por analogía con las reducciones

que han ocurrido en el pasado con tecnologías limpias similares (i.e., SCR y FGD). En las Eq. 2.56 – 2.58 se muestra una formulación general de las curvas de aprendizaje, donde el coste de la última unidad instalada (C_{cum}) depende del coste de la primera unidad instalada (C_0), de la cantidad acumulada de unidades instaladas a nivel mundial (número de duplicación de unidades) (Cum) y del índice de experiencia (d).

$$C_{cum} = C_0 Cum^{-d} \quad (2.56)$$

$$2^{-d} = PR \quad (2.57)$$

$$PR = 1 - LR \quad (2.58)$$

donde PR es el ratio de progreso y LR es la tasa de aprendizaje que indica la velocidad de la reducción de costes con cada duplicación de la producción acumulada. Este enfoque se ha utilizado en las Eq. 2.50 y 2.51. El incremento en capacidad instalada a nivel mundial de CCPC se considera constante, así como la capacidad instalada final después del horizonte temporal de estudio (i.e., 20 años) que es de 100 GW como sucedió con FGD y SCR. Además, se considera un mínimo de capacidad mundial instalada (i.e., 5 GW) por debajo del cual la reducción de costes por aprendizaje no se aplica (Rubin et al., 2007c).

o *Modelo de la dinámica de precios del CO₂*

Un punto importante a tener en cuenta en el modelo es el de cómo generar escenarios realistas con el parámetro incierto (i.e., precio del CO₂) teniendo en cuenta que el EU-ETS empezó a funcionar en 2005 y los datos disponibles son escasos. Por ello se usa un modelo para la dinámica de precios basado en el GBM, que comúnmente en la literatura se usa para modelar el comportamiento del precio de activos y que se puede usar para los permisos de emisiones debido a sus similitudes (Rammerstorfer y Eisl, 2011). Otros modelos son posibles para la dinámica de precios (Cristóbal et al., 2013).

La Eq. 2.59 muestra la ecuación diferencial estocástica que define un GBM.

$$dP_t^{CO_2} = \mu P_t^{CO_2} dt + \sigma P_t^{CO_2} dW_t \quad (2.59)$$

donde P^{CO_2} es el precio del permiso de emisión en el ETS, μ es el parámetro de deriva o "drift", σ es el parámetro de volatilidad y dW_t es el incremento de un proceso de Wiener. El logaritmo natural del precio futuro del permiso de emisión sigue una distribución normal (i.e., variable aleatoria log-normal). La ecuación diferencial tiene la solución analítica presentada en la Eq. 2.60 para un incremento de tiempo ΔT , que se usa en nuestro modelo para generar las diferentes evoluciones de precios de CO₂ en los diferentes escenarios. ξ responde a una variable aleatoria independiente con distribución normal $N(0,1)$.

$$P_{t+\Delta T}^{CO_2} = P_t^{CO_2} \exp \left[\left(\mu - \frac{\sigma^2}{2} \right) \Delta T + \sigma \sqrt{\Delta T} \xi \right] \quad (2.60)$$

Con la aplicación de técnicas de muestreo Monte Carlo a esta distribución es posible generar un conjunto de escenarios con igual probabilidad de ocurrencia que son usados en el PLEM para describir el parámetro incierto.

➤ Métrica de riesgo

Las inversiones en el ETS suelen ser arriesgadas debido a la incertidumbre en la regulación y a la alta volatilidad en los precios del CO₂ (Hoffmann, 2007). Debido a que las inversiones en el sector eléctrico son altamente irreversibles, es importante para los inversores a la hora de tomar decisiones evaluar los riesgos asociados, que principalmente vienen de la incertidumbre en el precio futuro del permiso de emisión.

Los modelos estocásticos estándar tratan de controlar el riesgo optimizando el valor esperado de la distribución objetivo (ver la discusión en Guillén et al. (2005)). Pero esta estrategia no permite controlar la variabilidad de la función objetivo en el espacio incierto del parámetro. Para superar esta dificultad, se hace uso de una métrica de riesgo que permite controlar el riesgo financiero de la inversión. Así, el riesgo financiero es entendido como la probabilidad de no alcanzar cierto nivel de ganancias representado por Ω (Barbaro y Bagajewicz, 2004). Esta métrica se puede calcular añadiendo variables binarias auxiliares que son dependientes del escenario. Pero para facilitar la computación, se usan en su lugar el riesgo de pérdida (*DRisk*), que tiene la propiedad de que sólo requiere variables continuas (Eq. 2.61 – 2.63), evitando así la definición de más variables binarias.

$$DRisk(\alpha, \Omega) = \sum_s pr_s \delta_s(\alpha, \Omega) \quad (2.61)$$

$$\delta_s(\alpha, \Omega) \geq \Omega - TNP_s \quad \forall s \quad (2.62)$$

$$\delta_s(\alpha, \Omega) \geq 0 \quad \forall s \quad (2.63)$$

donde $DRisk(\alpha, \Omega)$ es el riesgo financiero asociado con la solución α y un objetivo de ganancias Ω y δ_s es una variable continua auxiliar.

Por tanto, el modelo PLEM *UNCERATIN* se formula matemáticamente de la siguiente forma:

$$\begin{array}{l} \max_{x,y} \\ \text{suje}to \ a \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \{ E[TNP]; -DRisk \} \\ Eqs.(2.32) - (2.52), (2.60) - (2.63) \end{array} \right\} \quad (\text{UNCERTAIN})$$

2.5.2. Método de resolución y resultados

Las soluciones de Pareto se obtienen aplicando el método de restricción ϵ . El problema auxiliar resultante de mantener un objetivo mientras el otro es transferido al conjunto de restricciones se muestra a continuación:

$$\begin{array}{l} \max_{x,y} \quad \{ E[TNP] \} \\ \text{suje}to \quad a \quad \left. \begin{array}{l} Eqs.(2.32) - (2.52), (2.60) - (2.63) \\ DRisk(\alpha, \Omega) \leq \epsilon \end{array} \right\} \quad (\text{UNCERTAIN}) \end{array}$$

La Tabla 2.17 resume la metodología usada para solucionar el problema propuesto.

Tabla 2.17. Resumen de la metodología

<ul style="list-style-type: none"> • Generar los 100 escenarios equiprobables utilizando técnicas Monte Carlo de muestreo (usando Eq. 2.60), cada uno correspondiente a una materialización diferente del parámetro incierto (i.e., precio del CO₂ en el ETS) • Optimizar los objetivos por separado para obtener los límites superior e inferior del intervalo en el que estará el parámetro ϵ • Dividir el intervalo de ϵ en subintervalos de igual longitud • Resolver el PLEM auxiliar con un único objetivo para producir el frente de Pareto • Representar las curvas de probabilidad acumulada asociadas a cada solución de Pareto • Seleccionar una solución de acuerdo con las preferencias de la persona que decide
--

Los principales parámetros del caso de estudio se muestran en la Tabla 2.18, para una planta de 500 MW de capacidad instalada con 8000 h/año de funcionamiento ($F7$).

Tabla 2.18. Parámetros definidos para el caso de estudio

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
Emisiones de CO ₂ (X^{tot}) (tCO ₂ /año)	3727674	Eficiencia del proceso de combustión (%)	32.5
Volumen de gases de combustión (Vfg^{tot}) (10 ⁹ m ³ /año)	17.47	Precio de la electricidad (P^{elec}) (\$/MWh)	80.54
Consumo de fuel ($mfuel$) (t/año)	179.6	Tasa de interés (i_{rate})	0.1
Coste del carbón (C_{coal}) (\$/t)	45.24*	Eficiencia de captura en CCPC ($\eta_{CO_2}^{CCPC}$) (%)	90

*Nota: el carbón usado en el caso de estudio es AMS con PCS=30.84 MJ/kg

Según el trabajo de Rubin et al. (2007c) sobre curvas de aprendizaje en la tecnología CCPC usando MEA, el LR para costes de inversión es de 0.021 y el LR para costes de operación y mantenimiento de 0.057. Este factor implica que cada vez que se dobla la capacidad instalada de esta tecnología a nivel mundial, los costes de inversión y operación y mantenimiento se reducen un 2.1% y un 5.7%, respectivamente.

La cantidad de permisos de emisión asignados gratuitamente a la planta (Max^{CO_2}) es de 0, ya que es el escenario más probable para el sector eléctrico, aunque otros escenarios más permisivos para países de Europa central son posibles.

En cuanto al modelo de la dinámica de precios con GBM, el parámetro de deriva o rentabilidad esperada (μ) y de volatilidad o desviación estándar (σ) son derivados de los datos históricos de precios de CO_2 en el EU-ETS. El modelo se calibra calculando rentabilidad esperada y desviación estándar para intervalos cortos de tiempo (i.e., valores diarios), y se infiere la información sobre rentabilidad y volatilidad en periodos largos (Chriss, 1997). Analizando los datos existentes entre 2008 y 2011 (SENDECO2, 2012), se elige el año 2010 por su estabilidad y madurez como periodo de referencia para la estimación de los valores anuales de μ y σ , que toman los valores de 0.05 y 0.26, respectivamente. La Fig. 2.20 muestra los 100 escenarios de precios de CO_2 calculados para el caso de estudio con un precio inicial P^{CO_2} de 22\$/t CO_2 .

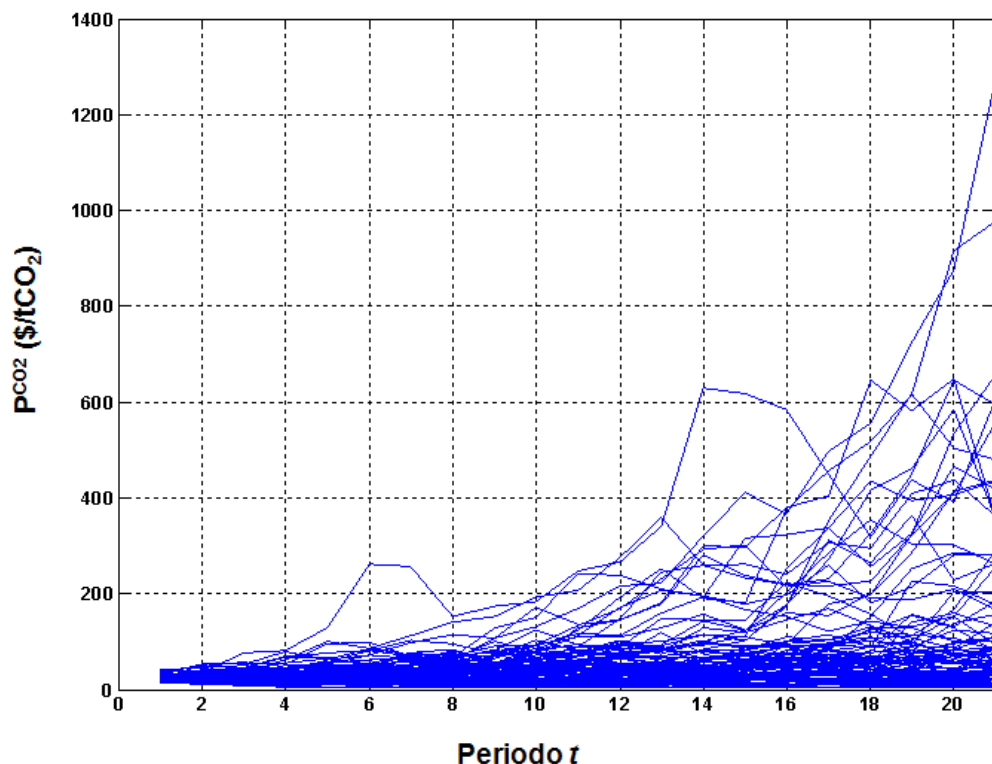


Figura 2.20: 100 escenarios de precios de CO_2 calculados usando GBM (Eq. 2.60) con valores de μ y σ de 0.05 y 0.26, respectivamente.

El nivel de ganancias objetivo al que se aspira (Ω) en este caso de estudio se ha fijado en 5×10^8 \$, eligiéndolo de la siguiente manera. Primero se maximiza el valor esperado de ganancias y se

analiza la curva de probabilidad acumulada. El nivel objetivo se escoge de la parte izquierda de esa curva de tal manera que las probabilidades de bajos impactos son reducidas cuando el riesgo de pérdida es minimizado.

El PLEM de este caso de estudio presenta 25488 variables continuas, 2121 binarias y 27708 ecuaciones. Ha sido implementado en GAMS y resuelto usando CEPLEX 12.2 en un ordenador Intel(R)-Core(TM) Duo con 3.00 GHz, variando el tiempo de CPU en torno a los 0.3 segundos.

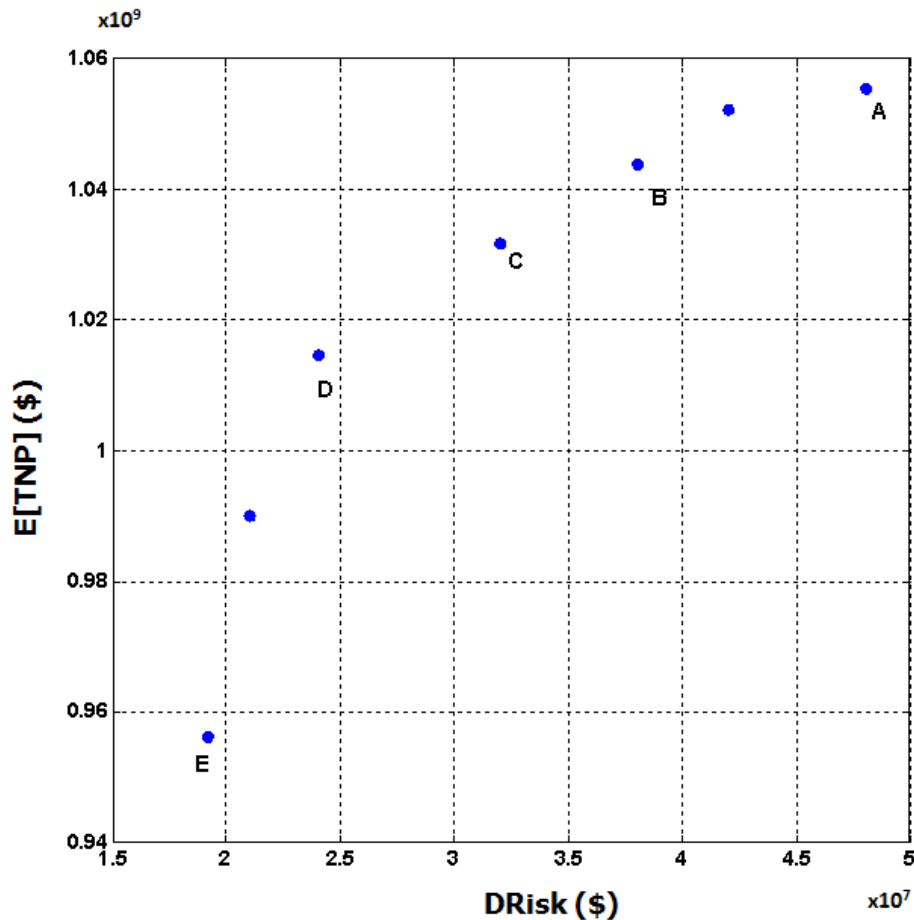


Figura 2.21: Curva de Pareto de soluciones óptimas

La Figura 2.21 muestra el frente de Pareto, donde la solución A se corresponde con la solución de máxima ganancia esperada que se halla al maximizar el problema con un único objetivo $Max \{E[TNP]\}$. Por otro lado, la solución E responde a minimizar la métrica de riesgo como único objetivo (i.e., $Max \{-DRisk\}$). Las soluciones B, C y D son soluciones intermedias obtenidas usando el método de restricción ϵ con diferentes límites superiores en $DRisk$. Todas ellas conllevan diferentes valores de las variables de decisión de primera etapa como se muestra en la Tabla 2.19. Las variables de segunda etapa no se muestran en los resultados ya que son dependientes de cada escenario y toman diferentes valores para cada uno de ellos.

Tabla 2.19. Soluciones de Pareto con valores de las funciones objetivo y variables de 1ª etapa

Solución	$E[TNP]$ ($\times 10^9$ \$)	$DRisk$ ($\times 10^7$ \$)	$t_{Y=1}$	QE ($\times 10^9$ m ³ /año)
A	1.06	4.8	10	17.4
B	1.04	3.8	8	17.4
C	1.03	3.2	7	17.4
D	1.01	2.4	6	17.4
E	0.96	1.92	4	17.4

Los resultados muestran que para maximizar el valor esperado de ganancias, el modelo decide posponer la instalación de la tecnología de captura hasta el 10º periodo. Con esta decisión el riesgo de pérdidas alcanza su valor máximo debido a que el rendimiento económico está más expuesto a la variabilidad en el precio del CO₂, ya que hasta el 10º periodo es imposible operar el sistema de captura. Esto se compensa con la reducción en costes de inversión y operación por el retraso en la inversión y con la reducción de costes debido a la curva de aprendizaje, mostrando así el sistema un mayor valor medio de ganancias. Por otro lado, para minimizar el riesgo de pérdidas el modelo adelanta la instalación del equipo al 4º periodo, reduciendo en este caso el valor esperado de ganancias y el riesgo asociado. Por tanto, con los datos y suposiciones discutidos anteriormente, posponer la instalación de CCPC conlleva mayores ganancias pero también mayores riesgos de pérdidas. Cabe destacar que en todas las soluciones de Pareto calculadas el modelo decide instalar el sistema de captura, por lo que, con el nivel de incertidumbre considerado, es conveniente actualizar las plantas de carbón con CCPC.

En la Figura 2.22 se observan las curvas de probabilidad acumulada asociadas a la solución de máximo valor esperado de ganancias (i.e., solución A), solución intermedia (i.e., solución C) y solución de mínimo riesgo de pérdida (i.e., solución E). Además se incluye la solución que se obtendría con información perfecta (i.e., si se supiera a priori el escenario que finalmente se va a materializar). Ésta última recibe el nombre de límite superior debido a que es imposible mejorar sus resultados (i.e., encontrar otra curva situada a la derecha de ésta en al menos un nivel de probabilidad).

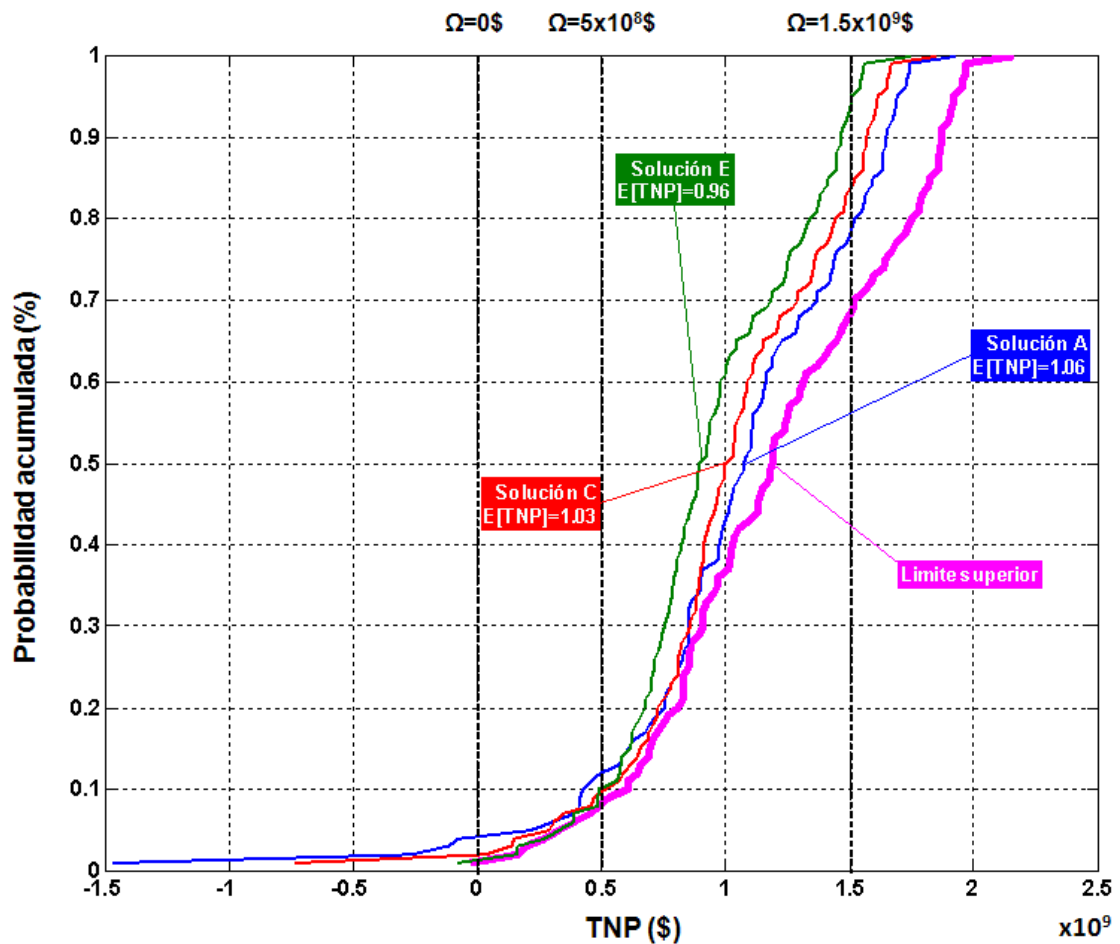


Figura 2.22: Curvas de probabilidad acumulada para las soluciones de máximo valor esperado de ganancias, una solución intermedia y la solución de mínimo riesgo de pérdida (solución A, C y E, respectivamente) y la solución que se obtendría con información perfecta (i.e., límite superior)

Para el estudio de estas curvas elegimos tres valores objetivo para el riesgo de pérdidas (i.e., 1.5×10^9 , 5×10^8 y 0 \$). Como se puede ver en la Fig. 2.22, la solución de máximo valor esperado de ganancias tiene una probabilidad de exceder el objetivo de 1.5×10^9 \$ del 20%. Este valor para el límite superior, la solución intermedia y la de mínimo riesgo es de 32%, 16% y 7%, respectivamente. Por otro lado, el riesgo de no alcanzar el objetivo de 5×10^8 \$ en la solución A tiene una probabilidad del 12%, mientras que para el límite superior, la solución C y la solución E esa probabilidad es del 8%, 9% y 10%, respectivamente.

Por tanto, la solución A sería elegida si la persona que decide está dispuesta a tomar riesgos, ya que tiene grandes probabilidades de elevadas ganancias a costa de incrementar la probabilidad de obtener bajas ganancias e incluso pérdidas (tiene un 4% de probabilidades de valores negativos del *TNP*). En cambio, una persona reacia al riesgo preferirá la solución E, ya que reduce la probabilidad de no alcanzar un valor bajo de ganancias o de tener pérdidas (1% probabilidad de valores negativos de *TNP*) a cambio de reducir la probabilidad de obtener

elevados valores de ganancias. La solución C es una solución intermedia entre los dos casos extremos.

Finalmente, la Fig. 2.23 representa el nivel máximo y mínimo de TNP alcanzado por las soluciones anteriormente seleccionadas en cada escenario del estudio. Como se puede observar, la solución A, que es la que mayor riesgo, tiene un intervalo de TNP que va de -1.47×10^9 \$ a 1.93×10^9 \$. La solución C, que toma menos riesgos que la anterior, presenta valores comprendidos entre -7.34×10^8 \$ y 1.86×10^9 \$, siendo claramente un intervalo más reducido que en la solución anterior ya que el incremento en el peor caso compensa la disminución del mejor valor. El intervalo en la solución con mayor aversión al riesgo, solución E, va de -7.9×10^2 \$ y 1.75×10^9 \$, siendo incluso más reducido que los dos anteriores. En cuanto al denominado límite superior, el mejor escenario alcanza un valor de TNP de 2.16×10^9 \$ y el peor de -2.72×10^2 \$. Como se puede observar, esta última solución domina al resto como es lógico ya que se obtiene asumiendo información completa.

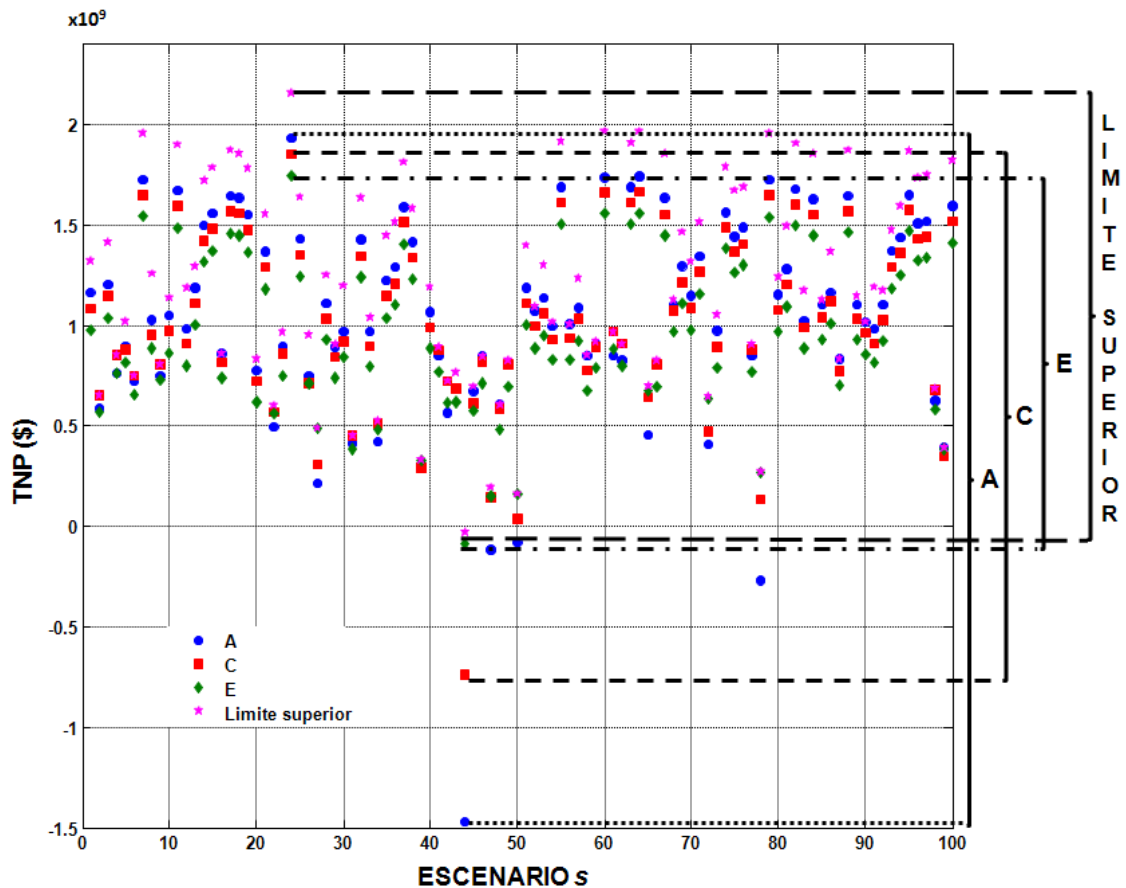


Figura 2.23: Rendimiento económico obtenido en cada solución para todos los escenarios s

Analizando el mejor y el peor caso de los escenarios para las diferentes soluciones (Fig. 2.23) se observa que el mejor nivel de TNP para todas ellas se alcanza en el escenario 24, donde los precios de CO_2 son muy bajos en todos los periodos (i.e., en 17 periodos este valor está por debajo de los 7 \$/t CO_2). El modelo decide instalar el sistema de captura pero no lo opera en ninguno de los periodos, pasando todo el gas de combustión por el bypass. Por el contrario, el

peor nivel de *TNP* se alcanza en el escenario 44, donde los precios del CO₂ son muy altos (i.e., el valor en 17 periodos está por encima de los 100 \$/tCO₂, siendo el valor más alto de 630 \$/tCO₂) e incluso operando a su máxima capacidad en la totalidad de los periodos posibles se alcanzan valores negativos de *TNP*.

2.6. Nomenclatura del Capítulo 2

Buy ^{CO2}	Cantidad de permisos de emisión de CO ₂ eq comprados en el ETS (t/año)
Bypass	Porcentaje de la corriente que no pasa por el equipo (%)
CAP _t	Capacidad de la tecnología de captura en el periodo <i>t</i> (m ³ /año)
Ccoal	Precio del carbón (\$/t)
CEPCI	Valor del Índice de Coste de Plantas de Ingeniería Química
Cfuel	Coste del fuel consumido en un periodo <i>t</i> (\$)
Cinv	Coste total de inversión (\$)
COA	Coste del CO ₂ evitado (\$/tCO ₂ eq evitada)
COE	Coste de la electricidad (\$/MWh)
Coper _{t,s}	Coste total de operación y mantenimiento en el periodo <i>t</i> y escenario <i>s</i> (\$)
crf	Factor de recuperación de capital
Cum _t	Capacidad acumulada mundial de la tecnología de captura en el periodo <i>t</i> (MW)
d	Parámetro específico de experiencia en curvas de aprendizaje
DC _i	Costes directos de la tecnología <i>i</i> (\$)
DRisk	Riesgo de pérdidas (\$)
Egen	Energía producida por la planta (MWh)
Epen _{t,s}	Energía consumida por la tecnología de captura en el periodo <i>t</i> y escenario <i>s</i> (MWh)
EIG	Impacto ambiental global
EIL	Impacto ambiental local
EPT _i	Energía usada por la tecnología <i>i</i> (MW)
E[TNP]	Valor esperado de las ganancias (\$)
FC	Coste del fuel consumido (\$/año)
FOM _i	Costes de operación y mantenimiento fijos de la tecnología <i>i</i> (\$/año)
FT	Tiempo de operación de la planta (h/año)
HHV	Poder calorífico superior (kJ/kg)

HR	Tasa de calor (kJ/kWh)
IC _i	Costes indirectos de la tecnología <i>i</i> (\$)
IP _i	Precio indicador de la tecnología <i>i</i> (\$/tCO ₂)
i _{rate}	Tasa de interés
LR	Tasa de aprendizaje
Max ^{CO₂}	Cantidad de permisos de emisión de CO ₂ eq gratuitos (t/año)
mfuel	Caudal másico de fuel consumido (kg/h)
MW	Tamaño de la planta (MW)
n _i	Vida útil de la tecnología <i>i</i> (años)
p ^{CO₂}	Precio del permiso de emisión en el ETS (\$/tCO ₂ eq)
p ^{elec}	Precio de la electricidad en el mercado (\$/MWh)
PEC _i	Costes de compra de los equipos en la tecnología <i>i</i> (\$)
PF _{j,l}	Factor de potencia para la sustancia <i>j</i> en la categoría de impacto <i>l</i>
pr _s	Probabilidad de ocurrencia del escenario <i>s</i>
QE _t	Expansión de la capacidad de la tecnología de captura en el periodo <i>t</i> (m ³ /año)
q _{steam}	Calor contenido en el vapor (MJ/t)
RR _j	Factor de recuperación del contaminante <i>j</i> (%)
Sale ^{CO₂}	Cantidad de permisos de emisión de CO ₂ eq vendidos en el ETS (t/año)
T ⁱ	Temperatura en la tecnología <i>i</i> (K)
TCI _i	Coste de inversión de la tecnología <i>i</i> (\$)
TDC _i	Costes totales directos de la tecnología <i>i</i> (\$)
TNB _{t,s}	Beneficios totales en el periodo <i>t</i> y el escenario <i>s</i> (\$)
TNC _{t,s}	Costes totales en el periodo <i>t</i> y el escenario <i>s</i> (\$)
TNP _s	Ganancias totales en el escenario <i>s</i> (\$)
TOM _i	Coste total anual de operación y mantenimiento de la tecnología <i>i</i> (\$/año)
Vfg	Flujo volumétrico (m ³ /año)
VLE _j	Valor límite de emisión del contaminante <i>j</i> (mg/Nm ³)
VOM _i	Costes de operación y mantenimiento variables de la tecnología <i>i</i> (\$/año)
X	Caudal másico (t/año)
Y _t	Variable binaria para la instalación de la tecnología de captura en el periodo <i>t</i>

$Z_{t,s}$ Variable binaria para la operación de la tecnología de captura en el periodo t y el escenario s

Símbolos griegos

α_i Coeficiente de costes directos para la tecnología i

β_i Coeficiente de costes indirectos para la tecnología i

ϵ Nivel límite

η_j^i Eficiencia de eliminación del equipo i en el contaminante j (%)

θ Umbral de emisión de sustancias (t/año)

τ Porcentaje mínimo deseado de la capacidad que debería ser instalado

λ Porcentaje mínimo deseado de la capacidad instalada que debería ser utilizada

μ Parámetro de deriva o rentabilidad esperada para el GBM

σ Parámetro de volatilidad o desviación estándar para el GBM

ξ Variable aleatoria independiente con distribución normal $N(0,1)$

Ω Nivel de ganancias objetivo al que se aspira

δ Variable auxiliar para la definición del riesgo de pérdida

Sets

I Conjunto de tecnologías limpias

J Conjunto de contaminantes

L Conjunto de categorías de impacto

S Conjunto de escenarios

T Conjunto de periodos

Índices

a Año de referencia

b Año base

i Tecnología limpia

j Contaminante

l Categoría de impacto

s Escenario

t Periodo

Abreviaturas

CCPC	Captura de carbono post-combustión
CCS	Captura y almacenamiento de carbono
ESP	Precipitador electrostático
ETS	Mercado de derechos de emisión
EU	Unión Europea
FGD	Desulfuración de gases
GBM	Movimiento Browniano geométrico
GHG	Gases de efecto invernadero
MEA	Monoetanolamina
MTD	Mejor técnica disponible
OMO	Optimización multi-objetivo
OXI	Oxicombustión
PEM	Programación entera mixta
PL	Programación lineal
PLEM	Programación lineal entera-mixta
PNA	Plan nacional de asignación
PNL	Programación no lineal
PNLEM	Programación no lineal entera-mixta
SCR	Reducción catalítica selectiva

2.7. Referencias del Capítulo 2

Barbaro A., Bagajewicz M.J. Managing financial risk in planning under uncertainty. *AIChE Journal*. **2004**, 50, 963 – 989.

Biegler L.T., Grossmann I.E. Retrospective on optimization. *Computers & Chemical engineering*. **2004**, 28, 1169 – 1192.

Biegler L.T. *Nonlinear programming: concepts, algorithms and applications to chemical processes*. MOS-SIAM series on optimization. Philadelphia: SIAM. **2010**.

Birge J.R., Louveaux F.V. *Introduction to stochastic programming*. New York: Springer Verlag. **1997**

- Bojarski A.D., Laínez J.M., España A., Puigjaner L. Incorporating environmental impacts and regulations in a holistic supply chains modeling: an LCA approach. *Computers & Chemical engineering*. **2009**, 33, 1747 – 1759.
- Braunschweig B., Gani R. Software architectures and tools for computer aided process engineering. *Computer-aided chemical engineering*, vol. 11. Amsterdam: Elsevier Science. **2002**.
- Brooke A., Kendrick D., Meeraus A., Raman R., Rosenthal R.E. GAMS – A User's guide. GAMS Development Corporation. Washington DC. **1998**.
- CE - Comisión Europea. E-PRTR Regulation N° 166/2006 of the European parliament and of the council concerning the establishment of a European pollutant release and transfer register and amending council directives 91/689/EC and 96/61/EC. **2006**.
- Chriss N.A. Black-Scholes and beyond: option pricing model. New York: McGraw-Hill. **1997**.
- Cristóbal J., Albo J., Irabien A. Environmental sustainability assessment of electricity from fossil fuel combustion: carbon footprint. *Low carbon economy*. **2010**, 1, 86 – 91.
- Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal burning. *Applied Energy*. **2012a**, 92, 369 – 378.
- Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Multi-objective optimization of coal-fired electricity production with CO₂ capture. *Applied Energy*. **2012b**, 98, 266 – 272.
- Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. MINLP model for optimizing electricity production from coal-fired power plants considering carbon management. *Energy Policy*. **2012c**, 51, 493 – 501.
- Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Kraslawski A., Irabien A. Stochastic MILP model for optimal timing of investments in CO₂ capture technologies under uncertainty in prices. *Energy*. **2013**, 54, 343 – 351.
- Dantzig G.B., Thapa M.N. *Linear programming 1: Introduction*. Springer series in operation research. New York: Springer-Verlag. **1997a**.
- Dantzig G.B., Thapa M.N. *Linear programming 2: Theory and extensions*. Springer series in operation research. New York: Springer-Verlag. **1997b**.
- Diniz da Costa J.C., Pagan R.J. Sustainability metrics for coal power generation in Australia. *Trans IChemE, Part B, Process safety environ*. **2006**, 84(B2), 143 – 149.
- Diwekar U.M. Optimization under uncertainty: an overview. *SIAG/OPT Views-and-News*. **2002**, 13 (1), 1 – 8.
- Drud, A. CONOPT – A large scale GRC Code. *ORSA journal on Computing*. **1992**, 6, 207 – 216.

- Ehrhart K.M., Hoppe C., Schleich J., Seifert S. Strategic aspects of CO₂-emission trading: theoretical concepts and empirical findings. *Energy & environment*. **2003**, 14 (5), 579 – 597.
- EP&EC – European Parliament & European Council. European Directive 2001/80/EC of the European Parliament and of the European Council of 23 October 2001 on the limitation of emissions of certain pollutants into the air from large combustion plants. **2001**.
- Grossmann I.E. Review of nonlinear mixed-integer and disjunctive programming techniques. *Optimization and Engineering*. **2002**, 3, 227 – 252.
- Grossmann I.E., Biegler L.T. Part II: Future perspective on optimization. *Computers & Chemical engineering*. **2004**, 28, 1193 – 1218.
- Grossmann I.E., Guillén-Gosálbez G. Scope for the application of mathematical programming techniques in the synthesis and planning of sustainable processes. *Computers & chemical engineering*. **2010**, 34 (9), 1365 – 1376.
- Guillén G., Mele F.D., Bagajewicz M.J., Espuña A., Puigjaner L. Multiobjective supply chain design under uncertainty. *Chemical Engineering Science*. **2005**, 60, 1535 – 1553.
- Guillén-Gosálbez G., Caballero J.A., Jiménez L. Application of life cycle assessment to the structural optimization of process flowsheets. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **2008**, 47, 777 – 789.
- Haimes Y.Y., Ladson L.S., Wismer D.A. On a bicriterion formulation of the problems of integrated system identification and system optimization. *IEEE transactions on systems, man and cybernetics*. **1971**, 1, 296 – 297.
- Hoffmann V.H. EU ETS and investment decisions: the case of the German electricity industry. *European Management Journal*. **2007**, 25 (6), 464 – 474.
- IBM – International Business Machines Corporation. IBM ILOG CPLEX V12.1 User's manual for CPLEX. **2009**.
- IChemE – Institution of Chemical Engineers. The sustainability metrics: IChemE Sustainable development progress metrics recommended for use in the Process Industries. **2002**.
- IEA– International Energy Agency. CCS RETROFIT: Analysis of the globally installed coal-fired power plant fleet. **2012c**.
- IEA - International Energy Agency. CO₂ emissions from fuel combustion: highlights. **2012d**.
- IECM – Integrated Environmental Control Model. User documentation. Center for Energy and Environmental Studies, Carnegie Mellon University: Pittsburgh, PA. **2001**.
- Li S., Zhang X., Gao L., Jin H. Learning rates and future costs curves for fossil fuel energy systems with CO₂ capture: methodology and case studies. *Applied Energy*. **2012**, 93, 348 – 356.

- Liebscher M., Witowski K., Goel T. Decision making in multi-objective optimization for industrial applications – data mining and visualization of Pareto data. In: proceedings of 8th world congress on structural and multidisciplinary optimization. **2009**, June 1 – 5, Lisbon, Portugal.
- Messac A., Ismail-Yahaya A., Mattson C.A. The normalized normal constraint method for generating the Pareto frontier. Structural and multidisciplinary optimization. **2003**, 25 (2), 86 – 98.
- Miettinen K. Nonlinear multi-objective optimization. Boston: Kluwer Academic Publishers. **1999**.
- MIT – Massachusetts Institute of Technology. Retrofitting of coal-fired power plants for CO₂ emissions reductions. **2009**.
- Nemhauser G.L., Wolsey L.A. Integer and combinatorial optimization. New York: John Wiley & Sons. **1999**.
- Nocedal J., Wright S.J. Numerical Optimization. 2nd edition. New York: Springer. **2006**.
- Portney P.R. Market-based approaches to environmental policy – a “refresher course”. Resources. **2003**, Summer 2003, 15 – 18.
- Rammerstorfer M., Eisl R. Carbon capture and storage: investment strategies for the future? Energy Policy. **2011**, 39, 7103 – 7111.
- Rangaiah G.P. Multi-objective optimization: techniques and applications in chemical engineering. Singapore: World Scientific. **2009**.
- Rao A.B., Rubin E.S. A technical, economic, and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plant greenhouse gas control. Environmental Science & Technology. **2002**, 36, 4467 - 4475.
- Rubin E.S., Chen C., Rao A.B. Cost and performance of fossil fuel power plants with CO₂ capture and storage. Energy policy. **2007a**, 35, 4444 – 4454.
- Rubin E.S., Rao A.B., Berkenpas M.B. Technical documentation: oxygen-based combustion systems (oxyfuels) with carbon capture and storage (CCS). Department of Engineering and Public Policy. Paper 75. **2007b**. On line: <http://repository.cmu.edu/epp/75>.
- Rubin E.S., Yeh S., Antes M., Berkenpas M., Davison J. Use of experience curves to estimate the future cost of power plants with CO₂ capture. International Journal of Greenhouse gas control I. **2007c**, 188 – 197.
- SENDECO2 – Carbon dioxide emission allowances electronic trading system. <http://www.sendeco2.com/>. Last visit on line – 21/12/2012.

CONCLUSIONES/ *CONCLUSIONS*

3

3.1 Conclusiones y progreso de la investigación

3.1.1 Conclusiones

La combustión del carbón es un proceso ampliamente estudiado, tanto la etapa de simulación como la de optimización. Esta tesis se ocupa de la optimización de la combustión más limpia del carbón desde un punto de vista económico y ambiental. Las conclusiones obtenidas son las siguientes:

- Definidas unas funciones objetivo para los impactos ambientales globales y locales de la generación de energía eléctrica a partir de carbón, la reducción de ambos impactos ambientales está directamente relacionada con las inversiones necesarias en tecnologías limpias. A partir de las restricciones que imponen las regulaciones, la reducción del impacto ambiental se produce siempre a costa de un incremento del coste de inversión, que es más significativo en el caso de los impactos globales.
- Las tecnologías de captura de CO₂ no tendrán prioridad en la planificación de inversiones de una planta de combustión de carbón frente al resto de tecnologías limpias estudiadas (i.e., control de partículas, desulfuración y desnitrificación), ya que presentan una peor relación efectividad-coste (i.e., el menor descenso marginal del impacto ambiental para un incremento de la inversión dado).
- Al minimizar el coste de la electricidad producida junto al impacto ambiental global, el proceso de captura de CO₂ seleccionado de entre las opciones de retrofit posibles (i.e., absorción química post-combustión con aminas y oxidación) depende de los límites ambientales a considerar. Así, el proceso de combustión con aire que usa captura post-combustión es preferible cuando los objetivos ambientales son menores (i.e., mayores impactos ambientales) debido a su mayor flexibilidad, mientras que el proceso de oxidación es el óptimo cuando se consideran objetivos ambientales más exigentes.
- En el contexto de un mercado de emisiones de CO₂, la estrategia de gestión de carbono para minimizar el coste de producción de electricidad depende del valor que tome el permiso de emisión en el mercado, así como de la cantidad de emisiones gratuitas asignadas a la planta. La combustión con aire sin captura, comprando los permisos de emisión en el mercado, es la opción óptima para precios bajos de la tCO₂. La captura con oxidación resulta económicamente viable para valores de tCO₂ de entre 22 y 30 \$/tCO₂, mientras que la absorción química con aminas es económicamente viable entre 31 y 45 \$/tCO₂.
- En el contexto de un mercado de emisiones dinámico y con incertidumbre en el precio futuro del CO₂, la inversión en tecnología de captura basada en absorción química post-combustión con aminas es aconsejable ya que el capital invertido es compensado con el ahorro de pagar los permisos de CO₂ necesarios. Se comprueba que posponer la instalación de dichas tecnologías conlleva mayores ganancias pero también mayor riesgo de pérdidas.

3.1.2 Progreso de la investigación

En relación con los resultados de esta Tesis Doctoral, se consideran relevantes las siguientes líneas para el progreso científico-técnico futuro:

- Desarrollar procesos y técnicas innovadoras para la captura de CO_2 . En este trabajo se han comparado las técnicas del estado del arte, pero los procesos con membranas están tomando gran protagonismo para el futuro como se ha discutido en sección 1.2.2. Así, en el caso de la oxidación, la producción de oxígeno por medio de columnas de destilación criogénica representa el 70% de los costes de inversión y consume el 70% de la energía auxiliar demandada. El uso de membranas de transporte iónico (ITM) reduce más del 30% en costes de inversión del ASU y aproximadamente el 60% de la energía requerida por kg de O_2 , haciendo el proceso de oxidación más competitivo. Lo mismo sucede con los procesos de membranas en captura post-combustión y otros procesos como el Chemical Looping. Todos ellos requieren un modelado técnico-económico que facilite su uso en la etapa de simulación-optimización.
- Mejorar la definición del modelo de programación matemática de tal forma que facilite el uso de un algoritmo que resuelva PNLEM en lugar de tener que descomponer el problema en varios PNL. Una solución sería desarrollar algoritmos de descomposición específicos para cada problema (por ejemplo usando métodos basados en programación disyuntiva). Además se podría buscar la convergencia al óptimo global para mejorar la calidad de las soluciones ya que en este documento no se puede ofrecer ninguna garantía teórica de ello debido a la naturaleza no convexa de los problemas planteados.
- Extender los límites del sistema incluyendo mayor número de etapas del ciclo de vida de la producción de electricidad a partir del carbón, como la extracción y el transporte de la materia prima que son muy influyentes en la sostenibilidad del proceso. Así mismo, ampliar el enfoque con la introducción de nuevos parámetros estocásticos relacionados con la cadena de suministro a parte del precio del CO_2 , como por ejemplo el precio de la electricidad y el precio de la materia prima.
- Desarrollar y estimar indicadores sociales para el uso del carbón como combustible fósil que permitan tener en cuenta este objetivo en la toma de decisiones.

3.1 Conclusions and on-going research

3.1.1 Conclusions

The coal combustion process has been extensively researched, both the simulation and the optimization stages. This Thesis studies the optimization of the cleaner coal combustion from the economic and environmental point of view. The conclusions which can be withdrawn are the following:

- Environmental objective functions for global and local impacts of the coal-based electricity production have been defined, and their reduction is directly related to needed investments in clean technologies. Beyond the constraints imposed by regulations, reductions in the environmental objective always come at the expense of increases in the investment cost, which is more significant in the case of global impacts.
- CO₂ capture technologies are given lower priority on the investment plan than the rest of clean technologies studied (i.e., particulate control, desulfurization, denitrification) because they present the worst cost-effective relation (i.e., the lowest marginal decrease in environmental impact for a given increment in investment cost).
- When minimizing the cost of the electricity produced along with the global environmental impact, the selected CO₂ capture process between those from the retrofit options (i.e., post-combustion chemical absorption with amines and oxy-fuel combustion) depends on the environmental limits considered. Thus, the combustion process with air that uses the post-combustion capture technology performs better for soft environmental limits (i.e., for large environmental impact limitations) due to its flexibility, while the oxy-fuel combustion process is the preferred choice when more stringent environmental limitations are considered.
- In the context of a CO₂ emission trading system, the optimal carbon management strategy selected to minimize the cost of the electricity produced depends on the projected value of the CO₂ emission and the quantity of free emission allowances allocated to the plant. Air-fired combustion without CO₂ capture, buying the emission allowances in the market, is the optimal option for low prices per tCO₂ in the market. Oxy-fuel combustion capture is profitable for CO₂ prices between 22 and 30 \$/tCO₂, while the chemical absorption with amines is profitable for prices between 31 and 45 \$/tCO₂.
- In the context of a dynamic emission trading system which present uncertainty in the future CO₂ allowance prices, investment in post-combustion CO₂ capture technology is convenient since the associate capital investment is compensated by the savings in carbon taxes. It is concluded that earlier installations of CO₂ capture technologies lead to lower expected profit and also to lower risk.

3.1.2 On-going research

Based on the results presented on this PhD Thesis, the following relevant lines are considered for the future scientific-technical progress:

- Develop innovative processes and technologies for the CO₂ capture. In this work we compare the state of the art technologies but membrane processes are gaining great importance for the future as discussed in section 1.2.2. Thus, as happens in the oxy-fuel combustion, the cryogenic distillation columns used for oxygen production represent almost 70% of the investment costs and consume 70% of the auxiliary power demand. Hence, the use of ion transport membranes (ITM) might cut down by more than 30% the capital requirement of the ASU and by approximately 60% the energy required per kg of O₂, making this technology more competitive. The same happens with membrane processes applied to post-combustion capture and other innovative processes such as the Chemical Looping. All of them require techno-economic modeling so they can be used in the simulation-optimization phase.
- Enhance the definition of the mathematical programming model in a way that the use of a MINLP algorithm for its resolution is allowed instead of decomposing it into different NLP problems. A possible solution would be developing tailored decomposition algorithms for each case study (for example using methods based on disjunctive programming). Besides, we could look for the convergence to the global optimum to enhance the quality of the solutions found, since we cannot offer any theoretical guarantee of it given the nonconvex nature of the problems.
- Enlarge the boundaries of the system under study in order to include more stages of the coal-based electricity production life cycle, such as the extraction and transport of the raw material, which are really meaningful in the process sustainability. In addition, enlarge the approach of the study with the introduction of new stochastic parameters related to the supply chain apart from the CO₂ allowance price, such as the electricity and the raw material prices.
- Develop and estimate social indicators for coal-based electricity production which allow including the social objective in the decision making process.

**ARTÍCULOS
CIENTÍFICOS/
*SCIENTIFIC ARTICLES***

4

4.1 Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal. Applied Energy. 2012, 92:369 – 378.

Impact factor: 5.106

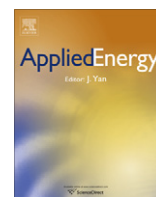
Resumen

En los próximos 25 años se espera un gran crecimiento de la generación de electricidad a nivel mundial debido principalmente al aumento en la demanda de las economías emergentes. En este contexto, el carbón seguirá manteniéndose como una de las más importantes fuentes de energía. Varios equipos de control de la contaminación han sido propuestos como Mejores Técnicas Disponibles (MTD) para actualizar las plantas de combustión de carbón con el fin de minimizar su impacto ambiental. En este trabajo se desarrolla una metodología basada en optimización multi-objetivo para el diseño óptimo de los equipos de control de la contaminación en plantas de carbón teniendo en cuenta criterios económicos y ambientales. La formulación del problema incluye modelos no lineales para predecir el coste y el rendimiento de las tecnologías de reducción de emisiones. La tarea de diseño se formula en términos matemáticos como un problema de programación no lineal entera-mixta (PNLEM) bi-objetivo, cuya solución se define a través de un conjunto de puntos de Pareto que representan el compromiso óptimo entre las dos funciones objetivo. La aplicabilidad de esta metodología se pone de manifiesto a través de un caso de estudio basado en una planta de carbón pulverizado de 500 MW usando carbón bituminoso con bajo contenido en azufre. Los resultados muestran que es posible reducir el impacto ambiental de la planta, con un aumento marginal de los costes, ajustando las condiciones de operación y las capacidades de los equipos de control de la contaminación.

Original abstract

World electricity generation is expected to strongly increase over the next 25 years, mainly due to the demand of the emerging economies. In this context, coal is likely to remain as one of the most important energy sources. Several pollution control devices have been proposed so far as Best Available Techniques (BATs) to retrofit coal combustion plants in order to minimize their environmental impact. In this work we have developed a systematic method based on multi-objective optimization for the optimal design of pollution control devices in coal-fired plants that considers simultaneously economic and environmental criteria. Our formulation includes nonlinear models for predicting the cost and performance of the abatement technologies. The design task is formulated in mathematical terms as a bi-criteria mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem, the solution of which is defined by a set of Pareto points that represent the

optimal trade-off between the two objective functions. The applicability of this method is explored through a case study based on a pulverized coal power plant of 500 MW (gross), burning low-sulfur bituminous coal. Numerical results show that it is possible to reduce the impact of these facilities at a marginal increase in cost by adjusting the operating conditions and capacities of the control pollution devices.



Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal burning

Jorge Cristóbal^{a,*}, Gonzalo Guillén-Gosálbez^b, Laureano Jiménez^b, Angel Irabien^a

^a Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica, Universidad de Cantabria, Av. de los Castros s/n, Santander 39005, Spain

^b Departamento de Ingeniería Química, Escuela Técnica Superior de Ingeniería Química, Universidad Rovira i Virgili, Av. Països Catalans 26, Tarragona 43007, Spain

ARTICLE INFO

Article history:

Received 24 May 2011

Received in revised form 27 October 2011

Accepted 12 November 2011

Keywords:

Multi-objective optimization

Coal-fired power plant

Environmental sustainability

Best Available Techniques

ABSTRACT

World electricity generation is expected to strongly increase over the next 25 years, mainly due to the demand of the emerging economies. In this context, coal is likely to remain as one of the most important energy sources. Several pollution control devices have been proposed so far as Best Available Techniques (BATs) to retrofit coal combustion plants in order to minimize their environmental impact. In this work we have developed a systematic method based on multi-objective optimization for the optimal design of pollution control devices in coal-fired plants that considers simultaneously economic and environmental criteria. Our formulation includes nonlinear models for predicting the cost and performance of the abatement technologies. The design task is formulated in mathematical terms as a bi-criteria mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem, the solution of which is defined by a set of Pareto points that represent the optimal trade-off between the two objective functions. The applicability of this method is explored through a case study based on a pulverized coal power plant of 500 MW (gross), burning low-sulfur bituminous coal. Numerical results show that it is possible to reduce the impact of these facilities at a marginal increase in cost by adjusting the operating conditions and capacities of the control pollution devices.

© 2011 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

World electricity production is nowadays dominated by the use of coal (41.5%) [1]. Projections indicate that the most likely scenario is to maintain this share in the future, mainly due to the increase in population and economic growth in the developing countries. China already uses more coal than the USA, EU and Japan together, whereas India is right behind China in the construction of coal combustion power plants.

Unfortunately, this technology shows significant environmental effects such as the depletion of natural resources, global environmental impacts and local/global pollution with implications on human health and ecosystems. As a result, hard coal technology evidences environmental and social drawbacks in comparison to other electrical power generation systems. The growing environmental concerns of society have led to more rigorous environmental standards and limits. Hence, in this general context, there is a strong motivation to develop new technology and systematic tools to improve the operation of coal burning, so in the near future it will become competitive in the energy market of an increasingly environmentally constrained world.

The concept of “Clean technology” refers to a new generation of energy processes that reduce air emissions and pollutants, with the final aim of mitigating the associated environmental impact. Atmospheric impact categories may be divided into global and local (Table 1) according to the substance’s potential impact based on the temporal-spatial release. Traditional technologies focused on removing particulates and sulfur dioxide in order to reduce human health effects and acidification, and more recently NO_x emissions.

Some studies have predicted and quantified future emission reductions for several pollutants using clean technology strategies. Streets and Waldhoff [2] analyzed the Chinese power sector, concluding that the use of cleaner processes and emission control technologies could lead to reductions of SO₂ emissions of around 67% from 1995 levels in 2020. In contrast, an increase of nearly 180% over 1995 levels will be attained if no control devices are installed. In addition, NO_x emissions are expected to increase around 150% over 1995 levels, surpassing emissions from North America and Europe.

Nowadays, carbon dioxide emissions that contribute to global warming and climate change have gained wider interest. The increase in global-warming gases derived from the use of coal in the emerging economies is likely to exceed the overall green house gases emissions in all the industrialized countries over the next 25 years, surpassing by 5 times the limits imposed by the Kyoto

* Corresponding author. Tel.: +34 942200931; fax: +34 942201591.

E-mail address: cristobalj@unican.es (J. Cristóbal).

Nomenclature

Sets		$V_{solvent}$	volumetric flow rate of the solvent in the CCS (m ³ /h)
H	set of system components	X	scaling factor (various. See Eq. (30) and Table 2)
I	set of treatment units	Parameters	
J	set of contaminants	$CEPCI$	value of the Chemical Engineering Plant Cost Index
L	set of impact categories	ELV_j	emission limit value for pollutant j (mg/Nm ³)
Indices		HHV	coal heating value (kJ/kg)
a	reference year	HR	plant heat rate (kJ/kWh)
b	base year	m_{fuel}	fuel consumption rate (kg/h)
h	system component of a technology	m_{MEA}	loss of MEA (kg MEA/t CO ₂)
i	treatment unit	MWe	gross plant size (MW)
j	contaminant	$PF_{j,l}$	potency factor for the substance j in the impact category l
l	impact category	q_{steam}	heat content of the steam (MJ/t steam)
Variables		t	operational time (h/year)
$\eta_{ESP,PM}$	removal efficiency of the ESP on PM (%)	T_{CCS}	operational temperature for the CCS (K)
η_{SCR,NO_x}	removal efficiency of the SCR on NO _x (%)	T_{ESP}	operational temperature for the ESP (K)
$ACFM$	volumetric flow rate (m ³ /h)	T_{SCR}	operational temperature for the SCR (K)
$BYPASS_i$	percentage of the stream bypassed in technology i (%)	TH_j	threshold of the substance j (kg/year)
C_h	cost of a system component h (\$)	THR_l	threshold of the reference substance in the impact category l (kg/year)
DC	direct costs (\$)	y_{CO_2}	CO ₂ concentration in the flue gas (mole%)
EIG	global environmental impact	WtS	coal sulfur content (%)
EIL	local environmental impact	$[MEA]$	concentration of MEA in the solvent (%)
$FR_{i,j}$	mass flow rate of pollutant j in unit i (kg/h)	α_i	cost coefficient for direct costs for technology i
IC	indirect costs (\$)	β_i	cost coefficient for indirect costs for technology i
M_{CO_2}	CO ₂ product flow rate (ton/h)	γ	minimum capacity factor
M_{MEA}	mass flow rate of makeup MEA in the CCS (kg/h)	η_{FGD,SO_2}	removal efficiency of the FGD on SO ₂ (%)
M_{steam}	flow rate of steam extracted from the turbines (kg/h)	η_{CCS,CO_2}	removal efficiency of the CCS on CO ₂ (%)
PEC	purchased equipment cost (\$)	Φ_{lean}	lean solvent CO ₂ loading (mole CO ₂ /mole MEA)
TCI	total cost of a control device (\$)		
TC	total cost of the plant (\$)		

Table 1
Global and local impact categories.

Global	Local
Atmospheric Acidification (AA): Referring to the impact of substances to acidify the atmosphere, soils and waters through acid rain or dry deposition. Acidifying pollutants can be transported long-distances – transfrontier pollution	Human Health Effects (HHE): Referring to the potential effects of air pollutants on human health
Global Warming (GW): Referring to the impact of anthropogenic emissions to increase the temperature of the Earth's near surface air and oceans water	Photochemical Ozone Formation (POF): Referring to the potential formation of ozone in the troposphere by the action of sunlight on air pollutants
Ozones Depletion (OD): Referring to the potential depletion of the stratospheric ozone layer, that protects life on Earth from the ultraviolet rays, by man-made chemicals (ozone-depleting substances)	

Protocol [3]. Stringent climate policies involving economic penalties will boost the retrofit of a large number of coal-fired power plants in order to reduce their CO₂ emissions. This is therefore a field in which the application of clean technology processes holds good promise.

Different pollution control devices have been proposed so far for improving the environmental performance of coal burning (see [4]). In this work, we will focus on Best Available Techniques (BATs), as defined in the IPPC Directive (Directive 96/61/EC), and

more precisely on the following post combustion treatments (secondary measures):

- Electrostatic precipitator (ESP), which is the preferred equipment to remove dust in power plants that burn hard coal or lignite [4], mainly because of its efficiency and flexibility to adapt to a wide range of operating conditions.
- Wet limestone flue gas desulfuration (FGD). This process leads the world market of installed post-combustion SO₂ control technologies (i.e., 86% of the market share). Particularly, limestone forced oxidation (LSFO) has been increasingly used in the recent past [5,6].
- Selective catalytic reduction (SCR), which is a widely applied process for controlling NO_x emissions in large combustion installations. The cumulative SCR installed capacity has increased exponentially in the last years [5], and is expected to continue with this growth in the future due to more stringent NO_x emissions limits.
- Carbon Capture and Storage (CCS), which includes several techniques for reducing CO₂ emissions. Several technologies are currently under development or at a research stage. Absorption techniques to remove CO₂ from flue gases using solvent monoethanolamine (MEA) are well positioned. The International Energy Agency (IEA), the Environmental Protection Agency (EPA) and Carnegie Mellon University are currently conducting research in this field [7–9].

Recent advances in optimization theory and software applications have enabled the development of systematic tools that assist decision-makers in environment related problems [10]. Air pollution management models, in particular, seek to optimize an

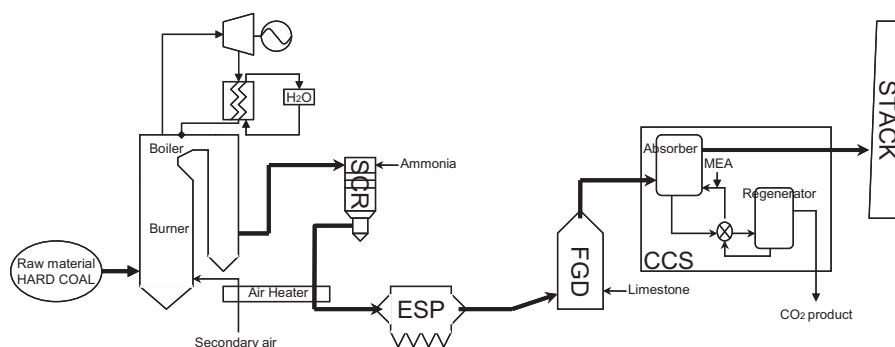


Fig. 1. Coal-fired power plant with SCR high dust configuration.

economic objective function (typically the cost) subject to some technical and legal constraints. Shaban et al. [11] developed a mixed-integer linear programming (MILP) model to select the optimum set of control options to achieve a certain pollution reduction level given a maximum budget available for investment. Ren et al. [12] introduced a multi-objective approach based on linear programming (LP) for the design of a distributed energy system that minimizes simultaneously an economic objective function (the annual energy cost) and an environmental one (the annual CO₂ emissions). Grandinetti et al. [13] presented a multi-objective linear programming model to identify the optimal set of Best Available Technologies (BATs) in an industrial facility for painting wood that accounts for the simultaneous minimization of the emissions and total cost. In the same line, Mavrotas et al. [14], proposed a methodology that offers the decision-maker combinations of BATs to be implemented. They applied their method to some industries of the greater Athens area in order to maximize the net present value and minimize up to 5 environmental objective functions.

One major limitation of the aforementioned approaches is that they typically rely on fairly simple linear models to estimate the cost and predict the performance of the pollution control devices. This simplification is motivated by the numerical difficulties associated with the optimization of nonlinear models, which are more difficult to handle than linear programming formulations. The complexity of these models is further increased when logic decisions must be determined along with continuous ones, giving rise to mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problems. Nonlinear models, however, have the advantage of providing more accurate results, and thus, more realistic designs.

This work introduces a systematic method based on multi-objective optimization for the optimal pollution control design in coal-fired plants retrofitted with control devices. The design task is formulated as a mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem that provides as output a set of Pareto alternatives representing the optimal trade-off between the economic and environmental performance of the system. One of the main contributions of this work is the development of a detailed MINLP model that realistically represents the performance of the pollution control devices. An additional novelty of this work is the use of local and global environmental impacts to assess the environmental performance of the system. The relationship between these types of impacts is assessed using a graphical tool based on the use of parallel coordinates plots.

2. Problem statement

2.1. System description

We consider a standard coal-fired power plant, in which the exhausted gas that exits the burner is released into the

environment through a chimney. One of the most common strategies to retrofit existing coal plants is to place control devices downstream of the burner (“end-of-pipe” technologies). Different configurations have been reported for this [4]. The most widely used is the SCR high-dust configuration (Fig. 1), where the SCR is placed between the economizer and the air preheater. This position permits to enlarge the temperature window, eliminating the need to reheat the flue gas to reach the catalyst operating temperature, and thereby reducing the associated cost. The model presented in the next section is also valid for a low-dust SCR system (SCR placed downstream of the ESP), but not for the tail end configuration. The optimal position for the CO₂ absorber is downstream of the FGD that cools the flue gas. This configuration does not require any additional cooling system. An additional advantage of this configuration is that it decreases the reagent cost in the absorber, since lower amounts of SO₂ and NO_x involve less loss of solvent.

2.2. Superstructure representation

We postulate a superstructure that includes four control devices in series located before the discharge point (see Fig. 2). We consider bypasses in each of these units (A–D) that split the discharge stream from the coal plant into two sub-streams, with only one of them passing through the pollution control device. This provides the system with more flexibility, since the investment cost of the equipment and the amount of emissions removed depend on the quantity of flue gas treated.

The concentration of pollutants is measured in the stack, and must not exceed the limits imposed by the applicable legislation. The treatment units remove a fraction of the selected pollutants (one per technology). This removal performance is fixed in some technologies (FGD and CCS) and variable in others (SCR and ESP).

The following assumptions are made:

- The flue gas behaves as an ideal gas.
- Isobaric conditions are considered along the superstructure as well as in the abatement technologies.
- Control devices operate under isothermal conditions.
- Variations in the temperature of the flue gas take place in the intermediate flows that connect the treatment units.

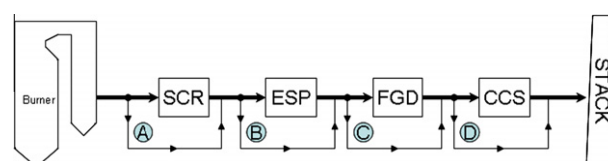


Fig. 2. Superstructure.

The problem of interest can be formally stated as follows. Given are a set J of contaminants present in the discharge stream from the coal plant, including NO_x , PM, SO_2 and CO_2 , and a set I of pollution control devices: SCR, ESP, FGD and CCS that selectively remove these contaminants. The investment cost and performance equations of each control pollution device are also known. The goal is to determine the optimal configuration (number and sizes of these devices) that minimizes simultaneously the environmental impact caused by the plant emissions, which is quantified through a set of global and local indicators, along with the total investment cost.

3. Mathematical model

The design task is posed in mathematical terms as a mixed-integer nonlinear programming problem (MINLP). Particularly, we present two MINLP formulations that differ in the environmental objective function (i.e. either global or local):

(CLEANG)

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & Z(x,y) = \{TC(x,y), EIG(x,y)\} \\ \text{s.t.} \quad & h(x,y) = 0 \\ & g(x,y) \leq 0 \\ & x \in \mathfrak{R}^n, y \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

(CLEANL)

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & Z(x,y) = \{TC(x,y), EIL(x,y)\} \\ \text{s.t.} \quad & h(x,y) = 0 \\ & g(x,y) \leq 0 \\ & x \in \mathfrak{R}^n, y \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

In model CLEAN, continuous variables x denote operating conditions, such as mass and volume flow rates and efficiencies, whereas integer variables y are employed to model structural decisions, like the installation of the pollution control devices or certain parts of them (i.e. number of sections of the ESP). The economic objective is represented by the total cost of the plant (TC), whereas the environmental performance is quantified by means of either global or local environmental impacts (EIG and EIL , respectively). The equations of the model are explained in detail in the sections that follow.

3.1. Main constraints

3.1.1. Mass balance constraints

To derive the mass balance constraints for all the process units, we consider a generic pollution control unit with a by-pass as the one shown in Fig. 3. We assume that the system operates under

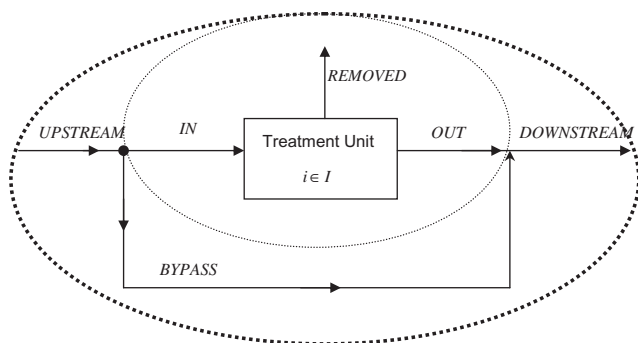


Fig. 3. Treatment unit.

steady state conditions. The mass balance equations can be expressed as follows (Eqs. (1)–(6)):

$$FR_{i,j}^{UPSTREAM} = FR_{i,j}^{REMOVED} + FR_{i,j}^{DOWNSTREAM} \quad \forall i,j \quad (1)$$

$$FR_{i,j}^{IN} = FR_{i,j}^{REMOVED} + FR_{i,j}^{OUT} \quad \forall i,j \quad (2)$$

$$FR_{i,j}^{UPSTREAM} = FR_{i,j}^{IN} + FR_{i,j}^{BYPASS} \quad \forall i,j \quad (3)$$

$$FR_{i,j}^{DOWNSTREAM} = FR_{i,j}^{OUT} + FR_{i,j}^{BYPASS} \quad \forall i,j \quad (4)$$

$$FR_{i,j}^{BYPASS} = FR_{i,j}^{UPSTREAM} (BYPASS_i/100) \quad \forall i,j \quad (5)$$

$$FR_{i,j}^{OUT} = FR_{i,j}^{IN} (1 - (\eta_{ij}/100)) \quad \forall i,j \quad (6)$$

where $FR_{i,j}$ is the mass flow rate (either input, output, removed or bypassed, as shown in Fig. 3), of pollutant j in unit i expressed in kg/h, $BYPASS_i$ is the percentage of the stream bypassed in technology i in%, and η_{ij} is the removal efficiency of pollutant j in technology i expressed in%.

The volumetric flow rate of flue gas treated in each unit is controlled by the bypass. Eq. (7) is used to determine the volumetric flow rate that enters the treatment unit i assuming isobaric and isothermal conditions in the treatment unit.

$$ACFM_i^{IN} = (1 - (BYPASS_i/100)) ACFM_i^{UPSTREAM} \quad \forall i \quad (7)$$

where $ACFM_i$ is the volumetric flow rate measured in m^3/h that enters the equipment i .

3.1.2. Compliance with current legislation

The maximum level of emissions permitted when retrofitting a power plant is given by the legislation. Regulations on emissions from stationary sources have been defined for the European Union and the United States, and are referred to as Performance Standards. They are expressed as concentrations in the EU and mass units per energy input in the US. Compliance with the current legislation is enforced via Eq. (8).

$$\frac{FR_{i,j}^{DOWNSTREAM} \times 10^6}{ACFM_i^{DOWNSTREAM}} \leq ELV_j \quad \forall j \quad (8)$$

where $ACFM$ is the volumetric flow rate in the measure point in m^3/min and ELV_j is the emission limit value of the pollutant j in the last pollution control device i installed before the discharge point in mg/Nm^3 .

3.2. Objective functions

3.2.1. Economical objective function

The economic objective function is the total cost of the plant (TC) measured in dollars. It is calculated from the capital investment costs of the equipments units (Eq. (9)), which are determined according to the Coal Utility Environmental Cost (CUECost) [15], the Air Pollution Control Cost Manual [8] and the report by Rao and Rubin [9]. Each cost model has a different base year and it needs to be predetermined because it has a strong influence on the results [16]. Using the Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI), the cost is projected to a common selected year [17], as shown in Eq. (9):

$$TC_a = \sum_i TCI_{i,b} \frac{CEPCI_a}{CEPCI_b} \quad \forall i \quad (9)$$

where TC_a is the total cost of the plant in the reference year a , $TCI_{i,b}$ is the total cost of technology i in base year b , $CEPCI_a$ is the value of

the index in reference year a , and $CEPCI_b$ is the value of the same index in base year b .

As shown in Eq. (10), the total cost of a control device is determined from the total direct cost, which accounts for the purchase equipment cost (PEC_i) and direct cost (DC_i) (see Eq. (11)), along with the indirect costs (IC_i). The direct and indirect costs are both calculated following the EPRI guidelines [18]. Direct costs (installation and site preparation) are typically factored from the PEC_i (Eq. (12)), whereas indirect costs (engineering, fees, start-up, contingencies and expenses) are calculated as percentages of the TDC_i (Eq. (13))

$$TCl_i = TDC_i + IC_i \quad \forall i \quad (10)$$

$$TDC_i = PEC_i + DC_i \quad \forall i \quad (11)$$

$$DC_i = \alpha_i PEC_i \quad \forall i \quad (12)$$

$$IC_i = \beta_i TDC_i \quad \forall i \quad (13)$$

where α_i and β_i are cost parameters used to determine the direct and indirect costs, respectively, of technology i .

For the sake of simplicity, cost correlations are represented as general mathematical functions f_c^z , in which z indicates the unit being modeled and c denotes either the total direct cost or the purchase equipment cost. We provide next an overview of these functions for each particular control device. A detailed description of the correlations can be found in Appendix A.

3.2.1.1. Selective catalytic reduction (SCR). Cost estimating equations for the SCR (Eqs. (14)–(16)) consider a retrofitted plant with a high dust configuration with one full reactor unit (a separate chamber). Aqueous and anhydrous ammonia can be used as reagent. Particularly, we consider a 29.4% solution of ammonia in water. The catalyst configuration is a ceramic honey-comb. No material catalyst is selected because the design is highly site-specific. An empirical equation taken from EPA, 2002 [8] is used to determine the catalyst volume. The model assumes a NO_x reduction efficiency between 70–90%.

$$TCl_i = TDC_i + IC_i \quad i = SCR \quad (14)$$

$$TDC_i = f_{TDC}^{SCR}(HHV, m_{fuel}, T_i, WtS, BYPASS_i, \eta_{ij}) \quad i = SCR, j = NO_x \quad (15)$$

$$IC_i = \beta_i TDC_i \quad i = SCR \quad (16)$$

The notation used in these correlations is as follows: parameter HHV represents the coal heating value expressed in kJ/kg, parameter m_{fuel} is the fuel consumption rate in kg/h, parameter $T_{i=SCR}$ is the operational temperature for the SCR in Kelvin degrees, parameter WtS is the coal sulfur content in%, $BYPASS_{i=SCR}$ is a continuous variable that controls the mass flow rate treated in the equipment in%, and $\eta_{i=SCR, j=NO_x}$ is another continuous variables denoting the efficiency of the SCR device in%.

3.2.1.2. Electrostatic precipitator (ESP). With regard to the ESP, we use the cost Eqs. (17)–(21), which account for the structure, internals, rappers, power supply and auxiliary equipment of a flat plate design with PM removal efficiencies between 99.9% and 99.99%.

$$TCl_i = TDC_i + IC_i \quad i = ESP \quad (17)$$

$$TDC_i = PEC_i + DC_i \quad i = ESP \quad (18)$$

$$PEC_i = f_{PEC}^{ESP}(T_i, BYPASS_i, \eta_{ij}) \quad i = ESP, j = PM \quad (19)$$

$$DC_i = \alpha_i PEC_i \quad i = ESP \quad (20)$$

$$IC_i = \beta_i PEC_i \quad i = ESP \quad (21)$$

Where parameter $T_{i=ESP}$ is the operational temperature for the ESP in Kelvin degrees, $BYPASS_{i=ESP}$ is a continuous variable that controls the mass flow rate treated in the equipment in%, and continuous variable $\eta_{i=ESP, j=PM}$ represents the removal efficiency of the ESP in%. Note that in this case $IC_{i=ESP}$ is obtained as a percentage of the PEC , as showed in Eq. (21), and not from the TDC , as was the case in Eq. (13).

3.2.1.3. Wet limestone flue gas desulfuration (FGD). For the FGD (Eqs. (22)–(24)), we have modified the CUECost correlations [15] according to the work by Srivastava [6]. The model accounts for the cost of an equipment with 95% SO_2 control efficiency that is divided in five major equipment areas: the reagent feed, SO_2 removal area (absorbers, tanks and pumps), flue gas handling system, byproduct handling with gypsum stacking and support equipment (electrical, water and air).

$$TCl_i = TDC_i + IC_i \quad i = FGD \quad (22)$$

$$TDC_i = f_{TDC}^{FGD}(MWe, HR, WtS, HHV, BYPASS_i) \quad i = FGD \quad (23)$$

$$IC_i = \beta_i TDC_i \quad i = FGD \quad (24)$$

The notation used in Eq. (23) is as follows. Parameter MWe is the gross plant size measured in MW, whereas parameter HR represents the plant heat rate in kJ/kWh. Parameter WtS is the coal sulfur content in%, parameter HHV is the coal heating value expressed in kJ/kg and $BYPASS_{i=FGD}$ is a continuous variable that controls the mass and volume flow rate treated in the equipment in%.

3.2.1.4. Carbon Capture and Storage (CCS). For the current commercially available technology of amine-based CO_2 capture system, the total cost is calculated as follows (Eqs. (25)–(29)):

$$TCl_i = TDC_i + IC_i \quad i = CCS \quad (25)$$

$$TDC_i = PEC_i + DC_i \quad i = CCS \quad (26)$$

$$DC_i = \alpha_i PEC_i \quad i = CCS \quad (27)$$

$$IC_i = \beta_i TDC_i \quad i = CCS \quad (28)$$

The purchase equipment cost (Eq. (29)) is determined according to the work by Rao and Rubin (2002), which is based on the IECM report [19]. We assume that the CO_2 capture technology is divided in eight major components: flue gas blower, absorber, heat exchanger, regenerator, reboiler, reclaiming, solvent processing area and CO_2 compression unit. The removal efficiency is assumed to be fixed and equal to 90%.

$$PEC_i = \sum_h C_h \quad i = CCS \quad (29)$$

Data from Fisher (2005) [20] are used as reference to calculate the costs of the main components of the system using the “six-tenth rule” showed in Eq. (30):

$$C_h = C_h^{REF} \left(\frac{X_{h1} X_{hn}}{X_{h1}^{REF} X_{hn}^{REF}} \right)^{0.6} \quad \forall h = 1, 2, \dots, n \quad (30)$$

where continuous variable C_h represents the cost of component h , parameter C_h^{REF} is the known cost of a reference component, continuous variable X_h is the scaling factor used in component h and parameter X_h^{REF} is the reference scaling factor. Note that the nature and magnitude of the scaling factors depend on the component under study. Table 2 shows the ones used in this study.

Table 2
CO₂ capture system components and scaling factors.

Component (<i>h</i>)	Scaling factor X_h	Units
Flue gas blower	$ACFM_{i=CCS}^{IN}$ and $T_{i=CCS}$	m ³ /h and K
Absorber	$ACFM_{i=CCS}^{IN}$ and $T_{i=CCS}$	m ³ /h and K
Heat exchanger	$V_{solvent}$	m ³ /h
Regenerator	$V_{solvent}$	m ³ /h
Reboiler	$V_{solvent}$ and M_{steam}	m ³ /h and kg/h
Reclaimer	M_{MEA}	kg/h
Solvent processing area	$V_{solvent}$	m ³ /h
CO ₂ compression unit	M_{CO_2}	t/h

The continuous variable $ACFM_{i=CCS}^{IN}$ is the volumetric flow rate of flue gas in the device, parameter $T_{i=CCS}$ is the operational temperature of the CCS, continuous variable $V_{solvent}$ is the volumetric flow rate of the solvent, continuous variable M_{CO_2} is the CO₂ flow rate produced, M_{MEA} is the mass flow rate of makeup MEA, and M_{steam} is the mass flow rate of the steam extracted from the turbines. The following equations (Eqs. (31)–(34)) are used to determine the values of the variables used in the calculation of the scaling factors:

$$V_{solvent} = f(BYPASS_i, \phi_{lean}, y_{CO_2}, \eta_{ij}, T_i, [MEA]) \quad i = CCS, j = CO_2 \quad (31)$$

$$M_{steam} = f(BYPASS_i, \phi_{lean}, y_{CO_2}, \eta_{ij}, T_i, [MEA], q_{steam}) \quad i = CCS, j = CO_2 \quad (32)$$

$$M_{MEA} = f(BYPASS_i, m_{MEA}) \quad i = CCS \quad (33)$$

$$M_{CO_2} = f(BYPASS_i, \eta_{ij}) \quad i = CCS, \quad j = CO_2 \quad (34)$$

The notation used in these correlations is as follows. Continuous variable $BYPASS_{i=CCS}$ controls the mass and volume flow rate treated in the equipment in%, parameter ϕ_{lean} is the lean solvent CO₂ loading expressed in mole of CO₂ per mole of MEA, parameter y_{CO_2} is the CO₂ concentration in the inlet flue gas in mole%, parameter $\eta_{i=CCS, j=CO_2}$ is the capture efficiency in the CCS in%, which in this case is fixed according to the literature, parameter $T_{i=CCS}$ is the operational temperature in the CCS in Kelvin degrees, parameter $[MEA]$ is the MEA concentration in the solvent in wt.%, parameter q_{steam} is the heat content of the steam in MJ per tonne of steam, and parameter m_{MEA} is the loss of MEA measured in kg of MEA per tonne of CO₂.

3.2.2. Environmental objective functions

Environmental concerns have evolved from being conditions or constraints imposed in optimization problems in which an economic objective is maximized, to being objective functions themselves. The definition of suitable environmental indicators for process optimization remains an open issue in the literature. The Institution of Chemical Engineers (ICHEM) introduced several sustainability metrics for process industries [21] that account for environmental, social and economic indicators. Normalization schemes based on the IPPC policy were developed to translate these indicators into a single objective function that quantifies the environmental performance in terms of how sustainable a system is [22]. Some authors applied this methodology to different industries and processes such as ferroalloys manufacture, electricity production and foundry [23–25]. Following these works, we define herein two objective functions based on the environmental burden sustainability of the four main air pollutants of coal combustion.

Particularly, in this paper we consider two different indicators, one global and another local. The global environmental impact (denoted by continuous variable EIG) includes three impact categories: Atmospheric Acidification (AA), Global Warming (GW) and Ozone Depletion (OD). They are regarded as global impacts

because the potential effect on the environment is independent of where or when the pollutants are released. Each emitted pollutant j is weighted by a potency factor that expresses the emission according to a reference substance. For the normalization, we use the thresholds proposed in Annex II of the E-PRTR [26], as shown in Eq. (35).

$$EIG = \sum_j \frac{FR_{ij}^{DOWNSTREAM} t PF_{j,l}}{THR_l^{REF}} \quad \forall i, j \quad (35)$$

where parameter t is the operational time in h/year, parameter $PF_{j,l}$ is the potency factor proposed by the IChemE for substance j in impact category l , and parameter THR_l^{REF} is the threshold of the reference substance associated with impact category l in kg/year.

The local environmental impact (denoted by continuous variable EIL) accounts for substances that contribute to the Human Health Effect (HHE) and Photochemical Ozone Formation (POF) impact categories as defined by the IChemE. They are local because its real impact depends on temporal, spatial and other site-dependent variables, such as meteorological conditions. No potency factors are used in the characterization of their impact index, since there are no internationally accepted ones [27]. Besides, some substances like PM are not included in the list of the IChemE, and therefore no potency factors have been defined for them. Variable EIL is calculated as shown in Eq. (36), where the impact is assessed from the social perspective of the population exposed to potential damage substances above the political threshold established by the E-PRTR.

$$EIL = \sum_j \frac{FR_{ij}^{DOWNSTREAM} t}{THJ_j} \quad \forall i, j \quad (36)$$

Parameter THJ_j used in this equation represents the threshold of substance j in kg/year.

3.3. Other constraints

We consider a minimum capacity for each pollution control device, below which the equipment will not be installed. Particularly, we define a minimum percentage of flue gas flow rate (Eq. (37)) that must pass through the pollution control device.

$$ACFM_i^{IN} \geq \gamma ACFM_i^{UPSTREAM} y \quad \forall i \quad (37)$$

where $ACFM_i$ is the volumetric flow rate that enters the control device i in m³/h and γ is the parameter that controls the minimum capacity of the control device. The integer variable y is one if the equipment is installed and zero otherwise.

4. Solution method

We generate the solutions of model CLEAN via the ϵ -constraint method [28,29], although any other method could be used for the same purpose. Following this technique, the Pareto solutions are calculated by solving a set of single-objective problems in which one criterion is kept in the objective function and the remaining are transferred to auxiliary constraints. These single-objective problems have the following form:

(CLEANG)

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & TC(x,y) \\ \text{s.t.} \quad & h(x,y) = 0 \\ & g(x,y) \leq 0 \\ & EIG(x,y) \leq \epsilon^{EIG} \\ & x \in \mathbb{R}^n, y \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

(CLEANL)

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & TC(x,y) \\ \text{s.t.} \quad & h(x,y) = 0 \\ & g(x,y) \leq 0 \\ & EIL(x,y) \leq \varepsilon^{EIL} \\ & x \in \mathfrak{R}^n, y \in \{0,1\} \end{aligned}$$

where ε^{EIG} and ε^{EIL} are auxiliary parameters that impose limits on the environmental impact. Note that integer variables denote whether certain control devices or parts of them are installed.

5. Discussion of numerical results

We illustrate the capabilities of our approach through a case study based on a pulverized coal power plant of 500 MW (gross), burning local low-sulfur bituminous coal that meets the European emission limits for particulates, SO₂ and NO_x. Table 3 lists the main parameters of the problem.

Note that the operational and maintenance costs are omitted from the analysis since they are out of the scope of this study. They will be included in further studies. The main properties of the solvent used in the CO₂ capture system based on amine (MEA) scrubbing are shown in Table 4.

Table 5 shows the direct and indirect costs data. A detailed description of these terms can be found in Appendix B.

To project all investment costs to a common reference, we use the cost indexes and cost year basis shown in Table 6.

The MINLP was implemented in the modeling system GAMS. All the numerical results were generated on an Intel(R)Core(TM) Duo CPU with 3.00 GHz and 3.25 GB of RAM. For simplicity, and due to the reduced number of binary variables, the model was solved by exhaustive enumeration, that is, by solving a number of NLP sub-problems corresponding to all possible combinations of the binary variables and then selecting the solution with best objective function value. Each NLP sub-problem was calculated using CONOPT.

To generate the Pareto points we proceeded as follows. We first optimized each single objective separately, and then partitioned the resulting interval into a number of sub-intervals. The single objective problem was then solved for the limits of each of them, generating in each run a different Pareto point. Fig. 4 depicts the Pareto set of the problem that minimizes the cost vs the EIG (continuous green line) and the one resulting from minimizing the cost and the EIL (discontinuous blue line). For the first one, as expected, the minimum cost solution (i.e. point G1) implies the installation of the minimum number of technologies that satisfies the emission limit imposed by the legislation on SO₂ and PM. Note that the emissions of PM have no influence on the EIG. However, to meet the legal limits, it is necessary to treat all the flue gas with an efficiency of 99.93%, as shown in Table 7. The operating conditions

Table 4

Solvent features for the CO₂ control device.

Parameter	Value
Lean solvent CO ₂ loading – Φ_{lean} (mole CO ₂ /mole MEA)	0.22
Concentration of MEA in the solvent – [MEA] (%)	30
Loss of MEA – m_{MEA} (kg MEA/t CO ₂)	1.5

Table 5

Composition of direct and indirect cost parameters.

	SCR	ESP	FGD	CCS
Direct costs (α_i)	– ^a	0.85	– ^a	1.04 ^b
Indirect costs (β_i)	0.35	0.54 ^c	0.38	0.56

^a Direct costs for these technologies are integrated in the calculation of TDC in the cases of units SCR and FGD.

^b Direct cost refers to the capture purchased equipment. For the compression unit, they are calculated as 180% of the compression purchased equipment cost.

^c This value is factored from the PEC (Eq. (21)). For the rest of technologies indirect costs are factored from the TDC, as shown in Eq. (13).

Table 6

Cost year basis and CEPCI values.

Technology modeled	Cost year basis (b)	CEPCI
SCR	1998	389.5
ESP	1987	323.8
FGD	1994	368.1
CCS	2004	442.2
Reference year (a)	2009	511.8

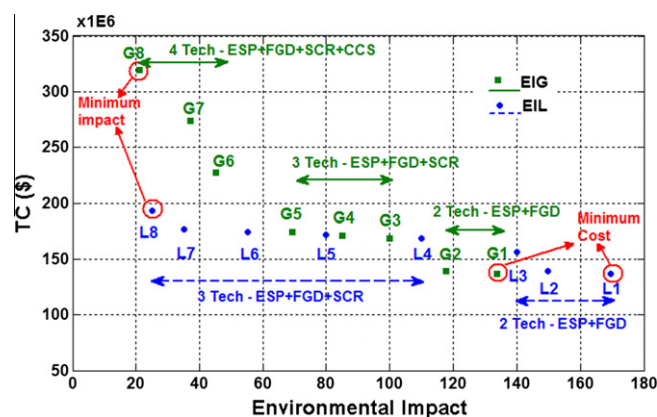


Fig. 4. Pareto set of solutions for both the economic and environmental impacts.

of the FGD in the minimum cost solution imply that 90% of the flue gas is treated with a fixed efficiency of 95%. In the minimum impact solution (i.e. point G8), all the control devices are

Table 3

Parameters for the case study.

Parameter	Value	Variables fixed	Value
Gross plant size – MWe (MW)	500	<i>Control device characteristics</i>	
Operational time – t (h/year)	8000	SO ₂ Removal eff. – η_{FGD,SO_2} (%)	95
Plan Heat Rate – HR (kJ/kWh)	11,078	CO ₂ Removal eff. – η_{CCS,CO_2} (%)	90
Fuel consumption rate – m_{fuel} (kg/h)	1.5E5	T_{ESP} (K)	480
Heat content of the steam – q_{steam} (MJ/t steam)	2000	T_{SCR} (K)	616
CO ₂ concentration in flue gas – y_{CO_2} (mole%)	12.33	T_{CCS} (K)	326
<i>Coal characteristics</i>		Minimum capacity factor (γ)	0.3
Coal heating value – HHV (kJ/lb)	27,680	<i>Emission limits – LCP directive [30]</i>	
Coal sulfur content – WtS (%)	1	ELV_{PM} (mg/Nm ³)	50
		ELV_{SO_2} (mg/Nm ³)	400
		ELV_{NO_x} (mg/Nm ³)	1200

Table 7
Design values for optimizing TC – EIG.

Solution	Objective functions		Decision variables					
			BYPASS _i (%)				$\eta_{i,j}$ (%)	
	TC (x1E6\$)	EIG	SCR	ESP	FGD	CCS	$\eta_{ESP,PM}$	$\eta_{SCR,NOx}$
G1	136.71	133.90	–	0	10	–	99.93	70
G2	139.08	117.80	–	0	2	–	99.93	70
G3	168.63	100.00	69	0	0	–	99.93	70
G4	171.30	85.00	44	0	0	–	99.93	81
G5	174.25	69.41	23	0	0	–	99.93	90
G6	226.96	45.00	0	0	0	69	99.93	90
G7	273.45	37.15	0	0	0	46	99.93	90
G8	319.38	21.02	0	0	0	0	99.93	90

implemented, which allows to reduce the EIG value by 85%, with an associated cost of almost 320 M\$. Note that as we move from the minimum cost towards the minimum impact solution, the model first focuses on treating the whole volume of gases on the FGD. Once all the flue gas passes through the desulfuration technology, the SCR is installed in order to treat NO_x (i.e. point G3). To reduce the impact further, the model decides to increase the gas volume treated along with the efficiency in the denitrification equipment. After a given point (i.e. G5), further reductions in the EIG require the installation of a carbon capture device.

As in the previous case, in the Pareto set resulting from optimizing the economic and the local environmental impact simultaneously, the minimum cost solution, with a cost of 137 M\$, entails the same operating conditions for the ESP and FGD. In the next trade-off solution (i.e., point L2), the model proposes to treat all the flue gas flow in the FGD, whereas in point L3 it increases as well the efficiency of the ESP. Further reductions in the EIL are then achieved by implementing the SCR to treat the NO_x, while keeping the initial operating conditions for the FGD and ESP, as shown in Table 8. After the entire flue gas flow passes through the denitrification technology (point L6), the model proposes to reduce the bypass in the FGD until the entire flue gas flow passes through the desulfuration device, increasing the ESP efficiency until it reaches its upper bound. Point L8 leads to the minimum local environmental impact, with a reduction of 85% and total cost of 193 M\$. Note that investments in carbon dioxide control devices have no influence on the EIL, and therefore are not implemented in the Pareto set.

The analysis of the Pareto fronts presented above can be complemented by investigating the relationships between the environmental indicators under study. Visualization methods that allow to display data sets of large dimension can be used for this purpose. Particularly, in this work we propose to use parallel coordinates plots [31] to enhance our understanding on the structure of the environmental problem, uncovering relationships between environmental indicators of concern for decision-makers.

Table 8
Design values for optimizing TC – EIL.

Solution	Objective functions		Decision variables					
			BYPASS _i (%)				$\eta_{i,j}$ (%)	
	TC (x1E6\$)	EIL	SCR	ESP	FGD	CCS	$\eta_{ESP,PM}$	$\eta_{SCR,NOx}$
L1	136.71	169.60	–	0	10	–	99.93	70
L2	139.62	149.82	–	0	0	–	99.93	70
L3	156.04	140.03	–	0	0	–	99.99	70
L4	168.58	110.00	43	0	10	–	99.93	82
L5	171.47	80.00	22	0	10	–	99.93	90
L6	174.25	55.00	0	0	10	–	99.93	90
L7	176.52	35.00	0	0	0	–	99.93	90
L8	192.93	25.09	0	0	0	–	99.99	90

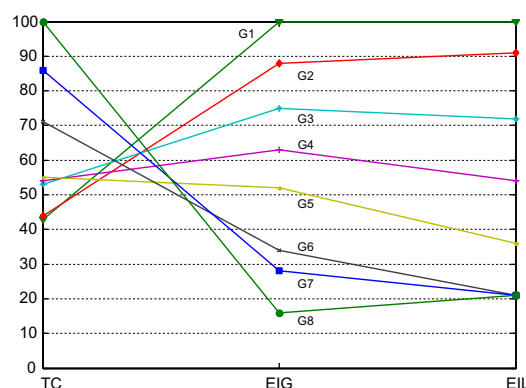


Fig. 5a. Parallel coordinates plot when minimizing EIG.

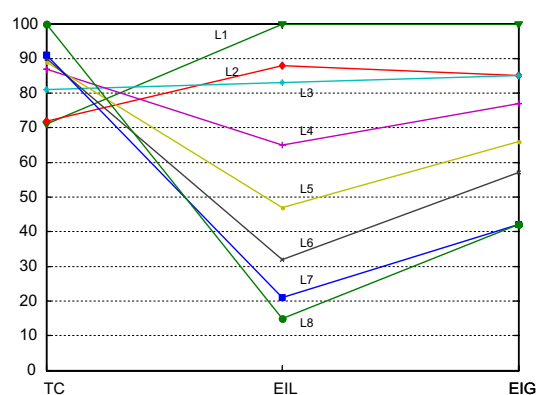


Fig. 5b. Parallel coordinates plot when minimizing EIL.

Figs. 5a and 5b show the parallel coordinates plot associated with both Pareto sets. In the bottom axis, the figures depict the different criteria, whereas the vertical axis provides the normalized value of each objective function in each solution. Data have been normalized by dividing the objective function of each solution by the maximum value among all the Pareto points. As observed, the economic and environmental objectives behave in opposite ways (i.e. they are somehow conflicting), since an improvement in one of them can only be achieved by compromising the other. In contrast, both environmental objectives tend to be nonconflicting, i.e. reductions in EIG involve lower EIL values and vice versa.

From Fig. 5a, it can be observed that EIG and EIL can be reduced up to 85% and 80%, respectively, at the expense of doubling the cost. Similar conclusions are obtained from Fig. 5b. Reductions of 85% in the EIL and 60% in the EIG with an increase of 30% from the minimum cost point are attained when EIL is minimized.

6. Conclusions

There is a growing need to produce electricity in a more sustainable manner all over the world. Cleaner coal combustion can contribute to meet this goal, given the growing importance of coal-fired power plants in the developing countries. The legislation settles different emission limit values for both new and existing plants, with the latter being more lenient. Control technologies already installed do not typically comply with the imposed emission limits. In this paper, Best Available Techniques were proposed to retrofit power plants as an effective manner to optimize their global and local environmental impact.

We presented a novel multi-objective MINLP to address this problem and highlighted its capabilities through a case study. Numerical examples showed that it is possible to reduce the global and local environmental impact to a similar extent by properly adjusting design and operating conditions. This leads in turn to an increase of the cost, which is more significant in the case of global impacts. Two different ranges of solutions can be observed in the Pareto set. In the first group the system is highly sensitivity to the investment, so little increases in TC leads to great reductions in El . These solutions implement the ESP, FGD and SCR technologies. The second shows lower sensitivity and involves the implementation of the CCS technology.

Future work will focus on incorporating operating and maintenance costs in the model. Since the high energy required for solvent regeneration in chemical absorption with MEA decreases the net output of the plant, we expect to obtain the same qualitative results. This is because the “impact avoided per unit of cost” is rather low in the CCS, so the inclusion of extra operating and maintenance costs will further worsen this ratio, making this technology even less appealing.

A visualization method based on the use of parallel coordinates plot was suggested for analyzing the results produced by the bi-criteria MINLPs. This technique has revealed that global and local environmental indicators tend to behave in a non-conflictive manner, making it possible to simplify the analysis of the Pareto set. The proposed methodology is intended to guide decision-makers towards the adoption of more sustainable process alternatives in coal burning plants.

Acknowledgements

J. Cristóbal would like to acknowledge the financial support received from the University of Cantabria. The authors wish to acknowledge support from the Spanish Ministry of Education and Science (Projects DPI2008-04099, PHB2008-0090-PC, BFU2008-00196 and C-CTM2006-00317) and the Spanish Ministry of External Affairs (Projects HS2007-0006 and A/023551/09).

Appendix A

A.1. Detailed description of the control device cost models

- SCR. Reference document: EPA air pollution control cost manual – sixth edition, 2002, EPA/600/R-09/131 [8].
 - o TDC_{SCR} – Eq. 2.36–2.43 in the section 4.2, chapter 2, page 2–42
 - o TCI_{SCR} – Table 2.5 in the section 4.2, chapter 2, page 2–44.
- ESP. Reference document: EPA air pollution control cost manual – sixth edition, 2002, EPA/600/R-09/131 [8].
 - o PEC_{ESP} – Fig. 3.5 and subsection 3.3.1 in the section 6, chapter 3, page 3–38.
 - o TCI_{ESP} – Table 3.16 in the section 6, chapter 3, page 3–46.
- FGD. Reference document: R.K. Srivastava, Controlling SO_2 emissions: a review of technologies, 2000, EPA/600/R-00/093. [6].
 - o TDC_{FGD} – Eq. 6.1–6.23 in the chapter 6, pages 46–52.
 - o TCI_{FGD} – Eq. 6.26 in the chapter 6, page 53.
- CCS. Reference document: A.B. Rao, E.S. Rubin, 2002, Details of A technical, economic and environmental assessment of amine-based CO_2 capture technology for power plant greenhouse gas control, DE-FC26-00NT40935.
 - o PEC_{CCS} – Section 4, page A-27.
 - o TCI_{CCS} – Tables 5–7 and 5–8. Ref: Fisher et al. [20].
 - o $V_{solvent}$ – Section 3.4, page A-20.
 - o M_{steam} – Section 3.4, page A-23.
 - o M_{MEA} – Section 3.4, page A-22.
 - o M_{CO_2} – Section 3.4, page A-21.

Appendix B

B.1. Extended composition of direct and indirect cost parameters

See Table B1.

Table B1

Extended composition of direct and indirect cost parameters.

Cost	SCR	ESP	FGD	CCS ^a
<i>Purchased Equipment Cost (PEC)</i>				
	Eq. (15)	Eq. (19)	Eq. (23)	Eq. (29)
<i>Direct Cost (DC)</i>				
Installation	Integrated in the model equations (Eq. (15))	54% of PEC	Integrated in the model equations (Eq. (23))	18% of PEC
Instrumentation and control		18% of PEC		8% of PEC
Electrical		8% of PEC		10% of PEC
Piping and painting		5% of PEC		20% of PEC
Buildings		As required		18% of PEC
Yard improvements		As required		6% of PEC
Service facilities		–		24% of PEC
<i>Indirect Cost (IC)</i>				
Engineering	10% of TDC	20% of PEC	10% of TDC	6% of TDC
General facilities, construction and field expenses	5% of TDC	20% of PEC	5% of TDC	10% of TDC
Fees	0	10% of PEC	3% of TDC	5% of TDC
Contingencies	20% of TDC	3% of PEC	20% of TDC	35% of TDC
Inventory & start-up	Inventory (calculated)	1% of PEC	2% of (TDC + IC)+1/12FOM + 1/12VOM + Inventory (calculated)	0.5% of (TDC + IC)+1/12FOM + 1/12VOM

TDC: Total Direct Costs.

PEC: Purchased Equipment Costs.

IC: Indirect Costs.

FOM: Fixed Operational and Maintenance Costs.

VOM: Variable Operational and Maintenance Costs.

^a Direct cost refers to the capture purchased equipment. For the compression unit, they are calculated as 180% of the compression purchased equipment cost.

References

- [1] International Energy Agency. Key world energy statistics; 2009.
- [2] Streets DG, Waldhoff ST. Present future emissions of air pollutants in China: SO₂, NO_x and CO. *Atmos Environ* 2000;34:363–74.
- [3] Environmental Protection Agency. <<http://www.epa.gov/climatechange/emissions/globalghg.html>> [19.10.11].
- [4] European Commission. Integrated Pollution Prevention and Control Reference Document on Best Available Techniques for Large Combustion Plants; 2006.
- [5] Yeh S, Rubin E. Incorporating technological learning in the coal utility environmental cost (CUECost) model: estimating the future cost trends of SO₂, NO_x, and mercury control technologies. ARCADIS Geraghty & Miller Inc. Research Triangle Park, North Carolina; 2007.
- [6] Srivastava RK. Controlling SO₂ emissions: a review of technologies. EPA/600/R-00/093; 2000.
- [7] Davison J. Performance and costs of power plants with capture and storage of CO₂. *Energy* 2007;32:1163–76.
- [8] Environmental Protection Agency, EPA air pollution control cost manual – sixth edition. EPA/600/R-09/131; 2002.
- [9] Rao AB, Rubin ES. A technical economic and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plant greenhouse gas control. *Environ Sci Technol* 2002;36:4467–75.
- [10] Kondili E. Review of optimization models in the pollution prevention and control. *Comput Aided Chem Eng* 2005;20(C):1627–32.
- [11] Shaban HI, Elkamel A, Gharbi R. An optimization model for air pollution control decision making. *Environ Modell Softw* 1997;12(1):51–8.
- [12] Ren H, Zhou W, Nakagami K, Gao W, Wu Q. Multi-objective optimization for the operation of distributed energy systems considering economic and environmental aspects. *Appl Energy* 2010;87:3642–51.
- [13] Grandinetti L, Guerriero F, Lepera G, Mancini M. A niched genetic algorithm to solve pollutant emission reduction problem in the manufacturing industry: a case study. *Comput Oper Res* 2007;34:2191–214.
- [14] Mavrotas G, Georgopoulou E, Mirasgedis S, Sarafidis Y, Lalas D, Hontou V, et al. An integrated approach for the selection of Best Available Techniques (BAT) for the industries in the greater Athens area using multi-objective combinatorial optimization. *Energy Econ* 2007;29:953–73.
- [15] Yelverton WH. CUECost workbook development documentation version 5.0. EPA/600/R-09/131; 2009.
- [16] Hoffmann BS, Szklo A. Integrated gasification combined cycle and carbon capture: a risky option to mitigate CO₂ emissions of coal-fired power plants. *Appl Energy* 2011;88:3917–29.
- [17] Perry RH. Perry's chemical engineers handbook. 7th ed. New York: McGraw-Hill; 1997.
- [18] EPRI – Electrical Power Research Institute. TAG – Technical Assessment Guide, EPRI TR 102276, Palo Alto, CA; 1993.
- [19] IECM – Integrated Environmental Control Model User Documentation. Center for Energy and Environmental Studies, Carnegie Mellon University: Pittsburgh, PA; 2001 <www.iecm-online.com>.
- [20] Fisher KS, Beitler C, Reuter C, Searcy K. Integrating MEA regeneration with CO₂ compression and peaking to reduce CO₂ capture cost. Trimeric corporation, Texas; 2005. <http://www.osti.gov/energycitations/product.biblio.jsp?osti_id=842857> [accessed 22.03.11].
- [21] IChemE, The Sustainability Metrics. IChemE Sustainable Development Progress Metrics recommended for use in the Process Industries; 2002.
- [22] Irabien A, Aldaco R, Dominguez-Ramos A. Environmental sustainability normalization of industrial processes. *Comput Aided Chem Eng* 2009;26:1105–9.
- [23] Irabien A, Aldaco R, Ruiz A, Margallo M, Rodríguez C. Environmental sustainability evaluation of secondary materials: case study, secondary materials from ferroalloys manufacture. In: Proceedings of the 7th international conference on sustainable management of waste and recycled materials in construction; 2009 – WASCON2009.
- [24] Albo J, Cristóbal J, Irabien A. Environmental sustainability assessment of coal/natural gas use in electricity generation. In: Proceedings of 20th European symposium on computer aided process engineering; 2010 – ESCAPE20. p. 1847–51.
- [25] Aldaco R, Margallo M, Irabien A. Environmental sustainability evaluation of foundry sand wastes using life cycle assessment. In: Proceedings of 3rd international conference on engineering for waste and biomass valorisation; 2010 – WASTEENG10.
- [26] European Commission. E-PRTR Regulation, 2006: Regulation N° 166/2006 of the European parliament and of the council concerning the establishment of a European pollutant release and transfer register and amending council directives 91/689/EEC and 96/61/EC.
- [27] Diniz da Costa JC, Pagan RJ. Sustainability metrics for coal power generation in Australia. *Trans IChemE, Part B, Process Safety Environ* 2006;84(B2):143–9.
- [28] Miettinen K. Nonlinear multi-objective optimization. Boston: Kluwer Academic Publishers; 1998.
- [29] Rangaiah GP. Multi-objective optimization: techniques and applications in chemical engineering. Singapore: World Scientific; 2009.
- [30] EP (European Parliament) & EC (European Council). Directive 2001/80/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2001 on the limitation of emissions of certain pollutants into the air from large combustion plants. *Official Journal of the European Communities* 2001;L 309:1–21.
- [31] Liebscher M, Witowski K, Goel T. Decision making in multi-objective optimization for industrial applications – data mining and visualization of pareto data. In: Proceedings of 8th world congress on structural and multidisciplinary optimization; 2009, June 1–5, Lisbon, Portugal.

4.2 Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Multi-objective optimization of coal-fired electricity production with CO₂ capture. *Applied Energy*. 2012, 98:266 – 272.

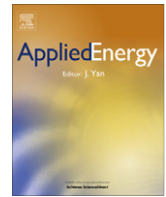
Impact factor: 5.106

Resumen

El uso de la oxidación para la captura de CO₂ aparece como una alternativa viable a la absorción basada en aminas en las plantas existentes de combustión de carbón. El objetivo de este trabajo es comparar estas dos tecnologías de captura teniendo en cuenta criterios económicos y ambientales. Para ello, se ha desarrollado un riguroso modelo de programación no lineal entera-mixta (PNLEM) bi-objetivo que permite identificar de manera sistemática la priorización de equipos de control de la contaminación a instalar en una planta existente de combustión de carbón. Esta metodología ha sido aplicada en un caso de estudio. Los resultados indican que la captura de carbono usando MEA es preferible cuando los objetivos ambientales son menores mientras que el proceso de oxidación es el elegido cuando se consideran objetivos ambientales más exigentes.

Original abstract

The use of oxy-combustion is an attractive alternative to amine based absorption of CO₂ to retrofit coal-fired power plants. The aim of this work is to compare these two carbon capture technologies taking into account environmental and economic criteria. To this end, we have developed a rigorous bi-criteria mixed-integer nonlinear programming (MINLP) model that allows identifying in a systematic and rigorous manner the best pollution control technologies (including carbon capture devices) to be installed in an existing coal-fired plant. We have applied this methodology to a coal-fired power plant of a given capacity. Numerical results indicate that carbon capture with MEA performs better for soft environmental limits while oxy-fuel combustion is the preferred choice when more stringent environmental limitations are considered.



Multi-objective optimization of coal-fired electricity production with CO₂ capture

Jorge Cristóbal^{a,*}, Gonzalo Guillén-Gosálbez^b, Laureano Jiménez^b, Angel Irabien^a

^aDepartamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica, Universidad de Cantabria, Av. de los Castros s/n, Santander 39005, Spain

^bDepartament d'Enginyeria Química, Universitat Rovira i Virgili, Av. Països Catalans 26, Tarragona 43007, Spain

ARTICLE INFO

Article history:

Received 1 December 2011

Received in revised form 13 March 2012

Accepted 17 March 2012

Available online 28 April 2012

Keywords:

Coal combustion

Electricity production

Multi-objective optimization

Environmental sustainability

CO₂ capture technologies

ABSTRACT

The use of oxy-combustion is an attractive alternative to amine based absorption of CO₂ to retrofit coal-fired power plants. The aim of this work is to compare these two carbon capture technologies taking into account environmental and economic criteria. To this end, we have developed a rigorous bi-criteria mixed-integer nonlinear programming (MINLP) model that allows identifying in a systematic and rigorous manner the best pollution control technologies (including carbon capture devices) to be installed in an existing coal-fired plant. We have applied this methodology to a coal-fired power plant of a given capacity. Numerical results indicate that carbon capture with MEA performs better for soft environmental limits while oxy-fuel combustion is the preferred choice when more stringent environmental limitations are considered.

© 2012 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

World net electricity consumption increases along with population growth. In this context, coal continues to be a promising raw material for its generation, as confirmed by its contribution (i.e., 42%) to the total energy produced worldwide. As projections show, its share will increase slightly in 2035 (i.e., 43%) [1]. Environmental concerns are gaining wider importance in society, which demands more sustainable electricity generation patterns. The outlook for the use of coal in power plants, eventually promoted by national policies, can change due to international agreements on reducing pollutant emissions, especially greenhouse gas emissions. Hence, there is a strong motivation for optimizing the design of pollution control systems so the environmental impact of these plants is reduced to the extent possible.

In previous works, we addressed the optimal design of pollution control systems in coal-fired plants retrofitted with capture devices considering environmental and economic criteria [2]. Results shed light on the most cost-effective best available techniques, being the CO₂ capture technology with amines the one with the lowest marginal decrease in environmental impact for a given increment in investment cost. In this work, we have enlarged the scope of our original model by including the oxy-fuel combustion as a technology that enables CO₂ capture without an absorption stage, so competing with the conventional post-combustion capture. This alternative to air-fired combustion with post-combustion capture replaces air by pure oxygen in conventional boilers.

This produces a CO₂ rich flue gas stream that is directly compressed after removing water. The main drawback of this technology is that it requires an air separation unit (ASU) for the oxygen production, typically a cryogenic distillation column, which leads to large investment costs and energy consumption rates.

Intensive research has been conducted on the aforementioned routes for CO₂ capture [3]. Post-combustion capture by monoethanolamine (MEA) scrubbing is currently the commercial technology used worldwide [4], while oxy-fuel combustion is still on an earlier stage of development. Many preliminary studies have shown that the latter technology is technically and economically feasible for retrofitting existing coal-fired power plants [5,6]. Rubin et al. [7] presented a detailed performance and cost model for the oxy-fuel combustion process. Several comparisons between both capture routes have been presented in the literature on the basis of different costs: investment, electricity and CO₂ avoidance [8–10]. Results have shown that both technologies can compete on the market. In fact, there is nowadays no agreement regarding which one is better positioned.

A proper assessment of these pollution control technologies requires the simultaneous consideration of several economic and environmental criteria at the early stages of the process development. Multi-objective optimization is well suited to address this type of problems in which a trade-off naturally exists between different economic and environmental indicators [11]. This approach produces a Pareto set of non-dominate solutions that feature the property that it is impossible to improve them in one objective without worsening at least one of the others. The task of decision makers is then to select the best solutions from this set of alternatives according to their preferences [12]. Some works have applied

* Corresponding author. Tel.: +34 942200931; fax: +34 942201591.

E-mail address: cristobal@unican.es (J. Cristóbal).

Nomenclature*Sets*

H	set of system components indexed by h
I	set of treatment units indexed by i
J	set of contaminants indexed by j
L	set of impact categories indexed by l

Variables

ACFM	volumetric flow rate (actual m ³ /h)
BYPASS _{i}	percentage of the stream bypassed in technology i (%)
C_h	cost of a system component h (\$)
COE	cost of the electricity (\$/MWh)
EIG	global environmental impact
FR _{i,j}	mass flow rate of pollutant j in unit i (kg/h)
FOM	fixed operational and maintenance cost (\$/year)
IC	indirect costs (\$)
RR	recovery ratio (%)
TCI	total capital investment of a control device (\$)
TDC	total direct costs (\$)
TOM	total operational and maintenance cost (\$/year)
VOM	variable operational and maintenance cost (\$/year)
X	scaling factor (various. See Eq. (6) and Table 1)
π_i	energy penalty of the technology i (MW)
$\eta_{\text{SCR,NO}_x}$	removal efficiency of the SCR on NO _x (%)

Parameters

C_{boiler}	cost of the boiler (\$)
crf	capital recovery factor
ELV _{j}	emission limit value for pollutant j (mg/Nm ³)
FC	fuel cost (\$/year)
hp_{CO_2}	CO ₂ product compression (MW)
HHV	coal heating value (Btu/lb)
i_{rate}	interest rate
M_{CO_2}	mass flow rate of CO ₂ captured (t/h)
M_{ox}	molar flow rate of output oxygen (kmole/h)
MW	gross plant size (MW)
n_i	lifetime of the device i (years)
PF _{j,l}	potency factor for the substance j in the impact category l
top	operational time (h/year)
T_a	ambient air temperature (K)
V_{FGR}	volumetric flow rate of the recycled flue gas (m ³ /h)
$\eta_{\text{FGD,SO}_2}$	removal efficiency of the FGD on SO ₂ (%)
$\eta_{\text{MEA,CO}_2}$	removal efficiency of the MEA absorption on CO ₂ (%)
$\eta_{\text{OXY,CO}_2}$	removal efficiency of the Oxy-fuel combustion on CO ₂ (%)
φ	purity of oxygen produced (%)
θ_1^{REF}	threshold of the reference substance for impact category l (kg/year)

this approach to the retrofit of pulverized coal power plants. Particularly, Eslick and Miller [13] designed a CO₂ capture and compression system taking into account cost, energy and water use and determining the optimal temperatures and sizes of the equipment units (absorber, regenerator and compressor).

This work proposes a systematic tool to assist decision-makers in the selection of optimal retrofitting options, including CO₂ capture technologies, in coal-fired power plants. The design task is mathematically expressed as a bi-criteria mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem that is solved by decomposing it into a series of MINLPs smaller in size [14]. By using our rigorous approach, we found that carbon capture with MEA performs better for soft environmental limits, while oxy-fuel combustion is the preferred choice when more stringent environmental limitations are considered.

The article is organized as follows: in Section 2, we formally state the problem to be studied. Section 3 provides an outline of the mathematical formulation, while in Section 4 the solution method it is discussed. In Section 5 we introduce the case study and discuss some numerical results. The conclusions of the work are drawn in Section 6.

2. Alternative processes

We consider a process superstructure to retrofit a coal-fired power plant that embeds different combustion technologies along with a set of pollution control devices alternatives. Two different combustion technologies are considered. The first is air-fired combustion, in which coal is pulverized into the furnace and mixed with high temperature air. This produces a flow of gaseous products that contains mainly N₂, O₂, CO₂ with a concentration of around 15% in volume and some pollutants such as SO₂, NO_x and particulate matter [15]. The second is oxy-fuel combustion, where coal is mixed with a combination of high pure oxygen and recycled flue gas. The flue gas contains CO₂ in a concentration of around 85% in volume [3]. The mixture contains also H₂O and some pollutants like SO₂ and NO_x along with non-condensable gases. This

technology requires some modifications in the plant, including a flue gas recycle system (needed to maintain the optimal temperature in the boiler), an ASU to provide pure oxygen, and a compression and purification unit (CPU) to purify the CO₂ contained in the flue gases according to the specifications [16].

Several environmental abatement units are available to reduce harmful emissions. The technologies considered in the superstructure (Fig. 1) are: (1) flue gas desulfuration (FGD) to reduce SO₂, (2) selective catalytic reduction (SCR) to reduce NO_x, and (3) chemical absorption with MEA to capture CO₂ (only used with air-fired combustion). We assume that electrostatic precipitators (ESP) are mandatory and hence must be installed in all configurations. Bypass streams are defined for all process units that allow this option (for oxy-fuel combustion is not possible). They allow to treat only a percentage of the flow stream coming from the coal plant, thereby providing the system with more flexibility. This enables designers to modify the capacity of the devices according to the applicable legislation and the decision-makers' interests.

The problem addressed in this article can be stated as follows. Given is a superstructure that embeds a set of pollution control retrofitting alternatives (i.e. SCR, FGD, oxy-fuel combustion and chemical absorption with MEA) to control a set of pollutants (i.e. NO_x, SO₂ and CO₂). Given are also the cost and performance models of these technologies as well as their capture efficiencies and the legal emission limit values. The problem then consists of selecting the optimal alternative design to retrofit the power plant such that both the total cost of the energy produced and the environmental impact are minimized simultaneously. We outline next the main equations of the optimization model.

3. Mathematical model

It is worthy clarifying that the model presented here improves the one introduced in Cristóbal et al. [2]. The economical objective function considers the cost of electricity (COE) incurred in installing and operating the abatement technologies. An outline of the

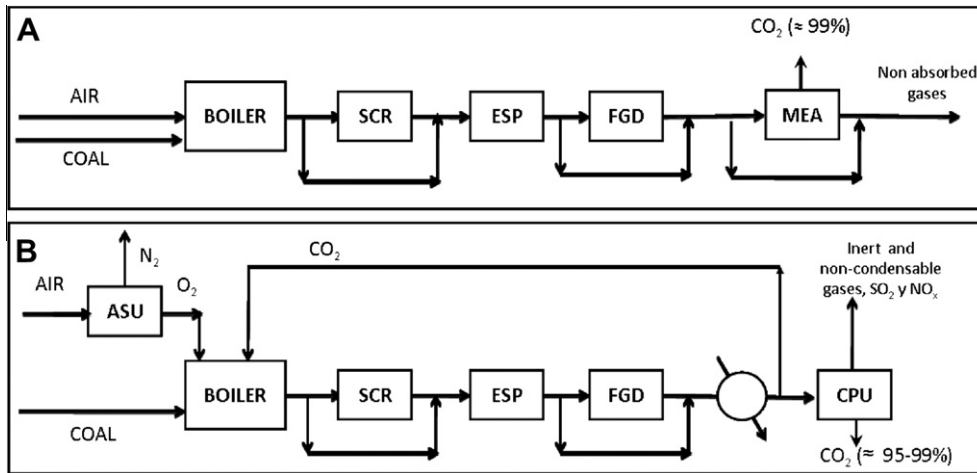


Fig. 1. Process flowcharts with pollution control devices for air-fired combustion (A) and oxy-fuel fired combustion (B).

model is provided next, with special emphasis on describing its main novelties compared to the original formulation.

3.1. Mass balance

Mass balance equations are defined for each pollution control device. We consider a by-pass variable (BYPASS_{*i*}) that is defined for all the pollution control units (FGD, SCR and MEA). This is a cost-saving strategy that allows achieving a desired overall pollutant reduction by controlling the size of the equipment installed and the composition of the stack emissions [17].

3.2. Economic objective function

The proposed model seeks to minimize the cost of electricity (COE) calculated according to Eq. (1) and quantified in \$ per MW h. The total cost accounts for the annualized capital investment, the annual operation and maintenance cost, the energy used by every pollution control device installed (which is derated from the total energy output), and the cost of the fuel consumed by the plant.

$$COE = \frac{\sum_i (TCI_i \cdot crf + TOM_i)}{(MW - \sum_i \pi_i) \cdot top} + \frac{FC}{MW \cdot top} \quad (1)$$

The notation used in this equation is as follows. TCI_{*i*} is the total capital investment of control device *i* (\$), which is calculated using non-linear performance and cost models [2,7], crf is the capital recovery factor that provides the equivalent uniform payment over the entire lifetime of the device considering a given interest rate (Eq. (2)), TOM_{*i*} is the total operating and maintenance costs of device *i* (\$/year) calculated via Eq. (3), MW is the gross annual output of the plant (MW), π_{*i*} is the energy consumed by the control device *i* (MW), top is the operational time of the plant (h/year), and FC is the cost of the fuel consumed (\$/year). Note that the energy consumed by each control device *i* is subtracted from the total energy produced by the coal plant. Hence, abatement technologies with large energy needs are penalized in the objective function.

$$crf = \frac{i_{rate}}{1 - (1 + i_{rate})^{-n_i}} \quad (2)$$

where *i_{rate}* is the interest rate and *n_i* is the life time of device *i* in years. The total operating and maintenance cost is determined as follows:

$$TOM_i = FOM_i + VOM_i \quad (3)$$

where FOM_{*i*} and VOM_{*i*} are the fixed and variable operational and maintenance costs of control device *i*, respectively. The former accounts for labor, maintenance and administrative costs, while the latter considers the costs of the chemicals consumed (reagent, inhibitors, catalysts...), utilities (i.e. water) and services used (i.e. waste water and waste disposal). Energy costs are not included because they are handled internally by derating the overall power plant. Transport and storage of CO₂ are also neglected.

Reference data used in the estimation of the cost of the main components of the carbon capture with MEA have been retrieved from the public software IECM [18] developed by Carnegie Mellon University. Cost parameters used in the calculation of the direct and indirect costs of the CO₂ capture technology with MEA have been taken from Rao and Rubin [19]. A detailed description of these cost models can be found in Appendix A.

3.2.1. Oxy-fuel combustion

For modeling the oxy-fuel combustion technology, we used the performance and cost model proposed by Rubin et al. [7]. The total capital investment (TCI) is calculated according to Eqs. (4)–(6). We assume that the oxy-fuel combustion technology is divided into eight major components (Table 1): air separation unit, flue gas recycle fan,

Table 1
Oxy-combustion system components and scaling factors.

Component (h)	Scaling factor X _{<i>h</i>}	Units	Cost year basis (b)	CEPCI
Air separation unit	M _{ox}	kmole/h	1989	355.4
	T _a	K		
	φ	%		
Flue gas recycle fan	V _{FGR}	m ³ /h	1998	389.5
Flue gas recycle ducting	V _{FGR}	m ³ /h	2001	394.3
Flue gas cooler	V _{FGR}	m ³ /h	2001	394.3
Oxygen heater	MW	MW	2001	394.3
CO ₂ purification system	M _{CO2}	t/h	1995	381.1
CO ₂ compression system	hp _{CO2}	MW	1998	389.5
Boiler modifications	C _{boiler}	\$	1998	389.5
			Reference year (a)	
			2009	511.8

where parameter M_{ox} is the molar flow rate of output oxygen, parameter T_a is the ambient air temperature, parameter φ is the purity of the oxygen produced, parameter V_{FGR} is the volumetric flow rate of the flue gas being recycled, parameter MW is the gross size of the plant, parameter M_{CO2} is the mass flow rate of CO₂ captured, parameter hp_{CO2} is the energy required for the CO₂ compression, and parameter C_{boiler} is the cost of the boiler.

fuel gas recycle ducting, flue gas cooler, oxygen heater, CO₂ purification system, CO₂ compression system, and boiler modifications.

$$TC_i = TDC_i + IC_i \quad i = OXY \quad (4)$$

$$TDC_i = \sum_h C_h \quad i = OXY \quad (5)$$

where TDC represents the total direct costs, and IC denotes the indirect costs (see Appendix A). Data from Rubin et al. [7] are used as reference to calculate the costs of the main components of the system using the “six-tenth rule” showed in Eq. (6). In order to set a reference year for comparison purposes and take into account the effect of inflation, we use the CEPCI price index (Chemical Engineering Plant Cost Index).

$$C_h = C_h^{REF} \left(\frac{X_{h1}}{X_{h1}^{REF}} \frac{X_{hm}}{X_{hm}^{REF}} \right)^{0.6} \left(\frac{CEPCI_a}{CEPCI_b} \right) \quad \forall h = 1, 2, \dots, n \quad (6)$$

where continuous variable C_h represents the cost of component h , parameter C_h^{REF} is the known cost of a reference component, continuous variable X_h is a scaling factor defined for component h , parameter X_h^{REF} is the reference scaling factor, $CEPCI_a$ is the value of the index in reference year a , and $CEPCI_b$ is the value of the same index in base year b . Note that the nature and magnitude of the scaling factors depend on the component under study. Table 1 shows the ones used for this technology, and the CEPCI values for each year.

3.3. Environmental objective function

The environmental performance is quantified according to the global environmental impact proposed by the IChemE and developed in previous literature [20], which includes three impact categories: Atmospheric Acidification (AA), Global Warming (GW) and Ozone Depletion (OD). They are regarded as global impacts because the potential effect on the environment is independent from where or when the pollutants are released. Each emitted pollutant j is weighted by a potency factor that expresses the emission on the basis of a reference substance. For the normalization, we use the thresholds proposed in Annex II of the E-PRTR. Hence, the environmental impact (denoted by EIG) is calculated using Eq. (7):

$$EIG = \sum_j \sum_l \frac{FR_{ij} \text{topPF}_{jl}}{\theta_l^{REF}} \quad i = \text{MEA, OXY} \quad (7)$$

where FR_{ij} is the mass flow rate of pollutant j in the last unit installed (i.e., $i = \text{MEA, OXY}$) expressed in kg/h, $\text{PF}_{j,l}$ is the potency factor proposed by the IChemE for substance j in impact category l , and parameter θ_l^{REF} is the threshold of the reference substance associated with impact category l in kg/year.

3.4. Additional constraints

A maximum amount of emissions allowed after retrofitting the power plant is considered. Regulations on emissions from stationary sources have been defined by the European Union for the main pollutants, and are expressed as concentration limits [21]. Compliance with the current legislation is enforced via Eq. (8).

$$\frac{FR_{ij} 10^6}{ACFM} \leq \text{ELV}_j \quad \forall j, i = \text{MEA, OXY} \quad (8)$$

where ACFM is the volumetric flow rate in the measure point in m³/h, and ELV_j is the emission limit value of pollutant j in the pollution control device i placed in the last position of the configuration (just before the discharge point) expressed in mg/Nm³.

The design task described above is mathematically formulated as a bi-criteria mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem as follows:

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & Z(x,y) = \{\text{COE}(x,y), \text{EIG}(x,y)\} \\ \text{s.t.} \quad & h(x,y) = 0 \\ & g(x,y) \leq 0 \\ & x \in \mathfrak{R}^n, y \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

where continuous variables x represent operating conditions (i.e., mass flow rates) and design decisions (i.e., capacity of a device), while binary variables y are employed to model logic decisions such as the selection of a combustion technology or pollution control device. Integer variables model the existence of certain components of the pollution control devices (e.g., number of catalyst layers in the SCR). The equality constraints $h(x,y) = 0$ represent mass balances and cost calculations. On the other hand, the inequality constraints $g(x,y) \leq 0$ represent design specifications, such as upper and lower limits imposed on process variables. $\text{COE}(x,y)$ and $\text{EIG}(x,y)$ are the objective functions representing the economic and environmental performance of the system, respectively.

4. Solution method

The ϵ -constrained method was used to solve the bi-criteria MINLP (i.e., cost vs environmental impact). This method relies on calculating a set of auxiliary single-objective problems in which one objective is kept in the objective function while the rest are transferred to constraints that impose bounds on them. Each auxiliary problem led to a MINLP with poor numerical performance due to the presence of binary variables in highly non-convex sets of equations difficult to handle using either the convex-hull or big-M reformulations [22]. To surmount this difficulty, the full space MINLP was decomposed into a series of MINLP sub-problems each one corresponding to a different structural configuration (Fig. 2). In turn, each of these sub-MINLPs was solved by exhaustive enumeration, i.e., by calculating a series of NLPs corresponding to all possible combinations of the binary variables (which denote the existence of some components of a device), and then selecting the solution with the best objective function value.

5. Case study: results and discussion

The mathematical model was applied to an existing coal-fired power plant located in Europe and retrofitted to comply with the legal emission limits showed in Table 2. For comparison purposes, we harmonized the values of certain key factors with a large influence on the COE, such as fuel properties and cost, plant size, plant capacity factor, and technology financing [23]. We considered a bituminous coal as fuel (Appalachian Medium Sulfur) whose composition and characteristics are showed in Table 2. The efficiency of the boiler varies according to the combustion technology (89.16% for air combustion, and 94.03% for oxy-fuel [7], which leads to different overall conversion efficiencies, 32% and 34%, respectively). Efficiencies of the CO₂ capture with MEA ($\eta_{\text{MEA,CO}_2}$) of up to 96% has been reported in the literature [19]. In this study we assumed an efficiency of 90%, which is the most widely used value for amine-based systems. For the oxy-combustion the capture efficiency ($\eta_{\text{OXY,CO}_2}$) falls in the range of 90–98%, a value that accounts for undesired losses during the drying and purification stage of the concentrated CO₂ stream [7]. In this study we assumed a nominal value of 90%. The value of the FGD capture efficiency ($\eta_{\text{FGD,SO}_2}$) was set to 95%. The efficiency of the SCR ($\eta_{\text{SCR,NO}_x}$) was assumed to fall within the range 70–90%. The recovery ratio (RR) is calculated for each solution as the percentage of the pollutant in the flue gas which is effectively removed in the control device. Note that this ratio depends on the efficiency of the pollution abatement technology as well as the amount of flue gas bypassed and it can be manipulated effectively by modifying the bypass.

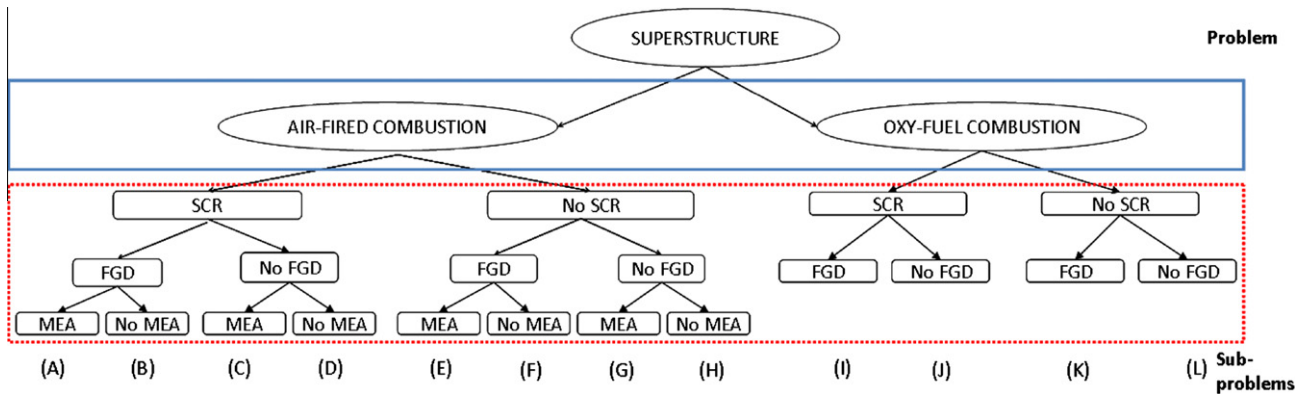


Fig. 2. Decomposition of the full space MINLP.

Table 2
Parameters for the case study.

Parameter	Value	Parameter	Value
Coal characteristics [18]		Plant characteristics	
Heating value – HHV (MJ/kg)	30.84	Gross plant size – MW (MW)	500
Carbon (wt%)	73.81	Operational time – top (h/year)	8000
Hydrogen (wt%)	4.88	Financing parameters	
Oxygen (wt%)	5.41	Lifetime of control device – n_i (years)	20
Chlorine (wt%)	6E-2	Interest rate – i_{rate}	0.07
Sulfur (wt%)	2.13	Emission limits – LCP directive [21]	
Nitrogen (wt%)	1.42	ELV _{PM} (mg/Nm ³)	50
Ash (wt%)	7.24	ELV _{SO₂} (mg/Nm ³)	400
Moisture (wt%)	5.05	ELV _{NO_x} (mg/Nm ³)	500
Cost (\$/t)	30		

Table 3
Pareto solutions for air-fired combustion.

	COE (\$/MW h)	EIG	RR _{NO_x} (%)	RR _{SO₂} (%)	RR _{CO₂} (%)
G _{1,1}	19.6	137.3	26.1	87.4	–
G _{1,2}	19.	124	26.1	91.2	–
G _{1,3}	19.7	110.7	25.2	94	–
G _{1,4}	20	97.4	40.5	95	–
G _{1,5}	20.3	84.1	61.2	95	–
G _{1,6}	20.7	70.7	81.9	95	–
G _{1,7}	26.6	57.4	90	95	20.7
G _{1,8}	37	44.1	90	95	55.8
G _{1,9}	49.7	30.7	90	95	90

As proposed by Rubin et al. [7], a dry flue gas recycle system is used where a fraction of the total flue gas is recycled back into the boiler after most of the water is condensed out. The flue gas recycle ratio can be in the range of 60 – 85% depending on the reference. In this study we assumed a value of 75%.

The MINLP model was implemented in GAMS. Every NLP sub-problem was solved using CONOPT3 on a computer Intel(R)Core(TM) Duo CPU with 3.00 GHz. In Fig. 3, we show the Pareto sets corresponding to the air-fired combustion with MEA (blue circles),

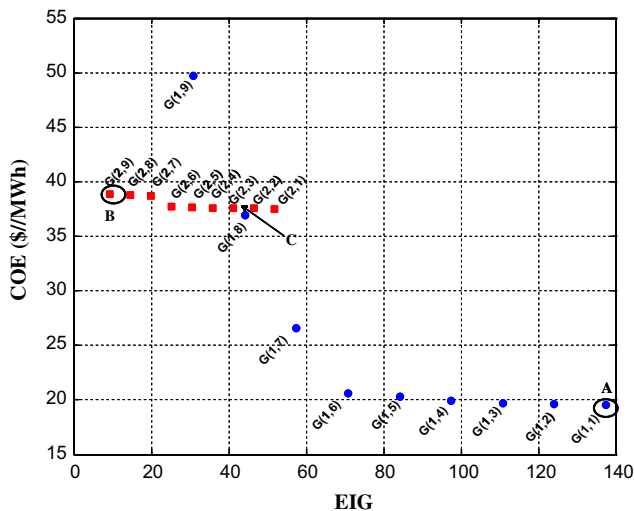


Fig. 3. Pareto curves for air-fired and oxy-fuel combustion alternatives.

and oxy-fuel combustion (red squares). Note that the overall Pareto set is the envelope of these individual Pareto fronts.

Every point in the figure entails a different pollution control design. All solutions implement ESP with an efficiency of up to 99.9% in order to achieve the emission limit on particulate matter. The Pareto solutions associated with each carbon capture design are summarized in Table 3. The minimum cost solution ($G_{1,1}$) implies the installation of the FGD unit to treat a 92% of the flue gas, and a SCR unit to treat a 29%. As we move to the left in the curve starting from the minimum cost solution, the model decides to reduce the FGD bypass gradually until it reaches zero (increasing the RR of SO₂ until its upper limit) and then does the same with the SCR bypass. Further reductions in the EIG are then attained by installing CO₂ capture with MEA. In the minimum impact solution ($G_{1,9}$), where the control devices are designed to treat all the flue gas, the EIG value is around 31, and the COE is almost 50 \$/MW h. Solutions entailing oxy-fuel combustion are displayed in Table 4. All of them present a RR for the CO₂ equal to 90%. The minimum cost solution ($G_{2,1}$) requires the installation of the FGD to treat a 78% of the flue gas flow to recover 74.1% of the SO₂. Further reductions in the EIG are achieved by reducing the bypass in the FGD until zero and by installing the SCR unit. In the minimum impact solution, the pollution control devices are designed to treat all the flue gas flow, yielding a COE of almost 39\$/MW h and an EIG of 9.

As shown in Fig. 3, the individual Pareto curves of each technology intersect in one point. Recall that the overall Pareto set is the envelope of these curves, so the best carbon sequestration option depends on the environmental target of choice. Specifically, in the intersecting point C, both alternatives lead to the same economic and environmental performance (see Table 5). The minimum cost solution (A) corresponds to a design where the air-fired combustion is used, and the FGD and SCR are installed with a bypass of 8% and 71% of flue gas, to eliminate the 87% and 26% of SO₂ and NO_x, respectively. At this point, the EIG is 137.3 and the COE is 19.57 \$/MW h, as shown in Table 3 ($G_{1,1}$). From A to the

Table 4
Pareto solutions for oxy-combustion.

	COE (\$/MW h)	EIG	RR _{NO_x} (%)	RR _{SO₂} (%)	RR _{CO₂} (%)
G _{2,1}	37.5	51.8	–	74.1	90
G _{2,2}	37.5	46.5	–	76.9	90
G _{2,3}	37.6	41.2	–	81.7	90
G _{2,4}	37.6	35.8	–	85.5	90
G _{2,5}	37.6	30.5	–	90.2	90
G _{2,6}	37.7	25.2	–	95	90
G _{2,7}	38.7	19.9	11.2	95	90
G _{2,8}	38.8	14.6	32.2	95	90
G _{2,9}	38.9	9.3	90	95	90

Table 5
Solutions with equal optimality in the intersection point (C).

Combustion technology	RR _{SO₂} (%)	RR _{NO_x} (%)	RR _{CO₂} (%)	COE (\$/MW h)	EIG
Air-fired	95	90	57.6	37.6	43.1
Oxy-fuel	80	–	90		

intersecting point C, air-fired combustion dominates oxy-fuel combustion (i.e., it shows better economic performance for a given environmental target). After C, air-fired combustion with carbon capture is dominated by oxy-fuel combustion. In the minimum impact solution (B), oxy-combustion is selected, and the value of EIG is reduced to 9.27, while the COE is 38.86 \$/MW h as shown in Table 4 (G_{2,9}).

Fig. 4 shows the breakdown of the COE and the EIG in the minimum cost solution (A), the minimum impact solution (B) and the intersecting point (C). The increase in the COE due to coal consumption is similar in all solutions because the mass flow rate for both combustion technologies is also similar (170 t/h for oxy-fuel and 180 t/h for air-fired). In point B, a large percentage of the cost (i.e., 54%) is given by the installation and operation of the CO₂ capture technology (i.e. oxy-fuel combustion). Particularly, the investment cost represents the 36% of the total cost, and a significant part is due to the ASU unit. By replacing the conventional air separation process (i.e. cryogenic), it is possible to reduce significantly the COE. In point C, both technologies lead to the same total cost, but they differ mainly in the costs of the SCR, which is larger for the case of air-fired combustion. This is because the SCR is not needed in the oxy-fuel configuration, as the legislation limit on NO_x can be fulfilled without installing it.

As seen in Fig. 4, in the minimum cost solution all pollutants contribute equally to the EIG. In point B, in which all the control devices are installed (i.e. CO₂ capture with oxy-fuel combustion, SCR and FGD), the contribution of the NO_x to the total impact is rather small. Furthermore, the impact of the CO₂ emissions is lower than that caused by the emissions of SO₂ (which depend on the sulfur content of the raw material). In point C, the contribution of SO₂ to the total impact is similar in both technologies. Furthermore, the contribution of CO₂ is larger in the air-fired combustion, while that of the NO_x is lower than in the oxy-fuel case. In the air-fired technology, the contribution of the CO₂ emissions is larger than that of the NO_x emissions, mainly because the SCR is more cost-effective, so the model decides to treat all the volume flue gas with this technology. On the other hand, in the oxy-fuel combustion the CO₂ is reduced to the maximum, since this technology does not offer the option of bypassing (i.e., all the flue gas must be treated). In this case, the impact is largely due to the NO_x emissions.

6. Conclusions and future work

In this paper we have presented a novel methodology to assist decision-makers in the selection of optimal retrofitting options, including CO₂ capture technologies, in coal-fired power plants. Our approach relies on a novel bi-criteria MINLP formulation that makes use of nonlinear models to predict the performance of the control pollution devices. This MINLP provides as output a set of configurations each achieving a unique combination of cost and environmental impact from which decision-makers should identify the one that better fulfills their preferences while satisfying at the same time the applicable legislation.

The capabilities of our approach were illustrated through its application to a case study based on a European coal fired plant. Results show that carbon capture with MEA performs better for soft environmental limits (i.e., for large environmental impact limitations), while oxy-fuel combustion is the preferred choice when more stringent environmental limitations are considered.

Further research including innovative processes for oxygen production in the ASU unit is ongoing. As showed in the results, cryogenic distillation columns represent almost 70% of the oxy-fuel technology investment costs and consume 70% of the auxiliary power demand. Hence, the use of ion transport membranes (ITM) is a promising alternative in this area, as they might cut down by more than 30% the capital requirement of the ASU, and by approximately 60% the energy required per kg of O₂ [24], making this technology more competitive in the carbon capture market.

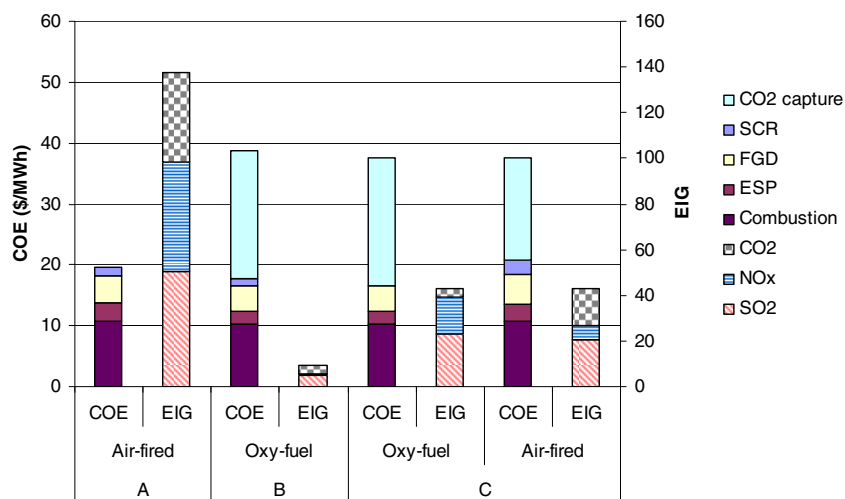


Fig. 4. Breakdown of the COE and EIG.

Table A1
Detailed description of the CO₂ capture technologies costs.

Cost	MEA [19]	OXY [7]
<i>Total direct costs (TDC)</i>		
	Ref. [2]	Eq. (5) and (6) (this study)
<i>Indirect costs (IC)</i>		
Engineering and home office		7% of TDC
General facilities		10% of TDC
Contingencies		20% of TDC
Royalty fees		0.5 of TDC
Preproduction costs	1/12 * FOM + 1/12 * VOM	
Inventory & start-up		0.5% of TDC
<i>Fixed O&M costs (FOM)</i>		
Total maintenance cost	2% of TCI	4% of TCI
Maintenance cost allocated to labor	40% of total maintenance cost	
Admin. & support labor cost	30% of total labor cost	
Operating labor	2 Jobs/shift	
<i>Variable O&M costs (VOM)</i>		
Reagent (MEA) cost	1250\$/tMEA	–
Water cost	0.2\$/m ³	–
Solid waste disposal cost	\$175\$/twaste	–
Inhibitor cost	250\$/tInhibitor	–
Chemicals	–	0.26\$/tCO ₂

Acknowledgements

J. Cristóbal would like to acknowledge the financial support received from the University of Cantabria. The authors wish to acknowledge support from the Spanish Ministry of Education and Science (Projects DPI2008-04099, CTQ2009-14420-CO2-01, BFU2008-00196 and ENE2010-14828).

Appendix A. Detailed description of the control device cost models

See Table A1.

References

- [1] IEA. International energy outlook 2010. Report DOE/EIA-0484; 2010. <<http://www.eia.gov/oiaf/ieo/coal.html>> [last access 24.08.11].
- [2] Cristóbal J, Guillén-Gosálbez G, Jiménez L, Irabien A. Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal burning. *Appl Energy* 2011;92:369–78.
- [3] Stolten D, Scherer V. Efficient carbon capture for coal power plants. Germany: Wiley-VCH; 2011.
- [4] Zhu L, Fan Y. A real options-based CCS investment evaluation model: case study of China's power generation sector. *Appl Energy* 2011;88:4320–33.
- [5] Hu Y, Yan J. Characterization of flue gas in oxy-coal combustion processes for CO₂ capture. *Appl Energy* 2012;90:113–21.
- [6] Buhre BJP, Elliott LK, Sheng CD, Gupta RP, Wall TF. Oxy-fuel combustion technology for coal-fired power generation. *Prog Energy Combust* 2005;31:283–307.
- [7] Rubin ES, Rao AB, Berkenpas MB. Technical documentation: oxygen-based combustion systems (oxyfuels) with carbon capture and storage (CCS). Department of Engineering and Public Policy, Paper 75; 2007. <<http://repository.cmu.edu/epp/75>>.
- [8] Kanniche M, Gros-Bonnivard R, Jaud P, Valle-Marcos J, Amann JM, Bouallou C. Pre-combustion, post-combustion and oxy-combustion in thermal power plant for CO₂ capture. *Appl Therm Eng* 2010;30:53–62.
- [9] Davison J. Performance and costs of power plants with capture and storage of CO₂. *Energy* 2007;32:1163–76.
- [10] Singh D, Croiset E, Douglas PL, Douglas MA. Techno-economic study of CO₂ capture from an existing coal-fired power plant: MEA scrubbing vs. O₂/CO₂ recycle combustion. *Energy Convers Manage* 2003;44:3037–91.
- [11] Guillén-Gosálbez G, Grossmann IE. Optimal design and planning of sustainable chemical supply chains under uncertainty. *AIChE J* 2009;55(1):99–121.
- [12] Ren H, Zhou W, Nakagami K, Gao W, Wu Q. Multi-objective optimization for the operation of distributed energy systems considering economic and environmental aspects. *Appl Energy* 2010;87:3642–51.
- [13] Eslick JC, Miller DC. A multi-objective analysis for the retrofit of a pulverized coal power plant with a CO₂ capture and compression process. *Comput Chem Eng* 2011;35:1488–500.
- [14] Biegler LT, Grossmann IE, Westerberg AW. Systematic methods for chemical process design. Prentice Hall; 1997.
- [15] Sanpasertparnich T, Idem R, Bolea I, deMontigny D, Tontiwachwuthikul P. Integration of post-combustion capture and storage into a pulverized coal-fired power plant. *Int J Greenhouse Gas Control* 2010;4:499–510.
- [16] Darde A, Prabhakar R, Tranier JP, Perrin N. Air separation and flue gas compression and purification units for oxy-coal combustion systems. *Energy Procedia* 2009;1:527–34.
- [17] Rao AB, Rubin ES. Identifying cost-effective CO₂ control levels for amine-based CO₂ capture systems. *Ind Eng Chem Res* 2006;45:2421–9.
- [18] IECM – Integrated Environmental Control Model User Documentation. Center for energy and environmental studies. Pittsburgh, PA: Carnegie Mellon University; 2001. <www.iecm-online.com>.
- [19] Rao AB, Rubin ES. A technical, economic, and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plants greenhouse gas control. *Environ Sci Technol* 2002;36:4467–75.
- [20] Irabien A, Aldaco R, Dominguez-Ramos A. Environmental sustainability normalization of industrial processes. *Comput Aid Chem Eng* 2009;26:1105–9.
- [21] EP (European Parliament) & EC (European Council). Directive 2001/80/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2001 on the limitation of emissions of certain pollutants into the air from large combustion plants. Official J Eur Commun 2001; L 309: 1–21.
- [22] Grossmann IE. Review of nonlinear mixed-integer and disjunctive programming techniques. Department of Chemical Engineering, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA 15213, USA; 2002.
- [23] Rubin ES, Chen C, Rao AB. Cost and performance of fossil fuel power plants with CO₂ capture and storage. *Energy Policy* 2007;35:4444–54.
- [24] Bernardo P, Drioli E, Golemme G. Membrane gas separation: a review of state of the art. *Ind Eng Chem Res* 2009;48:4638–63.

4.3 Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. MINLP model for optimizing electricity production from coal-fired power plants considering carbon management. Energy Policy. 2012, 51:493 – 501.

Impact factor: 2.723

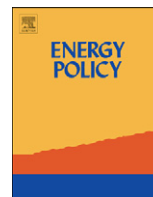
Resumen

Con el fin de alcanzar las reducciones en gases de efecto invernadero acordados en el Protocolo de Kioto, los países deben establecer políticas de control y estimular a las industrias para reducir sus emisiones. En el marco del sistema de intercambio de emisiones “cap and trade” existen dos opciones: (i) comprar/vender permisos de emisión; y (ii) reducir emisiones invirtiendo en tecnologías de captura. En este contexto, cada industria debe elegir la mejor estrategia considerando sus características particulares. Este trabajo propone una herramienta que facilite la toma de decisión en el diseño de la producción de electricidad en plantas de combustión de carbón existentes considerando la gestión del carbono. Nuestro enfoque se basa en un novedoso modelo de programación no lineal entera-mixta (PNLEM) que minimiza el coste de la electricidad producida (COE) para un precio dado del permiso de emisión de CO₂ en el mercado. Se demuestran las capacidades de este PNLEM a través de un caso de estudio que afronta la decisión de actualizar con tecnología de captura una planta de combustión de carbón. Los resultados muestran que el precio del permiso de emisión de CO₂ en el mercado que induce a la inversión en captura de carbono está en el rango de 22-30 \$/tCO₂eq, dependiendo de la cantidad de permisos gratuitos distribuidos a la planta. En esta solución, la tecnología que se implanta es la de oxidación (que se impone a la tecnología post-combustión que usa monoetanolamina como solvente).

Original abstract

In order to achieve the reduction in greenhouse gases committed in the Kyoto Protocol, countries must establish control policies and encourage industries to reduce their emissions. Two main options arise in a cap and trade framework: (i) buying/selling emission allowances; and (ii) reducing emissions by investing in abatement technologies. In this context, each industry must choose the best strategy considering its particular features. This work proposes a systematic tool to assist decision-makers in the design of coal-fired energy production with carbon management in existing power plants. Our approach relies on a novel mixed integer non-linear program (MINLP) that minimizes the cost of electricity (COE) for a given price of CO₂ allowance on the trade market. We demonstrate the capabilities of this MINLP through a case study that addresses

the retrofitting of a coal-fired power plant. Results show that the price of the CO₂ allowance on the market that effectively induce the investment in carbon capture falls in the range 22-30 \$/tCO₂eq depending on the quantity of allowances distributed for free. In this solution, carbon capture is accomplished by implementing the oxy-fuel combustion technology (which is preferred to the post-combustion capture using monoethanolamine as solvent).



MINLP model for optimizing electricity production from coal-fired power plants considering carbon management

Jorge Cristóbal^{a,*}, Gonzalo Guillén-Gosálbez^b, Laureano Jiménez^b, Angel Irabien^a

^a Universidad de Cantabria, Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica, Avd. de los Castros s/n, Santander 39005, Spain

^b Departament d'Enginyeria Química, Universitat Rovira i Virgili, Av. Països Catalans 26, Tarragona 43007, Spain.

H I G H L I G H T

- ▶ We optimize electricity production from coal-fired power plants considering carbon management.
- ▶ Our approach relies on a novel mixed integer non-linear programming (MINLP) optimization model.
- ▶ We minimize the cost of electricity (COE) for a given price of CO₂ allowance in the trade market.
- ▶ The allowance price that effectively induce the investment in CCS falls in the range 22–30 \$/tCO₂eq.
- ▶ Oxy-fuel is preferred to the post-combustion capture with MEA in a cap and trade framework.

A R T I C L E I N F O

Article history:

Received 3 April 2012

Accepted 23 August 2012

Available online 18 September 2012

Keywords:

Coal combustion

CO₂ cap and trade

Electricity production optimization

A B S T R A C T

In order to achieve the reduction in greenhouse gases committed in the Kyoto Protocol, countries must establish control policies and encourage industries to reduce their emissions. Two main options arise in a cap and trade framework: (i) buying/selling emission allowances; and (ii) reducing emissions by investing in abatement technologies. In this context, each industry must choose the best strategy considering its particular features. This work proposes a systematic tool to assist decision-makers in the design of coal-fired energy production with carbon management in existing power plants. Our approach relies on a novel mixed integer non-linear program (MINLP) that minimizes the cost of electricity (COE) for a given price of CO₂ allowance on the trade market. We demonstrate the capabilities of this MINLP through a case study that addresses the retrofitting of a coal-fired power plant. Results show that the price of the CO₂ allowance on the market that effectively induce the investment in carbon capture falls in the range 22–30 \$/tCO₂eq depending on the quantity of allowances distributed for free. In this solution, carbon capture is accomplished by implementing the oxy-fuel combustion technology (which is preferred to the post-combustion capture using mono-ethanolamine as solvent).

© 2012 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Global warming is nowadays on the top of the list of the world's environmental issues. International agreements like the Kyoto Protocol (and prospective legislation or policies) urge governments to reduce their CO₂ emissions. In this context, countries must find efficient ways to achieve these reductions while satisfying at the same time the population needs.

By ratifying the Kyoto Protocol, every Member State commits to reducing a given quantity of CO₂ by 2020 with respect to 1990 levels (UN, 1998). One of the mechanisms proposed to promote the

committed reductions is the establishment and operation of a cap and trade system. The Government imposes a cap (i.e., limit) on the total amount of greenhouse gases that the Member State can emit in line with the Kyoto's target. Within this cap, allowances are given (i.e., grandfathered) to the companies through a National Allocation Plan (NAP) and they can be sold or bought on a free market as needed. By imposing a limit on the total number of allowances available, it is guaranteed that they will have a market value.

Mandatory Emissions Trading Schemes (ETS) are already operating around the world (European Union, Norway, Switzerland, and New Zealand). Other trading systems are under planning (Korea, Japan, Brazil and China) or under design (Australia and USA) (International Energy Agency (IEA), 2010).

The European Union (EU) established an allowance trading system based on the directive 2003/87/EC (European Parliament

* Corresponding author. Tel.: +34942200931; fax: +34942201591.
E-mail address: cristobal@unican.es (J. Cristóbal).

& European Council (EP&EC), 2003) that entails three trading periods with its own NAP for allocating the free allowances. Each Member State proposes the total quantity of allowances that must be in line with the reduction objective within the framework of the Kyoto Protocol. These allocation plans are overseen and assessed by the European Commission. If the quantity of allowances grandfathered by the country is too high or cannot ensure meeting its Kyoto target, then the plan might be rejected (e.g., Estonian or Polish NAP for 2008–2012).

The electricity generation industry is by far the largest producer of greenhouse gases (41% of the world emissions), followed by the transport sector and other industrial sectors (23% and 20%, respectively) (International Energy Agency (IEA), 2011). Particularly, coal is nowadays the most widely used raw material for generating electricity. Hence, adopting tailored environmental policies in this sector might contribute significantly to global warming mitigation. Coal plants can reduce CO₂ emissions by implementing different measures (i.e., fuel switching, improvement of efficiency and secondary measures). Since no allowances will be presumably allocated free of charge for electricity production, it is expected that each plant will have the freedom to implement the least expensive approach to reduce its emissions.

Since 1990 when the Clean Air Act Amendments established the SO₂ emissions cap and trade system, emission trading has gained wider interest and has recently become a crucial policy instrument to address air pollution. Ackerman et al. (1999) discussed the advantages and drawbacks of a cap and trade system based on the SO₂ experience in USA, some of which can be extrapolated to the actual EU-ETS. Emission trading has been studied in different contexts, such as supply chain design (Bojarski et al., 2009), electricity production (Zhang et al., 2012) and in the techno-economic evaluation of carbon capture technologies (i.e., oxy-fuel combustion) (Xiong et al., 2011; Wang et al., 2010).

Future prices on emission allowances will have a large influence on the adoption of carbon capture technologies. Fluctuations and volatility in prices may trigger investment in carbon capture and storage (CCS) (Szolgayova et al., 2008). Conversely, low prices (like those established in 2010 within the European Union Emissions Trading Scheme EU-ETS) might prevent coal plants from installing capture technologies (Von Stechow et al., 2011). Several strategies can arise depending on the market value of the CO₂ allowance as shown in Fig. 1. The plant can either (1) decide to discharge more than the limit, buying the emissions excess on the market; or (2) reduce its emissions by investing in capture systems (with the incentive of having more emission allowances to sell on the market, as pointed out by Portney, 2003).

Identifying the best strategy for carbon management is not a trivial task. In previous research (Cristóbal et al., 2012a, 2012b), we assessed different pollution control device alternatives to retrofit coal-fired power plants in order to reduce emissions in a

cost-effective manner. Numerical results showed that carbon capture with monoethanolamine (MEA) performs better for soft environmental limits (i.e., large amount of emissions limitations), while oxy-fuel combustion shows better performance when more stringent emissions limitations are considered.

This work enlarges the scope of our previous contribution by proposing a systematic tool for the design of coal-fired energy production that considers explicitly carbon management along with CO₂ emissions trading. The design task is mathematically formulated as a mixed-integer nonlinear programming (MINLP) problem that seeks to minimize the total cost. The article is organized as follows. Section 2 provides the problem statement and introduces the model, including the mathematical formulation and the solution method. Section 3 presents the case study and the scenario assignment. Section 4 analyzes the results and discusses which strategy is the most appropriate in each scenario. Finally Section 5 presents the conclusions drawn from the study.

2. Problem statement and model

2.1. Problem statement

Coal fired power plants represent one of the most important domestic energy sources in many countries worldwide. Recent studies (Baris, 2011) have concluded that the use of coal in the long term is only compatible with the goals described in the Green Paper (Commission of the European Communities (CEC), 2006) (i.e., environmental sustainability and competitiveness) and Kyoto Protocol targets if CCS and emission reduction measures are both implemented in coal plants.

The problem addressed in this article can be stated as follows. Given are the performance of a coal-fired power plant and a set of pollution control retrofitting alternatives to be installed in a cap and trade framework where a limit on the GHG emissions is imposed. Given are also the cost and composition of the raw material and the carbon mitigation policy that establishes the quantity of emission allowances grandfathered to the power plant. The goal is to identify the optimal strategy that combines retrofitting and trading emissions considering a given price of the CO₂ allowance on the trade market such that the total cost of the electricity is minimized.

2.2. Mathematical formulation

This work represents a step forward over previous research, in which we developed a model for retrofitting coal fired plants (Cristóbal et al., 2012a). Our new formulation accounts for ETS along with the use of abatement technologies. It has been shown that imposing measures that force plants to be retrofitted with

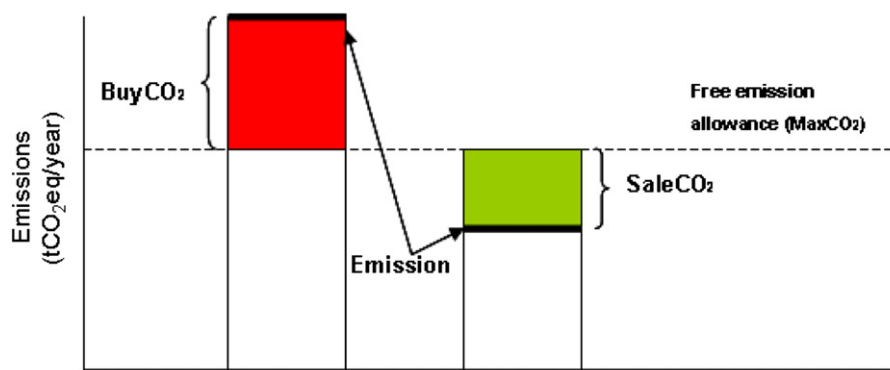


Fig. 1. Cap and trade system.

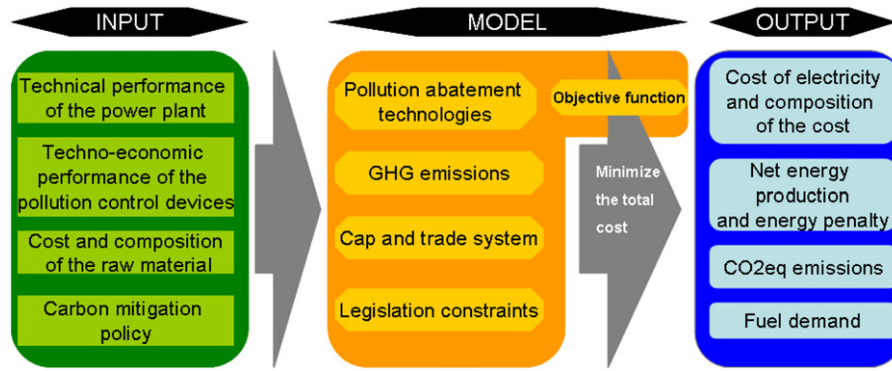


Fig. 2. Optimization superstructure.

pollution control technologies might be less efficient than a trading system (Ackerman et al., 1999). The main advantage of trading is that it provides a framework where each power plant has the option to select the less expensive alternative to reduce emissions. Hence, to provide decision-support in this context, we have developed an MINLP model that identifies the synchronised abatement and trading strategies that optimize the economic performance considering a given CO₂ allowance price in the ETS.

Fig. 2 outlines the approach proposed in this article, which consists of three main blocks: input, model and output. The input block includes all the data entered to the model: the technical performance of the power plant, the techno-economic performance of the pollution control alternatives, the cost and composition of the raw material, as well as the carbon mitigation policy, including the quantity of emission allowances grandfathered and their price in the ETS. The model block, which is the core of our approach, is based on a MINLP model that comprises the following sets of equations: GHG emissions, pollution abatement technologies, cap and trade system, legislation constraints and objective function equations. Finally, the output block provides the optimal carbon management strategy, including the electricity cost, net energy production and energy penalty, CO₂ eq emissions and fuel demand. We outline next the main equations of the optimization model that seeks to minimize the total cost.

2.2.1. GHG emissions

The unit used to measure GHG emissions is the carbon dioxide equivalent (CO₂eq) that describes for a given mixture of GHG, the amount of CO₂ that would have the same global warming potential (GWP). The main two pollutants responsible for global warming in coal combustion are CO₂ and NO_x (note that there are in fact many more chemicals affecting global warming, but in coal combustion these are the most important ones). The CO₂eq emission is calculated as showed in Eq. 1:

$$FR_{CO_2eq} = FR_{CO_2} + 40FR_{NO_x} \quad (1)$$

where FR_{CO_2eq} denotes the total quantity of emissions released by the power plant measured in tons/year. In this equation, the quantity of each pollutant is multiplied by a factor that translates the potential damage of each pollutant into a common basis expressed in CO₂eq. By definition, the potency factor associated with CO₂ is one, while for the NO_x is 40 (ICHEM, 2002). These factors are multiplied by the flows of CO₂ and NO_x, denoted by FR_{CO_2} and FR_{NO_x} , respectively, and both expressed in tons/year.

2.2.2. Pollution abatement technologies

Recent environmental policies aim to promote the retrofit of existing power plants using Best Available Techniques (BATs) for reducing NO_x and CO₂ emissions (Cohan and Douglass, 2011). The selective catalytic reduction (SCR) is recognised nowadays as the

most cost-effective alternative for large combustion plants, and it is widely applied for controlling NO_x emissions in facilities with a power above 100 MW. CO₂ capture technologies are under development and technical information is still quite scarce. According to Riensche et al. (2011), there are two technologies that stand out over the rest for retrofitting pulverized coal-fired power plants (PC). The first is post-combustion capture with chemical absorption using Monoethanolamine (MEA) as solvent. This “end-of-pipe” technology is placed downstream of the air-fired boiler of the PC. The CO₂ is separated from the flue gas by absorption and subsequent desorption by thermal stripping with steam. The second is oxy-fuel combustion (OXY). Retrofitting a PC with OXY requires two main elements: an air separation unit (ASU), which is needed to introduce pure oxygen along with the coal, and a recycle stream of flue gas for adjusting the combustion temperature. The oxy-fuel process produces flue gas with a high CO₂ concentration, which is removed from the water vapour by cooling and subsequent water condensation. Both technologies for controlling the CO₂ (i.e., MEA and OXY) are incompatible in the same retrofitted configuration. This is because the former uses an air-fired boiler, while the latter requires a change in the boiler to accommodate the pure oxygen feed, as shown in Fig. 3.

In the configuration shown in Fig. 3B, it is possible to retrofit the SCR, the MEA or both. Similarly in Fig. 3C, we could retrofit the SCR, the OXY or both. As proposed by Hildebrand and Herzog (2009), partial capture is permitted in SCR and MEA, but not in OXY. A portion of the flue gas can be bypassed around the equipment straight to the stack. With this measure, capital and operational costs can be reduced and the plant output can be improved. The recovery ratio (RR) is calculated as the percentage of the pollutant in the flue gas which is effectively removed in the control device. This metric depends on the efficiency of the pollution abatement technology i used for pollutant j ($\eta_{i,j}$) and the quantity of flue gas bypassed.

We have modelled each pollution abatement technology using algebraic equations that allow to determine their performance and cost from the operating conditions and properties of the input streams (Eqs. 2–4).

$$TCI_i = f(RR_j, T_i, WtS, HHV) \quad i = SCR, j = NO_x \quad (2)$$

$$TCI_i = f(RR_j, T_i, V_{solvent}, M_{steam}, M_{MEA}) \quad i = MEA, j = CO_2 \quad (3)$$

$$TCI_i = f(V_{FCR}, M_{ox}, T_a, \rho) \quad i = OXY, \quad j = CO_2 \quad (4)$$

The notation used in Eqs. 2–4 is as follows. TCI_i is the total capital investment of pollution abatement technology i in \$, RR_j is the recovery ratio of pollutant j measured in %, T_i is the operational temperature of technology i in Kelvin degrees, WtS the coal sulphur content in %, HHV is the heating value of the raw material in MJ/kg, $V_{solvent}$ is the volumetric flow rate of the solvent in m³/h,

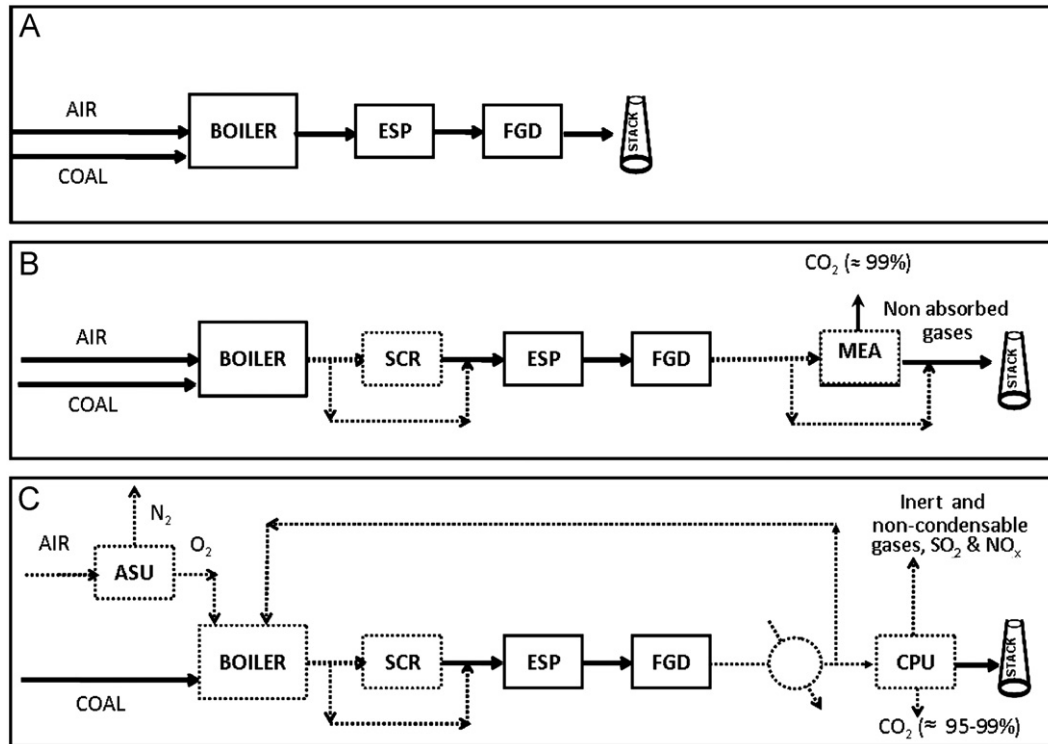


Fig. 3. Discontinuous lines represent the retrofitted elements. (A) Base case configuration of the power plant; (B) air-fired combustion retrofitted configuration; (C) oxy-fuel combustion retrofitted configuration. Acronyms: ESP—electrostatic precipitator; FGD—flue gas desulfurization; SCR—selective catalytic reduction; MEA—carbon capture using monoethanolamine; ASU—air separation unit; CPU—CO₂ purification unit.

M_{steam} is the mass flow of the steam extracted from the turbines in kg/h, M_{MEA} is the mass flow rate of makeup solvent MEA in kg/h, V_{FGR} is the volumetric flow rate of the flue gas being recycled in m³/h, M_{ox} is the molar flow rate of output oxygen from the ASU in kmole/h, T_a is the ambient air temperature in Kelvin degrees, and φ is the purity of the oxygen produced in the ASU measured in %.

Further details on the models associated with the retrofit alternatives can be found in Cristóbal et al. (2012a, 2012b).

2.2.3. Legislation constraints

Legislation on several pollutants from coal combustion has been published during the past 40 years. NO_x emissions have been a major concern since the beginning of the 1970s when the Clean Air Act stated the necessity of Performance Standards for industrial and mobile sources. Nowadays, there are regulations on NO_x emission levels worldwide. In Europe, those limits are defined as concentration limits (European Parliament & European Council (EP&EC), 2001) (i.e., mg/Nm³). With regard to CO₂, there are no legal concentration limits. However, the emission is controlled by the cap and trade system explained in the next lines. In our model the compliance with current legislation is enforced via Eq. 5:

$$\frac{FR_{i,j} 10^6}{ACFM} \leq ELV_j \quad j = NO_x, \quad i = MEA, OXY \quad (5)$$

where $ACFM$ is the volumetric flow rate in the measure point in m³/h, and ELV_{NO_x} is the emission limit value of NO_x in the pollution control device i placed in the last position of the configuration just before the discharge point in mg/Nm³.

2.2.4. Cap and trade system

Among the different policies proposed to control the CO₂ emissions and therefore achieve the committed reductions in

the Kyoto Protocol, the cap and trade system is one of the most extended. Each government has to deal with the individual sources to verify that the cap imposed is accomplished. If the industrial plant emits a quantity above the cap, emission allowances must be bought on the market until equaling the real emission. Governments must impose economic sanctions proportional to the excess of tons emitted above the cap without emission allowances. This will encourage energy producers to comply with the system imposed. The cap and trade system is modeled following the work by Bojarski et al. (2009) as showed in Eq. 6:

$$FR_{CO_2eq} = MaxCO_2 + BuyCO_2 - SaleCO_2 \quad (6)$$

A maximum of CO₂ free emission allowances, expressed in tons/year, is assumed ($MaxCO_2$). This limit is defined by governments in the NAP. We consider that any amount of rights can be obtained ($BuyCO_2$) or sold ($SaleCO_2$) at the emissions market, both measured in tons/year.

2.2.5. Objective function

The objective function to be minimized is the cost of electricity (COE), which considers the cost of generating electricity in the plant along with the global warming reduction expenditures and is measured in \$/MW h. Power plants usually internalize the cost of cleaner technologies in the cost of the product. An increase in the COE for the power plant could result in an increase of the bill paid by the final user of the electricity. As shown in Eq. 7, the COE involves the following terms: investment and operation cost of the pollution abatement technologies, fuel cost and cost/revenue of the emission allowances on the trade market. This last term is affected by the price of the allowances on the market. Ehrhart et al. (2003) stated that in a static approach (like in this study) this price will depend on the scarcity of allowances on the market and it will not depend on the initial distribution of allowances (i.e., $MaxCO_2$). The market price will lie between the marginal cost

of the most expensive abatement measure activated and the cheapest non-activated measure.

$$COE = \frac{\sum_i (TCl_i crf + TOM_i) + FC + (BuyCO_2 ValueCO_2 - SaleCO_2 ValueCO_2)}{(MW - \sum_i \pi_i) top} \quad (7)$$

In this equation, TCl_i is the total capital investment of pollution abatement technology i (\$), which is calculated using non-linear performance and cost models (Cristóbal et al., 2012a, 2012b) and set to a reference year (i.e., 2009), crf is the capital recovery factor that provides the equivalent uniform payment over the entire lifetime of the device considering a given interest rate, TOM_i is the total operating and maintenance costs of device i (\$/year), MW is the gross annual output of the plant (MW), π_i is the energy consumed by the control device i (MW), top is the operational time of the plant (h/year), FC is the cost of the fuel consumed (\$/year), $BuyCO_2$ and $SaleCO_2$ are the quantities of emission allowances bought or sold on the trade market, respectively, (tons/year), and $ValueCO_2$ is the price of the allowance on the trade market (\$/tonCO₂), which is considered to be the same for buying and selling.

Thus, the design problem can be expressed in compact form as follows:

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & Z(x,y) = \{COE(x,y)\} \\ \text{s.t.} \quad & h(x,y) = 0 \\ & g(x,y) \leq 0 \\ & x \in \mathfrak{R}^n, y \in \{0,1\} \end{aligned}$$

where continuous variables x represent operating conditions (i.e., mass flow rates), while binary variables y model logic decisions such as the selection of a combustion technology and/or a pollution control device. The equality constraints $h(x,y)=0$ represent mass balances and cost calculations, while the inequality constraints $g(x,y) \leq 0$ model design specifications that impose upper and lower limits on some process variables. Finally, $COE(x,y)$ is the objective function to be minimized.

2.3. Solution method

The MINLP model (Z) was implemented in the algebraic modeling system GAMS. This MINLP shows poor numerical performance owing to the presence of binary variables in highly non-convex sets of equations. To circumvent this difficulty, the full space MINLP was decomposed into a series of MINLP sub-problems each one corresponding to a different configuration (Fig. 3(B) and (C)). In turn, each of these sub-MINLPs was solved by exhaustive enumeration, i.e., by calculating a series of NLPs (corresponding to all possible combinations of the binary variables denoting the existence of components of a certain device), and then selecting the solution with the best objective function. These NLPs were solved using CONOPT3 on a computer Intel(R)-Core(TM) Duo CPU with 3.00 GHz. The objective function COE was minimized for both retrofitted options (i.e., air-fired and oxy-fuel fired) considering different values of the CO₂ allowance on the market ($ValueCO_2$).

Let us note that given the nonconvex nature of the problem, we cannot offer any theoretical guarantee of convergence to the global optimum. Hence, the solutions generated must be regarded as locally optimal.

3. Case study and scenarios

We illustrate the capabilities of the MINLP model by means of a case study that addresses the design of an existing PC with a capacity of 500 MW located in Europe. The plant is already

Table 1
Parameters of the case study.

Parameter	Value
Gross plant size-MW (MW)	500
Operational time-top (h/year)	8000
Lifetime of control device (years)	20
Interest rate	0.07
NO _x Emission limit value-ELV _{NO_x} (mg/Nm ³)	500
OXY efficiency- η_{OXY,CO_2} (%)	90
MEA efficiency- η_{MEA,CO_2} (%)	90
SCR efficiency- η_{SCR,NO_x} (%)	90

Table 2
Base coal (AMS) characteristics.

Parameter	Value
Heating value-HHV (MJ/kg)	30.84
Carbon (Wt%)	73.81
Hydrogen (Wt%)	4.88
Oxygen (Wt%)	5.41
Chlorine (Wt%)	0.06
Sulfur (Wt%)	2.13
Nitrogen (Wt%)	1.42
Ash (Wt%)	7.24
Moisture (Wt%)	5.05
Cost (\$/t)	45.24

retrofitted with the current BAT on particle control and SO₂ (i.e., electrostatic precipitator (ESP) and flue gas desulfurization (FGD), respectively). The basic parameters of the power plant are summarized in Table 1.

For the OXY configuration, a dry flue gas recycle system is used. The recycle ratio is usually in the range of 60–85% depending on the reference. For this study we assumed a value of 75%.

The base coal used in the analysis is a medium sulphur bituminous coal (i.e., Appalachian Medium Sulphur (AMS)) whose composition is adapted from the IECM database (IECM, 2001) (see Table 2).

Two key issues arise when defining the case study. The first is the method used for the assignment of allowances in the NAP, which depends typically on the country. One of the most widely used methodologies for large electricity producers is based either on benchmarks (i.e., the value that reflect the average greenhouse gas emission of the 10% best performing plants in the EU) or on the BAT reference. This strategy is the one followed by United Kingdom, Spain and Italy, among others. The idea here is to reward efficient facilities and encourage those that do not meet the benchmark or the BAT reference to invest in cleaner technologies. An alternative methodology consists of allocating allowances according to the historical electricity production of the sector (e.g., Denmark, Ireland and Norway). This method favours facilities with larger emissions because they face more difficulties when attempting to adapt to the ETS. Other countries (e.g., Germany) use a mixture of both depending on whether the plant is new or it is already under operation.

The second important aspect is the quantity of allowances distributed for free. In the NAP I, which covered the period 2005–2007, all the allowances were distributed for free. The NAP II (200–2012) projected that at least 90% of the allowances were assigned free of charge (Delarue et al., 2008). For the third trading period (2013–2020), the EU foresees that most of the allowances will be auctioned instead of freely allocated (European Union (EU), 2008), with full auctioning being the rule for electricity generators. Nevertheless, the EU-ETS offers the opportunity for

certain Member States to deviate from this rule with respect to existing power plants, allowing the grandfathering of 70% of the emissions in 2013 and with the goal of reducing progressively this quantity to zero by 2020.

In this work we have studied several scenarios (see Table 3) that cover a wide range of plausible future assumptions regarding the allowances assigned. For calculating the assignment of allowances, we use the BAT reference, which suggests an emission factor for PC of 0.92 tCO₂/MW h. With regard to the quantity of emissions grandfathered, we consider values that range from the maximum emission allocated (70%) for countries allowed to deviate from the full auctioning rule, to the minimum (0%), which is the most likely scenario for the developed countries in 2013.

4. Results and discussion

Figs. 4–7 show the results obtained with the MINLP model. Specifically, the figures display, for every scenario considered and pollution abatement strategy, the electricity cost resulting from different prices on CO₂ emissions. These points have been generated by running the MINLP for the corresponding values of allowances and cost of CO₂ emissions.

It can be seen from Figs. 4–7 that the CO₂eq abatement strategies behave similarly in all the scenarios. As seen, there is a part of the curve where the best strategy is to buy all the emission allowances on the market and avoid the installation of pollution abatement devices. As we increase the price of the CO₂ emissions, we reach a point in which the model decides to capture NO_x by reducing the bypass in the SCR (thereby increasing the recovery ratio) and to buy at the same time allowances for

Table 3
Scenarios defined for the case study.

Scenario	Allowances assigned (%)	Allowances assigned (x10 ⁵ tCO ₂ eq/year)
1	0	0
2	25	9.2
3	50	18.4
4	70	25.76

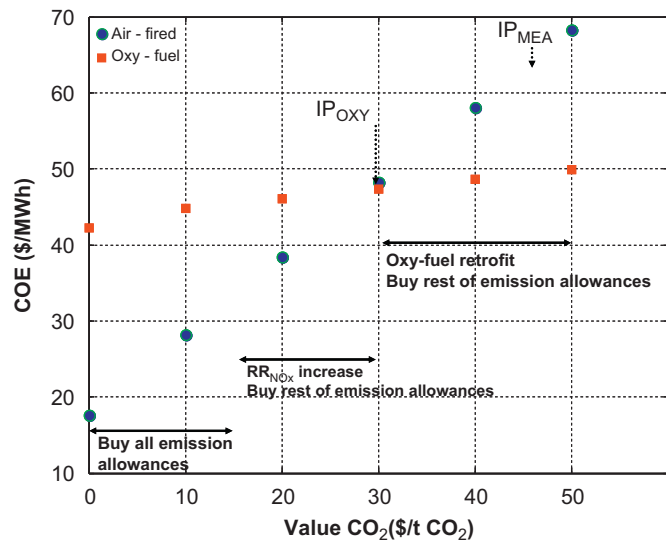


Fig. 4. Implementation of CO₂eq abatement strategies depending on the CO₂ allowance value on the market in scenario 1.

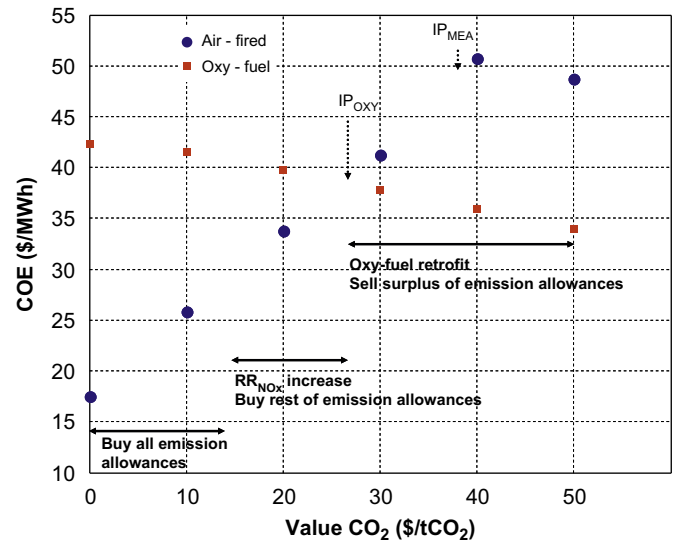


Fig. 5. Implementation of CO₂eq abatement strategies depending on the CO₂ allowance value on the market in scenario 2.

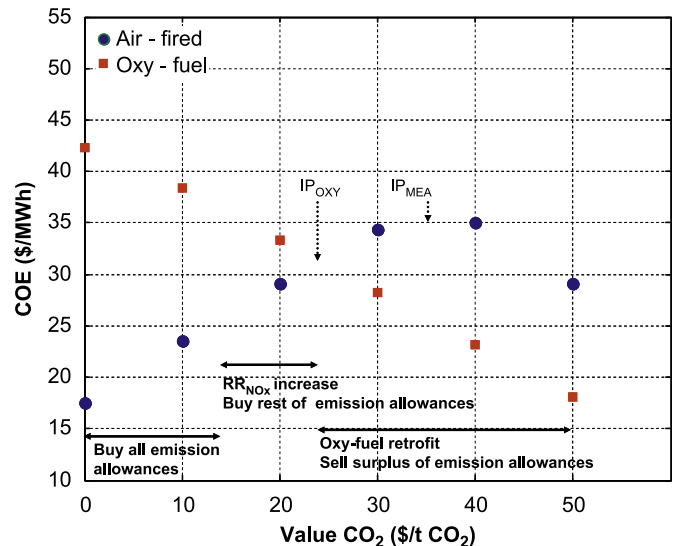


Fig. 6. Implementation of CO₂eq abatement strategies depending on the CO₂ allowance value on the market in scenario 3.

the emissions exceeding the limit established. As we increase further the price of the CO₂ emissions, we approach gradually a third point that entails retrofitting the power plant with CCS.

For the discussion that follows, we will make use of two widely used metrics: the cost of CO₂ avoidance and the indicator price. The cost of avoidance (COA) is commonly used to compare capture technologies installed in energy-intensive CO₂ processes. This metric takes into account the reduction in CO₂eq emissions attained per unit of net energy produced (see Fig. 8). The COA is therefore calculated according to Eq. 8 and measured in \$/tCO₂eq avoided:

$$COA = \frac{COE_{capture} - COE_{reference}}{Emissions_{reference} - Emissions_{capture}} \quad (8)$$

where $COE_{capture}$ is the cost of electricity with capture technology and $COE_{reference}$ is the cost of electricity of the reference plant, both measured in \$/MW h. $Emissions_{reference}$ and $Emissions_{capture}$ account for the emissions of CO₂eq per unit of energy produced in the

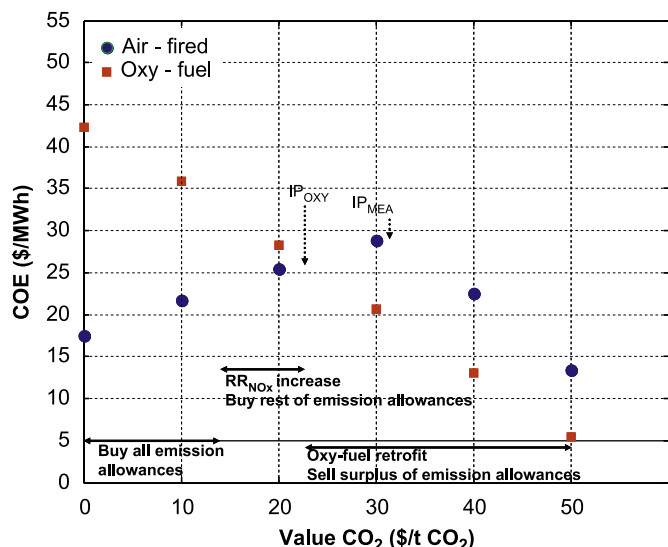


Fig. 7. Implementation of CO₂eq abatement strategies depending on the CO₂ allowance value on the market in scenario 4.

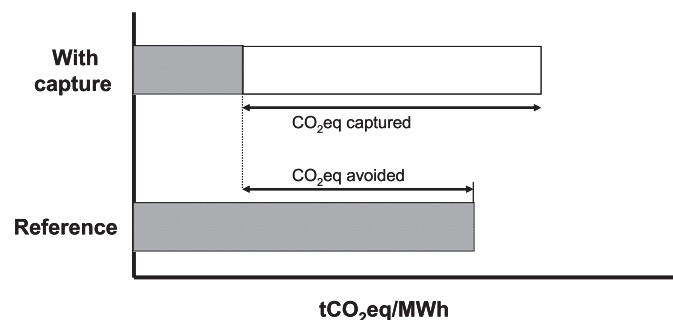


Fig. 8. Calculation of the CO₂ avoidance for a capture technology.

Table 4
Cost of avoidance of the pollution abatement technologies.

Pollution abatement technology	COA (\$/tCO ₂ eq avoided)
MEA	47
OXY	28

reference plant and the plant with capture technology, respectively, both expressed in tCO₂eq/MW h. The coal power plant without SCR and CCS (with COE_{reference} and Emissions_{reference} equal to 16.27 \$/MW h and 1.09 tCO₂eq/MW h, respectively) is taken as reference plant in the calculations. Table 4 shows the values calculated for each technology.

The indicator price (IP), introduced by Ehrhart et al. (2003), is the level of market price that should be given to the emission allowances such that the abatement measure becomes profitable (i.e., it is implemented in the power plant).

For scenario 1 (Fig. 4), where no allowances are distributed for free, which is presumably the scenario for developed countries in 2013, the IP value match up with the COA shown in Table 4. The power plant will be retrofitted with the abatement measure when the cost of avoiding one ton of CO₂eq using this technology equals the value of the allowance (i.e., one ton of CO₂eq) on the market. As we can see in Table 5, the best option when the price of the allowances is below 15 \$ is buying them on the trade market. In these solutions the configuration design includes the retrofitted SCR in order to comply with the legislation constraint imposed

on NO_x emissions. Note that only a 28% of the stream is treated in the SCR while the rest is bypassed. At almost 15 \$, the model starts decreasing the allowances bought in the trade marked by increasing the recovery ratio of NO_x (reducing the bypass in the SCR). Finally, the OXY technology is installed for allowances prices of almost 30 \$. The configuration in this case, which is equal to that in Fig. 3C, implements the OXY and SCR technologies. The change in the recovery ratio in the optimal solutions (shady cells) from 10.5 to 90% is due to the installation of the capture device which recovers 90% of the CO₂. Furthermore, the quantity of CO₂ allowances bought in the trade market decreases from 39.17 to 3.72 (x10⁵) t/year because the capture technology allows reducing the emissions. The IP of the MEA is almost 45 \$, which indicates that this technology will never be preferred over OXY for CO₂ capture.

For scenarios 2, 3 and 4, in which some emissions are grandfathered, the IP for OXY and MEA changes. The higher the allowances distributed for free, the lower the IP of the abatement measures. For OXY, the IP decreases from almost 30 \$ in scenario 1 to 22 \$ in scenario 4 (where 70% of the emissions are given for free). In the case of MEA, the decrease in the IP is more pronounced (from 45 \$ in scenario 1 to 31 in scenario 4). The installation of CCS in the case in which some allowances are grandfathered allows the power plant to reduce the emissions below the threshold and sale the surplus allowances on the market. This leads to lower COE values, as shown in Tables 6–8.

It is important to put the results obtained in a global context and remark the important role that CCS retrofit options may play in global warming mitigation. A life cycle impact assessment of the electricity production process (including raw material extraction, transport, combustion and waste/wastewater treatment) reveals that the combustion process represents an 88% of the life cycle CO₂eq/MW h emissions (Cristóbal et al., 2010). According to this, the use of OXY and MEA has the potential to reduce the life cycle emissions of coal-based electricity generation from 1.26 to almost 0.26 tCO₂eq/MW h (which represents 78.6% emission reduction). The electricity produced by coal combustion in the World is 8119 TW h. The use of CCS in coal-based power plants would deal to an avoidance of 8119 millions tons of CO₂. This quantity represents the 27.5% of the total CO₂ world emissions (i.e., 29549.3 MtCO₂ taking into account emissions from fuel combustion only) (International Energy Agency (IEA), 2011).

5. Conclusions

Reductions in CO₂ emissions committed by the Parties in the Kyoto Protocol can be achieved by individual sources through different strategies in a cap and trade framework, i.e., buying/selling emission allowances and reducing emissions by investing in abatement technologies. We have proposed herein a systematic tool to identify optimal strategies for minimizing the cost of electricity produced by burning coal. The capabilities of the model have been illustrated through a case study of an existing European coal-fired power plant.

We showed that the selection of the least cost strategy in each scenario depends on the projected values of the CO₂ emission allowance on the market. This value will determine whether it is better to buy allowances or implement emission control technologies. The indicator price represents the price of the CO₂ emission allowance for which investments in capture technologies are economically viable. Results show that for CO₂ prices below 15 \$, buying allowances leads to better economic performance. Reducing NO_x emissions using the SCR and buying allowances is the optimal strategy for CO₂ prices around 15 \$. When some emission allowances are distributed for free in the NAP, the indicator price

Table 5
Optimal solutions for scenario 1.

ValueCO ₂ (\$/tonCO ₂)	Air-fired fuel combustion				Oxy-fuel combustion			
	COE (\$/MW h)	Buy CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	Sale CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	RR _{CO₂eq} (%)	COE (\$/MW h)	Buy CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	Sale CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	RR _{CO₂eq} (%)
0	17.55	42.48	0	3	42.29	4.99	0	86.6
10	28.18	42.48	0	3	44.76	3.72	0	90
20	38.36	39.17	0	10.5	46.05	3.72	0	90
30	48.2	39.17	0	10.5	47.34	3.72	0	90
40	58.03	39.17	0	10.5	48.62	3.72	0	90
50	68.27	4.4	0	90	49.91	3.72	0	90

*Overall optimal solutions are marked in the table.

Table 6
Optimal solutions for scenario 2.

ValueCO ₂ (\$/tonCO ₂)	Air-fired fuel combustion				Oxy-fuel combustion			
	COE (\$/MW h)	Buy CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	Sale CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	RR _{CO₂eq} (%)	COE (\$/MW h)	Buy CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	Sale CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	RR _{CO₂eq} (%)
0	17.55	33.28	0	3	42.29	0	4.21	86.6
10	25.88	33.28	0	3	41.59	0	5.48	90
20	33.75	39.97	0	10.5	39.7	0	5.48	90
30	41.27	29.97	0	10.5	37.8	0	5.48	90
40	50.74	0	4.82	90	35.91	0	5.48	90
50	48.69	0	4.82	90	34.02	0	5.48	90

*Overall optimal solutions are marked in the table.

Table 7
Optimal solutions for scenario 3.

ValueCO ₂ (\$/tonCO ₂)	Air-fired fuel combustion				Oxy-fuel combustion			
	COE (\$/MW h)	Buy CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	Sale CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	RR _{CO₂eq} (%)	COE (\$/MW h)	Buy CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	Sale CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	RR _{CO₂eq} (%)
0	17.55	24.08	0	3	42.29	0	13.41	86.6
10	23.58	24.08	0	3	38.41	0	14.68	90
20	29.13	24.08	0	10.5	33.34	0	14.68	90
30	34.34	24.08	0	10.5	28.27	0	14.68	90
40	35.08	0	14.02	90	23.2	0	14.68	90
50	29.11	0	14.02	90	18.13	0	14.68	90

*Overall optimal solutions are marked in the table.

Table 8
Optimal solutions for scenario 4.

ValueCO ₂ (\$/tonCO ₂)	Air-fired fuel combustion				Oxy-fuel combustion			
	COE (\$/MW h)	Buy CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	Sale CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	RR _{CO₂eq} (%)	COE (\$/MW h)	Buy CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	Sale CO ₂ (x10 ⁵ t/year)	RR _{CO₂eq} (%)
0	17.55	16.72	0	3	42.29	0	20.77	86.6
10	21.74	16.72	0	3	35.87	0	22.04	90
20	25.43	13.41	0	10.5	28.26	0	22.04	90
30	28.8	13.41	0	10.5	20.65	0	22.04	90
40	22.55	0	21.38	90	13.03	0	22.04	90
50	13.45	0	21.38	90	5.42	0	22.04	90

*Overall optimal solutions are marked in the table.

lies between 20 and 30 \$ for oxy-fuel combustion, and between 30 and 40 \$ for MEA, and it reaches the value of 45 \$ when no allowances are grandfathered. In view of these results, we conclude that oxy-fuel combustion is more cost-effective than MEA in a cap and trade framework.

Another important conclusion of this study is that the quantity of emissions grandfathered in the NAP has a strong influence on the performance of the capture technology. The higher the number of allowances distributed for free, the lower the indicator price for carbon capture technologies. For the OXY, this indicator

can be reduced from 30 \$ in the case of 0% of free emission rights to almost 22 \$ when 70% are distributed. In the case of MEA, the emissions grandfathered are even more important as they can reduce the indicator price from 45 \$ to 31 \$ in the same scenarios. A low indicator price can trigger the decision of installing these technologies more easily.

We would like to highlight that this study does not pretend to discourage decision-makers from investing in CCS technology. Our objective is to estimate a trigger price that would make the investment in capture technology profitable, identifying at the same time the best technologies in terms of economic performance. Our tool can also be used by policy makers in order to assess the environmental benefits that might be achieved by imposing taxes on CO₂ emissions.

Future CO₂ prices in the trade market are dynamic and uncertain. We believe that measures adopted for the third phase (2013–2020) such as total auctioning for electricity producers and the entrance of aviation's emissions in the ETS will give stability and a rising trend of CO₂ prices due to the scarcity of allowances in the market. Hence, in future research we will apply stochastic programming and multi-period models for determining the optimal timing of investments in CO₂ capture technologies under market price uncertainty. Another potential area for improvement concerns the development of an efficient solution strategy for the MINLP. The exhaustive enumeration procedure applied here might be impractical when attempting to solve larger models with more alternatives for carbon capture. Hence, we will focus in the future on devising algorithms that will exploit the particular structure of the MINLP. Particularly, methods based on disjunctive programming seem particularly appealing in this context, since most of the nonlinear equations disappear when some units are not selected during the optimization.

Acknowledgements

J. Cristóbal would like to acknowledge the financial support received from the University of Cantabria. The authors wish to acknowledge support from the Spanish Ministry of Education and Science (projects CTQ2009-14420-C02-01, DPI2012-37154-C02-02, CTQ2012-37039-C02-01, BFU2008-00196 and ENE2010-14828)

References

- Ackerman, F., Biewald, B., White, D., Woolf, T., Moomaw, W., 1999. Grandfathering and coal plant emissions: the cost of cleaning up the Clean Air Act. *Energy Policy* 27, 929–940.
- Baris, K., 2011. The role of coal in energy policy and sustainable development of Turkey: is it compatible to the EU energy policy? *Energy Policy* 39, 1754–1763.
- Bojarski, A.D., Lainez, J.M., Espuña, A., Puigjaner, L., 2009. Incorporating environmental impacts and regulations in a holistic supply chains modelling: an LCA approach. *Computers and Chemical Engineering* 33, 1747–1759.
- CEC—Commission of the European Communities, 2006. Green Paper: a European strategy for sustainable, competitive and secure energy. COM(2006) 105 final.
- Cohan, D.S., Douglass, C., 2011. Potential emissions reductions from grandfathered coal power plants in the United States. *Energy Policy* 39, 4816–4822.
- Cristóbal, J., Albo, J., Irabien, A., 2010. Environmental sustainability assessment of electricity from fossil fuel combustion: carbon footprint. *Low Carbon Economy* 1, 86–91.
- Cristóbal, J., Guillén-Gosálbez, G., Jiménez, L., Irabien, A., 2012a. Multi-objective optimization of coal-fired electricity production with CO₂ capture. *Applied Energy*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.03.036>.
- Cristóbal, J., Guillén-Gosálbez, G., Jiménez, L., Irabien, A., 2012b. Optimization of global and local pollution control in electricity production from coal burning. *Applied Energy* 92, 369–378.
- Delarue, E., Voorspools, K., D'haeseleer, W., 2008. Fuel switching in the electricity sector under the EU ETS: review and prospective. *Journal of Energy Engineering* 134 (2), 40–46.
- Ehrhart, K.M., Hoppe, C., Schleich, J., Seifert, S., 2003. Strategic aspects of CO₂-emissions trading: theoretical concepts and empirical findings. *Energy & Environment* 14 (5), 579–597.
- EP (European Parliament) & EC (European Council) 2001. Directive 2001/80/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2001 on the limitation of emissions of certain pollutants into the air from large combustion plants. *Official Journal of the European Communities*, L 309, 1–21.
- EP (European Parliament) & EC (European Council), 2003. European Directive 2003/87/EC of the European Parliament and of the Council of 13 October 2003 Establishing a Scheme for Greenhouse Gas Emission Allowance Trading within the Community and Amending Council Directive 96/61/EC.
- EU—European Union, 2008. Position of the European parliament adopted on 17 December 2008 (EP-PE_TC1-COD(2008)0013).
- Hildebrand, A.N., Herzog, H.J., 2009. Optimization of carbon capture percentage for technical and economic impact of near-term CCS implementation at coal-fired power plants. *Energy Procedia* 1, 4135–4142.
- ICHEM—Institution of Chemical Engineers, 2002. The Sustainability Metrics: Sustainable Development Progress Metrics recommended for use in the Process Industries. http://nbis.org/nbisresources/metrics/triple_bottom_line_indicators_process_industries.pdf.
- IEA—International Energy Agency, 2010. Reviewing existing and proposed emissions trading systems. http://www.iea.org/papers/2010/ets_paper2010.pdf (last access: 30-11-2011).
- IEA—International Energy Agency, 2011. CO₂ emissions from fuel combustion—Highlights. <http://www.iea.org/co2highlights/co2highlights.pdf> (last access: 30-11-2011).
- IECM—Integrated Environmental Control Model User Documentation, 2001. www.iecm-online.com; Center for Energy and Environmental Studies, Carnegie Mellon University: Pittsburgh, PA.
- Portney, P.R., 2003. Market-based approaches to environmental policy—a “refresher course”. *Resources*, Summer 2003, 15–18.
- Rienschke, E., Nazarki, J., Schiebahn, S., Weber, M., Zhao, L., Stolten, D., 2011. Capture options for coal power plants. In: Stolten, D., Scherer, V. (Eds.), *Efficient Carbon Capture for Coal Power Plants*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co., KGaA, pp. 45–81.
- Szolgayova, J., Fuss, S., Obersteiner, M., 2008. Assessing the effects of CO₂ price caps on electricity investments—a real options analysis. *Energy Policy* 36, 3974–3981.
- UN—United Nations, 1998. Kyoto Protocol to the United Nations framework convention on climate change. <http://unfccc.int/resource/docs/convkp/kpeng.pdf>.
- Von Stechow, C., Watson, J., Praetorius, B., 2011. Policy incentives for carbon capture and storage technologies in Europe: a qualitative multi-criteria analysis. *Global Environmental Change* 21, 346–357.
- Wang, Y., Zhao, Y.C., Zhang, J.Y., Zheng, C.G., 2010. Technical-economic evaluation of O₂/CO₂ recycle combustion power plant based on life-cycle. *Science China Technological Sciences* 53, 3284–3293.
- Xiong, J., Zhao, H.B., Zheng, C.G., 2011. Techno-economic evaluation of oxy-combustion coal-fired power plants. *Chinese Science Bulletin* 56, 3333–3345.
- Zhang, D., Ma, L., Liu, P., Zhang, L., Li, Z., 2012. A multi-period superstructure optimisation model for the optimal planning of China's power sector considering carbon dioxide mitigation. *Energy Policy* 41, 173–183.

4.4 Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Kraslawski A., Irabien A. Stochastic MILP model for optimal timing of investments in CO₂ capture technologies under uncertainty in prices. Energy. 2013, 54:343 – 351.

Impact factor: 3.487

Resumen

La reducción de los gases de efecto invernadero que provienen de las plantas existentes de carbón es una medida imprescindible para lograr las reducciones acordadas en el Protocolo de Kioto. En el marco de un sistema de intercambio de emisiones "cap and trade", se propone un enfoque basado en programación lineal entera-mixta (PLEM) estocástica bietapa cuyo fin es determinar el momento óptimo de inversión y las decisiones de operación de tecnologías de captura de CO₂ teniendo en cuenta la incertidumbre en los precios del CO₂ en el mercado. En el PLEM, el parámetro considerado incierto se describe a través de escenarios con una probabilidad de ocurrencia conocida y generados utilizando técnicas de Monte Carlo y con una dinámica estocástica de crecimiento de los precios basada en el movimiento Browniano geométrico (GBM). El modelo considera dos objetivos económicos: el valor esperado de las ganancias y el riesgo financiero. Se demuestran las capacidades de la herramienta con su aplicación a un caso de estudio basado en una planta de combustión de carbón. El enfoque del PLEM es aplicable a un amplio rango de procesos e industrias que se enfrenten a problemas similares con captura de carbono.

Original abstract

Reduction in greenhouse gases emissions of existing coal-fired power plants is a necessary action to attain the global reductions committed in the Kyoto Protocol. In the framework of a cap and trade system, we propose a two-stage stochastic mixed-integer linear programming (MILP) approach for the optimal investment timing and operation of a CO₂ capture system under uncertainty in the CO₂ allowance price. In the MILP, uncertainties are modeled via scenarios that are generated from a set of probability functions obtained using the Geometric Brownian Motion (GBM) approach in conjunction with Monte Carlo sampling. The model takes into account two economic objectives: the expected net profit and the financial risk. We demonstrate the capabilities of the tool presented through a case study based on a coal fired power plant. Our MILP approach can be applied to a wide range of processes and industries that deal with carbon sequestration issues.



Stochastic MILP model for optimal timing of investments in CO₂ capture technologies under uncertainty in prices



Jorge Cristóbal^{a,*}, Gonzalo Guillén-Gosálbez^b, Andrzej Kraslawski^c, Angel Irabien^a

^a *Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica, Universidad de Cantabria, Av. de los Castros s/n, Santander 39005, Spain*

^b *Departament d'Enginyeria Química, Universitat Rovira i Virgili, Av. Països Catalans 26, Tarragona 43007, Spain*

^c *Department of Chemical Engineering, Lappeenranta University of Technology, P.O. Box 20, FIN-53851 Lappeenranta, Finland*

ARTICLE INFO

Article history:

Received 10 October 2012

Received in revised form

22 January 2013

Accepted 26 January 2013

Available online 5 March 2013

Keywords:

Coal-based electricity production

CO₂ capture technology

Stochastic CO₂ prices

Uncertainty

MILP model

Financial risk

ABSTRACT

Reduction in greenhouse gas emissions of existing coal-fired power plants is a necessary action to attain the global reductions committed in the Kyoto Protocol. In the framework of a cap and trade system, we propose a two-stage stochastic mixed-integer linear programming (MILP) approach for the optimal investment timing and operation of a CO₂ capture system under uncertainty in the CO₂ allowance price. In the MILP, uncertainties are modeled via scenarios that are generated from a set of probability functions obtained using the Geometric Brownian Motion (GBM) approach in conjunction with Monte Carlo sampling. The model takes into account two economic objectives: the expected net profit and the financial risk. We demonstrate the capabilities of the tool presented through a case study based on a coal fired power plant. Our MILP approach can be applied to a wide range of processes and industries that deal with carbon sequestration issues.

© 2013 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Society is aware of the problems that are present in today's world. In 1992 it took place the UN Conference on Environment and Development in Rio de Janeiro, known as the "Earth Summit", where global problems such as poverty, war, growing gap between industrialized and developing countries and the degradation of the global environmental system were discussed. Nowadays, 20 years after Rio92, EU citizens consider climate change as the second most serious problem just after poverty, hunger and lack of drinking water, and even more serious than the economic situation or the availability of energy [1].

One of the first milestones in the fight to rein in climate change was set in Rio92 where the Framework Convention on Climate Change (FCCC) was agreed. This settled the basis for the Kyoto Protocol, which is the instrument to create legal responsibility in developed countries that should reduce their Greenhouse Gases (GHG). The European Union (EU-15) decided to reduce their emissions of carbon dioxide by 8% (below levels in 1990) by 2012,

while the EU-27 has set a reduction target of 20% to be achieved by 2020.

Based on recent data of the European Environmental Agency [2], the EU-15 Kyoto commitments are likely to be met, since the total reduction in 2008 was 6.5% below base year emissions and preliminary estimates project a reduction in 2009 of 12.9% (note that this data exceed for the first time the Kyoto commitment by an 8% reduction). With regard to the EU-27 emissions target set for 2020, the EU is on track to meet it. Relative to 1990 base year emission levels, the 2008 figures represent an 11.3% reduction, and projections for 2009 show a 17.4% reduction, very close to the block's target of 20%.

These estimations are valid provided that Member States fully implement the Climate and Energy packages, which include, among others, a strengthening of the Emissions Trading System (ETS) introduced by the Kyoto Protocol and the promotion and development of carbon capture and storage (CCS). Without these measures, a 6% gap is expected below the 20% goal by 2020.

The energy sector contributes with more than 55% of the total EU GHG emissions. Because of this, reductions of CO₂ emissions in this sector are the focus of recent research and development projects. Retrofitting existing fossil-fueled power plants is an urgent need to achieve the Kyoto targets. CO₂ emissions can be reduced

* Corresponding author. Tel.: +34 942200931; fax: +34 942201591.
E-mail address: cristobalj@unican.es (J. Cristóbal).

using three main capture technologies: post-combustion, oxy-fuel combustion and pre-combustion [3]. Only the two first are available to retrofit coal-fired power plants. Post-combustion is the most common technology employed nowadays in industrial processes although it has not been yet designed for power-plant scale operations. Chemical absorption using amines is the preferred separation technique, mainly because it is already commercialized and is a mature technology. On the other hand, oxy-fuel combustion is still on an early stage of research. The latter technology is a modification of the post-combustion method that includes an Air Separation Unit to produce almost pure oxygen that is employed instead of air in the combustion chamber. Several works have presented techno-economical analysis of these technologies [4–7], providing estimates of their investment and operational and maintenance costs.

The overwhelming majority of the models mentioned above are deterministic. That is, they assume that all model parameters can be perfectly known in advance and show no variability. In practice, however, some parameters may be affected by uncertainties stemming from imprecise data or lack of knowledge. Neglecting these uncertainties may lead to too optimistic solutions that underestimate the negative impact of undesirable (but likely) scenarios.

Several studies have analyzed the role of uncertainty in electricity production planning considering investments on CO₂ capture technologies and/or emission trading. Most of them use real options to determine the optimal investment plan facing different stochastic variables. Literature reveals that the CO₂ price in the ETS is the most important and extensively studied source of uncertainty. Fuss et al., [8] analyze the transition dynamics from CO₂-intensive to CO₂-neutral electricity production in the face of uncertain CO₂ prices considering three technologies, including the update of coal-fired power plant with CCS. Other works have studied uncertainties in the fuel price, electricity price and technology development. Kim et al., [9] carry out an economic evaluation of energy systems taking into consideration uncertainties in learning rates and external factors such as fuel and CO₂ prices. To handle uncertainties they perform Monte Carlo simulations. Yang et al., [10] study the uncertainty associated with the prices of CO₂

and fuel, and their effect on the behavior of investors when choosing between coal and gas (with and without carbon capture) and nuclear power plants. Fuss et al., [11] calculate the optimal investment plan for an electricity producer facing stochastic electricity and CO₂ prices. The authors consider the option of installing a CCS system, with the possibility of switching the installed module on and off according to the specific needs. Szolgayova et al., [12] consider stochastic CO₂ and electricity prices and assess the advantages of replacing a coal-fired power plant by a newer one with CCS or by a biomass-fired power plant in terms of profitability and optimal timing. Li et al., [13] develop a method for planning CO₂ emission trading under uncertainty in CO₂ emission inventories, mitigation measures and related costs. They deal with multiple forms of uncertainties such as fuzzy sets, probabilistic distributions and interval values. Geske and Herold [14] analyze the option of retrofitting an existing power plant with CO₂ capture, taking into account uncertainties in CO₂ prices and technology development (i.e., capital costs and thermal efficiency). Han et al., [15] develop a mathematical model for the optimal planning of electricity generation and CO₂ mitigation infrastructures under uncertainty in electricity and carbon credit prices. They consider CO₂ capture, sequestration and transport in a region of Korea with the ultimate goal of identifying the minimum risk and maximum profit solution.

In this work we address the problem of retrofitting a coal-fired power plant that must decide between purchasing carbon allowances in the ETS or installing a post-combustion CO₂ capture unit. The benefits of these options depend on the expectations concerning future CO₂ allowance prices. We provide a systematic tool to facilitate decision-making in this context that considers explicitly the uncertain price of the emission allowance in the assessment of the investment alternatives.

Fig. 1 summarizes the framework presented in this work. The retrofitting problem is formulated as a multi-scenario mixed-integer linear program (MILP), where the uncertain parameter (i.e., CO₂ prices) is described through scenarios with known probability of occurrence. These scenarios are generated using Monte Carlo sampling in conjunction with a Geometric Brownian Motion (GBM) approach. The stochastic model seeks to optimize the expected total net profit along with a risk metric that allows controlling the

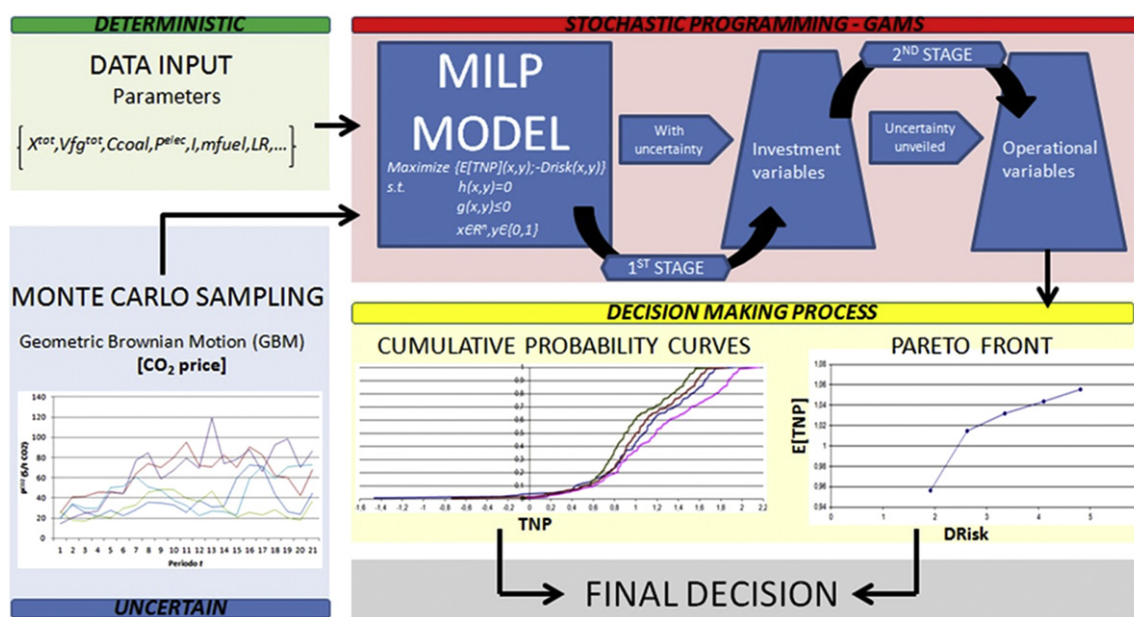


Fig. 1. General framework of the study.

probability of low profit levels. Hence, one of the main novelties of this work is the effective incorporation of a financial risk metric in the framework of multi-objective optimization under price uncertainty for the optimal timing of investments in CO₂ capture technology. The other novelty is the development of a multi-period retrofit model based on a linear approximation of the capture system model that provides as output the optimal capacity expansions to be executed over time.

The remainder of this article is organized as follows. In Section 2 the problem under study is stated and the assumptions made are discussed. Section 3 describes the mathematical model. In Section 4 the solution procedure is explained in detail. Finally, Section 5 presents some numerical results, while in Section 6 the conclusions of the work are drawn.

2. Problem statement

We address the retrofitting of an existing power plant considering a time horizon of 20 years divided in 20 periods of 1 year length each. In every period the decision-maker has the option to install a post-combustion capture technology in order to reduce the GHG emissions. The problem addressed in this article can thus be formally stated as follows. Given are:

- A simplified techno-economic model of a post-combustion CO₂ capture systems that provides the total capital requirement (TCR) and operational and maintenance costs (O&M).
- A dynamic pricing model for the CO₂ allowance price.
- The number and length of time intervals.
- The net energy generated by the coal-based power plant.
- The prices of electricity and fuel in the market.
- The political strategy.
- The interest rate.

The main objective is to determine the optimal investment timing and operational decisions that maximize the expected profit and minimize the associated risk. We assume that certain parameters that influence the optimal investment plan are perfectly known in advance. The raw material cost (C_{coal}) is considered constant. The price at which the power plant sells the electricity produced (p^{elec}) is known in advanced. Note that these two prices can fluctuate over time. For simplicity, in this work we focus on the uncertainty associated with the CO₂ price, although our framework could be easily extended in order to account for other uncertainties affecting the coefficients of the objective function. The interest rate (I) is also considered constant and includes the risk-free cost of capital, inflationary expectations and the cost of the transaction. We assume that the control device, once installed, can be switched on and off as necessary using a bypass.

3. Mathematical model

To select the optimal strategy in each period and the optimal timing of the investment, we propose a stochastic mixed-integer linear programming (MILP) model which takes into account two economic objectives: the expected net profit and the financial risk. Typically, the timing of investments on CO₂ capture is optimized taking into account the economic profit. One major novelty of this work is to include in the analysis a financial risk metric that allows controlling the probability of unfavorable scenarios. The expected profit and the risk metric tend to be conflicting objectives (i.e. one cannot be improved without necessarily worsening the other). The solution to this problem is therefore given by a set of Pareto points representing the optimal trade-off between the criteria considered in the analysis. From this Pareto

front, decision-makers must choose the best alternative according to their preferences.

In previous works, the authors analyzed the indicator price of the CO₂ allowance that makes different capture technologies economically viable using a deterministic static approach based on a mixed-integer nonlinear programming model (MINLP) [16]. To get more realistic solutions, we have incorporated in this work the economic impact of the dynamic and uncertain CO₂ allowance market. Hence, this paper takes a step further and introduces a multi-stage model that considers explicitly the uncertainty associated with the future CO₂ price. Our model is based on a linear representation of the carbon sequestration devices presented in Cristóbal et al., [16] and accounts for technology development through learning rates.

The stochastic MILP includes two types of decision variables: continuous and binary. Continuous variables model, for instance, the capacity installed or the volume of flue gas bypassed. Binary variables denote the installation and operation of the capture device in each time period. In addition, as shown in Fig. 1, the optimization model is based on two-stage stochastic programming where decisions are classified into two groups: first-stage and second-stage. The first are taken before the uncertainty is resolved, while the second are made once the uncertainty materializes [17]. In our model, all the decisions are first-stage except for the amount of gas treated in the carbon capture devices and the sales and purchases of CO₂ emissions, which are made once the uncertainty is unveiled (i.e., when we know the actual CO₂ price in the market). The CO₂ allowance price is regarded as uncertain and is described through a set of scenarios with given probability of occurrence. As will be discussed in detail later in the article (Section 3.3.3), this parameter is described using a Geometric Brownian Motion (GBM) approach and Monte Carlo sampling.

The mathematical formulation is next described in detail. Equations are divided in three groups: mass balance constraints, capacity constraints, and objective function calculations.

3.1. Mass balance constraints

Fig. 2 provides a general representation of a capture unit. We consider the option of bypassing part of the unit, that is, once the unit is installed we can either use it at full capacity or a percentage according to the needs. The mass balance for the capture unit for every time period and scenario is given by Eqs. (1)–(5), where X is the quantity of CO₂ in t/year, Bypass is a continuous variable that controls the quantity of CO₂ and flue gas that enters the capture unit measured in %, η is the removal efficiency of the technology in % and V_{fg} is the volume of flue gas measure in m³/year:

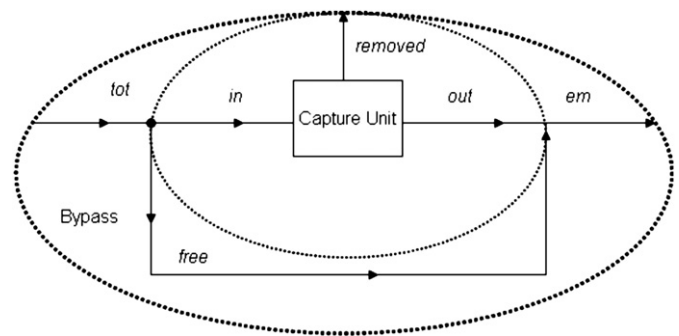


Fig. 2. Capture unit model.

$$X_{t,s}^{\text{in}} = X^{\text{tot}} \text{Bypass}_{t,s} \quad \forall t, s \quad (1)$$

$$X_{t,s}^{\text{free}} = X^{\text{tot}} - X_{t,s}^{\text{in}} \quad \forall t, s \quad (2)$$

$$X_{t,s}^{\text{out}} = X_{t,s}^{\text{in}} (1 - (\eta/100)) \quad \forall t, s \quad (3)$$

$$X_{t,s}^{\text{em}} = X_{t,s}^{\text{out}} + X_{t,s}^{\text{free}} \quad \forall t, s \quad (4)$$

$$\text{Vfg}_{t,s}^{\text{in}} = \text{Vfg}_{t,s}^{\text{tot}} \text{Bypass}_{t,s} \quad \forall t, s \quad (5)$$

The overall CO₂ mass balance must be satisfied in the whole system. As previously stated in this study, we consider an ETS framework. The market balance is therefore enforced via Eq. (6).

$$X_{t,s}^{\text{em}} = \text{Maxfree}^{\text{CO}_2} + \text{buy}_{t,s}^{\text{CO}_2} - \text{sale}_{t,s}^{\text{CO}_2} \quad \forall t, s \quad (6)$$

where X^{em} is the quantity of CO₂ emitted by the power plant, $\text{Maxfree}^{\text{CO}_2}$ is the quantity of free allowances given by the government, while buy^{CO_2} and $\text{sale}^{\text{CO}_2}$ are continuous variables that denote the quantity of allowances bought and sold in the trade market in every scenario, respectively. All of them are measured in t/year.

3.2. Capacity constraints

The capacity of the capture technology measured in m³/year is represented by a continuous variable (CAP). The capacity available to treat the flue gas in each period t is equal to the capacity installed in previous periods plus the capacity expansion executed in the current period (QE):

$$\text{CAP}_t = \text{CAP}_{t-1} + \text{QE}_t \quad \forall t \quad (7)$$

Note that this constraint does not depend on the scenarios, since capacity decisions must be taken before the uncertainty is resolved. The volume of flue gas treated (Vfg) cannot exceed the capacity installed:

$$\text{Vfg}_{t,s}^{\text{in}} \leq \text{CAP}_t \quad \forall t, s \quad (8)$$

Eq. (9) limits the capacity expansion between upper and lower bounds defined according to Eqs. (10) and (11), respectively, in case the technology is finally set. The binary variable Y_t used in this expression models the installation of the technology and takes the value of 1 in case the capture unit is installed in period t and 0 otherwise.

$$Y_t \underline{\text{QE}}_t \leq \text{QE}_t \leq Y_t \overline{\text{QE}}_t \quad \forall t \quad (9)$$

$$\underline{\text{QE}}_t = \text{Vfg}_t^{\text{tot}} \tau \quad \forall t \quad (10)$$

$$\overline{\text{QE}}_t = \text{Vfg}_t^{\text{tot}} \quad \forall t \quad (11)$$

where τ denotes a minimum desired percentage of the total capacity of the technology that should be installed.

We define the binary variable $Z_{t,s}$ to model the operation of the technology in a given time period t and scenario s . This binary variable takes the value of 1 in case the technology is operated during a time period and 0 otherwise. The definition of this variable is enforced through the following constraint:

$$Z_{t,s} \text{Vfg}_{t,s}^{\text{tot}} \lambda \leq \text{Vfg}_{t,s}^{\text{in}} \leq Z_{t,s} \text{Vfg}_{t,s}^{\text{tot}} \quad \forall t, s \quad (12)$$

where λ denotes a minimum desired percentage of the capacity of the technology installed that should be utilized.

3.3. Objective function

The model seeks to optimize two objective functions: the expected total net profit ($E[\text{TNP}]$) measured in \$ and a risk metric. For each scenario s the model shows a different economic performance. Thus, the model must account for the maximization of the expected value of the resulting profit distribution which is determined as follows:

$$E[\text{TNP}] = \sum_s pr_s \text{TNP}_s \quad (13)$$

where pr_s is the probability of scenario s and TNP_s is the total net profit attained in the same scenario. The latter is calculated in each particular scenario as the difference between total net benefits (TNB) and total net costs (TNC) generated in each period t .

$$\text{TNP}_s = \sum_t \frac{\text{TNB}_{t,s} - \text{TNC}_{t,s}}{(1+I)^t} \quad \forall s \quad (14)$$

Benefits are given by two terms as shown in Eq. (15). The first is the revenue obtained from selling the net electricity produced measured in MWh/year. It is calculated as the energy produced (Egen), Eq. (16), minus the energy penalty (Epen) consumed in the capture technology measured in MWh/year, Eq. (17), and multiplied by the nominal price of the electricity (P^{elec}) measured in \$/MWh. The second revenue is the income due to emission trading when the plant has emission rights to sale ($\text{sale}^{\text{CO}_2}$) multiplied by the price of the CO₂ in the market (P^{CO_2}) which is regarded as uncertain.

$$\text{TNB}_{t,s} = (\text{Egen} - \text{Epen}_{t,s}) P^{\text{elec}} + \text{sale}_{t,s}^{\text{CO}_2} P_{t,s}^{\text{CO}_2} \quad \forall t, s \quad (15)$$

$$\text{Egen} = \text{MWFT} \quad (16)$$

$$\text{Epen}_{t,s} = (10.696 \text{Vfg}_{t,s}^{\text{in}} + 0.0002 Z_{t,s}) \text{FT} \quad \forall t, s \quad (17)$$

where MW is the size of the power plant in MW, FT is the functioning time measured in h/year, Vfg is the volume of flue gases treated in the capture technology measured in 10⁹ m³/year, and $Z_{t,s}$ is the operational binary variable previously explained.

Several costs are considered in the model as shown in Eq. (18).

$$\text{TNC}_{t,s} = \text{Cinv}_t + \text{Coper}_{t,s} + \text{Cfuel} + \text{buy}_{t,s}^{\text{CO}_2} P_{t,s}^{\text{CO}_2} \quad \forall t, s \quad (18)$$

Cinv accounts for the investment cost in period t (when the capture technology is retrofitted and a capacity expansion is executed). A simplified techno-economical model is used to determine the value of the investment. In addition, a learning rate is applied to take into account the future cost reduction (Eq. (19)):

$$\text{Cinv}_t = (3 \times 10^7 \text{QE}_t + 3 \times 10^7 Y_t) \text{Cum}_{t,s}^{-d_{\text{inv}}} \quad \forall t \quad (19)$$

where QE_t is the capacity expansion accomplished in period t in 10⁹ m³/year, Y_t is the investment binary variable previously explained, Cum_t is the world cumulative capacity in period t and d_{inv} is the specific experience parameter for investment in MEA technology. This equation is discussed in more detail later in this section.

The operation and maintenance cost (Coper) is calculated similarly to Cinv as shown in Eq. (20), but in this case as a function of the volume of flue gas treated (Vfg) measured in m³/year. Z_{t,s} is the operational variable previously explained and the last term of the equation denotes the learning rate of the operational cost as a function of the world cumulative capacity (Cum_t) and the specific experience parameter for operation in MEA technology (d_{O&M}).

$$Coper_{t,s} = \left(1 \times 10^6 Vfg_{t,s}^{in} + 2 \times 10^6 Z_{t,s}\right) Cum_t^{-d_{O\&M}} \quad \forall t, s \quad (20)$$

The fuel cost (Cfuel) calculated as shown in Eq. (21) depends on the quantity of fuel used (mfuel) measured in t/h, the functioning time (FT) in h/year and the cost of the raw material in the market (Ccoal) in \$/t, all of them considered constant:

$$Cfuel = mfuelCcoalFT \quad (21)$$

Finally, the ETS framework forces the power plant to interact in the trade market. Hence, the last term in Eq. (18) denotes the cost of the emission trading, where buy^{CO₂} is the quantity of emission permits bought multiplied by their price P^{CO₂} in the market.

3.3.1. CO₂ capture technology cost model

The installation and operation of the capture technology lead to total capital requirement (TCR) and operational and maintenance (O&M) costs, respectively. Furthermore, the heat required for solvent regeneration once the technology is operated lowers the energy produced by the plant (i.e. Energy penalty (EPT)).

The techno-economical model of the CO₂ capture technology has been taken from Rao and Rubin [4]. A new feature in this model is that the installation of the technology can be accomplished in one or several periods with capacity expansions (QE) until the upper bound is reached (i.e. total flue gas volume capacity). For the sake of simplicity, we made a linear regression to obtain the TCR, O&M and EPT as a function of the power plant size represented by QE in the case of the investment cost (Eq. (22)), and the volume of flue gas treated (Vfgⁱⁿ) in the case of operational variables (see Eqs. (23) and (24)). A regression coefficient (R²) higher than 0.995 was obtained, indicating the high accuracy of this approximation.

$$TCR = 3 \times 10^7 QE + 3 \times 10^7 \quad (22)$$

$$O\&M = 1 \times 10^6 Vfg^{in} + 2 \times 10^6 \quad (23)$$

$$EPT = 10.696 Vfg^{in} + 0.0002 \quad (24)$$

Note that these equations are used in our model to calculate Cinv, Coper and Epen (Eqs. (17), (19) and (20), respectively).

3.3.2. Learning rates

For future cost estimates, Rubin et al. [18] and Li et al. [19] highlighted the importance of using learning curves in order to consider the technological improvement over time and the accompanying reduction in costs. They calculate these curves by assessing the rate of cost reductions achieved by other process technologies in the past (such as selective catalytic reduction (SCR) and flue gas desulfurization (FGD)) as a result of the installed capacity over time (i.e. learning-by-doing). Then, by analogy with CO₂ capture plants components, the reductions that may be achieved by those technologies in capital and O&M costs are estimated. A general formulation is shown in Eqs. (25)–(27), where the cost of the last unit (Ccum) depends on the cost of the first unit (C₀), the cumulative units installed in the world (number of doublings) (Cum) and the experience index (d):

$$Ccum = C_0 Cum^{-d} \quad (25)$$

$$2^{-d} = PR \quad (26)$$

$$PR = 1 - LR \quad (27)$$

where PR is the progress ratio and LR is the learning rate which denotes the rate of cost reduction with each doubling of the cumulative production. Note that this approach is used in Eqs. (19) and (20).

We assume a constant increase in the world capacity experience installing carbon capture with MEA. The final installed capacity after the time horizon of the study (i.e., 20 years) is equal to 100 GW as happened with FGD and SCR. Furthermore, we consider a minimum experience in world capacity installed (i.e., 5 GW) below which the learning effect is neglected [20].

3.3.3. CO₂ pricing dynamics model

A key point in the proposed model is how to generate realistic scenarios of the uncertain parameter (i.e., the price of CO₂). The EU-ETS was launched on January 2005 and the data available is scarce. To overcome this limitation, we use in this work a pricing dynamics model to predict future CO₂ allowance prices.

Different pricing dynamics models have been proposed in the literature for emission certificates. Benz and Trück [21] proposed the use of autoregressive models with conditional variance such as ARCH, GARCH or regime-switching models that outperform other approaches that assume a constant variance. Laurikka and Koljonen [22] made use of the Ornstein-Uhlenbeck mean-reverting processes which assumes a bounded variance. The most widely used model for describing CO₂ prices is the Geometric Brownian Motion (GBM), which assumes constant variance. It is a continuous-time stochastic process commonly employed to model stock price behavior which can be used in turn to model emission allowance price due to their similarities [23]. In this context, it has been used alone [10,12,24] or combined with other processes such as Poisson jump [25] or step functions [10] to model the role of political adjustments in the emission cap and permit prices.

In this paper we apply a GBM approach for describing the CO₂ price development based on the assumption that measures adopted for the third phase (2013–2020) such as total auctioning for electricity producers and the entrance of aviation's emissions in the ETS will give stability and a rising trend of CO₂ prices due to the scarcity of allowances in the market. This assumption is supported by the government's commitment to a GHG target [24] and the ultimate aim of eventual stabilization of the temperature or the concentration of GHG [8]. Eq. (28) shows the stochastic differential equation (SDE) that defines a GBM:

$$dP_t^{CO_2} = \mu P_t^{CO_2} dt + \sigma P_t^{CO_2} dW_t \quad (28)$$

where P^{CO₂} is the price of the emission allowance, μ is the drift parameter, σ is the volatility parameter and dW_t is the increment of a Wiener process. The natural logarithm of the future allowance price is normally distributed (i.e. random log-normal variable). The SDE has the following analytic solution (Eq. (29)) for an increment of time T, which is used in our model to generate the different CO₂ price paths for the scenarios:

$$P_{t+T}^{CO_2} = P_t^{CO_2} \exp \left[\left(\mu - \frac{\sigma^2}{2} \right) T + (\sigma \sqrt{T}) (N(0, 1)) \right] \quad (29)$$

By applying Monte Carlo sampling to this distribution, it is possible to generate a set of scenarios with equal probability of occurrence. These scenarios are then used in the stochastic MILP to describe the uncertain parameter.

3.4. Financial risk metric

Investments on ETS tend to be risky because of regulatory uncertainty and large volatility in CO₂ prices [26]. Since capital investments in the electricity sector are largely irreversible, it is important for investors to assess the associated risk, which comes largely from the uncertainty in the future prices of the CO₂.

Standard stochastic models attempt to control the risk by optimizing the expected value of the objective distribution (see a discussion on this in Guillén et al., [27]). This strategy provides no control on the variability of the objective function in the uncertain parameters space. To overcome this limitation, we make use of a risk metric that allows controlling the financial risk of the investment. The financial risk is understood here as the probability of not meeting a certain target profit level referred to as Ω [28]. This metric can be calculated by adding auxiliary binary variables that are scenario dependent. To help computations, we employ instead the downside risk (*DRisk*), which has the appealing property of requiring only continuous variables, thereby avoiding the definition of binary variables. The downside risk is calculated as shown in Eqs. (30)–(32).

$$DRisk(\alpha, \Omega) = \sum_s pr_s \delta_s(\alpha, \Omega) \quad (30)$$

$$\delta_s(\alpha, \Omega) \geq \Omega - TNP_s \quad \forall s \quad (31)$$

$$\delta_s(\alpha, \Omega) \geq 0 \quad \forall s \quad (32)$$

where *DRisk*(α, Ω) is the financial risk associated with a solution α and a target profit Ω , δ_s is an auxiliary continuous variable and pr_s is the probability of each scenario.

The MILP can be mathematically formulated as follows:

$$\begin{aligned} & \text{Maximize } \{E[TNP]; -DRisk\} \\ & \text{s.t. Eqs. (1) – (21), (29) – (32)} \end{aligned}$$

4. Solution procedure

The expected profit and financial risk tend to be conflictive objectives. The solution of the problem is therefore given by a set of Pareto optimal configurations each achieving a unique combination of both criteria. In this work, the Pareto solutions are obtained by applying the ϵ -constraint method, which is based on solving a set of auxiliary single-objective problems constructed by keeping one objective and transferring the rest to auxiliary constraints that set limits on them. The auxiliary problem takes the following form:

$$\begin{aligned} & \text{Maximize } \{E[TNP]\} \\ & \text{s.t. Eqs. (1) – (21), (29) – (32)} \\ & DRisk(\alpha, \Omega) \leq \epsilon \end{aligned}$$

Table 1 summarizes the methodology used in this paper to solve the proposed problem.

Table 1
Summary of the methodology used to select a solution.

- The 100 equiprobable scenarios are generated by means of Monte Carlo sampling (using Eq. (29)) each one corresponding to a different materialization of the uncertain parameter (i.e. CO₂ price in the market).
- The objectives are optimized separately in order to obtain the lower and upper limits of the interval within which the epsilon parameters should fall.
- The epsilon interval is split into subintervals of equal length.
- The auxiliary single-objective MILP is solved to produce a set of Pareto points.
- The cumulative probability curves associated with each Pareto solution are represented.
- A solution following the preferences of the decision-maker is selected.

5. Case study and results

We illustrate the capabilities of our approach using an existing coal-fired power plant of 500 MW of installed capacity and 8000 h/year of functioning time (FT) that considers installing a CO₂ capture technology. The removal efficiency (η) of the capture system is 90%. Table 2 summarizes the main data used in the case study.

Future cost reductions in post-combustion capture technology due to the “learning-by-doing” are based on the work by Rubin et al. [20], where the LR for investments costs is 0.021 and the LR for operation and maintenance costs is 0.057. This factor implies that doubling the cumulative production leads to reductions in investment and operational costs of 2.1 and 5.7%, respectively.

Based on the ETS framework, we first focus on the political strategy. The most probable scenario is the total auctioning for the coal-fired power plants in the new trading period in the EU-ETS (2013–2020). The quantity of CO₂ emission allowances grandfathered (i.e. allocated for free) is thus assumed to be 0 (Maxfree^{CO₂}). Other scenarios under discussion give power sectors in east and central European countries half of their permits for free in 2013 and start with total auctioning by 2016.

Furthermore, the CO₂ prices have been simulated using the GBM with mean drift or expected return (μ) and standard deviation or volatility (σ) derived from historical data of the allowance prices. We calibrate the model by computing the expected return and the standard deviation over short time intervals (i.e. business daily observations), and then infer information about long-term returns and volatility [29]. We analyzed the existing data between 2008 and 2011 [30]. Due to the stability and maturity of the ETS in year 2010, we chose this year as the reference period to estimate μ and σ annual values, which were set to 0.05 and 0.26, respectively. Fig. 3 shows the 100 CO₂ price paths calculated for the case study with an initial price P^{CO_2} equal to 22 \$/tCO₂.

The aspiration target level for the profit (Ω) was set as follows. We first maximized the expected profit and then analyze the associated cumulative probability curve. The target value was taken from the left-hand part of this curve, in a manner such that the probabilities of low impacts are reduced when the downside risk is minimized. Particularly, the target value implemented in the calculations was 5×10^8 \$.

The MILP features 25,488 continuous variables, 2121 binary variables and 27,708 equations. It was implemented in GAMS and solved with CPLEX 12.2 on a computer Intel(R)-Core(TM) Duo with 3.00 GHz. The CPU time varied depending on the instance being solved, but was always around 0.3 s.

Fig. 4 shows the Pareto front. Solution A is the maximum expected profit solution that arises from maximizing the single objective problem Max { $E[TNP]$ }. On the other hand, solution E corresponds to the minimization of the risk metric (i.e., Max { $-DRisk$ }). Solutions B, C and D are intermediate solutions obtained using the ϵ -constraint method with different upper bounds on the *DRisk*. All solutions entail different values of the first stage decision variables as shown in Table 3. Second stage variables are no

Table 2
Parameters used in the case study.

Parameters	Value	Parameters	Value
CO ₂ emissions (X^{tot}) (tCO ₂ /year)	3,727,674	Efficiency boiler (%)	89.16
Flue gas volume (Vfg^{tot}) (10 ⁹ m ³ /year)	17.47	Efficiency steam (%)	36.45
Fuel consumption ($mfuel$) (t/year)	179.6	Electricity price (P^{elec}) (\$/MWh)	80.54
Coal cost (Ccoal) (\$/t)	45.24	Interest rate (I)	0.1

Note: the coal used in the case study is an Appalachian Medium Sulfur with HHV=30.84 MJ/kg.

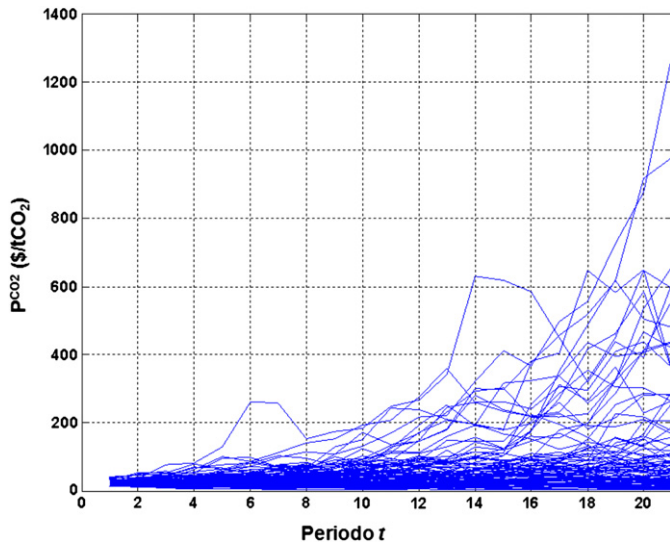


Fig. 3. 100 CO₂ price data paths, used as scenarios, calculated using Geometric Brownian Motion, Eq. (29), with annual drift equals to 0.05 and annual volatility equals to 0.26.

displayed in the results because they are scenario dependent, so they take different values for each one.

Results show that in order to maximize the expected profit, the model resolves to postpone the installation of the capture device until the 10th period. With this decision the downside risk reaches its maximum value. This is because the economic performance is more exposed to the variability of the CO₂ prices since the capture system cannot be operated till the 10th period. They payoff is that the system shows better profit on average due to reductions in investment and operation costs (i.e., delay in the installation period and cost-reduction effect of the learning rate). On the other hand, in order to minimize the downside risk the model moves forward the installation to the 4th period, reducing in this case the expected

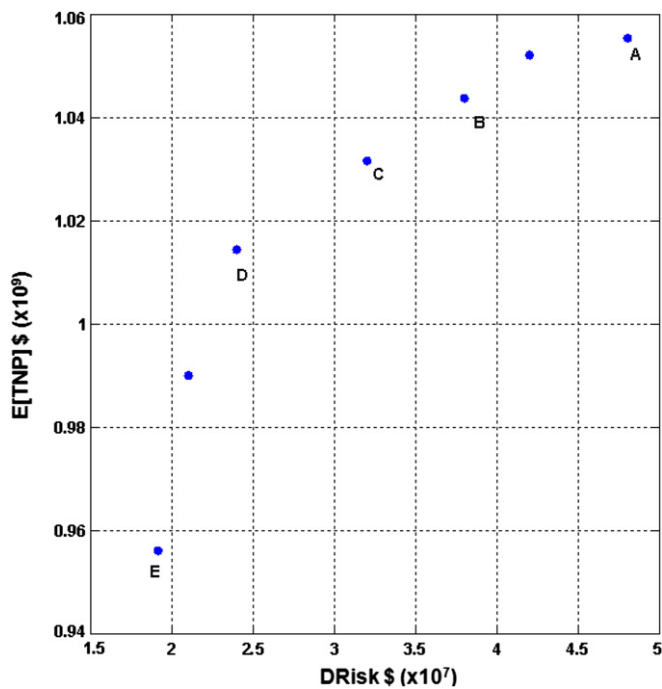


Fig. 4. Pareto optimal solution curve.

Table 3

Pareto solutions with their objective function values and associated first stage decision variables.

Solution	$E[TNP]$ ($\times 10^9$ \$)	$DRisk$ ($\times 10^7$ \$)	$t_{Y=1}$	QE ($\times 10^9$ m ³ /year)
A	1.06	4.8	10	17.4
B	1.04	3.8	8	17.4
C	1.03	3.2	7	17.4
D	1.01	2.4	6	17.4
E	0.96	1.92	4	17.4

profit and also the associated risk. Hence, with the data and assumptions discussed before, earlier installations of CO₂ capture lead to lower expected profit and also to lower risk. It is also important to highlight the fact that in all the points of the Pareto set that were calculated, the model decides to install the capture system. Hence, for the level of uncertainty considered, it is convenient to employ carbon sequestration, since the associate capital investment is compensated by the savings in carbon taxes.

Fig. 5 shows the cumulative probability curves associated with the following solutions: maximum expected profit solution (i.e., solution A), intermediate solution (i.e., solution C) and minimum risk solution (i.e., solution E). We also included in the figure the solution that would be obtained with perfect information, that is, if we knew in advance the scenario that would finally materialize. This curve is referred to as upper bound curve, since it is impossible to improve its performance (i.e., find another curve located to the right for at least one probability level). Note that the economic performance improves as we move to the right, since this implies larger profits for the same probability levels, or equivalently, lower risks for the same target values.

To further discuss these curves, we choose three targets for the downside risk (i.e., 1.5×10^9 , 5×10^8 and 0 \$). As we can see in Fig. 5, the maximum expected profit solution leads to a probability of exceeding the target of 1.5×10^9 \$ equal to 20%. In the upper bound, intermediate and the minimum risk solutions these probabilities are equal to 32%, 16% and 7%, respectively. On the other hand, the risk of not exceeding the target of 5×10^8 \$ in solution A is equal to 12% while in the upper bound, C and E solutions these probabilities

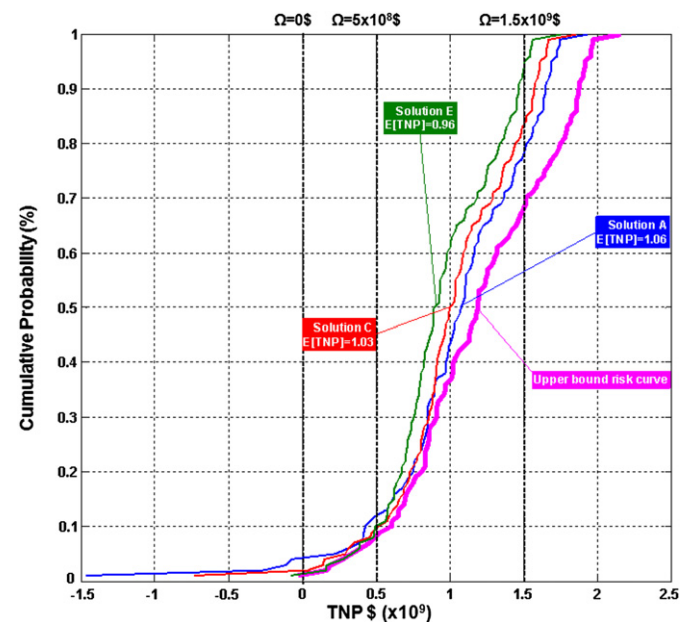


Fig. 5. Cumulative probability curves for the maximum expected profit, intermediate and minimum risk solutions (i.e., A, C and E, respectively) and the perfect information solution (i.e., upper bound).

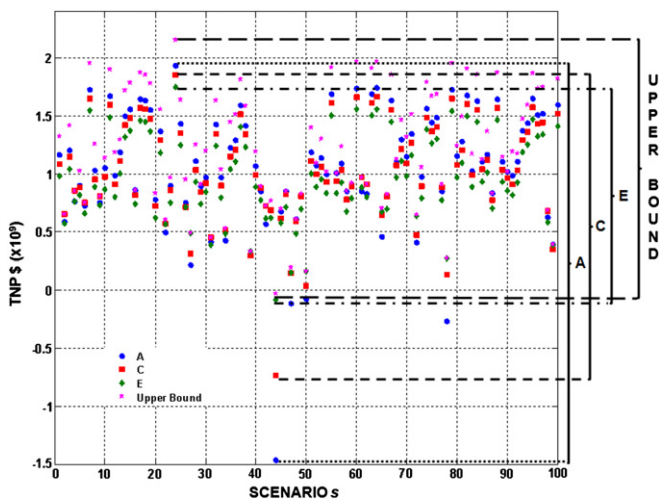


Fig. 6. Economic performance attained by every solution in every scenario *s*.

are equal to 8%, 9% and 10%, respectively. Solution A would be thus chosen by a risk-taker decision-maker, as it shows larger probabilities of high profits, something that is achieved at the expense of increasing the probability of lower profits and even in some cases of losing money (it shows a 4% probability of negative values of TNP). A risk-averse decision-maker would prefer solution E because it reduces the probability of not attaining a lower value of TNP and even losing money (1% probability of negative values of TNP). In this case, this is achieved by reducing the probability of high values of TNP. Point C is an intermediate solution between both extreme cases.

Fig. 6 shows the maximum and minimum profits attained by the solutions shown in Fig. 5 in every scenario considered in the analysis. As observed, solution A, the risk-taker solution, shows an interval of TNP that goes from -1.47×10^9 \$ to 1.93×10^9 \$. A “less risky” solution, solution C, takes values between -7.34×10^8 \$ and 1.86×10^9 \$. As we can see, the interval in this last case is narrower, because the increase in the worst case compensates for the decrease in best profit. The interval in the risk-averse solution, solution E, goes from -7.9×10^2 \$ to 1.75×10^9 \$ (even narrower than in the other two solutions). Finally in the upper bound solution, the best case scenario gives a TNP of 2.16×10^9 \$ and the worst one a value of -2.72×10^2 \$. As seen, this last solution dominates the rest, since it is obtained assuming perfect information.

We also analyzed the worst and the best case scenarios for all the solutions. The best economic performance in all of them, as shown in Fig. 6, is attained in scenario 24, where CO₂ prices are rather low in all of the periods (i.e., in 17 periods this value is under 7 \$/tCO₂). The model installs the capture device but does not operate it in any period, bypassing all the flue gas. On the contrary, the worst economic performance is in scenario 44, where CO₂ prices are very high (i.e., the value in 17 periods is over 100 \$/tCO₂ and the highest value is around 630 \$/tCO₂) and even operating the capture device in all of the possible periods leads to negative values of TNP.

6. Conclusions

To achieve the greenhouse gas emission reductions committed in the Kyoto Protocol, we need to retrofit existing coal-fired power plants with carbon capture. Due to the cap and trade system imposed and the uncertain CO₂ prices in the next future, an optimal investment timing and operation of the control device is essential. Besides, the decision-maker has to take into account not only the economic performance but also the irreversibility of the investment

and therefore the substantial financial risk. The use of a risk metric is important in this case because investments in the energy market are not profitable in all of the plausible scenarios.

In this paper we have proposed a two-stage stochastic MILP approach for the optimal investment timing and operation of a CO₂ capture retrofit system under uncertainty in prices. The model could easily manage uncertainty in other parameters such as electricity and raw material price, although the emphasis in this work was to study uncertainties in the CO₂ price only. In our framework, uncertainties are modeled via scenarios that are generated from a set of probability functions obtained using the Geometric Brownian Motion (GBM) approach in conjunction with Monte Carlo sampling. The model seeks to optimize simultaneously the expected profit and the associated financial risk.

The proposed model was conceived as a decision-support tool for decision makers. It is a general approach for investment planning considering several retrofit options applicable to a wide range of processes and industries facing similar decision-making problems. Its final aim is to shed light on the most sustainable design strategies for reducing the impact in CO₂-intensive industries.

The capabilities of the model were illustrated through a case study. The model identifies different strategies that illustrate the trade-off between expected profit and financial risk. The risk-taker solution, which postpones the installation until the 10th period, implies a larger probability of achieving a high profit at the expense of increasing the probability of lower profits, and even yielding negative values of profit in some scenarios. On the other hand, the risk-averse solution, which brings forward the installation to the 4th period, shows lower probabilities of low profits, but also of high profits. From this set of solutions, decision makers should select the best one according to his/her criteria.

Acknowledgments

J. Cristóbal would like to acknowledge the financial support received from the University of Cantabria. The authors wish to acknowledge support from the Spanish Ministry of Education and Science (projects CTQ2009-14420-C02-01, DPI2012-37154-C02-02, CTQ2012-37039-C02-01, BFU2008-00196 and ENE2010-14828)

Nomenclature

Sets

- S* set of scenarios indexed by *s*
- T* set of periods indexed by *t*

Variables

- Bypass*_{*t,s*} percentage of the stream bypassed in period *t* and scenario *s* (%)
- buy*_{*t,s*} quantity of allowances bought in period *t* and scenario *s* (t/year)
- CAP*_{*t*} capacity installed in period *t* (m³/year)
- Cinv*_{*t*} investment cost in period *t* (\$)
- Coper*_{*t,s*} operation and maintenance cost in period *t* and scenario *s* (\$)
- Cum*_{*t*} world cumulative capacity of CO₂ capture in period *t* (GW)
- DRisk* financial risk (\$)
- Epen*_{*t,s*} energy penalty consumed in period *t* and scenario *s* (MWh/year)
- E*[TNP] expected total net profit (\$)
- P*_{*t,s*}^{CO₂} price of the CO₂ in the trade market (\$/tCO₂)
- QE*_{*t*} capacity expansion carried out in period *t* (m³/year)
- QE*_{*t*} maximum capacity expansion carried out in period *t* (m³/year)

QE_t	minimum capacity expansion carried out in period t (m^3 /year)
$sale_{t,s}$	quantity of allowances sold in period t and scenario s (t /year)
$TNB_{t,s}$	total net benefits in period t and scenario s (\$)
$TNC_{t,s}$	total net costs in period t and scenario s (\$)
TNP_s	total net profit in scenario s (\$)
Vfg	volume of flue gas (m^3 /year)
X	quantity of CO_2 (t /year)
Y_t	binary variable for installation in period t
$Z_{t,s}$	binary variable for operation in period t and scenario s
τ	minimum desired percentage of the total capacity of the technology that should be installed (%)
λ	minimum desired percentage of the capacity of the technology installed that should be utilized (%)
δ_s	auxiliary variable for downside risk definition

Parameters

C_{coal}	cost of the raw material (\$/tcoal)
C_{fuel}	fuel cost (\$/year)
d_{inv}	specific experience parameter for investment in MEA technology
$d_{O\&M}$	specific experience parameter for operation in MEA technology
E_{gen}	energy produced (MWh/year)
FT	operational time (h/year)
I	interest rate
LR	learning rate
Max_{free}	quantity of free CO_2 allowances (t/year)
$mfuel$	quantity of fuel used (tcoal/h)
MW	gross plant size (MW)
p^{elec}	price of the electricity (\$/MWh)
PR	progress ratio
pr_s	probability of scenario s
η	removal efficiency of the capture technology on CO_2 (%)
μ	drift of the data in the GBM
σ	volatility of the data in the GBM
Ω	aspiration target level of profit
ε	bound level

References

- [1] EC – European Commission. Special eurobarometer, vol. 372; 2011. October 2011.
- [2] EEA – European Environment Agency. Tracking progress towards Kyoto and 2020 targets in Europe. EEA report 7/2010; 2010. Available at: <http://www.eea.europa.eu/publications/progress-towards-kyoto>.
- [3] Olajire AA. CO_2 capture and separation technologies for end-of-pipe applications – a review. *Energy* 2010;35:2610–28.
- [4] Rao AB, Rubin ES. A technical, economic, and environmental assessment of amine based CO_2 capture technology for power plants greenhouse gas control. *Environmental Science and Technology* 2002;36:4467–75.
- [5] Singh D, Croiset E, Douglas PL, Douglas MA. Techno-economic study of CO_2 capture from an existing coal-fired power plant: MEA scrubbing vs. O_2/CO_2 recycle combustion. *Energy Conversion and Management* 2003;44:3037–91.
- [6] Davison J. Performance and costs of power plants with capture and storage of CO_2 . *Energy* 2007;32:1163–76.
- [7] Rubin ES, Rao AB, Berkenpas MB. Technical documentation: oxygen-based combustion systems (oxyfuels) with carbon capture and storage (CCS). Department of Engineering and Public Policy; 2007. Paper 75.
- [8] Fuss S, Johansson DJA, Szolgayova J, Obersteiner M. Impact of climate policy uncertainty on the adoption of electricity generating technologies. *Energy Policy* 2009;37:733–43.
- [9] Kim S, Koo J, Lee CJ, Yoon ES. Optimization of Korean energy planning for sustainability considering uncertainties in learning rates and external factors. *Energy* 2012;44:126–34.
- [10] Yang M, Blyth W, Bradley R, Bunn D, Clarke C, Wilson T. Evaluating the power investment options with uncertainty in climate policy. *Energy Economics* 2008;30:1933–50.
- [11] Fuss S, Szolgayova J, Obersteiner M, Gusti M. Investment under market and climate policy uncertainty. *Applied Energy* 2008;85:708–21.
- [12] Szolgayova J, Fuss S, Obersteiner M. Assessing the effects of CO_2 price caps on electricity investments – a real options analysis. *Energy Policy* 2008;36:3974–81.
- [13] Li MW, Li YP, Huang GH. An interval-fuzzy two-stage stochastic programming model for planning carbon dioxide trading under uncertainty. *Energy* 2011;36:5677–89.
- [14] Geske J, Herold J. Carbon capture and storage investment and management in an environment of technological and price uncertainties. Working Paper WP-RD-05. Dresden University of Technology; 2010.
- [15] Han JH, Ahn YC, Lee IB. A multi-objective optimization model for sustainable electricity generation and CO_2 mitigation (EGCM) infrastructure design considering economic profit and financial risk. *Applied Energy* 2012;95:186–95.
- [16] Cristóbal J, Guillén-Gosalbez G, Jiménez L, Irabien A. MINLP model for optimizing electricity production from coal-fired power plants considering carbon management. *Energy Policy* 2012;51:493–501.
- [17] Krukanont P, Tezuka T. Implications of capacity expansion under uncertainty and value of information: the near-term energy planning of Japan. *Energy* 2007;32:1809–24.
- [18] Rubin ES, Taylor MR, Yeh S, Hounshell DA. Learning curves for environmental technology and their importance for climate policy analysis. *Energy* 2004;29:1551–9.
- [19] Li S, Zhang X, Gao L, Jin H. Learning rates and future cost curves for fossil fuel energy systems with CO_2 capture: methodology and case studies. *Applied Energy* 2012;93:348–56.
- [20] Rubin ES, Yeh S, Antes M, Berkenpas M, Davison J. Use of experience curves to estimate the future cost of power plants with CO_2 capture. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 2007;1:88–97.
- [21] Benz EA, Trück S. Modeling the price dynamics of CO_2 emission allowances. *Energy Economics* 2009;31:4–15.
- [22] Laurikka H, Koljonen T. Emissions trading and investment decisions in the power sector – a case study in Finland. *Energy Policy* 2006;34:1063–74.
- [23] Rammerstorfer M, Eisl R. Carbon capture and storage – investment strategies for the future? *Energy Policy* 2011;39:7103–11.
- [24] Zhou W, Zhu B, Fuss S, Szolgayova J, Obersteiner M, Fei W. Uncertainty modeling of CCS investment strategy in China's power sector. *Applied Energy* 2010;87:2392–400.
- [25] Tuthill L. Investment in electricity generation under emissions price uncertainty: the plant-type decision. Oxford Institute for Energy Studies; June 2008. Report – EV 39. Available at: <http://www.oxfordenergy.org/wpcms/wp-content/uploads/2011/03/EV39-InvestmentinElectricityGenerationUnderEmissionsPriceUncertaintyThePlant-TypeDecision-LTuthill-2008.pdf>.
- [26] Hoffmann VH. EU ETS and investment decisions: the case of the German electricity industry. *European Management Journal* 2007;25(6):464–74.
- [27] Guillén G, Mele FD, Bagajewicz MJ, Espuña A, Puigjaner L. Multiobjective supply chain design under uncertainty. *Chemical Engineering Science* 2005;60:1535–53.
- [28] Barbaro A, Bagajewicz MJ. Managing financial risk in planning under uncertainty. *AIChE Journal* 2004;50:963–89.
- [29] Chriss NA. *Black-Scholes and beyond: option pricing model*. New York: McGraw-Hill; 1997.
- [30] <http://www.sendeco2.com/index-uk.asp>. Last visit on line – 01.08.12.

**ANEXO I: MODELOS
TÉCNICO-
ECONÓMICOS DE LAS
TECNOLOGÍAS
LIMPIAS**

Anexo: Modelos técnico-económicos de las tecnologías limpias

A continuación se detallan los modelos técnico-económicos que se muestran y se comentan en la tesis. Para su visualización completa referimos al lector a las publicaciones que conforman el Capítulo 4 de esta Tesis y las diferentes publicaciones que se citan en cada apartado. En este anexo se resalta el cálculo de las variables de salida y su relación con el modelo de optimización.

1. Precipitador electrostático

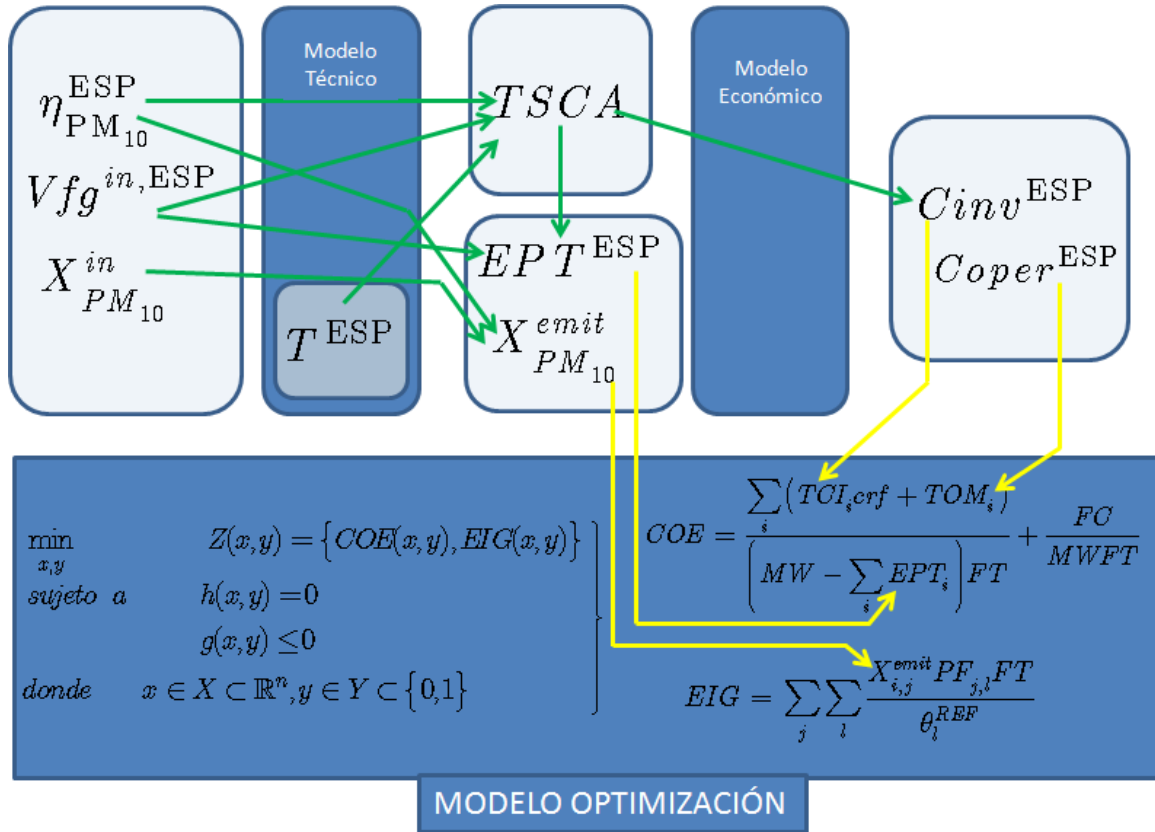


Figura A1.1: Modelo técnico-económico del precipitador electrostático con su relación entre variables

Se sigue el modelo descrito por la EPA (Environmental Protection Agency) (USEPA, 2002) donde los costes de inversión $Cinv$ se calculan de la siguiente manera:

Se calcula el $TSCA$ que depende del área específico de recolección SCA (que es función de la temperatura y la eficiencia de eliminación) y del volumen de gases que entra en el equipo (que es controlado por el bypass). El coste de inversión ($Cinv$) es la suma del coste de compra (PEC), los costes indirectos (IC) y los directos (DC):

$$SCA = f(T^{ESP}, \eta_{PM_{10}}^{ESP})$$

$$TSCA = Vfg^{in,ESP} SCA$$

$$PEC = 83.91(TSCA)^{0.8431}$$

$$TDC = PEC + DC$$

$$DC = \alpha PEC$$

$$IC = \beta PEC$$

$$C_{inv} = TCI = TDC + IC$$

En cuanto a los costes de operación $Coper$, son la suma de los costes de operación $C_{O\&L}$ y los costes de mantenimiento C_M :

$$Coper = TOM = C_{O\&L} + C_M$$

La energía consumida en el precipitador electrostático se calcula según la siguiente ecuación:

$$EPT^{ESP} = 1.81 \times 10^{-4} Vfg^{in,ESP} \Delta P + 1.94 \times 10^{-3} TSCA$$

La cantidad de contaminante emitida (X^{emit}) se calcula con el balance de masas en el equipo con bypass:

$$Vfg^{in,ESP} = Vfg^{tot} Bypass$$

$$X_{PM_{10},ESP}^{in} = X^{tot} Bypass$$

$$X_{PM_{10},ESP}^{free} = X^{tot} - X_{PM_{10},ESP}^{in}$$

$$X_{PM_{10},ESP}^{out} = X_{PM_{10},ESP}^{in} (1 - (\eta_{PM_{10}}^{ESP} / 100))$$

$$X_{PM_{10},ESP}^{emit} = X_{PM_{10},ESP}^{out} + X_{PM_{10},ESP}^{free}$$

2. Depuración húmeda – oxidación forzada

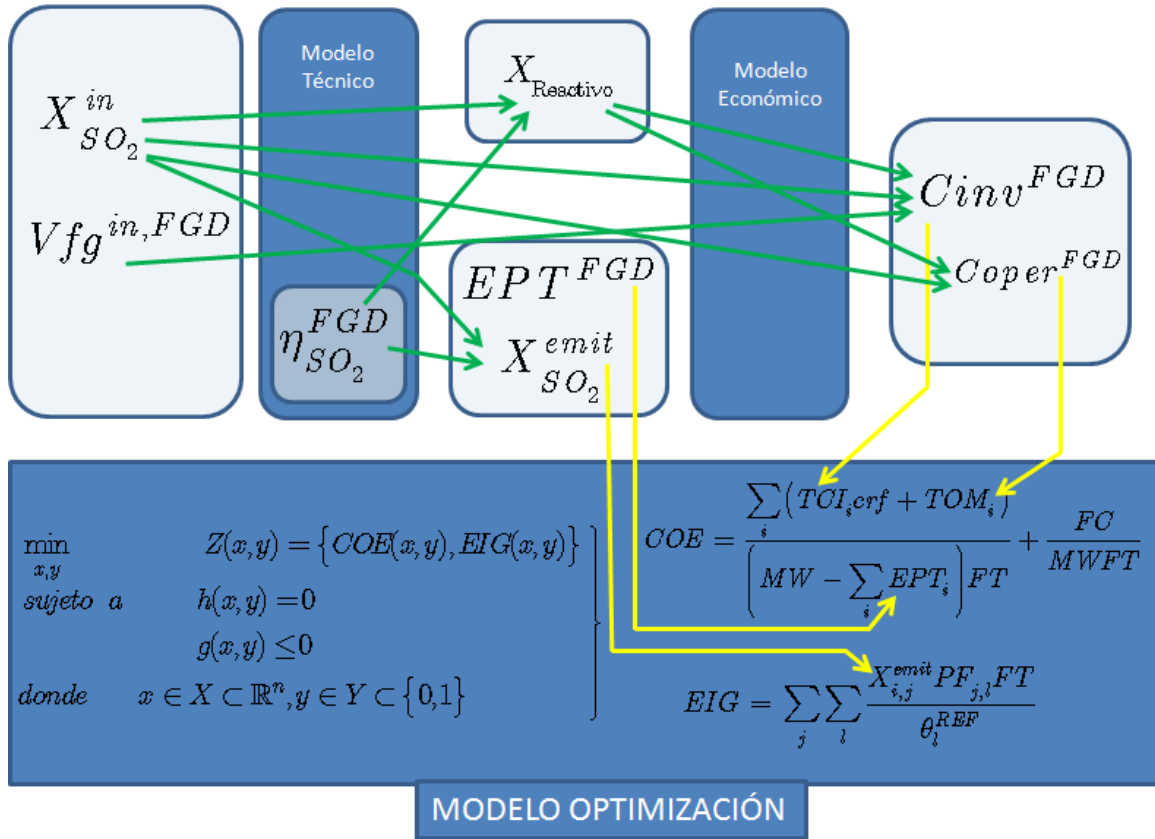


Figura A1.2: Modelo técnico-económico de la depuración húmeda con su relación entre variables

Se sigue el modelo descrito en Srivastava (2000) donde los costes de inversión C_{inv} se calculan de la siguiente manera:

Se calcula la cantidad de reactivo:

$$X_{\text{Reactivo}} = X_{SO_2}^{in} \cdot 1.05 \cdot \frac{100 \eta_{SO_2}^{FGD}}{64 \cdot 0.953}$$

Los costes totales directos (TDC) se calculan con el sumatorio de los costes de las cinco áreas o módulos principales en los que está dividido el equipo. El coste de inversión (C_{inv}) es suma del TDC más los costes indirectos (IC):

$$TDC = BM_F + BM_R + BMG + BM_W + BM_E$$

$$IC = \beta TDC$$

$$C_{inv} = TCI = TDC + IC$$

donde BM_F es el módulo de la alimentación de lechada, que se calcula como los costes de directos del equipo (TDC_F), más el coste de los ciclones de bolas y los hidrociclones necesarios ($C_{B\&H}$) y coste del ácido dibásico necesario (C_{DBA}):

$$BM_F = TDC_F + C_{B\&H} + C_{DBA}$$

$$TDC_F = f(X_{\text{Reactivo}})$$

$$C_{B\&H} = f(X_{\text{Reactivo}})$$

$$C_{DBA} = f(X_{SO_2}^{in}, \eta_{SO_2}^{FGD})$$

BM_R es el módulo de la eliminación del SO_2 , que se calcula como los costes de directos del módulo (TDC_R), más el coste del absorbedor (C_{ABS}) y el coste de las bombas necesarias (C_{PUM}):

$$BM_R = TDC_R + C_{ABS} + C_{PUM}$$

$$TDC_R = f(X_{SO_2}^{in})$$

$$C_{ABS} = f(Vfg^{in,FGD})$$

$$C_{PUM} = f(X_{\text{Reactivo}})$$

BM_G es el módulo del sistema de gases de salida:

$$BM_G = f(Vfg^{in,FGD}, Vfg^{out,FGD})$$

BM_W es el módulo del sistema de manejo de subproductos:

$$BM_W = f(X_{SO_2}^{in}, \eta_{SO_2}^{FGD})$$

BM_E es el módulo de los equipos de soporte:

$$BM_E = f(MW, Vfg^{out,FGD})$$

donde MW es el tamaño de la planta.

En cuanto a los costes de operación $Coper$:

$$Coper = TOM = FOM + VOM$$

donde el FOM es el sumatorio de los costes de operación ($C_{O\&L}$), mantenimiento (C_M) y administración ($C_{A\&S}$):

$$FOM = C_{O\&L} + C_M + C_{A\&S}$$

Y el VOM es el sumatorio de los costes del reactivo (C_{Reactivo}), del ácido dibásico (C_{DBA}), de la gestión de subproductos (C_{disp}) y del vapor necesario (C_{steam}):

$$VOM = C_{\text{Reactivo}} + C_{DBA} + C_{disp} + C_{steam}$$

La energía consumida se considera un 2% de la capacidad total de la planta.

$$EPT^{FGD} = 0.02MW$$

La cantidad de contaminante emitida (X^{emit}) se calcula con el balance de masas en el equipo con bypass:

$$Vfg^{in,FGD} = Vfg^{tot} Bypass$$

$$X_{SO_2,FGD}^{in} = X^{tot} Bypass$$

$$X_{SO_2,FGD}^{free} = X^{tot} - X_{SO_2,FGD}^{in}$$

$$X_{SO_2,FGD}^{out} = X_{SO_2,FGD}^{in} (1 - (\eta_{SO_2}^{FGD} / 100))$$

$$X_{SO_2,FGD}^{emit} = X_{SO_2,FGD}^{out} + X_{SO_2,FGD}^{free}$$

3. Reducción catalítica selectiva

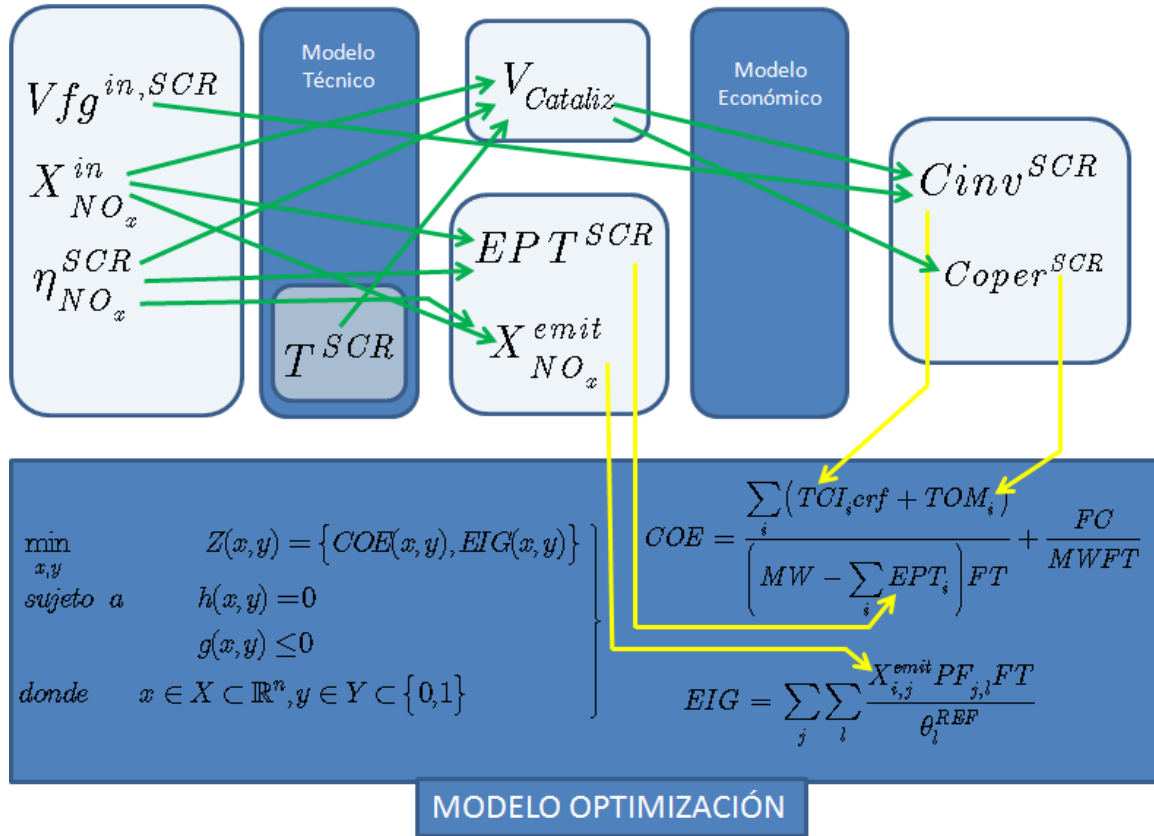


Figura A1.3: Modelo técnico-económico de la reducción catalítica selectiva con su relación entre variables

Se sigue el modelo descrito por la EPA (Environmental Protection Agency) (USEPA, 2002) donde los costes de inversión $Cinv$ se calculan de la siguiente manera:

Se calcula el volumen de catalizador necesario a través de la ecuación empírica:

$$V_{Cataliz} = 2.81 Q_B \eta_{adj} slip_{adj} NO_{x_{adj}} S_{adj} T_{adj}$$

$$Q_B = PCS \cdot m_{fuel}$$

donde Q_B es el aporte de calor, y η_{adj} , $slip_{adj}$, $NO_{x_{adj}}$, S_{adj} , T_{adj} son factores de ajuste que dependen de la eficiencia de eliminación del equipo ($\eta_{NO_x}^{SCR}$), de la cantidad de amonio que se escapa, la cantidad de NO_x que entra ($X_{NO_x}^{in}$), de la cantidad de azufre presente en el carbón y de la temperatura (T^{SCR}), respectivamente.

$$TDC = Q_B \left[3380 + f(h_{SCR}) + f(NH_3 rate) + f(bypass) \right] \left(\frac{3500}{Q_B} \right)^{0.35} + f(V_{Cataliz})$$

$$IC = \beta TDC$$

$$C_{inv} = TCI = TDC + IC$$

donde el TDC incluye los ajustes de la altura del reactor SCR, del caudal de amonio, de la inclusión de un bypass y del volumen del catalizador

En cuanto a los costes de operación C_{oper} :

$$C_{oper} = TOM = FOM + VOM$$

donde el FOM es el sumatorio de los costes de operación ($C_{O\&L}$) y de mantenimiento (C_M):

$$FOM = C_{O\&L} + C_M$$

Y el VOM es el sumatorio de los costes del reactivo ($C_{Reactivo}$) y del catalizador ($C_{Cataliz}$):

$$VOM = C_{Reactivo} + C_{Cataliz}$$

La energía consumida se calcula con la siguiente ecuación:

$$EPT^{SCR} = 0.105Q_B \left[X_{NO_x}^{in} \eta_{NO_x}^{SCR} + 0.5(\Delta P_{duct} + n\Delta P_{cataliz}) \right]$$

donde ΔP es la variación de la presión tanto en los conductos como en el catalizador

La cantidad de contaminante (X^{emit}) emitida se calcula con el balance de masas en el equipo con bypass:

$$Vfg^{in,SCR} = Vfg^{tot} Bypass$$

$$X_{NO_x,SCR}^{in} = X^{tot} Bypass$$

$$X_{NO_x,SCR}^{free} = X^{tot} - X_{NO_x,SCR}^{in}$$

$$X_{NO_x,SCR}^{out} = X_{NO_x,SCR}^{in} (1 - (\eta_{NO_x}^{SCR} / 100))$$

$$X_{NO_x,SCR}^{emit} = X_{NO_x,SCR}^{out} + X_{NO_x,SCR}^{free}$$

4. Captura de CO₂ post-combustión (absorción con aminas)

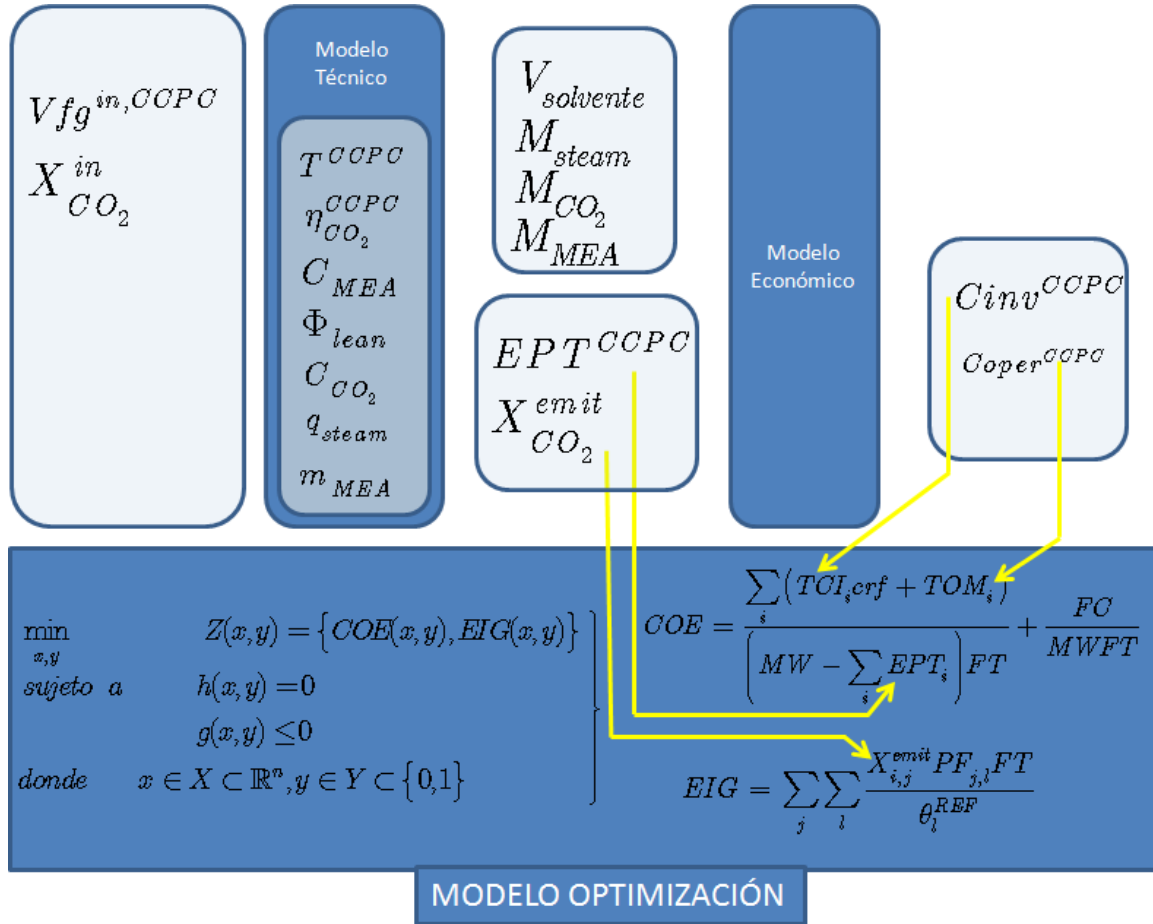


Figura A1.4: Modelo técnico-económico de la captura de CO₂ post-combustión con su relación entre variables

Se sigue el modelo descrito por Rubin y Rao (2002) donde los costes de inversión C_{inv} se calculan de la siguiente manera:

$$TDC = PEC + DC$$

$$DC = \alpha PEC$$

$$IC = \beta TDC$$

$$C_{inv} = TCI = TDC + IC$$

Los costes de compra (PEC) se calculan con el sumatorio de los costes de las ocho áreas o componentes principales (h) en los que está dividido el equipo. Para la estimación de costes de cada una se utiliza la regla de los seis décimos con respecto a factores de escalado específicos (X_h) para cada área (Tabla A1.1):

$$PEC = \sum_h C_h$$

$$C_h = C_h^{REF} \left(\frac{X_{h_1}}{X_{h_1}^{REF}} \frac{X_{h_n}}{X_{h_n}^{REF}} \right)^{0.6} \quad \forall h = 1, 2, \dots, n$$

Tabla A1.1. Componentes y factores de escalado del CCPC

Componente (h)	Factor de escalado (X_h)
Extractor de gases de combustión	$Vfg^{in,CCPC}$ & T^{CCPC}
Absorbedor	$Vfg^{in,CCPC}$ & T^{CCPC}
Intercambiador de calor	$V_{solvente}$
Regenerador	$V_{solvente}$
Recalentador (reboiler)	$V_{solvente}$ & M_{steam}
Recuperador (reclaimer)	M_{MEA}
Área de procesado del sorbente	$V_{solvente}$
Unidad de compresión	M_{CO_2}

donde:

$$V_{solvente} = f(X_{CO_2}^{in}, C_{CO_2}, \Phi_{lean}, \eta_{CO_2}^{CCPC}, C_{MEA}, T^{CCPC})$$

$$M_{steam} = f(X_{CO_2}^{in}, C_{CO_2}, \Phi_{lean}, \eta_{CO_2}^{CCPC}, C_{MEA}, T^{CCPC}, q_{steam})$$

$$M_{MEA} = f(X_{CO_2}^{in}, m_{MEA})$$

$$M_{CO_2} = f(X_{CO_2}^{in}, \eta_{CO_2}^{CCPC})$$

En cuanto a los costes de operación C_{oper} :

$$C_{oper} = TOM = FOM + VOM$$

donde el FOM es el sumatorio de los costes de operación ($C_{O\&L}$), de mantenimiento (C_M) y los de administración ($C_{A\&S}$):

$$FOM = C_{O\&L} + C_M + C_{A\&S}$$

Y el VOM es el sumatorio de los costes del reactivo MEA (C_{MEA}), del inhibidor ($C_{inhibidor}$), del agua usada (C_{agua}) y de la gestión de los subproductos a eliminar (C_{disp}):

$$VOM = C_{MEA} + C_{inhibidor} + C_{agua} + C_{disp}$$

La energía consumida es la suma de la energía del vapor de regeneración necesario (E_{regen}), de la energía utilizada para el bombeo de los diferentes equipos (E_{bombeo}) y de la energía utilizada para la compresión del CO_2 capturado (E_{compr}):

$$EPT^{CCPC} = E_{regen} + E_{bombeo} + E_{compr}$$

La cantidad de contaminante emitida (X^{emit}) se calcula con el balance de masas en el equipo con bypass:

$$Vfg^{in,CCPC} = Vfg^{tot} Bypass$$

$$X_{CO_2,CCPC}^{in} = X^{tot} Bypass$$

$$X_{CO_2,CCPC}^{free} = X^{tot} - X_{CO_2,CCPC}^{in}$$

$$X_{CO_2,CCPC}^{out} = X_{CO_2,CCPC}^{in} (1 - (\eta_{CO_2}^{CCPC} / 100))$$

$$X_{CO_2,CCPC}^{emit} = X_{CO_2,CCPC}^{out} + X_{CO_2,CCPC}^{free}$$

5. Captura de CO₂ oxicombustión

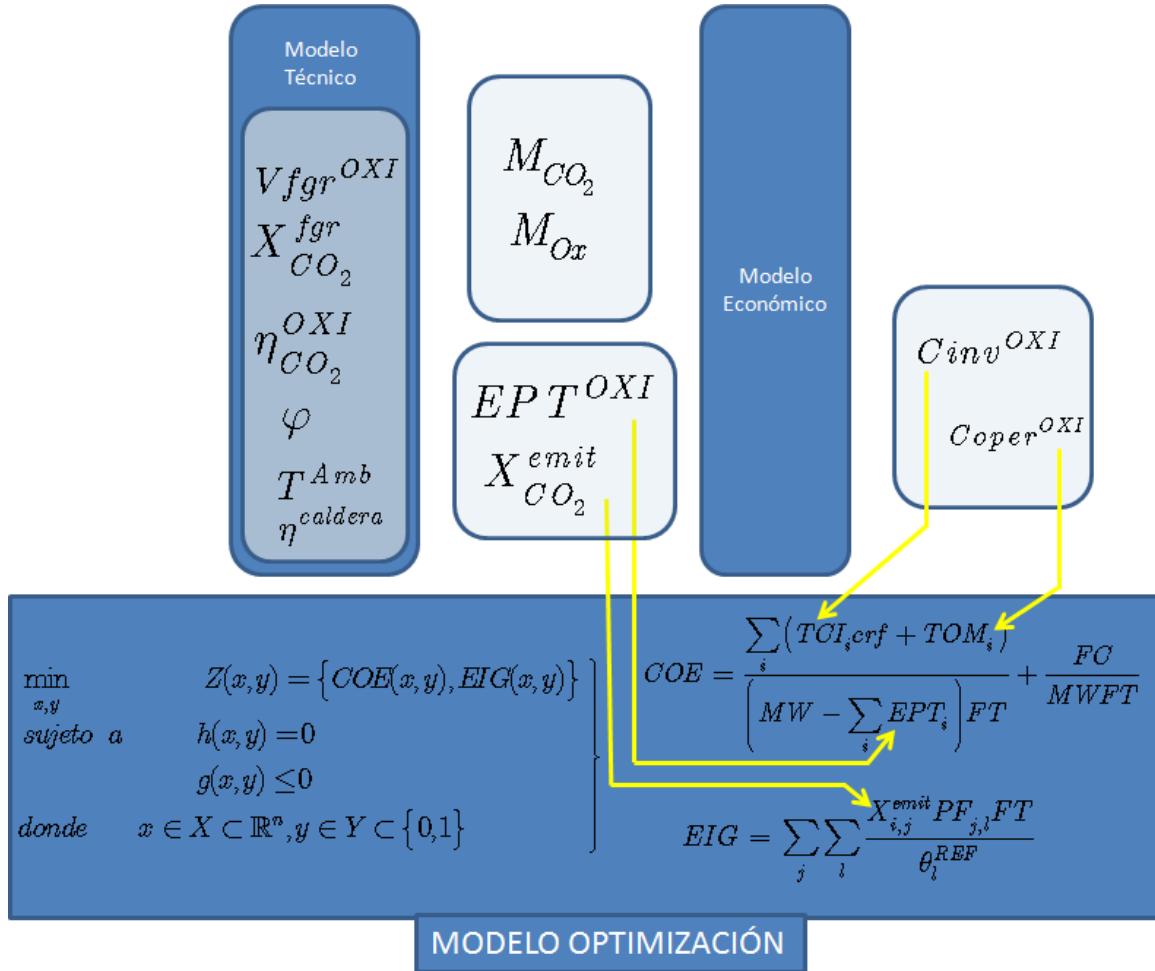


Figura A1.5: Modelo técnico-económico de la captura de CO₂ oxicombustión con su relación entre variables

Se sigue el modelo descrito por Rubin et al., (2007) donde los costes de inversión C_{inv} se calculan de la siguiente manera:

$$TDC = PEC + DC$$

$$DC = \alpha PEC$$

$$IC = \beta TDC$$

$$C_{inv} = TCI = TDC + IC$$

Los costes de compra (PEC) se calculan con el sumatorio de los costes de las ocho áreas o componentes principales (h) en los que está dividido el equipo. Para la estimación de costes de cada una se utiliza la regla de los seis décimos con respecto a factores de escalado específicos (X_h) para cada área (Tabla A1.2):

$$PEC = \sum_h C_h$$

$$C_h = C_h^{REF} \left(\frac{X_{h_1}}{X_{h_1}^{REF}} \frac{X_{h_n}}{X_{h_n}^{REF}} \right)^{0.6} \quad \forall h = 1, 2, \dots, n$$

Tabla A1.2. Componentes y factores de escalado del OXI

Componente (h)	Factor de escalado (X_h)
Unidad de Separación de Aire (ASU)	M_{Ox} & T^{Amb} & φ
Sistema de ventilación del flujo reciclado	$Vfgr^{OXI}$
Sistema de conducción del flujo reciclado	$Vfgr^{OXI}$
Sistema de enfriamiento de gases	$Vfgr^{OXI}$
Calentador de oxígeno	MW
Sistema de purificación de CO_2	M_{CO2}
Sistema de compresión	E_{comp}
Modificaciones en la caldera	C_{boiler}

donde M_{Ox} es el flujo de oxígeno producido en el ASU y se calcula con el flujo de carbón y su composición, T^{Amb} es la temperatura ambiente, φ es la pureza del oxígeno producido, MW es el tamaño de la planta, E_{comp} es la energía necesaria de compresión, C_{boiler} es el coste del combustor de la planta y M_{CO2} es flujo de CO_2 capturado:

$$M_{CO_2} = f(X_{CO_2}^{fgr}, \eta_{CO_2}^{OXI})$$

En cuanto a los costes de operación C_{oper} :

$$C_{oper} = TOM = FOM + VOM$$

donde el FOM es el sumatorio de los costes de operación ($C_{O\&L}$), de mantenimiento (C_M) y los de administración ($C_{A\&S}$):

$$FOM = C_{O\&L} + C_M + C_{A\&S}$$

Y el VOM se corresponde con los costes de los productos químicos necesarios ($C_{Chemicals}$):

$$VOM = C_{Chemicals}$$

La energía consumida es la suma de la energía del ASU (E_{ASU}), de la energía utilizada para la ventilación del flujo reciclado (E_{FGR}), de la energía utilizada para el enfriamiento del gas ($E_{FGcooling}$)

y de la energía utilizada para la compresión y purificación del CO₂ capturado (E_{comp} y E_{purif} , respectivamente):

$$EPT^{OXI} = E_{ASU} + E_{FGR} + E_{FGcooling} + E_{Comp} + E_{purif}$$

La cantidad de contaminante emitida (X^{emit}) se calcula:

$$X_{CO_2,OXI}^{emit} = X_{CO_2}^{fgr} \eta_{CO_2}^{OXI}$$

Referencias del Anexo

Rubin E.S., Rao A.B. A technical, economic and environmental assessment of amine-based CO₂ capture technology for power plant greenhouse gas control. Report to DOE/NETL from Center for Energy and Environmental studies Carnegie Mellon University, DOE/DE-FC26-00NT40935. **2002**.

Rubin E.S., Rao A.B., Berkenpas M.B. Technical documentation: oxygen-based combustion systems (oxyfuels) with carbon capture and storage (CCS). Department of Engineering and Public Policy. Paper 75. **2007**. On line: <http://repository.cmu.edu/epp/75>

Srivastava R.K., Jozewicz W., Singer C. SO₂ scrubbing technologies: a review. Environmental Progress. **2001**, 20 (4), 219 – 228.

USEPA – U.S. Environmental Protection Agency. EPA air pollution control cost manual, 6th ed., EPA/452/B-02-001. **2002**. On line: http://www.epa.gov/ttn/catc1/dir1/c_allchs.pdf

ANEXO II: DIFUSIÓN DE RESULTADOS

Anexo: Difusión de resultados

A continuación se listan otras publicaciones, así como congresos internacionales a través de los cuales se ha realizado la difusión de los resultados de la presente Tesis.

Otras publicaciones:

1. Cristóbal J., Albo J., Irabien A. Environmental sustainability assessment of electricity from fossil fuel combustion: carbon footprint. *Low carbon economy*. **2010**, 1, 86 – 91.
2. Albo J., Cristóbal J., Irabien A. Modeling and process integration of carbon dioxide capture using membrane contactors. *Computer Aided Chemical Engineering*. **2011**, 29: 1261-1265.

Congresos Internacionales:

1. Cristóbal J., Albo J., Irabien A. Environmental Sustainability Assessment of Coal/Natural Gas use in electricity generation. 20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE20. **2010**. Ischia (Italia). Comunicación Poster.
2. Cristóbal J., Dominguez-Ramos A., Albo J., Irabien A. Environmental Sustainability Assessment of clean and cleaner coal combustion. 6th European Meeting on Chemical Industry and Environment – EMCHIE2010. **2010**. Mechelen (Bélgica). Comunicación Oral.
3. Cristóbal J., Albo J., Dominguez-Ramos A., Irabien A. Environmental Sustainability Assessment of natural gas burning and photovoltaic electricity. 19th International Congress of Chemical and Process Engineering – CHISA2010. **2010**. Praga (República Checa). Comunicación Oral.
4. Cristóbal J., Luis P., Albo J., Irabien A. Environmental Sustainability Assessment of clean coal combustion compared to natural gas combustion: carbon footprint. 13th Conference on Process Integration, Modelling and Optimization for Energy Saving and Pollution Reduction – PRES2010. **2010**. Praga (República Checa). Comunicación Oral.
5. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Multi-objective optimization of the electricity production from coal burning. 21st European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE21. **2011**. Chalkidiki (Grecia). Comunicación Poster.
6. Albo J., Cristóbal J., Irabien A. Modelling and process integration of carbon dioxide capture using membrane contactors. 21st European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE21. **2011**. Chalkidiki (Grecia). Comunicación Oral.

7. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Optimal operation of air pollution control technology devices for coal combustion plants. 3rd International congress on Green Process Engineering – GPE2011. **2011**. Kuala Lumpur (Malasia). Comunicación Poster
8. Albo J., Cristóbal J., Irabien A. Ionic Liquids for carbon dioxide capture: Process selection. 2nd International Conference on Energy Process Engineering: Efficient carbon capture for coal power plants – ICEPE2011. **2011**. Frankfurt (Alemania). Comunicación Oral.
9. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Jiménez L., Irabien A. Multi-objective optimization of coal-fired electricity production with CO₂ capture. 22nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE22. **2012**. Londres (Inglaterra). Comunicación Poster.
10. Cristóbal J., Guillén-Gosálbez G., Irabien A. Optimal timing of investments in CO₂ capture technologies under uncertainty in CO₂ allowance and electricity prices. 3rd International Conference on Sustainable Chemical Product and Process Engineering – SCPPE2013. **2013**. Dalian (China). Comunicación Oral.