CONECTANDO DIMENSIONES PARA MAYOR EFICIENCIA ENERGÉTICA

La creciente demanda energética global ha generado una presión muy grande sobre el medio ambiente y hacer más eficientes nuestros métodos de generación y explotación se ha convertido en una imperiosa necesidad.

A medida que se hace cada vez más evidente que el ritmo actual de nuestra sociedad no es sostenible ambientalmente, la búsqueda de fuentes de energía alternativas se ha convertido en uno de los campos de estudio más explorados en el mundo.

Y aunque ha habido grandes avances en el desarrollo de fuentes renovables como la solar o la eólica, no se ha llegado al punto en que sean las que dominen la matriz energética, en que el carbón y el petróleo siguen como las fuentes principales de la generación eléctrica en el planeta.

Por eso, lograr que las emisiones causadas por las centrales térmicas a carbón se reduzcan al máximo posible y que la explotación petrolera sea lo más eficiente posible hacen parte de los objetivos del Grupo de investigación en Termodinámica Aplicada y Energías Alternativas – TAYEA de la UN en Medellín.

Modelando en múltiples escalas para conectarlas

Una de las metodologías usadas por el grupo para abordar proyectos en estas áreas es la modelación multiescala que permite, gracias al uso de modelos matemáticos, estudiar los fenómenos fisicoquímicos que se dan en la interacción de distintos materiales o sustancias desde el nivel atómico y molecular (microscópico) hasta escalas de interés industrial (macroscópico).

Estas ecuaciones permiten realizar simulaciones y saber si las modificaciones en una escala nanométrica tienen los efectos deseados en la escala macro.

“Cuando hablamos de modelos matemáticos estamos hablando de cómo representamos la naturaleza” explica el profesor Farid Chejne, líder del grupo TAYEA. “Un pintor lo hace con un dibujo, un escritor con un texto y nosotros lo hacemos con una ecuación matemática”.

Gracias a la creciente capacidad computacional disponible se pueden hacer cientos de simulaciones en poco tiempo y esto facilita llevar a la fase experimental los procesos con los mejores resultados en la simulación para convalidar con pruebas de laboratorio, modelos piloto y eventualmente el escalamiento a un nivel industrial.

Combustiones alternativas

Una de las áreas de trabajo que ha explorado el grupo es el de técnicas de combustión como la *combustión química en bucle* o la *oxicombustión* que permiten reducir o evitar en un alto porcentaje la emisión de gases nocivos al ambiente.

La primera es un proceso de combustión en el que unos catalizadores - generalmente óxidos metálicos a partir de níquel, cobalto o manganeso - transportan oxígeno del aire al

combustible en unos reactores interconectados: primero, en un reactor de reducción el combustible se oxida en CO2 y agua mientras que el óxido metálico se reduce a metal u otro óxido.

Luego, en el reactor de oxidación se regenera el óxido metálico con aire pudiendo utilizarse otra vez en el primer reactor, creando el ciclo o bucle. Con este proceso se obtiene una mezcla de gases a la salida del reactor de reducción en que el dióxido de carbono tiene un elevado grado de pureza ya que no está diluido con nitrógeno, facilitando su captura.

"El núcleo de esta tecnología es el catalizador" afirma Juan Carlos Maya, investigador de TAYEA quien realizó una modelación multiescala que le permitió identificar las reacciones físicas y químicas propicias para preparar un catalizador basado en cobre que soporte muchos ciclos de funcionamiento, lo que haría más viable económicamente la *combustión química en bucle.*

Con la *oxicombustión*, como su nombre lo indica, la ignición no se hace con aire sino con oxígeno puro. Al separar este elemento de los otros presentes en el aire, se evita que al hacer la combustión el CO2 generado esté mezclado con otros gases y sea necesario una separación posterior para su captura.

En las condiciones de la oxicombustión, el investigador simuló la calcinación de carbonato de calcio que se da en los hornos cementeros usando modelos matemáticos que no solo representaban el proceso químico sino que tuvo en cuenta la no uniformidad de las partículas de las calizas y arcillas que se usan en el proceso y la sinterización o compactación de ellas.

Se encontró que aunque la *oxicombustión* acelera el fenómeno de sinterización – lo que afecta la reacción - el beneficio ambiental de no emitir CO2 compensa en gran medida el menor rendimiento.

Captura de CO2 para la industria petrolera

Quizás una pregunta que surge al conocer los procesos de combustión alternativa es qué hacer con el CO2 capturado. Pues resulta que este gas es una materia prima muy importante para distintos sectores, desde la explotación petrolera hasta la industria de alimentos.

Juan Diego Arroyave, investigador de TAYEA, se enfocó en estudiar cómo distintas plantas de combustión incidían en la captura de CO2. Esto hace parte de un proyecto de explotación de hidrocarburos en Colombia, donde se tiene un déficit de gas para inyectar en los yacimientos.

"Casi todos los yacimientos en Colombia, principalmente en los llanos orientales, son de crudo pesado que necesita un agente de arrastre para lograr extraerlos. En este caso se haría con gas mejorado químicamente" explica Arroyave.

Los volúmenes de gas que se demandan son muy grandes y deben cumplir con unas condiciones estándar. El grupo realizó análisis y simulaciones de 4 tipos de plantas de producción de energía para identificar la que brindara la mejor alternativa de captura de CO2 para luego modelar cambios en distintas variables y optimizar el rendimiento.

Luego, se hacía una evaluación de la *combustión química en bucle* como alternativa a la absorción química para la captura de CO2 y se encontró que la mejor opción era combinar una de las plantas de gasificación con este método de combustión.

La investigación presentó también una evaluación económica que incluye los costos de los equipos necesarios, del mantenimiento y varios aspectos más que pueden afectar el costo del CO2 ya que esta variable "es el principal limitante en las operaciones de explotación" afirma el investigador.

El gas capturado no solo puede ser usado para la extracción de crudos pesados en los yacimientos del país sino que es una materia prima importante para sectores como el de alimentos, cosméticos y biocombustibles.

Y el modelo puede ser usado para analizar todo tipo de plantas industriales que generan gases en su producción y optimizar sus procesos en términos energéticos y reducir sus emisiones.

Humectabilidad y asfaltenos

El profesor Bibian Alonso Hoyos lleva más de una década trabajando modelos en una escala molecular porque vio en ellos la oportunidad de explorar su interés por las ciencias básicas y relacionarlo con aplicaciones de ingeniería.

Uno de los principales proyectos en los que ha trabajado surgió por una necesidad que Ecopetrol tenía con su explotación de yacimientos de gas: cuando la presión en los pozos baja, el gas se va condensando y se va acumulando en los conductos obstruyendo el flujo.

Para solucionar ese problema existen una variedad de productos cuyos elementos constitutivos no son dados a conocer por las empresas que los proveen. Por eso cuando el tratamiento funcionaba por unos pocos días o solamente en algunos de los pozos, aumentaba el interés de Ecopetrol por saber por qué funcionan y cuáles condiciones impiden que sean efectivos.

Allí es donde entra el trabajo del profesor: con modelos matemáticos analiza las interacciones moleculares que se dan entre el producto y las sustancias del yacimiento, identificando la solución adecuada para cada situación.

Esto le permitió abordar otros problemas, como la precipitación de asfaltenos, un elemento muy pesado de los crudos que se encuentran en Colombia. "Al conocer las interacciones moleculares de las sustancias en una escala microscópica y sus efectos en las escalas superiores, se puede determinar las nanopartículas o sustancias que reducirían su viscosidad y harían que el crudo se extraiga más fácil' explica el profesor Hoyos.

Al estudiar todas esas interacciones se pueden extraer propiedades macroscópicas que le interesan a la industria: densidades, temperaturas, presiones, viscosidades, capacidades caloríficas, conductividades, etc.

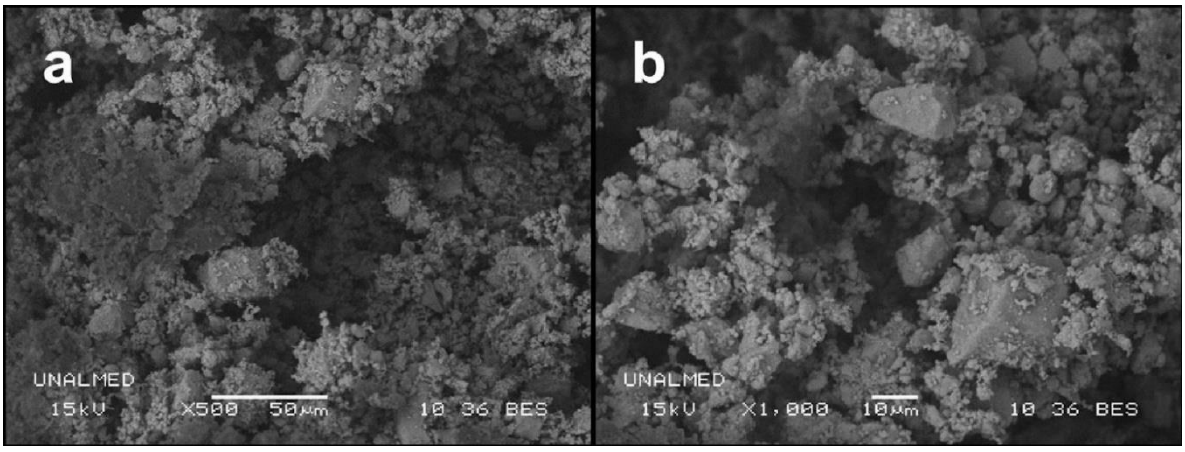
Estas capacidades le han permitido al profesor y al grupo explorar otras aplicaciones. La humectabilidad estudiada en los fenómenos de condensación que se dan en los yacimientos de gases puede ser el paso inicial para estudiarla en otros ambientes o materiales como los textiles.

Construir estos modelos matemáticos y simulaciones “es dispendioso, tiene una curva de aprendizaje grande” señala el profesor Hoyos. “Cuando uno empieza a obtener los resultados se necesita una buena capacidad computacional y afortunadamente tenemos un cluster de computadores en la Facultad de Minas de más de 250 unidades trabajando al tiempo”.

Estos proyectos no sólo mejoran la eficiencia energética de procesos industriales y sus rendimientos. También permiten abordar retos ambientales globales, abrir caminos para solucionarlos y lograr que nuestra sociedad se dirija a un futuro más sostenible.

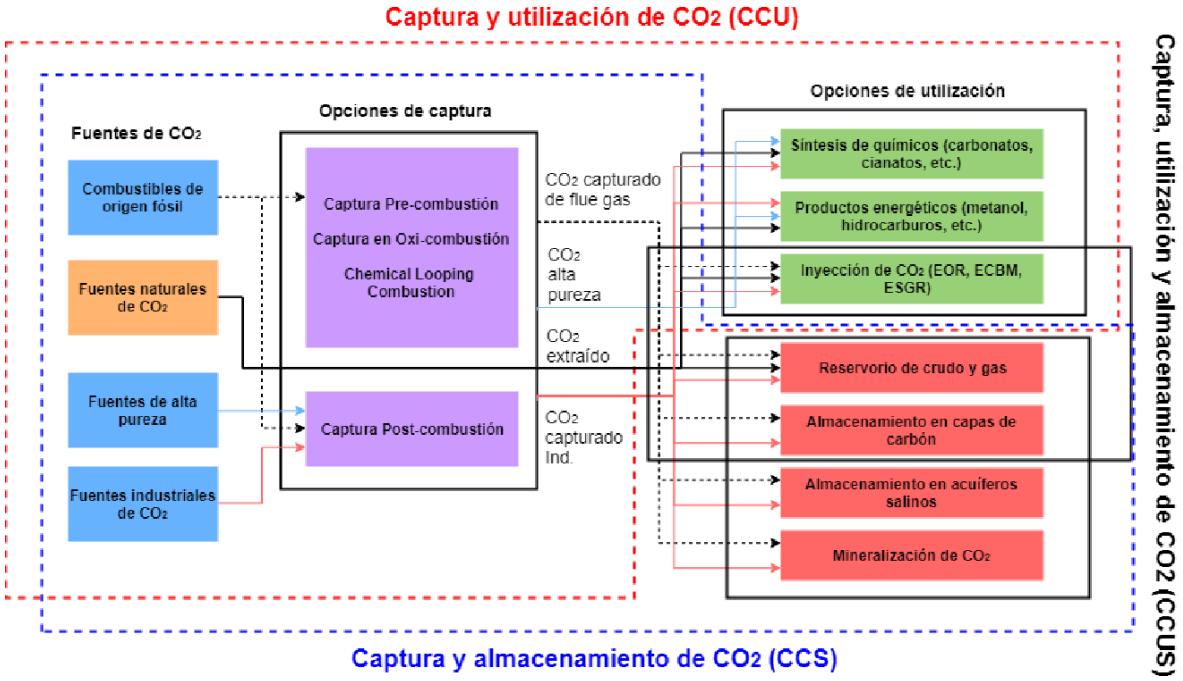
Todo gracias al conocimiento y a la dedicación de investigadores como los del grupo TAYEA.

Palabras claves: Eficiencia energética; modelación multiescala; combustión química en bucle; oxicombustión; catalizadores; captura CO2; extracción crudos pesados; alfaltenos; interacciones moleculares;



Micrografía de portador de cobre basado en oxígeno. (Tomado de la tesis de doctorado del investigador de TAYEA Juan Carlos Maya)

Horno cementero. (Tomado de solostocks.com.mx)


Captura y utilización de CO2 (CCU)
Captura, utilización y almacenamiento de CO2 (CCUS)
Fuentes de CO2
Combustibles de origen fósil
Fuentes naturales de CO2
Fuentes de alta pureza
Fuentes industriales de CO2
Opciones de captura
Captura Pre-combustión
Captura en Oxi-combustión
Chemical Looping Combustion
Captura Post-combustión
CO2 capturado de flue gas
CO2 alta pureza
CO2 extraído
CO2 capturado Ind.
Opciones de utilización
Síntesis de químicos (carbonatos, cianatos, etc.)
Productos energéticos (metanol, hidrocarburos, etc.)
Inyección de CO2 (EOR, ECBM, ESGR)
Reservorio de crudo y gas
Almacenamiento en capas de carbón
Almacenamiento en acuíferos salinos
Mineralización de CO2
Captura y almacenamiento de CO2 (CCS)

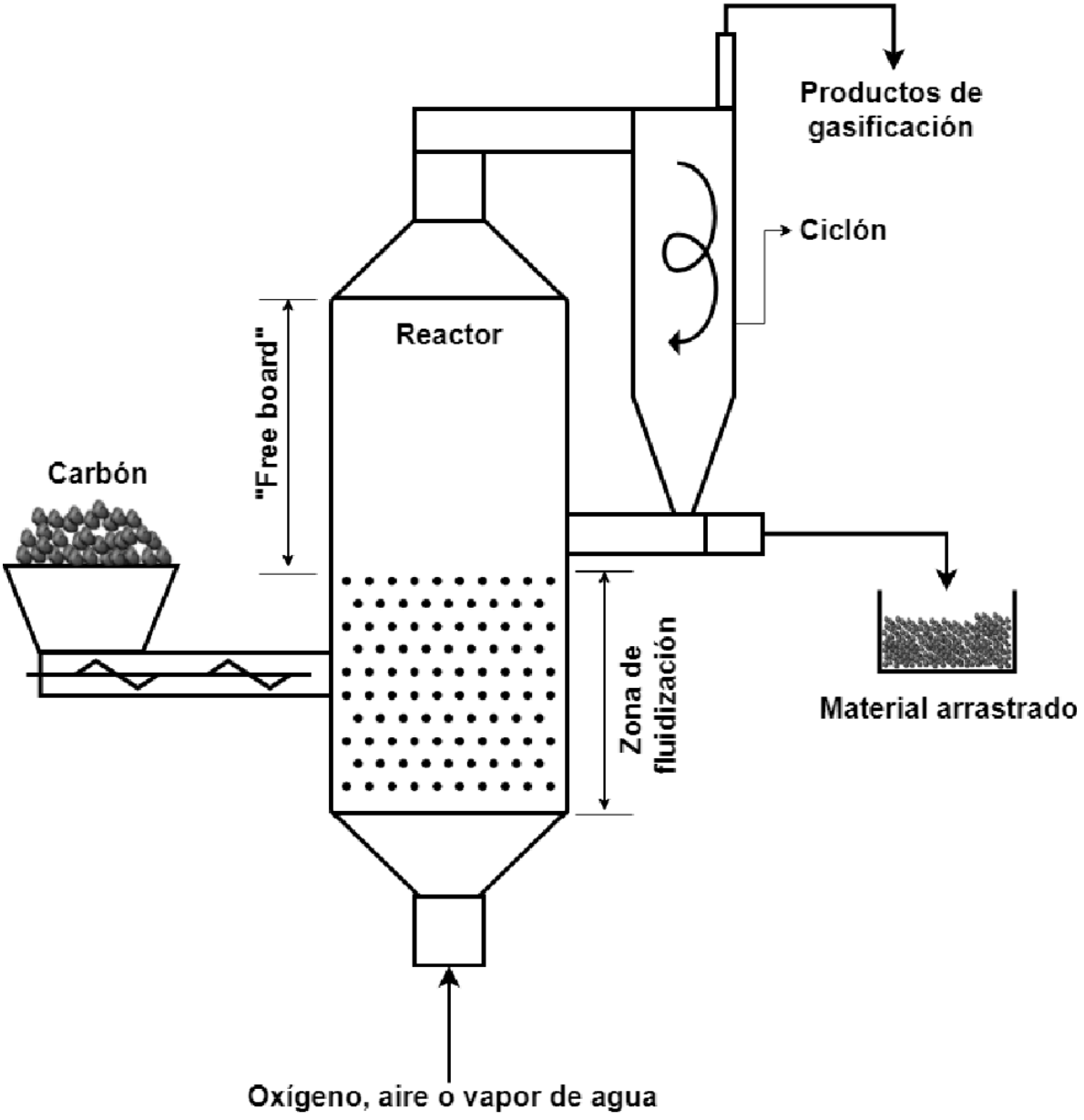
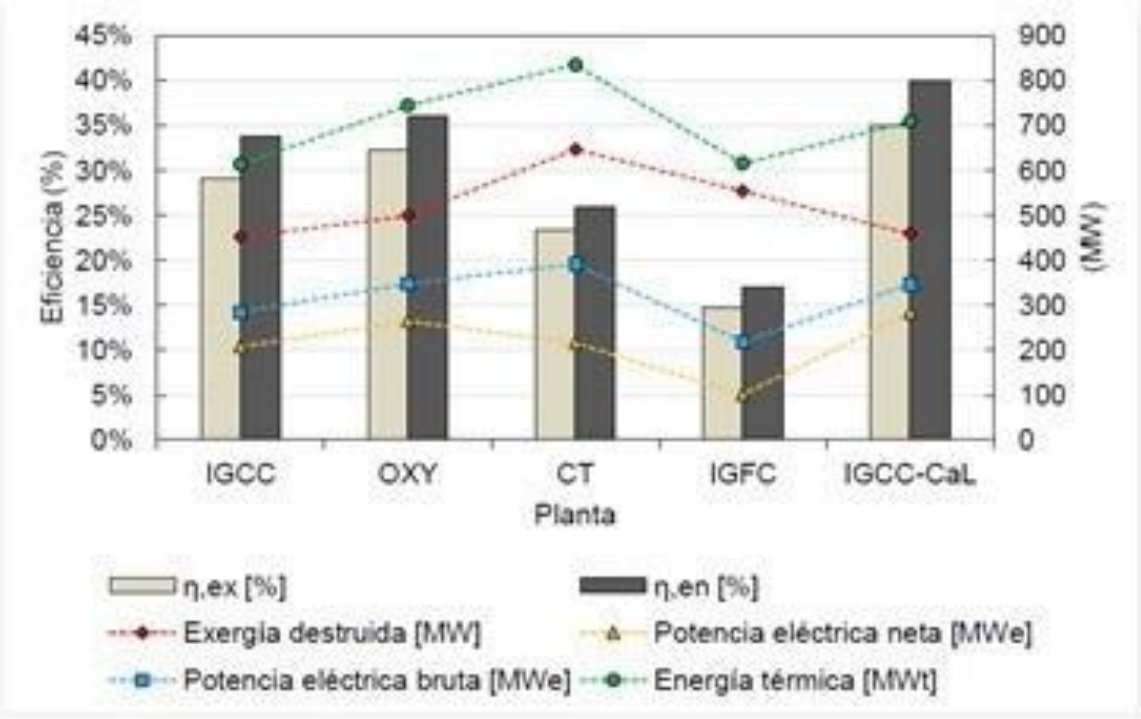
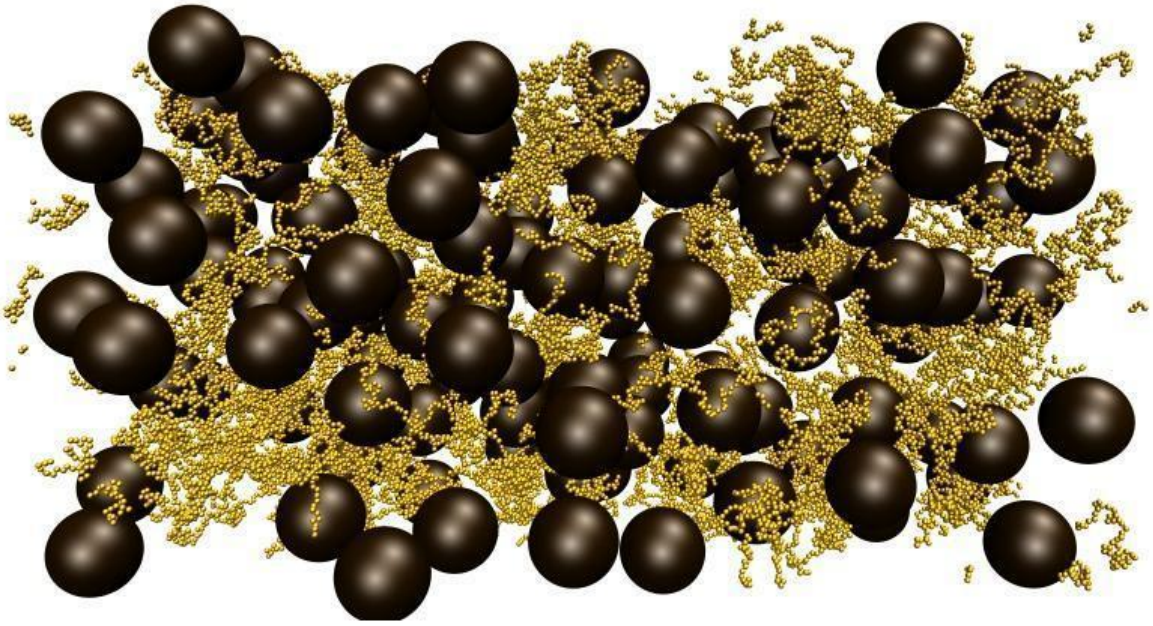


Diagrama esquemático del gasificador modelado (Tomado de tesis del investigador de TAYEA Juan Diego Arroyave)

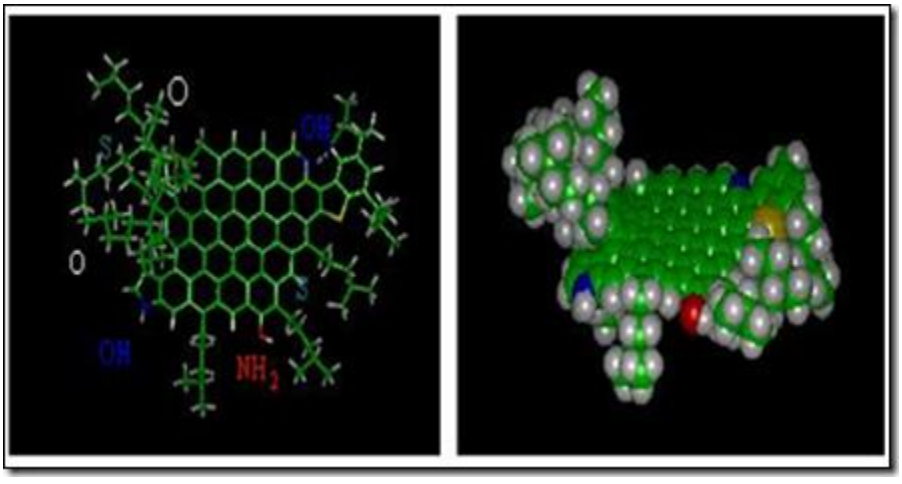


Comparación energética y exergética de distintos tipos de plantas (Tomado de tesis del investigador de TAYEA Juan Diego Arroyave)

Pozos petroleros. (Foto tomada de https://minas.medellin.unal.edu.co/noticias/facultad/1763-descontaminan-aguas-en-pozos-petroleros-para-reutilizarla-en-industria-agricola Origen: goo.gl/WfvkR)



Asfaltenos



Estructura molecular promedio de los asfaltenos

Juan Ignacio García