RAPORTARE ȘTIINȚIFICĂ

RST - Raport științific și tehnic în extenso

Cuprins

Acest raport științific și tehnic prezintă rezultatele obținute în anul 2017 în cadrul proiectului: *Demonstrarea aplicabilității tehnologiei de alimentare secvențială a gazelor pentru accelerarea transpunerii la scara a proceselor de tip ciclu chimic operate sub presiune* (acronim: GaSTech), cod proiect: COFUND-ACT ERANET - GaSTech, nr. contract: 91 / 2017.

Obiective an 2017

Pentru anul 2017 s-a prevăzut o singură activitate care s-a realizat integral: *Definirea principalelor caracteristici ale studiilor de caz ce se vor evalua de ex.: mărimea instalațiilor evaluate, tipurile de combustibili folosiți, purtătorii de oxigen utilizati, ipoteze folosite în analiza economică etc.*

Rezumatul etapei 2017 (maxim 2 pagini) – gradul de atingere a rezultatelor estimate

Raportul ştiinţific şi tehnic al proiectului cu titlul "*Demonstrarea aplicabilitatii tehnologiei de alimentare secventiala a gazelor pentru accelerarea transpunerii la scara a proceselor de tip ciclu chimic operate sub presiune"* (acronim: GaSTech), cod proiect: COFUND-ACT ERANET - GaSTech, nr. contract: 91 / 2017, elaborat în cadrul activităţii prezentate mai sus prevăzute pentru anul 2017 cuprinde următoarele secţiuni:

- Prezentarea tehnologiei de alimentare secvențială a gazelor în cadrul proceselor de tip ciclu-chimic pentru producereade energie electrică, hidrogen și/sau oxigen;
- Definirea principalelor caracteristici ale proceselor ce se vor evalua (tipuri de combustibili utilizați, mărimea instalațiilor, purtătorii de oxigen utilizați*)*;

- Stabilirea cazurilor de referință cu care vor fi comparate din punct de vedere tehnic și economic tehnologiile de alimentare secvențială a gazelor (gas switching) evaluate în cadrul proiectului;
- Stabilirea principalelor ipoteze și metodologii folosite în analiza economică a tehnologiilor evaluate în vederea determinării costurilorde producție pentru energia electrică / hidrogen și oxigen.

Toate informaţiile şi relaţiile matematice identificate şi prezentate în cadrul acestui raport vor fi incluse şi vor sta la baza studiului technico-economic ce va fi realizat în următoarele faze ale proiectului. Astfel, toate activităţile prevăzute şi convenite pentru anul 2017 au fost realizate integral.

- **Descrierea științifică și tehnică, cu punerea în evidență arezultatelor etapei și gradul de realizare a obiectivelor**

Procesele de tip ciclu chimic, presupun existența unui purtător de oxigen (oxid metalic) ce este transportat între două sau trei reactoare, în contact cu fluxuri diferite de gaze, pentru obținerea a diferiți vectori energetici și captarea inerentă a dioxidului de carbon. În cadrul tehnologiilor de alimentare secvențială a gazelor, purtătorii de oxigen sunt păstrați într-un singur reactor în strat fluidizat, iar fluxurile de gaz oxidant sau reducător sunt alimentate secvențial în reactor.

Proiect de fată vizează evaluarea tehnico-economică a următoarelor tipuri de procese de tip ciclu chimic prin prisma aplicabilității tehnologiei de alimentare secvențială a gazelor ce permite operarea sub presiune a acestor sisteme:

1. **Procesul de combustie**: În cadrul acestui proces, un combustibil gazos este oxidat indirect cu separarea inerentă a N_2 și a CO_2 pentru a produce un flux de gaz de temperatură ridicată în vederea acționarii unei turbine cu gaz (Figura 1), utilizînd $CaMnO_3$ ca și purtător de oxigen.

- **Avantaje:** Combustia cu alimentarea secvențială a gazelor nu necesită un consum suplimentar de energie pentru separarea CO_2 în comparațiile cu tehnologiile consacrate de captare a CO_2 (de ex. absorbția chimică gaz-lichid) în care este necesară o cantitate semificativă de energie pentru captare.
- **Blocaje / Provocări:** Purtătorul de oxigen, valvele şi filtrele limitează temperatura maximă de operare respectiv eficiența ciclului combinat gaze-abur.

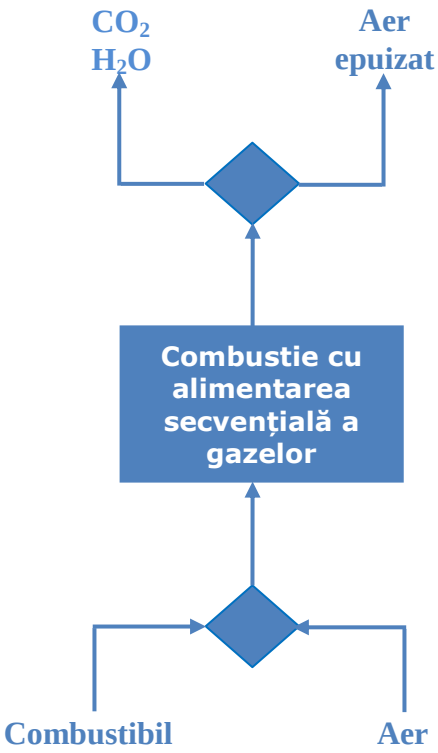


Figura 1. *Procesul de combustie*

2. **Procesul de reformare:** În acest caz, reacțiile redox ale purtătorul de oxigen furnizează căldura necesară reacției de reformare endotermă a metanului cu vapori de apă concomitent cu captarea inerentă de CO_2. De asemenea, este important pentru desfășurarea eficientă a procesului ca purtătorul de oxigen să catalizeze şi reformarea metanului (vezi Figura 2). Ca urmare, în cadrul acestui proiect se propune utilizarea unor purtatori de oxigen pe bază de peroskit ceea ce duce implicit la evitarea prezenței nichelului.

- **Avantaje:** Obținerea gazului de sinteză pentru producție de hidrogen/combustibil cu transfer direct de căldura pentru etapa de reformare catalitică simultan cu etapa de captarea a CO_2 din proces. Avantajul principal al tehnologiei de tip chemical looping cu alimentarea secvențială a gazelor este schema de integrarea energetică sensibil mai bună comparativ cu tehnologiile clasice de reformare catalitică a gazului metan, fapt care îmbunătățește semificativ eficiența energetică a procesului.
- **Blocaje / Provocări:** Necesită echipamente suplimentare pentru procesarea ulterioară a hidrogenului.



Figura 2. *Procesul de reformare cu vapori de apă*

3. **Procesul de disociere termo-chimică a apei:** Are ca scop obținerea de hidrogen în urma oxidării parțiale a purtătorului de oxigen cu abur. Ulterior, purtătorul de oxigen este complet oxidat cu oxigenul din aer și redus cu gaze combustibile bogate în carbon concomitent cu etapa de captarea a CO_2 rezultat din combustibilul folosit. În acest caz, materialele pe bază de fier sunt cei mai avantajoase ca și transportori de oxigen datorită rezultatelor bune obținute până în prezent.

- **Avantaje:** Permite obținerea de hidrogen simultan cu captarea de CO_2 prin utilizarea oricărui tip de combustibil gazos.
- **Blocaje / Provocări:** Limitarea termodinamică a conversiei combustibilului respectiv consumul ridicat de abur în etapa de obținerea hidrogenului.

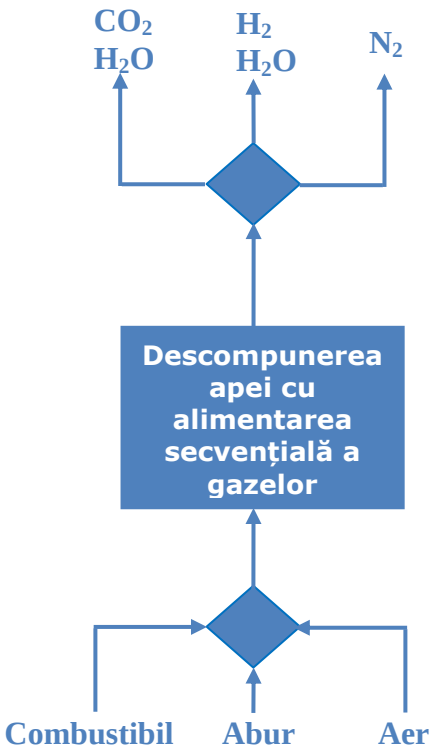


Figura 3. *Procesul de disociere a apei pentru producerea de hidrogen*

4. **Procesul de obținere a oxigenului:** Un purtător de oxigen cu proprietăți de eliberare a oxigenului (de tip Chemical Looping with Oxygen Uncoupling - CLOU) este utilizat pentru a prelua oxigenul din aer eliberându-l într-un curent de gaz lipsit de azot, care poate servi procesului de oxicombustie cu captare de CO_2 (Figura 4). În cadrul acestui proiect se propune utilizarea Ca_2AlMnO_{5+6} sau $CuMnO_x$ ca și potențiali purtători de oxigen.
    - **Avantaje:** Producția de oxigen cu alimentarea secvențială a gazelor nu necesita un consum suplimentar de energie pentru separarea oxigenului din aer. Tehnologia de separare a aerului folosind sisteme de tip chemical looping este foarte promițătoare în comparație cu tehnologia clasică de separare criogenică în vederea reducerii consumului energetic de la circa 200 kWh/t oxigen pentru separarea criogenică la sub 100 kWh/t oxigen pentru sistemele de tip chemical looping.
    - **Blocaje/Provocări:** Obținerea unui flux gazos cu concentrație scăzuta de oxigen respectiv cantități mari de aer epuizat cu temperaturi ridicate.

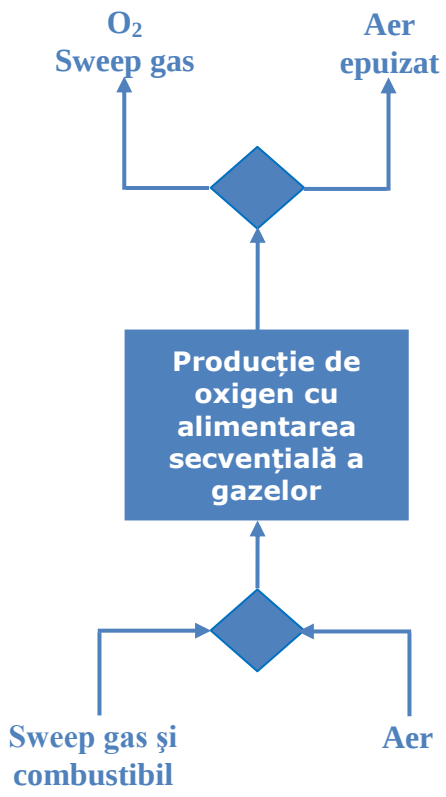


Figura 4. *Procesul de obținere de oxigen*

Ca și cazuri de referință cu care vor fi comparate din punct de vedere tehnic și economic tehnologiile de alimentare secvențială a gazelor (gas switching) evaluate în cadrul proiectului se vor considera următoarele procese clasice de conversie a energiei:

- Pentru tehnologia de alimentare secvențială a gazelor pentru procesul de combustie (gas switching combustion - GSC) se va considera tehnologia de gazeificare în ciclu combinat gaze - abur (integrated gasification combined cycle - IGCC) prevăzută cu o etapă de captare a dioxidului de carbon folosind absorbția gaz - lichid cu ajutorul solvenților chimici (de ex. alcanolamine) sau fizici (de ex. Selexol^{TM}).

Schema conceptuală a tehnologiei de tip IGCC cu captarea dioxidului de carbon folosind absorbția chimică sau fizică este prezentată în Figura 5, considerând un reactor de gazeificare de tip Shell (prevăzut cu transport pneumatic al combustibilului solid și răcirea gazului de sinteză prin folosirea gazului rece recirculat). După răcire și separare cenusă, gazul de sinteză este tratat în vederea conversiei catalitice a CO la CO_2 și hidrogen urmat de o etapă de captare gaze acide (atât H_2S cât și CO_2). Gazul decarbonizat (conținând în principal hidrogen) este utilizat la generarea de energie electrică într-un ciclu combinat.

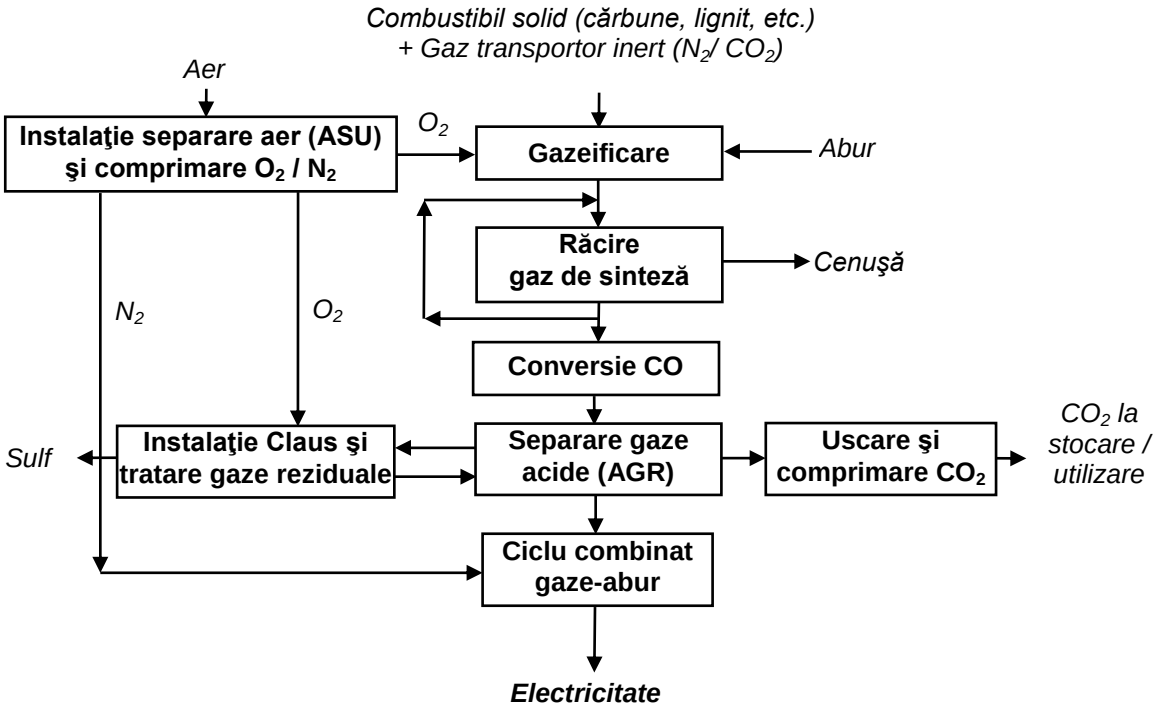


Figura 5. *Producerea de energie electrică prin gazeificarea combustibililor solizi cu captarea dioxidului de carbon*

- Pentru tehnologiile de alimentare secvențială a gazelor pentru procesul de reformare (gas switching reforming - GSR) și pentru procesul de disociere a apei pentru producerea de hidrogen (gas switching water spliting - GSWS) se va considera tehnologia de reformare catalitică a gazului metan cu și fără etapă de captare dioxid de carbon. Varianta de captare a dioxidului de carbon va utiliza procesul de absorbție gaz - lichid fie cu solvenți chimici (de tipul alcanolaminelor de ex. MEA, MDEA etc.) fie cu solvenți fizici (de ex. Selexol^{TM}).

Schema conceptuală a tehnologiei de reformare a gazului metan cu vapori de apă pentru producerea de hidrogen cu captarea dioxidului de carbon folosind absorbția chimică / fizică este prezentată în Figura 6. Gazul metan este desulfurizat (pentru a evita otrăvirea catalizatorilor) după care este supus procesului de reformare catalitică. Gazul de sinteză rezultat este apoi supus conversiei catalitice a CO la CO_2 și hidrogen urmat de o etapă de captare CO_2. Fluxul de hidrogen rezultat este purificat cu ajutorul unei instalații de adsorbție (Pressure Swing Adsorption - PSA) la o puritate de cel puțin 99.95% (mol). Aspectele de integrare energetică a instalației sunt foarte importante în optimizarea eficienței procesului și se vor trata în detaliu în cadrul proiectului.

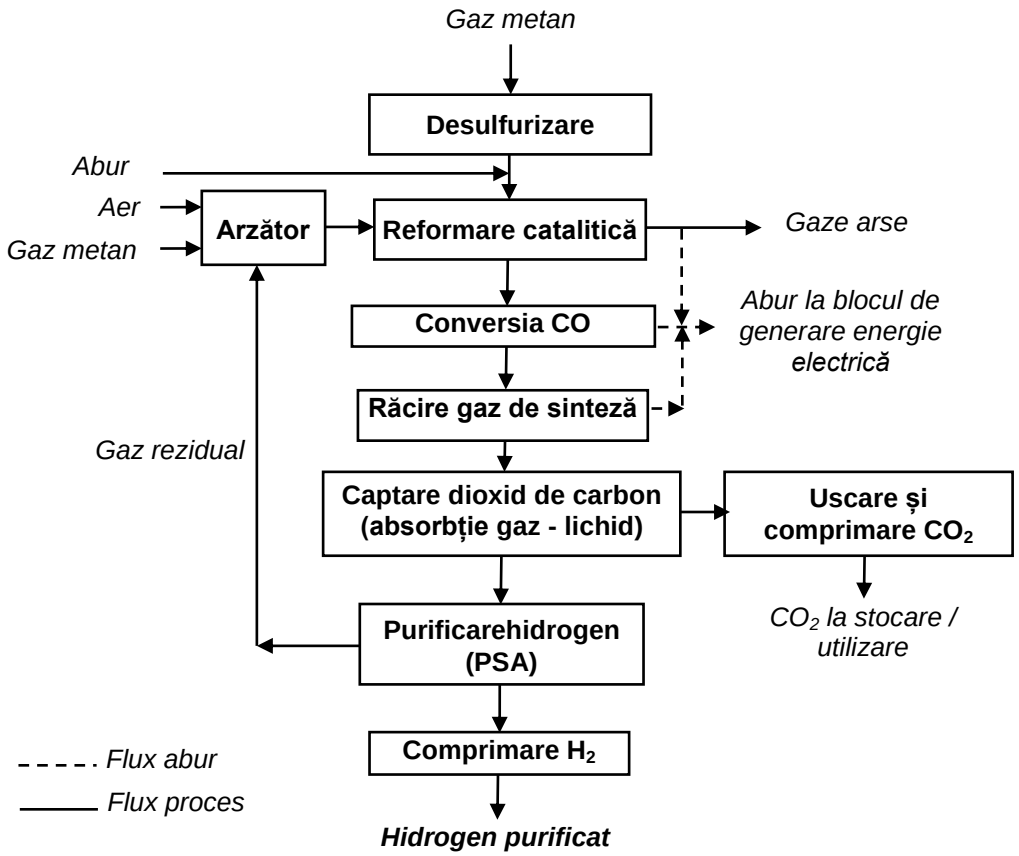


Figura 6. *Producerea de hidrogen prin reformarea catalitică a gazului metan cu captarea dioxidului de carbon*

Ca și mărime a instalațiilor ce se vor evalua din punct de vedere tehnic și economic se va considera pentru partea de generare energie electrică o putere netă generată de 300 - 400 MW iar pentru instalațiile de producere a hidrogenului o producție de 100 - 200 MW_{th} (considerând puterea calorică inferioară a hidrogenului - 10,795 MJ/Nm^3). Ca și combustibili fosili ce se vor utiliza în sistemele de conversie a energiei evaluate în cadrul proiectului se va considera atât combustibili gazoși (gaz natural) cât și solizi (cărbune).

Din punct de vedere al principalelor ipoteze și metodologii folosite în analiza economică a tehnologiilor evaluate se vor estima costurile de capital și cele de operare a instalațiilor ca mai apoi acestea să fie agregate pentru calcularea costului de producție pentru energia electrică / hidrogen și oxigen. În continuare sunt prezentate pe scurt principalele aspecte metodologice de evaluare economică a sistemelor analizate.

Pentru calcularea costurilor de capital al diferitelor echipamente din cadrul instalaţiilor de conversie bazate pe alimentarea secvențială a gazelor (gas switching) este

necesar în primul rând stabilirea principalelor blocuri funcţionale din cadrul instalaţiilor precum şi a principalului factor care guvernează costul acestor unităţi (cel mai adesea debitul de materie primă procesată sau debitul de produs realizat). În acest sens, instalațiile sunt separate în principalele sub-sisteme componente iar costul de capital al fiecărui sub-sistem este estimat cu ajutorul ecuației matematice:

$$C_E = C_B * (\frac{Q}{Q_B})^M \quad (1)$$

unde:

C_E - costul de capital al sub-sistemului cu capacitatea de producție Q;

C_B - costul de capital al sub-sistemului cu capacitatea de producție Q_B;

M - constantă ce depinde de tipul de echipament.

Debitele masice și energetice procesate de fiecare echipament (care au fost calculate prin modelare și simulare precum și pe baza datelor experimentale de la partenerii din proiect) sunt folosite ca și factori de scalare pentru capacitatea de producție (Q). În continuare, sunt calculate costurile specifice ale investiției folosind costul total de capital și puterea brută / netă generată de fiecare sistem (pentru producerea de hidrogen și oxigen se vor folosi debitele acestora):

- Costul specific al investiției (CSI) per kW brut:

$$CSI\ \ per\ kW(brut) = \frac{Cost\ total\ \ de\ capital}{Putere\ bruta\ \ generata} \quad (2)$$

- Costul specific al investiției (CSI) per kW net:

$$CSI\ \ per\ kW(net) = \frac{Cost\ total\ \ de\ capital}{Putere\ neta\ \ generata} \quad (3)$$

Ca și ipoteze pentru estimarea costului de capital se va considera că costul sistemului de utilități și instalații auxiliare este circa 25 % din principalele componente ale instalației. Odată estimate costurile investiţionale necesare realizării instalaţiei se continuă cu calcularea costurilor de operare a acesteia. Din punct de vedere al costurilor de operare, acestea au două componente importante: costurile fixe şi costurile variabile.

Costurile fixe ale instalațiilor au în componenţă următoarele elemente principale:

- Costurile de întreţinere ale instalaţiei ca fiind un anumit procent din costurile de capital asociate cu respectivele echipamente din cadrul instalaţiei;

- Costurile cu forţa de muncă directă;

- Costuri administrative estimate ca 30 % din costurile cu forţa de muncă directă.

Odată calculate costurile fixe de operare, următorul pas va fi de a calcula costurilor de operare variabile. Pentru acestea se va considera un număr de ore anual de funcţionare a instalaţiei industriale (de ex. 7500 ore/an). Costurile variabile de operare conţin următoarele componente principale:

- Costurile cu materiile prime energetice principale (cărbune, gaz metan) și auxiliare;
- Apă demineralizată de completare pentru ciclul de abur şi apă de răcire;
- Costurile cu catalizatorii folosiți;
- Costurile cu transportorii de oxigen folosit pentru unitatea de captare CO_2;
- Costuri cu alte chimicale necesare în procesul de producţie;
- Costuri de procesare a deşeurilor rezultate din procesul de fabricaţie.

Pe baza costurilor de capital și de operare se va calcula costul de producție a energiei electrice (Levelised Cost Of Electricity - LCOE) folosind metoda valorii prezente a investiției (Net Present Value - NPV). Costurile pentru captarea CO_2 și cele pentru evitarea emiterii CO_2 sunt parametrii importanți când se compară între ele diferite metode de captare și au fost calculate ținând cont de costul energiei electrice cu și fără captare CO_2 conform următoarelor ecuații:

$$Cost\ captare\ CO_2 = \frac{LCOE_{cu\ captare\ CO_2} - LCOE_{fara\ captare\ CO_2}}{CO_2\ captat} \quad (4)$$

$$Cost\ evitare\ emisii\ CO_2 = \frac{LCOE_{cu\ captare\ CO_2} - LCOE_{fara\ captare\ CO_2}}{Emisii\ CO_{2\ \ fara\ captare\ CO_2} - Emisii\ CO_{2\ \ cu\ captare\ CO_2}} \quad (5)$$

Pentru tehnologiile de alimentare secvențială a gazelor utilizate pentru producția de hidrogen sau oxigen se va folosi o metododologie similară cu cea prezentată mai sus pentru cazul producerii de energie electrică. Se vor avea în vedere și realizarea de studii de senzitivitate parametrică pentru evidențierea influenței diferiților parametrii tehnico-economici (de ex. costul combustibilului, costul de capital etc.) asupra principalilor indicatori economici (de ex. costul de producție) precum și analiza fluxului de numerar (cash flow).

Pentru cazurile de referință cu care se vor compara tehnologiile de alimentare secvențială a gazelor (gazeificarea cărbunelui cu captare CO_2 pre-combustie folosind Selexol™ și reformarea catalitică a gazului metan cu și fără etapă de captare CO_2) se vor folosi date tehnico-economice raportate în literatură (de ex. rapoartele Agenției Internaționale pentru Energie - IEA sau a National Energy Technology Laboratory precum și articole științifice relevante) și rezultate din activitatea proprie de cercetare.

- **Anexe (documentatie de executie, caiet de sarcini, teme de proiectare, buletine de incercari, atestari, certificari, etc. – dupa caz)**

Nu este cazul

- **Prezentare rezultate verificabile etapă – parametrii, nivel de performanță parametrii**

Nu este cazul

- **Concluzii**

Pentru raportul proiectului pentru anul 2017 se desprind următoarele concluzii punctuale cu privire la activitatea desfășurată:

- Prezentarea pe scurt a principalelor tehnologii de alimentare secvențială a gazelor pentru producerea de energie electrică (gas switching combustion - GSC), hidrogen (gas switching reforming - GSC / gas switching water spliting - GSC) și oxigen (gas switching oxygen production - GSOP).

- Stabilirea principalelor tehnologii de referință (gazeificarea carbunelui cu captare CO_2 pre-combustie folosind absorbție fizică sau chimică și reformarea catalitică a gazului metan cu și fără etapă de captare CO_2) cu care vor fi comparate din punct de vedere economic tehnologiile de alimentare secvențială a gazelor evaluate în cadrul proiectului.

- Prezentarea pe scurt a metologiei de evaluare economică a tehnologiilor de alimentare secvențială a gazelor cu evidențierea principalilor parametrii de performanță economică urmăriți (de ex. costurile de capital totale și cele specifice, costurile de operare și de producere a energiei electrice / hidrogen / oxigen, costurile de captare CO_2, fluxul de numerar cumulat, realizarea de studii de senzitivitate parametrică etc.).

- **Bibliografie**

- S. Cloete, M.C. Romano, P. Chiesa, G. Lozza, S. Amini, Integration of a Gas Switching Combustion (GSC) system in integratedgasification combined cycles, International Journal of Greenhouse Gas Control 42 (2015) 340–356.

- L. Mancuso, S. Cloete, P. Chiesa, S. Amini, Economic assessment of packed bed chemical looping combustion andsuitable benchmarks, International Journal of Greenhouse Gas Control 64 (2017) 223–233.

- V. Spallina, D. Pandolfo, A. Battistella, M.C. Romano, M. Van Sint Annaland, F. Gallucci, Techno-economic assessment of membrane assisted fluidized bed reactors for pure H2 production with CO_2 capture, Energy Conversion and Management 120 (2016) 257–273.

- International Energy Agency, Greenhouse Gas R & D Programme (IEAGHG), Co-production of hydrogen and electricity by coal gasification with CO_2 capture - Updated economic analysis, Report 2008/9, 2008.

- International Energy Agency, Greenhouse Gas R&D Programme (IEAGHG), Potential for improvement in gasification combined cycle power generation with CO_2 capture, Report PH4/19, 2003.

- C.C. Cormos, Techno-economic and environmental evaluations of large scale gasification-based CCS project in Romania, International Journal of Hydrogen Energy 39 (2014) 13-27.

- **Scurt raport despre deplasarea (deplasarile) in strainatate privind activitatea de diseminare si/sau formare profesionala** (se vor prezenta informatiireferitoare la simpozion/congres: denumire, perioada desfasurare, locul de desfasurare, programul evenimentului, titlul lucrarii care s-a prezentat, autorii, perspective de colaborare, noutati pentru proiect

În anul 2017 s-a realizat o singură mobilitate în străinătate la coordonatorul proiectului - Sintef, Trondheim, Norvegia în perioada 25 - 27 Septembrie cu ocazia startului proiectului. La întalnire au participat directorul de proiect: conf. dr. Ana-Maria Cormoș și un membru din echipa de cercetare: lector dr. ing. Fogarasi Szabolcs.

Privitor la activitatea de diseminare a rezultatelor proiectului a fost trimis un abstract pentru conferința: 21st Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction - PRES 2018, Praga, Republica Cehă, 2018.

Director de proiect

Conf. Dr. Ana-Maria Cormoş

