EXEMPLE D'APPLICATION DE PROSIMPLUS

CAPTURE DU CO_2 PAR UNE SOLUTION AQUEUSE D'AMINE

INTERET DE L'EXEMPLE
Cet exemple présente la simulation d'un procédé de capture par absorption du CO_2 présent dans un gaz de combustion. Le gaz est refroidi par contact direct avec de l'eau avant l'abattage du CO_2 dans un absorbeur (colonne d'absorption) par une solution aqueuse d'amine. L'amine est ensuite régénérée dans une colonne à distiller pour être recyclée vers l'absorbeur. Le courant vapeur de tête sortant de la colonne de régénération, composé de CO_2 et d'eau, est ensuite refroidi et envoyé dans un ballon afin de séparer l'eau du CO_2 pour stockage. Cet exemple illustre notamment l'utilisation du module « Bilan généralisé » de ProSimPlus pour le calcul des débits d'appoint en amine et en eau.

DIFFUSION	☑ **Libre-Internet**	☐ **Réservée clients**	☐ **Restreinte**	☐ **Confidentielle**

FICHIER PROSIMPLUS CORRESPONDANT	*PSPS_EX_FR- Procede-capture-CO2-avec-amine.pmp3*

Il est rappelé au lecteur que ce cas d'utilisation est un exemple et ne doit pas être utilisé à d'autres fins. Bien que cet exemple soit basé sur un cas réel il ne doit pas être considéré comme un modèle de ce type de procédé et les données utilisées ne sont pas toujours les plus exactes disponibles. Fives ProSim ne pourra en aucun cas être tenu pour responsable de l'application qui pourra être faite des calculs basés sur cet exemple.

Fives ProSim
Siège social : Immeuble Stratège A - 51 rue Ampère - 31670 Labège - FRANCE
Tél. : +33 (0)5 62 88 24 30
S.A.S. au capital de 147 800 € - 350 476 487 R.C.S. Toulouse - Siret 350 476 487 00037 - APE 5829C - N° TVA FR 10 350 476 487
www.fivesgroup.com / www.fives-prosim.com

TABLE DES MATIÈRES

1. INTRODUCTION 3

2. MODELISATION DU PROCEDE 3

2.1. Présentation du procédé 3

2.2. Schéma du procédé 4

2.3. Constituants 5

2.4. Modèle thermodynamique 6

2.5. Conditions opératoires 7

2.6. Détermination des consommations d'utilités 11

2.7. Détermination des débits d'appoint 17

3. RESULTATS DE LA SIMULATION 20

3.1. Commentaires sur les résultats 20

3.2. Bilans matière et énergie 21

3.3. Profils des colonnes 22

4. BIBLIOGRAPHIE 25

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

1. INTRODUCTION

Cet exemple présente un procédé de capture du CO_2 par absorption dans un solvant aminé. L'unité est placée en sortie d'un procédé de combustion de carburant fossile et permet de diminuer la quantité de CO_2 relâchée dans l'atmosphère. Dans un contexte de durcissement des normes environnementales et suite aux accords de la COP 21 visant à limiter le réchauffement climatique, ce procédé est une solution envisageable pour réduire les rejets de CO_2 (gaz à effet de serre) en sortie des unités de combustion.

Une des difficultés de la simulation de ce procédé est la gestion des recyclages et des appoints en amine et en eau. Le module « Bilan généralisé » disponible dans ProSimPlus permet de déterminer facilement ces appoints.

2. MODELISATION DU PROCEDE

2.1. Présentation du procédé

Absorption du CO_2 :

Le courant à traiter est un gaz de combustion à 100 °C et pression atmosphérique contenant de l'azote, du dioxyde de carbone et de l'eau. Pour obtenir les conditions optimales d'absorption du CO_2, le gaz est refroidi à environ 40 °C à travers un Réfrigérant par Contact Direct (RCD) avec de l'eau. Puis il est mis en contact avec l'amine dans une colonne d'absorption (absorbeur) afin d'extraire le CO_2.

Régénération et recyclage de l'amine :

L'amine enrichie en CO_2 en sortie d'absorbeur est régénérée (séparée du CO_2) dans une colonne à distiller (désorbeur) puis refroidie afin d'être recyclée vers l'absorbeur. Pour compenser les pertes d'amine dans les sorties vapeurs de l'absorbeur et du désorbeur, un appoint d'amine doit être effectué au courant de recyclage.

De manière analogue, un appoint d'eau est nécessaire pour satisfaire les bilans matières.

Récupération du CO_2

Le courant de sortie vapeur du désorbeur contient notamment du CO_2 et de l'eau. Pour séparer ces deux composés, le courant est refroidi puis envoyé dans un ballon de séparation. La sortie vapeur du ballon est composée majoritairement de CO_2 qui sera stocké, la sortie liquide est composée d'eau qui pourra être utilisée en tant qu'appoint.

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

2.2. Schéma du procédé

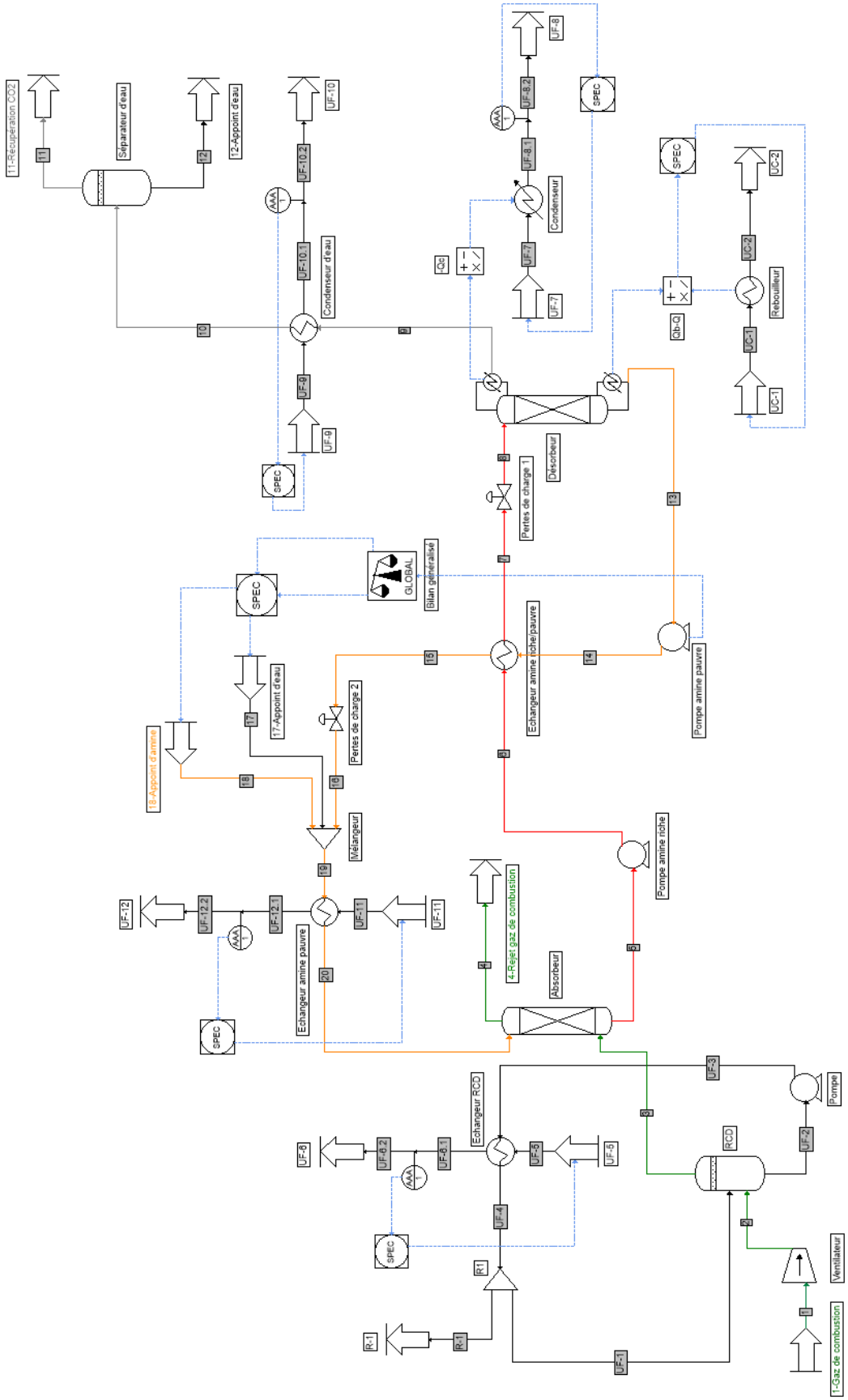


Schéma de l'unité de capture du CO_2

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

Pour améliorer la lisibilité du schéma du procédé, le gaz de combustion est en vert, l'amine riche en CO_2 en rouge, l'amine pauvre en CO_2 en orange, le CO_2 récupéré en gris et l'eau en noir.

2.3. Constituants

Les constituants pris en considération dans cet exemple sont listés dans le tableau ci-dessous.

Nom	Formule chimique	Numéro CAS
Dioxyde de carbone	CO_2	124-38-9
Monoethanolamine	C_2H_7NO	141-43-5
Eau	H_2O	7732-18-5
Diazote	N_2	7727-37-9

Dans la suite du document, la Monoethanolamine sera notée MEA.

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

2.4. Modèle thermodynamique

Le système considéré contient une alcanolamine, du CO_2 (gaz acide) et de l'eau. La pression de travail ne dépasse jamais 100 bars. En conséquence le modèle « Amines et gaz acides » a été choisi [DES81], [WEI93].

Un deuxième calculator nommé « Eau pure » est utilisé pour modéliser les utilités chaudes et froides (UC et UF). Il contient uniquement le constituant « WATER » et est donc défini avec un profil thermodynamique « Eau pure » (basé sur les tables de vapeur NBS / NRC).

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

2.5. Conditions opératoires

Une partie des données nécessaires à l'élaboration de cet exemple provient de [KAL10]. Les spécifications pour calculer les débits d'utilités sont indiquées dans la partie **2.6 Détermination des consommations d'utilités**. L'ensemble des conditions opératoires nécessaires à la définition du procédé est résumé dans cette partie, les données en vert étant des valeurs d'initialisation (modifiées par la simulation) :

- ✓ Gaz de combustion

	Gaz de combustion
Fraction massique CO_2	0,059
Fraction massique H_2O	0,043
Fraction massique N_2	0,898
Débit massique total (t/h)	3 073
Température (°C)	100
Pression (kPa)	101

- ✓ Appoint d'eau

	Appoint d'eau
Fraction massique H_2O	1
Débit massique total (t/h)	100
Température (°C)	15
Pression (kPa)	301

- ✓ Appoint d'amine

	Appoint d'amine
Fraction massique MEA	1
Débit massique total (t/h)	1
Température (°C)	15
Pression (kPa)	301

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

✓ Utilités froides (UF) et utilités chaudes (UC)

	Echangeur RCD ***UF-5***	***Condenseur désorbeur*** ***UF-7***	***Condenseur d'eau*** ***UF-9***	***Echangeur amine pauvre*** ***UF-11***	***Rebouilleur désorbeur*** ***UC-1***
Fraction massique H_2O	1	1	1	1	1
Débit massique total (t/h)	10 000	1 000	1 500	3 000	1 000
Pression (kPa)	101	101	101	101	500
Température (°C)	15	15	15	15	160

✓ Colonnes

Paramètres de fonctionnement	***Absorbeur***	***Désorbeur***
Type de colonne	Absorbeur	Colonne à distiller diphasique avec condenseur partiel
Nombre d'étages théoriques	5	12
Étage d'alimentation	-	2
Débit de distillat vapeur (t/h)	-	189,2
Taux molaire de reflux	-	0,4
Quantité de chaleur à fournir au rebouilleur (kcal/h)	-	Calculée
Pression en tête de colonne (kPa)	106	200
Pression en pied de colonne (kPa)	121	200
Efficacité des plateaux	0,48	0,5*

* : sauf pour le condenseur qui a une efficacité de 1

Spécifications complémentaires pour le désorbeur :

Spécification		***Type de produit***	***Constituant***	***Valeur***	***Type***	***Action***
1:	Débit partiel	Distillat vapeur	CO_2	154,47 t/h	Massique	Débit de distillat vapeur

Pour assurer la convergence du désorbeur, le facteur de relaxation maximum (situé au niveau des paramètres numériques dans l'onglet « Spécifications complémentaires ») a été fixé à 0,5, les autres paramètres numériques sont ceux par défaut.

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

✓ Séparateurs

Paramètres de fonctionnement	***Réfrigérant à Contact Direct RCD***	***Séparateur d'eau***
Type de séparateur	Séparateur diphasique liquide-vapeur	Séparateur diphasique liquide-vapeur
Pression (kPa)	121	La plus faible des alimentations
Pertes de charge (kPa)	0	0
Quantité de chaleur échangée (kcal/h)	Adiabatique	Adiabatique

✓ Échangeurs de chaleur généralisés

Nom	***Type***	***Type de spécification***	***Valeur spécification***	***Pertes de charge (kPa)***	
				1er courant	***2nd courant***
Echangeur RCD	Contre-courant ou multi-passes	Température de sortie courant chaud	30°C	179	0
Echangeur amine riche / pauvre	Contre-courant ou multi-passes	Ecart de température interne minimum	10°C	300	100
Echangeur amine pauvre	Contre-courant ou multi-passes	Température de sortie courant chaud	40°C	49	0
Condenseur d'eau	Contre-courant ou multi-passes	Température de sortie courant chaud	40°C	0	0

✓ Autres échangeurs

Nom	***Type***	***Température de sortie (°C)***	***Perte de charge (kPa)***
Rebouilleur	Consignateur de température	Température de bulle	0
Condenseur	Echangeur simple	25	0

✓ *Compresseurs*

Paramètres de fonctionnement	***Ventilateur***
Pression de refoulement (kPa)	121
Efficacité isentropique	0,8
Efficacité mécanique	1
Efficacité électrique	1

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

✓ *Pompes*

Paramètres de fonctionnement	***Pompe***	***Pompe amine riche***	***Pompe amine pauvre***
Pression de refoulement (kPa)	301	750	700
Efficacité volumétrique	0,75	0,75	0,75
Efficacité mécanique	1	1	1
Efficacité électrique	1	1	1

✓ *Mélangeurs*

Paramètre de fonctionnement	***Mélangeur***
Pression de sortie (kPa)	150

✓ *Pertes de charge (vannes de détente)*

Paramètre de fonctionnement	***Pertes de charge 1***	***Pertes de charge 2***
Pertes de charge (kPa)	200	299

✓ *Diviseurs de courants*

Paramètres de fonctionnement	***Diviseur de courants R1***
Débit massique courant UF-1 (t/h)	6500
Pression de sortie (kPa)	Egale à la pression d'entrée

✓ *Module Bilan généralisé : Détermination des appoints*

Pour déterminer les débits d'appoint, un module « Bilan » a été utilisé. Ces débits sont déterminés à partir d'un simple bilan matière des courants d'entrée et de sortie principaux :

Nom	***Remarque***	***Type***	***De***	***Vers***
18	Appoint d'amine	Courant d'entrée	16-Appoint d'amine	Mélangeur
17	Appoint d'eau	Courant d'entrée	17-Appoint d'eau	Mélangeur
3	Gaz de combustion	Courant d'entrée	RCD	Absorbeur
4	Rejet gaz de combustion	Courant de sortie	Absorbeur	4-Rejet gaz de combustion
9	Sortie tête désorbeur	Courant de sortie	Désorbeur	Condenseur d'eau

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

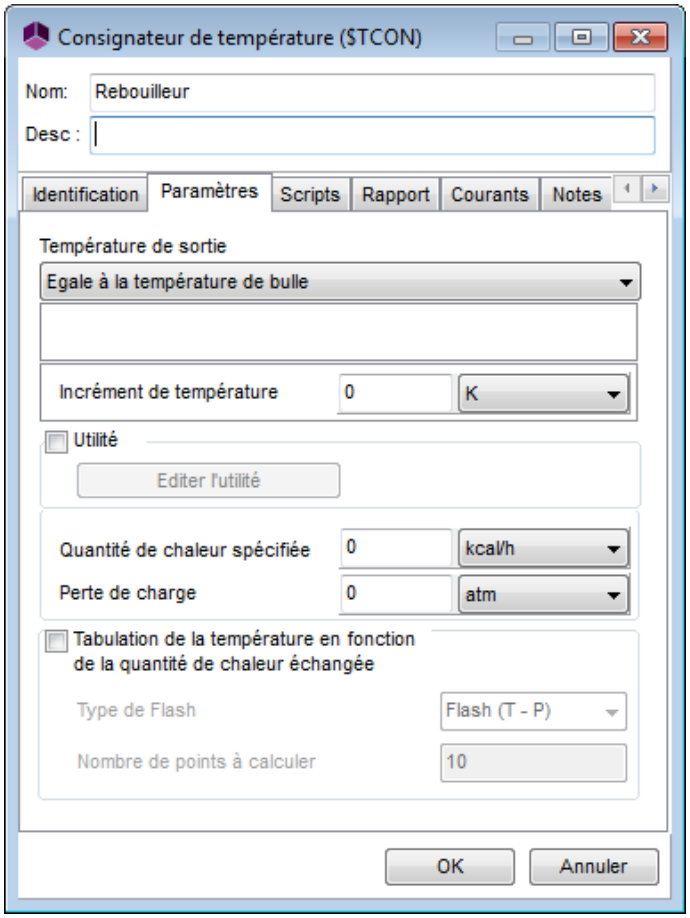
2.6. Détermination des consommations d'utilités

Les caractéristiques physiques d'alimentation des utilités employées sont regroupées dans le tableau de la partie **2.5 Conditions opératoires.**

Utilité chaude

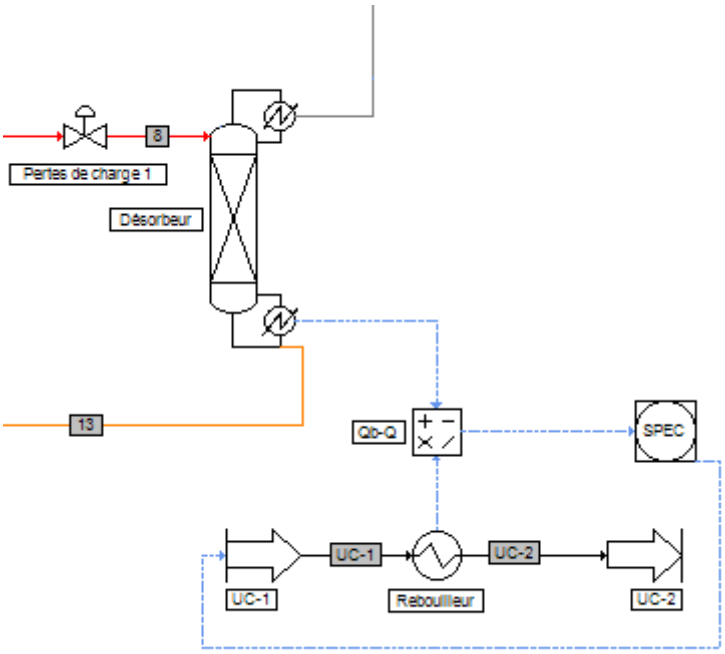
Le rebouilleur du désorbeur a été simulé à l'aide d'un consignateur de température. De la vapeur d'eau surchauffée à 160°C et 500 kPa est utilisée. En sortie de rebouilleur, le courant est spécifié à sa température de bulle.

La figure suivante illustre la configuration saisie au niveau du rebouilleur :

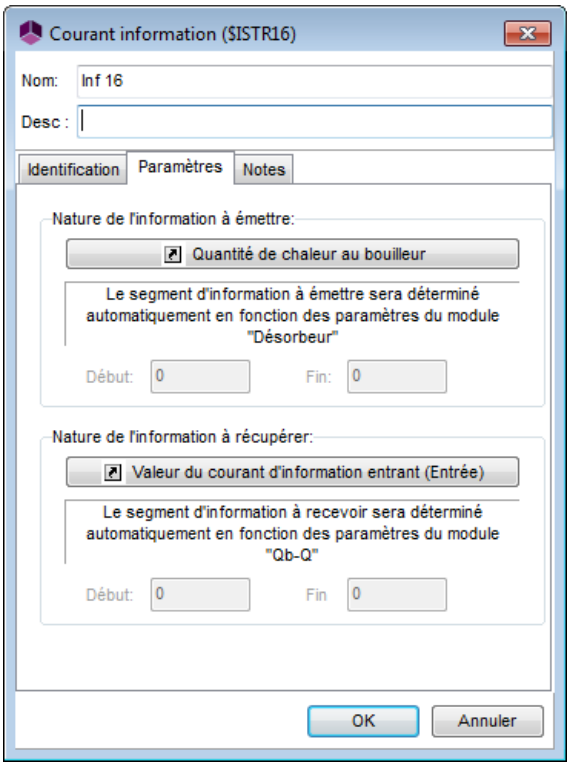


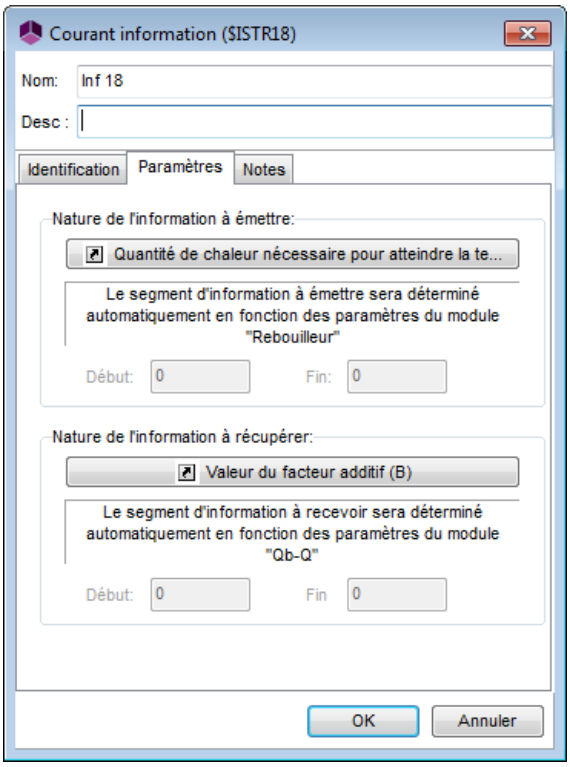
Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

Pour déterminer le débit d'utilité chaude nécessaire, un module de type « Gestion des contraintes et recyclages » (« SPEC ») est utilisé, comme illustré ci-après :



La démarche est la suivante : la valeur de la quantité de chaleur au rebouilleur du module désorbeur ainsi que la valeur de la quantité de chaleur du module consignateur de température associé sont transmises à un module de type « Manipulateur de courant d'information » à l'aide de courants d'information, dont la configuration est présentée ci-après :

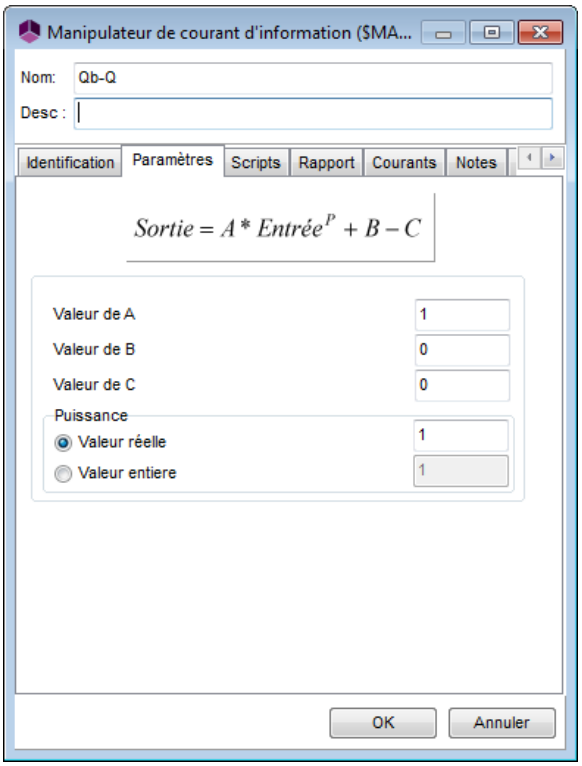




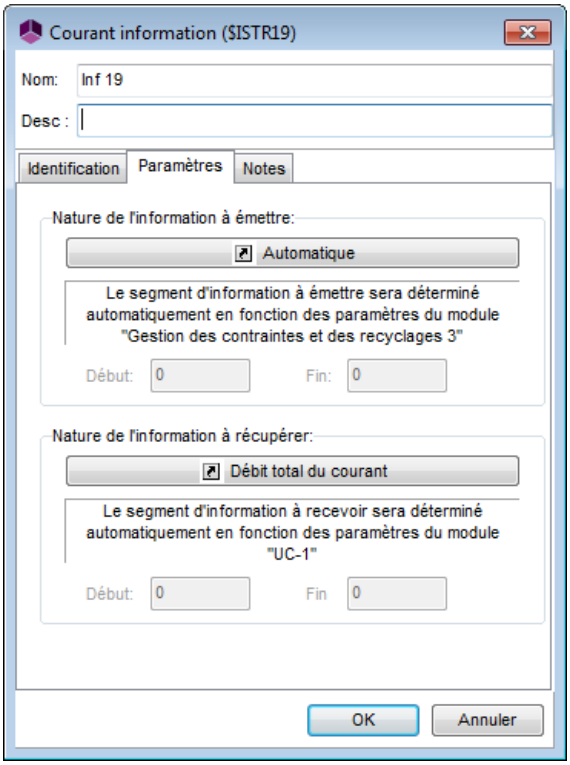
Ce module « manipulateur de courant d'information » calcule l'écart entre la quantité de chaleur au rebouilleur de la colonne (Entrée) et la quantité de chaleur calculée au niveau du module consignateur de température associé (B).

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

La quantité de chaleur au rebouilleur est positive et la quantité de chaleur du consignateur de température associé est négative. Ainsi il faut configurer le manipulateur de courant d'information comme suit :



L'écart entre la quantité de chaleur au rebouilleur du désorbeur et celle calculée au niveau du module consignateur de température associé est envoyé au niveau d'un module « SPEC ». Ce module « SPEC » est relié au module d'alimentation de l'utilité chaude par un courant d'information configuré ainsi :

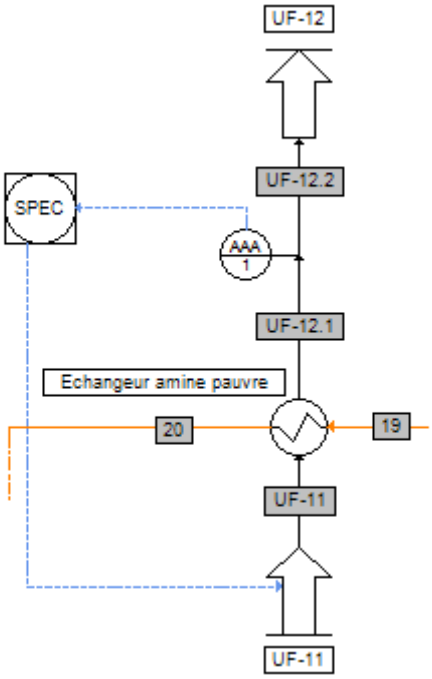


Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

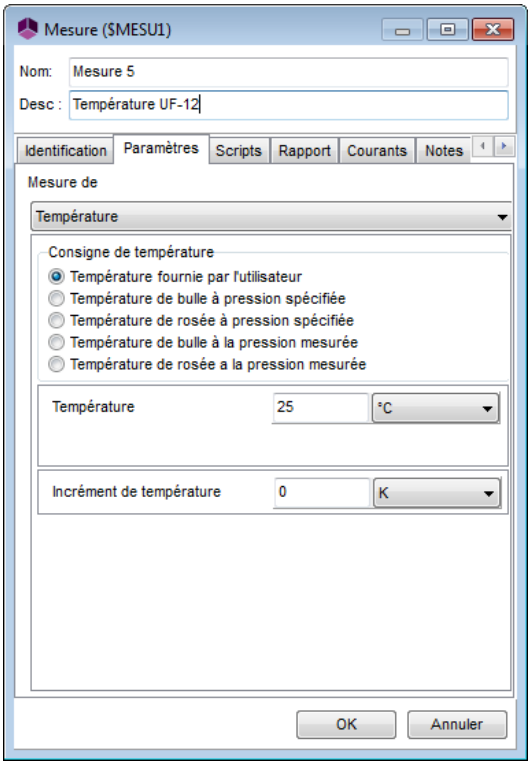
Ainsi le module SPEC va ajuster le débit d'utilité pour que les quantités de chaleur soient identiques. Le module consignateur de température représentera alors le rebouilleur et le débit d'utilité calculé correspondra au débit d'utilité circulant dans le rebouilleur.

Utilités froides :

L'utilité froide employée dans le procédé est de l'eau à 15°C et 101 kPa. La température de sortie de l'échangeur est spécifiée à 25°C. Pour ce faire, un module « SPEC » est également utilisé, comme illustré ci-dessous dans le cas de l'échangeur amine pauvre :

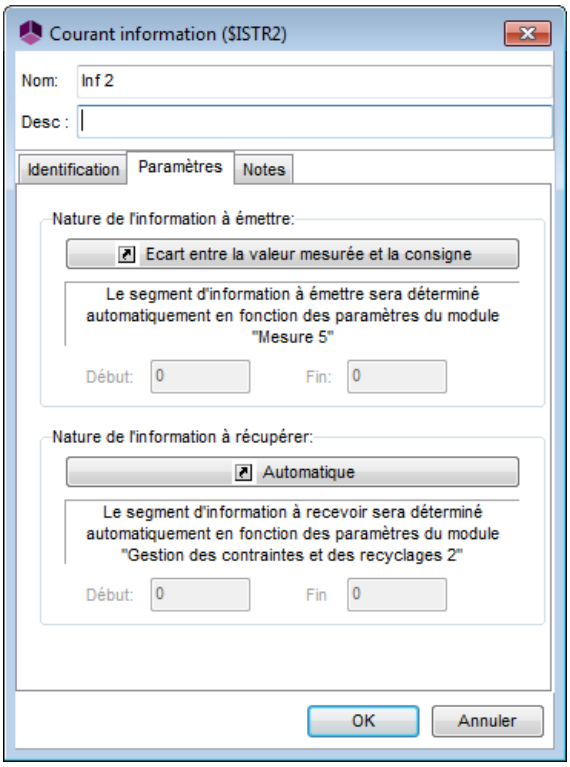


Le module « Mesure » contient la valeur de consigne de la température de l'utilité en sortie et est configuré ainsi :

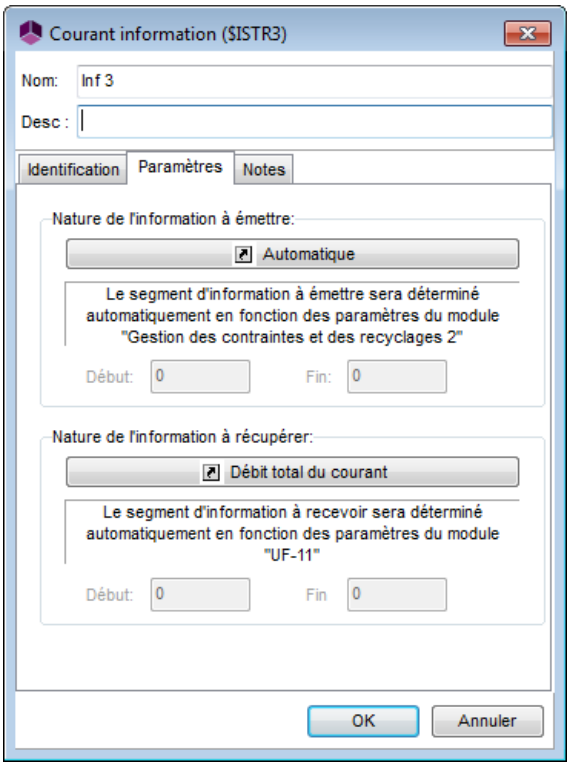


Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

Le courant d'information sortant du module « Mesure » et entrant dans le module « SPEC » véhicule l'écart entre la température du courant de sortie d'utilité froide et la valeur de consigne de température. La configuration de ce courant d'information est alors la suivante :

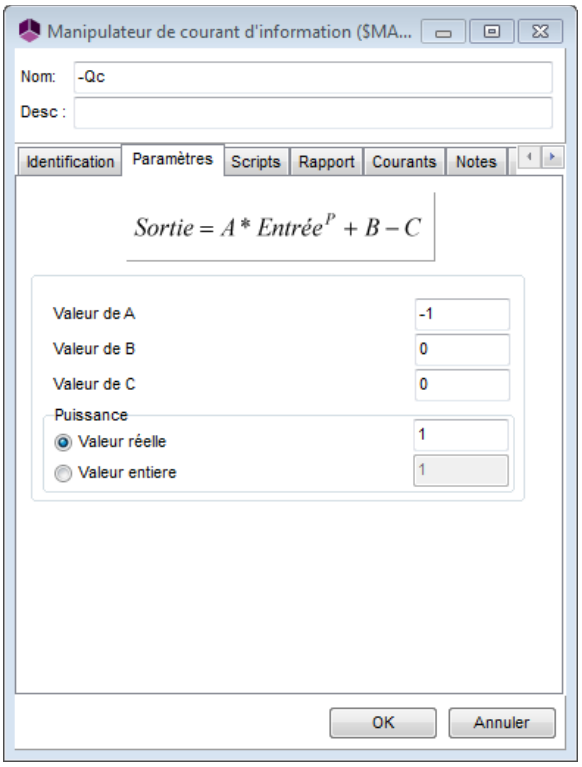


Afin d'ajuster le débit d'utilité froide pour atteindre cette température de consigne en sortie d'échangeur, le module « SPEC » est lui-même relié au module d'alimentation de l'utilité froide à l'aide d'un courant d'information ayant la configuration suivante :



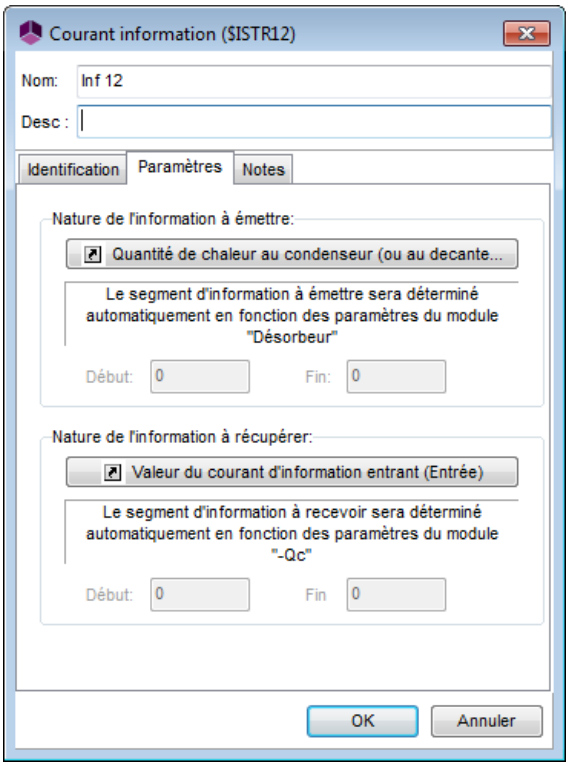
Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

Remarque : le condenseur a été simulé à l'aide d'un échangeur simple. Pour que cet échangeur simple soit représentatif du condenseur, il faut récupérer la valeur de la quantité de chaleur au condenseur calculée dans le module « Désorbeur » et envoyer cette information au niveau de l'échangeur simple. L'échangeur simple attend une quantité de chaleur négative dans le cas d'un réchauffement alors que la quantité de chaleur recueillie au condenseur est positive. Pour pallier cela, un manipulateur de courant d'information est utilisé, configuré de la façon suivante :

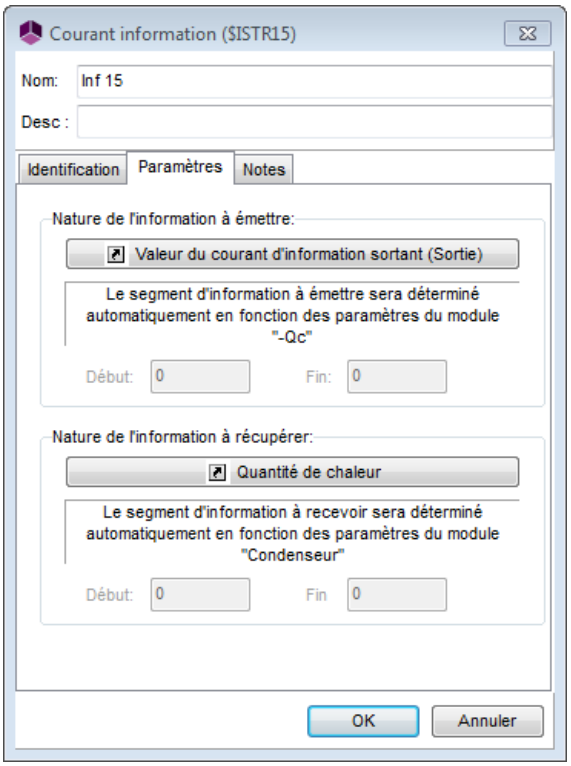


Les courants d'information entrant et sortant du manipulateur d'information sont configurés ainsi :

Courant entrant :



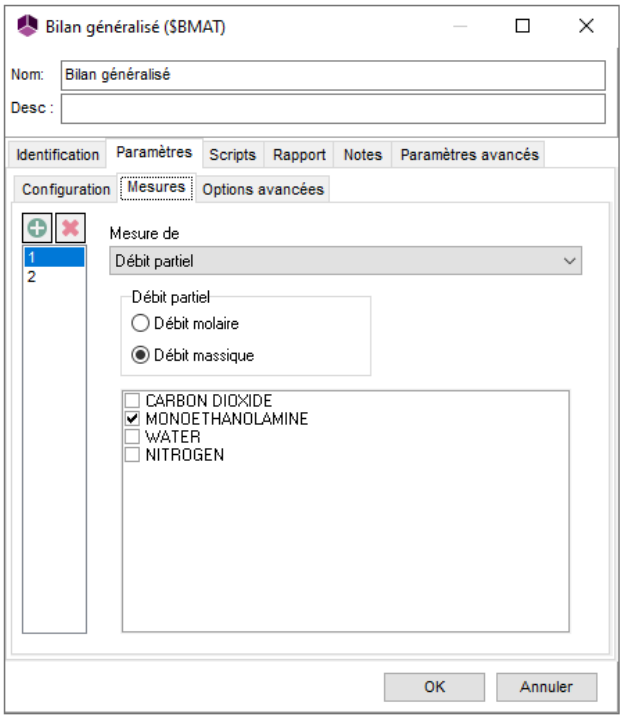
Courant sortant :

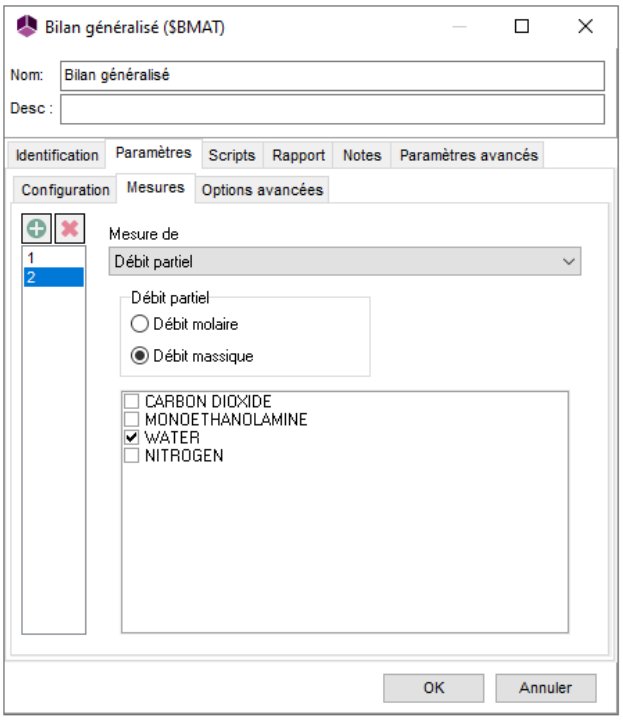


Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

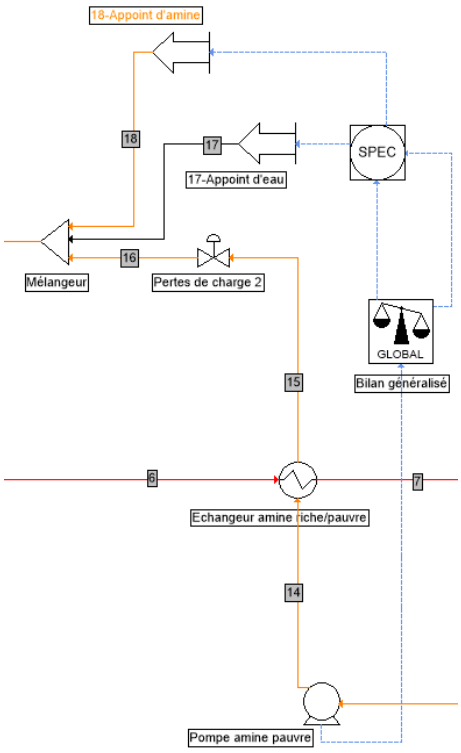
2.7. Détermination des débits d'appoint

Le module « Bilan généralisé » permet de faire des mesures de plusieurs paramètres et de calculer des bilans « Entrées – Sorties ». Dans ce cas, les débits partiels d'amine et d'eau sont pris en compte comme suit :





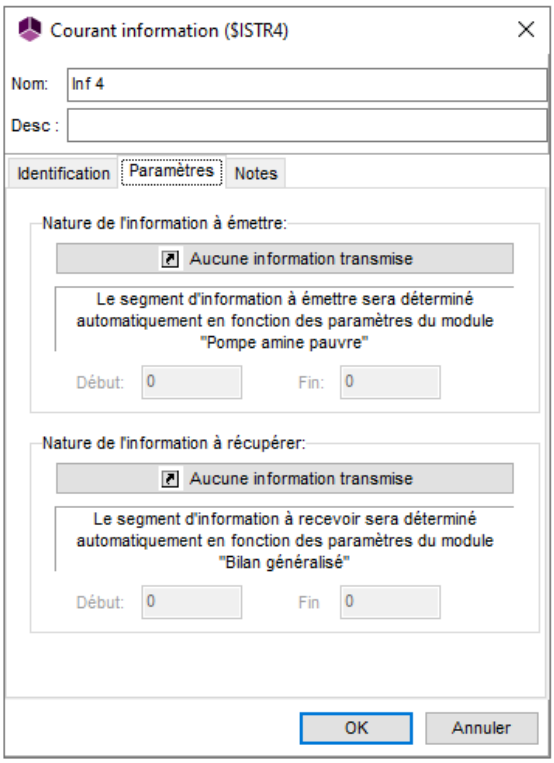
Pour déterminer les débits d'appoint, l'utilisation d'un module « SPEC » est nécessaire comme illustré ci-après :



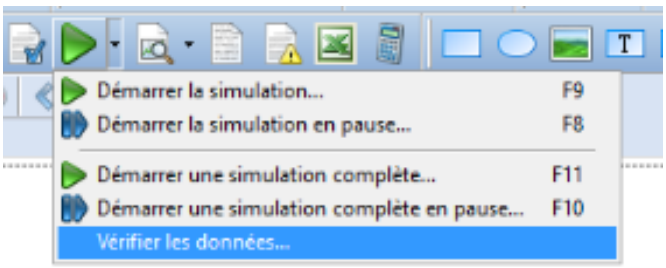
Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

La démarche est la suivante : un courant d'information permet de relier le dernier module calculé de la zone d'intérêt avec le module bilan. Cette action est importante car elle permet d'intégrer le module bilan dans la liste de calculs et pourra donc fournir des valeurs en tant que critères et/ou contraintes.

Ce courant d'information servant seulement à l'intégration du module bilan dans les calculs, il n'est pas nécessaire de transmettre des informations particulières vers le module bilan. La figure suivante illustre la configuration de ce courant d'information :



<u>Remarque</u> : La séquence de calcul est disponible dans le rapport de la simulation. Pour connaître la séquence utilisée par défaut, il suffit de démarrer la simulation en mode « vérification des données » comme indiqué dans la figure ci-dessous :



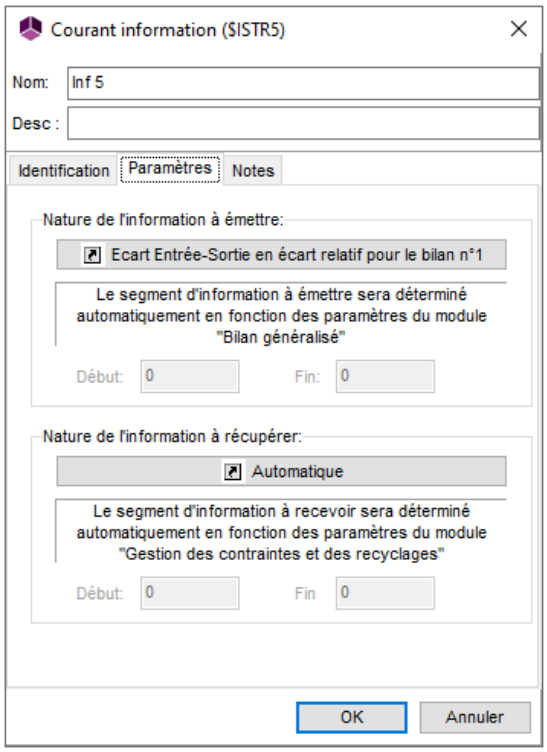
Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

L'image suivante montre la séquence de calcul ainsi obtenue pour cet exemple (cf. § « Séquence de calcul 1 » du rapport de simulation) :

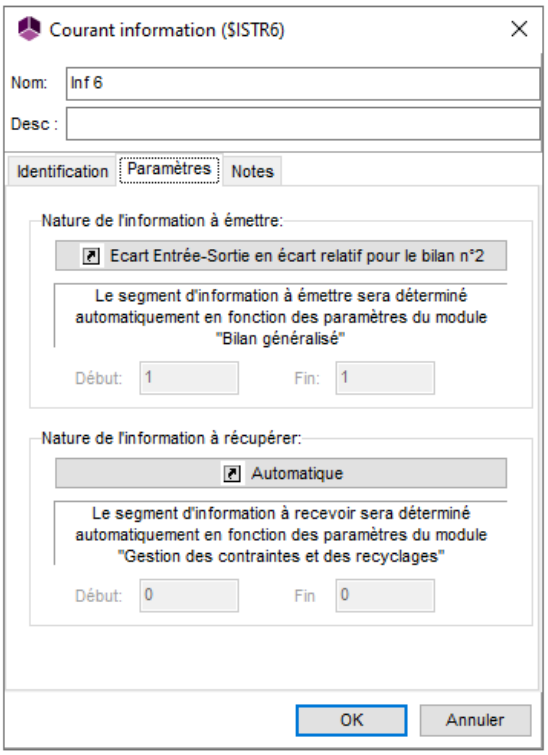
Il convient ensuite de relier le module « Bilan » et le module « SPEC » avec des courants d'information. Le module « Bilan » va transmettre les écarts des bilans entrée-sortie pour les débits partiels d'amine et d'eau au module « SPEC », qui, connecté par courants d'information aux alimentations des courants d'appoint (variables d'action), ajustera automatiquement les débits de ces alimentations pour satisfaire les bilans.

Configuration des courants d'information (« Bilan » vers « SPEC ») :

Bilan Amine :



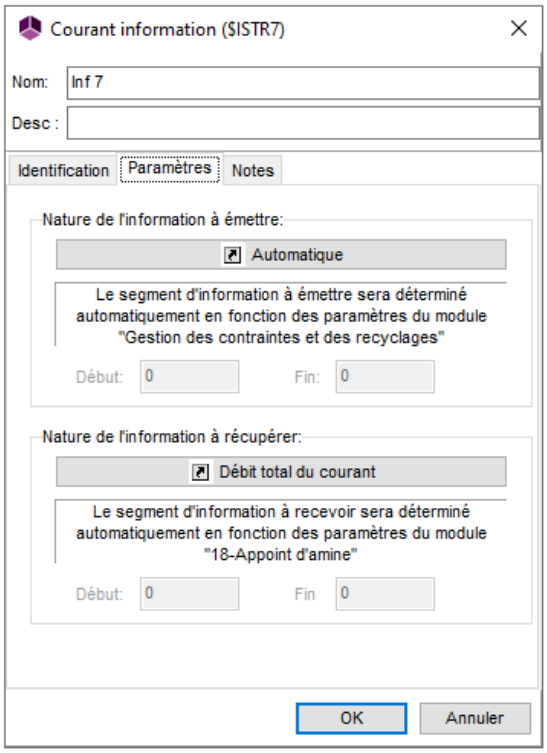
Bilan Eau :



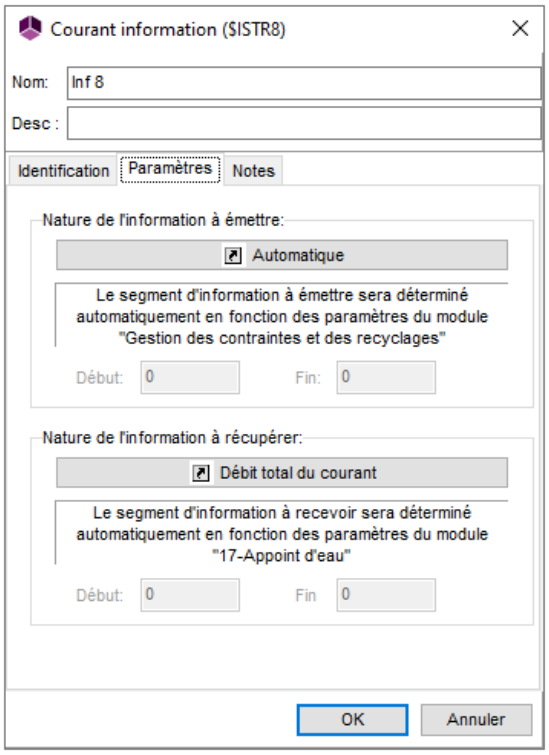
Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

Configuration des courants d'information du module « SPEC » vers les modules d'alimentation des appoints :

Vers l'appoint d'amine :



Vers l'appoint d'eau :



3. RESULTATS DE LA SIMULATION

3.1. Commentaires sur les résultats

La séquence de calcul (l'ordre de calcul des modules) est générée automatiquement. Les courants coupés « UF-1 », « 14 » et « 20 » sont initialisés avec les caractéristiques suivantes :

	UF-1	***14***	***20***
Fraction massique CO_2	0	0,055	0,055
Fraction massique MEA	0	0,3	0,29
Fraction massique H_2O	1	0,645	0,655
Fraction massique N_2	0	0	0
Débit massique total (t/h)	6 500	3 500	3 600
Température (°C)	25	115	40
Pression (kPa)	101,325	700	101

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

3.2. Bilans matière et énergie

Ce document ne présente que les bilans matière et énergie sur les courants entrées/sorties du procédé. ProSimPlus fournit cependant des résultats complets sur tous les courants et sur chaque opération unitaire.

Courants entrées/sorties (hors utilités) :

Courants		1	4	11	12	17	18	R-1
De		1-Gaz de combustion	Absorbeur	Séparateur d'eau	Séparateur d'eau	17-Appoint d'eau	18-Appoint d'amine	R1
Vers		Ventilateur	4-Rejet gaz de combustion	11-Récupération CO2	12-Appoint d'eau	Mélangeur	Mélangeur	R-1
Débits partiels (massiques)		t/h	t/h	t/h	t/h	t/h	t/h	t/h
CARBON DIOXIDE		181.3	26.8	154.4	0.1	0	0	0
MONOETHANOLAMINE		0	0.8	0	0	0	1	0
WATER		132.1	208.5	2.5	29.9	118.0	0	9
NITROGEN		2759.6	2759.5	0	0	0	0	0
Débit total (massique)	t/h	3073.0	2995.7	156.9	29.9	118.0	0.8	9.3
Fractions massiques							0	0
CARBON DIOXIDE		0.059	0.009	0.984	0.002	0	0	0
MONOETHANOLAMINE		0	3E-04	0	6E-05	0	1	0
WATER		0.043	0.070	0.016	0.998	1	0	1
NITROGEN		0.898	0.921	2E-04	8E-09	0	0	0
Etat physique		Vapeur	Vapeur	Vapeur	Liquide	Liquide	Liquide	Liquide
Température	°C	100	46	40	40	15	15	30
Pression	kPa	101	106	200	200	301	301	122
Flux enthalpique	MW	-874.9	-825.6	-392.3	-132.0	-524.8	-1.0	-41.3
Fraction vaporisée molaire		1	1	1	0	0	0	0

Courants entrées/sorties (utilités) :

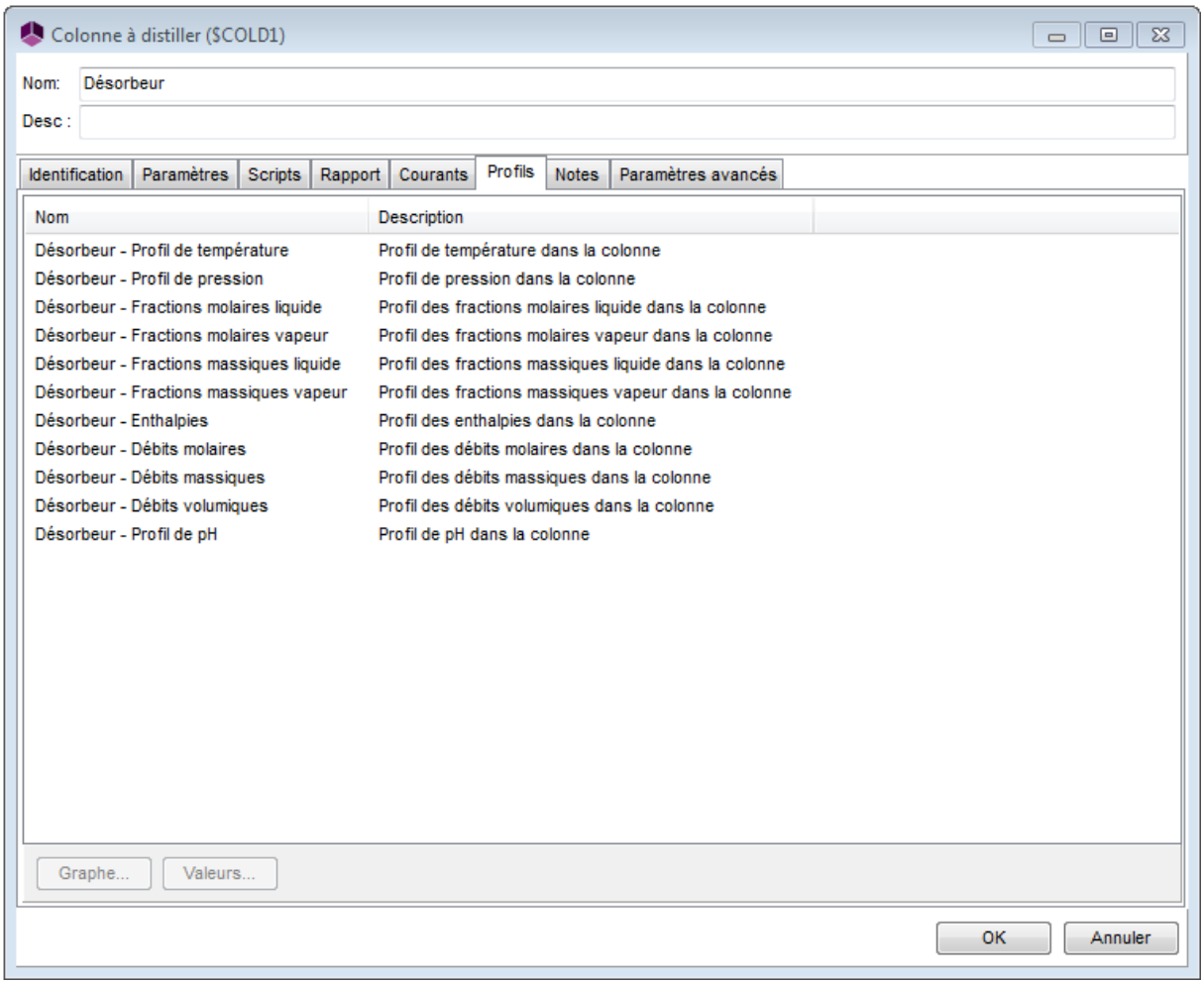
Courants		UF-5	UF-6.2	UF-7	UF-8.2	UF-9	UF-10.1
De		UF-5	Mesure 2	UF-7	Mesure 7	UF-9	Condenseur d'eau
Vers		Echangeur RCD	UF-6	Condenseur	UF-8	Condenseur d'eau	Mesure 8
Débits partiels (massiques)		t/h	t/h	t/h	t/h	t/h	t/h
WATER		7 207.8	7 207.8	2 233.1	2 233.1	2 011.2	2 011.2
Débit total (massique)	t/h	7207.8	7207.8	2233.1	2233.1	2011.2	2011.2
Fractions massiques							
WATER		1	1	1	1	1	1
Etat physique		Liquide	Liquide	Liquide	Liquide	Liquide	Liquide
Température	°C	15.0	25.0	15.0	25.0	15.0	25.0
Pression	kPa	101	101	101	101	101	101
Flux enthalpique	MW	-4 974	-4 891	-1 541	-1 515	-1 388	-1 365
Fraction vaporisée molaire		0	0	0	0	0	0

Courants		UF-11	UF-12.2	UC-1	UC-2
De		UF-11	Mesure 5	UC-1	Rebouilleur
Vers		Echangeur amine pauvre	UF-12	Rebouilleur	UC-2
Débits partiels (massiques)		t/h	t/h	t/h	t/h
WATER		4 508.6	4 508.6	288.8	288.8
Débit total (massique)	t/h	4508.6	4508.6	288.8	288.8
Fractions massiques					
WATER		1	1	1	1
Etat physique		Liquide	Liquide	Vapeur	Liquide
Température	°C	15.0	25.0	160.0	151.9
Pression	kPa	101	101	500	500
Flux enthalpique	MW	-3 111	-3 059	18	-153
Fraction vaporisée molaire		0	0	1	0

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

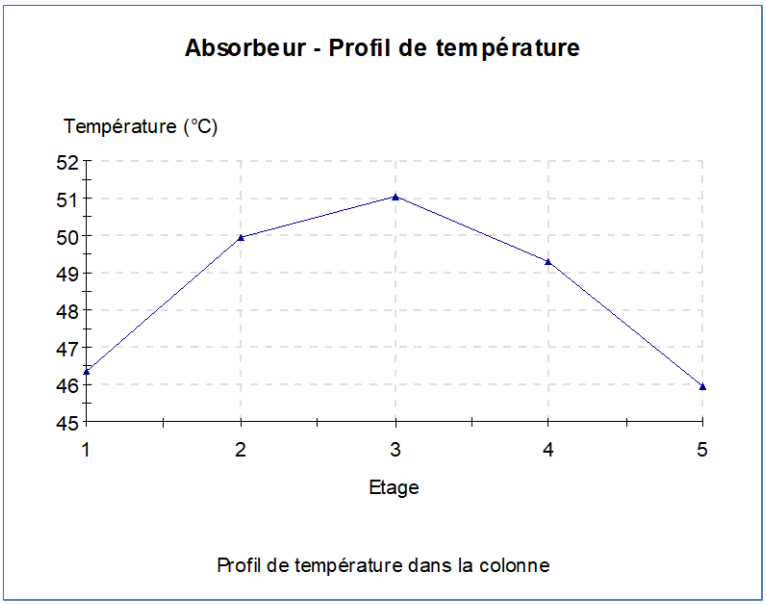
3.3. Profils des colonnes

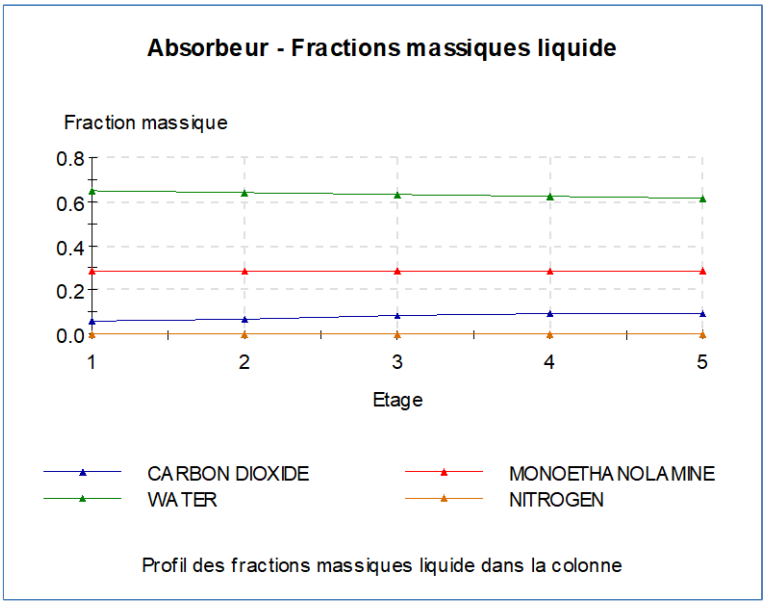
Les profils de colonnes sont obtenus après la simulation dans la fenêtre de configuration de la colonne, sous l'onglet « Profils ». Un double-clic sur le profil souhaité génère le graphique. Il est à noter que dans le logiciel ProSimPlus, les étages des colonnes sont numérotés de haut en bas (le premier plateau correspond au condenseur, le dernier au rebouilleur dans le cas des colonnes à distiller).

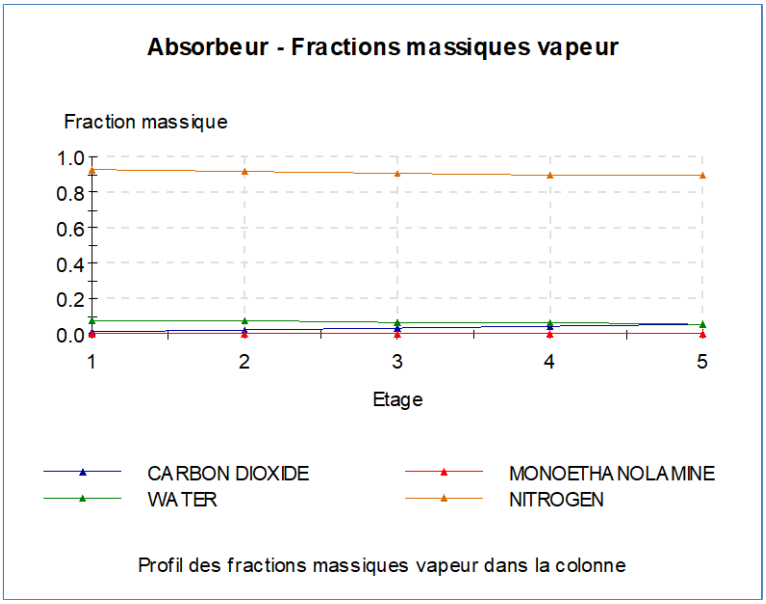


Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

Absorbeur

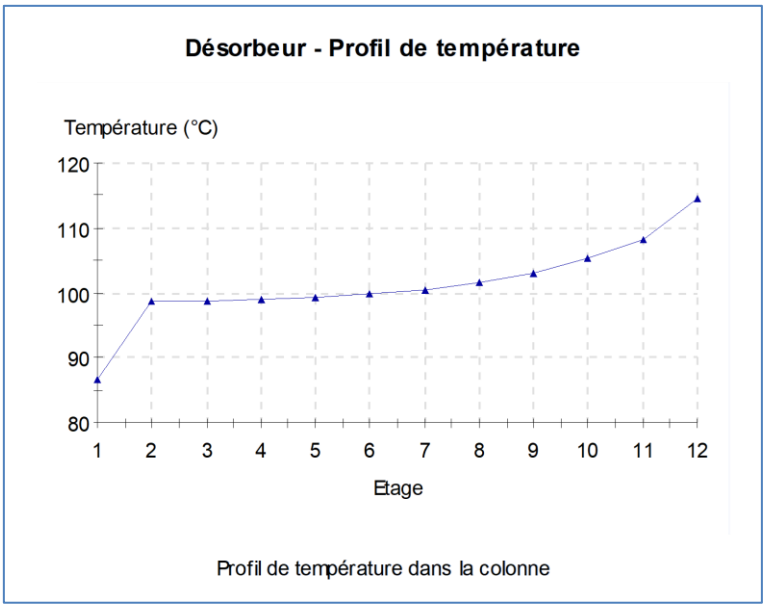


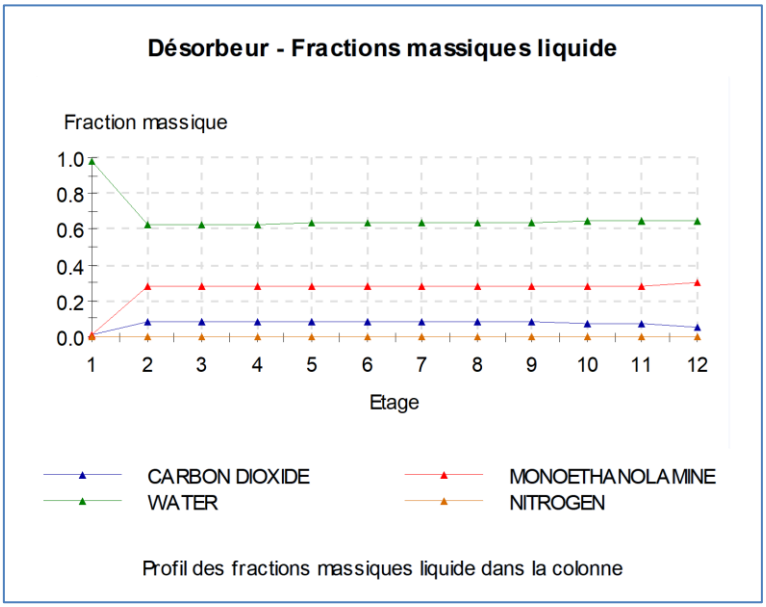


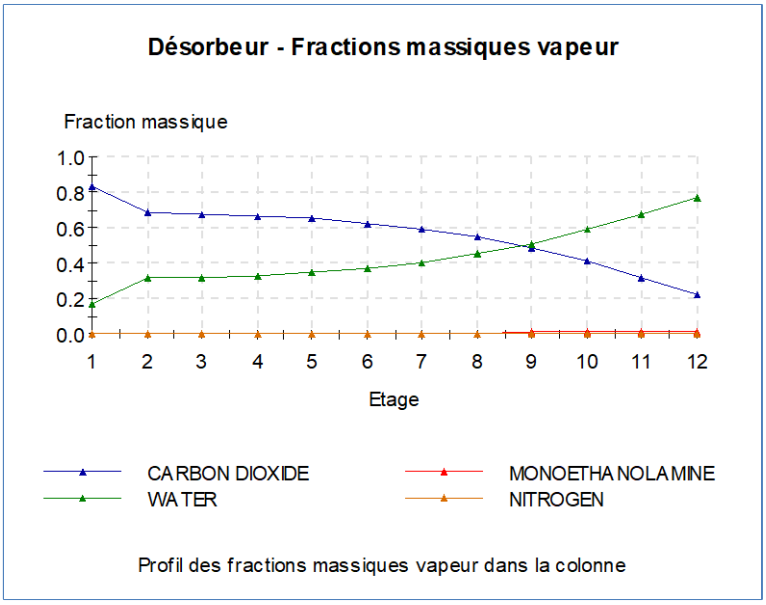


Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

Désorbeur







Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés

4. BIBLIOGRAPHIE

[DES81] R.D. DESHMUKH, A.E. MATHER

"A Mathematical Model for Equilibrium Solubility of Hydrogen Sulfide and Carbon Dioxide in Aqueous Alkanolamine Solutions"

Chem. Eng. Sci, 36, pp 355-362 (1981)

[KAL10] O. B. KALLEVIK

"Cost estimation of CO_2 removal in HYSYS"

Master's Thesis (2010)

[WEI93] WEILAND Ralph H., Tanmoy CHAKRAVARTY and Alan E. MATHER

"Solubility of Carbon Dioxide and Hydrogen Sulfide in Aqueous Alkanolamines"

Ind. Eng. Chem. Res., 32, pp 1419-1430 (1993)

Copyright © 2024 Fives ProSim, Labège, France – Tous droits réservés