PROCESS SIMULATION OF CARBON DIOXIDE CAPTURE USING IONIC LIQUID 1-ETHYL-3-METHYLIMIDAZOLIUM ACETATE

Koon Khonkaen

A Thesis Submitted in Partial Fulfilment of the Requirements
for the Degree of Master of Science
The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University
in Academic Partnership with
The University of Michigan, The University of Oklahoma,
Case Western Reserve University, and Institut Français du Pétrole
2014

Thesis Title:	Process Simulation of Carbon Dioxide Capture Using Ionic Liquid 1-Ethyl-3-methylimidazolium Acetate
By:	Mr. Koon Khonkaen
Program:	Petroleum Technology
Thesis Advisors:	Asst. Prof. Kitipat Siemanond
	Prof. Amr Henni

Accepted by The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University, in partial fulfilment of the requirements for the Degree of Master of Science.

..... College Dean

(Asst. Prof. Pomthong Malakul)

Thesis Committee:

.....

(Prof. Amr Henni)

Kitipat Siemanond

.....

(Asst. Prof. Kitipat Siemanond)

.....

(Assoc. Prof. Chintana Saiwan)

Apinya Duangchan

.....

(Assoc. Prof. Apinya Duangchan)

ABSTRACT

5573012063: Petroleum Technology Program
Koon Khonkaen: Process Simulation of Carbon Dioxide Capture Using Ionic Liquid 1-Ethyl-3-methylimidazolium Acetate
Thesis Advisors: Asst. Prof. Kitipat Siemanond, and Prof. Amr Henni 192 pp.
Keywords: Post combustion CO_2 capture/ MEA scrubbing process/ CO_2 solubility in ionic liquids

Among the emerging technologies created to replace the conventional monoethanolamine(MEA)-based process for post-combustion CO_2 capture, one ionic liquid, 1-Ethyl-3-methylimidazolium acetate ([emim][Ac]) is considered a potential solvent for green CO_2 capture technology, with the added benefit of cost reduction. In this study, both CO_2 capture processes (MEA and [emim][Ac]-based processes) were simulated to capture 90 % of CO_2 from post-combustion flue gas based on a 180 MWe coal burning power plant, using Aspen Plus (V. 7.1). Since the databases of Aspen Plus do not provide any pure component data for [emim][Ac], the direct input information and data regression modes in Aspen Plus were employed. The "modified Lyndersen-Joback-Reid" group contribution method was used to estimate the critical properties of [emim][Ac]. The temperature-dependent correlation parameters, the binary-interaction parameters for Non-Random Two Liquid model, the parameters of Henry's constant model, and the parameters of equilibrium calculation model were regressed based on the reported properties of [emim][Ac] available in related literature. Energy consumption and evaluated investment cost from the simulation of both processes were compared to determine the potential of [emim][Ac]. The results show both lower energy requirement and investment cost of the [emim][Ac]-based process compared to MEA by 13.5 % and 3.75 %, respectively.

บทคัดย่อ

ดูน ขอนแก่น: การจำลองกระบวนการของการจับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์โดยใช้ของเหลวไอออนิก 1-เอทิล-3-เมทิลอิมิดาโซเลียม อะซิเตท (Process Simulation of Carbon Dioxide Capture Using Ionic Liquid 1-Ethyl-3-methylimidazolium Acetate) อ. ที่ปรึกษา : ผศ. ดร. กิติพัฒน์ สีมานนท์ ศ. ดร. อามาร์ เฮนนี 192 หน้า

ในบรรดาเทคโนโลยีสมัยใหม่ที่ถูกสร้างขึ้นเพื่อนำมาแทนที่กระบวนการการจับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์หลังการเผาไหม้โดยใช้ตัวทำละลายเอมีน หนึ่งในเทคโนโลยีเหล่านั้นคือการใช้ของเหลวไอออนิก 1-เอทิล-3-เมทิลอิมิดาโซเลียม อะซิเตท ซึ่งได้รับการพิจารณาว่าเป็นตัวทำละลายที่เป็นมิตรกับสิ่งแวดล้อม และมีศักยภาพในการลดค่าใช้จ่ายให้กับกระบวนการการจับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์หลังการเผาไหม้ได้ ในงานวิจัยนี้ กระบวนการการจับก๊าคาร์บอนไดออกไซด์ทั้งสองกระบวนการคือกระบวนการที่ใช้ตัวทำละลายเอมีนและกระบวนการที่ใช้ตัวทำละลายของเหลวไอออนิกได้ถูกจำลองขึ้นโดยใช้โปรแกรม แอสเพน พลัส เวอร์ชัน 7.1 เพื่อใช้จับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์หลังจากการเผาไหม้จากโรงไฟฟ้าถ่านหินขนาด 180 เมกกะวัตต์ เป็นปริมาณร้อยละ 90 ของปริมาณก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ทั้งหมดที่ถูกปล่อยออกมา เนื่องจากข้อมูลเกี่ยวกับของเหลวไอออนิกที่ใช้ในงานวิจัยนี้ไม่มีปรากฏอยู่ในฐานข้อมูลของโปรแกรม แอสเพน พลัส ดังนั้นการใส่ข้อมูลเกี่ยวกับของเหลวไอออนิกโดยตรงและโหมดการวิเคราะห์การถดถอยข้อมูลในโปรแกรมแอสเพน พลัส จึงถูกนำมาใช้ วิธีการของ ลินเดอร์เซน-โจแบค-เรียด ถูกนำมาใช้ในการคาดคะเนคุณสมบัติวิกฤติของ 1-เอทิล-3-เมทิลอิมิดาโซเลียม อะซิเตท พารามิเตอร์ความสัมพันธ์ของสมบัติที่เปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิ, พารามิเตอร์อันตรกิริยาคู่ของโมเดล นอนแรนดอม ทู ลิควิด, พารามิเตอร์ของโมเดลค่าคงที่ของเฮนรี่และพารามิเตอร์สำหรับโมเดลการคำนวณสมดุลเคมี ถูกนำมาวิเคราะห์การถดถอยโดยอาศัยข้อมูลคุณสมบัติของ 1-เอทิล-3-เมทิลอิมิดาโซเลียม อะซิเตท ที่มีการรายงานไว้แล้วในงานวิจัยก่อนหน้านี้ ปริมาณการใช้พลังงานและค่าใช้จ่ายในการลงทุนของกระบวนการการจับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์หลังการเผาไหม้ของทั้งสองกระบวนการถูกนำมาเปรียบเทียบเพื่อพิจารณาศักยภาพของของเหลวไอออนิกชนิดนี้ในการนำมาใช้แทนที่ตัวทำละลายเอมีน ผลจากงานวิจัยพบว่า กระบวนการการจับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ที่ใช้ตัวทำละลายของเหลวไอออนิก 1-เอทิล-3-เมทิลอิมิดาโซเลียม อะซิเตท ใช้พลังงานน้อยกว่าและมีค่าใช้จ่ายในการลงทุนที่น้อยกว่าเมื่อเทียบกับกระบวนการการจับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ที่ใช้ตัวทำละลายเอมีนเป็นร้อยละ 13.5 และ 3.75 ตามลำดับ

ACKNOWLEDGEMENTS

This work is successfully completed due to the extended support by a number of people and organizations. I would like to express my sincere gratitude and appreciation to all of them.

First of all, I wish to express my sincere gratitude to Asst. Prof. Kitipat Siemanond, my advisor for this work, whose encouragement, guidance and support enabled me to develop an understanding of this thesis. I greatly appreciate his time and effort in pushing me and the thesis. Without his supervision, I may not have made this thesis complete.

I greatly appreciate Prof. Amr Henni, my co-advisor from University of Regina, Canada. His encouragement, great advice, and his willingness to devote his time so generously to give me valuable suggestions and to correct my work, have been very much appreciated. I am also extremely thankful to him for giving his time to answer my email, and for his insightful comments on my thesis results.

I would like to thank Assoc. Prof. Chintana Saiwan and Assoc. Prof. Apinya Duangchan for their kind suggestions and for being my thesis committees.

I am deeply grateful for the scholarship and funding of the thesis work provided by The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University, and by Center of Excellence on Petrochemical and Materials Technology.

I present my gratitude to all faculty members, research staff and other staff of The Petroleum and Petrochemical College, for the support and guidance given for better completion of the work.

Finally, I wish to thank my family and friends for their endless love and support. My deepest appreciation goes to my parents for their ability to bring balance to my life at this challenging time. Their encouragement and support from the very beginning make this thesis possible.

TABLE OF CONTENTS

CHAPTER PAGE

CHAPTER PAGE

LIST OF TABLES

TABLE **PAGE**

TABLE **PAGE**

LIST OF FIGURES

FIGURE **PAGE**

FIGURE **PAGE**