



Universidad
Zaragoza



Facultad de Ciencias
Universidad Zaragoza

Captura, transporte y almacenamiento del CO₂ antropogénico (CCS) para la reducción de gases de efecto invernadero: efecto de las impurezas SO₂ y H₂

Trabajo de Fin de Grado

Grado en Química

Autora: María González Castillo

Director: Javier Fernández López

Departamento de Química Física

Facultad de Ciencias

Curso 2018-2019

Índice

Resumen.....	i
Abstract	ii
1. Introducción	1
2. Objetivos y planteamiento del trabajo	3
3. Resultados: Cálculo de las propiedades de los sistemas	3
4. Discusión: Efecto de las impurezas en las etapas de transporte y almacenamiento.....	8
4.1. Etapa de transporte.....	8
4.1.1 Presión mínima operacional	8
4.1.2 Caída de presión con la distancia	9
4.1.3 Caída de densidad con la distancia	11
4.1.4 Diámetro interno de tubería	12
4.2 Etapa de almacenamiento	14
4.2.1 Capacidad de almacenamiento normalizada	15
4.2.2 Velocidad de ascenso de la pluma normalizada en acuíferos salinos	17
4.2.3 Flujo de permeación normalizado	20
5. Conclusiones	22
6. Bibliografía	23
Anexo	25

Resumen

La tecnología de Captura y Almacenamiento del CO₂ (CCS) es una de las principales alternativas para reducir las emisiones de este gas de efecto invernadero. Consiste en capturarlo principalmente de la combustión de combustibles fósiles y transportarlo hasta almacenes subterráneos profundos que pueden ser naturales.

El CO₂ antropogénico contiene impurezas que afectan a sus propiedades y eso hay que tenerlo en cuenta para el diseño y condiciones de operación de los equipos.

En este trabajo se estudia el impacto de H₂ y SO₂ de forma conjunta. El SO₂ es una impureza condensable, en cambio el H₂ es no condensable. Se calcularon los valores de densidad y viscosidad frente a la presión hasta 30 MPa y a ocho temperaturas diferentes comprendidas entre 263,15K a 373,15 K para el CO₂ puro, las dos mezclas binarias (CO₂(96%) + H₂(4%) en moles y CO₂(96%) + SO₂(4%) en moles) y la mezcla ternaria estudiada CO₂(92%) + H₂(4%) + SO₂(4%) en moles. También se ha calculado el equilibrio líquido vapor.

A partir de estos datos, se calculan diversos parámetros relacionados con el transporte y el almacenamiento en la tecnología CCS. Para el transporte se estudia la presión operacional mínima, la caída de presión y de densidad y diámetro interno de la tubería. Para el almacenamiento, se calcula la capacidad de almacenamiento, la velocidad de ascenso en acuíferos salinos y el flujo de permeación.

La conclusión es que la presencia conjunta de ambas impurezas produce efectos negativos con los parámetros estudiados en el transporte y en el almacenamiento. Si bien el efecto del SO₂ es positivo en muchos aspectos, el efecto negativo del H₂ lo sobrepasa en todos ellos. De esta forma, el trabajo con esta mezcla ternaria resulta más costoso, menos eficiente y menos seguro que con el CO₂ puro.

Abstract

CO₂ Capture and Storage (CCS) technology is one of the main alternatives to reduce the emissions of this greenhouse gas. It consists in capturing it mainly from the combustion of fossil fuels and transporting it to deep underground stores that can be natural.

Anthropogenic CO₂ contains impurities that affect its properties and that must be taken into account for the design and operating conditions of the equipment.

In this essay, we study the impact of H₂ and SO₂ jointly. SO₂ is a condensable impurity, while H₂ is non-condensable. Density and viscosity values were calculated against pressure up to 30 MPa and at eight different temperatures between 263.15K to 373.15K for pure CO₂, the two binary mixtures (CO₂ (96%) + H₂ (4%) in moles and CO₂ (96%) + SO₂ (4%) in moles) and the ternary mixture studied CO₂ (92%) + H₂ (4%) + SO₂ (4%) in moles. The vapor liquid equilibrium has also been calculated.

From this data, various related parameters are calculated for both transport and storage in CCS technology. For transport, we calculate the minimum operational pressure, pressure drop and density and the internal diameter of the pipe. For storage, we calculate storage capacity, rising velocity in saline aquifers and permeation flux.

The conclusion is that the joint presence of both impurities produces negative effects on both the parameters studied in transport and storage. Although the effect of SO₂ is positive in many ways, the negative effect of H₂ overcomes it in all of them. In this way, working with this ternary mixture is more expensive, less efficient and less safe than with pure CO₂.

1. Introducción

CCS (Carbon capture and storage) significa captura y almacenamiento de carbono y es un conjunto de tecnologías para prevenir que se emitan grandes cantidades de CO₂ a la atmósfera.¹

El CO₂ es capturado antes de ser emitido a la atmósfera en las plantas energéticas y en grandes industrias. Después, se transporta hasta un lugar elegido y seguro para el almacenamiento permanente.¹

La tecnología CCS puede ayudar a reducir significativamente las emisiones y combatir así el cambio climático, y por ello es ahora tan importante.¹ Se calcula que, para cumplir las previsiones del Tratado de París² en su escenario 2°C, la tecnología CCS debe contribuir con al menos un 14% de la reducción de las emisiones. Esto supone capturar y almacenar al menos 4 Gt de CO₂ al año para 2040, 100 veces más de la capacidad de captura que se tiene actualmente.³ Por tanto, es necesario un rápido desarrollo de esta tecnología, que puede además combinarse con otras como el uso de biomasa como combustible.⁴

Las etapas de la tecnología CCS son:⁵

- Captura: En primer lugar, el CO₂ debe ser separado de otros gases resultantes de la combustión o el procesamiento. El dióxido de carbono resultante puede ser capturado utilizando uno de los tres sistemas:
 - Post combustión: Separa el CO₂ de los demás gases de combustión mediante la utilización de sustancias absorbentes.
 - Pre combustión: Empieza procesando el combustible primario con vapor de agua y aire u oxígeno. El CO resultante reacciona con vapor de agua en un segundo reactor. Eso produce tanto hidrógeno como CO₂ que se separa para su almacenamiento.
 - Oxi combustión: Se usa oxígeno puro para quemar el combustible en vez de aire. Da como productos CO₂ y vapor de agua. Esta última se retira enfriando y comprimiendo.
- Transporte: Generalmente es necesario el transporte de CO₂ hasta el lugar adecuado para su almacenaje. Las corrientes de CO₂ se transportan preferentemente por gaseoductos a elevadas presiones de modo que el fluido esté en fase densa o supercrítica. También pueden usarse buques o camiones cisterna pero estos métodos no resultan rentables en la mayoría de los casos.
- Almacenamiento: Las formaciones geológicas son la opción de almacenamiento para el CO₂ más viable desde el punto de vista medioambiental y económico. El CO₂ comprimido puede inyectarse en formaciones rocosas porosas utilizando la tecnología de la industria del petróleo y gas natural. Los tipos principales de almacenamiento geológico son los depósitos de petróleo y gas natural agotados,

las salinas y los acuíferos salinos profundos y los estratos carboníferos no extraíbles. En el caso de yacimientos de petróleo o gas agotados, el proceso puede aprovecharse para acceder a las últimas reservas (enhanced oil/gas recovery). Los lugares de almacenamiento suelen comenzar a una profundidad de 800 m para que las temperaturas y presiones imperantes mantengan el CO₂ en estado supercrítico.⁵

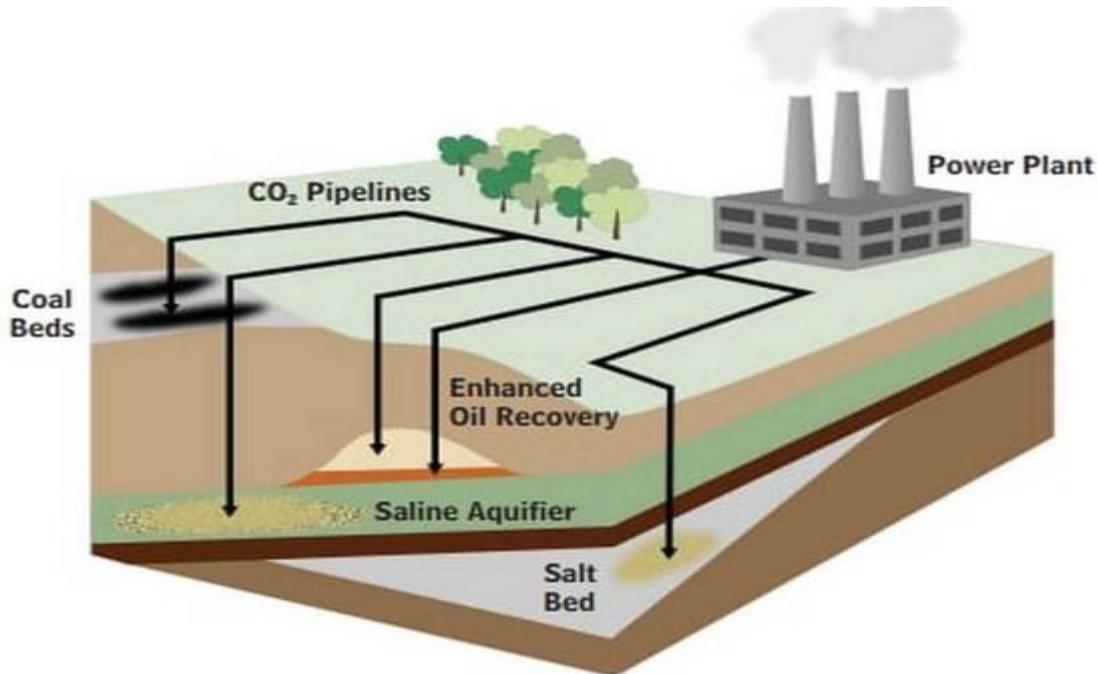


Diagrama 1. Proceso global de la tecnología CCS (Fuente: Washington Post)

El CO₂ que se maneja no está puro sino que contiene impurezas procedentes del combustible utilizado y los métodos de captura. La presencia de estas impurezas, aun en pequeñas cantidades, puede afectar de una forma muy importante a las propiedades del sistema, lo que se traduce en un efecto también importante en los parámetros técnicos de las instalaciones CCS. La purificación total de la corriente de CO₂ es técnicamente posible pero económicamente inabordable.⁶ Las impurezas más importantes son N₂, H₂, O₂, Ar, SO₂, NO_x, CO, CH₄ y H₂O.^{7,8}

Se ha comprobado que algunas de estas impurezas, como SO₂, pueden favorecer algunas de las etapas de la tecnología de CCS, por lo que se ha propuesto la co-captura CO₂ más impurezas.^{9,10} De esta manera se evita la emisión de las impurezas, que pueden ser muy tóxicas, como en el caso de SO₂, y también los costes de purificación.

En este trabajo se estudia la influencia conjunta de las impurezas SO₂ y H₂ en las propiedades del CO₂ antropogénico en tanto en cuanto afectan a las etapas de transporte y almacenamiento. Solo se tienen en cuenta los efectos termodinámicos e hidráulicos, mientras que posibles efectos químicos no entran dentro del ámbito de este estudio.

2. Objetivos y planteamiento del trabajo

El objetivo global de este trabajo es cuantificar la influencia conjunta de las impurezas SO_2 y H_2 en las propiedades termodinámicas e hidráulicas del CO_2 antropogénico, para así poder optimizar el diseño y el funcionamiento de la tecnología CCS en sus etapas de transporte y almacenamiento.

Este objetivo se alcanzará mediante el cumplimiento de los siguientes objetivos parciales:

1) Calcular las densidades, ρ , viscosidades, η , y el equilibrio líquido vapor, ELV, del CO_2 puro a presiones, p , y temperaturas, T , de interés para la tecnología CCS en sus etapas de transporte y almacenamiento.

2) Calcular ρ , η y ELV de las mezclas binarias $\text{CO}_2 + \text{H}_2$ y $\text{CO}_2 + \text{SO}_2$ a las mismas temperaturas y presiones.

3) Calcular ρ , η y ELV de la mezcla ternaria $\text{CO}_2 + \text{SO}_2 + \text{H}_2$, objeto de este trabajo, a las mismas T y p , para saber cómo afectan las impurezas de H_2 y SO_2 de forma conjunta al proceso de transporte y almacenamiento.

4) Calcular los parámetros de transporte: presión operacional mínima, caída de presión y de densidad a lo largo del ceoducto y diámetro interno de la tubería. Comparar el comportamiento de la mezcla ternaria con los de las dos mezclas binarias y el CO_2 puro.

5) Calcular los parámetros de almacenamiento: capacidad de almacenamiento normalizada, velocidad de ascenso de la pluma normalizada en acuíferos salinos y flujo de permeación normalizado. Comparar la mezcla ternaria con las dos mezclas binarias.

6) Obtener conclusiones en relación con el comportamiento de la mezcla estudiada en las etapas de transporte y almacenamiento de la tecnología CCS.

3. Resultados: Cálculo de las propiedades de los sistemas

Como mezcla ternaria representativa se escogió la compuesta por 92% en moles de CO_2 , 4% en moles de SO_2 y 4% en moles de H_2 . 4% en moles de SO_2 es una composición adecuada para la co-captura $\text{CO}_2\text{-SO}_2$ ^{9,10} y 4% de H_2 corresponde a la máxima concentración de gases no condensables recomendada por el proyecto ENCAP.¹¹ Las mezclas binarias contenían la misma concentración de cada impureza: $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ y $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$. Se ha utilizado la misma concentración de las

dos impurezas para facilitar la comparación de sus efectos. Las temperaturas de trabajo fueron cuatro correspondientes al transporte (263,15 K, 273,15 K, 293,15 K y 304,21 K) y cuatro al almacenamiento (313,15 K, 333,15 K, 353,15 K y 373,15 K) y las presiones llegaron hasta 30 MPa. Se cubren así los rangos de interés para estas dos etapas de la tecnología CCS.¹²⁻¹⁶

La densidad, ρ , la viscosidad, η , y equilibrio líquido vapor, ELV, de CO₂ puro se obtuvieron con el programa REFPROP 9.0 (Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties).¹⁷ Para la densidad y ELV el programa utiliza la ecuación de estado de Span y Wagner¹⁸ y para la viscosidad el modelo de Feghhour et al.¹⁹ Para la densidad y el equilibrio líquido vapor de las mezclas se usó el programa TREND 3.0,²⁰ que utiliza la ecuación de estado EOS-CG.²¹ Para las viscosidades de las mezclas binarias se aplicó el programa REFPROP 9.0, que implementa un método para estimarlas.²² La viscosidad de la mezcla ternaria fue calculada a partir de las de las mezclas binarias despreciando las interacciones entre las impurezas. Dada la baja concentración de éstas, se asume que el error no será importante. La ecuación de estado de Span y Wagner esta aceptada como ecuación de referencia para el CO₂, mientras que la ecuación EOS-CG ha sido validada para las mezclas CO₂ + SO₂ en el rango de temperaturas y presiones de este trabajo. ^{9,10}

En la figura 1 se representan las densidades de la mezcla CO₂(92%) + H₂(4%) + SO₂(4%) en moles a las temperaturas y presiones de trabajo, junto con las del CO₂ puro. Se comprueba que la densidad de la mezcla ternaria disminuye con la temperatura y aumenta con la presión. Para las temperaturas 263,15 K, 273,15 K, 293,15 K y 304,21 K se obtiene una discontinuidad que corresponde al equilibrio líquido vapor ya que son temperaturas subcríticas. Los límites de dichas discontinuidades son el punto de rocío (primera gota de líquido) y el punto de burbuja (primera burbuja de gas). A 313,15 K, 333,15 K, 353,15 K y 373,15 K las curvas ρ - p varían de una forma gradual y sin discontinuidades con la presión ya que son temperaturas supercríticas.

También puede verse que las impurezas provocan una disminución de la densidad de la mezcla respecto al CO₂ puro para todo el rango de temperaturas y presiones.

En la figura 2, se comparan las dos mezclas binarias, la mezcla ternaria y el CO₂ puro a la temperatura seleccionada de 293,15 K. El comportamiento es análogo a las demás temperaturas estudiadas. El SO₂, impureza condensable, hace aumentar la densidad del sistema respecto al CO₂ puro. El H₂, impureza no condensable, la disminuye. La presencia conjunta de ambas impurezas hace que sus efectos se contrarresten en parte, pero prevalece el efecto negativo del H₂, obteniéndose que la densidad de la mezcla ternaria es inferior a la de CO₂ puro a todas las presiones y temperaturas.

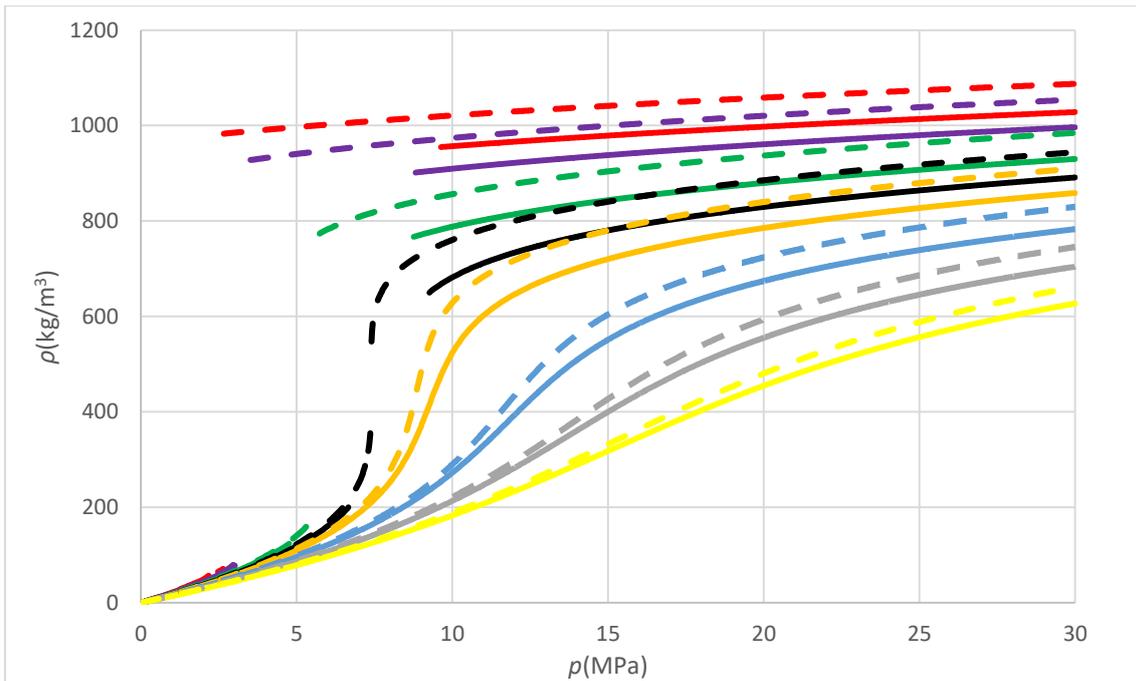


Figura 1. Densidades calculadas, ρ , en función de presión, p , a las temperaturas: 263.15 K (rojo), 273.15 K (púrpura), 293.15 K (verde), 304.21 K (negro), 313.15 K (naranja), 333.15 K (azul), 353.15 K (gris) y 373.15 K (amarillo) para el CO_2 puro y la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles. Las líneas continuas corresponden a la mezcla ternaria y las de trazos al CO_2 puro.

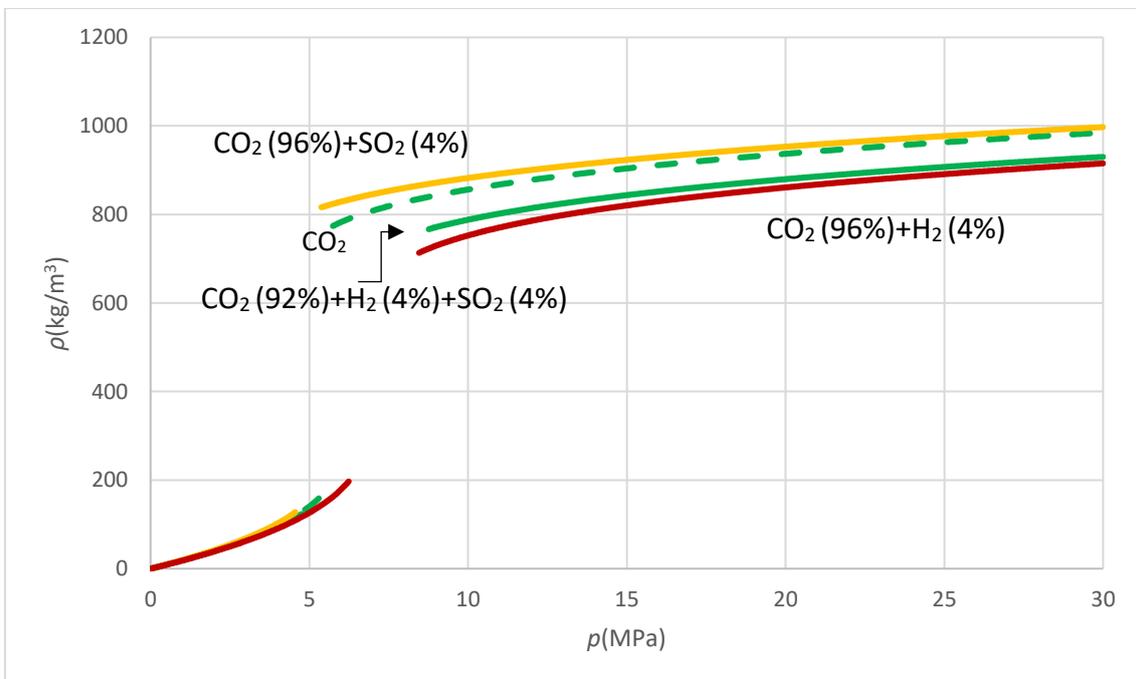


Figura 2. Densidades calculadas, ρ , frente a la presión, p , a 293,15 K para el CO_2 puro (verde a trazos), la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (verde con línea continua), la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$ en moles (rojo) y la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (naranja).

En la figura 3 se representan las viscosidades de la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles a las temperaturas y presiones de trabajo junto con las del CO_2 puro. Puede verse que la viscosidad de la fase densa aumenta cuando disminuye la temperatura y aumenta la presión. El CO_2 puro tiene mayores viscosidades que la mezcla ternaria estudiada. Como sucede en la densidad, a las temperaturas subcríticas se presentan discontinuidades correspondientes al ELV.

La figura 4, a la temperatura seleccionada de 293,15 K, muestra que tanto SO_2 como H_2 hacen disminuir la viscosidad de la mezcla en la fase densa, y sus efectos se suman en la mezcla ternaria. El comportamiento es análogo a las demás temperaturas estudiadas.

En la figura 5 se representa el ELV de las tres mezclas estudiadas y el del CO_2 puro. La presencia de SO_2 disminuye las presiones de rocío y de burbuja del sistema respecto al CO_2 puro, mientras que la de H_2 las aumenta.²³ La presencia conjunta de SO_2 y H_2 hace que la presión de burbuja de la mezcla ternaria sea mayor que la del CO_2 puro y que las de las dos binarias. Su presión de rocío es menor que la del CO_2 puro y que la de la mezcla $\text{CO}_2 + \text{H}_2$ y ligeramente mayor que la de mezcla $\text{CO}_2 + \text{SO}_2$.

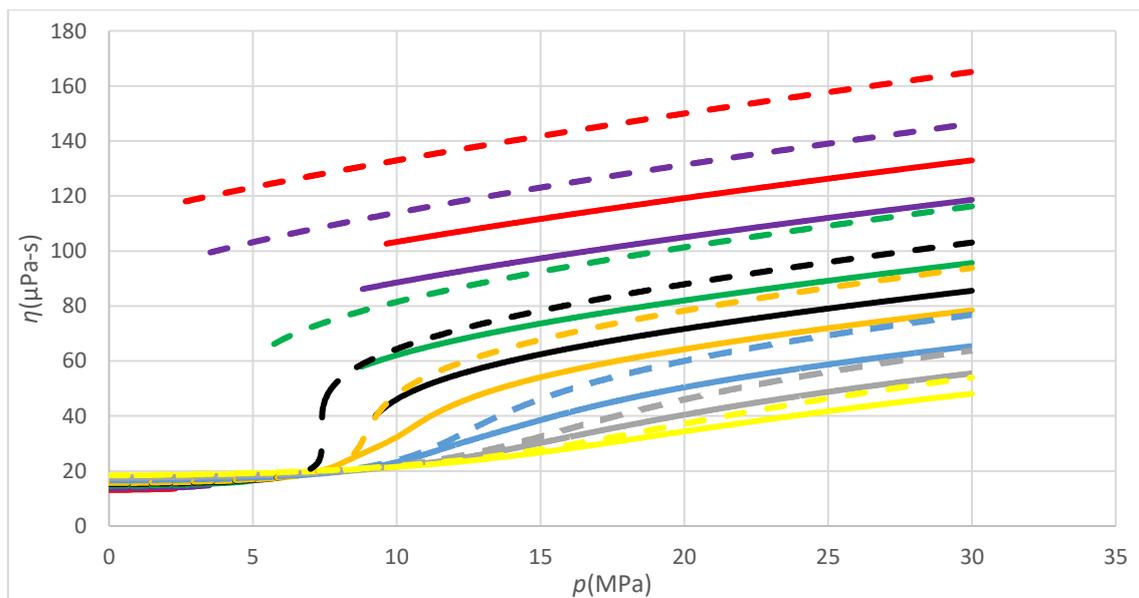


Figura 3. Viscosidades calculadas, η , en función de presión, p , a las temperaturas: 263,15 K (rojo), 273,15 K (púrpura), 293,15 K (verde), 304,21 K (negro), 313,15 K (naranja), 333,15 K (azul), 353,15 K (gris) y 373,15 K (amarillo) para el CO_2 puro y la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles. Las líneas continuas corresponden a la mezcla ternaria y las de trazos al CO_2 puro.

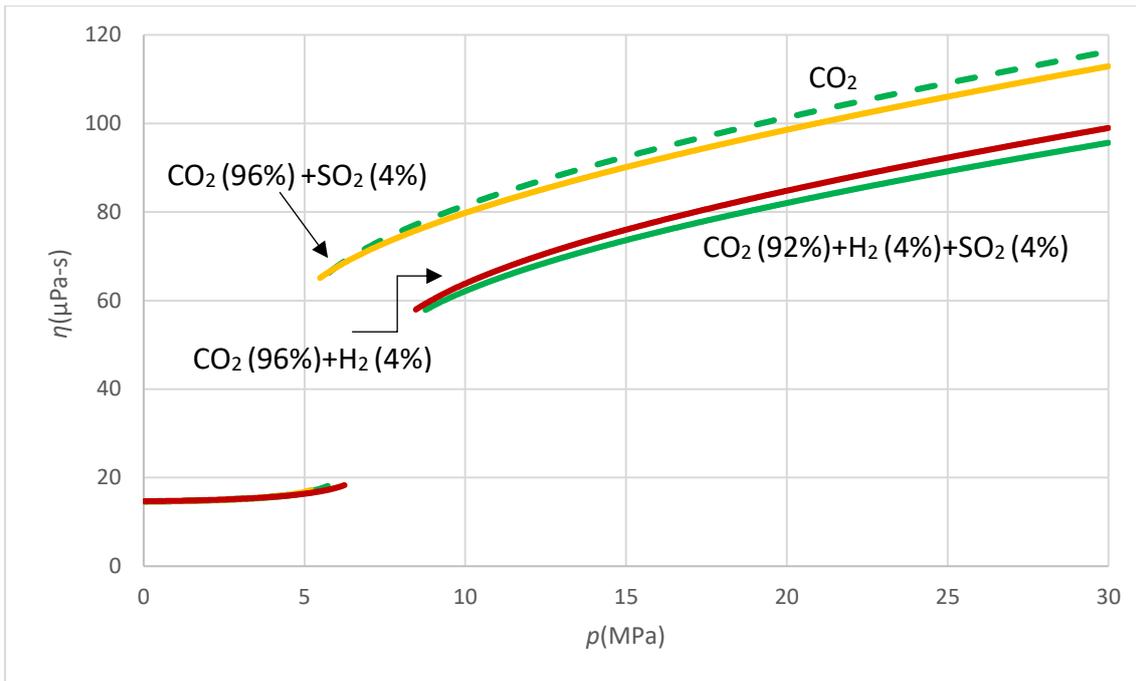


Figura 4. Viscosidades calculadas, η , frente a la presión, p , a 293,15K para el CO_2 puro (verde a trazos), la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (verde con línea continua), la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$ en moles (rojo) y la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (naranja).

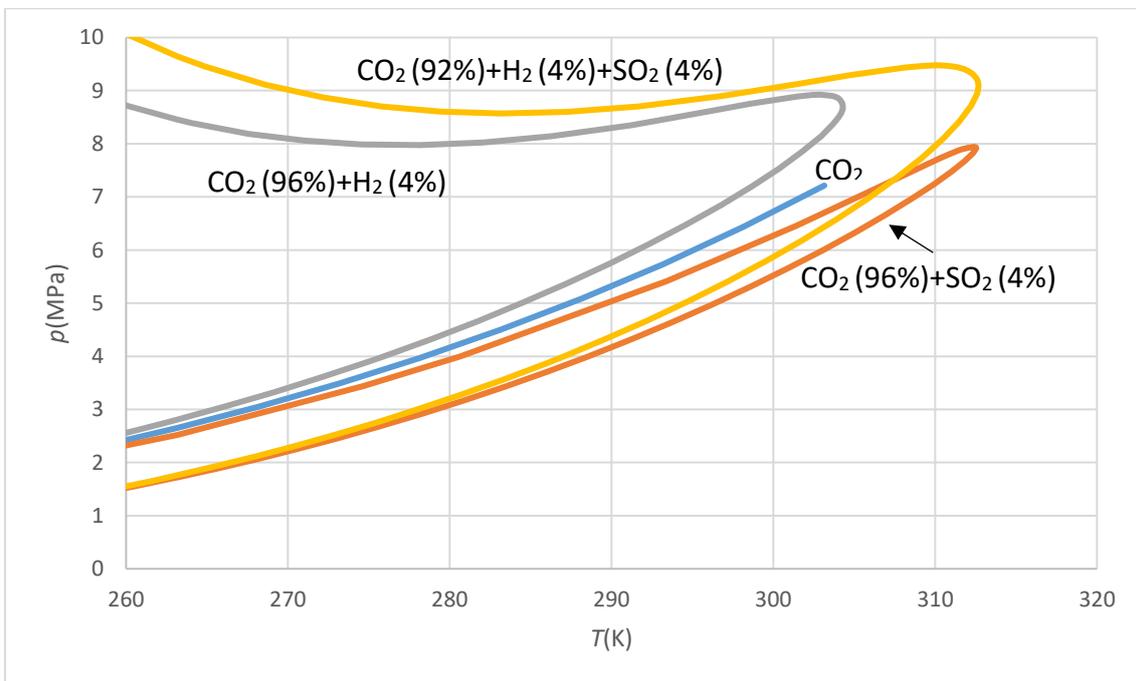


Figura 5. ELV del CO_2 puro (azul), la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (naranja), la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$ en moles (gris) y la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (amarillo).

4. Discusión: Efecto de las impurezas de las etapas de transporte y almacenamiento

4.1. Etapa de transporte

La presencia de las impurezas afecta al transporte del CO₂ antropogénico. En este apartado se estudia la presión operacional mínima, la caída de presión y de densidad a lo largo del ceoducto y el diámetro interno del ceoducto. Las ecuaciones que se necesitan están descritas en la tabla 1.⁹

Parámetro	Fórmula	Símbolos
Coeficiente de Reynolds(<i>Re</i>)	$Re = \frac{4m}{D\pi\eta}$	<i>m</i> =flujo de masa(kg/s) <i>D</i> =diámetro interno(m) <i>η</i> =viscosidad de las ecuaciones ajustadas
Factor de fricción(<i>f</i>)	$f = \frac{1.325}{\left[\ln\left(\frac{e}{3.7D} + \frac{5.74}{Re^{0.9}}\right)\right]^2}$	<i>e</i> = factor de rugosidad(m) <i>D</i> =diámetro interno(m) <i>Re</i> = coeficiente de Reynolds
Caída de presión respecto a la distancia($\Delta P/L$)	$\frac{\Delta P}{L} = \frac{8fm^2}{\rho\pi^2D^5}$	<i>f</i> =factor de fricción <i>m</i> =flujo de masa <i>ρ</i> = densidad de las ecuaciones ajustadas(kg/m ³) <i>D</i> =diámetro interno(m)
Diámetro interno (<i>D</i>)	$D = \left[\frac{8fm^2}{\rho\pi^2\frac{\Delta P}{L}}\right]^{1/5}$	<i>f</i> =factor de fricción <i>m</i> =flujo de masa(kg/s) <i>ρ</i> = densidad de las ecuaciones ajustadas(kg/m ³) <i>D</i> =diámetro interno(m)

Tabla 1. Ecuaciones de transporte.

4.1.1. Presión operacional mínima

El fluido debe transportarse en fase densa o supercrítica, ya que la presencia de fase gas disminuye la eficacia de transporte y la presencia de burbujas y turbulencias puede dañar las instalaciones.²⁴ Por eso, la presión de transporte debe ser siempre superior a la presión de burbuja cuando las temperaturas son subcríticas, que es lo más habitual en el transporte. En este caso, el importante aumento de la presión de burbuja de la mezcla ternaria por la presencia de las impurezas es desfavorable para la

tecnología CCS, porque obliga a trabajar con presiones más elevadas que con el CO₂ puro o con las mezclas binarias.

4.1.2. Caída de presión con la distancia

La caída de presión a lo largo de la tubería se ve afectada por la presencia de impurezas. Cuanto más rápida sea la caída de presión, menor es la distancia recorrida antes de llegar al punto de burbuja, cuando es necesaria la recompresión. Para realizar estos cálculos y los de la caída de densidad ha sido necesario ajustar los datos en función de la presión usando polinomios del tipo

$$x(p) = a_0 + a_1 \cdot p + a_2 \cdot p^2 + a_3 \cdot p^3 + a_4 \cdot p^4 + a_5 \cdot p^5 + a_6 \cdot p^6 \quad (1)$$

Donde x es η ó ρ . La tabla A1 del Anexo recoge los coeficientes a_i de los polinomios de ajuste y las desviaciones medias relativas (MRD%).

Se han considerado unas características intermedias de la instalación entre las encontradas en la bibliografía:⁹ Diámetro interno de la tubería, $D=0,508\text{m}$ (20 in); flujo de masa, $m= 317,1 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ (10 Mt/año); factor de rugosidad, $e= 4,6 \cdot 10^{-5}\text{m}$ y presión inicial, $p_{in}=20 \text{ MPa}$. En las figuras, L es la longitud de la tubería recorrida por el fluido.

En la figura 6 se puede observar que la caída de presión es más rápida en la mezcla ternaria estudiada que en el CO₂ puro lo que se debe a los menores valores de la densidad y viscosidad. Esto dificulta al transporte, ya que se necesitarán más recompresiones. Cuanto mayor es la temperatura, más rápida es la caída de presión.

En la figura 7 se representa las caídas de presión para las tres mezclas y el CO₂ puro a 293,15 K. Como puede observarse, la presencia de SO₂ ralentiza la caída y la de H₂ la acelera. Ambos efectos se contrarrestan en parte en la mezcla ternaria, pero predomina el de H₂, de manera que la caída es más rápida en la mezcla ternaria que en el CO₂ puro, lo que dificulta el transporte.

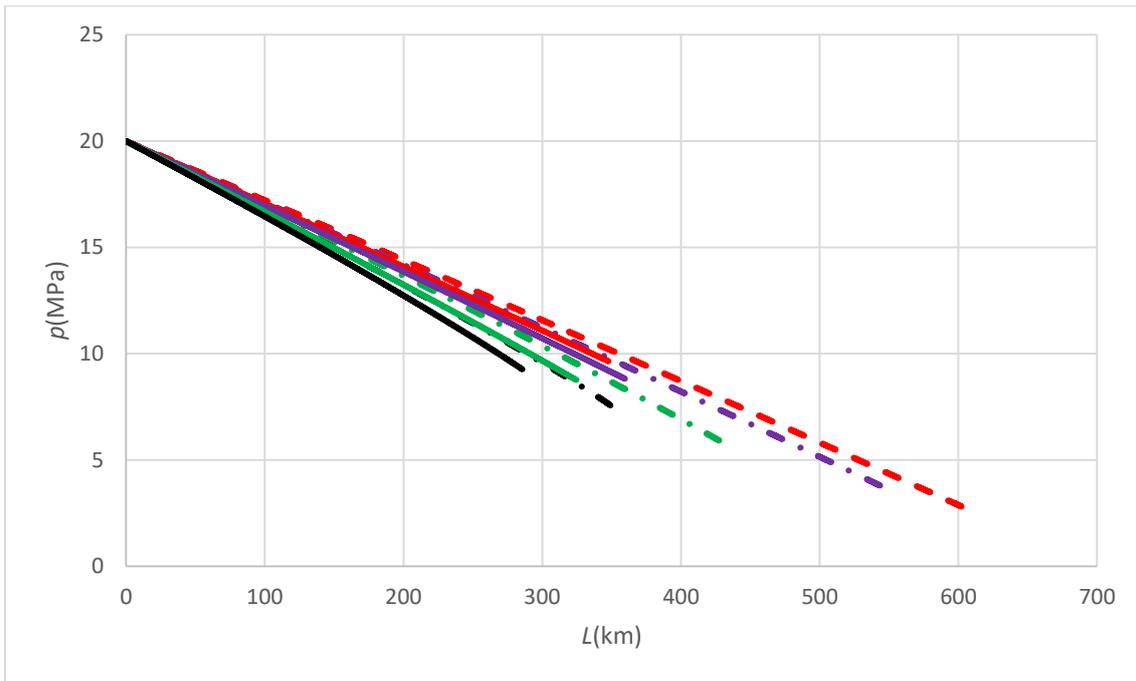


Figura 6. Caída de la presión a lo largo de la tubería para la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (líneas continuas) y CO_2 puro (a trazos) a las temperaturas de transporte: 263,15 K (rojo), 273,15 K (azul), 293,15 K (verde) y 304,21 K (negro).

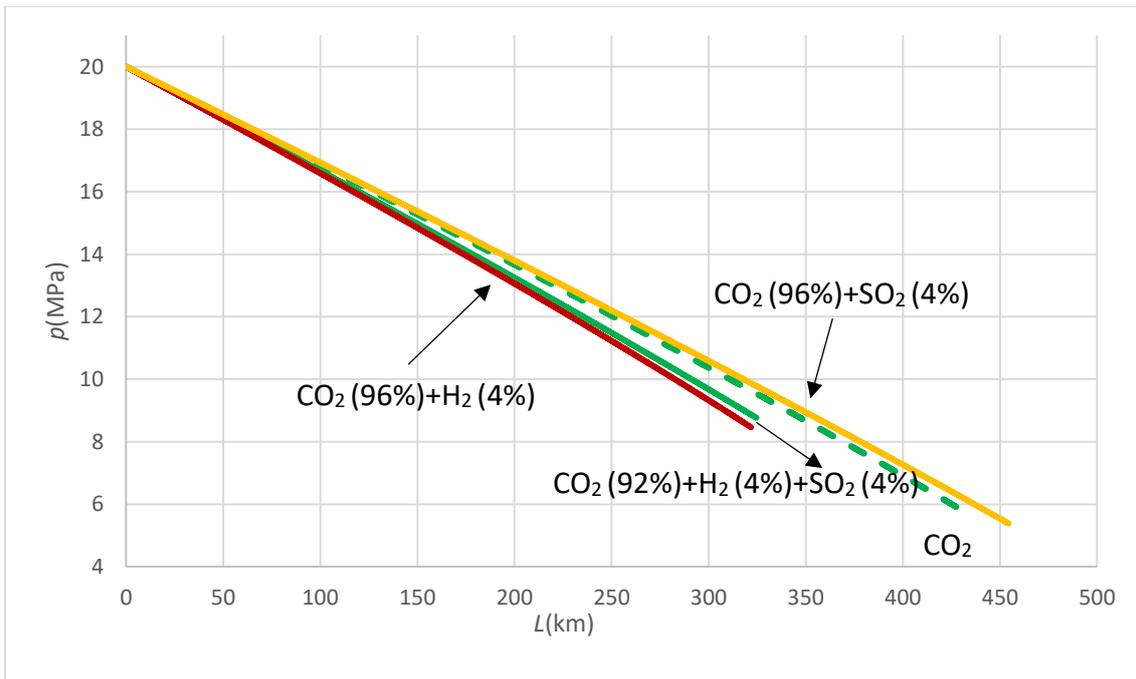


Figura 7. Caída de la presión a lo largo de la tubería a 293,15 K para el CO_2 puro (verde a trazos), la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (verde con línea continua), la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$ en moles (rojo) y la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (naranja).

4.1.3. Caída de densidad con la distancia

Empleando las mismas características de tubería usadas en la caída de presión con la distancia, L , se ha calculado la caída de densidad.⁶

En la figura 8 se observa que la caída de densidad es mayor para la mezcla ternaria estudiada que para el CO_2 puro, lo que dificulta el transporte. Las diferencias aumentan al aumentar a temperatura.

La figura 9 muestra que la mayor caída de densidad a 293,15 K es para la mezcla binaria $\text{CO}_2 + \text{H}_2$ y la menor para $\text{CO}_2 + \text{SO}_2$. La mezcla ternaria tiene un comportamiento intermedio pero el efecto negativo del H_2 predomina. El comportamiento es análogo a las demás temperaturas de transporte.

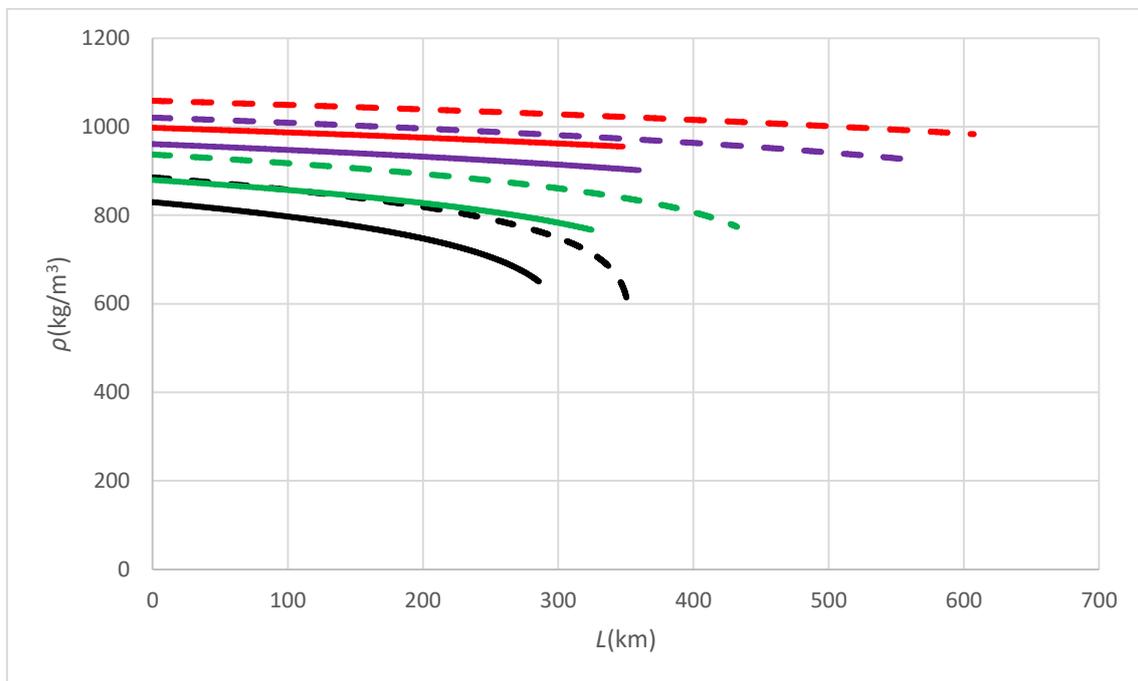


Figura 8. Caída de la densidad a lo largo de la tubería para la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (líneas continuas) y CO_2 puro (a trazos) a las temperaturas de transporte: 263,15 K (rojo), 273,15 K (azul), 293,15 K (verde) y 304,21 K (negro).

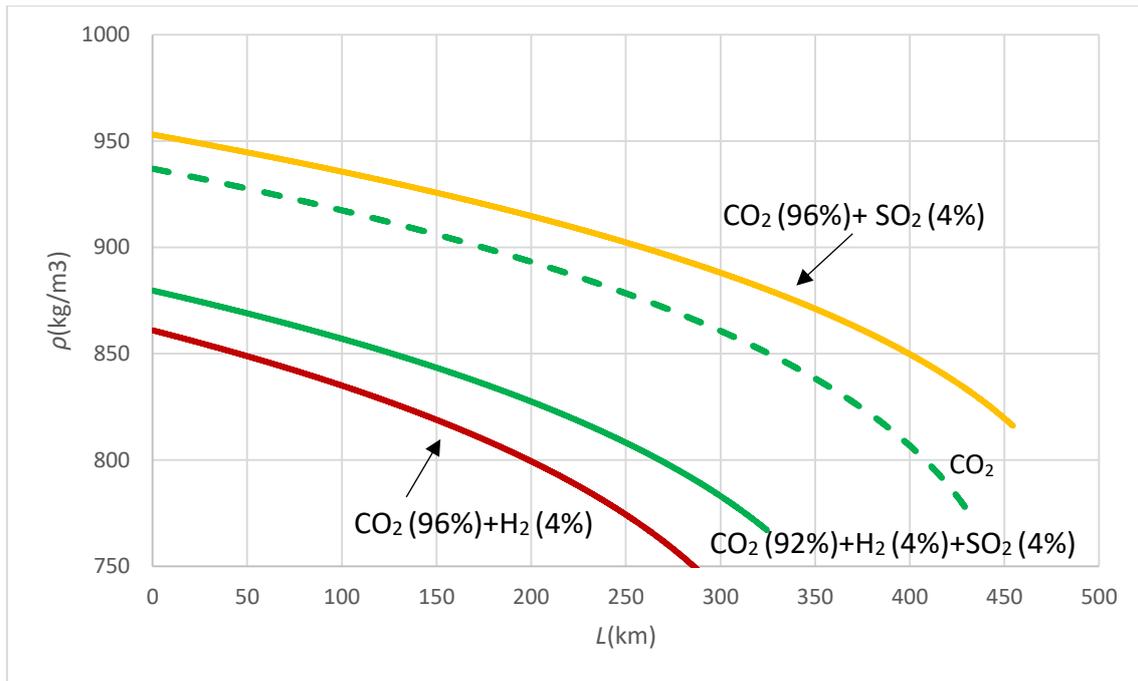


Figura 9. Comparación de la caída de la densidad a lo largo de la tubería a 293,15K para el CO₂ puro (verde a trazos), la mezcla CO₂(92%) + H₂(4%) + SO₂(4%) en moles (verde con línea continua), la mezcla CO₂(96%) + H₂(4%) en moles (rojo) y la mezcla CO₂(96%) + SO₂(4%) en moles (naranja).

4.1.4. Diámetro interno de tubería

El diámetro interno de la tubería es un factor importante en el transporte ya que es parte de la instalación y dependiendo de su tamaño se podrá transportar mayor o menor flujo de masa. Mediante un procedimiento iterativo se han calculado los diámetros internos para cada flujo de masa desde 310 a 326 kg/s y a tres presiones distintas 10 MPa, 15 MPa y 20 MPa. Se asumen una rugosidad de la tubería ($e=4,6 \cdot 10^{-5}$ m) y una caída de presión por unidad de longitud ($\Delta P/L=32,52$ Pa/m), que es el valor medio de todos los sistemas y condiciones estudiados.⁹

En la figura 10 se comprueba que, para un flujo de masa determinado a 293,15 K, se necesita un mayor diámetro para la mezcla ternaria que para el CO₂ puro a las tres presiones estudiadas, lo cual perjudica el transporte. También se aprecia que a menores presiones, mayores son los diámetros internos necesarios.

En la figura 11, se compara, a una presión fija de 15 MPa, la influencia de las temperaturas de transporte en el diámetro interno tanto para la mezcla ternaria estudiada como para el CO₂ puro. A mayor temperatura, mayor es el diámetro interno necesario, y siempre mayor para la mezcla ternaria que para el CO₂ puro.

En la figura 12 se refleja que a 293,15 K y 15 MPa la mezcla binaria CO₂ + H₂ es la que necesita un mayor diámetro interno mientras que la mezcla CO₂ + SO₂ es la que

menor diámetro interno requiere. Los efectos del SO_2 y H_2 se cancelan en parte, pero prevalece el del H_2 y la mezcla ternaria necesita un diámetro mayor que el CO_2 puro. Así, el transporte se ve perjudicado para la mezcla ternaria.

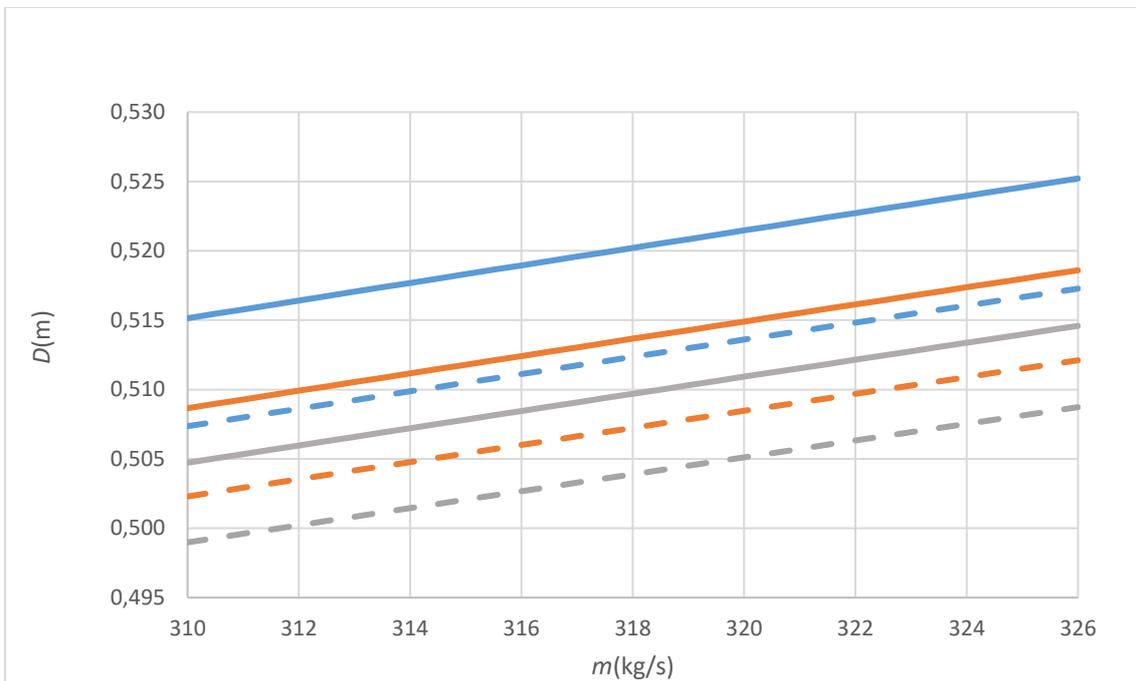


Figura 10. Diámetro interno, D , frente al flujo de masa, m , para la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (líneas continuas) y CO_2 puro (a trazos) a 293,15 K a las presiones de 10 MPa (azul), 15 MPa (naranja) y 20 MPa (gris).

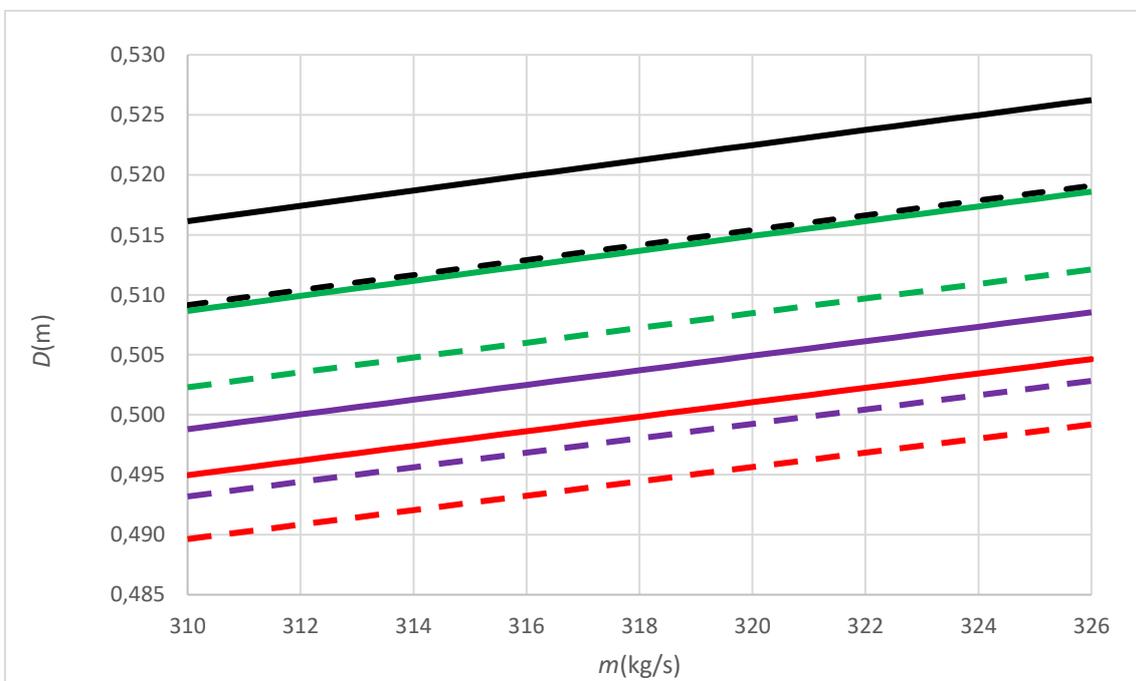


Figura 11. Diámetro interno, D , frente a flujo de masa, m , a 15 MPa para la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (líneas continuas) y CO_2 puro (a trazos) a las

temperaturas de transporte: 263,15 K (rojo), 273,15 K (azul), 293,15 K (verde) y 304,21 K (negro).

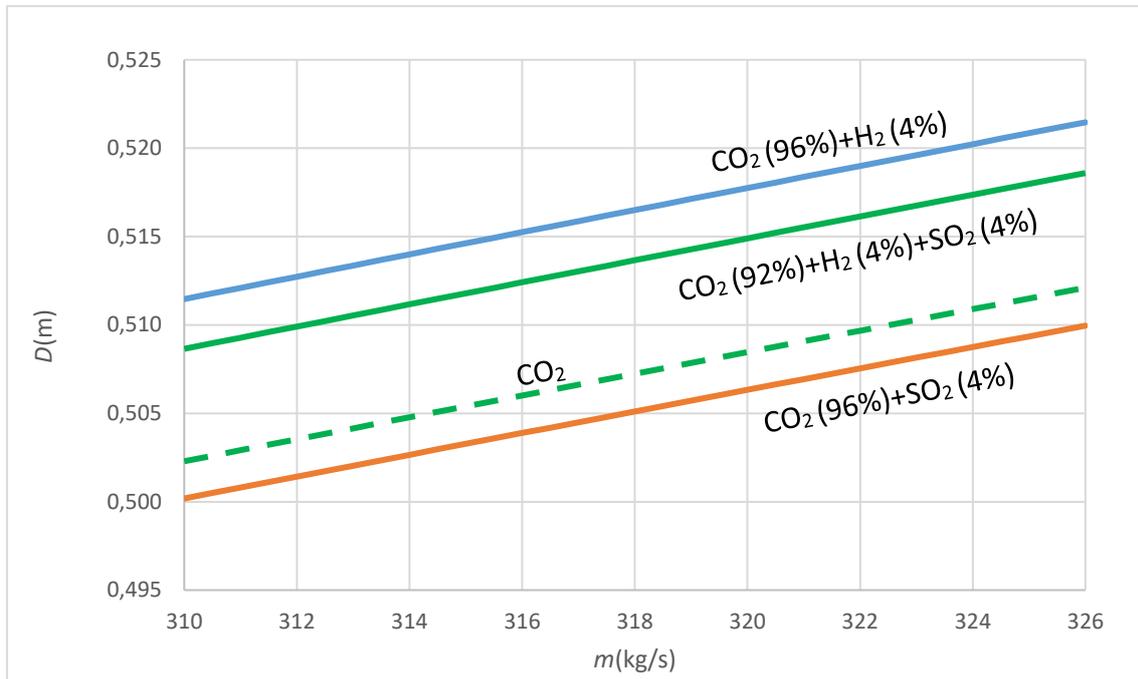


Figura 12. Diámetro interno, D , frente al flujo de masa, m , a 293,15 K y 15 MPa para el CO_2 puro (verde a trazos), la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (verde con línea continua), la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$ en moles (azul) y la mezcla $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (naranja).

4.2. Etapa de almacenamiento

Los parámetros calculados para la etapa de almacenamiento están normalizados respecto al CO_2 puro. Cada parámetro X/X_o es el coeficiente entre la propiedad correspondiente para la mezcla y la del CO_2 puro. En la etapa de almacenamiento se trabaja desde 7 a 30 MPa y a las cuatro temperaturas supercríticas (313.15K, 333.15K, 353.15K, 373.15K) debido a las condiciones en los lugares de almacenamiento.^{12,13} Las ecuaciones empleadas en esta etapa están descritas en orden en la tabla 2.¹⁰

Parámetro	Fórmula	Símbolos
Capacidad de almacenamiento normalizada (M/M_o)	$\frac{M}{M_o} = \frac{\rho}{\rho_o [1 + \sum_i (m_i/m_o)]}$	M/M_o = capacidad de almacenamiento normalizada ρ = densidad de la mezcla ρ_o = densidad de CO_2 puro m_i = masa de las impurezas m_o = masa de CO_2 puro

Velocidad de ascenso normalizada (v/v_o)	$\frac{v}{v_o} = \frac{(\rho_{br} - \rho_o)(\rho_o\eta_o)}{(\rho_{br}-\rho_o)(\rho\eta)}$	v/v_o = velocidad de ascenso normalizada ρ_{br} = densidad del acuífero ρ = densidad de la mezcla ρ_o = densidad de CO ₂ puro η = viscosidad de la mezcla η_o = viscosidad de CO ₂ puro
Flujo de permeación normalizada (\dot{M}/\dot{M}_o)	$\frac{\dot{M}}{\dot{M}_o} = \frac{\rho(\frac{\eta_o}{\eta})}{\rho_o[1 + \sum_i(m_i/m_o)]}$	\dot{M}/\dot{M}_o =flujo de permeación normalizada ρ = densidad de la mezcla ρ_o = densidad de CO ₂ puro η = viscosidad de la mezcla η_o = viscosidad de CO ₂ puro m_i = masa de las impurezas m_o =masa de CO ₂ puro

Tabla 2. Ecuaciones de almacenamiento.

4.2.1. Capacidad de almacenamiento normalizada, M/M_o

La presencia de impurezas en la mezcla afecta a la cantidad que puede ser almacenada en un determinado reservorio, ya que la densidad de la pluma cambia respecto a la del CO₂ puro.

La capacidad de almacenamiento normalizada, M/M_o , es menor que la unidad a las cuatro temperaturas de almacenamiento representadas en la figura 13. Es decir, que la capacidad de almacenamiento de la mezcla ternaria estudiada es peor que la del CO₂ puro. Además aparece un mínimo, más acusado cuanto menor es la temperatura y que se desplaza a mayores presiones cuando aumenta la temperatura.

La figura 14 representa la capacidad de almacenamiento normalizada para la mezcla ternaria y las dos binarias a la temperatura seleccionada de 333,15 K. El comportamiento es similar a las demás temperaturas. Se aprecia que M/M_o para la mezcla binaria CO₂+SO₂ supera la unidad a presiones entre 7 y 15 MPa, en cambio para la mezcla CO₂+H₂ es menor que uno. Pero influye más el H₂ que el SO₂, y el resultado es una menor capacidad de almacenamiento para la mezcla ternaria que para el CO₂ puro, menor además a bajas temperaturas y presiones, es decir, en reservorios poco profundos.¹⁰ A mayores presiones, M/M_o se estabiliza cerca de 0,9 a todas las temperaturas estudiadas.

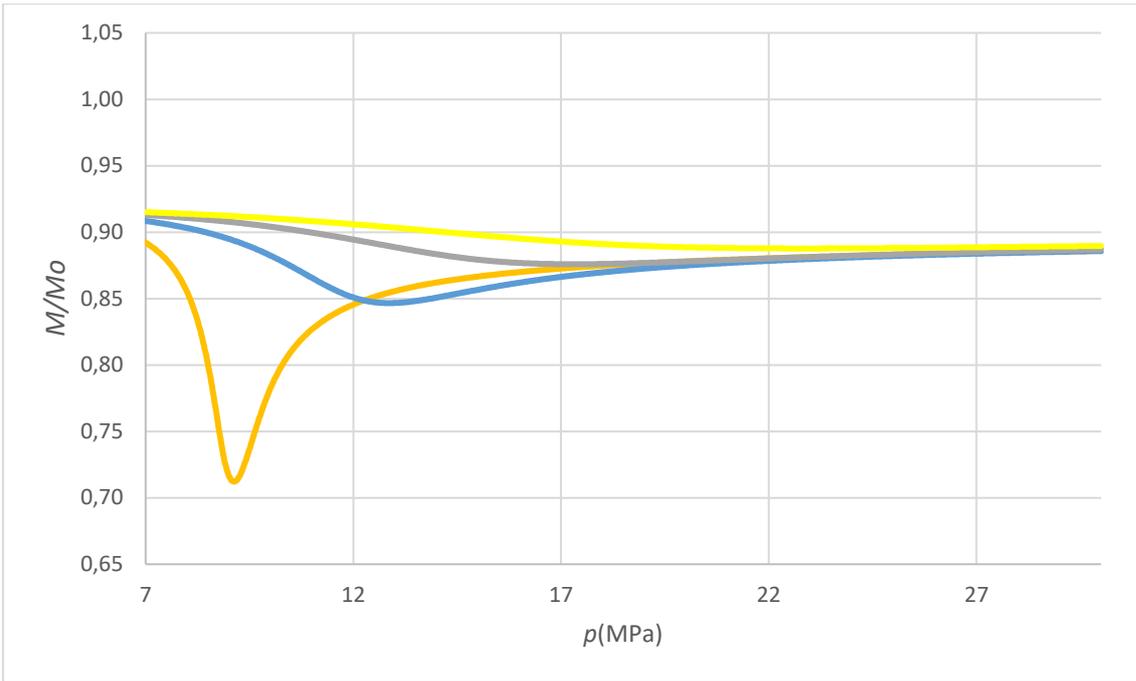


Figura 13. Capacidad de almacenamiento normalizada, M/M_o frente a la presión, p , para la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles a 313,15 K (naranja), 333,15 K (azul), 353,15 K (gris) y 373,15 K (amarillo).

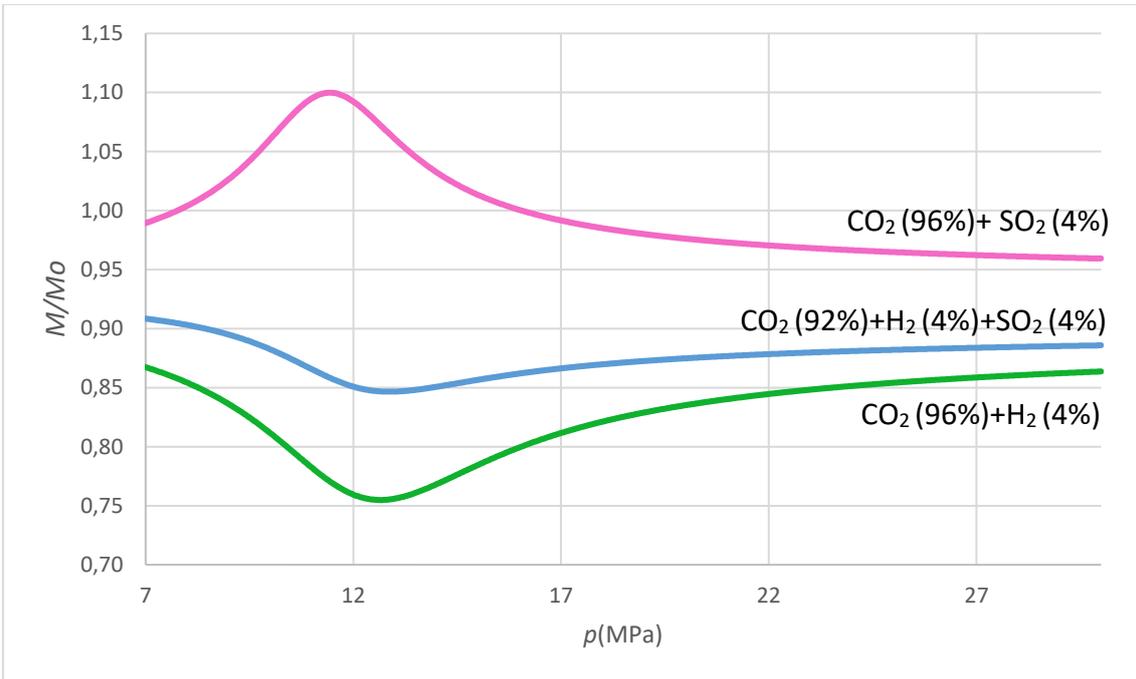


Figura 14. Capacidad de almacenamiento normalizada, M/M_o frente a la presión, p , a 333,15 K para las mezclas binarias $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (rosa), $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$ en moles (verde) junto con la mezcla ternaria $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (azul).

4.2.2. Velocidad de ascenso de la pluma normalizada en acuíferos salinos, v/v_o

La velocidad de ascenso normalizada depende de la densidad de los acuíferos y de la densidad y viscosidad de la pluma así como de las del CO₂ puro, como se muestra en la ecuación de la tabla 2. Se toman como referencia dos densidades de acuíferos, 1025 kg/m³ y 1250 kg/m³, representativas de salinas diluidas y concentradas respectivamente.^{10,25} Cuanto mayor sea la velocidad de ascenso normalizada, la retención será menor y eso se traduce en menor seguridad del almacenamiento respecto al CO₂ puro.¹⁰

Las figura 15 y 16 hacen referencia al acuífero diluido. En la figura 15 se observa que la velocidad de ascenso normalizada es mayor que la unidad a todas las temperaturas. A 313,15 K tiene un máximo a 9,8 MPa donde alcanza un valor de 2,3. A mayores temperaturas y mayores presiones, la diferencia de la mezcla ternaria con el CO₂ puro es menor.

En la figura 16 se observa que a la temperatura seleccionada de 333,15 K, la mezcla binaria CO₂ + H₂ presenta un máximo de 1,8 a diferencia del mínimo de 0,7 de la mezcla binaria CO₂ + SO₂. Predomina el efecto del H₂ y la mezcla ternaria presenta un v/v_o siempre mayor que la unidad.

Las figura 17 y 18 representan el acuífero concentrado. En la figura 17 se observa que v/v_o de la mezcla ternaria es siempre mayor que la unidad, con un máximo importante en la curva de 313,15 K que alcanza a 2,2 a 9,5 MPa. La representación es muy similar a la del acuífero diluido.

La figura 18 compara las dos mezclas binarias con la ternaria en el acuífero concentrado y es muy similar a la figura 16. Se comprueba que la impureza H₂ hace que la mezcla ternaria tenga mayor velocidad de ascenso que el CO₂ puro.

Así pues, en ambos tipos de acuíferos la velocidad de ascenso para la mezcla ternaria es mayor que para el CO₂ puro, lo que perjudica el almacenamiento. El efecto se magnifica a temperaturas y presiones bajas, es decir, en acuíferos poco profundos.

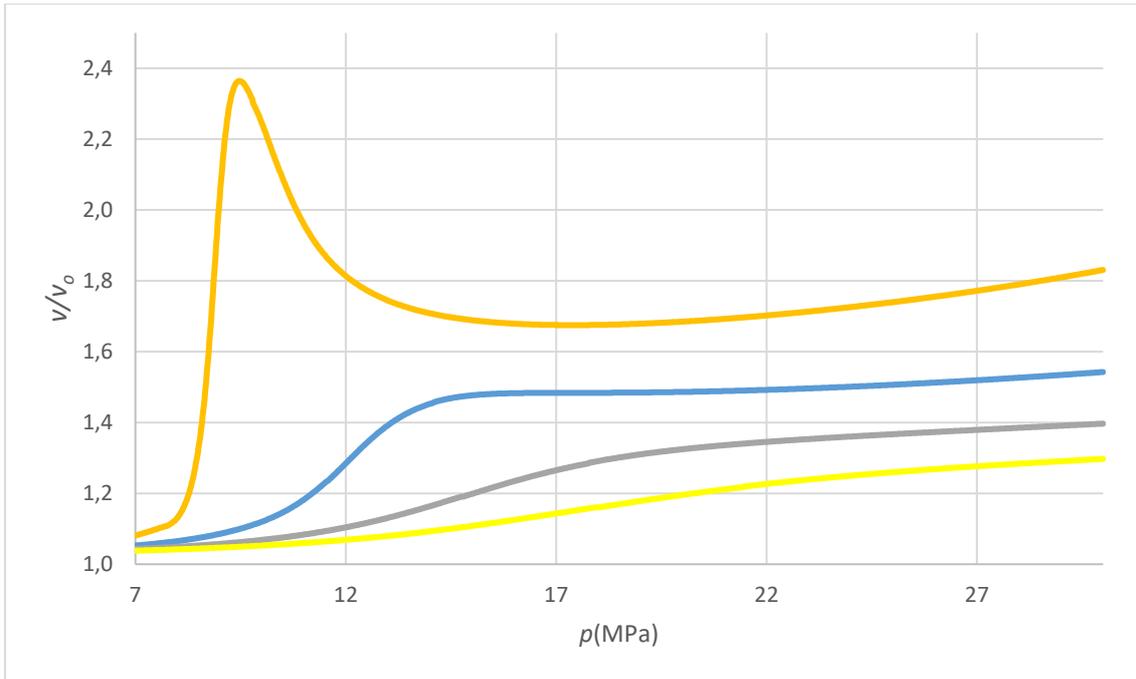


Figura 15. Velocidad de ascenso normalizada en un acuífero salino con una densidad de 1025 kg/m^3 , v/v_0 , frente a la presión, p , para la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles a $313,15 \text{ K}$ (naranja), $333,15 \text{ K}$ (azul), $353,15 \text{ K}$ (gris) y $373,15 \text{ K}$ (amarillo).

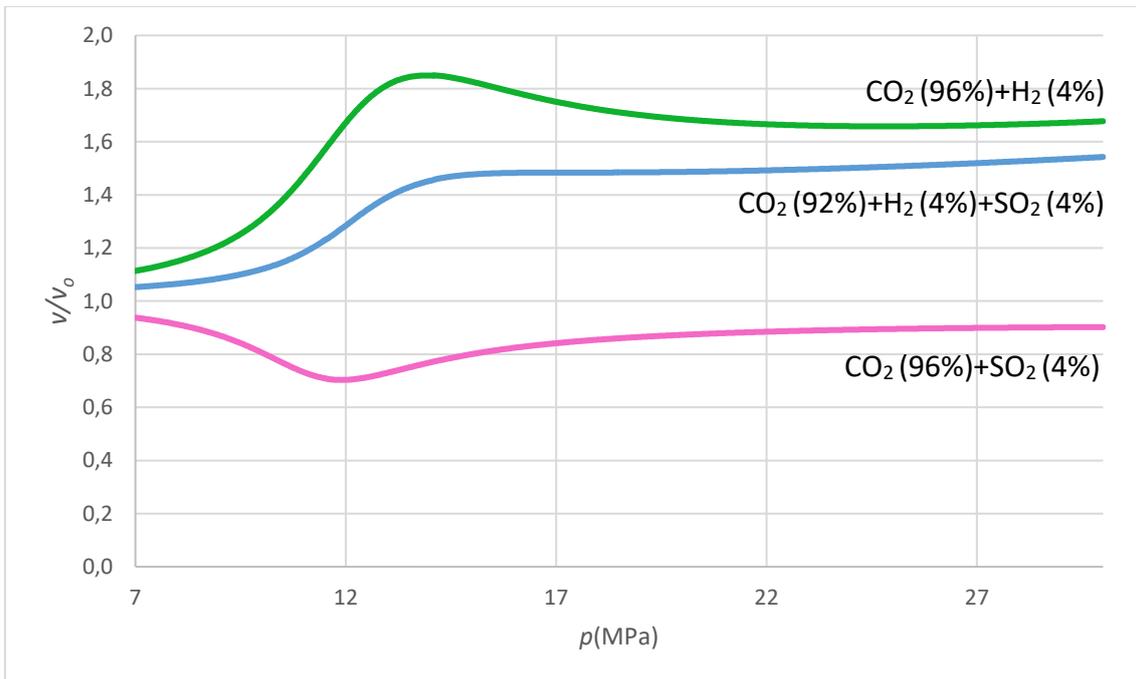


Figura 16. Velocidad de ascenso normalizada en un acuífero salino con una densidad de 1025 kg/m^3 , v/v_0 , frente a la presión, p , a $333,15 \text{ K}$ para las mezclas binarias $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (rosa) y $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$ en moles (verde) junto con la mezcla ternaria $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (azul).

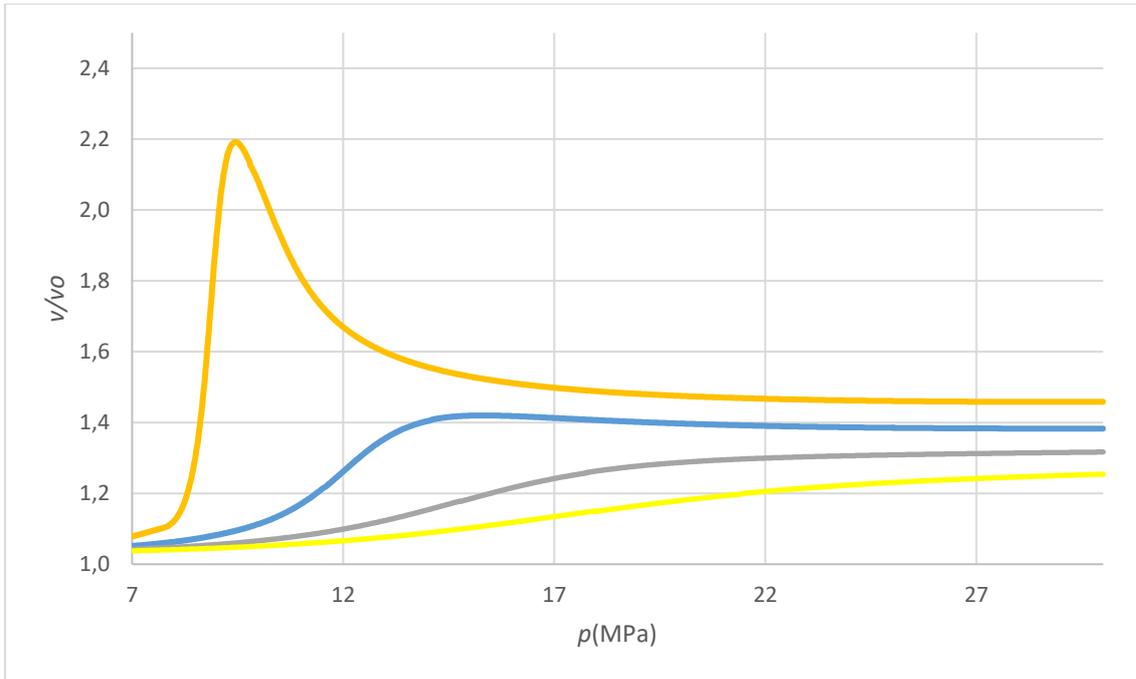


Figura 17. Velocidad de ascenso normalizada en un acuífero salino con una densidad de 1250 kg/m^3 , v/v_0 , frente a la presión, p , para la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles a 313,15 K (naranja), 333,15 K (azul), 353,15 K (gris) y 373,15 K (amarillo).

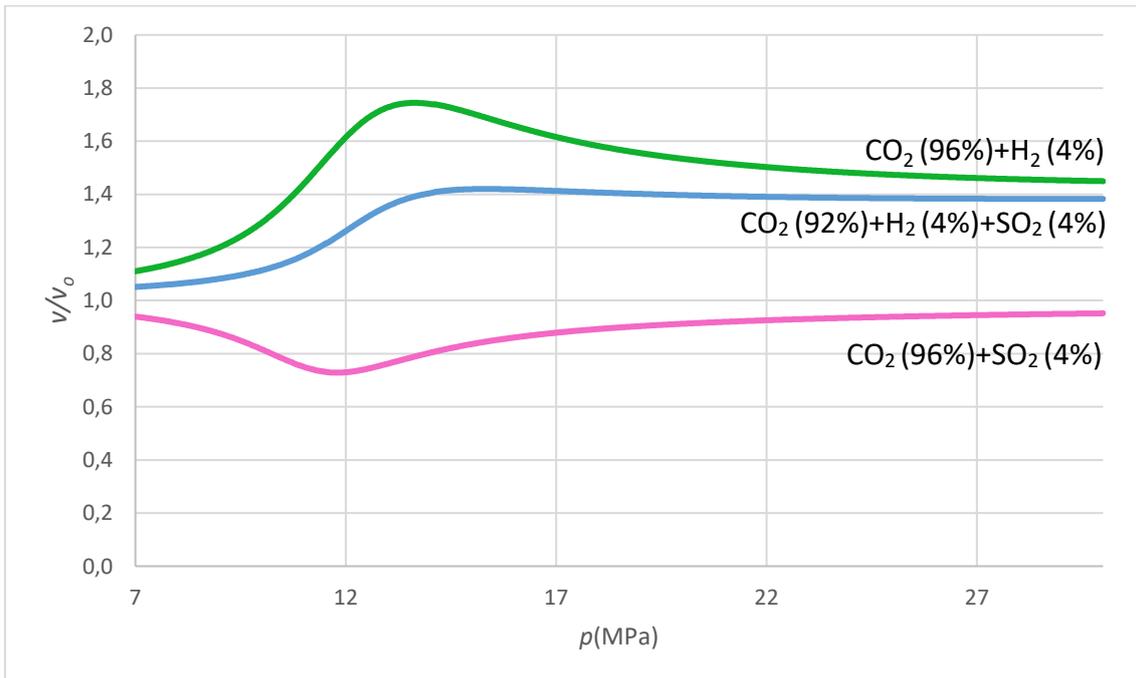


Figura 18. Velocidad de ascenso normalizada en un acuífero salino con una densidad de 1250 kg/m^3 , v/v_0 , frente a la presión, p , a 333,15 K para las mezclas $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (azul), $\text{CO}_2(96\%) + \text{H}_2(4\%)$ en moles (verde) y $\text{CO}_2(96\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles (rosa).

4.2.3. Flujo de permeación normalizado, \dot{M}/\dot{M}_0

El flujo de permeación normalizado representa la inyectividad del fluido. Depende de los efectos de las impurezas tanto en la densidad como en la viscosidad de la pluma. Interesa que el valor sea mayor que la unidad para que haya mayor penetración en los poros de la roca.

Como puede verse en la figura 19, como norma general \dot{M}/\dot{M}_0 aumenta al aumentar la presión y disminuir la temperatura. A 313,15 K aparecen un mínimo y un máximo a baja presión (8,5MPa y 10,5 MPa respectivamente), probablemente debido a la proximidad a la zona crítica.

En la figura 20, se observa que a presiones bajas el flujo de permeación de la mezcla ternaria es entre las dos mezclas binarias e inferior al del CO₂ puro. Pero a presiones altas el efecto acumulado de las impurezas sobre la viscosidad hace que sea ligeramente superior al del CO₂ puro.

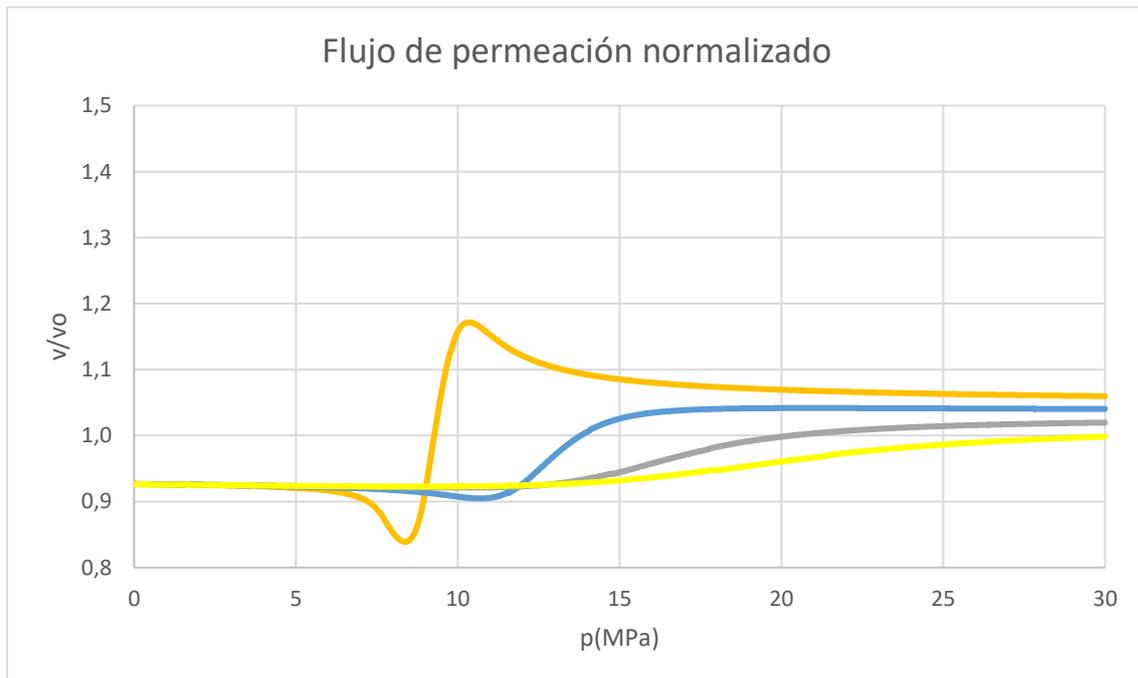


Figura 19. Flujo de permeación normalizado, \dot{M}/\dot{M}_0 , frente a la presión, p , para la mezcla CO₂(92%) + H₂(4%) + SO₂(4%) en moles a 313,15 K (naranja), 333,15 K (azul), 353,15 K (gris) y 373,15 K (amarillo).

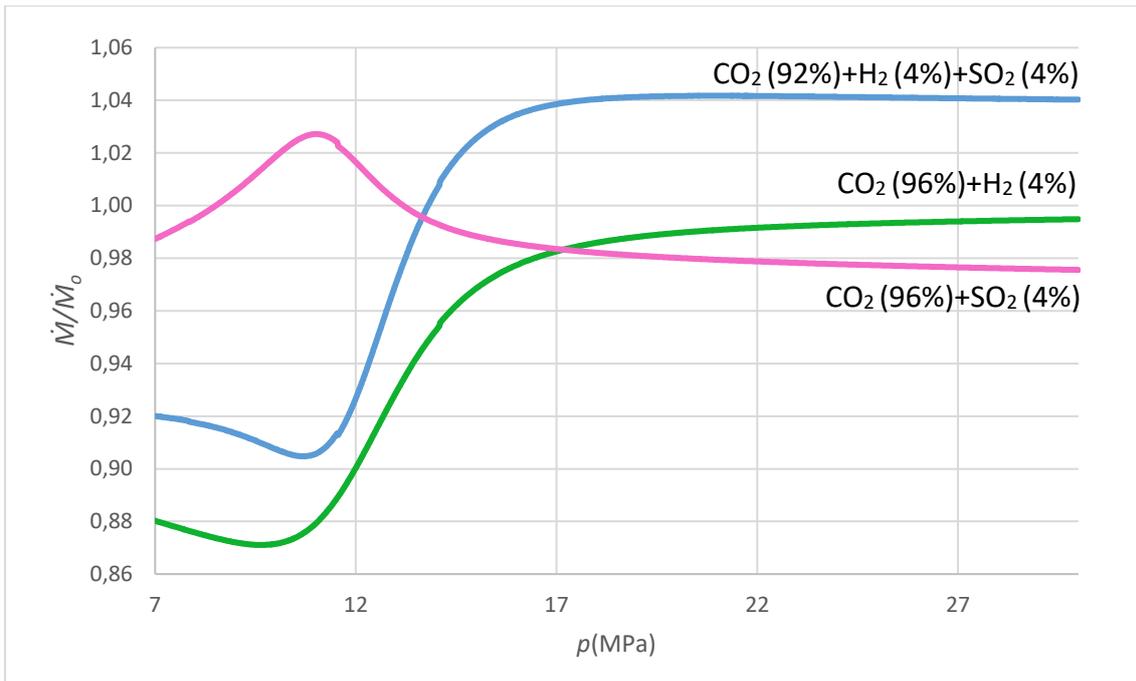


Figura 20. Flujo de permeación normalizado, \dot{M}/\dot{M}_0 , frente a la presión, p , a 333,15 K para las mezclas CO₂(92%) + H₂(4%) + SO₂(4%) en moles (azul), CO₂(96%) + H₂(4%) en moles (verde) y CO₂(96%) + SO₂(4%) en moles (rosa).

5. Conclusiones

Este trabajo estudia la mezcla $\text{CO}_2(92\%) + \text{H}_2(4\%) + \text{SO}_2(4\%)$ en moles para conocer el efecto conjunto de ambas impurezas tanto en las propiedades físico químicas del sistema (densidad, viscosidad y equilibrio de líquido vapor) como en operaciones de transporte y almacenamiento de la tecnología CCS

La presencia de las impurezas afecta a las propiedades estudiadas, ya que estas son diferentes para la mezcla que para el CO_2 puro. La densidad del sistema aumenta debido a la presencia de SO_2 y disminuye por la de H_2 , pero el efecto de H_2 predomina, de forma que la densidad de la mezcla ternaria es menor que la del CO_2 puro. Tanto SO_2 como H_2 hacen disminuir la viscosidad y ambos efectos se acumulan en la mezcla ternaria. La presión de burbuja disminuye por la presencia de SO_2 y aumenta por la de H_2 . De nuevo el efecto del H_2 predomina y la presión de burbuja de la mezcla ternaria es mayor que la del CO_2 y que la de las mezclas binarias.

Para la etapa de transporte se estudia la influencia de H_2 y SO_2 en la presión operacional mínima y en la caída de presión y densidad, así como el diámetro interno de la tubería. Los datos obtenidos reflejan que la presencia conjunta de estas impurezas dificulta el transporte porque provocan una presión operacional mínima mayor, una mayor caída de presión y densidad y además es necesario un diámetro interno de tubería mayor que para el CO_2 puro. Cuanto mayor es la temperatura, más rápida es la caída de presión y densidad, y cuanto menor es la presión y mayor la temperatura, mayor es el diámetro interno necesario. Aunque el SO_2 (condensable) tiene un efecto positivo en todas estas propiedades no contrarresta los efectos negativos del H_2 (no condensable).

En cuanto a los parámetros de almacenamiento, de nuevo la impureza H_2 tiene mayor influencia y está es negativa, superando la presencia beneficiosa del SO_2 en el almacenaje. Para la mezcla ternaria, hay una disminución de la capacidad de almacenamiento, aumenta la velocidad de ascenso en ambos acuíferos salinos y disminuye el flujo de permeación. Es decir, el almacenamiento de esta mezcla es más difícil y menos seguro que el del CO_2 puro.

Se puede concluir que todos los parámetros de transporte y almacenamiento estudiados se ven desfavorecidos por la presencia conjunta de SO_2 y H_2 en la corriente de CO_2 en las condiciones de este trabajo. El resultado de estos efectos negativos es aumento del coste y riesgo de CCS, ya que el transporte es menos eficaz y el almacenamiento no es tan seguro.

6. Bibliografía

- [1] <https://www.globalccsinstitute.com> (visitado el 30 de julio de 2019)
- [2] <https://unfccc.int/process-and-meetings/the-paris-agreement/what-is-the-paris-agreement> (visitado el 30 de julio de 2019)
- [3] <https://www.globalccsinstitute.com/resources/global-status-report/> (visitado el 30 de julio de 2019)
- [4] <https://www.iea.org/topics/carbon-capture-and-storage/> (visitado el 30 de julio de 2019)
- [5] PNUMA. Guía simplificada del Informe especial sobre captura y almacenamiento de dióxido de carbono del Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático. **2006**.
- [6] Olajire, A. A. CO₂ capture and separation technologies for end-of-pipe applications-A review. **2008**.
- [7] Løvseth, S; Skaugen, G; Stang, H. G. J; Jakobsen, J. P; Wilhelmsen, Ø; Span, R; Wegge, R. CO₂ Mix Project Experimental determination of thermophysical properties of CO₂-rich mixtures. *Energy Procedia*, **2013**, 37, 7841-7849.
- [8] Porter, R. T. J; Fairweather, M; Pourkashanian, M; Woolley, R. M. The range and level of impurities in CO₂ streams from different carbon capture sources. *International Greenhouse Gas Control*, **2015**, 36, 161-174.
- [9] Gimeno, B; Artal, M; Velasco, I; Fernández, J; Blanco, S. T. Influence of SO₂ on CO₂ Transport by Pipeline for Carbon Capture and Storage Technology: Evaluation of CO₂/SO₂ Cocapture. *Energy Fuels*, **2018**, 32, 8641-8657.
- [10] Gimeno, B; Artal, M; Velasco, I; Blanco, S. T; Fernández, J. Influence of SO₂ on CO₂ storage for CCS technology: evaluation of CO₂/SO₂ co-capture. *Applied Energy*, **2017**, 206, 172-180.
- [11] Reference cases and guidelines for technology concepts. ENCAP-WP1.1, Deliverable D1.1.1&D1.1.2. *Vattenfall A/S Report* No 55431. Issue No.4, February **2008**.
- [12] Michael, K; Golab, A; Shulakova, V; Ennis-King, J; Allison, G; Sharma, S; et al. Geological storage of CO₂ in saline aquifers-a review of the experience from existing storage operations. *Int J Greenh Gas Control*, **2010**, 4(4): 659-67.
- [13] Bachu, S. Screening and ranking of sedimentary basins of sequestration of CO₂ in geological media in response to climate change. *Environ Geol*, **2003**, 44(3):277-89.
- [14] CO₂ Pipeline Infrastructure. International Energy Agency 2014. *IEAGHG Report 2013/18*, January **2014**.

[15] Li, H; Jackobsen, J. P; Wilhelmsen, Ø; Yan, J. PVTxy properties of CO₂ mixtures relevant for CO₂ capture, transport and storage: Review of available experimental data and theoretical models. *Applied Energy*, **2011**, 88(11), 3567-3579.

[16] Serpa, J; Morbee, J; Tzimas, E. Technical and Economic Characteristics of a CO₂ Transmission Pipeline Infrastructure. European Commission. Joint Research Centre. *Institute of Energy*, **2011**. JRC62502.

[17] Lemmon, E. W; Huber, M. L; McLindlen, M. O. Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties (REFPROP). NIST Standard Reference Database 23, Version 9.0. Thermophysical Properties Division. Copyright **2010**.

[18] Span,R; Wagner,W. A New Equation of State for Carbon Dioxide Covering the Fluid Region from the Triple-Point Temperature to 1100K at Pressures up to 800 MPa. *J.Phys.Chem.Data*, **1996**, 25(6), 1509-1596.

[19] Fenghour, A; Wakeham, W. A; Vesovic, V. The Viscosity of Carbon Dioxide. *J.Phys.Chem.Data*, **1998**, 27:31-44.

[20] Span, R; Eckermann, T; Herrig, S; Hielser, S; Jäger, A; Thol, M; TREND. Thermodynamic Reference and Engineering Data 3.0. Lehrstuhl für Thermodynamik, Ruhr-Universität. **2016**.

[21] Gernert, J; Span,R. EOS-CG: A Helmholtz energy mixture model for humid gases and CCS mixtures. *J Chem Thermodyn*, **2016**, 93:273-94.

[22] Klein, S. A; McLinden, M. O; Laesecke, A. An improved extended corresponding states method estimation of viscosity of pure refrigerants and mixtures. *Int J Refrig*, **1997**, 20:208-17

[23] Tenorio, M. J; Parrott, A. J; Calladine, J. A; Sanchez-Vicente, Y; Cresswell, A. J; Graham, R. S; Drage, T. C; Poliakoff, M; Ke, J; George, M. W. Measurement of vapour-liquid equilibrium of binary and ternary mixtures of CO₂, N₂ and H₂, systems which are of relevance to CCS technology. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, **2015**, 41, 68-81.

[24] McCoy, S. T; Rubin, E. S. An engineering-economic model of pipeline transport with application to carbon capture and storage. *Int J Greenh Gas Control*, **2008**, 2:219-229.

[25] Some fundamentals of mineralogy and geochemistry. Deepbasins brines I: density, TDS, and chloride. **2016**

Tabla A1. Coeficientes de la ecuación (1) y desviación media relativa de los ajustes.

- MEZCLA CO₂ + H₂ + SO₂

T(K)	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	MRD(%)
Densidad	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻¹	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻²	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻³	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁴	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁵	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁶	
Viscosidad	μPa·s	μPa·s·MPa ⁻¹	μPa·s·MPa ⁻²	μPa·s·MPa ⁻³	μPa·s·MPa ⁻⁴	μPa·s·MPa ⁻⁵	μPa·s·MPa ⁻⁶	
Densidad								
263,15	8,69E+02	1,82E+01	-1,92E+00	1,55E-01	-7,47E-03	1,94E-04	-2,10E-06	9,68E-05
273,15	8,03E+02	1,82E+01	-1,27E+00	7,53E-02	-2,92E-03	6,46E-05	-6,19E-07	5,57E-06
293,15	3,65E+01	2,30E+02	-3,17E+01	2,53E+00	-1,16E-01	2,89E-03	-3,01E-05	5,83E-04
304,21 de 9,26 a 11 MPa	-1,75E+05	9,82E+04	-2,30E+04	2,89E+03	-2,05E+02	7,75E+00	-1,22E-01	2,52E-05
304,21 de 11,02 a 13,58 MPa	-9,75E+03	4,45E+03	-8,12E+02	8,05E+01	-4,54E+00	1,37E-01	-1,74E-03	2,37E-06
304,21 de 13,6 a 20 MPa	-8,46E+02	4,28E+02	-5,13E+01	3,49E+00	-1,37E-01	2,93E-03	-2,63E-05	9,46E-06
Viscosidad								
263,15	8,22E+01	2,46E+00	-2,50E-02	-3,13E-03	3,01E-04	-1,09E-05	1,47E-07	3,69E-03
273,15	5,88E+01	5,14E+00	-4,00E-01	2,78E-02	-1,21E-03	2,95E-05	-3,06E-07	3,72E-03
293,15	-1,43E+02	6,99E+01	-1,06E+01	8,98E-01	-4,34E-02	1,12E-03	-1,20E-05	4,33E-03
304,21 de 7,84 a 7,98 MPa	-5,58E+07	3,53E+07	-8,92E+06	1,13E+06	-7,13E+04	1,80E+03	3,91E-03	5,11E-02
304,21 de 8 a 8,34 MPa	-5,75E+07	4,23E+07	-1,30E+07	2,12E+06	-1,95E+05	9,55E+03	-1,95E+02	9,48E-02
304,21 de 8,36 a 9,48 MPa	-5,15E+06	3,48E+06	-9,78E+05	1,47E+05	-1,23E+04	5,52E+02	-1,03E+01	1,63E-02
304,21 de 9,5 a 10,98 MPa	-8,10E+04	4,57E+04	-1,08E+04	1,36E+03	-9,68E+01	3,68E+00	-5,83E-02	7,89E-04
304,21 de 11 a 20 MPa	-5,05E+02	1,85E+02	-2,67E+01	2,10E+00	-9,38E-02	2,24E-03	-2,24E-05	1,75E-03

- CO₂ PURO

T(K)	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	MRD(%)
Densidad	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻¹	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻²	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻³	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁴	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁵	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁶	
Viscosidad	μPa·s	μPa·s·MPa ⁻¹	μPa·s·MPa ⁻²	μPa·s·MPa ⁻³	μPa·s·MPa ⁻⁴	μPa·s·MPa ⁻⁵	μPa·s·MPa ⁻⁶	
Densidad								
263,15	9,65E+02	7,68E+00	-3,19E-01	1,77E-02	-7,78E-04	2,09E-05	-2,47E-07	2,11E-03
273,15	8,87E+02	1,45E+01	-1,08E+00	7,83E-02	-3,81E-03	1,05E-04	-1,24E-06	9,55E-04
293,15 de 5,74 a 7,74 MPa	-1,11E+04	9,77E+03	-3,41E+03	6,40E+02	-6,81E+01	3,88E+00	-9,22E-02	2,91E-04
293,15 de 7,76 a 10,48 MPa	-2,49E+02	5,35E+02	-1,23E+02	1,63E+01	-1,26E+00	5,28E-02	-9,41E-04	2,88E-04
293,15 de 10,5 a 12,98 MPa	-6,48E+03	3,65E+03	-7,66E+02	8,62E+01	-5,46E+00	1,85E-01	-2,60E-03	2,79E-04
293,15 de 13 a 20 MPa	6,13E+02	4,48E+01	-3,09E+00	1,31E-01	-2,86E-03	2,11E-05	1,20E-07	2,79E-04
304,21 de 7,5 a 7,62 MPa	2,83E+11	-2,24E+11	7,43E+10	-1,31E+10	1,30E+09	-6,89E+07	1,52E+06	2,65E+01
304,21 de 7,64 a 8,2MPa	-7,81E+07	5,83E+07	-1,82E+07	3,01E+06	-2,81E+05	1,40E+04	-2,91E+02	1,08E-03
304,21 de 8,22 a 9,88 MPa	-3,01E+05	1,92E+05	-5,09E+04	7,24E+03	-5,79E+02	2,48E+01	-4,42E-01	3,18E-04
304,21 de 9,9 a 12,74MPa	-5,82E+03	2,90E+03	-5,51E+02	5,70E+01	-3,35E+00	1,06E-01	-1,39E-03	2,97E-04
304,21 de 12,76 a 20 MPa	-3,28E+02	3,00E+02	-3,59E+01	2,47E+00	-9,84E-02	2,13E-03	-1,94E-05	2,81E-04
Viscosidad								
263,15	1,12E+02	2,59E+00	-7,17E-02	3,99E-03	-1,76E-04	4,71E-06	-5,54E-08	1,84E-03
273,15	8,86E+01	3,69E+00	-2,16E-01	1,60E-02	-7,87E-04	2,19E-05	-2,58E-07	2,17E-03
293,15	-2,67E+01	3,64E+01	-5,86E+00	5,49E-01	-2,93E-02	8,30E-04	-9,73E-06	1,23E-02
304,21 de 7,5 a 8,2 MPa	-2,87E+07	2,17E+07	-6,84E+06	1,15E+06	-1,09E+05	5,49E+03	-1,15E+02	1,99E-02
304,21 de 8,22 a 9,88 MPa	-2,77E+04	1,75E+04	-4,63E+03	6,55E+02	-5,22E+01	2,22E+00	-3,95E-02	4,43E-04
304,21 de 9,9 a 12,74 Mpa	-6,90E+02	3,33E+02	-6,39E+01	6,72E+00	-4,03E-01	1,30E-02	-1,76E-04	3,77E-04
304,21 de 12,76 a 20 MPa	-6,81E+01	3,44E+01	-3,94E+00	2,68E-01	-1,06E-02	2,29E-04	-2,08E-06	3,07E-04

• MEZCLA CO₂ + H₂

T(K)	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	MRD(%)
Densidad	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻¹	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻²	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻³	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁴	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁵	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁶	
Viscosidad	μPa·s	μPa·s·MPa ⁻¹	μPa·s·MPa ⁻²	μPa·s·MPa ⁻³	μPa·s·MPa ⁻⁴	μPa·s·MPa ⁻⁵	μPa·s·MPa ⁻⁶	
Densidad								
293,15 de 8,46 a 10,7 MPa	-1,74E+04	1,03E+04	-2,47E+03	3,20E+02	-2,35E+01	9,23E-01	-1,52E-02	1,24E-05
293,15 de 10,72 a 13,72 MPa	-1,44E+03	8,47E+02	-1,45E+02	1,38E+01	-7,58E-01	2,25E-02	-2,81E-04	1,01E-08
293,15 de 13,74 a 20 MPa	7,27E+01	1,72E+02	-1,88E+01	1,22E+00	-4,64E-02	9,64E-04	-8,48E-06	2,09E-06
Viscosidad								
293,15 de 8,46 a 11 MPa	-1,87E+03	1,09E+03	-2,60E+02	3,36E+01	-2,46E+00	9,63E-02	-1,58E-03	3,30E-04
293,15 de 11,02 a 20 MPa	-5,52E+01	3,25E+01	-3,98E+00	2,90E-01	-1,22E-02	2,81E-04	-2,71E-06	1,23E-03

• MEZCLA CO₂ + SO₂

T(K)	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	MRD(%)
Densidad	kg·m ⁻³	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻¹	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻²	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻³	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁴	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁵	kg·m ⁻³ ·MPa ⁻⁶	
Viscosidad	μPa·s	μPa·s·MPa ⁻¹	μPa·s·MPa ⁻²	μPa·s·MPa ⁻³	μPa·s·MPa ⁻⁴	μPa·s·MPa ⁻⁵	μPa·s·MPa ⁻⁶	
Densidad								
293,15 de 5,38 a 7 MPa	-3,80E+02	8,88E+02	-2,97E+02	5,58E+01	-6,03E+00	3,53E-01	-8,70E-03	6,60E-07
293,15 de 7,02 a 12 MPa	4,81E+02	1,43E+02	-2,63E+01	2,96E+00	-1,98E-01	7,23E-03	-1,12E-04	8,95E-06
293,15 de 12,02 a 20 MPa	6,66E+02	4,44E+01	-3,96E+00	2,42E-01	-9,07E-03	1,90E-04	-1,70E-06	1,64E-06
Viscosidad								
293,15 de 5,48 a 8,08 MPa	-2,93E+02	2,58E+02	-8,13E+01	1,41E+01	-1,40E+00	7,45E-02	-1,66E-03	3,57E-04
293,15 de 8,1 a 20 MPa	2,23E+01	1,38E+01	-1,59E+00	1,22E-01	-5,54E-03	1,37E-04	-1,43E-06	2,23E-03

$$MRD(\%) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|x_{ajustada} - x_{calculada}|}{x_{calculada}} \quad \text{donde } x = \rho, \eta$$