

Titre: Optimisation thermo-économique et environnementale du cycle de vie d'un procédé de capture de dioxyde de carbone dans une centrale thermique
Title:

Auteur: Etienne Bernier
Author:

Date: 2011

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Bernier, E. (2011). Optimisation thermo-économique et environnementale du cycle de vie d'un procédé de capture de dioxyde de carbone dans une centrale thermique [Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/736/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/736/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Réjean Samson, & François Maréchal
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

OPTIMISATION THERMO-ÉCONOMIQUE ET ENVIRONNEMENTALE DU
CYCLE DE VIE D'UN PROCÉDÉ DE CAPTURE DE DIOXYDE DE CARBONE
DANS UNE CENTRALE THERMIQUE

ETIENNE BERNIER

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION

DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR

(GÉNIE CHIMIQUE)

DÉCEMBRE 2011

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

OPTIMISATION THERMO-ÉCONOMIQUE ET ENVIRONNEMENTALE DU
CYCLE DE VIE D'UN PROCÉDÉ DE CAPTURE DE DIOXYDE DE CARBONE
DANS UNE CENTRALE THERMIQUE

présentée par : BERNIER Etienne

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiæ Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. FRADETTE Louis, Ph.D., président

M. SAMSON Réjean, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. MARÉCHAL François, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. TAVARES Jason R., Ph.D., membre

M. SORIN Mikhail, Ph.D., membre

REMERCIEMENTS

En tout premier lieu, il faut souligner que la réalisation de ce doctorat n'aurait pas pu se faire sans l'appui financier d'organismes pleinement engagés dans l'appui de la recherche universitaire. J'aimerais donc chaleureusement remercier le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (Bourse BESC), le Fonds québécois de la recherche sur la nature et les technologies et le ministère des Ressources naturelles du Québec (Bourse A7), la Chaire industrielle CRSNG en assainissement et gestion des sites et la Chaire internationale en analyse du cycle de vie.

J'aimerais ensuite remercier les nombreuses personnes sans qui il n'aurait jamais été possible de compléter ce doctorat.

Il y a d'abord mon directeur Réjean Samson, qui a su fournir le soutien nécessaire et répondre efficacement à mes questionnements, tout en me laissant une grande liberté académique.

Il y a ensuite mon co-directeur François Maréchal, qui m'a généreusement ouvert les portes de son laboratoire, en plus d'avoir fourni des pistes de recherche intéressantes, patienté de nombreuses heures sur Skype, et consacré beaucoup d'énergie à comprendre les détails et à réviser les publications.

L'aide de Lisa Cecchini et de Danielle Guilbault, pour la correction de la langue, a aussi été un élément indispensable.

À cela s'ajoute toute l'équipe du LENI, en particulier Brigitte Gabioud pour les détails administratifs, les étudiants Isabelle Juchli, Martin Gassner, Léda Gerber, Luc Girardin et Raffaele Bolliger. J'ajouterais une mention spéciale pour ce dernier, qui gère bénévolement les problèmes informatiques de tous, parfois même au détriment de ses propres travaux de doctorat.

J'aimerais remercier tous les anciens et nouveaux du CIRAIG, pour l'aide occasionnelle et pour une atmosphère stimulante intellectuellement, mais aussi pour l'esprit de camaraderie qui fait de nos bureaux un endroit agréable où travailler.

Mentionnons aussi deux braves étudiantes ayant accepté de faire leur projet de fin d'étude sur un sujet plutôt rébarbatif : Camille Lanctôt-Downs et Martine Locas.

J'aimerais aussi remercier ma famille et mes amis pour leur soutien indéfectible et leur aide ponctuelle, notamment ma mère, ma sœur et Diana.

Finalement, j'aimerais remercier ceux qui sont trop souvent oubliés dans ce genre de remerciements : toutes ces personnes rencontrées fortuitement, que ce soit à Polytechnique, sur Internet, en conférence ou ailleurs, avec qui les échanges et collaborations ponctuelles ajoutent plein de détails importants à tout projet de recherche. Sans ordre particulier, je pense à : Lutz Meyer, Enrico Sciubba, Joost Vogtländer, Marc Rosen, Adrian Bejan, Rob Bradley, Pierre Desrochers, Chau-Chyun Chen, Habib Khan, Shahriar Amini, Michel Feidt, Mikhail Sorin, Rouzbeh Jafari, Antoine Godefroy, Naomi Brammer, *etc.*

RÉSUMÉ

L'optimisation multicritères de la conception d'un procédé permet d'en minimiser les émissions polluantes et les coûts simultanément. Cela permet de déterminer une série de configurations représentant le meilleur compromis possible entre ces deux objectifs, peu importe leur pondération ultérieure. L'espace de décision peut comprendre des variables de conception, comme le choix de la taille ou de la température d'opération des équipements, et des variables d'approvisionnement, comme le choix d'un fournisseur ayant de meilleures pratiques environnementales plutôt qu'un autre. Pour obtenir le meilleur compromis possible, il faut d'abord définir les fonctions-objectif correctement, ce qui pourrait nécessiter de les considérer dans une perspective du *cycle de vie*. La conception réellement optimale d'un procédé pourrait donc dépendre des impacts environnementaux du cycle de vie de ses intrants.

L'*hypothèse de recherche* de cette thèse est qu'une décision de conception de procédé prise post-optimisation avec analyse du cycle de vie (ACV), comparativement à la décision prise sans ACV, apporte un bénéfice économique et environnemental à long terme dont l'espérance est mesurable, du moins lorsque les contraintes environnementales ne sont pas déjà internalisées dans le coût des intrants mais le seront plutôt entre le moment de la conception et celui de la construction.

L'*objectif général* de recherche de cette thèse est de faire une *validation de principe* de l'intégration de données d'ACV dans un contexte d'optimisation de la conception d'un procédé par simulation informatique, et d'en mesurer le bénéfice pour un cas d'étude. Ce faisant, il est souhaité de développer de nouvelles façons d'utiliser l'ACV.

Le cas d'étude est la conception préliminaire d'un procédé de capture de CO₂ en postcombustion dans une centrale électrique à cycle combiné fonctionnant au gaz naturel. Le procédé en boucle met la fumée refroidie en contact avec un absorbant chimique aqueux qui réagit avec le CO₂, pour ensuite chauffer l'absorbant et libérer le CO₂ concentré qui peut ensuite être injecté dans un aquifère salin en haute mer. Les impacts environnementaux de ce procédé viennent principalement du fait que la désorption consomme de la vapeur qui aurait autrement pu produire davantage d'électricité. Des impacts supplémentaires sont associés au remplacement périodique de l'absorbant, aux fuites de séquestration, ainsi qu'aux infrastructures, à la machinerie et à l'énergie requises pour compresser, assécher, re-compresser, transporter et injecter le CO₂.

La modélisation informatique du cas d'étude comprend un modèle de schéma d'écoulement du procédé incluant la cinétique de la capture, un modèle séparé d'intégration thermique du procédé, un algorithme génétique d'optimisation multicritères, le calcul des fonctions-objectif, et une plate-forme sous-jacente fournie par le Laboratoire d'énergétique industrielle de l'École polytechnique fédérale de Lausanne. L'espace de décision combine des variables de décision continues (par exemple, la pression d'une colonne) et discrètes (par exemple, le branchement d'un écoulement).

Une partie de l'originalité de la démarche est d'explorer simultanément de nombreuses configurations d'écoulement et d'échangeurs de chaleur grâce à la plate-forme utilisée. Un objectif secondaire de recherche est donc de contribuer à l'état de l'art de la conception des procédés de capture de CO₂ en milieu aqueux, particulièrement au niveau de l'intégration thermique.

La *principale originalité de la démarche* est toutefois de comparer la prise de décisions en considérant toujours plusieurs façons de mesurer les impacts environnementaux avec ou sans l'ACV. Cela permet de mesurer la contribution de l'ACV elle-même pour la prise de décisions, mais aussi l'importance des impacts environnementaux spécifiques à chaque intrant, qu'il s'agisse de gaz naturel, d'acier, d'absorbant, ou d'un service de transport et de séquestration du CO₂, ou encore spécifiques à chaque substance émise, qu'il s'agisse du CO₂ lui-même, des autres gaz à effet de serre ou d'autres polluants.

Les *principaux résultats* de ce travail sont que le coût de la capture du CO₂, par unité de potentiel de réchauffement global évité, augmente d'environ 3 % lorsqu'on considère les impacts dans une perspective du cycle de vie, et que c'est le CO₂ lui-même, émis par les producteurs de gaz naturel et les transporteurs de CO₂, qui contribue principalement à cette différence. Ainsi, l'ACV peut mener à de meilleures décisions dans plusieurs circonstances, en favorisant l'efficacité énergétique et la substitution de combustibles biogéniques comme le gaz naturel synthétique du bois gazéifié, et en décidant d'encourager les fournisseurs à réduire leurs propres émissions. Dans le cas précis où une taxe anticipée sur le CO₂ est tout juste suffisante pour donner l'impression que la capture est rentable, alors qu'une évaluation détaillée de la même taxe chez les fournisseurs indique qu'elle n'est pas rentable, le recours à l'ACV mène alors à la décision de payer la taxe plutôt que de capturer le CO₂, pour un gain d'environ 0,64 \$/MWh attribuable à l'ACV, validant ainsi l'hypothèse de recherche.

Les conclusions techniques, économiques et environnementales découlant de ces résultats sont détaillées dans trois articles soumis avec cette thèse, respectivement.

Quelques observations originales sur le plan technique répondent à l'objectif secondaire de recherche. En particulier, il pourrait être avantageux d'utiliser la chaleur de l'absorbant de CO₂ appauvri pour générer de la vapeur, ce qui permettrait de simplifier le désorbeur. Aussi, les résultats donnent des valeurs optimales relativement élevées pour la largeur de l'absorbant, la charge nette de l'absorbant et le taux de capture. Cela porte à croire que les auteurs précédents n'ont pas pu arriver à un optimum global parce qu'ils ont utilisé un nombre insuffisant de variables de décision et parce que leur fonction-objectif, minimiser la consommation de vapeur, est inadéquate. Cependant, ces idées restent à valider avec un modèle plus détaillé.

Le *principal apport aux connaissances* de cette thèse consiste en une nouvelle méthodologie d'*optimisation du cycle de vie* qui combine l'ACV et l'analyse des coûts du cycle de vie. Elle permet d'optimiser la conception d'un procédé tout en considérant que les fournisseurs vont optimiser eux-mêmes leurs émissions, sous la pression soit de nouvelles taxes, soit d'une politique d'approvisionnement à déterminer plus tard. Son originalité repose sur une pondération des émissions des fournisseurs selon leur coût d'évitement correspondant à un mélange optimal de mesures de prévention et de compensation. Cette méthodologie est la seule permettant une conception globalement optimale, selon la démonstration fournie dans cette thèse, qui suggère également que la validité de l'approche s'étend à toutes les décisions de conception en général.

L'analyse des coûts d'évitement de 3850 processus élémentaires d'une base de données d'ACV démontre que pour une très large majorité de processus, qualifiables d'*énergivores*, les coûts d'évitement des substances autres que le CO₂ sont négligeables par rapport aux autres coûts. Comme les coûts non-environnementaux représentent indirectement des *opportunités d'évitement d'impacts ailleurs*, il est souvent préférable, même d'un point de vue strictement environnemental, d'utiliser une conception de faible coût mais en incitant (monétairement) les fournisseurs à prévenir ou à compenser leurs émissions, plutôt que d'utiliser la conception de faibles impacts selon l'ACV sans égard aux coûts. En fait, lorsque la totalité des intrants d'un procédé sont *énergivores*, la conception optimale est simplement celle qui minimise les coûts du cycle de vie, incluant les futures taxes indirectes sur le CO₂ que l'ACV permet d'estimer pour chaque intrant.

ABSTRACT

Multi-objective process design optimization makes it possible to simultaneously minimize the polluting emissions and the costs of a process, determining a set of configurations that represents the best possible compromise between these two objectives, regardless of their future weighting. The decision space may include design variables such as equipment size or operating temperature and procurement variables such as the choice of a supplier with better environmental practices than another. In order to obtain the best possible compromise, the objective functions must be correctly defined in the first place – a process that may require considering them in a *life cycle* perspective. The truly optimal design of a process could thus depend on the life cycle environmental impacts of all its inputs.

The *research hypothesis* outlined in this dissertation advances that a process design decision taken post-optimization with life cycle assessment (LCA), as compared to the decision taken without LCA, brings a long-term economic and environmental benefit with a measurable expectation, at least when environmental constraints have not been internalized in input prices yet, but will be internalized between the design phase and the construction phase.

The *general research objective* is therefore to set out a *proof of concept* of LCA data integration into a process design optimization context through computer simulation and then to measure the benefits for a case study, with a view to develop new ways of using LCA.

The case study involves the preliminary design of a post-combustion CO₂ capture process in a natural gas combined cycle power plant. The closed-loop process puts cold flue gas in contact with an aqueous chemical absorbent that reacts with the CO₂, after which the absorbent is heated to release concentrated CO₂ that can later be injected into a saline aquifer at sea. The environmental impacts of the process stem in majority from the stripper consumption of steam that would otherwise produce more electricity. Additional impacts are generated by make-up absorbent production and by sequestration leaks, as well as by the infrastructure, the machinery and the energy required to compress, dry out, recompress, transport and inject the CO₂.

Computer modeling of the case study includes a process flow-sheeting model that accounts for CO₂ capture kinetics, a separate thermal integration model, a genetic multi-objective optimization algorithm, the calculation of objective functions as well as an underlying platform provided by

the Industrial Energy Systems Laboratory of École polytechnique fédérale de Lausanne. The decision space combines continuous (e.g. a column operating pressure) and discrete variables (e.g. the branching of a flow).

Part of the originality of the approach is that it concurrently explores several absorbent flow and heat exchanger configurations using the unique capabilities of the platform. A secondary research objective is therefore to contribute to the state of the art in CO₂ capture process design, especially as it pertains to thermal integration with the power plant steam cycle.

However, the *originality of the approach* is mainly driven by the fact that it compares decisions made by considering several ways of measuring the environmental impacts, with and without LCA, thus making it possible to assess the contribution of LCA itself for decision-making as well as the significance of the environmental impacts specific to each input (e.g. natural gas, steel, absorbent, or CO₂ transport and sequestration services), or specific to each substance emitted (e.g. CO₂, other greenhouse gases, or other pollutants).

The *main results* of the research are that the CO₂ capture costs, per unit of avoided global warming potential, increase by approximately 3% when considering impacts in a life cycle perspective and that it is the CO₂ released by natural gas producers and CO₂ transporters that largely contribute to the increase. LCA can therefore lead to better decision-making in several circumstances by fostering energy efficiency and the substitution of biogenic fuels such as synthetic natural gas from wood gasification as well as by choosing to incite suppliers to reduce their emissions. In the specific case in which an anticipated CO₂ tax is just enough to give the impression that capture is profitable while a detailed assessment of the same tax as paid by suppliers indicates that it is not, LCA will support the decision to pay the tax rather than capture the CO₂, for a net gain of some \$0.64/MWh attributable to the LCA, therefore validating the research hypothesis.

The technical, economic and environmental conclusions drawn from these results are detailed in the three articles submitted with this dissertation, respectively.

Certain novel technical observations meet the secondary research objective. More specifically, it may be advantageous to use the lean CO₂ absorbent heat to generate steam, simplifying stripper design. Also, results include relatively high optimal values for the absorber width, the net absorbent loading and the overall capture rate, leading one to believe that other authors have not

yet been able to reach a global optimum because they used too few decision variables and they relied on the inadequate objective function of minimizing steam consumption. However, these ideas must still be validated using a more detailed model including the individual cost of the main heat exchangers.

This dissertation's main *contribution to scientific knowledge* consists in a new *life cycle optimization* methodology that combines life cycle assessment and life cycle costing, making it possible to optimize a process design while considering that suppliers will also optimize their emissions themselves because of future taxes or voluntarily through a procurement policy to be determined at a later date. Its originality is based on a method for weighting supply-chain emissions according to the avoidance cost of an optimal combination of prevention and compensation measures. According to the theoretical demonstration set out in the dissertation, this methodology is the only approach that makes it possible to determine a globally optimal design, and it is suggested that its validity extends to all design decision-making in general.

The avoidance costs of a batch of 3 850 elementary processes from an LCA database show that, for the vast majority of these processes defined as *energy-intensive*, the avoidance costs of non-CO₂ substances are negligible as compared to all other costs. Since non-environmental costs indirectly represent *avoidance opportunities elsewhere*, it is often preferable – even from a strictly environmental perspective – to use a low-cost design and incite suppliers (using money) to prevent or compensate their emissions rather than rely on a design with low-impacts according to LCA but without considering costs. In fact, when all inputs of a process are *energy-intensive*, the optimal process design is simply the one that minimizes all life cycle costs, including indirect future CO₂ taxes that LCA can estimate for each input.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	III
RÉSUMÉ	V
ABSTRACT	VIII
TABLE DES MATIÈRES	XI
LISTE DES TABLEAUX.....	XV
LISTE DES FIGURES.....	XVI
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	XVIII
LISTE DES ANNEXES.....	XX
INTRODUCTION.....	1
0.1 Problématique.....	7
0.2 Hypothèse, objectifs et originalité.....	14
CHAPITRE 1. REVUE DE LITTÉRATURE	17
1.1 Environnement de simulation.....	24
1.1.1 Optimisation de la centrale thermique	24
1.1.2 Simulation du procédé de capture	26
1.2 Analyse du cycle de vie du procédé de capture	30
CHAPITRE 2. PRÉSENTATION DES ÉTAPES DE TRAVAIL	32
2.1 Structure de la thèse	34
2.2 Justification de la structure de la thèse.....	35
CHAPITRE 3. MÉTHODOLOGIE DE SIMULATION.....	36
3.1 Configuration d' <i>ASPEN Plus</i>	38
3.1.1 Nécessité de simuler la cinétique de la capture de CO ₂	38
3.1.2 Commentaires sur les niveaux de convergence.....	39
3.1.3 Configuration générale d' <i>ASPEN Plus</i>	39
3.1.4 Diagramme d'écoulement sous <i>ASPEN Plus</i> 2004.1	45
3.1.5 Diagramme d'écoulement sous <i>ASPEN Plus</i> 2006.5	47
3.1.6 Interface <i>MATLAB-ASPEN Plus</i>	49
3.2 Configuration d' <i>EASY</i>	52
3.2.1 Optimisation du cycle vapeur.....	52

3.2.2	Configuration générale d' <i>EASY</i>	55
3.2.3	Exécution manuelle d' <i>EASY</i>	58
3.3	Configuration de <i>MATLAB</i>	59
3.3.1	Fichier « front-end ».....	59
3.3.2	Fichier « pré »	60
3.3.3	Fichier « post ».....	61
3.4	Exemple d'optimisation	63
3.5	Génération de données techniques (premier article)	65
3.5.1	Modèle économique	66
3.5.2	Modèle du cycle de vie.....	71
3.6	Génération de données économiques (deuxième article).....	79
3.7	Génération de données environnementales (troisième article)	84
CHAPITRE 4. OPTIMISATION MULTICRITÈRES DE LA CONCEPTION D'UNE CENTRALE NGCC AVEC CAPTURE DE CO ₂ DANS UNE PERSPECTIVE DE CYCLE DE VIE (RÉSULTATS TECHNIQUES).....		86
4.1	Présentation de l'article	86
4.2	Multi-Objective Design Optimization of a Natural Gas Combined Cycle with Carbon Dioxide Capture in a Life Cycle Perspective	86
4.2.1	Introduction	87
4.2.2	Method	88
4.2.3	Case study	91
4.2.4	Optimization results	97
4.2.5	Discussion	101
4.2.6	Conclusion.....	105
4.2.7	Acknowledgements	106
4.2.8	References	107
4.3	Résultats complémentaires	109
4.3.1	Variation du taux de recirculation dans la turbine à gaz	109
4.3.2	Réseau explicite d'échangeurs de chaleur.....	111
4.3.3	Conception pour la capture intermittente de CO ₂	114

CHAPITRE 5. ÉMISSIONS OPTIMALES DE GAZ À EFFET DE SERRE DANS LES CENTRALES NGCC EN INTÉGRANT L'ANALYSE DU CYCLE DE VIE (RÉSULTATS ÉCONOMIQUES)	117
5.1 Présentation de l'article	117
5.2 Optimal Greenhouse Gas Emissions in NGCC Plants Integrating Life Cycle Assessment	117
5.2.1 Introduction	119
5.2.2 Method	121
5.2.3 Results and discussion	133
5.2.4 Conclusion	141
5.2.5 Acknowledgements	143
5.2.6 References	143
5.3 Résultats complémentaires	145
5.3.1 Relation entre la surestimation des émissions inévitables et les pertes potentielles qui en découlent	145
5.3.2 Application au choix du taux de capture	148
CHAPITRE 6. OPTIMISATION DU CYCLE DE VIE DES PROCÉDÉS ÉNERGIVORES À L'AIDE DES ÉCO-COÛTS (RÉSULTATS ENVIRONNEMENTAUX)	150
6.1 Présentation de l'article	150
6.2 Life Cycle Optimization of Energy-Intensive Processes Using Eco-costs	150
6.2.1 Introduction	152
6.2.2 Theory	154
6.2.3 Methods	160
6.2.4 Results	167
6.2.5 Discussion	173
6.2.6 Conclusion	173
6.2.7 Recommendations	175
6.2.8 Acknowledgements	175
CHAPITRE 7. DISCUSSION GÉNÉRALE	176
7.1 Capture de CO ₂ en postcombustion	177
7.1.1 Capturer le CO ₂ ou l'éviter autrement ?	177

7.1.2	Capture postcombustion vs autres méthodes de capture	180
7.1.3	Perspective environnementale	185
7.1.4	Perspective méthodologique	186
7.2	Utilisation de l'ACV en contexte d'optimisation	188
7.2.1	Bénéfice économique de l'ACV	189
7.2.2	Le poids relatif des différentes émissions et catégories d'impacts	191
7.2.3	Optimisation avec ACV, mais avec ou sans l'approche multicritères ?	195
7.2.4	L'importance relative des coûts et des éco-coûts	197
7.2.5	Perspective méthodologique	199
7.3	ACV, optimisation et choix environnemental	202
7.3.1	L'ACV et la prise de décisions	202
7.3.2	L'ACV et la sensibilisation	207
CONCLUSION		210
BIBLIOGRAPHIE		217
ANNEXES		226

LISTE DES TABLEAUX

Table 3-1 : Variables de l'interface <i>MATLAB-ASPEN Plus</i> pour les simulations publiées.....	51
Table 3-2 : Classification des processus du vecteur de demande finale dans l'ACV	74
Table 4-1 : Major decision variables and results.....	90
Table 4-2 : Technical and economic parameters for the NGCC power plant	92
Table 4-3 : Life cycle GWP intensity of NGCC power plant inputs	96
Table 4-4 : Additional details on the <i>b2</i> and <i>b5</i> designs	99
Table 5-1 : Economic and performance parameters for the NGCC power plant and the SNG plants [12,16,17].....	125
Table 5-2 : Life-cycle GWP of the material inputs [10,12], their cost, and life-cycle GWP taxes (at \$62.30/ton CO _{2eq}) as a fraction of their cost	126
Table 5-3 : Optimal system configurations, expressed as effective capture rates at each plant, by SNG plant type and by GWP tax level.....	135
Table 5-4 : LCA sensitivity analysis for <i>mac_{CCS}</i> (based on 90% capture).....	141
Table 5-5 : Contribution des capitaux et du combustible au coût d'évitement de six configurations	148
Table 6-1 : Input flows per MWh of net electricity output (reference flows).....	161
Table 6-2 : LCA and eco-costs summary (bold = highest in category)	168
Table 6-3 : Avoidance costs for major pollutants (bold when maximum is lower than eco-cost)	170

LISTE DES FIGURES

Figure 0.1 : Un compromis environnemental illustrant la Pareto-optimalité.....	2
Figure 0.2 : Coûts et impacts du cycle de vie de l'isolant d'une maison en fonction de l'épaisseur	4
Figure 0.3 : Déviation de l'optimum en ajoutant le cycle de vie	12
Figure 1.1: Absorption de CO ₂ à l'interface gaz-liquide, adapté de Freguia (2002)	27
Figure 2.1: Données, étapes d'analyse et publications du projet	32
Figure 3.1: Processus itératif de simulation	37
Figure 3.2: Diagramme d'écoulement définitif	48
Figure 3.3: Courbe composite intégrée de Carnot et générateur de vapeur correspondant, pour une centrale NGCC sans capture de CO ₂ , adapté de (Smith, Polukort, Maslak, Jones, & Gardiner, 2001)	53
Figure 3.4: Courbe Pareto-optimale avec usine de SNG de taille variable mais sans capture.....	80
Figure 4.1 : Flow-sheeting model used to simulate multi-pressure, split-fraction CO ₂ capture and extract information about heat and work requirements and the effective capture rate.	93
Figure 4.2 : Gas cycle showing by-pass, direct contact cooler (DCC), heat recovery steam generator (HRSG) and flue gas recirculation.	94
Figure 4.3 : Integrated Carnot composite curve for an NGCC power plant with CO ₂ capture. (Steam pressures indicated in bar.)	95
Figure 4.4 : Pareto-optimal frontier. (Life cycle GWP is the sum of on-site and off-site GWP.) .	98
Figure 4.5 : C_{CO_2} as a function of the local capture rate is higher with LCA than without because CO ₂ capture involves higher off-site emissions per MWh.....	100
Figure 4.6 : Courbes Pareto-optimales avec ACV pour quatre scénarios de recirculation	111
Figure 4.7 : Réseau explicite d'échangeurs de chaleur, pour un désorbeur à deux pressions avec division de l'absorbant riche	113
Figure 4.8 : Système NGCC d'environ 700 MW avec capture de CO ₂ , pouvant passer à 800 MW en interrompant momentanément la capture, adapté de (Smith, Polukort, Maslak, Jones, & Gardiner, 2001)	116
Figure 5.1 : Block diagram of energy system with CO ₂ capture (shaded areas represent the decision space)	122

Figure 5.2 : Information flows within the simulation model (shaded area represents this study)	123
Figure 5.3 : Pareto-optimal configurations for the NGCC power plant with 33 CO ₂ capture rates	124
Figure 5.4 : Pareto-optimal configurations for the FNG upstream emissions with 9 levels of CO ₂ and methane emissions (all background and nil without LCA)	128
Figure 5.5 : Pareto-optimal configurations for the high-cost SNG plant with 18 CO ₂ capture rates	129
Figure 5.6 : Pareto-optimal system configurations with and without fuel mixing	134
Figure 5.7 : Specific GWP vs. electricity cost, including a \$61.50/ton CO _{2eq} tax	136
Figure 5.8 : Minimum electricity cost, including GWP taxes or credits (also shown separately), as a function of the tax	136
Figure 5.9 : Detail of the technological transition to CO ₂ capture (no SNG)	138
Figure 5.10 : Detail of the technological transition to SNG (large plant)	138
Figure 5.11 : Cost of wood for the break-even SNG producer, as a function of the GWP tax	139
Figure 5.12 : Modèle du bénéfice ou de la perte reliée à la surestimation ou la sous-estimation des émissions en arrière-plan	146
Figure 6.1 : Relationship between avoidance costs (w_{ik}) and hypothetical prevention costs	155
Figure 6.2 : Hypothetical multi-objective optimization result	159
Figure 6.3 : Estimated prevention cost of CH ₄ emissions in the natural gas industry sector	165
Figure 6.4 : LCA results for four NGCC power plant scenarios expressed as eco-costs	171
Figure 6.5 : Distribution of eco-costs over 3 850 <i>ecoinvent v2.0</i> processes	172
Figure 7.1 : Choix environnemental d'un savon	204

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

ACCV	Analyse des coûts du cycle de vie
ACV	Analyse du cycle de vie
ACV-A	Analyse du cycle de vie attributionnelle
ACV-C	Analyse du cycle de vie conséquentielle
ASPEN Plus	Logiciel de simulation d'écoulement d'un procédé
Belsim Vali	Logiciel de simulation d'écoulement d'un procédé
c	Coût
CIRAIG	Centre interuniversitaire de recherche sur le cycle de vie des produits, procédés et services
CML	Méthode d'évaluation des impacts environnementaux développée aux Pays-Bas (<i>Centrum voor Milieukunde Leiden</i>)
CO ₂ éq	Dioxyde de carbone équivalent (gaz à effet de serre)
CYGIN	Émulateur pour exécuter certains logiciels sous <i>Microsoft Windows</i>
DALY	Unité de dommages à la santé humaine (<i>disability-adjusted life year</i>)
DTmin	Paramètre de simulation relié à l'écart minimal de température dans un groupe d'échangeurs de chaleur
EASY	Logiciel de simulation d'intégration des procédés (<i>energy systems analysis and synthesis</i>)
EcoCosts2007	Méthode de calcul des éco-coûts dans SimaPro
Éco-coût	Coût virtuel de prévention de l'émission d'une substance
ECOS2008	Conférence en 2008 (<i>Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems</i>)
GWP	Potentiel de réchauffement climatique d'un gaz à effet de serre (<i>global warming potential</i>)
KEMEA	Modèle <i>ASPEN Plus</i> des réactions du 2-aminoéthanol
ISO	<i>International Organization for Standardization</i>
LENI	Laboratoire d'énergétique industrielle de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne
LeniWiki	Documentation électronique du LENI à l'adresse http://leniwiki.epfl.ch

LP	Vapeur à une pression d'environ 3 bar (<i>low pressure</i>)
MATLAB	Logiciel de programmation et de calcul matriciel
MEA	2-aminoéthanol (absorbant pour le CO ₂)
MW _{th}	Mégawatt thermique
NGCC	Cycle combiné au gaz naturel dans une centrale thermique (<i>natural gas combined cycle</i>)
NRTL	Modèle de la réaction de capture de CO ₂ (<i>non-random two-liquid</i>)
O&M	Opération et entretien (<i>operation and maintenance</i>)
OSMOSE	Plate-forme logicielle d'optimisation sous <i>MATLAB</i> (optimisation multi-objectifs de systèmes énergétiques intégrés)
p	Pression
QMOO	Algorithme d'optimisation évolutif multicritères intégré à la plateforme <i>OSMOSE</i>
R	Constante des gaz parfaits (8,314 J mol ⁻¹ K ⁻¹)
SimaPro	Logiciel d'analyse du cycle de vie
SNG	Méthane synthétique provenant du bois (<i>synthetic natural gas</i>)
SRI	La compagnie <i>SRI International Consulting</i>
T	Température
t	Taxe sur les émissions exprimée en pourcentage du coût total
TXTFLEX	Utilitaire de conversion de fichier utilisé par <i>OSMOSE</i>
VLP	Vapeur à une pression d'environ 1 bar (<i>very low pressure</i>)
W	Travail
w	Coût d'évitement et/ou facteur de pondération
x	Fraction d'une série d'émissions qui a été prévenue

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE 1. LES PROBLÈMES ÉPISTÉMOLOGIQUES DES SCIENCES DU CHOIX ENVIRONNEMENTAL	226
A1.1 Conséquences du dualisme méthodologique.....	227
A1.1.1 La décision humaine individuelle comme singularité.....	227
A1.1.2 Les phénomènes de marché et leur imputation	229
A1.1.3 Empiricisme et rationalisme.....	232
A1.1.4 Préférences affirmées et démontrées	233
A1.1.5 L’intersubjectivité des problèmes environnementaux.....	235
A1.2 Méthodologie du choix environnemental.....	238
ANNEXE 2. LISTE DE COMMUNICATIONS.....	242
A2.1 Article dans le chapitre 4 (publié, avec comité de lecture)	242
A2.2 Article dans le chapitre 5 (publié, avec comité de lecture)	242
A2.3 Article dans le chapitre 6 (soumis, avec comité de lecture).....	242
A2.4 Compte rendu de conférence dans l’annexe 3 (comité de lecture limité)	242
A2.5 Comptes rendus de conférence (comité de lecture limité)	242
A2.6 Présentations dans les conférences internationales	243
A2.7 Affiche dans une conférence	243
A2.8 Affiches et présentations devant les partenaires du projet	244
ANNEXE 3. RÉSULTATS PRÉLIMINAIRES PRÉSENTÉS À ECOS2008.....	245
A3.1 Présentation de l’article	245
A3.2 Multi-objective Design Optimization of a NGCC Power Plant with CO ₂ Capture Using Life Cycle Assessment Results	245
A3.2.1 Introduction	246
A3.2.2 Method.....	247
A3.2.3 Case study.....	248
A3.2.4 Results	253
A3.2.5 Conclusion.....	255
A3.2.6 Acknowledgements	256
A3.2.7 References	256

INTRODUCTION

Depuis la signature du protocole de Kyoto en 1997, la diminution des émissions de gaz à effet de serre comme le CO₂ est devenue un enjeu international et géopolitique majeur. Chaque pays pourrait être contraint un jour de respecter une cible nationale d'émissions. Plusieurs pays pourraient alors créer un marché interne de permis échangeables ou instaurer une taxe sur les émissions. La principale différence entre les deux est que les permis garantissent un niveau d'émissions précis, mais à un prix inconnu, alors qu'une taxe permet de connaître la valeur monétaire accordée aux émissions, mais pas le niveau qui sera atteint. Les deux moyens sont généralement reconnus comme économiquement efficaces, c'est-à-dire que la taxe permet un minimum d'émissions pour ce qu'elle coûte, alors que les permis permettent d'atteindre un niveau d'émissions donné à un coût minimum. En fait, cette efficacité dépend de certaines conditions, notamment que toute taxe créditée et tout permis gratuitement attribué le soient de façon inconditionnelle, même en cas d'arrêt de production (Pezzey, 2003).

Dans tous les cas, lors d'une prise de décision comme la construction d'une usine, il deviendra nécessaire de tenir compte de la valeur économique des émissions futures si on veut faire un choix qui va minimiser les coûts totaux. Même si cette valeur est inconnue au moment de la conception, des outils appropriés permettent d'en prendre compte. Par exemple, il est possible de comparer différentes façons de construire l'usine, et ensuite voir laquelle est avantageuse pour différents intervalles de valeur monétaire accordée aux impacts environnementaux futurs. Cela revient à un problème d'optimisation, comme la plupart des choix environnementaux d'ailleurs, puisqu'il est généralement question de prendre une décision de manière à participer au mieux à la minimisation des impacts environnementaux globalement. La Fig.0.1 illustre la situation.

Sur la Fig.0.1, chaque point sur le trait plein correspond à un choix (variable continue) exprimé selon deux critères au sens très large : un sacrifice quelconque et les impacts environnementaux. Cela peut représenter le choix d'habiter à une certaine distance de son lieu de travail, l'épaisseur de l'isolant d'une maison, ou le choix parmi des milliers de configurations possibles d'une usine à construire. Le rayon de courbure du trait indique que ce genre de choix est associé à des rendements décroissants.

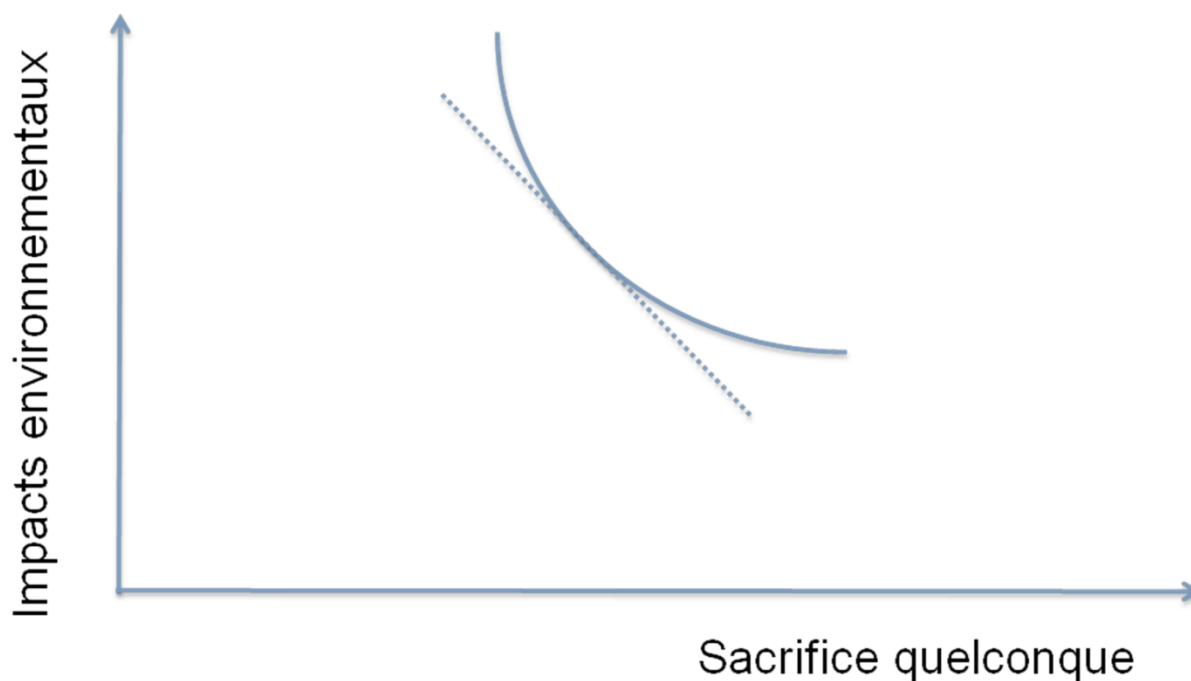


Figure 0.1 : Un compromis environnemental illustrant la Pareto-optimalité

Dans le cas particulier où aucune décision ne peut mener à un point se trouvant en bas et à gauche des points déjà sur le trait plein, ce dernier relie alors l'ensemble des meilleurs choix possibles en termes d'obtenir les moindres impacts environnementaux pour un sacrifice donné. Par définition, le trait forme alors la courbe Pareto-optimale d'une optimisation multicritères, ce qui est supposé être le cas sur la Fig.0.1.

Toujours sur la Fig.0.1, le trait pointillé correspond à la possibilité de réduire les impacts environnementaux *ailleurs*. Comme ce trait pointillé correspond à un domaine de choix beaucoup plus vaste, son rayon de courbure est presque infini, comme une droite. La juxtaposition des deux courbes illustre qu'il est parfois avantageux de réduire les impacts chez soi, parfois ailleurs. Par exemple, pour capturer du CO₂ en plantant des arbres, il se peut que le même sacrifice permette de planter trois fois plus d'arbres chez Pierre que chez Jacques, selon la nature du terrain. La capture d'une tonne de CO₂ chez Jacques a donc une *valeur d'échange* équivalente à la capture de trois tonnes chez Pierre, indépendamment de tout système juridique, politique, ou monétaire. Étant donné les rendements décroissants associés au trait plein, il existe toujours un point où le même sacrifice permet davantage de réduction d'impacts *ailleurs* qu'il en permet chez soi.

Sur la Fig.0.1, la meilleure combinaison possible entre la réduction d'impacts chez soi et ailleurs se situe au point de contact. Pour tout sacrifice supplémentaire, seules les réductions ailleurs permettent encore de minimiser les impacts totaux. Ce point de contact indique donc l'unique conception optimale, celle qui serait obtenue par l'optimisation d'un seul critère, soit le sacrifice total pour un impact donné soit l'impact pour un sacrifice donné, *mais en considérant l'opportunité d'éviter l'impact ailleurs comme faisant partie de l'espace de décision*.

L'intérêt de connaître les autres points sur la courbe Pareto-optimale, et donc de procéder à une optimisation multicritères, vient du fait que la pente du trait pointillé peut être inconnue. Tous les points sur le trait plein correspondent alors potentiellement à l'unique meilleur choix, d'où l'intérêt de tous les connaître. De plus, la courbe Pareto-optimale permet d'observer quel compromis a été nécessaire pour arriver au point choisi. On procède donc à une optimisation multicritère afin de générer une vue d'ensemble des meilleurs choix possibles. Pour ce faire, il faut un algorithme capable de retenir toutes les solutions Pareto-optimales.

Sur la Fig.0.1, on remarque que le terme *sacrifice quelconque* est interchangeable avec *coût d'opportunité* puisque les deux se ramènent à la valeur d'échange. L'utilisation d'unités monétaires n'enlève donc rien à la généralité du propos. La pente inconnue du trait pointillé est un coût marginal d'évitement et équivaudra au prix d'une taxe ou d'un permis échangeable le cas échéant. Ainsi, la valeur monétaire des émissions (taxes ou permis) indique toujours l'opportunité d'éviter des impacts *ailleurs*, qui fait toujours *implicitement* partie de l'espace de décision. L'équivalence entre la pente du trait plein et celle du trait pointillé veut donc dire que la décision localement optimale correspond à un *coût d'évitement marginal* égal à la valeur monétaire des émissions, ce qui fait en sorte de minimiser le coût total incluant taxes et permis.

La raison pour laquelle la question du choix environnemental se ramène à la valeur monétaire des coûts d'évitement dépasse donc le simple discours idéologique : « l'économie fait partie du système et il faut se compromettre avec ». Fondamentalement, c'est plutôt une exigence de la réalité intersubjective dans laquelle les problèmes environnementaux émergent. Ce sujet est détaillé à l'annexe 1, qui analyse, entre autres, le contexte épistémologique du choix environnemental. Ce qu'il faut retenir à ce point-ci, c'est que *même d'un point de vue strictement environnemental*, il n'y a rien d'avantageux à réduire ses propres impacts environnementaux au-delà du point où cela sacrifie l'opportunité de réduire davantage d'impacts ailleurs.

Prenons le cas de l'isolation d'une maison et imaginons que ses coûts et ses impacts environnementaux soient proportionnels à $(R + 900 / R + C)$ et à $(R + 8100 / R + C)$ respectivement, où C est une constante et R est une variable reliée à l'épaisseur et à la résistance thermique de l'isolant. La différence entre les facteurs 900 et 8100 illustre une situation somme toute assez réaliste où les fournisseurs de chauffage, toutes proportions gardées (par unité monétaire), sont neuf fois plus polluants que les autres fournisseurs incluant le fabricant de l'isolant. En utilisant ces équations hypothétiques, la Fig.0.1 prend la forme hyperbolique donnée à la Fig.0.2.

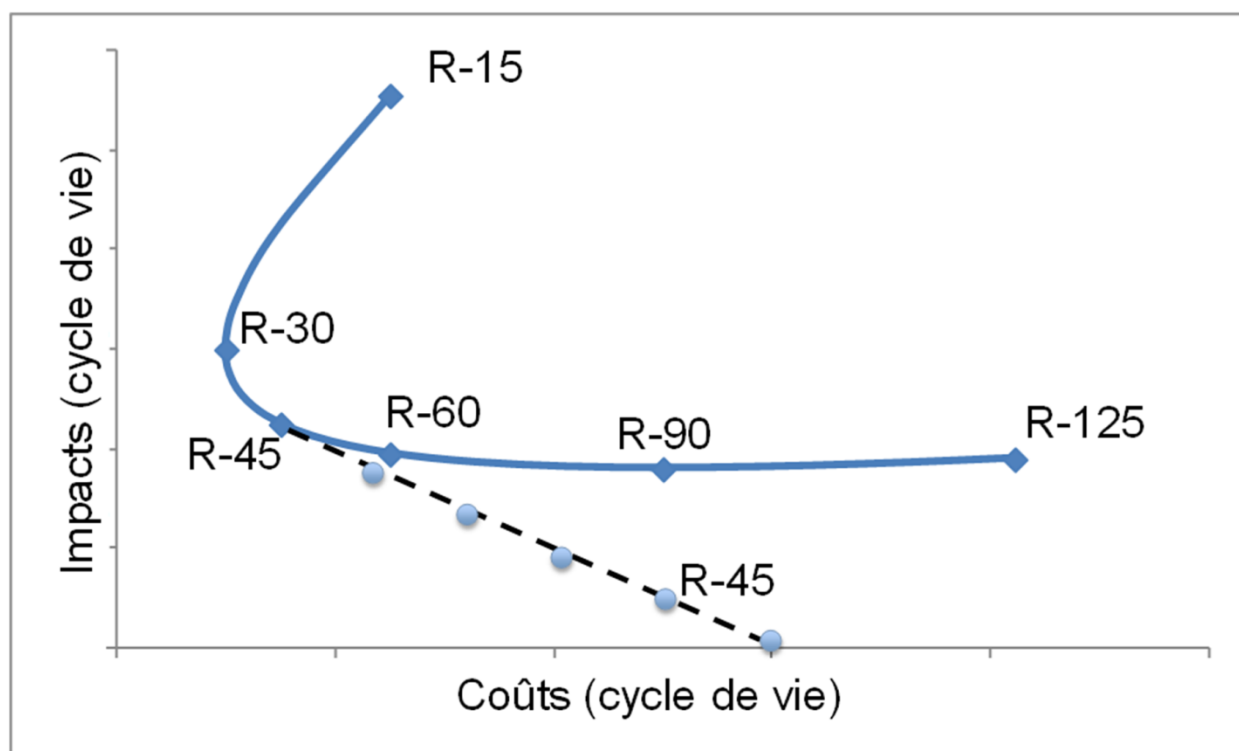


Figure 0.2 : Coûts et impacts du cycle de vie de l'isolant d'une maison en fonction de l'épaisseur

Sur la Fig.0.2, seules les épaisseurs d'isolant correspondant à une valeur de R entre 30 et 90 sont Pareto-optimales : aucune autre solution se trouve à la fois en bas et à gauche de ces points. Par contre, en l'absence de pondération entre les deux critères d'optimisation (impacts et coûts), il est impossible de choisir une épaisseur finale entre 30 (celle qui coûte le moins cher) et 90 (celle qui a le moins d'impacts et apparaît donc superficiellement comme avantageuse sur le plan environnemental). C'est là qu'intervient la ligne pointillée, dont la pente associe un coût à l'évitement des impacts. Si les points le long de cette droite, tous basés sur $R = 45$, sont admis dans l'espace de décision, alors ceux-ci deviennent Pareto-optimaux devant tous les points sur la

courbe initiale. Dans ce cas, la valeur $R = 45$ correspond à l'unique épaisseur optimale, celle qui coûte un minimum en combustible, en laine minérale, en taxes et en permis d'émission au total. Si on veut diminuer encore les impacts, il faut rester le long de la ligne pointillée. Cela implique nécessairement de réduire les impacts *ailleurs* – ce que l'achat d'un permis échangeable permettrait de faire – et non exagérer l'épaisseur de l'isolant, gaspillant ainsi l'opportunité de mieux utiliser la laine minérale et d'autres ressources *ailleurs*.

On remarque que la Fig.0.2 implique que la valeur monétaire des émissions (taxe ou permis) est connue. Dans ce cas, il devient possible d'optimiser un seul critère et d'obtenir directement l'épaisseur optimale ($R = 45$) de l'isolant. C'est plutôt lorsque cette valeur monétaire des émissions est inconnue que l'optimisation multicritères est utile. La pente du trait plein remplace alors la ligne pointillée et indique directement pour quelle valeur monétaire des émissions chaque épaisseur d'isolant (entre $R = 30$ et $R = 90$) est optimale.

Sur la Fig.0.1 ou la Fig.0.2, on peut imaginer deux façons, simple et complexe, de calculer les impacts environnementaux. La plus simple ne considère que les émissions les plus directes, locales, immédiates, accessibles et évidentes. Ce calcul exclut les processus comme la construction des routes, dont les émissions sont reliées au système étudié, mais de loin. Sur la Fig.0.2, un calcul qui exclurait ces émissions lointaines – dites d'*arrière-plan* – pourrait se limiter aux émissions polluantes sortant par la cheminée de la maison. À l'opposé, la façon la plus complexe s'intéresse à tout le cycle de vie du système considéré, couvrant ainsi toute la chaîne d'approvisionnement de chaque intrant du procédé. Sur la Fig.0.2, cela pourrait inclure les émissions des producteurs de combustible et de laine minérale, ainsi que les émissions de leurs propres fournisseurs. L'*analyse du cycle de vie* (ACV) est la méthode standardisée d'évaluation des impacts environnementaux potentiels des produits, procédés et services tout le long de leur chaîne de production, d'utilisation et d'élimination. L'ACV peut comptabiliser des milliers d'émissions grâce à l'utilisation de données *secondaires* provenant de bases de données recensant les émissions moyennes de différents processus élémentaires d'*arrière-plan*. Ainsi, l'ACV d'une maison inclurait les émissions par la cheminée, mais utiliserait aussi une base de données pour ajouter, au minimum, les impacts reliés à la production de combustible et de laine minérale.

La comparaison de ces deux façons, simple et complexe, de calculer les impacts environnementaux, dans un contexte d'optimisation d'un procédé, est au cœur de cette thèse. La façon la

plus complexe (avec ACV) devrait être avantageuse car elle permet d'anticiper les ajustements du prix relatif des intrants qui pourraient être causés par de nouvelles taxes ou de nouveaux permis sur les émissions, et d'agir en conséquence. Il reste à voir si cela apporte un bénéfice mesurable, significatif par rapport aux incertitudes qui entrent dans son calcul, et suffisant pour justifier l'investissement dans la réalisation d'une ACV, particulièrement l'acquisition de données secondaires sur les processus d'arrière-plan. Il reste aussi à voir comment gérer, parmi ces données secondaires, les émissions dont le coût d'évitement est largement inférieur à ce que pourrait être la taxe. Ces émissions peuvent avantageusement être elles-mêmes optimisées. Sur la Fig.0.2 par exemple, si les émissions du producteur de combustible étaient de simples fuites de méthane, il vaudrait peut-être mieux colmater ces fuites plutôt que d'exagérer l'épaisseur de l'isolant dans chaque maison alimentée par ce producteur.

En conclusion, afin de démontrer que $R = 45$ est un meilleur choix que $R = 44$ ou $R = 46$ sur la Fig.0.2, il faut s'assurer de plusieurs choses : d'une part, il faut définir correctement la pente de la ligne pointillée en termes de ce que seront (ou devraient être) les futurs coûts d'évitement des impacts environnementaux; d'autre part, il faut que le calcul des impacts comptabilise correctement les émissions de nombreux fournisseurs anonymes à l'*arrière-plan* et considère bien le fait que ces émissions sont elles-mêmes partiellement évitables sans qu'il soit possible de le vérifier méticuleusement pour chacune. Sans cela, il serait impossible de bien anticiper les taxes qui seront potentiellement refilées par les fournisseurs de combustible et ainsi de choisir l'épaisseur d'isolant offrant le meilleur bénéfice au fil des ans. Toutes ces interrogations sont au cœur de la démarche scientifique dans cette thèse et les méthodes qui y sont développées permettent de répondre quantitativement à ces interrogations pour le cas d'étude d'un système de capture de CO_2 dans une centrale thermique.

D'une façon plus générale, l'optimisation multicritères et l'ACV sont deux outils importants pour l'ingénieur chimiste concepteur de procédés, particulièrement en cette nouvelle ère de *responsabilité élargie du producteur*. Pourtant, l'utilisation combinée de ces outils est un sujet mal exploré; on les utilise sans se demander dans quel *sens* les procédés ainsi conçus sont améliorés. En particulier, cette thèse propose d'examiner en détails comment la façon d'utiliser l'ACV à l'intérieur du calcul d'une fonction-objectif peut affecter les résultats d'une optimisation multicritères, tant en théorie qu'en pratique dans le cas d'étude.

0.1 Problématique

La capture et la séquestration du CO₂ permettent évidemment de réduire la quantité de CO₂ émise par une centrale thermique, mais peuvent aussi engendrer des impacts environnementaux dans d'autres étapes du cycle de vie, y compris par l'émission de CO₂ mais aussi dans d'autres catégories d'impact comme l'acidification aquatique ou l'écotoxicité terrestre. Pour voir jusqu'à quel point tout cela en vaut la peine dans un cas d'étude donné, il faut d'abord tenter d'optimiser la conception de la centrale thermique avec capture en considérant tous ces impacts. Cette thèse s'intéresse donc à la conception d'un système de capture de CO₂ dans une centrale au gaz naturel à cycle combiné (NGCC), en tenant compte de son cycle de vie. Cela permet en quelque sorte de déterminer s'il y a des émissions *ailleurs* qui affectent la prise de décision optimale à propos de la capture de CO₂, y compris la décision d'une configuration interne du procédé.

La Fig.5.1 schématise les principaux éléments d'une centrale NGCC, incluant le système de capture de CO₂ à l'étude et l'utilisation optionnelle d'un combustible biogénique pour éviter encore plus le CO₂. La Fig.4.1 montre les détails du système de capture de CO₂ à l'étude. Ce procédé en boucle met la fumée refroidie en contact avec un absorbant chimique, le 2-aminoéthanol (MEA), qui réagit avec le CO₂ avant d'être chauffé pour libérer le CO₂ concentré. Ce dernier est ensuite comprimé, purifié, transporté par pipeline et finalement injecté dans un aquifère salin, ce qui constitue une séquestration géologique permanente.

L'optimisation du procédé de capture à l'étude peut s'effectuer à plusieurs endroits :

- la configuration de l'écoulement, avec ou sans division de l'absorbant riche ou pauvre, avec désorption à une, deux ou trois pressions, avec ou sans échanges internes de chaleur, *etc.*;
- le choix de l'absorbant, des additifs, des matériaux de construction, du type de garnissage dans les colonnes;
- le diamètre, la hauteur des colonnes, la surface des échangeurs de chaleur;
- les températures, débits, concentrations et pressions tout au long du parcours de l'absorbant;

- la configuration du cycle gaz, particulièrement la recirculation des fumées pour en réduire le volume;
- les niveaux de pression du réseau vapeur, les points d'extraction dans la turbine à vapeur, la configuration du réseau d'échangeurs de chaleur;
- le choix des étapes de purification des fumées avant et après l'absorption du CO₂, et de purification du CO₂ après désorption;
- le choix du site d'injection du CO₂ et des infrastructures pour s'y rendre;
- le recours à un combustible biogénique en totalité ou en partie, comme le gaz naturel synthétique (SNG) produit par la gazéification et la méthanisation du bois, afin de bonifier la capture de CO₂ en évitant encore plus de CO₂ ;
- le choix des fournisseurs, pour chaque intrant donné, en fonction de leurs propres émissions, et donc de leur propre exposition à une future contrainte sur le CO₂ (taxe, permis d'émissions, *etc.*)¹, afin de réduire le total des émissions de CO₂ et d'autres gaz à effet de serre attribuables à la centrale NGCC.

Ces choix ne peuvent pas tous être faits en même temps. En particulier, des choix fondamentaux, comme le nombre de pressions de vapeur, doivent être faits avant de configurer explicitement le réseau d'échangeurs de chaleur, alors que d'autres choix plus raffinés ne peuvent être faits encore qu'après. Un exemple de choix raffiné – qui devra attendre – serait la fraction optimale d'absorbant qui doit être divisé entre deux échangeurs de chaleur car ils n'entreront pas le désorbeur à la même hauteur. La valeur optimale de cette fraction peut dépendre du coût marginal par unité de surface de chaque échangeur et ne peut donc pas être évaluée avec un réseau implicite d'échangeurs dans lequel le coût moyen des échangeurs est supposé égal au coût de l'échangeur moyen. Cela oblige un calcul basé sur le coût individuel de chaque échangeur et donc l'utilisation d'un réseau explicite.

¹ Comme c'est une contrainte sur le CO₂ qui justifie l'existence du procédé de capture de CO₂, l'application de cette même contrainte aux fournisseurs n'est pas un exercice théorique, mais bien une nécessité par hypothèse dans le cadre de ce projet. La capture de CO₂ est donc un bon choix de procédé pour étudier tout le long de cette thèse. Toutefois, il ne faut pas perdre de vue la généralité du propos, qui s'applique à tous les procédés, même ceux qui n'ont pas d'émissions.

Aussi, l'effet de tous les choix énumérés précédemment ne peut pas être simulé avec un seul logiciel. Certains choix demandant un modèle détaillé de la cinétique d'une réaction; d'autres, un modèle de turbine vapeur; d'autres encore, un modèle du cycle de vie, *etc.* De plus, certains choix sont plutôt indépendants, comme le choix d'une géométrie de garnissage ou d'une technologie de dessiccation du CO₂. D'autres choix sont interdépendants, comme la pression du désorbeur et celle de l'extraction de vapeur. Pour compliquer le tout, ces choix correspondent à un mélange de variables continues et discrètes.

Pour limiter la complexité du cas d'étude, il faut forcément conserver un nombre limité de variables à optimiser en priorité et faire des hypothèses appropriées pour le reste. La priorité va alors aux variables de décision les plus pertinentes pour répondre à l'objectif scientifique du projet en lien avec l'ACV, qui sera détaillé plus loin. Ensuite, l'attention se porte sur les variables qui peuvent mener à des résultats inédits grâce à des outils logiciels auxquels les autres auteurs n'ont pas eu accès, comme la plateforme *OSMOSE*² du Laboratoire d'énergétique industrielle de l'École polytechnique fédérale de Lausanne (LENI). Les variables les moins intéressantes sont celles qui ne font qu'ajouter une inconnue au problème sans contribuer à la pertinence scientifique du cas d'étude. Celles-ci peuvent donc être laissées de côté même si elles devront quand même être optimisées avant la conception définitive d'un dispendieux système de capture de CO₂ à grande échelle.

Pour ces raisons, la problématique technique du cas d'étude est principalement confinée au dimensionnement du procédé de capture et son intégration thermique avec le cycle vapeur de la centrale NGCC. Les étapes en aval de la compression initiale du CO₂ à 63 bar deviennent extérieures à l'espace de décision, tout comme si elles étaient réalisées par une tierce partie. La capture de CO₂ est alors modélisée avec un réseau implicite d'échangeurs de chaleur, ce qui place le projet dans un contexte de design *conceptuel* et limite le degré de détails requis dans la modélisation économique. Cela tire parti des capacités de la plateforme *OSMOSE* en mettant l'emphasis sur les variables de décision qui affectent l'intégration thermique des procédés, plutôt

² Acronyme de « Optimisation multi-objectifs de systèmes énergétiques intégrés », *OSMOSE* est une suite d'outils en langage *MATLAB* permettant l'optimisation multicritères de procédés modélisés dans d'autres logiciels. *OSMOSE* marie algorithme génétique et intégration énergétique, ce qui est idéal pour la modélisation de procédés thermiques complexes avec réseau d'échangeurs de chaleur non encore spécifié.

absente dans la littérature sur l'optimisation de tels procédés. Aussi, une certaine emphase est mise sur la substitution du gaz naturel par le SNG, vu que la production du SNG a déjà été optimisée avec *OSMOSE* et qu'il s'agit d'une technologie de réduction des gaz à effet de serre en compétition directe avec la capture de CO₂. Par contre, le contexte de design *conceptuel* limite la portée des résultats techniques, qui ne doivent en aucun cas être considérés comme valides pour un design définitif de procédé.

Comme mentionné plus haut, la démarche scientifique de cette thèse porte sur le *comment optimiser*, en particulier l'utilisation cohérente de données d'ACV (notamment les données secondaires sur les processus d'arrière-plan) avec des outils d'optimisation multicritères. La problématique scientifique est donc localisée dans la définition des fonctions évaluant les critères d'optimisation. Une fonction-objectif doit toujours pondérer correctement les intrants du procédé car la surévaluation d'un intrant mène à sa sous-utilisation et sa sous-évaluation mène à sa sur-utilisation, inévitablement (de la même façon que l'isolant d'une maison risque d'être trop mince si on a sous-estimé le prix futur du combustible et vice-versa). Comme expliqué plus en détails dans la section 6.2.2, on peut donc supposer qu'une optimisation sans ACV sous-utilise les intrants ayant moins d'impacts environnementaux et sur-utilise les intrants ayant davantage d'impacts, par exemple, en sous-investissant dans l'efficacité énergétique. L'ACV permettrait alors de corriger cette lacune et devrait apporter un bénéfice mesurable.

Par contre, la même logique indique qu'une optimisation utilisant une fonction-objectif exclusivement basée sur l'ACV pourrait sous-utiliser les intrants ayant des impacts environnementaux facilement évitables et sur-utiliser les intrants ayant des impacts difficilement évitables. En effet, les processus d'arrière-plan contribuant aux données secondaires d'ACV ne sont pas eux-mêmes optimisés et produisent donc des émissions dont l'existence n'est pas compatible avec l'optimum global, c'est-à-dire des émissions qui disparaîtraient à coup sûr si elles étaient taxées au même taux que celui qui est nécessaire pour justifier l'existence du procédé de capture de CO₂ à l'étude.

Ainsi, l'optimisation de la conception du procédé risque de mener à des résultats contradictoires selon qu'on essaie d'en minimiser les émissions sur place, d'en minimiser les résultats d'un indicateur d'ACV, ou de véritablement en optimiser le cycle de vie au sens illustré sur la Fig.0.1, c'est-à-dire de chercher une combinaison optimale de coûts d'évitement. Seule cette dernière

méthode répartirait correctement les efforts de réduction des émissions, menant ainsi à une conception du procédé rigoureusement optimale dans une perspective du cycle de vie. Toutefois, l'écart des résultats entre les trois méthodes n'est pas nécessairement significatif et est à démontrer.

Pour obtenir cette conception rigoureusement optimale en considérant toutes les émissions du cycle de vie du procédé et de ses intrants, il faut d'abord estimer quelles émissions sont évitables et à quel prix, à partir des données d'ACV, idéalement sans devoir faire un modèle détaillé de chaque option pour chaque processus élémentaire, ce qui serait interminable. Ensuite, l'algorithme d'optimisation doit pouvoir gérer ces informations pour correctement arriver à la solution optimale qui évite les impacts environnementaux dans les meilleures proportions à chaque endroit (localement via la capture de CO_2 , et chez chaque fournisseur via la méthode la plus appropriée pour chacun). Ainsi, la problématique de ce projet englobe l'adaptation des données d'ACV (notamment les données secondaires sur les processus d'arrière-plan) au contexte d'optimisation du design conceptuel d'un procédé.

Ensuite, une fois les résultats obtenus sous forme de courbe Pareto-optimale, après avoir fait un choix approprié de variables de décision et de fonctions objectif avec et sans ACV, il faut encore voir comment cela affecte la prise de décisions post-optimisation. La Fig.0.3 décrit qualitativement les résultats attendus, pour le cas d'étude en considérant un combustible fossile ou biogénique avec ou sans capture de CO_2 . La solution à plus faible coût est en haut à gauche et celle à plus faibles impacts est en bas à droite. L'optimum environnemental se trouve entre les deux et serait situé, de la même façon que sur Fig.0.1 et Fig.0.2, au contact d'une tangente dont la pente correspondrait à un prix de CO_2 -équivalent déterminé post-optimisation. Les deux courbes sur la Fig.0.3 correspondent alors aux résultats d'une seule optimisation avec un seul espace de décision, mais selon deux types de calcul de l'objectif environnemental, avec et sans ACV. Ici *sans ACV* désigne l'absence de système d'arrière-plan et comprend donc les fumées de la centrale thermique seulement.

En première approximation, la courbe pleine (Pareto-optimale avec ACV) n'est qu'une simple translation vers le haut de la courbe pointillée (Pareto-optimale sans ACV). Cette translation n'affecte pas la prise de décisions pour un prix de CO_2 -équivalent donné car la pente des deux courbes est la même à chaque endroit. Par contre, la translation n'est peut-être pas parfaite et ce

ne sont donc peut-être pas les mêmes points qui sont Pareto-optimaux sur chaque courbe, indiquant la présence de subtilités affectant la prise de décisions. Dans le cas illustré, la configuration *a* est Pareto-optimale seulement sans ACV, alors que la configuration *b* est Pareto-optimale seulement avec ACV. Par exemple, la configuration *a* pourrait correspondre à l'utilisation d'un combustible fossile avec capture de CO₂, alors que la configuration *b* correspondrait à l'utilisation d'un combustible biogénique sans capture de CO₂. Dans ce cas, la considération des informations nouvelles fournies par l'ACV affecterait radicalement la prise de décision, du moins pour un prix de CO₂-équivalent tangent à la courbe aux environs de *a* et *b*.

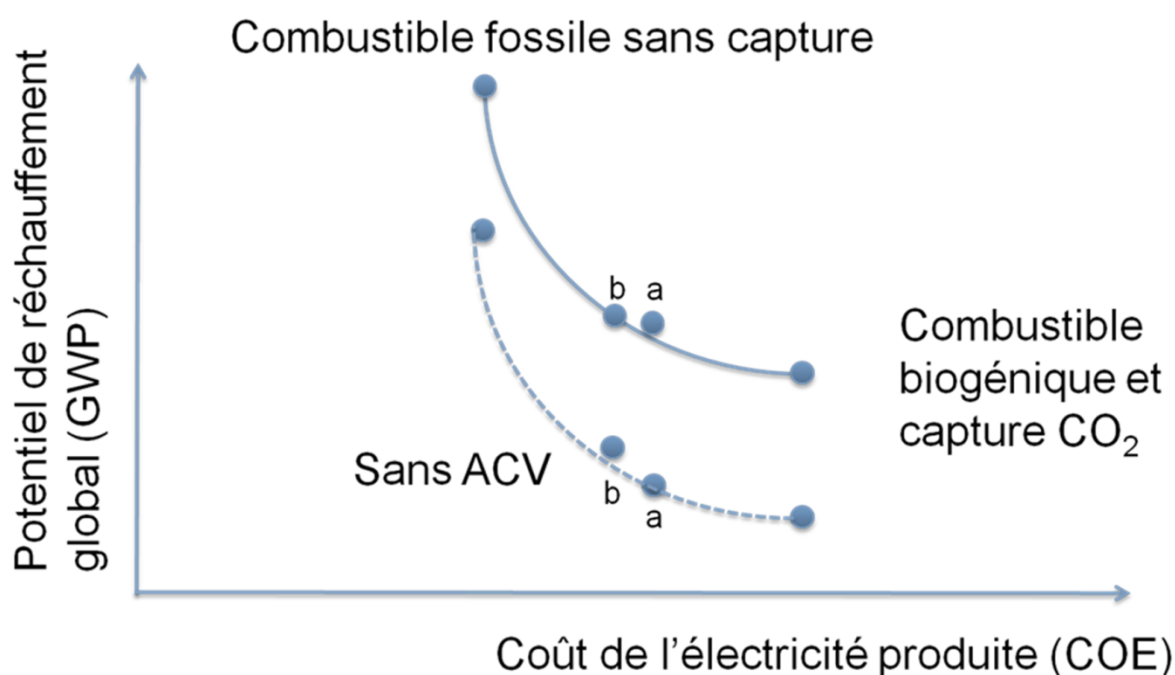


Figure 0.3 : Déviation de l'optimum en ajoutant le cycle de vie

De plus, la pente de la sécante entre deux points ne sera peut-être pas exactement la même avec et sans ACV, même s'il s'agit de configurations identiques et Pareto-optimales (non illustré). Il se peut donc que le coût d'évitement associé à une transition technologique ne soit pas le même avec et sans ACV, ce qui pourrait affecter la prise de décisions dans un cas où le prix du CO₂-équivalent s'avère entre les deux. L'ACV deviendrait alors capable d'améliorer des prévisions économiques comme le seuil de rentabilité d'une technologie de capture de CO₂ ou le prix qu'un producteur marginal de gaz synthétique peut offrir pour le bois, ce qui fait partie de la problématique de ce projet.

Ironiquement, il est donc possible que l'ACV donne un avantage à la configuration ayant le plus d'émissions, comme le point *b* de la Fig.0.3. Cela n'a rien de paradoxal vu que l'évitement d'une partie des coûts reliés aux émissions des fournisseurs libère des fonds permettant de réduire davantage d'impacts ailleurs. Vu autrement, l'optimisation avec ACV permettrait à l'industriel de choisir une configuration d'un procédé évitant au mieux possible les fournisseurs polluants qui risquent de lui refiler leurs futurs coûts environnementaux, quitte à augmenter légèrement son propre futur coût environnemental s'il le faut. En plus d'un bénéfice environnemental, l'ACV aurait alors un bénéfice économique mesurable au niveau du coût final, en supposant que certains coûts environnementaux seront internalisés par législation après la conception, mais avant la construction de l'usine contenant le procédé en question. La problématique de ce projet inclut donc la quantification d'un tel bénéfice supposé.

De plus, il serait utile que les résultats de ce projet permettent à l'avenir de simplifier la démarche de réalisation d'une ACV et de formulation des fonctions-objectif dans un contexte d'optimisation d'un procédé en général, en éliminant les étapes qui s'avèrent rétrospectivement inutiles. Ultimement, la démarche simplifiée idéale permettrait d'utiliser les outils d'ACV existants, d'en extraire les résultats simplement sous la forme d'un ajustement du coût de chaque intrant, pour finalement utiliser les outils d'optimisation existants afin d'obtenir une conception d'un procédé qui minimise les impacts environnementaux sans toutefois excéder le point où l'on gaspille l'opportunité d'en éviter davantage ailleurs. La problématique de ce projet intègre donc plusieurs interrogations d'ordre général sur ce qu'apporte concrètement l'ACV dans le fonctionnement d'un algorithme d'optimisation : le type de variable de décision le plus susceptible d'être affecté par l'ajout de l'ACV; le poids relatif des intrants sur la prise de décisions et donc le choix de seuil de coupure de l'ACV; le poids relatif des différents polluants et donc la priorité à donner aux différentes catégories d'impacts pour former des fonctions-objectif; *etc.*

Au final, la problématique de ce projet est la prise de décisions judicieuses grâce à l'ACV, dans tout contexte où l'opportunité d'éviter des impacts environnementaux *ailleurs* fait implicitement partie de l'espace de décision. Cela dépasse donc largement la seule conception de procédés mais peut quand même faire l'objet de discussions dans cette thèse.

0.2 Hypothèse, objectifs et originalité

La problématique soulevée dans cette thèse suggère qu'il est impossible de trouver la conception réellement optimale d'un procédé sans d'abord connaître les impacts environnementaux du cycle de vie de ses intrants. Dans le cas d'étude, cela veut essentiellement dire qu'on ne capturera pas le CO₂ de la même façon en sachant combien il faut en émettre avant de pouvoir en capturer, vu que cela affecte le ratio entre ce qui est capturé et ce qui est réellement évité. L'amélioration de la prise de décisions grâce à l'ACV pourrait même jusqu'à apporter un bénéfice économique pouvant justifier le coût de cette ACV, en plus de diminuer les impacts environnementaux.

L'*hypothèse de recherche* de cette thèse est donc qu'une décision de conception de procédé prise post-optimisation avec ACV, comparativement à la décision prise sans ACV, apporte un bénéfice économique et environnemental à long terme dont l'espérance est mesurable, du moins lorsque les contraintes environnementales ne sont pas déjà internalisées dans le coût des intrants mais le seront plutôt entre le moment de la conception et celui de la construction.

L'*objectif général* de recherche de cette thèse est de faire une *validation de principe* de l'intégration de données d'ACV dans un contexte d'optimisation de la conception d'un procédé par simulation informatique, et d'en mesurer le bénéfice pour le cas d'étude de la conception d'un procédé de capture de CO₂. Ce faisant, il est souhaité de développer de nouvelles façons commercialement viables d'utiliser l'ACV. À la limite, cela peut permettre de repenser certains aspects de la méthodologie de l'ACV, notamment la pondération des catégories d'impacts dans un contexte de prise de décisions.

Il faut bien clarifier que l'objectif ne vise pas la justesse de la modélisation du procédé, mais plutôt la justesse de la contribution de l'ACV à des résultats spécifiques. La conception d'un véritable système de capture de CO₂ nécessiterait plutôt d'aller au-delà de la phase de design conceptuel, en utilisant des modèles thermodynamiques et économiques précis et validés, auxquels l'ACV pourrait ensuite être ajoutée de nouveau sur la base des résultats de cette thèse.

Un objectif secondaire de la recherche est de contribuer à l'état de l'art de la conception des procédés de capture de CO₂ en postcombustion, particulièrement dans le domaine de l'intégration thermique entre le procédé et un cycle vapeur.

Les objectifs spécifiques de cette recherche sont de :

1. Modéliser le système de capture de CO₂ avec le logiciel commercial *ASPEN Plus* et greffer ce modèle à la plate-forme *OSMOSE*;
2. Intégrer à ce modèle deux façons de calculer le critère environnemental d'optimisation (GWP ou potentiel de réchauffement climatique) : avec et sans les résultats de l'ACV des principaux intrants (combustible, absorbant, matériaux d'infrastructures, transport de CO₂, etc.);
3. Lui ajouter le gaz naturel synthétique (SNG) comme combustible de substitution, en compétition avec la capture de CO₂ en tant que technologie d'évitement du GWP;
4. Lui ajouter d'autres technologies d'évitement du GWP du cycle de vie des intrants, reflétant des choix d'approvisionnement avec émissions réduites, dont notamment un approvisionnement de gaz naturel avec des émissions fugitives de méthane réduites;
5. Établir la courbe Pareto-optimale combinant les meilleures décisions de conception et les meilleures décisions d'approvisionnement, selon que GWP est calculé avec ou sans ACV;
6. Procéder à une analyse de sensibilité : importance de l'ACV de chaque intrant; importance de chaque gaz à effet de serre; importance du couplage entre les décisions d'approvisionnement et les décisions de conception;
7. Déterminer sous quelles conditions l'ACV contribue aux décisions de conception, ainsi que comment cela affecte certaines relations économiques comme le lien entre le prix du bois et le prix du CO₂;
8. Déterminer le poids relatif de chaque catégorie d'impacts environnementaux, en termes de probabilité d'affecter les décisions de conception lorsque chaque catégorie forme un critère d'optimisation;
9. Établir un système de pondération des résultats de l'ACV de chaque intrant d'un procédé, afin de permettre à l'avenir d'optimiser correctement la conception du procédé sans nécessairement devoir connaître comment les fournisseurs eux-mêmes doivent gérer les technologies d'évitement de leur propre domaine.

La principale originalité scientifique de cette thèse se trouve donc dans la réponse théorique et empirique au problème central soulevé dans la problématique ci-haut : les conceptions d'un procédé qui sont contradictoires selon qu'on essaie d'en minimiser les émissions sur place, d'en minimiser les résultats d'un indicateur d'ACV, ou de véritablement en optimiser le cycle de vie. En particulier, cette thèse développe une méthode originale pour explorer rapidement le potentiel d'évitement des émissions du cycle de vie de chaque intrant, sans devoir faire un modèle détaillé de chaque option pour chaque processus élémentaire. Ultimement, cela mène à une méthode entièrement originale d'*optimisation du cycle de vie* qui permet de répondre à un large éventail de problèmes de conception de procédés et d'autres domaines.

Une originalité supplémentaire de cette thèse, davantage sur le plan technique, est de procéder à une optimisation simultanée des détails du procédé de capture de CO₂ et de son intégration au reste de la centrale électrique, mais avec des outils logiciels différents. Cela permet de faire des combinaisons de variables de décision impossibles auparavant. En particulier, une emphase est mise sur la synergie possible entre la configuration de l'écoulement de l'absorbant et la configuration du cycle vapeur, ce que peu d'outils logiciels permettent d'explorer. Il en résulte un certain doute original sur plusieurs idées reçues concernant la capture de CO₂, notamment à propos des caractéristiques souhaitables de l'absorbant et à propos de la pertinence de focaliser les efforts de recherche et de développement sur la complexification du désorbeur.

Cette dualité entre les aspects scientifiques et techniques de cette thèse se reflète dans sa structure, qui est détaillée et justifiée dans le chapitre 2. Le chapitre 3, davantage focalisé sur les aspects techniques, présente les détails de la plateforme logicielle de simulation afin de préserver la reproductibilité des résultats scientifiques, sur lesquels portent plutôt les chapitres 4 à 7, soit les articles et la discussion générale.

CHAPITRE 1. REVUE DE LITTÉRATURE

Le sujet de cette thèse touche à plusieurs domaines, il serait impossible, ici, de les résumer tous. Ces domaines couvrent le fonctionnement de base d'une centrale thermique à cycle combiné, d'une colonne d'absorption, et des logiciels *MATLAB* et *ASPEN Plus*; les méthodes de base de l'optimisation multicritères et de la conception de réseaux d'échangeurs de chaleur; les principaux enjeux environnementaux, l'analyse du cycle de vie, et les bases de la capture et de la séquestration de CO_2 (où, pourquoi et comment). Le lecteur est donc supposé détenir un niveau de connaissances correspondant au minimum à l'ensemble des cours universitaires de génie chimique couvrant ces domaines, avant d'entamer la revue de littérature qui suit.

Par exemple, le lecteur devrait déjà comprendre qu'on ne peut pas truquer l'utilisation de l'énergie fossile pour obtenir un produit final autre que le CO_2 puisque c'est dans la création même des liens carbone-oxygène que se libère le potentiel thermodynamique. Seule sa séquestration géologique permet d'éviter son émission dans l'atmosphère ou l'océan. Pour cela, il faut d'abord le capturer, un processus de séparation pour lequel un travail minimum (au sens thermodynamique) est absolument requis, travail qui représente la majorité du coût total de la capture, de la purification, du transport et de la séquestration du CO_2 . Le lecteur doit pouvoir visualiser comment s'intègre la capture de CO_2 postcombustion dans une centrale thermique à cycle combiné. En particulier, il faut un absorbant aqueux circulant entre un absorbeur en contact avec la fumée à basse température et à basse pression partielle et un désorbeur à température plus élevée, qui consommera à la fois de la vapeur qui aurait autrement été turbinée, et de l'électricité qui aurait autrement été vendue. Pour faciliter cette tâche, un bref survol des figures 4.1, 4.2, 4.3, 4.7 et 4.8 peut s'avérer utile à ce moment.

Comme le cœur de cette thèse porte sur différents aspects de la plateforme logicielle de simulation, alors que les sujets scientifiques sont plutôt relégués aux articles (chapitres 4 à 6), il est normal que la revue de littérature qui suit (sections 1.1 et 1.2) se concentre sur les publications relatives à la plateforme logicielle et aux données qui y ont été modélisées, alors que la revue de littérature scientifique soit plutôt reléguée à l'introduction de chaque article. Les paragraphes qui suivent servent d'introduction à ces introductions, avant d'entrer dans le vif du sujet.

Il convient d'abord de situer la pertinence des outils proposés, l'ACV et l'optimisation multicritères, dans le large contexte de l'amélioration de la performance environnementale des procédés chimiques. Comme le remarquent Hugo et Pistikopoulos (2005):

Despite the consensus about the relevance and benefits of adopting more sustainable business practices across entire chemical product value chains, the greatest challenge still lies in the practical application of the environmental management strategies in pursuit of technological innovations. [...] Adopting a strategy that considers the environment as a design objective and not merely as a constraint on operations can lead to the discovery of novel processing alternatives that achieve both improved economic and environmental performance. (emphase dans l'original)

Comme l'élaboration de fonctions-objectif à caractère environnemental requiert des indicateurs de performance *quantitatifs*, l'ACV facilite cette tâche. Il devient alors possible de faire un compromis entre les objectifs environnementaux et économiques avec des outils de décision multicritères, dont l'optimisation multicritères en particulier. Cela peut couvrir autant des décisions de conception d'un procédé, que des décisions d'ordonnancement, opérationnelles, tactiques ou stratégiques. (Hugo & Pistikopoulos, 2005)

Il convient ensuite de bien situer le projet dans la littérature scientifique sur l'analyse du cycle de vie. L'ACV est une méthode standardisée d'évaluation des impacts environnementaux dans une perspective générique *du berceau au tombeau*. Les principales étapes de la méthode sont décrites en détails dans la série de standards ISO 1404x (International Organization for Standardization [ISO], 1997) et résumées dans le mémoire de Nathalie Bellerive (2009). Très brièvement, les quatre étapes standardisées sont :

- La définition des objectifs et du champ de l'étude, qui consiste à définir les frontières spatiales et temporelles du système de produit, la qualité et le seuil de coupure des données, les procédures d'imputation *etc.*, d'une façon cohérente avec l'application spécifique de l'étude et avec son audience.
- L'analyse de l'inventaire, qui consiste à quantifier les intrants et extrants matériels et énergétiques des processus élémentaires dans le système de produit. C'est un processus itératif qui se termine quand tous les intrants et extrants sont soit des flux élémentaires dans la nature, soit en-deçà d'un certain seuil.

- L'évaluation des impacts, qui vise à évaluer la magnitude des impacts environnementaux potentiels à partir des résultats de l'inventaire. Cela consiste à définir quelles substances contribuent à quelles catégories d'impacts (classification), à modéliser les impacts environnementaux potentiels relatifs de chaque substance pour chaque catégorie (caractérisation), et optionnellement, à agréger les résultats dans des cas spécifiques où cela en facilite la compréhension (normalisation et pondération).
- L'interprétation, qui consiste à combiner les résultats de l'inventaire et de l'évaluation des impacts en faisant des conclusions et des recommandations pour les décideurs, qui sont cohérentes avec les objectifs et le champ de l'étude.

Selon le standard, la méthodologie de l'ACV peut contenir des éléments subjectifs, notamment dans la définition des frontières du système, ce qui exige une grande transparence dans la présentation des résultats (ISO, 1997). Finnveden *et al.* (2009) ont fait une revue détaillée des développements méthodologiques récents en ACV.

Bien que l'ACV s'applique autant aux produits qu'aux procédés et aux services, peu de littérature et de cas d'étude portent sur les procédés thermodynamiques ou chimiques en particulier. Azapagic (1999) a fait une bonne revue de la littérature disponible en 1999 à ce sujet. Pour elle, l'ACV est d'abord utile pour aider les industriels à agir dans une perspective à long terme, plutôt que de simplement réagir aux revendications étroites et momentanées de groupes de pression. L'ACV peut servir autant à la sélection, la conception et l'optimisation d'un procédé qu'à d'autres utilisations comme la planification stratégique, l'évaluation et l'innovation de produits, l'établissement et l'amélioration du bilan environnemental, ou le marketing environnemental. Dans le contexte réglementaire britannique, l'ACV (sans optimisation) est utile afin d'éviter les déplacements de problèmes lorsqu'on recherche la « best practicable environmental option » ou la « best available technique not entailing excessive cost ». Par exemple, l'ACV permet de démontrer que trois méthodes de capture du SO₂ ont des impacts différents en termes de changements climatiques et des autres catégories d'impacts. Des résultats semblables ont été obtenus lors de la comparaison de méthodes d'évitement des NO_x ou des composés organiques volatils. L'ACV de trois sources de CO₂ en tant que gaz de grade industriel a montré un déplacement des impacts entre catégories. En effet, les impacts sur les changements climatiques

sont minimaux lorsque le CO₂ est recyclé d'une usine d'ammoniac, alors que les impacts pour les autres catégories sont minimaux lorsque le CO₂ provient d'un gisement naturel. (Azapagic, 1999)

Toujours selon Azapagic, l'optimisation environnementale des procédés a fait ses débuts sans ACV, lorsqu'on essayait de minimiser le volume des déchets d'un procédé, ou leur coût de traitement. L'utilisation de l'ACV dans un contexte d'optimisation est plus récente et comporte trois étapes distinctes : la réalisation de l'ACV, la formulation du problème d'optimisation à partir de l'ACV, et l'exécution de l'optimisation. La formulation du problème résulte en un modèle linéaire ou non-linéaire, selon les caractéristiques du procédé. L'évaluation des objectifs est multicritères, donc avec un vecteur de fonctions économiques et environnementales. Les variables de décision continues peuvent correspondre à des débits de matière et d'énergie, des pressions, des compositions, *etc.*, alors que les variables discrètes peuvent correspondre à des choix de technologies ou de matériaux. Selon le champ de l'étude, l'optimisation peut se faire au niveau de l'inventaire, des problèmes, ou des dommages. Dans les deux derniers cas, il y aura une fonction-objectif par catégorie d'impacts d'intérêt. L'avantage de l'optimisation multicritères est de pouvoir explorer l'ensemble des solutions Pareto-optimales et de pouvoir remettre à plus tard l'articulation de préférences, qui deviendrait nécessaire si chaque catégorie devait être pondérée à l'intérieur d'un unique objectif. Connaître l'ensemble des solutions Pareto-optimales est particulièrement utile pour la négociation entre parties ayant des intérêts divergents, assurant ainsi que la négociation ne dévie pas de l'optimalité. Aussi, cela évite la difficile agrégation ou financiarisation de la valeur des impacts. Finalement, si tous les objectifs sont jugés de la même importance, le choix final de la solution peut être arbitraire ou basé sur différentes méthodes comme « Multi-Attribute Utility Theory », « Analytic Hierarchy Process », ou simplement en minimisant la distance totale depuis la solution optimale pour chaque objectif, ce qui implique toutefois une pondération égale des objectifs. Toutes ces méthodes s'appliquent autant aux procédés existants qu'aux nouveaux, et peuvent s'intégrer dans une démarche complète de « Life Cycle Process Design ». (Azapagic, 1999)

Bien que la littérature récente apporte quelques nouveaux cas d'étude (comme Martinez et Eliceche (2009) sur les centrales thermiques ainsi que certains travaux du Laboratoire d'Énergétique Industrielle sur les centrales thermiques, la gazéification, le chauffage urbain, le dessalement, *etc.*), on n'y remarque aucun développement méthodologique majeur en ce qui

concerne la formulation de fonctions-objectif à partir de résultats d'ACV existants. Une exception notable consiste à utiliser la probabilité jointe d'atteindre une série de cibles (une par catégorie d'impacts) comme fonction-objectif, ce qui permet de mieux gérer les incertitudes des méthodes d'évaluation des impacts et d'éviter le problème de la pondération (Guillen-Gosalbez & Grossmann, 2010). Une approche analogue permet de gérer les incertitudes de l'inventaire du cycle de vie (Guillen-Gosalbez & Grossmann, 2009).

D'autres auteurs ne traitent pas directement de conception de procédés, mais peuvent s'intéresser davantage à l'optimisation de la chaîne d'approvisionnement d'un procédé. C'est le cas d'Hugo et Pistikopoulos (2005), qui utilisent les mêmes outils (optimisation multicritères et ACV) afin de choisir un arrangement optimal de types d'usines, de leur emplacement, et du choix de certains fournisseurs, afin de combler un marché précis pour des produits chimiques de base. Comme ils remarquent, l'optimisation de la chaîne d'approvisionnement est une extension naturelle de l'espace de décision lors de l'optimisation de la conception de procédés :

While these previous applications have successfully included environmental considerations within a process design context, limited work to date has been conducted on the extension of the same trade-off analysis methodology to assist the strategic planning and design of extended supply chain networks. The opportunity naturally exists to expand the process systems boundary to allow the structure of the supply chain network to be a design decision within the overall process optimization framework. (Hugo & Pistikopoulos, 2005)

Il est donc possible d'utiliser les mêmes outils pour optimiser la conception d'un procédé et sa chaîne d'approvisionnement, et donc de mettre en compétition des décisions de conception et des décisions d'approvisionnement pour atteindre une performance environnementale optimale. On remarque qu'Hugo et Pistikopoulos (2005) utilisent un indicateur à score unique comme fonction-objectif, mais qu'ils expérimentent aussi l'utilisation de trois fonctions-objectif, une économique et une pour chacune des deux catégories d'impacts contribuant le plus au score unique.

Dans tous les cas recensés, les processus d'arrière-plan – dont les émissions du cycle de vie ne sont pas considérées spécifiques à un fournisseur en particulier, mais plutôt à une moyenne de fournisseurs comptabilisée dans une base de données comme *ecoinvent* – ne sont jamais eux-mêmes sujets à optimisation. Il n'est jamais question d'ajouter des variables de décision

permettant de choisir certaines données secondaires plutôt que d'autres, ce qui reflète un peu leur caractère mystérieux du point de vue des utilisateurs non spécialistes de l'ACV. La perception semble être qu'il n'y a pas d'émissions évitables dans le monde de l'arrière-plan, où l'on ne trouverait plutôt qu'un océan ténébreux de données intouchables tant qu'on ne les ramène pas à l'avant-plan. L'idée de modéliser de façon générique le potentiel d'évitement des émissions d'arrière-plan, tel que proposé dans ce projet, semble donc tout à fait originale.

En plus de l'ACV et de l'optimisation multicritères, ce projet touche aussi brièvement à un troisième outil conceptuel : l'approche des éco-coûts de Vogtländer et Bijma (2000). L'éco-coût se définit par catégorie d'impacts et correspond au coût d'évitement marginal pour ramener le total des émissions à un niveau de risque négligeable. Par exemple, s'il faut réduire les émissions acidifiantes de 90% pour ramener leurs impacts à un niveau de risque négligeable, alors l'éco-coût de l'ensemble des émissions acidifiantes correspond au coût d'évitement de leur 91^e percentile, peu importe que ce 91^e percentile corresponde à une émission de SO₂, d'ammoniac, *etc.* Les facteurs de caractérisation de l'ACV sont alors utilisés pour transposer les éco-coûts d'une substance à l'autre. Par exemple, si l'éco-coût du SO₂ est de 7,55 €/kg, alors celui de l'ammoniac sera de 14,19 €/kg, proportionnellement à son pouvoir acidifiant et non à son coût de prévention. Le coût d'évitement sera alors équivalent pour toutes les substances par unité d'acidification, qu'il existe ou non des émissions de chaque substance évitables à ces coûts.

Comme expliqué au chapitre 6, le concept d'éco-coût a un rôle crucial à jouer dans un contexte d'optimisation car il fournit une borne maximale au poids que peut exercer chaque catégorie d'impacts sur la configuration du procédé. Cette pondération est indépendante de l'importance subjective de chaque catégorie en tant qu'enjeu environnemental. Cependant, cette application de l'éco-coût n'était pas envisagée par son concepteur, qui n'y voyait qu'un simple outil pour obtenir un indicateur à score unique, facilitant ainsi la communication des résultats d'une ACV classique. En effet, la principale raison d'adopter les éco-coûts offerte par Vogtländer et Bijma (2000) est que les modèles d'indicateurs basés sur la prévention sont mieux adaptés au contexte d'une prise de décision, alors que les modèles d'indicateurs basés sur les impacts sont mieux adaptés au contexte d'une sensibilisation, malgré leurs défauts respectifs. Toutefois, cette utilisation des l'éco-coûts tel qu'originellement proposée n'est pas sans controverse puisque certains jugent que le rôle traditionnel de l'ACV est d'évaluer les dommages (que ce soit

pertinent ou non pour la prise de décisions), ce pour quoi une méthode basée sur d'hypothétiques coûts d'évitement est trop déconnectée (Soares, Toffoletto, & Deschênes, 2006). Ainsi, même si le concepteur des éco-coûts espérait éviter la controverse, c'est peut-être notre application, et non la sienne, qui s'avère ironiquement la moins controversée vu qu'elle ne cherche aucunement à évaluer les dommages.

En conclusion, l'utilisation combinée de l'ACV et de l'optimisation multicritères pour la conception d'un procédé n'est pas nouvelle en tant que tel, bien que la littérature soit peu abondante. Par contre, d'un point de vue fondamental, ce projet de recherche propose une approche totalement nouvelle pour la pratique de l'ACV. En effet, l'optimisation multicritères est toujours présentée dans la littérature comme une façon d'alimenter un compromis entre intérêts environnementaux et économiques divergents. Pourtant, l'intérêt économique est aussi de ne pas gaspiller les ressources pouvant servir à éviter des impacts *ailleurs*, ce qui est convergent, en plus d'être très pertinent dès qu'il est question de permis échangeables. Aucune littérature n'a été trouvée montrant l'ACV comme outil d'aide à la prise d'une décision *en vue de minimiser les impacts environnementaux globaux* dans un contexte de conception d'un procédé. Or, c'est précisément ce que le cas d'étude vise à démontrer en visant à concevoir un procédé pour en optimiser le cycle de vie plutôt que pour simplement en minimiser les résultats d'un indicateur d'ACV. On voit donc bien que ce projet ouvre une branche originale des connaissances à l'intersection de l'ACV et de l'optimisation multicritères.

Suite à cette introduction, il convient d'explorer la littérature scientifique et technique qui se rapporte directement à l'environnement de simulation du procédé de capture de CO₂ et qui n'est pas nécessairement citée dans les articles (chapitres 4 à 6). Celle-ci est présentée en deux volets : l'optimisation de la centrale thermique sans les détails de la capture (section 1.1.1) et l'optimisation des détails de la capture (section 1.1.2). Finalement, la revue se termine par la littérature sur l'analyse du cycle de vie du procédé de la capture du CO₂, une source essentielle de données pour ce projet (section 1.2).

1.1 Environnement de simulation

1.1.1 Optimisation de la centrale thermique

Dans le cadre du développement de la plateforme *OSMOSE*, la présente thèse s'inscrit dans une lignée de travaux de recherche entrepris au Laboratoire d'énergétique industrielle (LENI) par Stefan Pelster et repris par Hongtao Li, portant sur l'optimisation de centrales thermiques avec ou sans capture de CO_2 . La thèse de Li (2006), jusqu'au chapitre 3 inclusivement, constitue probablement la meilleure introduction possible à l'environnement de simulation, dans le contexte de la conception d'une centrale thermique à gaz naturel à cycle combiné (NGCC).

Entre autres, ces chapitres de la thèse de Li (2006) expliquent pourquoi une optimisation basée sur une modélisation enviro-écono-thermodynamique avec superstructure est utile pour gérer la complexité d'un système comme une centrale thermique. Il explique aussi comment l'optimisation multicritères permet de gérer l'incertitude sur le taux d'intérêt, le prix du gaz ou le prix du CO_2 . Il indique que pour une centrale sans capture, il est avantageux d'optimiser le coût d'investissement comme première fonction-objectif, ce qui permet d'étudier l'évolution du rendement thermodynamique et l'apparition de sauts technologiques le long de la courbe Pareto, et ce, peu importe si l'autre objectif évalue le rendement énergétique, le coût d'opération ou les émissions, qui sont tous dépendants. (Li, 2006) On remarque toutefois que lorsque le taux de capture de CO_2 est variable, cette dépendance disparaît et il faudrait utiliser trois objectifs pour garder la même flexibilité.

Ces chapitres de la thèse de Li (2006) présentent également les bases de *QMOO*, l'algorithme d'optimisation évolutif multicritères intégré à la plateforme *OSMOSE*. Li y explique le concept de superstructure qui consiste, par exemple si on ne sait pas quel modèle de turbine choisir, à modéliser plusieurs équipements fonctionnant fictivement en parallèle, permettant à l'algorithme d'en choisir un. Il montre comment des relations empiriques peuvent être utilisées pour interpoler l'efficacité ou le coût d'un équipement en fonction de sa taille, ce qui est indispensable pour le calcul des coûts d'investissement. Il décrit son modèle de calcul des émissions de CO_2 , qui n'est pas formellement basé sur une ACV, mais tient quand même compte des émissions de CO_2 et de méthane chez les producteurs de gaz naturel. (Li, 2006)

Pour optimiser le cycle vapeur sans capture de CO₂, Li fait varier les quatre niveaux de pression (condenseur compris) et les degrés de surchauffe correspondants, alors que pour optimiser le cycle gaz il ne fait que choisir des modèles différents de turbine. Sa courbe Pareto-optimale permet alors de sélectionner post-optimisation une combinaison particulière selon le prix du gaz, le taux d'intérêt, la puissance recherchée et le nombre d'heures d'opération par année. (Li, 2006)

Pour ses simulations avec capture de CO₂, Li utilise un cycle gaz plus flexible, avec cinq variables de décision incluant la recirculation des fumées. Les coûts totaux remplacent les coûts d'investissement comme objectif. (Il ne mentionne pas la possibilité d'optimiser à trois objectifs.) Le système de capture de CO₂ est binaire – présent ou absent – et basé sur le cycle MEA classique. Le modèle de style boîte noire se limite à une consommation de vapeur de 3,7 GJ/tonne puisée dans la littérature, ainsi qu'à une consommation d'électricité correspondant au compresseur de CO₂. Pour obtenir des résultats intermédiaires entre la centrale avec et sans capture, il considère la construction d'une centrale plus petite et l'importation de l'électricité manquante. (Cette option n'est pas Pareto-optimale par rapport à la nôtre, qui est de faire la capture sur une partie des fumées seulement.) Ses résultats démontrent que les émissions de CO₂ dépendent surtout de la capture, mais varient aussi un peu selon l'efficacité énergétique du cycle. La taxe CO₂ minimum pour justifier la capture est 69 \$/tonne. (Li, 2006)

La thèse de Li (2006) est complétée par son article dans *Energy* (Li, Marechal, Burer, & Favrat, 2006), évidemment plus concis. L'article de Pelster, Favrat et Von Spakovsky (2001) est aussi utile pour comprendre les travaux antérieurs. Pour une introduction à l'architecture d'*OSMOSE*, et aux avantages de simuler séparément les échanges de chaleur dans un modèle d'intégration de procédés, le lecteur se référera plutôt à Bolliger, Favrat et Marechal (2005). L'article de Maréchal et Kalitventzeff (1999) donne une idée de la programmation linéaire en nombres entiers utilisée pour résoudre le cycle vapeur avec un réseau d'échangeurs de chaleur implicite. La documentation technique des logiciels se trouve plutôt sur le LeniWiki (leniwiki.epfl.ch).

Finalement, la thèse de Gassner (2010) fournit une ample description du procédé de production du SNG pouvant servir à alimenter la centrale NGCC en combustible biogénique, excepté pour son ACV. Cette thèse détaille les méthodes utilisées pour obtenir des courbes Pareto-optimales pour différentes technologies de gazéification, pour des taux de capture de CO₂ différents et des conditions économiques différentes, et en extrapolant pour des procédés de différentes tailles. De

plus, cette thèse donne une perspective différente et plus récente que celle de Li (2006) sur *OSMOSE* et son utilisation.

Cette revue des travaux du LENI vise à bien comprendre l'environnement de simulation et son évolution au fil des circonstances. Elle ne vise pas à comparer la performance de la plateforme *OSMOSE* avec d'autres plateformes. En particulier, il faut reconnaître que l'algorithme *QMOO* n'est pas nécessairement le plus rapide pour le cas d'étude. D'autres algorithmes utilisés à Polytechnique (Audet, Béchard, & Chaouki, 2008) pourraient être applicables au cas d'étude, à condition d'être adaptables à un problème multicritères. Toutefois, du point de vue de cette thèse, l'environnement de simulation est un outil, et non un sujet de recherche. Il ne semble donc pas pertinent d'étendre la revue de littérature dans cette direction.

1.1.2 Simulation du procédé de capture

La capture de CO_2 en postcombustion est généralement réalisée avec un absorbant chimique, la pression partielle étant plutôt basse pour les autres méthodes. Le MEA (2-aminoéthanol) est l'absorbant de CO_2 pour lequel la modélisation thermodynamique et cinétique est la mieux développée. Plusieurs travaux, dont cette thèse, remettent peu en question le choix du MEA afin de ne pas compromettre la qualité des simulations. Cette lacune devrait s'estomper à mesure que la capture de CO_2 avec d'autres absorbants suscite davantage d'intérêt.

Parmi les nombreux chercheurs qui s'intéressent à la capture postcombustion avec ou sans MEA, l'équipe de l'Université du Texas à Austin se démarque particulièrement par le nombre de publications, l'accès à une usine pilote, et le fait que ses modèles sont utilisés par le logiciel *ASPEN Plus*. Pour comprendre la théorie derrière ces modèles, tant sous les aspects d'équilibre thermodynamique que de cinétique, le mémoire de maîtrise de Stefano Freguia (2002), chapitres 1 à 4, apparaît comme lecture d'introduction très complète.

Selon ces chapitres du mémoire de Freguia, un modèle rigoureux de la thermodynamique du procédé commence par l'équilibre chimique des espèces ioniques H_3O^+ , OH^- , MEA^+ , MEACOO^- , HCO_3^- et CO_3^{--} .³ Le calcul de l'enthalpie et de l'entropie, pour être assez rigoureux, est

³ Au long, le MEA correspond à la formule $\text{HO-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_2$. Ainsi, MEA^+ (ou plus correctement MEAH^+) correspond à $\text{HO-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_3^+$ et MEACOO^- correspond à $\text{HO-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH-CO}_2^-$.

préférentiellement basé sur un modèle NRTL (non-random two-liquid), où un grand nombre de paramètres, obtenus expérimentalement par régression, définissent les interactions entre espèces ioniques. (Freguia, 2002)

Toujours selon Freguia, la cinétique est particulièrement complexe dans le cas de l'absorbeur, car le transfert de masse de CO_2 est limité à la fois par des considérations de diffusion, et par la cinétique des réactions. (Freguia, 2002) En fait, l'essentiel de la réaction se produit dans une couche d'environ 200 microns juste sous l'interface gaz-liquide⁴, illustrée à la Fig.1.1.

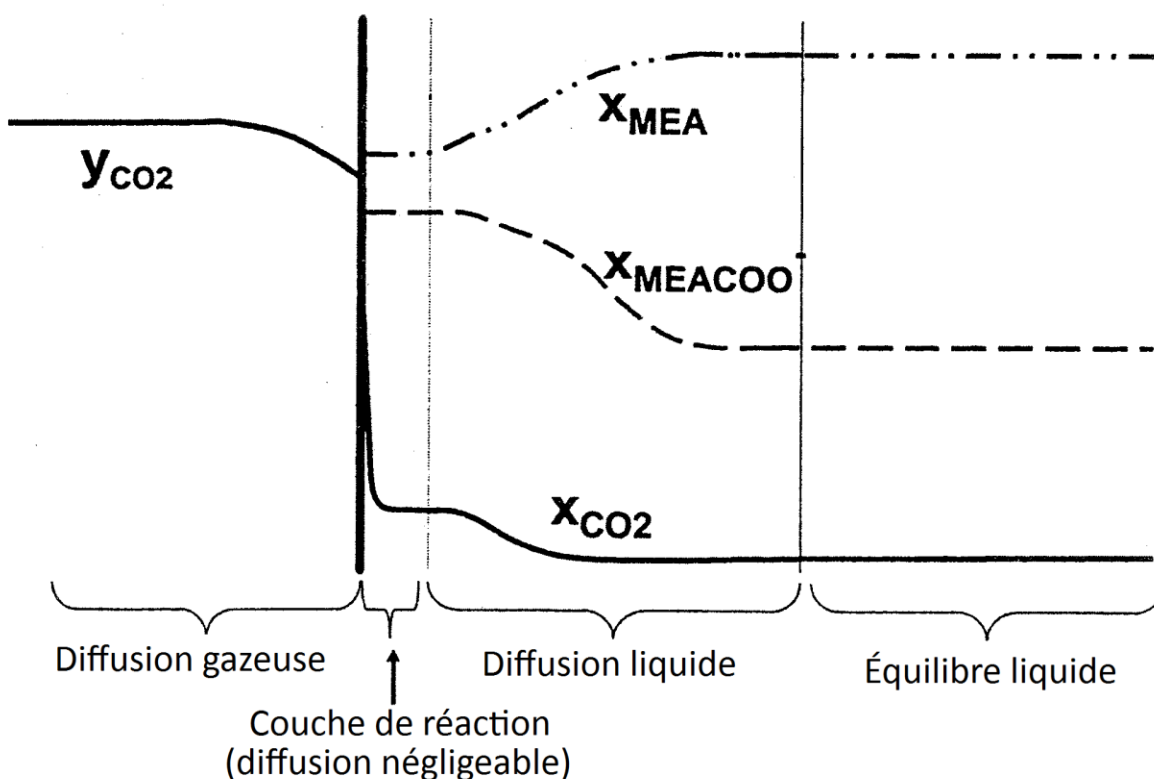


Figure 1.1: Absorption de CO_2 à l'interface gaz-liquide, adapté de Freguia (2002)

La couche de réaction de l'absorbeur est le seul endroit de tout le système qu'il n'est pas raisonnable d'approximer par l'équilibre chimique. Il en résulte un écart relativement important entre la pression partielle de CO_2 dans le gaz et sa pression d'équilibre dans le liquide. Cet écart, présent tout le long de l'axe vertical de l'absorbeur, est d'autant plus grand que la quantité de garnissage est petite, limitant la surface d'échange disponible. Selon Freguia, un modèle de

⁴ Épaisseur selon le prof. Haut. (Conférence donnée à Polytechnique le 9 avril 2009.)

cinétique simple mais précis (nommé « interface pseudo first order ») consiste à supposer que la couche de réaction comporte des réactions lentes mais est trop mince pour contenir des gradients de concentration ionique, alors que la couche de diffusion comporte un gradient de concentration mais des réactions rapides étant donné que l'équilibre est presque déjà atteint. Un tel modèle de cinétique n'est pas nécessaire pour le désorbeur, où toutes les réactions sont quasi-instantanées vu la température plus élevée. Seuls les mécanismes de transfert de masse et de chaleur y affectent la cinétique, et donc le besoin de modéliser une surface de garnissage en détail. On peut donc supposer l'équilibre chimique partout dans le désorbeur. Autant pour l'absorbeur que pour le désorbeur, le modèle s'exécute sur plusieurs plateaux virtuels, représentant les différentes conditions rencontrées le long de l'axe vertical. (Freguia, 2002)

Remarquons que le modèle cinétique implémenté dans *ASPEN Plus* n'utilise pas l'approximation d'interface proposée par Freguia dans le cas de l'absorbeur. Il procède plutôt en discrétisant l'interface, ce qui revient à faire une intégration numérique des profils de concentration. Cette discrétisation semble introduire un type d'erreur qui rend difficile pour *ASPEN* de déterminer s'il a convergé ou non. Aucune littérature n'a pu être identifiée afin de déterminer si cela affecte la qualité des résultats par rapport au modèle non discrétisé de Freguia.

Pour plus de détails et références sur l'ensemble des modèles, corrélations et données utilisées dans *ASPEN Plus* pour modéliser la capture de CO₂, le lecteur est référé à la documentation qui accompagne le fichier exemple (DeVincentis, 2008). Aussi, un modèle alternatif de la cinétique est détaillé par Tobiesen, Svendsen et Juliussen (2007) et utilise une discrétisation de l'interface avec grille adaptative, entre autres nouveautés.

D'autres publications de l'équipe de l'Université du Texas à Austin poussent la modélisation technico-économique jusqu'à l'échelle du procédé complet (Jassim & Rochelle, 2006 ; Oyekan & Rochelle, 2006; Oyekan & Rochelle, 2007), tout comme l'ont fait d'autres équipes (Bozzolo, Brandani, Traverso, & Massardo, 2003; Alie, 2004; Rao, Rubin, & Berkenpas, 2004; Abu-Zahra, Schneiders, Niederer, Feron, & Versteeg, 2007; Cousins, Wardhaugh, & Feron, 2011). Toutefois, comme expliqué au chapitre 4, l'approche d'optimisation de ces équipes est très limitée. Elle comprend un nombre limité de variables de décision (dont très peu concernent le dimensionnement des équipements), aucun modèle d'intégration de procédés (sauf Alie), et aucun modèle d'ACV. De plus, leur approche utilise la fonction-objectif de minimiser la charge

thermique, plus étroite que le coût et les impacts environnementaux. D'ailleurs, il est prouvé que la conception optimale ne minimise pas la charge thermique (Schach, Schneider, Schramm, & Repke, 2010). Ces publications sont donc plutôt utiles pour extraire à la pièce les données manquantes lors de la modélisation, et pour énumérer les configurations exotiques possibles du désorbeur, plutôt que comme véritable inspiration méthodologique. Le plus récent de ces articles (Cousins, Wardhaugh, & Feron, 2011) offre la recension la plus complète de toutes les configurations possibles : désorbeur multi-pressions, refroidissement intermédiaire de l'absorbeur, récupération interne de chaleur dans le désorbeur, divisions multiples de l'écoulement, re-compression de vapeur, configuration « matricielle » d'écoulement, et réchauffement intermédiaire du désorbeur par la récupération de la chaleur résiduelle des fumées.

Pour donner un exemple d'extraction de donnée manquante, l'article de Rao, Rubin et Berkenpas (2004) est utile pour estimer les pertes d'absorbant, qu'il chiffre à entre 0,5 et 3,1 kg de MEA (et non de solvant) par tonne de CO₂ capturé. Selon cet estimé, la moitié est polymérisée et l'autre moitié est oxydée lors du fonctionnement normal, ce qui ne laisse aucune place aux pertes physiques (évaporation, entraînement, fuites, purges). Les auteurs ne clarifient pas si la quantité récupérable à l'aide du « reclaim » est incluse. On remarque toutefois que les pertes chimiques sont difficiles à estimer vu qu'il faut connaître la chimie des additifs utilisés, en fonction des conditions d'opération, et connaître la composition exacte des fumées. Des données obtenues avec le charbon peuvent ne pas correspondre au gaz naturel. De plus, les pertes physiques dépendent de la qualité des débrumiseurs, de l'effet des additifs sur la tension de vapeur, des fuites, *etc.*

Finalement, on remarque le volumineux article de Leites, Sama et Lior (2003), qui présente une approche théorique de l'efficacité énergétique des procédés de génie chimique, basée en partie sur l'analyse exergétique. La capture du CO₂ par le MEA est utilisée comme exemple tout le long de l'article. C'est donc une référence utile pour comprendre où se trouve le potentiel théorique d'amélioration de ce procédé, toujours là où se génère l'entropie, ce qui peut aider à la conception de nouvelles configurations d'écoulement. Yu, Li, Li, Jiang et Zhang (2009) incluent également un volet d'analyse exergétique dans leur analyse d'un procédé de capture simultanée de CO₂ et de SO₂.

1.2 Analyse du cycle de vie du procédé de capture

La modélisation des impacts environnementaux du cycle de vie d'un procédé de capture de CO₂ a la particularité que l'infrastructure de transport et de séquestration de CO₂ dont il faut estimer les impacts est essentiellement hypothétique. Le reste du cycle de vie est beaucoup plus simple vu qu'il existe déjà des données génériques d'ACV pour les centrales thermiques à cycle combiné et vu que le procédé de capture comme tel n'utilise qu'un petit nombre d'intrants dont le cycle de vie est bien connu : aciers, MEA, eau de refroidissement.

Grâce aux travaux de maîtrise de Nathalie Bellerive au sein du CIRAIG et avec l'appui considérable des compagnies GDF SUEZ et Électricité de France, il a été possible de faire une analyse détaillée d'un projet de transport et de séquestration de CO₂ du nord de la France vers la mer du Nord. Cette analyse combine les données d'inventaire fournies par les partenaires industriels avec celles de la base de données *ecoinvent v1.2*. Les résultats de cette ACV sont colligés dans le rapport technique exécutif final (confidentiel, daté du 31 août 2007) soumis aux partenaires industriels du CIRAIG ainsi que dans le mémoire de Nathalie Bellerive (2009). Le rapport contient une discussion détaillée de la méthodologie, de la littérature pertinente, des hypothèses et des limites de l'étude, afin de respecter la norme ISO (1997).

Le rapport et le mémoire détaillent l'ACV d'un kilowattheure d'électricité produit avec différentes technologies pour le charbon ou le gaz naturel, avec ou sans capture de CO₂. Le procédé de capture de CO₂ n'est pas optimisé, mais la possibilité de le faire est considérée dans l'analyse de sensibilité, sous la forme d'une variation arbitraire du rendement thermodynamique de la centrale. Dans le cas de la centrale à cycle combiné au gaz naturel, le rendement varie de 55,7 % sans capture, à 48,0 % avec capture, à 51,8 % après optimisation hypothétique. L'effet de la capture de CO₂ est d'augmenter les impacts dans toutes les catégories sauf GWP, d'une façon fortement corrélée au rendement thermodynamique. En optimisant l'efficacité énergétique de la centrale NGCC, cette thèse répond donc directement au besoin d'améliorer la performance environnementale de la capture de CO₂.

La même analyse de sensibilité montre également qu'après le rendement thermodynamique, les principaux paramètres affectant la performance environnementale de la capture de CO₂ sont la

distance de transport du CO₂ et les fuites de séquestration (Bellerive, 2009), deux paramètres non reliés à la conception du système de capture. Une limite importante de l'étude est qu'il est difficile d'estimer les fuites de séquestration géologique, et qu'on leur attribue les mêmes impacts que si elles étaient émises immédiatement (pour ce qui est des 500 premières années de fuites) ou aucun impact (pour ce qui est des fuites subséquentes), alors que la dynamique des changements climatiques pourrait exiger un calcul plus complexe.

D'autres études portent sur l'ACV de la capture et de la séquestration du CO₂. Hertwich, Aaberg, Singh et Stromman (2008) présentent une comparaison détaillée de dix publications sur le sujet. La revue de littérature de Nathalie Bellerive (2009) recoupe en partie cette étude, et recense quelques autres publications sur l'ACV des centrales thermiques sans capture de CO₂. Toutefois, les données de GDF SUEZ conviennent très bien à notre cas d'étude et peuvent être utilisées seules. La modélisation à partir de ces données est décrite à la section 3.5.2.

Finalement, les données d'ACV de la filière du gaz naturel synthétique (SNG) peuvent être retrouvées dans le rapport de Léda Gerber (2008), très détaillé tant pour la modélisation que pour les résultats. Ce rapport présente aussi l'approche logicielle utilisée pour réaliser l'ACV, qui est mieux intégrée à la plateforme *OSMOSE* que la nôtre et facilite le calcul des impacts d'équipements à taille variable, par exemple un compresseur. Cette approche est détaillée dans le LeniWiki et dans un article plus récent (Gerber, Gassner, & Marechal, 2011). La base de données *ecoinvent* contient aussi un modèle différent d'inventaire pour le SNG, basée sur une usine pilote autrichienne. La principale différence est que le modèle de Gerber *et al.* est exportateur net d'électricité, alors que l'usine pilote n'est pas bien optimisée et doit importer de l'électricité vu son rendement thermodynamique inférieur. Le dernier article (Chapitre 6) utilise la donnée *ecoinvent* pour alléger la discussion.

CHAPITRE 2. PRÉSENTATION DES ÉTAPES DE TRAVAIL

La Fig.2.1 présente la structure logique des étapes de ce projet de recherche. Les sources de données se trouvent à gauche, les étapes d'analyse se trouvent au centre, et les communications les plus pertinentes découlant du projet se trouvent à droite.

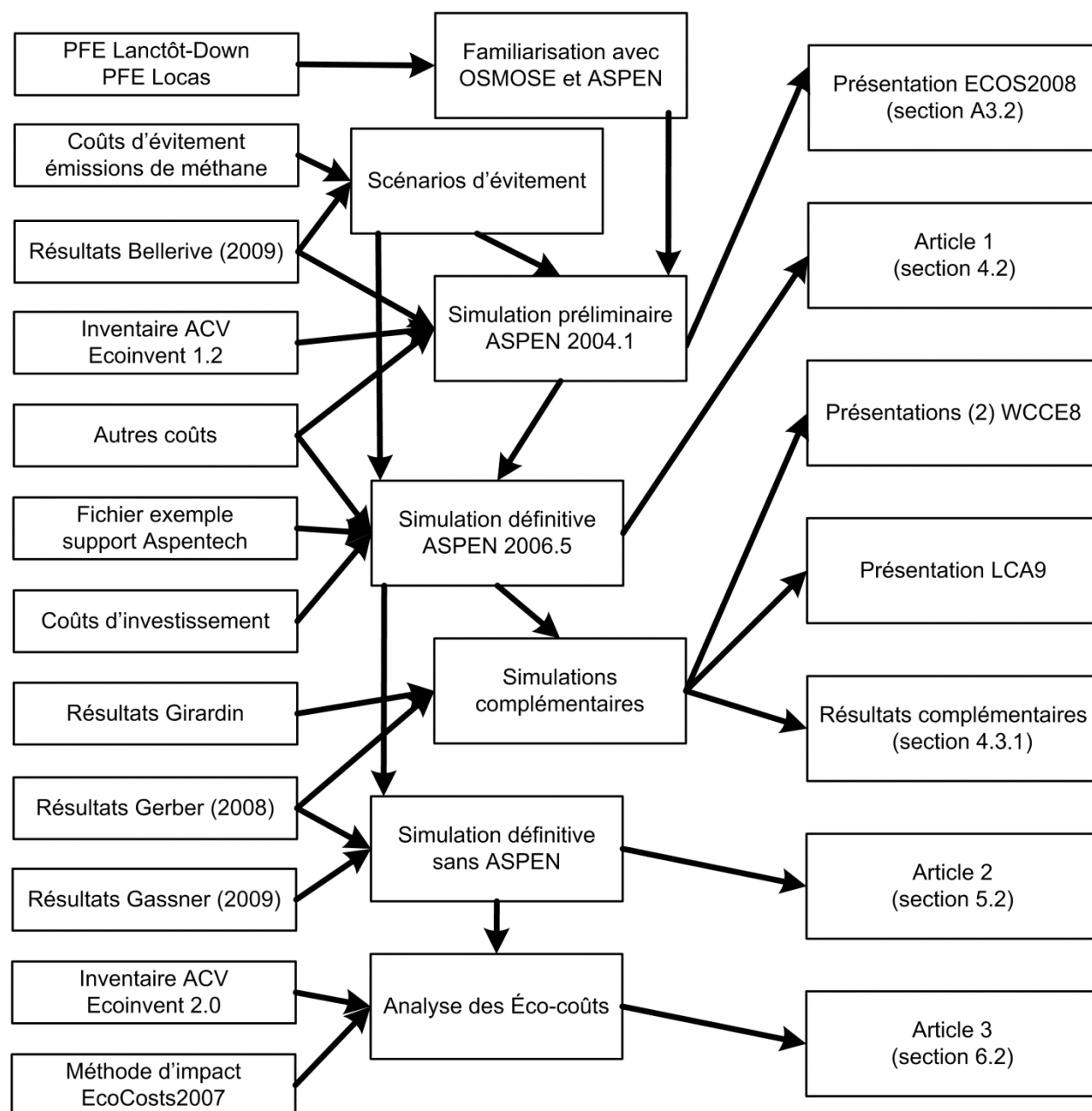


Figure 2.1: Données, étapes d'analyse et publications du projet

La Fig.2.1 montre qu'après les étapes du pré-doctorat (non illustré), le cas d'étude comme tel a débuté par la familiarisation avec les outils logiciels rendus disponibles par le LENI. La version préliminaire du modèle, plutôt rudimentaire surtout au niveau de l'évaluation des coûts d'investissement, est décrite aux sections 3.1.4 et 3.4 de cette thèse. Ce modèle répond quand même aux objectifs 1, 2, 4 et 5 identifiés dans la section 0.2, c'est-à-dire qu'il permet d'établir une courbe Pareto pour différents taux de capture de CO₂, avec et sans ACV, et avec différentes émissions de méthane chez les producteurs de gaz naturel. Ces résultats préliminaires ont été présentés à la conférence *ECOS2008* (Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems).

La version définitive du modèle, décrite aux sections 3.1.5 et 3.5 de cette thèse, répond aux mêmes objectifs, mais avec un degré de détails et de confiance supplémentaires. Cette confiance vient en partie de la possibilité d'utiliser un fichier exemple fourni par le soutien technique d'*Aspentech*, ce qui était impossible auparavant pour des raisons administratives. Toutefois, la principale différence se situe au niveau du modèle des coûts, suffisamment détaillé pour permettre la comparaison de centrales thermiques avec et sans capture de CO₂. L'article subséquent (chapitre 4) contient les résultats de cette comparaison. Pour la suite, les résultats sont réutilisés sans ré-exécuter le modèle.

La possibilité d'utiliser un combustible biogénique comme le gaz naturel synthétique (SNG) a été ajoutée en deux étapes. La première permet de varier la taille du procédé de gazéification et de méthanisation de bois mais ne permet pas d'y capturer le CO₂, au contraire du modèle définitif utilisé pour le deuxième article (chapitre 5). L'ajout du SNG permet, entre autres, de voir comment interagit l'optimisation simultanée de la conception de deux procédés, l'un alimentant l'autre, répondant ainsi aux objectifs 3, 6 et 7 identifiés plus tôt.

L'analyse reliée aux autres catégories d'impacts environnementaux et leur éco-coût a été ajoutée en tout dernier et intégrée au dernier article (chapitre 6). Cela répond aux objectifs 8 et 9. Cette analyse davantage théorique ne dépend aucunement d'un modèle de simulation. Elle s'appuie plutôt sur les résultats déjà publiés à ce moment.

2.1 Structure de la thèse

Comme mentionné à la fin de l'introduction (section 0.2), les articles (chapitres 4 à 6) ne présentent pas suffisamment les détails des simulations informatiques pour en préserver la reproductibilité. Le corps de cette thèse met donc l'emphasis sur cet aspect, particulièrement dans le chapitre 3, afin de combler cette lacune. Les sujets plutôt tangentiels sont relégués aux annexes.

Le chapitre 3 présente la méthodologie, les détails de la configuration logicielle, les détails des calculs utilisés ainsi que des éléments de discussion non spécifiques aux résultats, par exemple sur la convergence. La configuration concerne les versions 2004.1 et 2006.5 d'*ASPEN Plus*. Les résultats présentés à *ECOS2008*, réalisés avec la version antérieure, sont présentés dans ce chapitre à titre d'exemple d'exécution.

Les trois articles soumis avec cette thèse sont intégrés aux chapitres 4, 5 et 6. Ils présentent les résultats et conclusions techniques, économiques et environnementales respectivement. Le résumé de ces articles est intégré au résumé de cette thèse, au début de celle-ci, de même que dans l'abstract de chaque article, ce qui évitera de les répéter ici. Les trois articles ont été entièrement rédigés par l'auteur et les deux premiers ont été publiés dans la revue *Energy* alors que le dernier a été soumis à *International Journal of LCA*. Le premier fait partie d'un numéro spécial consacré à *ECOS2008* et est déjà publié. Le deuxième a été accepté tout juste avant de déposer cette thèse. Le troisième a été soumis en même temps que le dépôt initial de cette thèse.

Le chapitre 7 présente la discussion générale, divisée en trois parties concernant les procédés de capture de CO₂, l'utilisation de l'ACV dans un contexte d'optimisation d'un procédé, et la méthodologie de l'ACV en général. Ce chapitre est suivi d'une conclusion générale.

L'annexe 1 présente une courte réflexion philosophique sur le sujet des problèmes épistémologiques du choix environnemental et se veut un complément à l'introduction de cette thèse, en plus d'un soutien à la discussion générale (section 7.3.2 en particulier).

L'annexe 2 présente la liste des communications d'importance réalisées au cours de ce projet.

L'annexe 3 présente l'article soumis à *ECOS2008*. Celui-ci contient quelques résultats uniques et donne une bonne idée de l'avancement des travaux à cette étape intermédiaire.

2.2 Justification de la structure de la thèse

Bien que chaque article découle de simulations différentes, repose sur des équations différentes et correspond à une discussion de nature différente, il y a une continuité évidente entre ceux-ci vu qu'ils présentent le même modèle à divers degrés de raffinement et répondent aux mêmes objectifs généraux de la recherche. En regroupant les conclusions techniques dans un seul article, les conclusions économiques dans un seul article et les conclusions environnementales dans un seul article, la structure de chaque article est allégée comparativement à une présentation entremêlée. Toutefois, cela n'empêche pas les articles réunis de former un tout cohérent par rapport aux objectifs.

Ainsi, les résultats complémentaires suivent chaque article selon la même organisation, c'est-à-dire qu'ils sont ajoutés à la fin du chapitre 4, 5 ou 6 selon qu'ils sont de nature technique, économique ou environnementale.

CHAPITRE 3. MÉTHODOLOGIE DE SIMULATION

Ce chapitre présente la plateforme de simulation et les calculs utilisés pour obtenir les résultats de chaque article. Ceci concerne en particulier la configuration d'*OSMOSE* et des autres logiciels rattachés, ainsi que quelques fichiers *Excel* utilisés pour traiter les résultats et préparer les figures. La méthodologie sur le plan strictement scientifique est plutôt présentée directement dans les articles, aux chapitres suivants. On peut toutefois en résumer ici les grandes étapes, qui se répètent d'un article à l'autre, selon les objectifs visés :

1. Préparer un modèle de simulation d'un procédé permettant l'optimisation multicritères du design conceptuel de ce procédé (dans ce cas-ci, le procédé de capture de CO₂);
2. Générer une courbe Pareto-optimale de conceptions dont la performance environnementale est évaluée à partir de l'ACV;
3. Générer une courbe Pareto-optimale de conceptions dont la performance environnementale est évaluée à partir d'un calcul simpliste des impacts, sans ACV (en tout cas, sans les processus d'arrière-plan);
4. Comparer les résultats pour identifier les contributions spécifiques de l'ACV.

Le processus itératif de simulation d'*OSMOSE* dans la Fig.3.1 représente le cœur de cette méthodologie. La case du haut représente la simulation du procédé de capture de CO₂ sous *ASPEN Plus*. La case de droite représente *EASY*, le programme *FORTTRAN* qui simule le réseau vapeur de la centrale thermique à partir de la demande de chaleur du procédé de capture de CO₂, qui lui est spécifiée sous la forme d'une courbe composite linéaire par morceaux. *EASY* retourne la production nette d'électricité ainsi qu'une estimation du nombre et de la surface moyenne des échangeurs de chaleur requis. Chaque itération demande donc l'initialisation complète des deux logiciels. La case du bas représente le calcul manuel (c'est-à-dire directement en code *MATLAB*) de l'évaluation des objectifs, en l'occurrence « cost of electricity » et « global warming potential » (GWP) avec ou sans recours aux données d'ACV (processus d'arrière-plan). Finalement, la case de gauche représente l'algorithme génétique qui établit de nouvelles variables de décision à chaque itération, en recombinaison les propriétés d'une population de configurations déjà provisoirement Pareto-optimales, à la manière d'un processus de sélection naturelle.

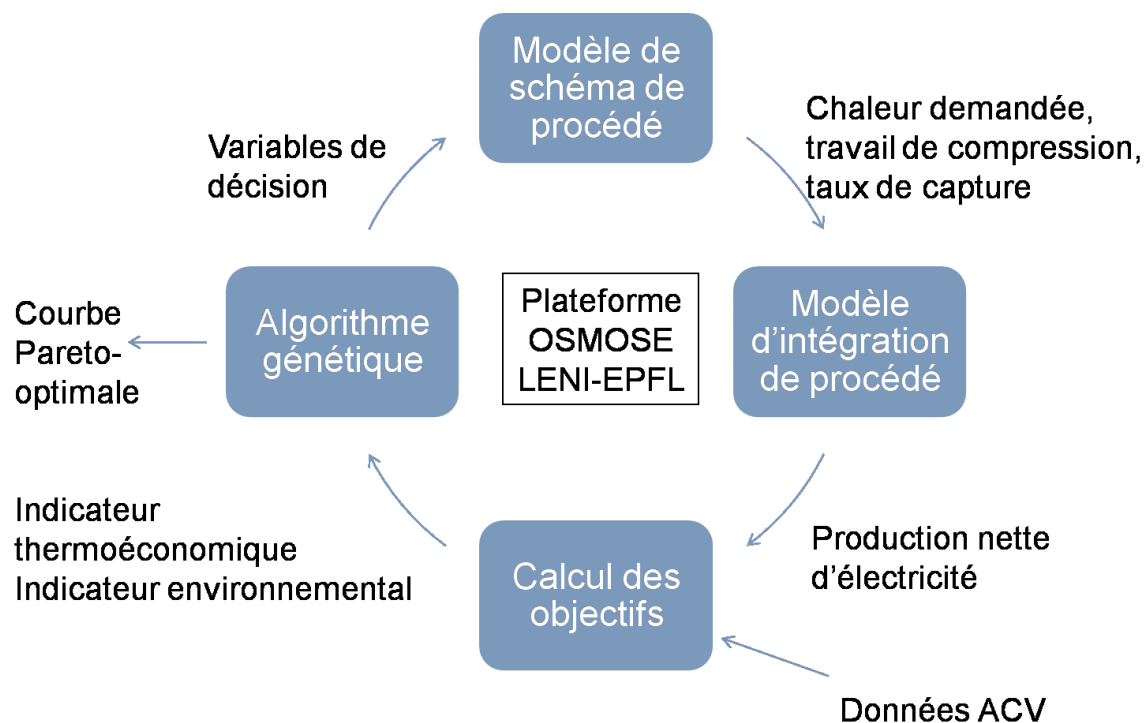


Figure 3.1: Processus itératif de simulation

La Fig.3.1 s'insère dans les cases « Simulation préliminaire » et « Simulation définitive » de la Fig.2.1, ce qui permet de situer la plateforme de simulation dans l'ensemble des étapes du travail. On remarque aussi la similarité entre la moitié gauche de la Fig.3.1 et la partie en haut à droite de la Fig.5.2. Cette dernière montre comment les données générées à partir de ce modèle sont ultérieurement traitées, ce qui correspond par ailleurs à la case « Simulation définitive sans ASPEN » de la Fig.2.1.

En résumé, la section méthodologique de chaque article et les Fig.2.1, 3.1 et 5.2, de même que la courte description ci-haut décrivent la méthodologie de recherche, alors que les sections suivantes se consacrent à la méthodologie de simulation. Les sections 3.1 à 3.3 regroupent les étapes de configuration selon chaque logiciel : *ASPEN Plus*, *EASY*, et *MATLAB* (incluant le calcul des objectifs, l'algorithme génétique, et la configuration générale d'*OSMOSE*). La section 3.4 illustre l'exécution de ces logiciels par un exemple de résultats : ceux présentés à *ECOS2008*. Les sections 3.5 à 3.7 développent les calculs ayant servi respectivement aux trois articles soumis avec cette thèse. En particulier, la section 3.5.2 décrit l'ACV du système de capture de CO_2 et la transformation des résultats en données utilisables par l'algorithme de la Fig.3.1.

3.1 Configuration d'*ASPEN Plus*

ASPEN Plus est un logiciel commercial utilisé pour la simulation de nombreux procédés de génie chimique. Il convient pour la simulation thermodynamique et cinétique des systèmes MEA et CO₂, grâce au bloc *RadFrac* et son option cinétique *RateSep*, qui peuvent être utilisés pour modéliser autant l'absorbeur que le désorbeur. Pour obtenir le fichier exemple en lien avec les travaux de l'université du Texas à Austin présentés dans la revue de littérature, il faut demander la *solution 122271*, disponible depuis 2008, au support technique d'*Aspentech*.

Du point de vue d'*OSMOSE*, le logiciel *ASPEN Plus* sert à mettre en relation des variables de décision, comme le diamètre de l'absorbeur ou la température de l'absorbant, avec des variables nécessaires à l'évaluation des objectifs, comme la quantité de chaleur requise ou la quantité de CO₂ effectivement capturée. Cela est impossible sans simuler correctement la thermodynamique et la cinétique du procédé.

Avant de présenter les configurations du procédé utilisées pour la simulation, il convient de faire quelques commentaires sur la nécessité d'une simulation de la cinétique, sur les différents niveaux de convergence impliqués et sur la configuration générale d'*ASPEN*. La dernière sous-section présentera l'interface logicielle entre *ASPEN* et *MATLAB*.

3.1.1 Nécessité de simuler la cinétique de la capture de CO₂

Pour capturer le CO₂ avec le MEA, n'importe quelle vitesse de réaction peut être obtenue avec une surface de contact gaz-liquide suffisamment élevée, surface fournie par le garnissage de l'absorbeur. Un modèle sans cinétique pourrait alors très bien fournir l'enthalpie d'une solution de MEA en fonction de sa température et de sa charge en CO₂, donc de sa pression partielle, et permettre d'en déduire les quantités de chaleur échangées avec le cycle vapeur de la centrale à chaque point du procédé de capture. Par contre, un tel modèle ne permettrait pas d'estimer la taille de l'absorbeur, encore moins son coût d'investissement ou ses impacts environnementaux. Fondamentalement, c'est donc parce que la masse du garnissage est souhaitée relativement précise dans le calcul des objectifs qu'il faut incorporer un modèle de cinétique à la simulation. Sinon, une relation semi-empirique entre la masse du garnissage et le rendement de la capture à chaque étage serait suffisante pour décrire le système entier sans modèle de cinétique.

3.1.2 Commentaires sur les niveaux de convergence

L'optimisation, qui se déroule sous *MATLAB*, est considérée convergée lorsqu'on peut constater qu'il y a une relation suffisamment précise entre la valeur de chaque variable de décision et la position correspondante le long de la courbe Pareto-optimale, ce qui implique que cette dernière est devenue définitive au fil des itérations (évolution génétique achevée). En pratique, chaque simulation ne s'arrête qu'après un nombre d'itérations prédéfini dans *OSMOSE*, peu importe le degré de précision atteint. Vu l'incertitude du modèle, la convergence partielle de l'optimisation n'est pas une source significative d'incertitude additionnelle.

Comme chaque itération correspond à une simulation entière effectuée sous *ASPEN* et une autre sous *EASY*, il faut aussi que ces simulations convergent individuellement. La simulation *ASPEN* consiste elle-même en plusieurs boucles imbriquées, et la convergence d'une boucle interne est nécessaire à la convergence d'une boucle externe. Ainsi, on parlera de plusieurs niveaux de convergence, de l'extérieur vers l'intérieur : celle de l'optimisation, celle d'une itération, celle d'un « Design Spec », celle d'une boucle de recirculation, celle d'un bloc (procédé unitaire), celle de l'initialisation d'un bloc, et finalement celle du calcul de l'état thermodynamique d'un écoulement. Chacun de ces niveaux est sujet à ses propres difficultés de convergence. Dans ce cas-ci, et autant avec les deux versions d'*ASPEN*, le problème le plus fréquent, et largement non résolu, est la non-convergence des blocs les plus complexes, l'absorbeur et le désorbeur (en mode « RateSep »), ou de leur initialisation (en mode « RadFrac »). *EASY* comporte aussi quelques problèmes de convergence et leur fréquence semble surtout dépendre du nombre de niveaux de pression définis. Ces problèmes seront abordés plus loin.

3.1.3 Configuration générale d'*ASPEN Plus*

L'évolution d'*ASPEN* a vu naître différentes composantes logicielles liées à la thermodynamique des systèmes MEA et CO₂. La plus ancienne est le « property method AMINES », qui n'est pas basée sur un modèle NRTL, et qui n'est pas utilisable pour simuler la cinétique des réactions. Ensuite est apparu le « property insert » *KEMEA*, qui est basé sur le modèle NRTL, mais dont les paramètres de cinétique sont erronés. Finalement, le fichier exemple accompagnant la « solution » 122271 peut être considéré l'état de l'art. Les simulations sous la version 2004.1, incluant les résultats présentés à *ECOS2008*, ont été réalisées avec *KEMEA*, en essayant d'utiliser

au mieux la documentation technique du fichier exemple (DeVincentis, 2008) pour en corriger les erreurs. Les paragraphes qui suivent expliquent la configuration des systèmes MEA et CO₂ en général sous *ASPEN Plus* 2004.1 et 2006.5, mais dans un contexte d'optimisation en interaction avec un autre logiciel comme *MATLAB*. Les explications sont en ordre d'apparition dans l'interface graphique, en commençant par la section « Setup » du « Data browser ».

Il est recommandable de choisir le système d'unités dès le départ et définitivement, car la retransmission des données d'*ASPEN* vers *MATLAB* ne permet pas de conversion automatique d'unités. Dans les options de simulation, on veillera aussi à diminuer le nombre maximal d'erreurs sévères permises. Ces modifications sont nécessaires parce que l'interface de communication avec *MATLAB* se fie uniquement sur la présence ou l'absence de fichier de sortie pour établir l'état de convergence de chaque itération. Il est donc préférable de voir occasionnellement une itération avorter même si elle allait converger, que de voir une itération diverger mais générer quand même un fichier de sortie erroné. On veut aussi que le programme avorte le plus tôt possible dès qu'il est évident qu'il ne convergera pas, afin de démarrer l'itération suivante le plus tôt possible. D'un autre côté, on préfère laisser tourner une itération qui a trébuché sur quelques erreurs lors de l'initialisation d'une boucle de recirculation, mais semble bien vouloir converger après cela. Ainsi, une limite d'environ 5 erreurs, pouvant varier selon la stabilité du modèle, apparaît raisonnable.

Si on utilise la version 2004.1, on veillera à définir correctement la présence des CO₂, MEA, H₂O, H₂S et N₂ avant d'importer KEMEA, et ce, même si le système ne contient pas de H₂S. Qu'on utilise la version 2004.1 ou 2006.5, les composantes mineures du gaz de combustion peuvent être ajoutées ou remplacées par le N₂. Elles seront considérées inertes, y compris l'oxygène, même si ce dernier dégrade chimiquement le MEA en réalité. C'est suite à cette étape qu'on dessine le diagramme d'écoulement selon la superstructure qu'on veut faire correspondre aux variables de décision.

Lorsqu'on spécifie la composition et l'état thermodynamique des flux entrant dans le diagramme, il faut veiller à ce qu'un flux servant à initialiser une boucle de recirculation soit situé au début de l'exécution de la boucle. Aussi, il faut noter que lorsqu'on utilisera l'interface avec *MATLAB* pour varier la composition initiale d'un mélange (de MEA et de CO₂ par exemple), la quantité substituée sera celle présente *après* dissociation du flux défini par défaut. Cela mène à des

résultats inattendus vu qu'une certaine quantité se retrouve dissociée en double, soit avant et après le moment de la substitution dans l'exécution du modèle. Une solution à ce problème est de ne faire entrer dans le système que des substances indissociables, pour ensuite les mélanger dans un échangeur fictif réglé à la température initiale voulue et dont on ignorera la chaleur de mélange, tout aussi fictive.

Pour spécifier un absorbeur ou un désorbeur, il faut utiliser le bloc *Radfrac* en mode *Rate-Based*. Le nombre d'étages, lorsque le garnissage n'est pas en plateaux, est analogue au choix du nombre d'éléments dans un problème d'éléments finis. C'est un compromis entre la précision des résultats, le temps de calcul, et certaines difficultés de convergence du bloc lorsque le nombre est élevé. Le fichier exemple d'*ASPEN* suggère 20 étages, mais il est raisonnable d'en utiliser moins pour l'optimisation d'une conception préliminaire, où l'on veut explorer rapidement l'espace des solutions avant de préciser un design définitif.

Il n'est pas utile de spécifier une chute de pression car elle sera recalculée par le modèle du garnissage et n'est pas assez grande pour affecter significativement l'état thermodynamique de chaque étage. La valeur calculée pourra être utile pour estimer la puissance d'un souffleur.

Pour une colonne à l'intérieur d'une boucle de recirculation, on peut diminuer le nombre maximal d'itérations dans les options de *RateSep* de 25 à 15 environ. Cela sauve un peu de temps dans des situations où le bloc ne peut pas converger à la première itération de la boucle mais le pourra à la deuxième ou troisième. C'est cette même situation qui requiert une limite d'erreurs sévères supérieure à 1. Si le film liquide doit être discrétisé, comme dans le cas d'un absorbeur, il peut aussi être nécessaire d'augmenter ici la tolérance pour faciliter la convergence, par un facteur allant jusqu'à 20. En effet, il semblerait que l'erreur systématiquement introduite par la discrétisation rende inatteignable la précision souhaitée par défaut, ce qu'il faut corriger manuellement pour le bloc et pour les boucles qui lui sont extérieures.

Pour spécifier un absorbeur avec *KEMEA*, il faut associer la réaction « MEA-CO₂ » à tous les étages, ce qui active la modélisation des réactions lentes. Il faut ensuite spécifier un « holdup » en mètres cubes pour l'ensemble des étages. Cette valeur n'affecte que l'enchaînement entre la dernière itération de l'initialisation et la première itération de *RateSep*, qui utilise un hold-up calculé. L'ordre de grandeur de hold-up approprié semble correspondre au volume de la couche

mince de réaction et non au volume total de liquide retenu⁵. Modifier les paramètres de convergence et ajouter des estimés n'améliore pas beaucoup la probabilité de convergence du bloc; cela est documenté plus en détails dans le projet de fin d'études de Martine Locas.

Avec la version 2006.5 et le fichier exemple, ces paramètres sont ajustés par défaut. Il ne reste qu'à ajuster ceux qui doivent être proportionnels à la taille des colonnes. Les estimés de flux et de composition du fichier exemple peuvent être retirés, ou sinon remplacés en cas de problème de convergence.

La dernière étape de spécification d'un absorbeur est l'ajout du garnissage. Le « packing size », s'il n'est pas automatiquement ajouté pour le modèle de garnissage choisi, doit correspondre au diamètre de la rondelle. Il faut activer « Rate-based calculations », mettre « Interfacial area factor » à 1,5, « Liquid film resistance » à « Discrxn », et « Vapor film resistance » à « Film ». Sous l'onglet « Optional », il faut ajouter 5 points de discrétisation du film liquide, aux positions 0,1, 0,2, 0,3, 0,4 et 0,5, ce qui est logique vu que la couche mince de réaction est située dans la première moitié de la couche de diffusion, tel qu'illustré à la Fig.1.1. Ces choix sont justifiés dans (DeVincentis, 2008) et déjà inclus dans le fichier exemple.

Le « Interfacial area factor » est un facteur de calibration de la cinétique apparemment arbitraire. À ce titre, son incertitude est assimilable à l'incertitude sur le prix du garnissage⁶. La calibration est vérifiable pour deux points expérimentaux. Premièrement, on peut comparer le taux de capture de CO₂ entre le fichier exemple (65,3 %), l'équivalent sous la version 2004.1 (62,5 %), et le résultat expérimental ayant inspiré le fichier exemple (69 %, une valeur potentiellement erronée car incompatible avec la teneur mesurée en CO₂ dans l'absorbant). Deuxièmement, on peut comparer le taux de capture de CO₂ entre le modèle de SRI (Anonymous, 1987), basé sur les données d'une usine pilote ayant fonctionné en 1982 à Lubock, Texas (90 %), et la simulation

⁵ Il ne faut pas changer l'unité du holdup, ni le transformer en « residence time », car cela change l'unité implicite des constantes de réaction. Ce détail illogique et bien caché a été confirmé le 19 mars 2008 par courriel avec Gary chez *Aspentech*. De plus, spécifier une valeur de holdup irréaliste aide parfois la convergence du bloc, tout comme pour les estimés de température. Tel est l'art de la simulation.

⁶ Pour un taux de capture donné, une sous-estimation de la rapidité des réactions peut toujours être compensée par l'achat d'un surplus de garnissage. Ainsi, une erreur de 10% sur le « Interfacial area factor » a le même effet sur les résultats qu'une erreur de 10 % sur le prix du garnissage.

ASPEN sous les mêmes conditions (91,0 %). Dans ces deux cas, les résultats correspondent nettement mieux aux résultats expérimentaux avec un « Interfacial area factor » de 1,5 plutôt que 1,0. Faute de données expérimentales supplémentaires, il faudra donc supposer que 1,5 est la meilleure calibration pour l'ensemble des conceptions possibles.

Pour spécifier un désorbeur, on peut copier la spécification d'un absorbeur. On peut ensuite retirer tout ce qui concerne les réactions lentes pour accélérer la simulation, même si le fichier exemple ne le fait pas. Il faut faire attention de spécifier rebouilleurs et condenseurs, s'il y a lieu, avec un « Duty » bien estimé. Sans discrétisation de film, on peut rétablir une tolérance de convergence plus serrée. Lorsqu'il est nécessaire de fixer la teneur en CO_2 à la sortie d'un désorbeur, plutôt que sa charge thermique ou son ratio de flux, on ajoute un « design spec » spécifiant « mole purity » pour le produit liquide. Étant donnée la dissociation, la teneur en CO_2 se calcule en divisant la somme des concentrations molaires de CO_2 , HCO_3^- , MEACOO^- et CO_3^{2-} par la somme des concentrations de MEA, MEACOO^- et MEAH^+ . Ce « design spec » est obtenu en variant la charge thermique, dont la borne minimale peut être mise à 0. Le garnissage du désorbeur exclut l'étage du rebouilleur et du condenseur. Si on retire les réactions lentes, « liquid film resistance » devient « Filmrxn ». Le « Interfacial area factor » devient inutile⁷.

Tant qu'à retirer les réactions lentes du désorbeur, on peut se demander si on peut aussi en retirer les phénomènes de diffusion et simplement simuler l'équilibre thermodynamique avec *Radfrac*. Le projet de fin d'études de Camille Lanctôt démontre que le comportement du désorbeur, y compris la puissance du rebouilleur, diffère peu entre le modèle à l'équilibre et le modèle cinétique. La cinétique est nécessaire seulement lorsqu'on veut ajouter le diamètre et la hauteur des désorbeurs comme variables de décision à l'optimisation. Toutefois, ces variables convergent difficilement, justement parce qu'elles ne contribuent pas grand-chose aux résultats. Une meilleure raison de conserver le calcul de la cinétique est peut-être pour obtenir des écarts de

⁷ Il est d'ailleurs curieux que le fichier exemple spécifie une valeur de 2.0, différente de l'absorbeur, alors même qu'on peut la changer sans aucun effet sur les résultats, même dans les conditions du fichier exemple. Il est aussi curieux de spécifier des réactions lentes dans le désorbeur alors qu'il est impossible de le faire dans les échangeurs alimentant le désorbeur, toujours modélisés à l'équilibre et où peuvent donc se dérouler des réactions rapides, même en mode « liquid-only ». Une explication possible de ce mystère est que *Aspentech* a copié un absorbeur pour spécifier le désorbeur, sans trop réfléchir à la pertinence de laisser ces paramètres en place.

température réalistes entre les liquides et les gaz lorsque ceux-ci interviennent dans les échangeurs de chaleur externes.

Pour configurer un compresseur, il peut être nécessaire d'éliminer artificiellement toute trace de MEA dans l'écoulement, par exemple avec un « Transfer Block », sous peine de résultats erratiques allant jusqu'à la non-convergence du bloc. Toutefois, cela n'est pas possible pour un compresseur dans une boucle de recirculation, vu que cela risquerait de violer la conservation de la masse et d'empêcher la convergence de la boucle.

Pour configurer un échangeur ou un autre bloc où circule l'absorbant riche, il vaut mieux en surestimer la pression de fonctionnement. Cela empêche la phase gazeuse de prendre trop de place. Non seulement de tels changements de phase ayant lieu dans un échangeur sont peu réalistes, mais en plus ils rendent impossible la construction, nécessaire pour *EASY*, d'une courbe composite linéaire par morceaux (chaleur spécifique approximativement constante).

Si on utilise le fichier exemple, les constantes de réaction sont déjà configurées. Elles utilisent implicitement la mole et le mètre cube comme unités. La section « Reactions » ne sert que pour le film liquide discrétisé d'un absorbeur alors que la section « Chemistry » sert en général. Au final, « Chemistry » doit contenir au moins cinq réactions réversibles, alors que « Reactions » transforme deux de ces réactions réversibles en quatre réactions irréversibles, ce qui donne au final un minimum de sept réactions :

- $\text{MEA}^+ + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{MEA} + \text{H}_3\text{O}^+$
- $2.0 \text{ H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$
- $\text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CO}_3^{-2}$
- $\text{CO}_2 + \text{OH}^- \rightarrow \text{HCO}_3^-$
- $\text{HCO}_3^- \rightarrow \text{CO}_2 + \text{OH}^-$
- $\text{MEA} + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{MEACOO}^- + \text{H}_3\text{O}^+$
- $\text{MEACOO}^- + \text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow \text{MEA} + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$

On remarque que toutes ces réactions ont une cinétique de premier ordre pour tous les réactifs sauf l'eau. Si on utilise *KEMEA* plutôt que le fichier exemple, il faut corriger la constante de

cinétique et l'énergie d'activation de chaque réaction, à partir de la Table 3 de la documentation (DeVincentis, 2008).

Il ne semble pas nécessaire de modifier les options de convergence des boucles de re-circulation, excepté qu'il ne faut pas imbriquer une boucle de faible tolérance dans une boucle de haute tolérance. L'échec de convergence d'une boucle de recirculation dépend habituellement de l'échec de convergence d'un absorbeur ou d'un désorbeur dans la boucle. Si jamais une boucle de re-circulation s'avérait difficile à converger, il pourrait être avisé de changer de méthode. Dans ce cas, le projet de fin d'études de Martine Locas peut être une référence utile.

Les « Design spec », « Calculator » et « Transfer Block » sont parfois nécessaires. Un « Design spec » peut être utile pour ajuster une charge de refroidissement afin d'équilibrer la balance d'eau dans le système. Un « Transfer Block » peut être utile afin de faire correspondre la charge d'un souffleur à la perte de pression dans un garnissage, ou faire correspondre la température d'un échangeur à une température mesurée ailleurs. On remarque que l'interface logicielle avec *MATLAB* ajoute automatiquement deux « Calculator » nommés « Input » et « Output »; ces noms deviennent réservés et doivent donc être évités.

3.1.4 Diagramme d'écoulement sous *ASPEN Plus* 2004.1

La configuration du diagramme d'écoulement se fait de la même manière avec l'une ou l'autre version du logiciel. Par contre, les fichiers utilisés dans ce projet diffèrent parce que la version 2004.1 a été utilisée pour obtenir les résultats préliminaires présentés à *ECOS2008* (annexe 3), alors que la version 2006.5 a été utilisée pour obtenir les résultats définitifs présentés dans le premier article (chapitre 4) et réutilisés dans les deux autres (chapitres 5 et 6). Cette section présente donc le diagramme d'écoulement qui correspond à la Fig.A3.1 en annexe, à titre d'exemple pour illustrer la méthodologie de spécification d'un tel diagramme.

La Fig.A3.1 permet d'utiliser un ou deux désorbeurs, dans n'importe quel ordre, et de retourner l'absorbant pauvre ou mi-pauvre en haut ou au milieu de l'absorbeur. Comme ces options ne sont jamais utilisées toutes en même temps, il y a toujours des éléments de ce diagramme inutilisés lors d'une itération donnée; la Fig.A3.1 représente donc une superstructure. Une désorption à un seul désorbeur peut être simulée en spécifiant la même pression dans les deux désorbeurs. La grande boucle est ouverte, ce qui simplifie la convergence. Cela requiert toutefois de faire

correspondre les teneurs en CO_2 entre la sortie des désorbeurs et l'entrée de l'absorbeur, à la fois pour l'absorbant pauvre et mi-pauvre. Pour éviter que le système soit surdéterminé, il faut alors deux rebouilleurs de puissance variable, chacun avec un « Design Spec ». On remarque aussi l'absence d'échangeurs de chaleur internes au diagramme, ceux-ci étant plutôt simulés par *EASY*.

La complexité de cette superstructure reflète le désir, à ce stade du projet, de permettre une grande flexibilité dans l'utilisation des ressources énergétiques de la centrale thermique, afin d'explorer toutes les pistes possibles d'amélioration de l'efficacité énergétique. En particulier, plus l'écart de température entre les deux rebouilleurs est grand, plus il est facile d'en alimenter un avec de la chaleur autrement perdue. Ainsi, il pourrait sembler avantageux de désorber d'abord à basse température et à basse pression, et ensuite à haute température et à haute pression, même si cela est contraire à l'idée générale de l'efficacité supérieure des échanges à contre-courant. Toutefois, cette option ne s'est pas révélée avantageuse puisque l'algorithme l'a rejetée, tout comme il a rejeté l'option d'injecter un absorbant mi-pauvre à mi-hauteur de l'absorbeur. En éliminant ces deux options, une version ultérieure du diagramme sera simplifiée.

L'absorbeur et les deux désorbeurs ont 10 étages chacun. Le souffleur est en aval de l'absorbeur et sa pression correspond à la perte de charge dans l'absorbeur, information obtenue par l'entremise d'un « transfer block ». En pratique, le souffleur est généralement en amont, mais cela aurait inutilement ajouté une boucle. La balance d'eau est assurée par l'ajustement de la température de l'absorbant pauvre entrant dans l'absorbeur, avec un « Design Spec ». Le refroidissement initial des gaz de combustion est configuré pour qu'il y ait saturation d'eau peu importe la température, correspondant à l'utilisation d'un refroidisseur à contact direct. Le condensat en aval du désorbeur, qui contient des traces de MEA, est rejeté, facilitant ainsi la convergence du désorbeur sans boucle ni condenseur interne. Vu que la balance d'eau est contrainte, cette situation correspond en fait à un retour du condensat à la tête de l'absorbeur. Le « Design Spec » doit donc considérer le débit approximatif de ce condensat.

Le compresseur final ne compresse qu'un flux virtuel de CO_2 pur. Il utilise seulement deux refroidissements intermédiaires, à 40°C , une configuration probablement sous-optimale mais utilisée par GDF SUEZ. On remarque que le compresseur ne fait pas vraiment partie du système de capture et aucune variable de décision ne s'y rapporte. Il est néanmoins important de modéliser l'effet de la pression de désorption sur la consommation électrique du compresseur.

Sinon, on pénaliserait la désorption à haute pression. La chaleur et l'eau rejetées par le compresseur ne sont pas comptabilisées.

Le refroidissement final de l'absorbant se fait à une température fixe de 43°C et non à la température initiale. Cela simplifie le transfert des données vers *EASY* et n'affecte pas le résultat vu qu'on ne peut pas produire d'électricité à cette température. La composition du gaz de combustion correspond à 144 tonnes de CO₂ à l'heure et une dilution d'azote correspondant à 8 mol de gaz inerte sec par mol de CO₂, ce qui implique une recirculation à taux fixe dans la turbine à gaz. On remarque qu'il ne sert à rien de rechercher la composition exacte de la fumée vu qu'elle varie selon le type de gaz naturel et vu que tous les composants autres que le CO₂ sont considérés inertes par le modèle chimique.

3.1.5 Diagramme d'écoulement sous *ASPEN Plus* 2006.5

Cette section présente le diagramme d'écoulement définitif, Fig.3.2, correspondant aux simulations ayant servi pour le premier article au chapitre 4. Les modifications apportées reflètent l'évolution du projet au fil des résultats obtenus, et non une différence de fonctionnement entre les versions 2004.1 et 2006.5. Aussi, la Fig.3.2 diffère de la Fig.4.1 car cette dernière a été modifiée pour des raisons esthétiques et pour correspondre davantage à la situation réelle qu'à la simulation. En particulier, la configuration telle que simulée comporte toujours une boucle ouverte et un refroidisseur de fumée, comme sur la Fig.3.2.

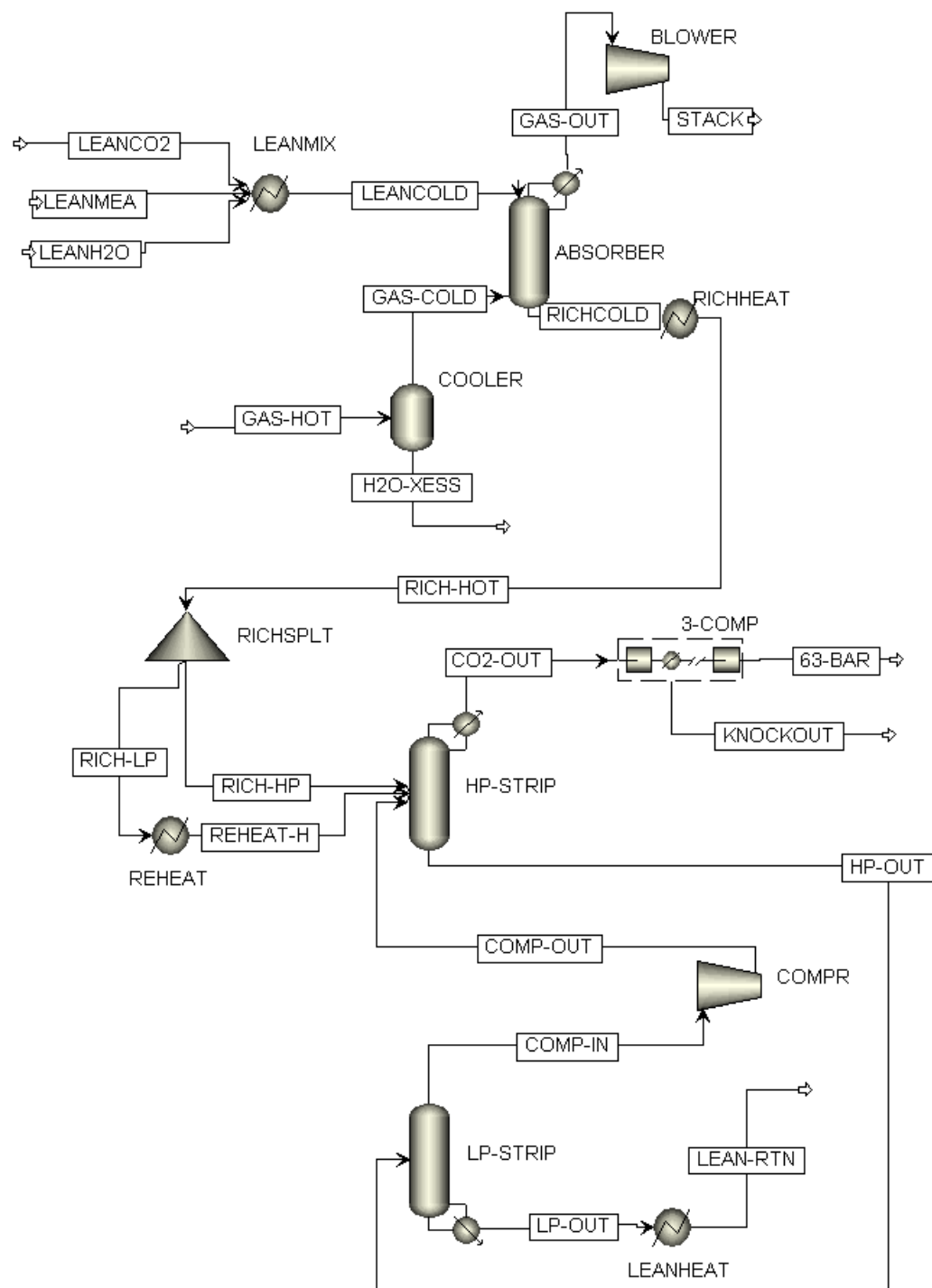


Figure 3.2: Diagramme d'écoulement définitif

Par rapport au diagramme précédent, on observe plusieurs changements. D’abord, la disparition de l’absorbant mi-pauvre, ainsi que du rebouilleur correspondant, et l’apparition d’un absorbant riche surchauffé à la mi-hauteur (étage 6) de l’absorbeur du haut. La balance d’eau est assurée par un condenseur de puissance variable, interne à l’absorbeur. Le condenseur principal est maintenant interne au désorbeur. L’absorbant y entre plus bas, à l’étage 3, afin de permettre des échanges de chaleur entre le condensat et le CO₂ humide remontant au-delà de ce point d’entrée. Le compresseur final considère la présence d’eau, mais on en retire quand même virtuellement les traces de MEA, tout comme pour le souffleur. Les refroidissements sont tous faits à la température de 40°C généralement acceptée dans la littérature, incluant condenseur, fumée et absorbant. En effet, l’utilisation de températures plus élevées semble avoir toujours un effet nul ou néfaste, alors que l’utilisation de températures plus basses pourrait être avantageuse si la température extérieure le permettait, mais cela n’est pas d’un grand intérêt d’un point de vue d’intégration de procédés. En effet, le choix d’un pincement pour l’eau de refroidissement interagit peu avec le reste du système; ce n’est qu’un simple compromis entre le coût du combustible, de l’eau et des échangeurs. L’efficacité isentropique des compresseurs et du souffleur a été harmonisée à 0,72, la valeur par défaut pour le compresseur final.

En conclusion, la Fig.3.2 montre une superstructure grandement simplifiée, comparativement à la Fig.A3.1, tout en permettant une flexibilité supplémentaire. Cela a été rendu possible en tenant pour acquises certaines conclusions obtenues avec le diagramme précédent. Dans le même ordre d’idées, une version ultérieure pourrait être encore davantage simplifiée mais introduire quelques échangeurs de chaleur internes, approchant ainsi le modèle d’une conception finale.

3.1.6 Interface *MATLAB-ASPEN Plus*

La communication entre *MATLAB* et *ASPEN Plus* est assurée par une composante d’*OSMOSE* qui s’appelle le « Aspen handler ». Elle a été créée par Martin Gassner et ensuite améliorée par nous, qui en avons aussi écrit la documentation technique sur le LeniWiki⁸.

⁸ <http://leniwiki.epfl.ch/index.php/OSMOSE/Documentation/Aspen>

C'est la commande « `define_aspentag` » qui appelle le « Aspen handler ». *OSMOSE* identifie si la variable est à importer ou à exporter et annexe un texte approprié au fichier « `.inp` » utilisé par *ASPEN*. Par exemple, la définition :

```
o = define_aspentag(o, 'Pressure', 'bar', ...
    'Block-Var Block=COMPR Variable=PRES', 'Sentence=PARAM');
```

permet de remplacer la pression par défaut à la sortie d'un compresseur par une pression calculée et enregistrée dans une variable nommée « Pressure » dans *MATLAB*. Pour ce faire, *MATLAB* va ajouter le texte suivant au fichier « `.inp` », par exemple pour une pression calculée de 1,751261 bar :

```
CALCULATOR INPUT
  DEFINE v1 Block-Var Block=COMPR Variable=PRES &
    Sentence=PARAM
F      v1= 1.751261
      WRITE-VARS v1
```

Pour ensuite lire la puissance du même compresseur et la ramener dans une variable *MATLAB*, après simulation, on utilise une syntaxe similaire :

```
o = define_aspentag(o, 'COMPR_POWER', 'Watt', ...
    'Block-Var Block=COMPR Variable=BRAKE-POWER', 'Sentence=RESULTS');
```

Le texte ajouté au fichier « `.inp` » devient:

```
CALCULATOR OUTPUT
  DEFINE v1 Block-Var Block=COMPR Variable=BRAKE-POWER &
    Sentence=RESULTS
F      write(56,*) v1
      READ-VARS v1
```

Ceci permet à *MATLAB* de recopier la donnée vers la variable « `COMPR_POWER` », en la lisant depuis le fichier texte « `fort.56` » juste après la fin de l'exécution d'*ASPEN*.

La Table 3-1 donne deux exemples d'ensembles de variables ainsi définies. Les deux correspondent respectivement aux publications de l'annexe 3 avec *ASPEN Plus* 2004.1 et du chapitre 4 avec *ASPEN Plus* 2006.5. La table indique aussi si chaque variable est une variable de décision directement transmise à *ASPEN*, une variable calculée transmise à *ASPEN*, ou un résultat transmis depuis *ASPEN*. On remarque que le nombre de variables a diminué avec la version ultérieure, à mesure que certains éléments de la superstructure sont apparus inutiles.

Table 3-1 : Variables de l'interface *MATLAB-ASPEN Plus* pour les simulations publiées

Nom	Description	v. 2004.1	v. 2006.5
split_co2, ...mea, ...h2o	Débit absorbant mi-pauvre	Calculée	N/A
lean_co2, ...mea, ...h2o	Débit absorbant pauvre	Calculée	Calculée
Pressure	Pression sortie compresseur	Calculée	Calculée
Hp	Pression désorbeur HP	Calculée	Calculée
Lp	Pression désorbeur LP	Calculée	Décision
T_SPLITCOLD	Temp. absorbant mi-pauvre froid	Décision	N/A
T_COOLER	Temp. fumée froide	Décision	N/A
T_RICHHEAT	Temp. absorbant riche	Décision	Décision
T_REHEAT	Temp. absorbant préchauffé	N/A	Décision
rich2hp	Fraction riche vers désorb. HP	Calculée	Décision
hp2split	Fraction désorb. HP vers mi-abs.	Calculée	N/A
hp2abs	Fraction désorb. HP vers abs.	Calculée	N/A
lp2split	Fraction désorb. LP vers mi-abs.	Calculée	N/A
lp2abs	Fraction désorb. LP vers abs.	Calculée	N/A
HP_target	Teneur CO ₂ sortie désorb. HP	Calculée	N/A
LP_target	Teneur CO ₂ sortie désorb. LP	Calculée	Décision
D_ABS, D_HP, D_LP	Diamètre	Décision	Décision
HETP_ABS, ...HP, ...LP	Hauteur par étage	Décision	Décision
CO2_uncaptured	Débit CO ₂ non-capturé	Résultat	Résultat
CO2_captured	Débit CO ₂ capturé	Résultat	Résultat
T_PRE_RICHHEAT	Temp. absorbant riche froid	Résultat	Résultat
T_PRE_splitheat	Temp. absorbant mi-pauvre chaud	Résultat	Résultat
T_PRE_leanheat	Temp. absorbant pauvre chaud	Résultat	Résultat
T_PRE_REHEAT	Temp. absorbant riche chaud	Résultat	N/A
P_LOSS	Chute de pression dans l'absorbeur	N/A	Résultat
HP_DUTY	Puissance rebouilleur HP	Résultat	N/A
LP_DUT	Puissance rebouilleur LP	Résultat	Résultat
T_HP_REB	Temp. rebouilleur HP	Résultat	N/A
T_LP_REB	Temp. rebouilleur LP	Résultat	N/A
BLOWER_POWER	Puissance souffleur	Résultat	Résultat
COMPR_POWER	Puissance compresseur LP vers HP	Résultat	Résultat
MULTI_COMPR_POWER	Puissance compresseur final	Résultat	Résultat
RICHHEAT_POWER	P. chauffe absorbant riche	Résultat	Résultat
splitheat_POWER	P. refroid. absorbant mi-pauvre	Résultat	N/A
leanheat_POWER	P. refroid. absorbant pauvre	Résultat	Résultat
REHEAT_POWER	P. re-chauffe absorbant riche	Résultat	Résultat
T_GAS_OUT	Temp. finale fumée	Résultat	Résultat
T_LEANCOLD_FINAL	Temp. absorbant « design spec »	Résultat	N/A

3.2 Configuration d'*EASY*

EASY (Energy systems Analysis and Synthesis), est un programme *FORTTRAN*, compilé sous *Linux*, peut rouler sous *Windows* avec l'émulateur *CYGWIN*. Il a été développé en partie au LENI. Avant d'expliquer la configuration et l'exécution d'*EASY*, il convient d'en résumer le principe général de fonctionnement.

3.2.1 Optimisation du cycle vapeur

Dans une centrale à cycle combiné, le rôle du cycle vapeur est de produire un maximum d'électricité à partir de la chaleur résiduelle des gaz de combustion, avec un investissement raisonnable. Cela permet également de maximiser la réversibilité du cycle gaz sans se soucier d'une trop grande perte de chaleur par les gaz de combustion. Ainsi, on remarquera qu'un cycle à gaz simple typique utilisera un régénérateur et une pression de combustion forcément basse pour minimiser sa température d'échappement, alors que le cycle combiné permet une pression de combustion optimale, sans régénérateur.

Comme le rendement isentropique des turbines à vapeur de grande taille est généralement le même pour une vaste gamme de conditions de température et de pression, il en résulte que chaque unité d'exergie disponible dans le gaz de combustion, peu importe la température, représente à peu près le même potentiel de production électrique. Il est donc utile de superposer la courbe composite du gaz de combustion et celle du cycle vapeur sur un graphe avec l'enthalpie en abscisse et le facteur de Carnot en ordonnée. Ainsi, l'aire entre les deux courbes est à peu près proportionnelle au potentiel de production électrique inutilisé, et on peut voir dans quelle gamme de températures se trouve ce potentiel.

La Fig.3.3 donne un exemple d'une telle courbe composite intégrée, préparée par *EASY*, pour une centrale NGCC sans capture de CO₂. La Fig.A3.2 et la Fig.4.3 représentent le même type de courbe, mais avec capture de CO₂. *EASY* élimine automatiquement l'aire correspondant à l'écart de température minimal permissible dans les échangeurs, « DTmin », ce qui fait que les courbes se touchent à chaque pincement. La structure interne du générateur de vapeur, à droite sur la Fig.3.3, est fournie par General Electric et orientée de façon à ce que la fumée se dirige vers le bas. Par alignement, on peut observer à quel segment de la courbe composite correspond chaque

chaudière (rectangle), chaque préchauffeur (ligne pointillée) et chaque surchauffeur (ligne pleine).

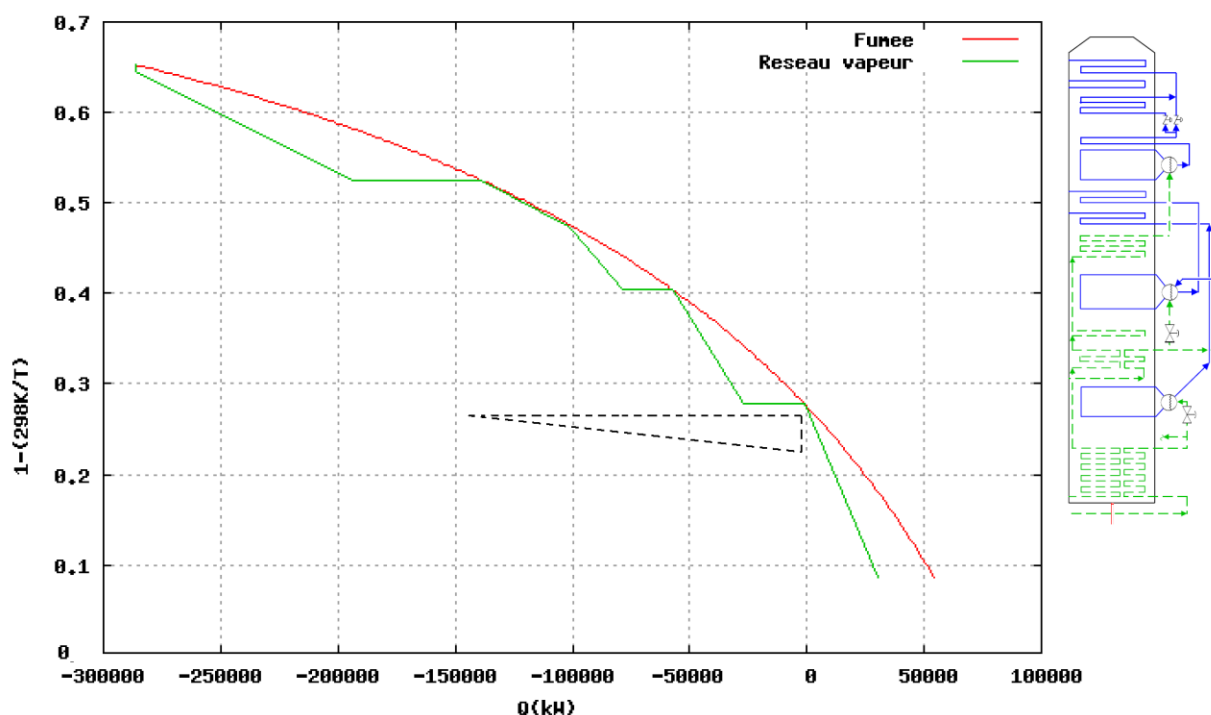


Figure 3.3: Courbe composite intégrée de Carnot et générateur de vapeur correspondant, pour une centrale NGCC sans capture de CO_2 , adapté de (Smith, Polukort, Maslak, Jones, & Gardiner, 2001)

Le triangle pointillé ajouté manuellement sur la Fig.3.3 représente de façon très idéalisée l'exergie devenue non-disponible car nécessaire pour la capture de CO_2 (Éq.7.1). La face supérieure du triangle représente la chaleur qui doit être fournie à température constante pour faire bouillir l'absorbant pauvre. Puisque l'énergie est conservée et que la capture fonctionne en boucle, cette chaleur est nécessairement redonnée ailleurs à des températures inférieures, ce qui est symbolisé par la face inférieure du triangle. Cette face pourrait aussi être remplacée par un escalier car cette chaleur est souvent disponible en pratique à plusieurs températures constantes. Ce qu'il faut retenir, c'est que la surface totale en-dessous du triangle, théoriquement disponible pour produire de l'électricité, dépasse largement la surface donnée par l'Éq.7.1, qu'elle ait ou non la forme d'un triangle. L'exergie correspondant à cette surface n'est pas utilisée en pratique parce que ces basses températures sont jugées inappropriées pour la production d'électricité.

Le défi d'optimisation, à l'échelle du réseau de vapeur, consiste à maximiser la production électrique avec un nombre raisonnable de niveaux de pression et sans exagérer la surface totale des échangeurs de chaleur. Cela se fait par un choix judicieux des pressions, des surchauffes, de « DTmin », et du débit massique de production de vapeur à chaque pression. Le choix des débits massiques se fait en dernier et correspond au choix qui maximise le nombre de pincements entre les deux courbes. C'est un problème standard de programmation linéaire en nombres entiers, que résout automatiquement *EASY*. Par exemple, la Fig.3.3 montre trois pincements pour trois niveaux de vapeur, ce qui indique qu'*EASY* a correctement optimisé ce réseau vapeur. De plus, l'espacement des niveaux semble adéquatement minimiser l'aire totale entre les deux courbes, ce qui indique que les ingénieurs de General Electric ont correctement choisi les températures de surchauffe ainsi que les trois niveaux de pression, à défaut d'en ajouter un quatrième.

Une fois la production électrique maximisée, et donc l'écart entre les deux courbes composites à peu près minimisé, il devient possible d'estimer la surface totale des échangeurs de chaleur, sans même connaître la configuration de leur réseau, un problème plus complexe. Il suffit d'intégrer l'inverse de l'écart de température et du coefficient de transfert de chaleur, le long de la courbe composite. Ce calcul est effectué par *EASY*, qui peut aussi estimer le nombre minimal d'échangeurs requis. On peut alors estimer le coût de l'échangeur moyen, à défaut de pouvoir estimer le coût moyen des échangeurs.

Dans une centrale typique, l'effet d'ajouter un système de capture de CO₂ avec un absorbant aqueux est de consommer une grande quantité de chaleur dans un rebouilleur et de la redonner à des températures inférieures, tel que grossièrement illustré par le triangle pointillé sur la Fig.3.3. On remarque que ce cycle thermodynamique entre en compétition avec celui de la turbine basse pression, qui lui ressemble à un cycle de Carnot prenant la chaleur à environ 120°C pour la redonner à environ 40°C. Sur la courbe composite, le système de capture apparaît comme une dent de forme irrégulière pointant vers la gauche, visible sur les Fig.A3.2 et Fig.4.3, contrairement au triangle pointillé idéalisé de la Fig.3.3. La forme de cette dent varie selon qu'on préchauffe plus ou moins chaque flux d'absorbant, selon le nombre et la pression des rebouilleurs. Cette dent ne crée pas de nouveau pincement, mais sa profondeur correspond à environ la moitié de toute la vapeur basse pression disponible. Il convient alors d'ajuster les niveaux de pression afin de permettre à la courbe composite du cycle vapeur de bien épouser

cette nouvelle dent, par exemple en permettant la condensation de vapeur à une pression entre 2 et 3 atmosphères et en permettant la production de vapeur à environ 1 atmosphère.

En effet, c'est l'analyse de pincement qui suggère qu'une telle dent requiert de condenser de la vapeur juste au-dessus, et d'en produire juste en-dessous. Selon cette même analyse, pomper de la chaleur dans le rebouilleur ne serait utile qu'en cas de réel pincement vers 120°C, par exemple dans une application de cogénération où la capture rendrait négative la quantité de vapeur disponible à cette température. Autrement dit, il n'est pas logique de comprimer de la vapeur de 1 à 3 atmosphères au sein du désorbeur de CO₂ en même temps qu'on fait l'expansion de vapeur de 3 à 1 atmosphère dans les étages supérieurs de la turbine basse pression, alors même que la courte distance entre ces deux composantes permet de les considérer comme faisant partie du même système. Cela s'apparente à une recherche de mouvement perpétuel et n'est pas une piste appropriée pour améliorer l'efficacité énergétique à l'échelle du système, ce qui n'empêche toutefois pas d'adopter cette pratique en dernier recours, si des considérations pratiques l'exigent.

Comme la dent est éloignée de la partie du haut du cycle vapeur, et lorsqu'on peut supposer que celui-ci a été optimisé auparavant par les concepteurs de la turbine, il ne semble pas *a priori* nécessaire de ré-optimiser le choix des pressions haute et intermédiaire. Quelques simulations préliminaires tendent à le confirmer. Ainsi, les principales variables de décision d'intérêt sont le choix des pressions et le choix des « DTmin » pour les composantes opérant près de 120°C.

3.2.2 Configuration générale d'*EASY*

EASY se configure à partir d'un fichier texte géré par *OSMOSE*. La première section du fichier spécifie la courbe composite excluant le cycle vapeur; la deuxième spécifie le cycle vapeur; et la troisième spécifie les paramètres généraux. La syntaxe est décrite en détails sur le LeniWiki. Un exemple peut donner :

```

UNIT U1 SYNPRO
qt S1. S1: 868 461193 336 120874 -100.00060
qt S2. S2: 868 151928 868 132879 -100.01600
qt S5. S5: [write T_PRE_leanheat+273.15,0,T_PRE_leanheat+273.15,
          LP_DUTY/1000,'-20.01600']
qt S6. S6: [write T_RICHHEAT+273.15,0,T_REHEAT+273.15,
          REHEAT_POWER/1000,Rich_DTmin-1700E-5]
qt S7. S7: [write T_PRE_RICHHEAT+273.15,0,T_RICHHEAT+273.15,
          RICHHEAT_POWER/1000,Rich_DTmin-1700E-5]
qt S9. S9: [write T_PRE_leanheat+273.15,
          0,313.15,leanheat_POWER/1000,Lean_DTmin-1700E-5]
endunit
ADUN SYNEP U1

UNIT U2 SYNCYC2
qt S3. S3: 281.000000 0.000000 285.000000 1000.000000 -40.00560
endunit
[...]
ADUN SYNEP U2

UNIT STNET SEQUEN
UNIT HP_IN SYNHEAV 166 838 -1 1 -40.00560
UNIT IP_IN SYNHEAV 24.8 838 -1 1 -40.00560
UNIT IP2_IN SYNHEAV 7.0 624 -1 1 -40.00560
UNIT LP_IN SYNHEAV [write EASY_PLO,'-1',70,1,'-40.00560']
UNIT HP_OUT SYNHEAU 24.8 563 0 1 -20.00060
UNIT IP_OUT SYNHEAU [write lp*EASY_PHI,'-1',0,1,'-20.01600']
UNIT LP_OUT SYNHEAU 0.04 -1 0 0.93 -20.01600
UNIT DESORB SYNHEAC [write lp*EASY_PHI,'-1','-1',0,'-20.01600']
UNIT CONDENS SYNHEAC 0.04 -1 -1 0 -20.01600
endunit
[...]
UNIT SYNUNT EFFIC 0.90
UNIT SYNUNT EFFICC 0.85
[...]
```

Dans cet exemple, S1 spécifie la chaleur des gaz de combustion ; S2, celle du refroidissement de la turbine à gaz ; S3, l'eau de refroidissement ; S5, le rebouilleur ; S6 et S7, la chaleur de l'absorbant riche ; S9, celle de l'absorbant pauvre ; HP_IN, la vapeur haute pression ; IP_IN, la vapeur moyenne pression ; IP2_IN, la vapeur basse pression ; LP_IN, la vapeur très basse pression ; HP_OUT, la resurchauffe ; IP_OUT et DESORB, la vapeur extraite pour le rebouilleur ; LP_OUT et CONDENS, le condenseur. En général, les chiffres positifs entre 281 et 868 sont des températures en K, les chiffres plus bas sont des pressions en bar, et les chiffres plus élevés sont des puissances en kW.

Le mot “write” entre crochets est un code permettant d'appeler l'utilitaire *TXTFLEX*, capable d'insérer des variables calculées dans *MATLAB*. *TXTFLEX* peut aussi faire quelques opérations

mathématiques, par exemple faire les conversions d'unités, vu qu'*EASY* n'accepte que les kW et les K.

L'unité « U1 » spécifie la courbe composite linéaire par morceaux pour les gaz de combustion, le refroidissement de la turbine à gaz, l'absorbant à chauffer et l'absorbant à refroidir. Il est possible de la subdiviser en plusieurs unités. L'unité « U2 » spécifie l'eau de refroidissement, séparément vu que son débit est variable. L'unité « STNET » spécifie chaque niveau de pression du cycle vapeur, selon qu'il sert à la production « SYNHEAV », à l'extraction « SYNHEAU » ou à la condensation « SYNHEAC ».

Les deux dernières lignes spécifient l'efficacité des turbines avec et sans condensation. On remarque ici la possibilité théorique d'une vapeur juste assez énergétique pour qu'une turbine efficace à 85 % ne donne pas de condensation, alors qu'une turbine efficace à 90 %, ayant extrait davantage de travail, donnerait de la condensation. Un tel événement pourrait empêcher *EASY* de converger, mais il n'a pas été possible d'attribuer de cas de non-convergence à cette cause.

Le dernier terme de chaque ligne spécifie l'écart de température minimal « DTmin/2 » et le coefficient de transfert entre un fluide et le métal d'un échangeur de chaleur⁹. Par exemple, si un fluide avec des contributions de 4 K et 1800 W/m²K doit échanger de la chaleur avec un fluide avec des contributions de 12 K et 600 W/m²K, alors *EASY* supposera que l'approche minimale doit être de 16 K, avec un coefficient de transfert de 450 W/m²K. Dans le cas d'une vapeur, le coefficient de transfert est automatiquement calculé à partir de celui de l'eau liquide (560 W/m²K).

⁹ Il y a deux notations possibles pour ce terme. La notation dans l'exemple utilise le point décimal comme séparateur entre le « DTmin/2 » entier donné en décikelvins et le coefficient de transfert, en partie décimale, donné en unités de 10⁵ W/m²K. L'inconvénient de cette notation est que *TXTFLEX* par défaut arrondit les chiffres à trois décimales. Il faut donc des coefficients qui sont des multiples de 100 W/m²K, lorsqu'ils dépendent d'une commande « write » (1700 dans l'exemple). L'autre notation, sans le signe négatif, permet de spécifier seulement les « DTmin/2 » en kelvins mais à condition qu'ils soient proportionnels à la racine carrée du coefficient de transfert, une règle heuristique utile pour optimiser plusieurs « DTmin/2 » simultanément. Autrement dit, les « DTmin/2 » des gaz, liquides, condenseurs et évaporateurs spécifiés de cette façon doivent respecter un ratio 15:5:3:2 ou 5:2:1:1 environ. Cette notation est toutefois risquée, car si on l'utilise mal, les coefficients de transfert risquent de diminuer à mesure que l'optimisation évolue, alors qu'ils sont évidemment fixes dans la réalité. Et comme les experts *EASY* sont rares au LENI, l'erreur a bien pu survenir une ou deux fois...

3.2.3 Exécution manuelle d'*EASY*

Bien qu'*OSMOSE* exécute automatiquement *EASY*, l'exécution manuelle d'*EASY* peut être utile dans les situations de débogage. *EASY* peut être exécuté avec une interface graphique en mode texte, ou en mode batch avec la commande *UNIX/CYGWIN* :

```
./run_easy2.sh . probleme mer .
```

Parmi les nombreux fichiers de sortie, on voudra surtout examiner le résultat du calcul des échangeurs « obj_areas » (nombre d'échangeurs, surface totale, *etc.*) et le rapport « synep.html ». En particulier, la section « streams » du rapport permet d'examiner les détails des écoulements et de vérifier le calcul des coefficients de transfert, alors que la section « steam network » permet d'examiner les détails de la solution, par exemple :

```
HP_IN (838.K,166.00bar)->HP_OUT (563.K,24.80 bar) 253.813t/h 34402.4kW
IP_IN (838.K, 24.80bar)->IP_OUT (406.K, 2.92 bar) 135.944t/h 22397.4kW
IP_IN (838.K, 24.80bar)->LP_OUT (302.K, 0.04 bar) 151.577t/h 50334.8kW
IP2_IN(624.K, 7.00bar)->IP_OUT (406.K, 2.92 bar) 27.4151t/h 1546.82kW
LP_IN (446.K, 1.11bar)->LP_OUT (302.K, 0.04 bar) 32.0638t/h 3635.98kW
```

où l'on voit que la vapeur sortant des turbines est dirigée soit vers une resurchauffe à 24,8 bar, soit vers le rebouilleur à 2,92 bar, soit vers le condenseur à 0,04 bar. On voit aussi que la production de vapeur à très basse pression à 1,11 bar permet un gain non négligeable de 3,6 MW, soit plus de 0,5 % sur le rendement thermodynamique total.

EASY génère automatiquement les images des courbes composites. Pour en générer une manuellement, par exemple avec le facteur de Carnot en ordonnée, on utilise des commandes *GNUPlot* semblables à celles-ci :

```
set data style lines;set grid
set ylabel '1-(298K/T)'
set xlabel 'Q(kW)'
plot 'synep.stnet.udt'
    index 0 u 2: (1-298/$1) t 'Flue gas+CO2 capture ',
    '' index 1 u 2: (1-298/$1) t 'Steam Network '
set term png
set output "fichier.png"
replot
```

On peut trouver davantage d'informations concernant *EASY* sur le LeniWiki.

3.3 Configuration de *MATLAB*

La configuration d'*OSMOSE* repose principalement sur trois fichiers *MATLAB*. Le fichier « front-end » spécifie les paramètres généraux de l'optimisation. Les calculs pour chaque itération sont ensuite faits dans le fichier « pré » ou « post » selon qu'ils doivent être faits au début ou à la fin de l'itération. Un quatrième fichier permet aussi de faire des calculs entre l'exécution d'*ASPEN* et celle d'*EASY*, si nécessaire.

Les variables sont stockées dans une petite base de données nommée « tags ». Chaque fichier « pré », intermédiaire ou « post » débute donc par la lecture des « tags » et se termine par l'écriture des « tags ». Les sous-sections suivantes décrivent ces fichiers un à un. Le fichier « post » est particulièrement important pour ce projet vu qu'il contient le calcul des émissions et l'évaluation des objectifs.

3.3.1 Fichier « front-end »

Ce fichier est l'exécutable de l'optimisation. Il spécifie un modèle qui décrit la simulation.

Le fichier spécifie d'abord le mode d'exécution d'*OSMOSE*. Les deux principaux modes sont « Moo », qui exécute l'optimisation avec l'algorithme génétique *QMOO* mais ne conserve aucun « tag » pour limiter les écritures sur le disque, et « Recompute », qui ré-exécute uniquement les solutions Pareto-optimales, pour en récupérer les « tags ». Les autres modes servent au débogage ou à faire des analyses particulières et sont documentés sur le LeniWiki.

La fonction « DefineMooOptim » définit les paramètres les plus importants de l'optimisation. « nobjectives » est le nombre d'objectifs; « max_evaluations » est le nombre d'itérations. Deux paramètres sont utiles spécifiquement à l'algorithme génétique, soit « nclusters » qui détermine le nombre de sous-populations dans la structure interne de l'algorithme, et « InitialPopulationSize » qui détermine le nombre initial d'itérations avant que l'algorithme ne commence à éliminer des configurations sous-optimales. Ces deux paramètres représentent un compromis entre la rapidité de convergence de l'optimisation dans son ensemble, et la probabilité d'avoir suffisamment balayé l'espace de décision pour trouver la zone d'attraction de l'optimum global.

Il y a aussi quelques paramètres d’affichage. Il faut ensuite définir les « tags » correspondant aux fonctions-objectif et aux variables de décision, comme dans :

```
ObjectiveFunction(2).DisplayName = {'Global warming potential'};
ObjectiveFunction(2).TagName = {'GWP_OBJ'};
ObjectiveFunction(2).Unit = {'MT CO2eq'};
ObjectiveFunction(2).MinOrMax = {'min'};

o.Variables(2).TagName = {'lean_load'};
o.Variables(2).DisplayName = {'Lean solvent CO2 loading'};
o.Variables(2).Unit = {' '};
o.Variables(2).Limits = [0.20 0.35];
% o.Variables(2).Start_limits = [0.30 0.35];
o.Variables(2).Is_integer = 0;
```

On remarque que chaque fonction-objectif doit être spécifiée comme un maximum ou un minimum, et que chaque variable de décision doit être spécifiée comme continue ou entière, avec deux bornes définissant l’espace de décision. Il est aussi possible de spécifier des bornes plus étroites pour les itérations initiales.

La fonction « DefineAspenTags » contient la liste des appels à « define_aspentag » pour définir la communication entre *MATLAB* et *ASPEN Plus* tel que décrit dans la section 3.1.6. La fonction « DefineConstants » permet de définir d’autres variables. Les « tags » correspondant à des variables de type « calculée » dans la Table 3-1 doivent être déclarés dans cette fonction vu que c’est la seule façon de les distinguer des variables de type « résultat ».

3.3.2 Fichier « pré »

Lors de l’exécution de ce fichier, au début de chaque itération, seules les variables de décision ont une valeur définie, déterminée par l’algorithme d’optimisation. Le fichier sert alors à calculer la valeur des variables requises par *ASPEN* et *EASY* qui ne sont pas des variables de décision. Par exemple, le calcul des débits massiques de chaque composante de chaque absorbant (pauvre ou mi-pauvre, avant dissociation) se fait à partir des valeurs décidées pour les teneurs molaires en CO₂ et pour la fraction divisée.

Après résolution du système d'équations du bilan de masse¹⁰, cela donne :

```
denominateur=(-split_frac*split_load+rich_load-
    lean_load+lean_load*split_frac);
lean_co2=(144000.0*(1-split_frac)*lean_load)/denominateur;
lean_mea=(2196000.0/11.0*(1-split_frac))/denominateur;
split_co2=(144000.0*split_frac*split_load)/denominateur;
split_mea=(2196000.0/11.0*split_frac)/denominateur;
lean_h2o = lean_mea*0.7/0.3;
split_h2o = split_mea*0.7/0.3;
```

Ici « rich_load » est une valeur hypothétique correspondant à un taux de capture de 100 %, donc 144000 kg/h, alors que 0,3 et 0,7 représentent les fractions massiques de MEA et d'eau dans l'absorbant.

D'autres calculs plus simples peuvent entrer dans le fichier, comme la correspondance entre la pression d'une colonne et celle d'un compresseur. Enfin, pour faire correspondre la pression de production de vapeur avec la température de préchauffage de l'absorbant et avec son « DTmin », il peut être utile de s'inspirer de l'équation d'Antoine :

```
EASY_PLO = 10^(5.0916 - 1668.21 / (T_RICHHEAT + 224 - Rich_DTmin/10.0));
```

3.3.3 Fichier « post »

Ce fichier sert obligatoirement à l'évaluation des objectifs. Il doit donc, au minimum, donner une valeur aux « tags » associés aux objectifs dans le fichier « front-end ». Avant de calculer les objectifs, il y a plusieurs calculs préliminaires à faire, à partir des résultats d'*ASPEN* et d'*EASY*, comme le calcul de la puissance nette ou de la masse totale d'acier. Les calculs d'ACV sont aussi faits dans ce fichier et précèdent le calcul de l'objectif environnemental. Finalement, on peut utiliser ce fichier pour calculer toute autre variable qu'on veut facilement pouvoir analyser ou exporter vers un tableau ou une figure. Par exemple, on peut calculer le coût d'évitement d'une tonne de CO₂.

¹⁰ En se rappelant que les masses molaires du CO₂ et du MEA sont 44 et 61 respectivement, ces équations sont :

```
split_mea=(lean_mea+split_mea)*split_frac
lean_co2/44.0=lean_mea/61.0*lean_load
split_co2/44.0=split_mea/61.0*split_load
rich_load*(lean_mea+split_mea)/61.0=(lean_co2+split_co2+144000)/44.0
```

Comme le choix des objectifs et des modèles utilisés pour les évaluer diffèrent d'un chapitre à l'autre, cette discussion est laissée aux sections suivantes. On remarque cependant que dans plusieurs cas il est question de comparer des résultats d'optimisation selon deux définitions différentes de la fonction-objectif environnementale, par exemple avec et sans les émissions en arrière-plan. Il est alors possible de procéder de deux façons, ce qui affecte le fichier « post ».

La première méthode évalue la fonction-objectif selon les deux définitions à chaque itération, mais n'en révèle qu'une seule à l'algorithme génétique d'optimisation. Dans ce cas, rien ne garantit que la population obtenue soit Pareto-optimale par rapport à la deuxième fonction, encore moins qu'elle soit convergente. L'autre méthode effectue deux optimisations séparées, sans partage d'informations sur les solutions intermédiaires. Elle mène donc à deux populations indépendantes. Dans ce cas, rien ne garantit que les différences entre les populations découlent des différences entre les définitions de la fonction-objectif, plutôt que du simple hasard.

Dans le cas où l'algorithme converge avec une tolérance beaucoup plus étroite que l'écart pouvant être causé par le changement de fonction-objectif, il existe alors deux populations Pareto-optimales distinctes et il faut évidemment deux optimisations séparées (deuxième méthode) pour les découvrir. Par contre, dans le cas d'une convergence moins précise, il devient impossible de déterminer si l'émergence de deux populations distinctes correspond à un effet réel du changement de la fonction-objectif, ou plutôt à l'existence de plusieurs trajets de convergence vers une population unique.

Pour les besoins scientifiques de ce projet, il devient alors plus prudent de travailler avec une seule population (première méthode) et ensuite observer comment le changement de fonction-objectif amplifie les différences déjà présentes à l'intérieur de cette population unique. Par exemple, pour vérifier comment la considération des émissions de méthane en arrière-plan affecte la pression optimale du désorbeur, on prend deux configurations de la même population dont la pression diffère, et on observe laquelle des deux est avantagée après l'ajout du calcul des émissions de méthane. Si les pressions élevées sont avantagées, on sait alors que la pression optimale sera plus élevée, sans toutefois savoir de combien.

3.4 Exemple d'optimisation

Cette section examine la simulation ayant produit la Fig.A3.3 en annexe, à titre d'exemple pour compléter la description méthodologique de l'environnement de simulation.

Comme mentionné plus haut, les simulations présentées à *ECOS2008* visaient principalement à débroussailler un grand espace de décision, en donnant priorité aux zones pouvant bénéficier le plus des capacités d'*OSMOSE* comparativement aux capacités d'optimisation limitées d'un programme comme *ASPEN* pris isolément. Les simulations ont donc couvert un large éventail de variables de décision relatives à l'interaction avec le cycle vapeur, la configuration d'écoulement et la taille des colonnes. Tel est le cas de celle qui a servi à produire la Fig.A3.3, soit la 104^e et dernière exécution d'*OSMOSE* avec *ASPEN Plus* 2004.1. Toutefois, cette simulation n'est pas la seule ayant participé à l'exploration de l'espace de décision avant *ECOS2008*. Plusieurs variables ont convergé de façon convaincante lors de simulations préliminaires. Par exemple, la préférence pour opérer les deux désorbeurs à contre-courant a été établie définitivement à la 60^e exécution, avant même que les données d'ACV ou les coûts d'investissement n'arrivent dans le modèle. La possibilité d'opérer le condenseur à plus de 40°C a également été éliminée relativement tôt. Comparativement, ce sont des simulations plus tardives qui ont éliminé la possibilité de varier les températures à l'entrée de l'absorbeur, qui ont ajouté la possibilité de varier la pression d'extraction de vapeur, qui ont ajouté la production de vapeur à environ 1 bar, et ensuite à 7 bar.

Au moment de la 104^e exécution, les 18 variables de décision étaient : type de configuration d'écoulement (désorption à une ou deux pressions, division ou non d'absorbant), teneur en CO₂ de l'absorbant aux diverses étapes, température de l'absorbant aux diverses étapes, ratio de pression entre les deux désorbeurs, dimensions des colonnes, pression d'extraction de vapeur, et degré de surchauffe de la vapeur basse pression produite.

À ce moment, le calcul des objectifs (coût et potentiel de réchauffement climatique) était simple vu que définis à une constante près, sans référence à un modèle de centrale sans capture :

```
CASH_OBJ = (50*225000*Lost_Power+15*Total_packing_mass
            +20*225*CO2_captured)/1000000.0;
GWP_OBJ = ((CO2_uncaptured+CO2_captured*0.0101)*225000.0
            +Total_packing_mass*6.69)/1000000000.0;
```

Ici « *Lost_Power* » considère la puissance de la turbine à vapeur, du souffleur et des deux compresseurs de CO₂, alors que « *Total_packing_mass* » considère la masse de garnissage de l'absorbeur et des deux désorbeurs (15 \$/kg). Le transport du CO₂ est évalué à 20 \$/tonne. Les objectifs sont évalués pour 225000 heures cumulatives d'opération, en millions de dollars de valeur actualisée et en mégatonnes de CO₂éq. L'électricité non produite contribue 50 \$/MWh à l'objectif économique, mais rien à l'objectif environnemental, ce qui revient à supposer que ce montant est une moyenne actualisée correspondant à de l'électricité neutre en CO₂. L'ACV contribue à l'objectif environnemental, pour ce qui est des émissions en arrière-plan, à hauteur de 0,0101 kg CO₂éq par kg de CO₂ capturé et 6,69 kg CO₂éq par kg d'inox dans le garnissage. Les autres éléments de l'ACV sont ignorés selon l'idée qu'ils ne contribuent pas beaucoup à l'impact marginal des variables de décision considérées. Par exemple, la masse d'acier des colonnes avant remplissage est considérée varier peu en fonction de leur volume, comparativement à leur garnissage en inox, dont la masse varie davantage et les impacts spécifiques sont plus grands.

Le déroulement de la simulation prend quelques minutes par itération, au moins 75 % du temps étant consacré à l'exécution de *RateSep*. Dans ce cas-ci, la simulation a requis 500 itérations en mode « Moo » et 184 itérations en mode « Recompute ». Le ratio 500:184 est relativement faible à cause du temps limité avant la publication et à cause du nombre de sous-populations (*nclusters*) qu'on peut rétrospectivement juger trop élevé. Cela explique pourquoi la Fig.A3.3 ne présente qu'un très petit nombre de points réellement intéressants. À la fin du mode « Recompute », *OSMOSE* lance l'utilitaire « *osmose_gui_plot* », qui permet de tracer la courbe entre n'importe quels deux « tag » et de visuellement inspecter les corrélations. Ces données sont automatiquement stockées dans un fichier « o.mat » pour réutilisation ultérieure. Les « tags » peuvent aussi être enregistrés dans un fichier *Excel* avec une commande pouvant ressembler à :

```
lid = fopen('tags.csv','a')
for i = 1 : size(o.Results.Tags,2)
    fprintf(lid,'%s; ',cell2mat(o.Results.Tags(i).TagName));
end
for j = 1 : o.convergenceCounter
    fprintf(lid,'\r\n');
    for i = 1 : size(o.Results.Tags,2)
        fprintf(lid,'%f; ',o.Results.Tags(i).Value(j));
    end
end
fclose(lid)
```

3.5 Génération de données techniques (premier article)

Le modèle décrit précédemment a été modifié après la conférence *ECOS2008*. Le passage à *ASPEN Plus* 2006.5 et au fichier exemple a permis de gagner en confiance face au choix de nombreux paramètres, bien que cela n'ait pas grandement affecté les résultats. La disparition de l'absorbant mi-pauvre a permis de simplifier le modèle et d'y ajouter de nouvelles configurations d'écoulement. Il est alors devenu possible d'envoyer un absorbant riche plus chaud à la mi-hauteur du désorbeur haute pression, alors que le désorbeur basse pression passe de 10 à 5 étages. L'utilisation de la nouvelle notation des « DTmin » dans *EASY* permet de spécifier des températures d'approche différentes pour l'absorbant riche et pauvre.

Un ajout important est la variable de décision « Init_frac » qui détermine la fraction des gaz de combustion qui passe dans l'absorbeur. Il devient alors possible, par exemple, de capturer 40 % du CO₂ en capturant 80 % sur 50 % de l'écoulement. Cette variable est d'abord utile pour compléter la courbe Pareto dans la zone correspondant à des taux de capture bas, mais elle ajoute aussi un degré de liberté qui permet d'atteindre des taux de capture intermédiaires de façon moins coûteuse, en réduisant la taille du système quitte à en augmenter le taux interne de capture. Dans le cas d'*ASPEN*, ce paramètre est appliqué après exécution sous forme de facteur multiplicatif appliqué au fichier de sortie. La simulation se fait donc toujours sur le plein volume de gaz, ce qui en simplifie l'initialisation sans en changer les résultats. Cette transformation suppose un écoulement unidimensionnel et des rendements indépendants des diamètres des composantes.

Une autre différence avec l'exemple de la section 3.4 est que les Fig.4.4 et Fig.4.5 recombinaient manuellement les résultats de plusieurs simulations. Cela a permis d'explorer des zones différentes de l'espace de décision, d'utiliser deux ordinateurs en parallèle¹¹, et d'obtenir un nombre total d'itérations beaucoup plus grand avant publication. Même le choix de la fonction objectif a changé en cours de route. En effet, certaines simulations tentaient de minimiser

¹¹ *OSMOSE* supporte le « Message Passing Interface » pour exécution simultanée sur plusieurs ordinateurs, mais seulement sous *LINUX*, qui lui, ne supporte pas *ASPEN*. La recombinaison manuelle des résultats permet l'équivalent, mais plus lentement vu qu'il n'y a pas de partage d'information entre les algorithmes génétiques sur chaque ordinateur.

directement le coût d'évitement du GWP (Eq.5.9), plutôt que le GWP lui-même (Eq.5.4), créant ainsi une contrainte plus sévère d'appartenance à la courbe Pareto. Rétrospectivement, il est difficile de dire si cela a accéléré l'optimisation.

Les résultats de ces différentes simulations ont été regroupés dans le même fichier « tags_final.xlsx ». Il contient la sélection manuelle des points les plus représentatifs de la courbe Pareto et les calculs finaux, trop simples pour être expliqués ici, ayant servi à produire les tables 4.3 et 4.4. Les figures du chapitre 4, quant à elles, proviennent du fichier « Figures_chap_4.xlsx » qui reprend les mêmes données.

Il faut noter que la liste des variables de décision donnée à la Table 4-1 est incomplète vu qu'il manque les dimensions des désorbeurs, soit quatre variables qui ont très peu d'effets sur les résultats. Aussi, la variable « Lean absorbent split fraction » ne fait pas techniquement partie de cette série de simulations, bien qu'elle ait été utilisée auparavant avec la version 2006.5. Finalement, le calcul des objectifs aussi a évolué comparativement à l'exemple précédent, tel que décrit dans les deux sous-sections suivantes.

3.5.1 Modèle économique

L'objectif économique à minimiser est le coût total de l'électricité produite en \$/MWh. Il est calculé sur une base horaire en supposant 7500 heures d'utilisation par année (donnée de GDF SUEZ) et comprend la dépréciation de l'investissement, le coût d'opération et le coût d'évitement des émissions en arrière-plan. Ce dernier sera détaillé dans la sous-section suivante. Ces coûts récurrents doivent correspondre à ceux d'une année représentative. La dépréciation annuelle de l'investissement est de 11 %, ce qui correspond à un taux d'environ 8 % sur 15 ans, comme utilisé par Hongtao Li. Lorsqu'utilise, *OSMOSE* contient des routines permettant de calculer le coût de composantes individuelles comme les turbines, compresseurs ou échangeurs, indexé pour une année donnée, ici 2007, et en fonction de leur taille.

Le coût d'opération comprend l'achat de gaz naturel et d'absorbant, le coût de transport et de séquestration du CO₂ et le O&M (coût d'opération et d'entretien au jour le jour). Les prix sont énumérés dans la Table 4-2, avec références. Le volume de gaz est 2400 GJ/h vu que la centrale sans capture produit 400 MW avec un rendement de 60 %. Le coût de l'absorbant n'a pas grande importance vu qu'il est environ 600 fois moindre que le gaz si on suppose, comme GDF SUEZ,

une perte de 0,5kg de solvant (70 % eau 30 % MEA) par tonne de CO₂ capturée lorsque le taux de capture est de 90 %, ce qui donne 8,4g de MEA par GJ de gaz brûlé peu importe le taux de capture¹².

Le coût du transport et de séquestration du CO₂ est estimé à 20 \$/tonne, soit la borne supérieure des estimations trouvées dans la littérature. Toutefois, ce montant n'est pas nécessairement surestimé vu que des estimés plus récents sont supérieurs¹³ et vu qu'il comprend ici des coûts qui ne sont probablement pas inclus dans ces estimations : le coût de dessiccation avec le tri-éthylène glycol, le coût de compression de 63 bar à la pression finale, et le coût d'un fonds pour la recapture des fuites de séquestration à long terme. L'O&M annuel est estimé à 4 % de l'investissement total, une pratique courante pour ce type de projet. Par contre, le fait d'appliquer le même pourcentage uniformément à tout type d'investissement est discutable. Par exemple, l'ajout d'un mètre à la hauteur de l'absorbeur ne demande que très peu d'entretien supplémentaire, mais ajoute à l'énergie de pompage de l'absorbant. Ce serait tout un hasard que ce pompage corresponde à 4 % par année du coût du garnissage. En fait, pour un débit de 2600 t/h, un diamètre de 18 m, et un rendement de pompage de 60 %, ce serait un peu moins de 1 %, donc beaucoup moins que 4 %. Une simulation où le calcul de l'O&M exclut le garnissage donne des résultats significativement différents. Entre autres, le taux optimal de capture passe de 90 % à 95 %. On peut donc se demander si cette règle du 4 % est appropriée dans un contexte d'optimisation, vu qu'elle gonfle artificiellement le taux apparent d'amortissement sur l'investissement marginal (ici, de 11 % à 15 %), menant ainsi potentiellement à un sous-investissement systématique dans la taille des équipements.

Pour compléter le calcul de l'objectif économique, il reste à préciser le coût d'investissement comme tel. Selon l'agence internationale de l'énergie (Simbolotti, 2006), la capture de CO₂ en

¹² Même si on multiplie cette perte par dix, son coût et ses impacts restent négligeables comparativement à ceux du combustible. On remarque que GDF SUEZ recommande les travaux de Rao (2004). Abu-Zahra (2007) utilise le même taux et la même source, soit 1,5 kg de MEA (et non de solvant) par tonne de CO₂ capturé, ce qui est effectivement dix fois plus. Au total, le coût du MEA peut quand même atteindre 8 % du coût d'évitement par tonne de CO₂, selon Rao. Comme mentionné à la section 1.1.2, il faut faire attention de ne pas supposer que les fumées de gaz naturel et de charbon dégradent nécessairement le MEA à la même vitesse.

¹³ Environ 40 €/tonne selon Dr Vogtländer (communication personnelle). Comme indiqué plus loin, le transport influence peu l'optimisation étant donné la faible variation de la quantité de CO₂ transporté par unité de CO₂ évité.

postcombustion ajoute environ 50 % à un coût d'environ 600 \$/kWe pour ce type de centrale (Fraser, Stridbaeck, & Bertel, 2005). En supposant que la puissance baisse de 400 MWe à 360 MWe, on en déduit donc un investissement de 240 \$ millions avant capture et de 324 \$ millions après capture mais avant optimisation. En soustrayant les composantes du système de capture dont le coût est facilement calculable, soit les échangeurs de chaleur et le garnissage des colonnes, on arrive à un *résidu* utile pour calibrer le reste du modèle.

Le coût du garnissage est basé sur une donnée obtenue par téléphone auprès de Koch-Glitsch Canada, de 70 \$/pi³ donc 12,25 \$/kg (selon leur propre donnée de densité). Le coût des échangeurs est basé, à ce point-ci, sur un coût moyen de 592 \$/m², soit le plus économique selon la routine fournie avec *OSMOSE*, suivant Turton (2003). Si le cas de SRI (Anonymous, 1987) est un bon exemple de système de capture non-optimisé, la capture de 112234 livres de CO₂ à l'heure nécessiterait 91549 pieds carrés supplémentaires d'échangeurs et 30599 pieds cubes de garnissage. Ces données fournissent un point de référence à partir duquel calculer le *résidu* du paragraphe précédent. En rajustant ces données pour un débit de CO₂ de 144000 kg/h et en les soustrayant de l'investissement total, on obtient un résidu de 67 \$ millions attribuable aux infrastructures de capture autres que les échangeurs de chaleur et le garnissage des colonnes.

Sans connaître la décomposition exacte de ce *résidu*, il est nécessaire de pouvoir estimer comment il évolue en fonction des variables de décision. Environ la moitié de l'équipement est reliée à l'absorption et sa taille dépend du volume de gaz à traiter, mais pas du taux de capture, alors que l'autre moitié est reliée à la désorption et sa taille dépend du taux de capture. L'investissement est donc modélisé séparément pour ces deux moitiés, avec une fonction de puissance 0,65, une valeur raisonnable pour un système composé principalement de compresseurs, de tuyauterie et de colonnes¹⁴. Cette répartition moitié-moitié est aussi en accord avec Abu-Zahra, Niederer *et al.* (2007), bien qu'au total leurs coûts soient plus bas.

¹⁴ Mathématiquement, le résidu devient : $33,5(\text{Init_frac})^{0,65} + 33,5(\text{Init_frac})^{0,65}(\text{taux capture}/90\%)^{0,65}$ \$ millions. Ainsi, un système capturant 90 % du CO₂ sur 80 % des fumées correspondra à un investissement résiduel de 58 millions, alors qu'un système capturant 80 % du CO₂ sur 90 % des fumées correspondra à un investissement résiduel de 60 millions, la différence correspondant à la taille accrue de l'équipement du côté absorbeur. Par extrapolation, un système capturant plus de 90 % du CO₂ demandera un investissement supérieur à 67 \$ millions, avant garnissage et échangeurs.

Il serait possible de raffiner ce modèle à divers degrés supplémentaires, par exemple en tentant de modéliser l'investissement supplémentaire requis pour un écoulement plus complexe ou à plus grand débit. Afin de comparer correctement l'investissement dans un désorbeur à deux pressions plutôt qu'une, il serait également souhaitable de calculer le coût des compresseurs en isolation, par exemple avec la fonction *OSMOSE* « cost_AxialCompressors ». Par contre, il serait inutile de préciser excessivement les coûts d'investissement en l'absence d'un réseau explicite d'échangeurs de chaleur, vu les incertitudes reliées à l'estimation des coûts par *EASY*, basée sur le coût de l'échangeur moyen et non sur le coût moyen d'un échangeur. L'option choisie a plutôt été de permettre un étage de refroidissement supplémentaire au compresseur final lorsque la désorption ne se fait qu'à une seule pression, permettant ainsi une économie d'énergie à défaut de permettre une économie d'investissement.

Le coût de l'échangeur moyen est basé sur la comparaison des résultats d'*EASY* entre la simulation avec capture et la simulation sans capture. La centrale sans capture est basée sur le fichier « st_input_no_capture.txt » et donne 16 échangeurs totalisant $2,1 \times 10^5 \text{ m}^2$. La surface de l'échangeur moyen du système de capture est donc obtenue en divisant la surface excédentaire par le nombre excédentaire d'échangeurs, plafonné à 34 s'il y a une division d'absorbant ou 32 sinon. Ce plafonnement vient du fait qu'*EASY* attribue entre 34 et 45 échangeurs pour des configurations apparemment identiques, une différence supposée correspondre à de très petits échangeurs qui ne seront pas installés en pratique. Le coût est ensuite établi en extrapolant la fonction *OSMOSE* « cost_HeatExchanger_FlatePlate » avec un exposant 0,8 à partir de la taille maximale disponible, soit 1500 m^2 .¹⁵ L'exposant 0,8 est une valeur standard pour le dimensionnement des échangeurs de chaleur en fonction de leur surface. C'est toutefois un choix discutable pour les grandes tailles, vu qu'en extrapolant vers l'infini on obtient un coût inférieur au coût des matériaux. L'exposant de 0,65 pour l'absorbeur est aussi discutable vu que, passé une certaine taille, c'est le nombre de colonnes en parallèle qui augmente, et non leur diamètre, impliquant un exposant plus près de 1,0. De toute façon, le calcul ne pourra jamais être précis car il ignore que les composantes de taille standard coûtent moins que les composantes sur mesure.

¹⁵ Par exemple, si *EASY* calcule qu'une centrale avec capture contient 32 échangeurs totalisant 260270 m^2 , le système de capture correspond alors à un ajout de 16 échangeurs de 3125 m^2 chacun en moyenne. Le coût moyen des échangeurs sera alors supposé $(3125/1500)^{0,8}$ fois celui d'un échangeur de 1500 m^2 .

Le choix du coefficient de transfert de chaleur pour l'absorbant dans *EASY* est adapté au type d'échangeur utilisé dans le calcul des coûts. Il faut toutefois remarquer qu'une bonne partie de la surface excédentaire correspond en fait à la resurchauffe de la vapeur de très basse pression qui n'était pas produite dans le cas de la centrale sans capture. Cette surface peut être très grande vu que la vapeur surchauffée a un coefficient de transfert de $60 \text{ W/m}^2\text{K}$ seulement. On se retrouve donc à estimer le coût d'un échangeur relativement simple (par unité de surface) avec une formule adaptée à un échangeur plus complexe. Cela introduit un biais défavorable à la production de vapeur de très basse pression. On peut donc s'attendre à ce qu'un design optimisé avec un réseau explicite d'échangeurs utilise encore davantage la vapeur de très basse pression, amplifiant la tendance observée à simplifier la configuration du désorbeur au profit de cette vapeur, décrite au chapitre 4. (Par contre, le fait d'ignorer les pertes de charge dans ces échangeurs crée un biais inverse qui pourrait être significatif à une si faible pression.)

Le coût du garnissage est calculé pour l'absorbeur, les désorbeurs et le refroidisseur à contact direct. Dans le cas du refroidisseur, le diamètre s'ajuste à la quantité de gaz à refroidir, qui inclut la fumée à re-circuler dans la turbine, alors que la hauteur est fixée à 8,53 m comme dans l'exemple de SRI (Anonymous, 1987)¹⁶. On remarque ici que le coût de chaque colonne se retrouve conceptuellement divisé en deux parties : le coût du garnissage, qui dépend du carré du diamètre réel ; et le reste intégré au résidu, qui dépend du volume de gaz à la puissance 0,65, indépendamment du diamètre réel. Cette division évite l'évaluation fastidieuse du coût détaillé de chaque colonne, tout en considérant la majeure partie de l'impact du diamètre réel sur le coût, impact déjà exagéré par le calcul du O&M. (Par exemple, comme montré plus haut, 25 % du coût d'opération supplémentaire est attribuable au pompage supplémentaire, mais le 75 % restant est plutôt spéculatif.)

La dernière composante du coût d'investissement est le coût de la turbine à vapeur, supposée plus petite vu que la capture du CO_2 diminue la quantité de vapeur à turbiner. On soustrait donc le coût de l'ancienne turbine pour ajouter celui de la nouvelle, avec la fonction *OSMOSE* « cost_PelsterSteamTurbine ». On ne considère pas de coût associé à la recirculation des gaz de combustion vu que le refroidissement requis est déjà fourni par le système de capture.

¹⁶ En fait SRI utilise une colonne de 28 pieds avec seulement 10 pieds de garnissage. Il aurait peut-être donc été plus juste d'utiliser 3,05 m de garnissage pour le refroidisseur.

En résumé, le calcul de l'objectif économique donne le code suivant :

```
Total_packing_mass = 3.1416*(D_ABS^2*HETP_ABS*10.0
+D_HP^2*HETP_HP*10.0+D_LP^2*HETP_LP*5.0)*50.5*Init_frac;
% add direct contact cooler
Total_packing_mass = Total_packing_mass
+ 3.1416*(11.24^2*8.53)*50.5*(1.15+Init_frac);
Net_Power=270.0+Overall_electricity_production*0.98/1000.0
- (COMPR_POWER+BLOWER_POWER+MULTI_COMPR_POWER)*Init_frac/1000000.0;

if (HTX_NMINMER > 34)
    HTX_NMINMER = 34;
end
if (rich2hp > 0.99)
    HTX_NMINMER = HTX_NMINMER - 2;
end

c = cost_defaults;

HTX_unit_cost = cost_HeatExchanger_FlatePlate(c, 'CS', 1500, 3);
HTX_cost = HTX_unit_cost.GR*(HTX_NMINMER-16)
* ((TOTAL_HTX_AREA-210270)/1500/(HTX_NMINMER-16))^0.8;

Old_turbine_cost = cost_PelsterSteamTurbine(c,130000);
New_turbine_cost = cost_PelsterSteamTurbine
(c,Overall_electricity_production);

Total_investment = HTX_cost + 240000000 + 33500000*Init_frac^0.65
+ 33500000*(Init_frac*CO2_captured/129600)^0.65
+ New_turbine_cost.GR - Old_turbine_cost.GR
+ 12.25*Total_packing_mass*(c.f_TotalModule+c.f_GrassRoot);

Hourly_depreciation = Total_investment*0.11/7500.0;
Hourly_operation = 18720 + 0.02 * CO2_captured*Init_frac
+ Total_investment*0.04/7500.0 + 30.0*Init_frac;

% economic objective without mitigation
CASH_nomitigation = (Hourly_depreciation + Hourly_operation) / Net_Power;
CASH_basecase_nomitigation = (240000000*0.15/7500.0 + 18720)/400.0;
```

3.5.2 Modèle du cycle de vie

Comme expliqué dans le mémoire de Nathalie Bellerive (2009), l'ACV d'un système de capture de CO₂ repose généralement sur la comparaison de deux centrales thermiques semblables, avec et sans capture. Dans ce cas, l'unité fonctionnelle de l'analyse est une unité d'électricité produite, comme le kWh. Cela cadre bien dans le contexte de l'optimisation, où l'objectif environnemental est le potentiel de réchauffement climatique (GWP) en kg CO₂éq/MWh, donc par unité d'électricité produite.

Bellerive (2009) identifie les principales étapes du cycle de vie de la capture de CO₂. Ceux-ci sont, pour une centrale NGCC :

- La capture de CO₂ (absorbants pour séparation et déshydratation);
- Le transport de CO₂ (énergie de compression, construction d'un réseau de conduites semblable à un réseau de distribution de gaz naturel, construction de trois stations de compression dont une au diesel);
- La séquestration du CO₂ (plateforme en mer pour forage et opération d'un puits, fuites géologiques de CO₂);
- L'extraction, le traitement et le transport du gaz naturel (forage, extraction, refroidissement, odorisation, séchage, désulfuration, récupération des hydrocarbures lourds, entreposage saisonnier);
- La construction et l'opération de la centrale NGCC (construction des bâtiments, turbine à gaz, turbine à vapeur, fumée);
- La démolition de la centrale NGCC (machinerie, transport, recyclage des métaux).

Le mémoire de Bellerive (2009) détaille également les choix technologiques et autres hypothèses définissant la frontière de l'inventaire de ce système. Dans le cas où le gaz naturel est remplacé par le gaz naturel synthétique (SNG), la partie « extraction, traitement et transport du gaz » serait évidemment remplacée par l'équivalent pour le SNG, par exemple d'après les données de Gerber (2008), selon la taille de l'usine SNG et son type de technologie.

L'ACV du système de capture de CO₂ mène à un vecteur de demande finale faisant appel à 33 processus élémentaires d'arrière-plan, ce qui est suffisant pour détailler les principales étapes du cycle de vie décrit précédemment. Le passage au SNG ajoute 18 processus élémentaires d'arrière-plan (catalyseurs compris) et 3 flux élémentaires (CO₂ fossile, NO_x, particules fines) émis directement par l'usine de SNG. Les impacts environnementaux se calculent alors à partir de la demande finale, selon la méthode d'évaluation des impacts choisie, en suivant les règles habituelles de l'ACV. Cela est également détaillé dans le mémoire de Bellerive (2009).

Pour optimiser les impacts environnementaux du procédé de capture de CO₂ avec la plateforme *OSMOSE*, il devient nécessaire de refaire l'inventaire d'ACV à chaque itération, car chaque

conception correspond à des impacts environnementaux différents. Toutefois, le vecteur de demande finale garde toujours les mêmes dimensions puisque ce sont toujours les 33 mêmes processus élémentaires qui sont utilisés; seules les quantités changent. Ainsi, les variations d'inventaire d'une itération à l'autre ne constituent pas nécessairement des nouvelles ACV à réaliser à chaque fois, mais plutôt une recombinaison linéaire de plusieurs inventaires statiques. Le processus itératif ne demanderait alors que quelques opérations algébriques. Cette simplification est au cœur de la méthode employée pour gérer les données d'ACV dans ce projet.

Par exemple, douze processus élémentaires d'arrière-plan servent à décrire la manutention du CO_2 , de l'étape de la déshydratation à celle de la séquestration. Pour une itération donnée, la quantité de ces douze processus interdépendants est toujours proportionnelle. Ainsi, leurs impacts environnementaux combinés sont identiques à ce que donnerait une nouvelle ACV dont l'unité fonctionnelle serait la manutention d'une tonne de CO_2 . Ces impacts peuvent donc être regroupés dans un seul item, aux fins de calcul dans le fichier « post » (section 3.3.3).

De la même façon, tous les 33 processus élémentaires peuvent être regroupés *fonctionnellement* en quelques intrants matériels dont les impacts environnementaux spécifiques sont indépendants des variables de décision dans le modèle. La manutention du CO_2 est l'un de ces intrants. Les 33 processus peuvent aussi être regroupés *mathématiquement* en quatre catégories dont le comportement mathématique, en fonction des variables de décision, est identique. Concrètement, la principale différence entre les deux types de regroupement vient du fait que les consommations d'eau de refroidissement, d'acier et de MEA paraissent intuitivement indépendantes, mais en fait sont toutes dépendantes de la quantité de fumée traitée dans le modèle, du moins pour le niveau de détail utilisé dans cette thèse. Tout au long de cette thèse, le regroupement *fonctionnel*, davantage intuitif et pédagogique, est généralement utilisé dans la discussion, alors que le regroupement *mathématique* est utilisé dans la programmation du modèle.

Dans le cas du SNG, presque tous les équipements ont une taille et un régime d'opération définis en fonction de la quantité de bois entrant. Pour simplifier, les impacts sont donc fixés par unité de bois, ce qui fait que le SNG se ramène à un seul intrant, malgré la complexité des taux variables de capture de CO_2 et de production électrique. Par contre, il faut bien noter que les impacts ne sont pas fixes par unité de SNG, lorsque le taux de capture de CO_2 à l'usine de SNG est variable. Le calcul de ces impacts est décrit à la section 3.6.

Les regroupements *mathématique* et *fonctionnel* facilitent la gestion des données et constituent les premières étapes de l'adaptation d'une ACV à un contexte d'optimisation. La Table 3-2 résume ces résultats.

Table 3-2 : Classification des processus du vecteur de demande finale dans l'ACV

Nom abrégé	Groupe	Facteur de conversion		
		Groupe	Horaire	
Gaz naturel distribution /FR U	1 GJ Gaz naturel	0,0075	320000	
Gaz naturel France /RER U				
Gaz naturel Royaume-uni /RER U				
Gaz naturel Netherlands /RER U				
Gaz naturel Norway /RER U				
Gaz naturel Russian /RER U				
Gaz naturel Algérie /RER U				
Gaz naturel Nigéria adapté /RER U				
Électricité NGCC avec capture /RER U	1 GJ Fumée	0,0075	320000 * (Fraction des fumées sur laquelle la capture s’opère)	
Centrale Métaux instituts /RER/I U	1 GJ Infrastr.	0,0075		
Hydrochloric acid, at plant/RER U	1 GJ Autres intrants chimiques			
Sodium hydroxide, at plant/RER U				
Water, decarbonised, at plant/RER U				
Disposal, residue cooling tower, /CH U				
IISI - Coil BF -Europe no RE	1 kg Acier	1,04E-05		
Trp carbon steel /RER U	1 kg Eau de refroidissement	60,155		
Eau Cooling water, at plant/RER U		6,30E-05		
MEA at plant/RER U	1 kg MEA		(Quantité de CO ₂ effectivement capturée) / 0,378	
Trp MEA /RER U				
Déshydratation CO2 sec modifié /NO U	1 t Transport de CO ₂	0,000378		
Construction plateforme /OCE/I U				
Forage puits /OCE/I U				
IISI - Plate BF-Europe no RE vf				
Construction pipeline onshore /I U				
Électricité compression rive /UCTE U				
Construction pipeline offshore /I U				
Génératrice pour compression /GLO U				
Trp diesel sur la plateforme /RER U				
Trp infra compression lorry /RER U				
Trp infra compression barge/RER U				
Fuite de CO2	1 t Séquestr.CO ₂	0,000378		(Quantité d’inox) / 3,4
SSL - Stainless Steel 316 2B no RE	1 kg Acier inoxydable	1,51E-05		
Trp Stainless /RER U				

Dans la Table 3-2, on remarque que seuls les processus dont le nom se termine en « U » proviennent d'*ecoinvent*. Par contre, tous les processus de la table sont d'arrière-plan, sauf « Électricité NGCC avec capture » et « Fuite de CO₂ », qui peuvent être considérés d'avant-plan dans la mesure où ceux-ci sont en principe spécifiques au site, même s'il s'agit de données génériques dans ce cas-ci. La deuxième et la troisième colonne représentent le regroupement fonctionnel, alors que la dernière colonne représente le regroupement mathématique.

Dans la Table 3-2, le « facteur de conversion groupe » correspond à la quantité de chaque intrant entrant dans le cycle de vie d'un kWh d'électricité, pour la centrale non optimisée dans le contexte de l'ACV (Bellerive, 2009). Ces facteurs sont utiles pour décomposer les impacts de ce kWh en termes compréhensibles, mais ne sont pas utilisés dans la programmation. Comme les deux types de facteurs ne sont pas directement reliés, leur comparaison peut être une étape utile de vérification.

Le « facteur de conversion horaire » correspond plutôt au regroupement *mathématique* et est utilisé dans la programmation. Cette quantité peu intuitive indique directement par quoi il faut multiplier la contribution d'un processus aux impacts environnementaux d'un kWh d'électricité avant optimisation, pour obtenir les impacts de la centrale optimisée, par heure, en fonction de trois variables du modèle d'optimisation. Cette recombinaison procède plutôt par imitation de la modélisation économique, qui est aussi sur une base horaire. Le nombre de ces facteurs (seulement quatre) peut paraître bas, mais en fait les impacts ne peuvent pas être détaillés davantage à moins de refaire un nouveau modèle plus détaillé que celui des coûts, ce qui ne serait pas logique. Ainsi, le vecteur de demande finale, en fonction de l'ensemble des variables de décision sélectionnées pour la simulation, n'a que quatre éléments linéairement indépendants. Ceux-ci correspondent aux processus dont les impacts environnementaux sont respectivement : fixes par unité de temps, fixes par unité de fumée traitée, fixes par unité de CO₂ capturé, et fixes par unité d'inox installé. Notamment, aucun impact n'est fixe par unité d'électricité produite.

Par exemple, tous les impacts sur une base horaire déjà présents dans la centrale sans capture, sauf les émissions directes de CO₂, sont des impacts indépendants de la conception du système de capture. Ils sont donc fixes par unité de temps dans la Table 3-2. Comme le rendement thermodynamique de 48 % supposé dans l'ACV ne permet de produire que 320000 kWh par heure avec 2400 GJ/h de gaz naturel, le facteur de conversion horaire devient 320000,

indépendamment de la façon dont a été obtenue la performance de la centrale modélisée dans l'ACV originale. Les impacts horaires de la centrale optimisée, dont c'est la puissance thermique de 2400 GJ/h qui est fixe, correspondront alors à 320000 unités fonctionnelles dans l'ACV, indépendamment de son rendement thermodynamique.

En appliquant ces facteurs de conversion horaire aux résultats de Bellerive (2009) pour la catégorie d'impacts GWP, les impacts deviennent¹⁷ :

- 30266 (ou 29473) kg CO₂eq/h d'impacts fixes par unité de temps
 - 29168 pour le gaz naturel (extraction, traitement et transport) ;
 - 304 pour l'infrastructure de la centrale avant capture, ici amortie sur 225000 heures comme dans l'ACV (312 si on inclut l'infrastructure d'acier pour la capture) ;
 - 774 pour le méthane et l'oxyde nitreux dans la fumée, qui peuvent théoriquement varier selon le design des brûleurs et la recirculation (0 si on les néglige) ;
 - 20 pour les autres intrants chimiques (0 si on les considère utiles à la capture) ;

¹⁷ Ces données ne considèrent pas les impacts évitables. Elles proviennent du fichier « Processus Etienne Résultats.xls », qui provient lui-même du fichier « GDF Résultats_TEG modif-corrigé.xls », en particulier le processus « GDF avec cap, dés,TEG mod/corr ». Ce dernier provient de la base de données SimaPro « EDFGdF / Nathalie Bellerive EDF - Gaz de France / Product stages / Assembly / Others ». Il s'agit de l'ACV finalisée par Jean-François Ménard pour le compte d'Électricité de France et de GDF SUEZ, avec *ecoinvent* 1.2. Cette base de données est à distinguer de version de travail, localisée dans « Total21092005 / Nathalie EDF - GDF », particulièrement dans les sections « Processes / Material / Etienne » et « Product stages / Assembly / Others ». Elle est aussi à distinguer de la base de données « Professional / Tutorial with wood example » qui a été utilisée pour recréer l'ACV du SNG réalisée par Léda Gerber, et pour obtenir des données *ecoinvent* 2.0 pour le troisième article (chapitre 7), notamment dans les sections « Processes / Material / Fuels / Biofuels / Methane » et « Processes / Energy / Cogeneration / Gas / Power unit ». Les chiffres entre parenthèses indiquent les valeurs utilisées dans certaines simulations. Celles-ci diffèrent à cause d'omissions (méthane et oxyde nitreux), d'erreurs de catégorisation (acier dans infrastructures, « autres intrants chimiques » dans fumée traitée), ou de simplifications (inox dans fumée traitée). Finalement, on remarque qu'*ecoinvent* considère l'eau de refroidissement d'une centrale NGCC comme étant sans impact; il est donc curieux d'utiliser une eau différente pour le refroidissement du système de capture. Si les pertes de MEA étaient modélisées séparément, les impacts fixes par unité de fumée deviendraient plutôt négligeables.

- 0 à 239 (ou 259 ou 290) kg CO₂éq/h d'impacts fixes par unité de fumée traitée (la fraction de la fumée traitée est « Init_frac »)
 - (163 x Init_frac) pour l'eau de refroidissement du système de capture seul ;
 - (69 x Init_frac) pour l'absorbant MEA et son transport ;
 - (31 x Init_frac) si on veut inclure l'inox ici pour simplifier (distorsion à éviter tant que la hauteur de l'absorbeur est une variable de décision) ;
 - (8 x Init_frac) pour l'acier et son transport, ici amorti sur 225000 heures comme dans l'ACV¹⁸ (0 si on le considère avec les autres infrastructures);
 - 0 pour les autres intrants chimiques (20 si on les considère utiles à la capture) ;
- 0 à 1455 kg CO₂éq/h d'impacts fixes par unité de CO₂ capturé (« CO2_captured »)
 - 1,01 % du CO₂ effectivement capturé, lui-même indiqué par *ASPEN*, pour son séchage, transport et séquestration, infrastructures incluses mais fuites exclues ;
- 0 à ~ 40 kg CO₂éq/h d'impacts fixes par unité d'inox installé (« Total_packing_mass »)
 - $2,973 \times 10^{-5}$ kg CO₂éq/h (ou 0) par kg d'inox contenu dans le garnissage des colonnes, pour sa fabrication et son transport, ici amorti sur 225000 heures comme dans l'ACV (calculé à partir des dimensions réelles des colonnes dans la simulation).

On remarque que les impacts de l'inox sont presque aussi minimes que ceux de l'acier. Il est toutefois intéressant de les désagréger des impacts fixes par unité de fumée traitée, en vue de l'analyse de sensibilité, afin que les impacts associés à la partie variable de l'investissement soient bien représentés dans le modèle. Cela permet éventuellement de déterminer si les dimensions réelles des colonnes (et donc la modélisation cinétique) sont utiles à l'optimisation des impacts environnementaux.

Finalement, il reste à modéliser les émissions évitables, selon la méthode décrite dans les articles. Dans certaines simulations, le choix d'éviter ces émissions est fait par une variable de décision,

¹⁸ La proportionnalité n'est pas exacte en réalité vu que la masse de certaines infrastructures ne dépend pas linéairement du volume de fumée, mais l'erreur ici est négligeable sur le total de 239. Il est à noter que l'utilisation de fonctions non-linéaires pour décrire la masse des équipements a été explorée plus récemment par Gerber (2011).

alors que dans d'autres simulations, incluant celles décrites ici, les émissions sont plutôt calculées en double (évitement maximal ou nul). La quantité de méthane évitable chez les producteurs de gaz naturel varie, selon les auteurs, entre 30 % (Robinson, Fernandez, & Kantamaneni, 2003) et 50 % (Anonymous, 1999b). La quantité de CO₂ capturable dans le gaz naturel est grossièrement estimée à 1 kg/GJ, soit 11 % du total¹⁹. Le coût horaire d'évitement de ces émissions correspond alors au produit de la quantité de gaz consommé, de la quantité d'émissions évitables par unité de gaz, et du coût par quantité évitée tel que déterminé dans les publications. Dans ce cas-ci, en prenant seulement 30 % des émissions de méthane comme évitables, cela revient à moins de 60 \$/h ou 0,03 \$/GJ ou 0,4 % du coût du combustible.

En résumé, le modèle d'optimisation calcule l'objectif environnemental, c'est-à-dire le potentiel de réchauffement climatique (GWP) en kg CO₂éq/MWh, en additionnant les émissions de CO₂ non capturé avec les émissions non évitées en arrière-plan qui sont décrites depuis le début de cette section. Les lignes de code qui correspondent au calcul du coût des émissions évitables, de l'objectif environnemental et des coûts totaux d'évitement du CO₂, sans utilisation du SNG, sont les suivantes :

```
% 30% of methane avoided at $10/ton and 1kg CO2 avoided at $15/ton
Hourly_mitigation = 2400.0/1000.0*(3.15*0.3*10.0+1.0*15.0);
GWP_noLCA = 144000*(1-Init_frac) + CO2_uncaptured*Init_frac;
GWP_nomitigation = GWP_noLCA + CO2_captured*Init_frac*0.0101
    + Total_packing_mass*6.69/225000.0 + 29473 + 259 * Init_frac;
GWP_OBJ = GWP_nomitigation - 2400.0*(3.15*0.3+1.0);
GWP_basecase_noLCA = 144000;
GWP_basecase_nomitigation = 144000+29473;
GWP_basecase_mitigation = 144000+29473-2400.0*(3.15*0.3+1.0);

% avoidance cost without mitigation
CCO2_noLCA = 1000*(CASH_basecase_nomitigation-CASH_nomitigation)/
    (GWP_noLCA/Net_Power - GWP_basecase_noLCA/400.0);
CCO2_nomitigation = 1000*(CASH_basecase_nomitigation-CASH_nomitigation)/
    (GWP_nomitigation/Net_Power - GWP_basecase_nomitigation/400.0);
% avoidance cost with mitigation
CCO2_mitigation = 1000*(CASH_basecase_mitigation-CASH_OBJ)/
    (GWP_mitigation/Net_Power - GWP_basecase_mitigation/400.0);
```

¹⁹ L'estimé apparaît du bon ordre de grandeur considérant que, selon *ecoinvent*, 16 % des émissions de CO₂ dans le cycle de vie du gaz russe provient du procédé d'adoucissement, et que ce gaz n'est pas tout séquestrable. Il n'y a pas de données spécifiques à l'adoucissement pour les autres pays. Certains types de gaz ne contiennent pas assez de CO₂ pour avoir besoin de ce procédé, ce qui diminue également le pourcentage séquestrable en moyenne. Au total, au moins 89 % du CO₂ et 50 % du CH₄ est donc considéré « inévitable » à ~ 60 \$/ton CO₂éq, seuil de la capture.

3.6 Génération de données économiques (deuxième article)

Pour la suite des travaux, il aurait certes été possible de conserver les modèles *ASPEN* et *EASY* et ainsi continuer d'optimiser la configuration interne du système de capture à mesure que d'autres options s'y ajoutent, comme la substitution de gaz naturel synthétique (SNG). Toutefois, cela aurait exigé un temps de calcul considérable sans produire de résultats publiables, l'article à saveur technique étant terminé (chapitre 4). Il a donc été jugé plus intéressant et expéditif de mettre en compétition les nouvelles options avec les meilleures configurations du système de capture telles que publiées, à l'intérieur d'un modèle pouvant s'exécuter en moins d'une seconde par itération, comparativement à plus de quatre minutes. Ce modèle *MATLAB* utilise l'équivalent d'une table pour récupérer les résultats de simulations antérieures.

Il existe plusieurs versions de ce modèle, chacune dans une version différente du fichier « parameterised_model.m », mais à chaque fois l'idée générale est de combiner les 32 systèmes de capture représentés aux figures 4.4 et 4.5 avec les autres options, par un jeu de variables de décision en nombres entiers. Même la fraction de SNG dans le combustible mélangé est exprimée en vingtièmes par « SNG_frac », une variable entière dans le modèle – mais une variable continue dans l'article par souci de généralité. On remarque que cela donne un espace de décision très restreint qu'il devient possible d'explorer en entier, rendant l'algorithme peu utile, sans compter que les combinaisons Pareto-optimales sont plutôt prévisibles cette fois-ci.

Les versions initiales de ce modèle utilisent les résultats de Gerber, Gassner et Maréchal (2009) où le SNG est produit dans une usine de taille variable mais sans capture de CO₂. Les versions suivantes utilisent les résultats de Gassner, Baciocchi, Marechal et Mazzotti (2009) où le SNG est produit dans une usine de taille fixe de 20 mégawatts thermiques (MW_{th}) mais avec un taux de capture de CO₂ variable. La Fig.3.4 illustre une courbe Pareto-optimale avec un gazéificateur de taille variable et sans capture. La section de gauche correspond à un taux de capture de CO₂ croissant pour la centrale NGCC ; la section du milieu, à une substitution croissante de SNG dans le combustible ; la section de droite, à une taille décroissante de l'usine de SNG.

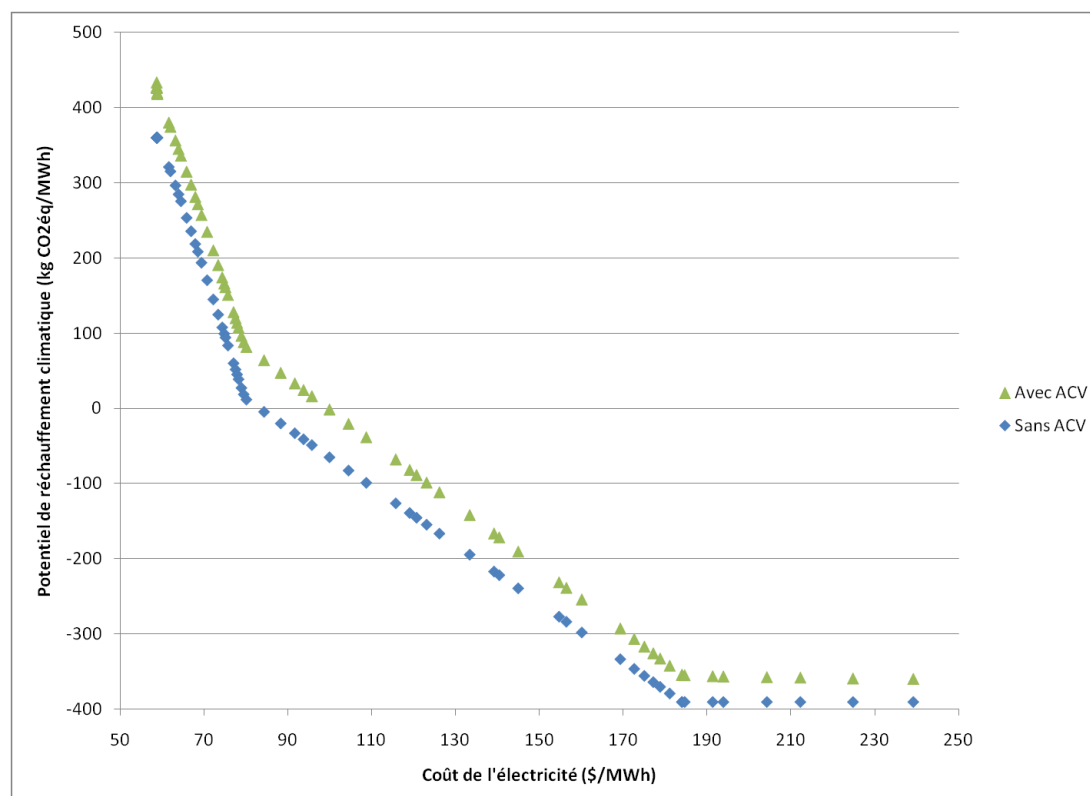


Figure 3.4: Courbe Pareto-optimale avec usine de SNG de taille variable mais sans capture

Comme cette section de droite sur la Fig.3.4 est presque plate, cela indique que le gain environnemental correspondant à des gazéificateurs de petite taille est difficilement justifiable comparativement à la très grande quantité de CO_2 qui peut être capturée ailleurs pour le même coût. On peut donc conclure que la taille optimale de l'usine de SNG excède probablement le maximum considéré par Gerber ($50 \text{ MW}_{\text{th}}$) et devrait plutôt se trouver à proximité de ce que serait l'optimum strictement économique. Bien entendu, pour identifier l'optimum économique, il faut d'abord modéliser correctement les coûts de camionnage en fonction de la distance parcourue pour chercher le bois, ce qui n'a pas été fait lors des travaux originaux (Gerber 2008). D'ailleurs, les derniers travaux de Gassner (2010) considèrent des usines de SNG allant jusqu'à $150 \text{ MW}_{\text{th}}$, ce qui permet de bonnes économies d'échelle malgré le surplus de camionnage. Il est à noter que si l'optimum environnemental était de plus petite taille que l'optimum économique, la Fig.3.4 serait différenciable au point de transition entre la section du milieu et la section de droite, ce qui n'est pas le cas. En effet, c'est la seule façon qui permette géométriquement l'existence d'un point non-Pareto-optimal pour une usine qui serait de plus grande taille mais davantage économique que ce point de transition.

Les usines SNG avec capture de CO₂, même limitées à 20 MW_{th}, donnent un GWP encore plus négatif que les points de la Fig.3.4 et sont donc avantageuses. Parmi les résultats de Gassner, Baciocchi, Marechal et Mazzotti (2009), 17 taux de capture allant de 0 % à 43 % ont été sélectionnés pour l'usine de SNG dans le modèle. Le taux de 40 %, qui s'avère optimal avec les hypothèses de coût par défaut, a été ajouté par la suite en tant que 18^e sélection.

Le fichier « gassner.xlsx » contient la sélection et l'interprétation de ces résultats. On y remarque quelques hypothèses, comme un taux de change de 1,30 \$ / € et un potentiel de réchauffement climatique en arrière-plan de 13,16 kg CO₂éq par MWh de bois, établi en suivant les principes établis à la section 3.5.2. En effet, la taille de la majorité des équipements dépend exclusivement de la quantité de bois traitée, vu que la séparation du SNG et du CO₂ a lieu en aval du procédé. La très grande majorité des impacts de l'usine de production de SNG peut alors être considérée comme fixe par unité de temps, d'où l'utilisation d'impacts proportionnels à la quantité de bois et non à la quantité de SNG. La donnée de 13,16 kg CO₂éq pour les impacts en arrière-plan provient des résultats de Gerber (2008) pour le procédé le plus semblable à celui utilisé par Gassner *et al.*, soit celui du scénario technologique « B » décrit dans le mémoire (Gerber 2008), pour une usine de 20,018 MW_{th} sans capture de CO₂.

Le modèle *MATLAB* résultant ne considère que les paramètres nécessaires au calcul des objectifs, sous forme de « tags » définis exclusivement en unités de MW, \$, kg, GJ et h. Ainsi, le concept de table prend la forme d'une instruction de type « switch/case ». Cela donne par exemple, pour les systèmes de capture de 90 % et 93 % (NGCC) et 30 % (SNG), respectivement :

```
case 28
    Total_investment = 351440056.3;
    Init_frac = 1;
    CO2_captured = 129868.1661;
    Net_Power = 363.121668;

case 29
    Total_investment = 353231836.7;
    Init_frac = 1;
    CO2_captured = 134100.855;
    Net_Power = 361.454939;

[...]

case 11
    SNG_cost = 40.29778097 - SNG_rebate / 12861.55852;
    SNG_GWP = 5.684467478;
    SNG_elec = 0.008307236;
    SNG_captured = 47.810691;
```

La variable « SNG_rebate » correspond au rabais utilisé dans l'article (chapitre 5) pour augmenter la compétitivité du SNG avec la capture du CO₂, exprimé ici en millionnièmes de dollars par seconde par usine de SNG. (12861 correspond à la production de SNG en kW par usine.) Ce rabais est présenté dans l'article comme une économie d'échelle lors du passage de 20 MW_{th} à 150 MW_{th}, même s'il s'agit au départ d'un simple facteur de remplissage. Le calcul des objectifs est ensuite effectué dans un nouveau fichier « post » qui ne considère que les « tags » décrits. Ce fichier est tout de même semblable à celui des sections 3.5.1 et 3.5.2 :

```
SNG_frac = SNG_frac/20.0;
Net_Power = Net_Power + SNG_frac * SNG_elec * 2400 / 3.6;

Hourly_depreciation = Total_investment*0.11/7500.0;
Hourly_fuel = 2400 * (SNG_frac * SNG_cost + (1-SNG_frac) * NG_cost);
Hourly_operation = Total_investment*0.04/7500.0 + 30.0*Init_frac
    + 0.02 * (CO2_captured*Init_frac+2400*SNG_frac*SNG_captured);

% economic objective: $/MWh
CASH_OBJ = (Hourly_depreciation + Hourly_operation + Hourly_fuel)
    / Net_Power;

% environmental objective before and after LCA: kg CO2eq/MWh
Hourly_local_GWP = 144000*(1-Init_frac-SNG_frac)
    + (144000-CO2_captured)*Init_frac - 2400*SNG_frac*SNG_captured;

GWP_OBJ = Hourly_local_GWP/Net_Power;

Hourly_LCA_GWP = Hourly_local_GWP + CO2_captured*Init_frac*0.0101
    + 2400 * (SNG_frac * SNG_GWP + (1-SNG_frac) * NG_GWP)
    + 312 + 290 * Init_frac + 2400*SNG_frac*SNG_captured*0.0101;

GWP_LCA = Hourly_LCA_GWP/Net_Power;
```

On remarque alors que le cycle de vie de l'inox est fusionné avec celui des intrants proportionnels à la quantité de fumée traitée, dont les impacts passent à 290 kg CO₂éq/h (voir section 3.5.2). Cela ne s'applique toutefois pas à la Table 5-4 et la Table 5-5, basées sur des données antérieures modélisées avec la quantité réelle d'inox. Les données de cette analyse de sensibilité se trouvent sous l'onglet « sensibilité » du fichier « rapido.xlsx ». Pour chaque scénario, le coût d'évitement est basé sur la comparaison d'une centrale avec et sans capture dont les objectifs sont calculés de façon identique, tel que détaillé aux équations 5.8 et 5.9.

Dans ce modèle, on remarque également que le transport du CO₂ a les mêmes impacts que celui-ci soit biogénique ou fossile. En effet, le transport de CO₂ biogénique implique à la fois des émissions de CO₂ fossile et des émissions de CO₂ biogénique précédemment comptabilisé

comme séquestré, ce qui revient au même que si toutes les émissions étaient fossiles. Par contre, il se peut que certaines simulations complémentaires aient été effectuées sans considérer les impacts du transport du CO₂ biogénique, par inadvertance.

Dans ce modèle, on remarque finalement qu'il n'y a pas de compresseur entre l'usine de SNG et le pipeline de CO₂, alors que la pression doit en fait être haussée de 1 bar à environ 63 bar. Si on veut utiliser la donnée du coût du transport de CO₂ – aussi incertaine soit-elle – de façon cohérente pour l'usine de SNG et la centrale NGCC simultanément, alors il serait mieux d'ajouter ce compresseur au modèle. Cet ajout mineur, correspondant à une consommation électrique de 0,432 GJ par tonne de CO₂ capturé et à un investissement de 0,78 \$ millions par usine de SNG pour un taux de capture de 30 %, est inclus dans certaines versions récentes du modèle, mais pas dans celles qui ont été utilisées pour générer les résultats présentés dans cette thèse.

Une fois la forme de la courbe Pareto-optimale connue, il devient alors possible de la générer sans algorithme, par énumération comme indiqué à la Fig.5.2. Cette énumération peut se faire grâce aux fichiers « rapido*.m » basés sur le même modèle *MATLAB*, dont les résultats sont rassemblés dans les fichiers « rapido.xlsx ». Toutefois, la préparation des figures 5.3 à 5.11, incluant les calculs reliés à l'équation 5.14 pour le prix du bois, se trouve dans le fichier « Figures_chap_5.xlsx » et est basée sur l'exécution d'*OSMOSE* en mode manuel « OneRun » pour chacun des points. Voilà donc tout autant de méthodes différentes pour régénérer les mêmes résultats au besoin.

Si l'on compare le modèle *MATLAB* à celui présenté dans l'article (section 5.2.2), on observe quelques différences cosmétiques. En effet, l'article présente les calculs intermédiaires en fonction de x_{SNG} , α , et n_{SNG} , alors que le modèle utilise les variables « SNG_frac » et « Init_frac ». On constate alors que « SNG_frac » vaut $20 x_{SNG}$, transformé en nombre entier ; que « Init_frac » vaut $(\alpha/0,9)$, limité à 1,0 ; et que n_{SNG} est inutile vu que les données sont définies par unité de SNG dans le modèle. Si le modèle était à refaire, il serait probablement plus élégant d'utiliser x_{SNG} , α , et n_{SNG} . Il serait aussi envisageable d'utiliser exclusivement des variables continues, en définissant un modèle capable d'interpoler entre les configurations déjà définies. Cela permettrait d'associer une configuration exacte de procédé à chaque taux de capture de CO₂.

3.7 Génération de données environnementales (troisième article)

Il existe une version du modèle *MATLAB* (toujours dans un fichier « parameterised_model.m ») qui permet le calcul des impacts dans les autres catégories que le changement climatique (GWP), pour neuf scénarios prédéfinis. Cette version-là utilise la méthode d'évaluation des impacts néerlandaise *CML* car c'est la méthode pour laquelle les résultats originaux de l'ACV de l'usine de SNG, tels que disponibles dans le fichier « LCI_Etienne_Bernier.xls » aimablement produit par Léda Gerber, sont le plus facilement utilisables. Toutefois, le troisième article (chapitre 6) n'utilise pas ce modèle car le développement méthodologique présenté dans l'article est déjà suffisamment complexe sans entrer dans les détails de la modélisation du procédé de gazéification. De plus, l'article porte en grande partie sur le traitement des données d'arrière-plan, faisant en sorte qu'il n'est pas souhaitable dans ce cas-ci d'amener les émissions de la gazéification à l'avant-plan, même s'il est bien entendu normalement souhaitable de modéliser le plus grand nombre possible d'émissions à l'avant-plan pour un maximum de précision.

Le troisième article se focalise plutôt sur l'utilisation de données environnementales plus récentes d'*ecoinvent v2.0*, avec la méthode d'évaluation des impacts *EcoCosts 2007*, qui permet de présenter les résultats dans un format mieux adapté à la discussion. La méthode *EcoCosts 2007* correspond à l'implémentation la plus récente de l'approche des éco-coûts de Vogtländer et Bijma (2000) brièvement présentée dans l'introduction ainsi qu'aux sections 6.2.1, 6.2.2 et 6.2.3.3. Cette méthode est en terrain connu vu que c'est un hybride entre les méthodes *CML* et *IMPACT 2002+* à la base. La seule nouveauté est l'ajout d'une pondération basée sur les coûts de prévention marginaux, en €. D'ailleurs, sauf exception, l'utilisation de l'euro dans cette thèse est toujours limitée aux éco-coûts, ce qui permet de faciliter conceptuellement la séparation entre les coûts réels (en dollars) et virtuels (en euros). Pour faire la conversion, il est préférable d'utiliser un taux de 1,30 \$ / € ou 1,35 \$ / €, les deux seuls taux utilisés ailleurs dans la modélisation.

Comme seulement quatre scénarios sont présentés dans l'article (scénario de base, scénario avec 90 % de capture dans la centrale NGCC, scénario avec SNG sans capture, scénario avec biogaz sans capture), il n'est pas nécessaire de modéliser cet espace de décision dans *MATLAB* pour y appliquer une forme algorithmique d'optimisation. Les données sont transférées directement et exclusivement de *SimaPro* vers *Excel*. La méthode *EcoCosts 2007* utilisée est légèrement

modifiée par rapport à l'originale afin de faciliter le calcul séparé des éco-coûts pour le CO₂, le CH₄, les SO_x, les NO_x et les métaux écotoxiques. Cette version modifiée se trouve dans un fichier « Ecocosts_2007_system_110517 – Etienne.csv » directement importable dans *SimaPro*.

Comme les données d'inventaire reliées à la capture de CO₂ sont trop complexes pour pouvoir être migrées facilement d'une base de données à une autre, celles-ci sont laissées dans le projet « Nathalie Bellerive EDF - Gaz de France » de la base de données « EDfGdF » avec *ecoinvent* v1.2, tandis que l'inventaire des autres étapes du cycle de vie sont dans le projet « Tutorial with wood example » de la base de données « Professional » avec *ecoinvent* v2.0. Ces données sont fusionnées dans l'onglet « Final » du fichier « Figures_chap_6.xlsx », qui contient aussi tous les tableaux et figures de l'article, sauf Fig.6.1 et Fig.6.3, qui sont dans « Figures_chap_4.xlsx » où se trouve la modélisation de l'évitement des émissions de méthane chez les producteurs de gaz.

Toujours dans l'onglet « Final », on retrouvera facilement les éco-coûts des quatre scénarios présentés dans l'article et les calculs simples utilisés pour traiter ces données, incluant le calcul manuel des facteurs de pondération minimums et maximums. Le calcul des principaux contributeurs utilise l'option « Specification per process » dans *SimaPro*, dont les résultats sont recopiés manuellement dans *Excel*. Le calcul des distributions d'éco-coûts (colonne CK) est simplement le tri des colonnes BZ à CI, elles-mêmes obtenues à partir de *SimaPro* en comparant tous les processus *ecoinvent*, environ 275 à la fois, avec la méthode *Ecocosts 2007* modifiée, puis en transposant les résultats dans *Excel*.

Les autres onglets contiennent des résultats non utilisés avec la méthode *CML* ou avec celle des éco-coûts, quelques calculs supplémentaires comme le coût d'investissement spécifique au SNG, le GWP du cycle de vie exprimé comme un taux de capture de CO₂ équivalent, le rendement thermodynamique global, et le coût de revient du combustible neutralisé en carbone. Certains de ces anciens résultats dépendent d'une version reconstituée des données de Léda Gerber sous *ecoinvent* v2.0, contrairement à la version finale de l'article qui est basée sur l'usine de SNG autrichienne modélisée directement dans *ecoinvent*. Les deux versions utilisent presque exactement les mêmes intrants, mais dans des proportions légèrement différentes. Par contre, l'utilisation de la version *ecoinvent* simplifie la description de la méthode dans l'article.

Ainsi, bien que ce soit dans le troisième article que la théorie présentée soit la plus complexe et achevée, c'est quand même dans cet article que la modélisation est la plus simple !

CHAPITRE 4. OPTIMISATION MULTICRITÈRES DE LA CONCEPTION D'UNE CENTRALE NGCC AVEC CAPTURE DE CO₂ DANS UNE PERSPECTIVE DE CYCLE DE VIE (RÉSULTATS TECHNIQUES)

Ce chapitre contient le premier article soumis avec cette thèse. Il a été publié dans la revue *Energy*. L'article a été soumis le 30 octobre 2008, resoumis le 25 avril 2009, accepté le 12 juin 2009 et mis en ligne le 17 juillet 2009. Quelques résultats complémentaires suivent l'article. La référence complète est donnée dans l'annexe 2.1. La politique des droits d'auteur d'*Elsevier* (elsevier.com/copyright) autorise la transcription intégrale de l'article dans cette thèse.

4.1 Présentation de l'article

L'article s'adresse à un auditoire d'énergéticiens et d'ingénieurs de procédés. Il vise à déterminer la configuration technique du système de capture de CO₂ qui minimise le coût d'évitement du CO₂ dans une perspective de cycle de vie, en mettant l'emphasis sur l'intégration thermique des procédés. C'est donc l'article qui présente les résultats dépendant directement de la plate-forme de simulation présentée au chapitre 3, et qui fournit la liste de configurations Pareto-optimales réutilisées dans les articles suivants. La revue exige des références numérotées dont la liste se trouve à la section 4.2.8.

4.2 Multi-Objective Design Optimization of a Natural Gas Combined Cycle with Carbon Dioxide Capture in a Life Cycle Perspective

Etienne Bernier, François Maréchal, Réjean Samson

Keywords: Life cycle; Methodology; Multi-objective optimization; Carbon dioxide capture

Abstract The use of multi-objective optimization techniques is attractive to incorporate environmental objectives into the design of energy conversion systems. A method to locally optimize a given process while considering its global environmental impact by using life cycle assessment (LCA) to account for avoidable and unavoidable off-site emissions for each independent material input is presented. It is applied to study the integration of a CO₂ capture process using monoethanolamine in a natural gas combined cycle power plant, simultaneously optimizing column dimensions, heat exchange and absorbent flow configuration with respect to

two objectives: the levelized cost of electricity and its life cycle global warming potential. The model combines a process flow-sheeting model and a separate process integration model. After optimization using an evolutionary algorithm, the results showed that widening the absorber and generating near-atmospheric pressure steam are cost-effective options but that increasing stripper complexity is less so. With \$7.80/GJ natural gas and \$20/ton CO₂ handling, the minimum on-site CO₂ abatement cost reaches \$62.43/ton on a life cycle basis, achieved with a capture rate of over 90%. Of this, \$2.13/ton is related to off-site emissions – a specific advantage of LCA that could help industries and governments anticipate the actual future costs of CO₂ capture.

Nomenclature

CO ₂	Carbon dioxide
CO _{2eq}	Carbon dioxide equivalent
COE	Levelized cost of electricity
GWP	Global warming potential
LCA	Life cycle assessment
LP	Low pressure
NGCC	Natural gas combined cycle
MEA	Monoethanolamine
C_{CO_2}	CO ₂ abatement cost, \$/ton
VLP	Very low pressure

4.2.1 Introduction

Environmental constraints are increasingly significant to all types of technical decision-making, including the design optimization of energy conversion systems such as large power plants. Multi-objective optimization methodology is ideally suited to incorporate environmental information since it does not require weighing different environmental and non-environmental objectives before optimization [1]. This is particularly useful in understanding the trade-off between cost, performance and environmental impact when facing unknown future constraints such as an emission limit or tax. In order to achieve a minimum-emission design, it is not sufficient to optimize on-site emissions because off-site emissions also need to be accounted for, if not internalized. Life cycle assessment (LCA) as defined by ISO 14040 [2] is a method for measuring the overall impact of both on-site and off-site emissions.

Optimizing a design with respect to LCA results is straightforward but can have unintended consequences. LCA methodology systematically weighs emissions according to their measured

potential impact rather than their abatement cost, even when the abatement cost is significantly lower than the impact value. Consequently, directly using LCA results as an optimization objective function may lead to a sub-optimal design, since inputs whose life cycle emissions are easy to reduce will not be favoured or vice-versa. In other words, the search for a process configuration compatible with the global emissions minimum requires that lower-cost off-site emission mitigation options be enabled, which, in turn, necessitates knowledge about emission abatement costs throughout the life cycle. This type of economic information is not typically available in LCA results.

This study aimed to optimize the integration of a post-combustion CO₂ capture process using reversible absorption with MEA in a NGCC power plant. It minimized two aspects: the levelized cost of electricity (COE) and its life cycle global warming potential (GWP) based on LCA results. A previous study [1] computed similar objective functions in a power plant design method but used a partial life cycle approach and did not optimize the CO₂ capture system internally.

This study is the first to optimize a post-combustion CO₂ capture process by simultaneously using a process flow-sheeting model and a separate process integration model. This made it possible, for example, to model the potential benefit of producing additional steam²⁰ using the heat of the lean absorbent. Comparatively, the authors in [3-6] did not use a process integration model. This is also the first study to adapt LCA results before using them to build a process optimisation objective to ensure that the optimal configurations found are compatible with the goal to minimize global emissions.

4.2.2 Method

Using a multi-objective optimization framework, the process was designed to minimize both thermo-economic and environmental objectives. Plotting one objective against the other for several competing process designs provided a graphic representation of the compromise between the objectives. The Pareto-optimal frontier is the unique set of optimal designs for which no other design was found better for both objectives.

²⁰ Il est implicite que cette vapeur est destinée à la turbine, puisqu'il n'est pas question de cogénération, mais cela aurait pu être clarifié ici.

The process was optimized by iterative simulation to compute operating conditions, local emissions and energy transfers with a flow-sheeting model described in section 4.2.2.1. In order to minimize the global (rather than local) environmental impact, the environmental objective accounted for all off-site emissions, except those that are avoidable at a cost lower than the abatement cost of on-site emissions. Section 4.2.2.2 describes the computation of the environmental objective using adapted LCA results.

4.2.2.1 Thermo-economic process design

A generic thermo-economic optimization method was applied to study the process design (in this case, the CO₂ capture process in a NGCC power plant). The superstructure-based method is detailed in [7] and was implemented within a software platform developed by the Industrial Energy Systems Laboratory. The model combined a simple gas turbine model and an *ASPEN Plus* flow-sheeting model of the CO₂ absorption and desorption columns and ancillary equipment. It then combined a process integration model used for modelling an implicit heat exchanger network and steam cycle electricity production. The performance indicators included a cost estimate based on a thermo-economic evaluation of the size of the equipment and an adapted LCA model to account for the related off-site emissions. An evolutionary algorithm based on queuing and clustering was used to solve the multi-objective optimization problem with respect to the user-defined decision variables listed in Table 4-1.

When executing the optimisation, the algorithm maintained a population of design candidates, including the Pareto-optimal frontier of all previous iterations. It assigned new values to the decision variables and then solved the flow-sheeting model, which returned information about the performance, heat transfer requirements in the system (e.g. heat load of the columns) and power requirements of the ancillary equipment. Heat transfer requirements were transferred to the process integration model, which then maximized electricity production by solving a mixed integer linear programming problem that found the optimal flows in the steam network using the heat cascade as an implicit heat exchanger network model. Net electricity production, simulated emission flows, equipment cost as a function of size and other information could then be used to calculate the objectives, which were processed by the evolutionary algorithm. Exploring the decision space and improving the designs led to optimization convergence, which never formally ended.

Table 4-1 : Major decision variables and results

Parameter	Min (Decisionspace)	Max	Min (a1 to a13)	Max a13)	Min (a14 to a26)	Max a26)	Best (b2)
Flue gas by-pass fraction (%)	0	1	0.37	0.875	0	0.35	0
Lean absorbent CO ₂ loading (mol/mol)	0.2	0.35	0.223	0.243	0.222	0.225	0.225
Rich absorbent target CO ₂ loading ^a	0.45	0.5	0.484	0.499	0.494	0.499	0.491
Rich absorbent split fraction ^b	0	0.7	0.35	0.51	0.37	0.47	0.45
Lean absorbent split fraction ^c	0	0.4	0	0.02	0	0.02	0
Rich absorbent pre-heat temp. (°C)	95	110	102	105	102	103	102.5
Split rich absorbent re-heat temp. (°C)	105	120	115	119	114	116	116
Pinch on the lean absorbent side (°C)	1	10	8.1	9.1	4.1	6.6	4.5
Pinch on the rich absorbent side (°C)	1	10	4.1	4.2	4.1	4.2	4.1
LP stripper pressure (bar)	1.2	2	1.79	1.98	1.87	1.98	1.98
HP stripper / LP stripper pressure ratio	1	1.5	1.29	1.43	1.28	1.32	1.30
Steam extraction / LP stripper pr. ratio	1.2	1.5	1.49	1.5	1.47	1.49	1.47
Absorber diameter / (1-bypass) ^{0.5} (m)	12	18	15.5	17.2	15.5	15.9	16.0
Absorber packed height (m)	5	20	13.4	14.4	13.9	14.4	15.1

^a Hypothetical CO₂/MEA loading corresponding to a 100% internal capture rate, convenient to determine absorbent flow

^b From the bottom of the absorber to the middle of the HP stripper

^c From the bottom of the HP stripper to the middle of the absorber

4.2.2.2 Integrating LCA results when optimizing the process design

When optimizing global process emissions, it was important to consider the relevant parts of a cradle-to-grave analysis for two material input categories: the chemicals flowing into the process and the metals used to manufacture process equipment. To account for a maximum of relevant off-site emissions, the proposed method used a maximum of pre-existing information, including information in ISO 14040-compliant [2] LCA databases and generic information about emission abatement costs. The methodology used to adapt the LCA results is described in the following three-step procedure. It required available LCA results for a typical base case of the process as a whole and then for each material input.

First, elementary processes within the base case LCA were sorted in decreasing order based on their contribution to the environmental objective (an impact category). Second, mitigation

options were assessed for the top ranking processes. Specifically, the options had to correspond to alternate technologies that were cost-effective given the estimated on-site abatement cost for equivalent emissions. Last, the avoidable emissions for each option and each input were subtracted from the LCA results and any corresponding additional costs were added to the cost of the respective inputs.

For example, in the natural gas industry sector, methane recovery technologies such as low-bleed pneumatics, green completions and compressor blow-down gas recovery have an abatement cost well below the cost of CO₂ capture [8]. They should be considered when adapting the LCA of the fuel supply of the NGCC power plant.

It is important to note that this method is only applicable when the on-site abatement cost is expected to vary narrowly along the Pareto-optimal frontier²¹. In more general cases, it is necessary to optimize on-site and off-site emissions simultaneously by defining decision variables for the off-site options. This method will be described in a later publication.

4.2.3 Case study

The optimization method was applied to the specific case of a NGCC power plant with post-combustion CO₂ capture using MEA and considered COE and life cycle GWP per unit of electricity. The power plant base case without capture (not to be confused with the LCA base case with CO₂ capture) was the 400MW General Electric STAG 107H/109H cycle, described in part of Table 4-2. Based on the analysis of the process composite curves, only the high-temperature part of the steam cycle used the same pressures with and without CO₂ capture. The integration of CO₂ capture required two pressure levels as decision variables: LP steam extraction in the 1.4-3.0 bar range and VLP steam production in the 0.8-1.5 bar range.

²¹ Cette phrase aurait aussi pu se lire comme suit: “It is important to note that this method is valid only when the resulting Pareto-optimal frontier is cut off where the marginal abatement cost of on-site emissions remains below the cost of the next available off-site mitigation option.”

Table 4-2 : Technical and economic parameters for the NGCC power plant

Parameter	Unit	Value	Source
Gas cycle net power output	MW	270	[20]
Gas turbine cooling heat	MW	19	[21]
Flue gas temperature leaving the gas turbine	K	868	[21]
Flue gas heat flow capacity	kW/K	639.7	calculated
CO ₂ outflow after recirculation	t/h	144	
Nitrogen outflow after recirculation	t/h	733	
Flue gas temperature entering the absorber	K	313	
Absorbent temperature entering the absorber	K	313	
High pressure steam pressure	bar	166	[20]
High pressure steam temperature	K	838	[20]
Intermediate pressure steam pressure	bar	24.8	[20]
Intermediate pressure steam temperature	K	838	[20]
Low pressure steam pressure without CO ₂ capture	bar	3.2	[20]
Low pressure steam pressure with CO ₂ capture	bar	7.0	
Low pressure steam temperature with CO ₂ capture	K	624	
Temperature pinch on the water side	K	4	
Temperature pinch on the flue gas side	K	10	
Non-condensing steam turbine isentropic efficiency	%	90	
Condensing steam turbine isentropic efficiency	%	85	
Steam cycle net power output without CO ₂ capture	MW	130	[20]
Number of CO ₂ absorber stages		11	
Number of high-pressure CO ₂ stripper stages		10	
Number of low-pressure CO ₂ stripper stages		5	
Number of CO ₂ compression stages (to 63 bar)		4	
Lifetime	years	30	
Amortization	years	15	
Interest rate	%	8	
Annual O&M as fraction of investment	%	4	[5,13]
Duty	h/year	7500	
Capital costs without CO ₂ capture	M\$	240	[16]
Column packing density	kg/m ³	202	Koch-Glitsch
Column packing cost	\$/kg	18.75	Koch-Glitsch
Cost of 1500 m ² heat exchanger	M\$	0.888	[15]
Sizing exponent for heat exchanger cost extrapolation		0.8	
Cost for CO ₂ capture balance of equipment	M\$	67	calculated
Sizing exponent for CO ₂ capture balance of equipment		0.65	
Cost of natural gas	\$/GJ	7.80	[17]
Cost of MEA	\$/kg	1.50	[5]
Cost of CO ₂ handling w/ leaks recapture	\$/ton	20.00	

4.2.3.1 CO₂ capture process model set-up

The optimization superstructure was built around the power plant base case and the CO₂ capture flow-sheeting model shown in Fig.4.1. It let the algorithm try options that may have turned out useless, including dual-pressure stripping, split-flow at the absorber and the stripper, absorbent partial pre-heating, steam production at very low pressure, partial flue gas by-pass around the absorber, *etc.* Split-flow could be disabled by setting the splitters to extreme fractions. Dual-pressure stripping could be disabled by setting both strippers to the same pressure and adding a stage to the final compressor, compressing to 63 bar in four stages in every case. Split-flow and multi-pressure stripping increase energy efficiency according to [9] and [6] respectively, but they seem to have never been tried simultaneously.

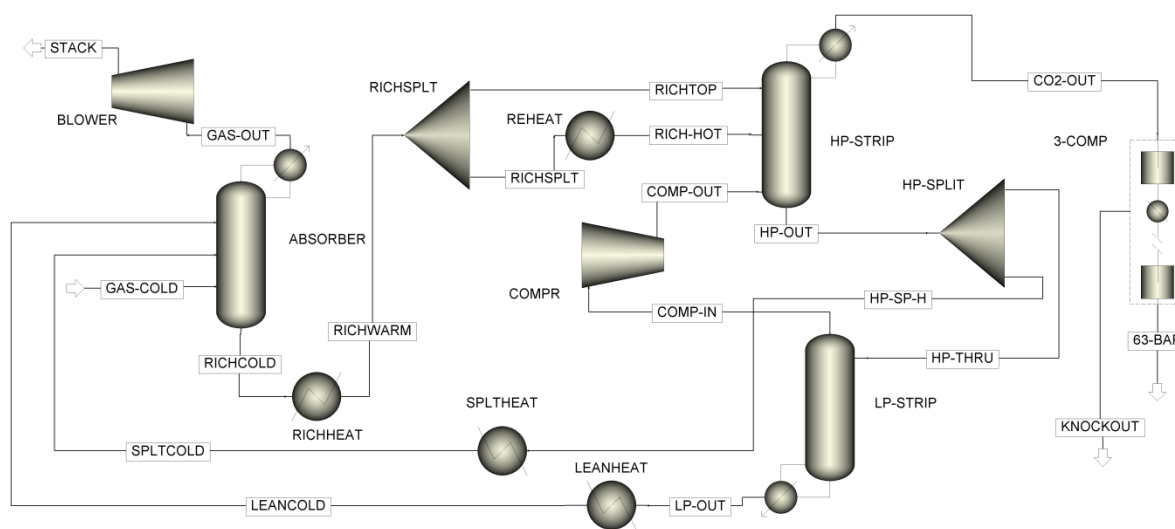


Figure 4.1 : Flow-sheeting model used to simulate multi-pressure, split-fraction CO₂ capture and extract information about heat and work requirements and the effective capture rate.

After it is captured, CO₂ must be dried, transported, re-compressed and geologically sequestered. Possible storage leaks require the recapture of an equivalent amount. These steps were priced in a fixed “CO₂ handling” cost. To limit the complexity of the simulation, the operating parameters of the gas cycle and the CO₂ handling equipment were put outside the decision space. Thus, the decision variables listed in Table 4-1 only cover the absorbent flow configuration, column dimensions and operation of the low-pressure part of the steam cycle.

Fig.4.2 depicts the flue gas recirculation introduced to reach stoichiometric combustion and maximize the partial pressure of the CO_2 before capture. It was assumed that recirculation did not affect gas turbine performance or cost (the direct contact cooler and blower are attributed to CO_2 capture). Flue gas could be partially vented into the atmosphere using the by-pass shown on Fig.4.2 and then enter the absorber with a known composition and saturated with water.

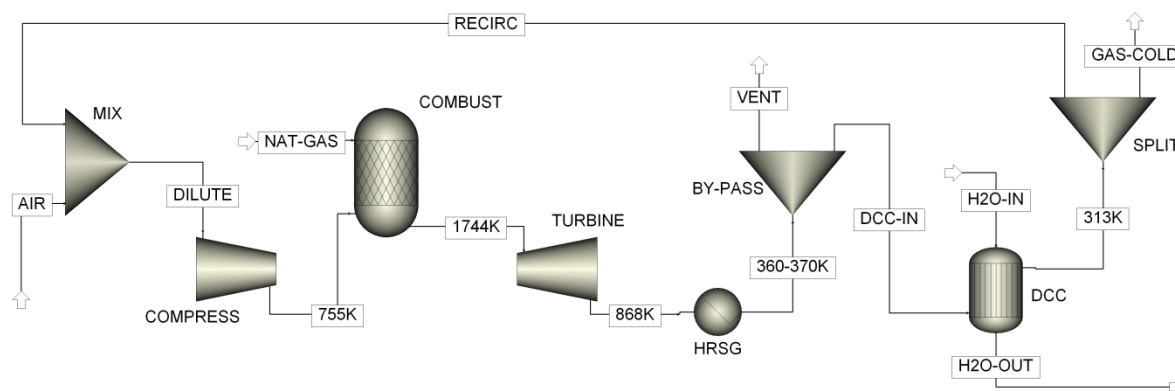


Figure 4.2 : Gas cycle showing by-pass, direct contact cooler (DCC), heat recovery steam generator (HRSG) and flue gas recirculation.

The flow-sheeting model (Fig.4.1) is based on a rate-based model of the columns, randomly packed with stainless steel cascade mini-rings. It was used to determine the CO_2 capture rate as a function of the absorber size and its operating conditions. The default software configuration was borrowed from the example file provided by AspenTech support [10]. The water balance was closed by varying the cold duty in the top (water-wash) stage of the absorber where no absorbent circulates. Having no internal heat exchangers, as seen on Fig.4.1, the model made it possible to characterize the hot and cold streams that were considered in the heat cascade model for process integration (Fig.4.3). Information extracted from the flow-sheeting model included all of the heat and power requirements.

In the process integration model, all steam pressures were fixed and all steam flows were optimized internally. However, from an overall optimization perspective, the LP steam extraction pressure was a decision variable. The VLP pressure was calculated as the saturation pressure at the temperature of the pre-heated rich absorbent, also a decision variable. The composite curve on Fig.4.3 shows the integration of the steam cycle with the combined heat cascade of the gas cycle and the CO_2 capture process streams when half of the rich absorbent was pre-heated to

389 K and half was pre-heated to 375 K, temperature at which VLP steam was produced (1.11 bar). Since the pre-heating temperature was a decision variable, the algorithm automatically determined the usefulness of VLP steam generation, just as it determined the amount of LP steam to extract for reboiler operation. Information extracted from the process integration model included the net steam turbine power output, an estimate of the number of heat exchangers and an estimate of the total heat exchanger area.

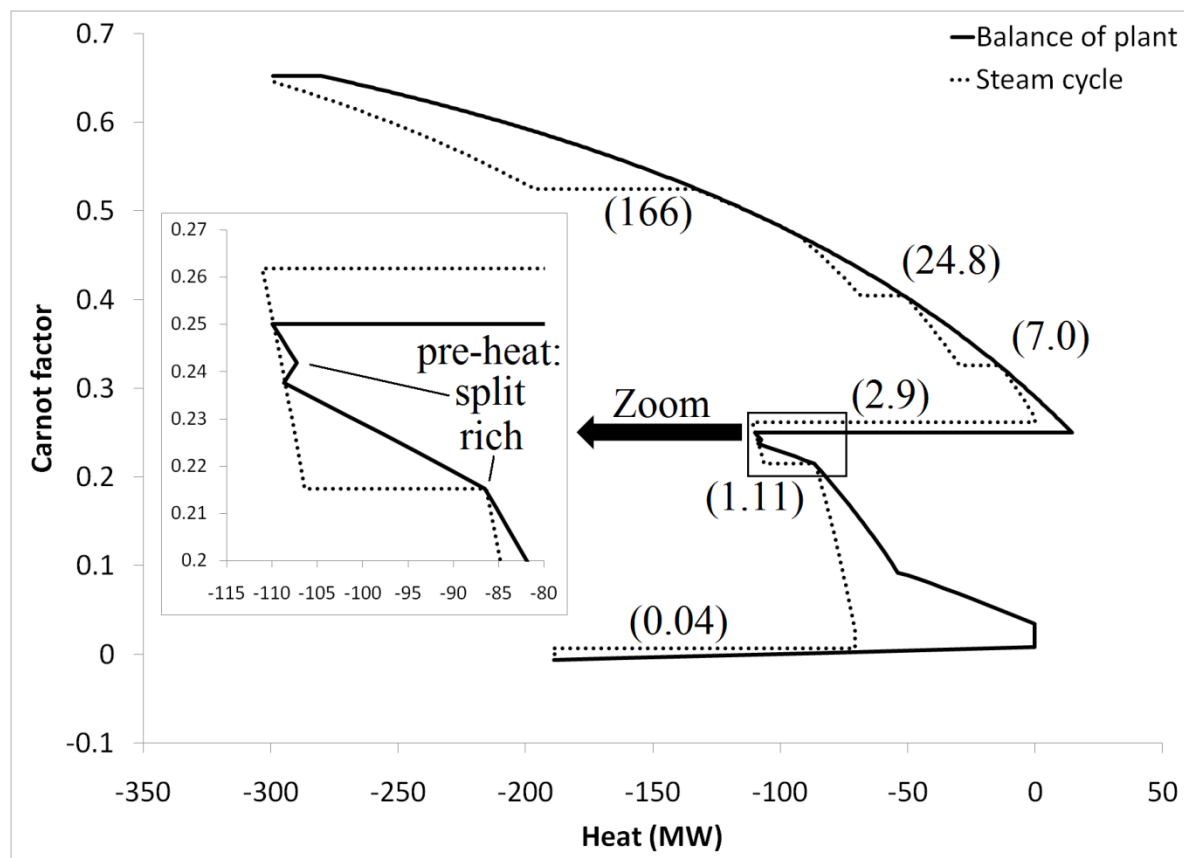


Figure 4.3 : Integrated Carnot composite curve for an NGCC power plant with CO₂ capture. (Steam pressures indicated in bar.)

4.2.3.2 Integrating the LCA of CO₂ capture

The LCA of an un-optimized NGCC power plant model with CO₂ capture using MEA was performed in a previous study carried out in partnership with GDF SUEZ. The study covered several elements of the life cycle of the power plant, including natural gas production as a mix from seven countries, power plant construction and operation, absorbents, water, CO₂ drying, recompression, sequestration and more. It accounted for infrastructure, transportation and

disposal whenever applicable. Secondary data was obtained from the *ecoinvent 1.2* database [11], and the *IMPACT2002+* method [12] was used for impact assessment, except that GWP was calculated on a 100-year basis.

These results were factored to assess the off-site emissions associated with each of the independent inputs and construction materials for the CO₂ capture process under study listed in Table 4-3: natural gas, carbon steel, stainless steel, MEA, cooling water and CO₂ handling. (Although CO₂ is an output, its handling is treated as an input.) This breakdown was necessary to calculate the environmental objective because the proportion of these inputs varied according to power plant efficiency and the effective capture rate.

Table 4-3 : Life cycle GWP intensity of NGCC power plant inputs

Input	GWP in LCA ²² kg CO _{2eq} /kg	Adapted GWP kg CO _{2eq} /kg	GWP in design b2 kg CO _{2eq} /MWh
Carbon steel	2.42	2.42	0.022
Stainless steel	6.69	6.69	0.085
Cooling water	8.46E-6	8.46E-6	0.45
MEA w/o decomposition	3.40	3.40	0.19
CO ₂ handling w/o leaks	0.0105	0.0105	3.76
Natural gas (per GJ)	12.15	10.205	67.45

In the case of natural gas, lower-cost off-site emission mitigation options were found. The CO₂ removed by sweetening operations was relatively pure and some of it could likely be sequestered at a low cost in a nearby depleted gas field. Here, the sequestration cost was conservatively estimated at \$15/ton, but could be as low as \$5/ton [13]. Country-specific data on the amount of

²² Clarifications: Les chiffres de cette colonne font le résumé des résultats de l'étude originale et contiennent donc à la fois des données primaires et secondaires. Cela est mieux détaillé aux sections 3.5.2 et 5.2.2.3. Les facteurs de caractérisation sont basés sur un horizon temporel de 100 ans car c'est ce qui avait originalement été demandé par le client. Le CO₂ est considéré comme un intrant dans la mesure où celui qui va s'occuper de le transporter est considéré comme un fournisseur, et non un client, par l'opérateur de la centrale. Cela n'affecte pas les résultats car le CO₂ n'est pas un coproduit : il n'est pas question de construire des centrales thermiques pour vendre du CO₂ à séquestrer, mais bien pour produire de l'électricité. Finalement, il convient de rappeler que le seuil entre les émissions « évitables » et « inévitables » correspond au coût d'évitement pour le procédé en cours d'optimisation.

available CO_2 was not found and was therefore roughly estimated at an average of $1.0 \text{ kg CO}_{2\text{eq}}/\text{GJ}$. Since CO_2 capture is more economical for large point sources, the capture of other off-site CO_2 emissions, such as those from compression stations, was assumed to be unviable given on-site capture costs.

Also, in the case of natural gas, some methane emissions were avoidable, as evidenced in [8] and [14] with similar conclusions for eleven producing countries. It was conservatively assumed that 30% of total of methane emissions could be avoided at an average cost of $\$10/\text{ton CO}_{2\text{eq}}$, consistent with the findings of [14].

Thus, after pre-analyzing the LCA results, the GWP of the natural gas input could be reduced from $12.15 \text{ kg CO}_{2\text{eq}}/\text{GJ}$ (of which 3.15 was methane) to $10.205 \text{ kg CO}_{2\text{eq}}/\text{GJ}$ at an additional cost of $\$0.02445/\text{GJ}$. The five other inputs listed in Table 4-3 each had only one possible GWP value, since research has found no mitigation options in their life cycles that are significant for the power plant overall.

To compute off-site emissions, the mass of stainless steel was calculated from the column packing total volume, while the mass of CO_2 to be handled was taken from the simulation results. The masses of carbon steel and of make-up MEA were obtained directly from the LCA results per unit of flue gas volume sent to the absorber. Life cycle GWP was calculated by adding these off-site emissions to the on-site emissions calculated by the flow-sheeting model.

The economic objective, COE, was based on the cost estimates described in Table 4-2. The heat exchanger cost was calculated based on the average size of a heat exchanger, which itself is based on the total heat exchange area in excess of the power plant base case, as calculated by the process integration model without any explicit heat exchange network. The abatement cost, C_{CO_2} , is calculated by comparing life cycle emissions with and without CO_2 capture, including off-site mitigation options.

4.2.4 Optimization results

The results of the multi-objective optimisation obtained after 20,000 evaluations are presented on the Pareto-optimal frontier shown on Fig.4.4. The difference between life cycle emissions and off-site emissions corresponds to the un-captured CO_2 , which is less than off-site emissions for capture rates above 80%.

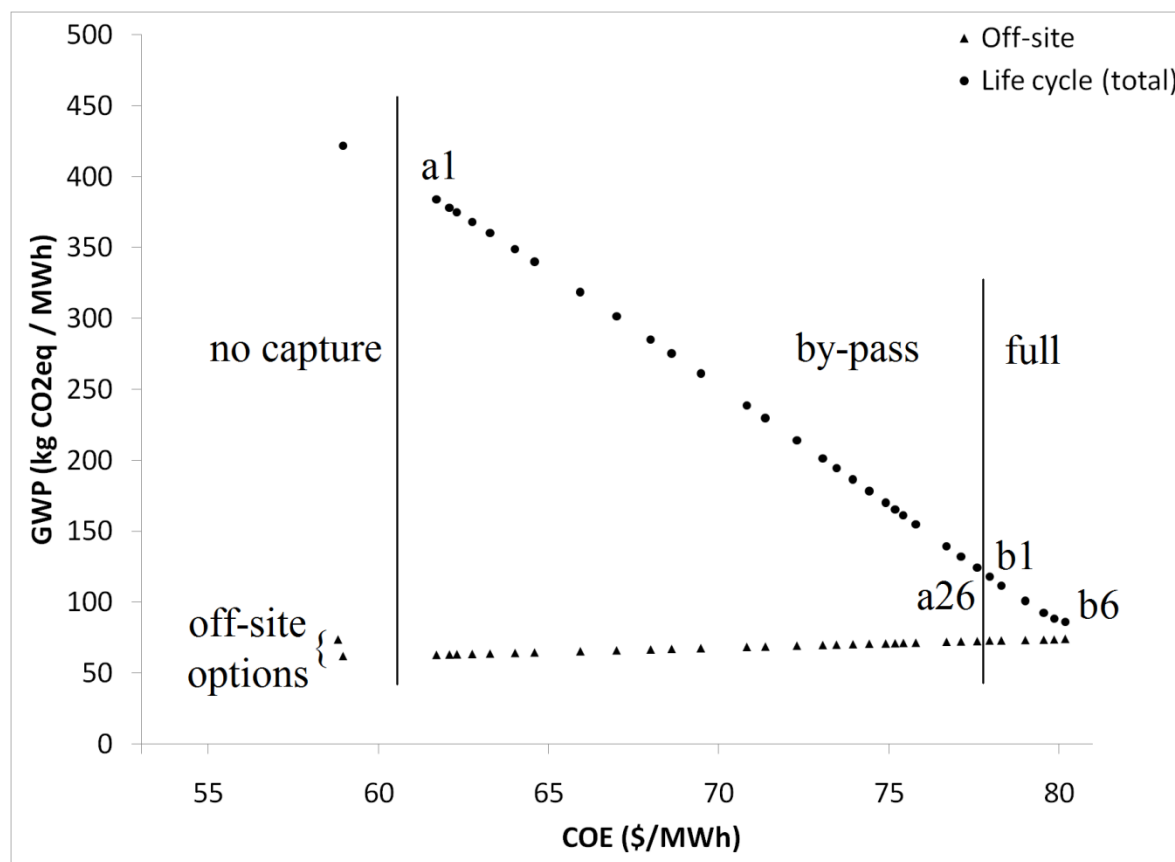


Figure 4.4 : Pareto-optimal frontier. (Life cycle GWP is the sum of on-site and off-site GWP.)

As seen in Table 4-1, the capture rate in zone *a* is strongly correlated with the by-pass fraction, and weakly correlated with the lean CO₂/MEA loading, temperature pinch, reheat temperature and absorber cross-sectional area²³. The internal capture rate is in the 87-91% range, even for overall capture rates as low as 11%. This indicates that relatively similar operating conditions are optimal over a wide range of capture rates and equipment sizes, giving a nearly constant internal capture rate. The curve is slightly concave because of the scale economies of a larger capture system.

In zone *b*, the system is constrained differently by the lack of additional flue gas to divert to the absorber, and the curve is convex. The capture rate increases from 87% to 97%, is strongly correlated with the absorber height and weakly correlated with the absorber cross-sectional area. The lean CO₂/MEA loading remains above 0.22 for all points except *b6*, at 0.201.

²³ Cette phrase aurait dû se limiter à l'affirmation suivante: "Between solutions *a1* and *a26* in Fig.4.4, there is no observable trend in any decision variable other than the by-pass fraction, as seen in Table 4-1."

Fig.4.5 shows C_{CO_2} plotted as a function of the capture rate. Design *b2*, with a capture rate of 90%, has the lowest C_{CO_2} , at \$62.43/ton. It corresponds to the inflexion point in Fig.4.4, and is described in the right column of Tables 4-1 and 4-3, in Table 4-4 and in Fig.4.3. It has a COE of \$78.24/MWh, compared to \$58.86/MWh without capture. These results differ from the previous study [1] because of higher natural gas and different investment cost estimates. Having the lowest C_{CO_2} , design *b2* is optimal in the reasonable case in which the process under study becomes the marginal GWP mitigation technology in a cap-and-trade system. Each of the other points may still be ideal under different circumstances (e.g. a mandated maximum emissions level). However, designs *a1* to *b1* cannot be ideal in any cap-and-trade or tax system because they fail to achieve the scale economies of the *b2* design.

Table 4-4 : Additional details on the *b2* and *b5* designs

Parameter	Unit	Design <i>b2</i>	Design <i>b5</i>
Effective capture rate	%	90.2	96.4
Net power	MW	363	360
LHV efficiency	%	54.5	54.0
Total investment	M\$	351	357
Rich absorbent CO ₂ loading	mol CO ₂ /mol MEA	0.465	0.461
Reboiler duty	GJ/ton CO ₂ captured	3.45	3.46
Cost of electricity (objective 1)	\$/MWh	78.31	79.85
Life cycle GWP (objective 2)	kg CO _{2eq} /MWh	111.9	88.4
Life cycle C_{CO_2}	\$/kg CO _{2eq}	62.43	62.67

Fig.4.5 also shows the contribution of the LCA results to the upwards adjustment of the estimated C_{CO_2} from \$60.30/ton to \$62.43/ton in the lowest case. This increase is essentially due to the additional CO₂ emitted in the CO₂ transport infrastructure building and operating processes (\$0.72/ton) and the off-site emissions related to the additional natural gas consumed per net electricity output (\$1.23/ton).

Finally, Fig.4.3 shows the structural exergy losses from heat transfers corresponding to the 9.97 MW area between the curves. This is 1.63 MW more than without CO₂ capture, neglecting the lean absorbent cooling, the absorber and stripper condensers and the CO₂ compressor intercoolers. Since few of these losses are located between the two lowest steam boilers (1.11 and

7.0 bar) on the temperature scale, the CO₂ stripper is adequately integrated with the steam cycle. Thus, it can be said that CO₂ capture takes heat at a temperature at which it would be efficiently used by the steam cycle and releases it at various temperatures, some of which cannot be efficiently used by the steam cycle. This structural exergy loss is inherent to the use of an aqueous absorbent.

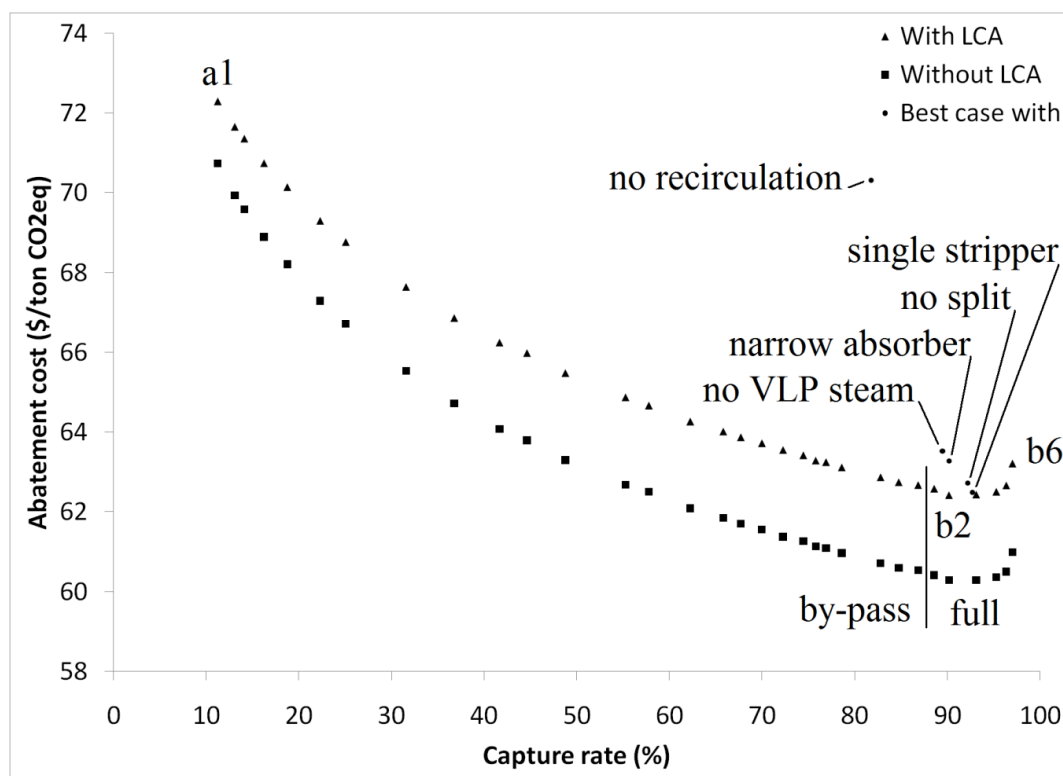


Figure 4.5 : C_{CO_2} as a function of the local capture rate is higher with LCA than without because CO₂ capture involves higher off-site emissions per MWh.

4.2.4.1 Notable features of the optimal configurations

Designs along the Pareto-optimal frontier systematically use an absorber with a cross-section that is at least three times the minimum required to avoid flooding²⁴. This indicates that the additional captured CO₂ and the reduced blower duty are worth the investment in additional column packing. All efficient designs use a lean absorbent loading between 0.22 and 0.25 mol CO₂/mol MEA with no split.

²⁴ Il y a deux effets séparés ici : d'une part, il vaut la peine d'augmenter le volume total pour augmenter le temps de résidence du gaz; d'autre part, à volume égal, il vaut mieux être large et bas pour faciliter le soufflage.

The Pareto-optimal designs all use a dual-pressure stripper with a rich absorbent split. They produce VLP steam at around 375K, the rich absorbent temperature before split. They each reach the maximum allowable absorbent temperature (for chemical stability) in both strippers. Reboiler duty (3.45 GJ/ton CO₂) is within the same range as the other results [5, 6], and the net power plant efficiency (54% with 90% capture compared to 60% without capture) is comparable to the best results in [1].

Fig.4.5 shows other sub-optimal designs that posted the lowest C_{CO_2} with specific technology options. The latter can then be ranked by decreasing cost-effectiveness, starting with flue gas recirculation, followed by VLP steam production, absorber widening, rich split and multi-pressure stripping. Some of these designs are more energy-intensive but less capital-intensive, so the ranking may be different when gas prices are lower, interest rates are higher and/or when the power plant duty is lower. For example, the best design using no VLP steam production used a lower rich split fraction, a lower LP stripper pressure, a higher internal capture rate and a higher temperature pinch for the absorbent, making it significantly less capital-intensive. Also, the VLP steam is sub-atmospheric in the case of single-pressure stripping but not in the case of double-pressure stripping. This could influence the steam cycle capital costs.

4.2.5 Discussion

4.2.5.1 High capture rates are more effective

The results show that the Pareto-optimal capture rate inside the absorber decreases from 91% to 88% as the overall capture rate increases from 11% to 88%. Low capture rates are achieved by opening the by-pass shown in Fig.4.2, which indicates that internal capture rates below 87% are always suboptimal when combining a large absorber cross-sectional area and a maximum flue gas recirculation in the gas turbine. Also, a comparison of Fig.4.5 points *b2* and *b5* shows that a 96% capture rate is far from prohibitive given that it can be achieved at a cost increment of less than \$0.25/ton CO₂ avoided.

The cost-effectiveness of high capture rates is related to the observation that the absorber top is not chemically pinched. (Otherwise the lean Pareto-optimal CO₂/MEA loading would not be the same for capture rates of 88 and 96%.) Consequently, there is no incentive to decrease the capture rate by increasing the absorbent lean loading – the latter is systematically limited

otherwise. For example, the heat exchanger costs could impose a limit on the absorbent flow and, in turn, lead to wide loading differentials. Consequently, although reboiler duty can be minimised with a lean loading of 0.25 or even 0.34 mol CO₂/mol MEA [6], the observed Pareto-optimal loading is only 0.22. The absorbent enters the absorber with a very low CO₂ equilibrium partial pressure, and the internal capture rate is limited only by absorber height costs.

4.2.5.2 Stripper configuration comparisons

The results show that strippers with different absorbent flow configurations, heat exchanger configurations, costs, energy efficiencies and internal capture rates may still post nearly the same overall economic and environmental life cycle performances. Thus, the definitive choice of a stripper configuration is unwarranted because it is sensitive to cost estimate variations and cannot be the same for every power plant. However, there is a solid theoretical case against stripper complexity, as discussed below²⁵.

²⁵ Cette discussion contenant plusieurs éléments contre-intuitifs pouvant porter à confusion, il convient d'ajouter quelques commentaires ici. La critique des auteurs précédents porte sur plusieurs éléments distincts :

- Le fait de déclarer un nombre trop faible de variables de décision, ce qui introduit des contraintes et peut faire apparaître des relations artificielles entre ces variables. Par exemple, la charge de l'absorbant en CO₂ peut apparaître artificiellement corrélée au taux de capture si on ne déclare pas un taux de by-pass comme variable de décision, ou elle peut apparaître artificiellement corrélée à l'efficacité énergétique si on ne déclare pas le pincement minimum des échangeurs comme variable de décision.
- Le fait d'utiliser une fonction-objectif qui ignore les coûts en capitaux, ce qui biaise les résultats en faveur de la complexité des équipements.
- Le fait d'utiliser une fonction-objectif qui ignore les gains possibles par l'intégration thermique, notamment par la production de vapeur pouvant être retournée à la turbine. Ainsi, une modification de procédé qui augmente de 1 MW la quantité de vapeur consommée à 3 bar, mais qui permet de générer 2 MW de vapeur à 1 bar et de diminuer de 1 MW des pertes de chaleur, sera jugée inefficace même si elle permet une plus grande production électrique.
- Plus généralement, le fait de focaliser l'analyse du système de capture de CO₂ là où la chaleur se consomme plutôt que sur les irréversibilités du cycle, ce qui est typique des méthodes qui intègrent mal la deuxième loi de la thermodynamique. L'efficacité maximale ne peut s'obtenir qu'en diminuant les irréversibilités et ce n'est pas dans le désorbeur que celles-ci se trouvent principalement.

Ce que les résultats de la présente simulation révèlent, c'est qu'il est davantage économique de retourner une partie de la chaleur de l'absorbant à la turbine à vapeur, plutôt que de la recycler dans le désorbeur. Comme indiqué à la

The simplest way to optimize the configuration of the stripper is to consider it in isolation, ignore capital costs, and minimize the reboiler duty. However, this simple optimization is biased in favour of excessive stripper complexity because capital costs increase with complexity and because minimizing reboiler duty decreases the amount of heat that can be *returned* to the steam cycle. Indeed, the simplest stripper requires less absorbent pre-heating and thus allows more VLP steam production. In fact, the optimal pre-heat temperature (around 375 K for a double-pressure stripper or 365 K for a single-pressure stripper) is obviously below the one that would minimize reboiler duty for a given minimum pinch. Consequently, a simple stripper with no VLP steam production is not a fair basis of comparison for complex strippers: a fact overlooked in the literature on stripper optimization [3,4,6,9]. Only complete optimization that includes the proper integration of the stripper and steam cycle is unbiased.

In essence, heat recovery is not a justifiable rationale for stripper complexity. The gas/liquid heat transfers within the simplest stripper with VLP steam production are already efficient in terms of avoiding large temperature differences and the crossing of steam cycle temperature pinches. In particular, compressing hot gases in the stripper while the steam turbine expands the equivalent is

section 3.2.1, cela est conforme à la logique des règles du pincement et évite une perte associée à la compression et l'expansion simultanées de vapeur aux mêmes pressions. Il n'est donc pas surprenant, sur la Fig.4.5, que l'optimum contraint par l'absence de valeur VLP ait une moins bonne performance que l'optimum contraint par l'absence de désorbeur multi-pressions.

Ainsi, il est généralement vrai que moins on préchauffe l'absorbant, plus il reste de chaleur à retourner au cycle vapeur. Évidemment, cela augmente aussi la chaleur consommée, mais pas nécessairement en quantité égale puisque l'arrivée d'absorbant plus froid dans le désorbeur en change complètement le profil de température et peut donc affecter la charge du condenseur situé à la tête du désorbeur. C'est donc à l'algorithme de juger et le verdict est clair sur la Fig.4.3 : au moins une partie de l'absorbant ne doit pas être préchauffé au-delà du point d'ébullition de la vapeur VLP, lui-même une variable de décision (indirectement via le choix de pression). Cette variable converge 18 K sous le point d'ébullition de l'absorbant pour un désorbeur à deux pressions, et 28 K sous le point d'ébullition de l'absorbant pour un désorbeur à une seule pression. (Par ailleurs, si cette règle se maintient pour d'autres absorbants, on pourrait conclure que la température de dégradation de l'absorbant idéal serait d'au moins 28 K au dessus du point d'ébullition de la vapeur LP, puisque cela permettrait de bénéficier de la simplicité d'un désorbeur à une seule pression tout en produisant de la vapeur LP à la pression habituelle.)

thermodynamically counterproductive, as discovered experimentally in [6]. It is equivalent to inserting a heat pump in a system that does not require one. Stripper complexity is more justifiable when it significantly decreases the average chemical driving force.

Finally, there is no guarantee that VLP steam production itself is necessary, even if it is more cost-effective than most other technology options. The results show that with VLP steam production, double-pressure stripping is not significantly more cost-effective than single-pressure stripping but that a double-pressure stripper is marginally more cost-effective with VLP steam production than without. This indicates that no less than three stripping pressures are required to potentially avoid VLP steam production. However, to determine the cost-effectiveness of triple-pressure stripping, a new flow-sheeting model would be required along with an explicit heat exchanger network and a detailed equipment cost models to account for adding a stripping vessel and a compressor, the removal of a VLP boiler and superheater. Again, a resolute conclusion would be unwarranted at this process design refinement level and could still vary from one power plant to another.

4.2.5.3 Error analysis

Uncertainties in the results include errors in the flow-sheeting model, the incomplete convergence of the evolutionary algorithm, and cost estimate uncertainties.

The flow-sheeting model is based on the *ASPEN* technical support example file “Solution 122271”. The validity of the results depends on the quality of the thermodynamic models and of the unit operation models used within the example file. These models are pre-validated with one set of experimental data and were also cross-checked with data from Dow’s GAS/SPEC FT-1 technology provided by [19], with excellent concurrence. They were used strictly within their specified validity range.

The evolutionary algorithm does not formally converge. However, observation of the evolution of the Pareto-optimal frontier after more than 20,000 iterations indicates that the probability of a major improvement within the chosen decision space is remarkably small.

Cost estimates are always uncertain and can always be more detailed but for the purpose of this project, the economic model is in keeping with the state-of-the-art standards [15] used in the conceptual design stage of conventional chemical and power plant design.

4.2.6 Conclusion

The combined use of LCA data and a process model has been shown to solve the problem of a NGCC power plant design with CO₂ capture using MEA absorption. CO₂ capture performance has been optimized with respect to 1) CO₂ absorbent flow configuration, 2) equipment sizing and 3) its thermal integration with the steam cycle. The heat cascade optimization model revealed itself to be very useful to model the combined heat and power integration of the steam cycle in such a complex system. The Pareto curve effectively illustrates the trade-off between the life cycle global warming potential and the levelized cost of electricity. Plotting life cycle emissions (rather than local emissions) better represents the compromise between the economic and environmental objectives. A major benefit of the multi-objective framework is that no arbitrary weight is given to the objectives or any particular environmental impact categories.

The optimization results show that the optimal internal configuration of the CO₂ capture system is practically independent of the capture rate. Using monoethanolamine and flue gas recirculation, the abatement cost C_{CO_2} is minimized with a capture rate of at least 90%. Low capture rates are achieved by opening up the by-pass shown in Fig.4.2, which indicates that it is unprofitable to instead increase the lean absorbent loading. The key to efficient absorber operation was shown to be the excess width, while the key to efficient stripper operation was its integration with the steam cycle.

The results show that the optimal stripper configuration cannot be determined until the final stages of the process design process and will *not* minimize reboiler duty. It is likely to be site-specific, requiring an explicit heat exchanger network and precise models of stripper and heat exchanger investment costs. In particular, complex stripper configurations such as split-flow and multi-pressure are less attractive when very low pressure steam is recovered by heat exchange and expanded in the condensing turbine.

These new results confirm the interest of the process integration approach based on an implicit heat exchanger network combined with a flow-sheeting superstructure allowing the comparison of attractive power plant options with different flow configurations. This combination leads to the exploration of a large decision space and satisfactory results refinement with a limited cost estimation effort.

Part of the originality of the approach is the use of a software platform that easily handles a large number of decision variables. As it turns out, simultaneously optimizing the absorber diameter, VLP steam production and by-pass fraction was essential to the key findings of this study. Yet these variables cannot be optimized simultaneously with a limited approach. The main value of the approach is therefore that it simplifies the human effort needed to add decision variables, think system-wide and imagine new process integration options. It also removes the biases of simpler optimization approaches, such as the bias towards stripper complexity.

In the future, this method could be used to optimize CO₂ capture systems using other absorbents and determine optimal capture rates for each absorbent. It would then be critically important to simultaneously optimize design and operational parameters.

To obtain results, LCA data was useful for the initial screening of specific off-site emission sources within the life cycle and the determination of mitigation options. Since these options have a lower abatement cost than CO₂ capture on-site (less than \$15/ton versus over \$60/ton), they cannot be neglected as part of the global optimum. They have a high chance to be implemented before on-site actions become economic. This is overlooked by optimization methodologies that lack a life cycle perspective, the interest of the holistic approach being to define the break-even point between off-site and on-site measures.

The on-site abatement cost calculated using LCA is significantly higher by \$2.13/ton CO_{2eq} than the one predicted otherwise. This readjustment is not merely theoretical; it potentially represents a better estimate of the inflationary effects of measures such as a carbon tax on future process costs whenever off-site emitters are subject to the same measures. This difference shows how existing LCA data can help the industry to avoid cost overruns and predict long-term emission permit pricing and help governments project the effects of new policies.

4.2.7 Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the financial support of the industrial partners of the International Chair for Life Cycle Assessment (a research unit of the CIRAIG) and especially GDF SUEZ for the permission to use the LCA results. This research was also supported by a Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) Graduate Scholarship and the Fonds québécois de la recherche sur la nature et les technologies (FQRNT).

4.2.8 References

- [1] Li H, Marechal F, Burer M, Favrat D. Multi-objective optimization of an advanced combined cycle power plant including CO₂ separation options. *Energy* 2006;31:3117–3134.
- [2] ISO 14040. Environmental management Life cycle assessment Principles and framework. Geneva, Switzerland: International Standard International Standards Organisation, 1997.
- [3] Oyenekan BA, Rochelle GT. Alternative stripper configurations for CO₂ capture by aqueous amines. *AIChE Journal* 2007;53(12):3144-3154.
- [4] Oyenekan BA, Rochelle GT. Energy performance of stripper configurations for CO₂ capture by aqueous amines. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 2006; 45(8):2457-2464.
- [5] Abu-Zahra MRM, Niederer JPM, Feron PHM, Versteeg GF. CO₂ capture from power plants. Part II. A parametric study of the economical performance based on mono-ethanolamine. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 2007;1(2):135-142.
- [6] Jassim MS, Rochelle GT. Innovative Absorber/Stripper Configurations for CO₂ Capture by Aqueous Monoethanolamine. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2006;45:2465-2472.
- [7] Bolliger R, Favrat D, Marechal F. Advanced Power Plant Design Methodology using Process Integration and Multi-Objective Thermo-Economic Optimisation. In: *Proceedings of ECOS 2005, Trondheim, Norway, 2005.* p.777-784.
- [8] US EPA. Report on U.S. Methane Emissions 1990-2020: Inventories, Projections, and Opportunities for Reductions, report no. 430-R-99-013. Washington, DC: Environmental Protection Agency, 1999.
- [9] Aroonwilas A, Veawab A. Integration of CO₂ capture unit using single- and blended- amines into supercritical coal-fired power plants: Implications for emission and energy management International. *Journal of Greenhouse Gas Control.* 2007;1:143-150.
- [10] AspenTech Support Center. New feature to Aspen Plus 2006.5: Rate-Base Model of the CO₂ Capture Process by MEA Using Aspen Plus, Solution ID 122271. Burlington, MA: Aspen Technology, 2008. See also: <http://support.aspentech.com/>

- [11] Frischknecht R, Jungbluth N, Althaus HJ, Doka G, Dones R, Heck T, Hellweg S, Hischer R, Nemecek T, Rebitzer G, Spielmann M. The ecoinvent Database: Overview and Methodological Framework. *International Journal of Life Cycle Assessment*. 2005;10:3-9.
- [12] Jolliet O, Margni M, Charles R, Humbert S, Payet J, Rebitzer G, Rosenbaum R. IMPACT 2002+: A New Life Cycle Impact Assessment Methodology. *International Journal of Life Cycle Assessment*. 2003;8:324-330.
- [13] Simbolotti G. CO₂ Capture & Storage. IEA Energy Technology Essentials. Paris: International Energy Agency 2006;4. Fact Sheet ETE01. See also: <http://www.iea.org/Textbase/techno/essentials.htm>
- [14] Robinson DR, Fernandez R, Kantamaneni RK. Methane Emissions Mitigation Options in the Global Oil and Natural Gas Industries 3rd International Methane & Nitrous Oxide Mitigation Conference. Beijing, China, Coal Information Institute, 2003. p. 11.
- [15] Turton R. Analysis, synthesis, and design of chemical processes. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2003.
- [16] Fraser P, Stridbaeck U, Bertel, E. Projected Costs of Generating Electricity. Paris: International Energy Agency 2005;230.
- [17] Adams D, Davison J. Capturing CO₂. Cheltenham, UK: IEA Greenhouse Gas R&D, 2007. Programme:17.
- [18] Abu-Zahra MRM, Schneiders LHJ, Niederer JPM, Feron PHM, Versteeg GF. CO₂ capture from power plants. Part I. A parametric study of the technical performance based on monoethanolamine. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 2007;1(1):37-46.
- [19] SRI International. Carbon Dioxide Recovery from Gas Power Plant Flue Gas with Monoethanolamine. Process Economics Program Report 180: Carbon Dioxide Separation. SRI Consulting, 1987. p. 93-99.
- [20] Smith RW, Polukort P, Maslak CE, Jones CM, Gardiner BD. Advanced Technology Combined Cycles, report no. GER-3936A. Schenectady: GE Power Systems 2001.
- [21] US DOE. Market-Based Advanced Coal Power Systems, report no. DOE/FE-0400. Washington, DC: Office of Fossil Energy, 1999.

4.3 Résultats complémentaires

Cette section présente des résultats sur la configuration technique du système de capture de CO₂ dans une centrale NGCC. Ces résultats ont été obtenus avec les mêmes outils de simulation, mais après la publication de l'article de la section 4.2. (Voir Fig.2.1 pour les étapes du projet.)

4.3.1 Variation du taux de recirculation dans la turbine à gaz

Le taux de recirculation des fumées dans la turbine à gaz affecte le volume de la fumée entrant dans l'absorbeur, ainsi que sa pression partielle en CO₂. Cela affecte le diamètre requis, le taux de capture, la teneur en CO₂ de l'absorbant riche, et donc la performance énergétique du système de capture. De plus, le remplacement partiel de l'oxygène diatomique par le CO₂ triatomique, à l'intérieur du cycle gaz, affecte légèrement la puissance et la température de sortie de la turbine à gaz. Ainsi, tant que le taux de recirculation est fixe, on peut toujours modéliser le cycle gaz comme une boîte noire avec une performance réaliste mais arbitraire, mais dès qu'on veut varier le taux de recirculation, il faut un modèle détaillé du compresseur et de la turbine à gaz.

Un tel modèle a été réalisé au Laboratoire d'énergétique industrielle par Luc Girardin à l'aide du logiciel *Belsim Vali*. Les résultats obtenus pour 29 différents taux de recirculation sont contenus dans le fichier « Luc.xls ». Ceux-ci démontrent que, pour une géométrie donnée et avec une température contrainte à l'entrée de la turbine, la recirculation augmente la densité de puissance et la température de sortie de la turbine à gaz. Cela permet ensuite un gain considérable de puissance dans la turbine à vapeur. En termes de rendement thermodynamique (première loi), on observe alors une baisse pour le cycle gaz, une hausse pour le cycle vapeur, et au net une légère baisse pour le cycle combiné. Ces résultats supposent la combustion complète, une hypothèse moins réaliste pour les taux élevés de recirculation et potentiellement problématique pour la performance environnementale si cela résulte en émissions supplémentaires de méthane.

La performance de la capture de CO₂ a été simulée avec *OSMOSE* pour 4 des 29 taux de recirculation, soit 0 %, 46 %, 66 % et 68 % (stœchiométrique), ce qui implique le passage du même air dans la turbine 1 fois, 1,86 fois (~2), 2,92 fois (~3) et 3,14 fois respectivement, en moyenne. Pour réaliser ces simulations, les données de Girardin (notamment la puissance nette du cycle gaz) ont été normalisées pour un débit net de CO₂ de 144000 kg/h, avant de les importer dans le modèle de centrale NGCC, basé sur *EASY* et *ASPEN Plus*, décrit au chapitre 3

(diagramme d'écoulement de la Fig.3.2). De plus, les hypothèses suivantes ont été introduites afin de limiter le nombre de variables de décision requises, pour accélérer la convergence de l'optimisation, tout en optimisant chaque scénario sous un jeu de contraintes équitables :

- La température de surchauffe et de resurchauffe de la vapeur est toujours 30 K sous la température de la fumée à la sortie de la turbine à gaz ;
- Aucun autre paramètre du cycle vapeur n'est affecté, en particulier les pressions ;
- La température de la fumée re-circulée est de 313 K même si le modèle sous *Belsim Vali* utilise 293 K ;
- Le diamètre de l'absorbeur peut varier entre deux bornes déterminées par le volume de gaz y entrant ;
- La totalité de la fumée passe dans l'absorbeur (« Init_frac » = 1) ;
- L'investissement requis dans le cycle gaz est invariant, malgré la normalisation et la complexité variable de la chambre de combustion ;
- Le coût du refroidisseur ne change pas, vu qu'il faut refroidir toute la fumée de toute façon, qu'elle soit dirigée vers l'absorbeur ou vers la recirculation.

Les calculs de normalisation se trouvent sous l'onglet « Calculs » du fichier « Luc.xls », alors que les résultats des simulations sont regroupés sous l'onglet « Figure_Luc » du fichier « Figures_chap_5.xlsx ». L'ensemble des courbes Pareto-optimales est donné à la Fig.4.6.

Sur la Fig.4.6, on ne remarque aucune intersection des courbes. Ainsi, peu importe le taux de capture, un taux de recirculation élevé est toujours Pareto-optimal devant un taux de recirculation plus faible. Cela indique que le gain d'efficacité énergétique au niveau du cycle de capture, ainsi que l'économie d'investissement avec un absorbeur de diamètre plus petit, compense largement la perte d'efficacité énergétique au niveau du cycle gaz, tant sur le plan économique qu'environnemental (sauf émissions de méthane, le cas échéant). L'inverse ne pourrait être vrai que dans une situation où la capture de CO₂ ne s'effectue que sur une petite fraction de la fumée, situation peu intéressante au départ, vu le manque d'économies d'échelle. On peut donc conclure que *la recirculation maximale est toujours avantageuse*, dans la limite où on peut faire la conception d'une chambre de combustion approchant la combustion complète, à coût raisonnable.

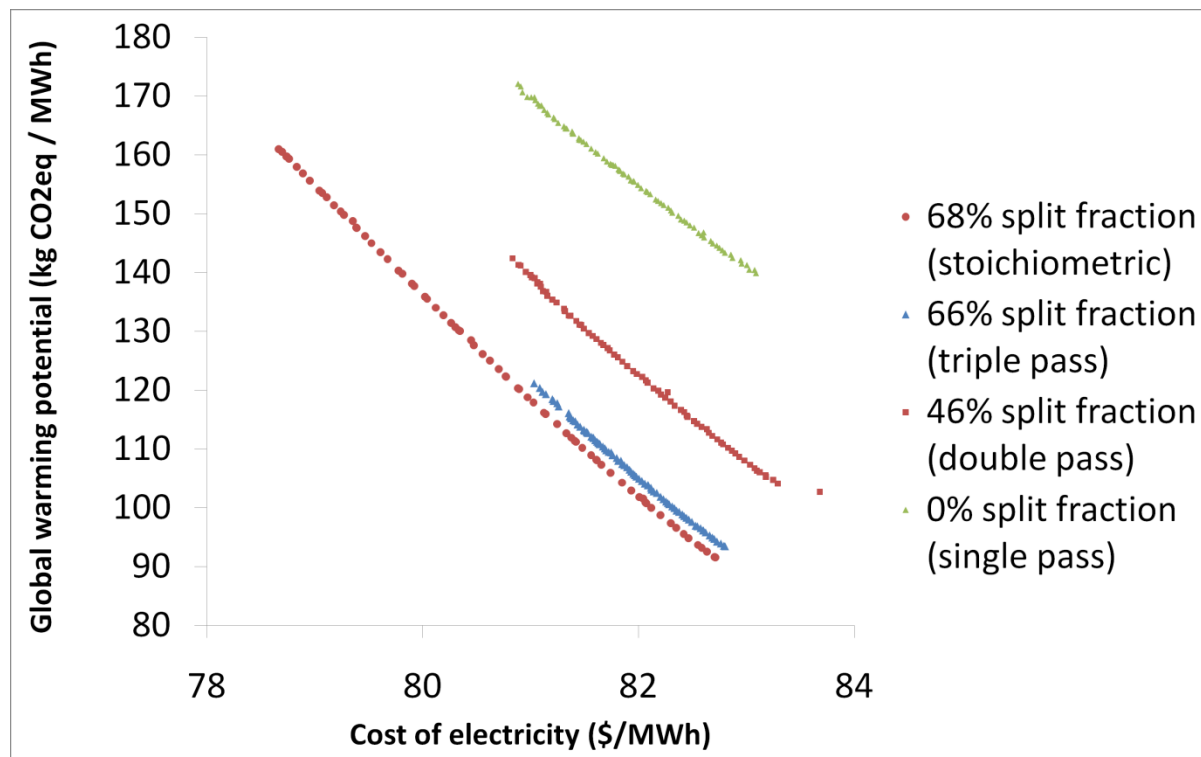


Figure 4.6 : Courbes Pareto-optimales avec ACV pour quatre scénarios de recirculation

Finalement, on remarque aussi sur la Fig.4.6 qu'un passage de la fraction divisée de 0 % à 50 % correspond à un gain substantiel. L'utilisation de deux cycles gaz en tandem et sans recirculation (la fumée refroidie du premier cycle passe à l'entrée du deuxième compresseur) permettrait donc une conception simplifiée avec une performance intéressante, vu qu'on atteindrait la même pression partielle de CO_2 . L'utilisation de trois cycles en tandem serait encore plus avantageuse, puisqu'on atteindrait une performance équivalente à une recirculation de 66%, à condition qu'il demeure possible d'effectuer une combustion complète dans les conditions très appauvries en oxygène du troisième cycle (7,6 % O_2 avant combustion et 0,9 % O_2 après).

4.3.2 Réseau explicite d'échangeurs de chaleur

Comme mentionné à plusieurs endroits dans le chapitre 3, une étape importante du passage d'un design conceptuel à un design définitif, pour un système thermique complexe comme une centrale NGCC, est la conception d'un réseau explicite d'échangeurs de chaleur. La Fig.3.3, à droite, illustre un exemple de réseau d'échangeurs de chaleur pour une centrale NGCC sans capture de CO_2 . L'expansion d'un tel réseau à la capture de CO_2 est une tâche complexe car,

selon *EASY*, il pourrait y avoir jusqu'à 45 échangeurs à concevoir. En plus de respecter au maximum les règles du pincement, le réseau doit aussi respecter des contraintes pratiques, notamment la proximité spatiale des flux de grand volume. Il serait donc impossible de réaliser cette conception en l'espace de quelques pages seulement.

Toutefois, l'observation de la courbe composite de la Fig.4.3 permet de faire quelques observations à propos des échangeurs et de leur emplacement :

- Le plus gros échangeur sera entre l'absorbant riche et l'absorbant pauvre, situé entre l'absorbeur et le désorbeur, comme il est habituel pour ce type de système de capture ;
- S'il y a production de vapeur très basse pression, il faudra un échangeur entre l'absorbant pauvre et l'eau bouillante, à proximité du rebouilleur, en amont de l'échangeur principal ;
- S'il y a division de l'absorbant riche, l'échangeur principal sera aussi divisé en deux ;
- Pour produire le reste de la vapeur très basse pression, il pourrait être intéressant de détendre le condensat du rebouilleur, ce qui éviterait plusieurs allers-retours de fluide caloporteur entre deux sites éloignés (le rebouilleur d'absorbant, près de la colonne de désorption, et le générateur de vapeur principal, près de la turbine à gaz) ;
- Surchauffer la vapeur très basse pression et désurchauffer la vapeur basse pression avec le même échangeur permettrait également de réduire la distance de trajet de ces deux écoulements particulièrement volumineux et sensibles aux pertes de charge.

La Fig.4.7 donne un exemple de désorbeur intégré à cinq principaux échangeurs de chaleur.

Sur la Fig.4.7, l'absorbant riche (RICHE-1) est préchauffé (ECH1), divisé (SPLIT) et réchauffé (ECH2) avant d'entrer dans le désorbeur (DESORB) à deux températures différentes. Les autres principaux échangeurs sont le rebouilleur (REBOUILL), la chaudière très basse pression (BOUILL), et le surchauffeur/désurchauffeur (SURCH). Ainsi la vapeur basse pression surchauffée (LP-SUP), qui sort de la turbine moyenne pression, est désurchauffée (LP-SAT), condensée, détendue à très basse pression (DETEND), partiellement re-vaporisée (VLP-SAT) et resurchauffée (VLP-SUP), permettant ultimement d'alimenter la turbine très basse pression, accompagnée d'un condensat à la même pression (EAU). Il ne reste qu'à refroidir l'absorbant pauvre (PAUVRE-1) et le condenseur du désorbeur (non illustré).

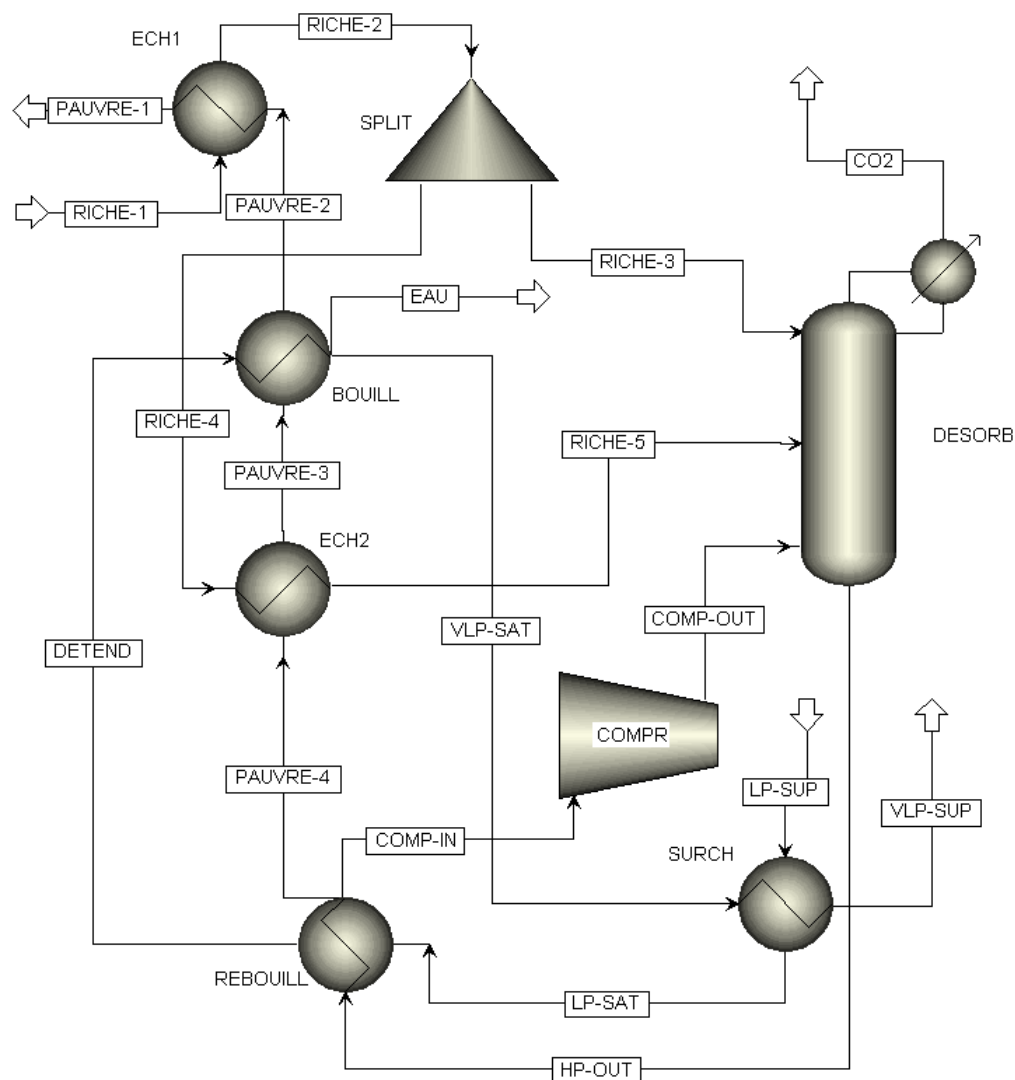


Figure 4.7 : Réseau explicite d'échangeurs de chaleur, pour un désorbeur à deux pressions avec division de l'absorbant riche

La modélisation du coût individuel des échangeurs de la Fig.4.7 devrait être considérée comme prioritaire avant la prochaine ronde d'optimisation pour deux raisons. Premièrement, en étant les plus gros, et en faisant intervenir des fluides très différents, ces échangeurs sont probablement ceux qui dévient le plus de l'approximation du coût moyen des échangeurs par le coût de l'échangeur moyen. Deuxièmement, ces échangeurs sont probablement ceux dont la taille est la plus affectée par les variables de décision reliées au système de capture de CO_2 , contrairement aux échangeurs à plus haute ou plus basse température dans le réseau. Une modélisation individuelle permettrait alors un gain substantiel de précision dans l'évaluation de l'objectif

économique, en fonction des variables de décision les plus pertinentes. Il serait donc envisageable, pour une deuxième ronde d'optimisation avec un modèle plus détaillé, de modéliser ces échangeurs sous *ASPEN Plus*, avec un calcul individuel de leur coût, alors que le reste des échangeurs plus petits serait modélisé sous *EASY*.

En conclusion, bien que la Fig.4.7 soit spéculative et ne résulte pas d'une étude systématique des échangeurs de chaleur requis, elle permet d'explicitier une bonne partie des échanges de chaleur en toute compatibilité avec les résultats de la Fig.4.3. Avec *OSMOSE* et un modèle détaillé du coût de chaque équipement, il serait possible d'utiliser le modèle de la Fig.4.7 pour optimiser le dimensionnement et les conditions d'opération de chaque équipement. Cela déterminerait définitivement l'utilité de la désorption multi-pressions, de la division de l'absorbant riche et de la production de vapeur très basse pression. Une telle détermination n'est pas possible avec un réseau implicite d'échangeurs de chaleur car l'approximation du coût moyen des échangeurs par le coût de l'échangeur moyen introduit trop d'incertitude dans le calcul de l'objectif économique. À ce niveau de détails, un modèle du coût individuel de chaque colonne devient également nécessaire pour bien gérer les incertitudes (Schach, Schneider, Schramm, & Repke, 2010).

4.3.3 Conception pour la capture intermittente de CO₂

Même si toutes les simulations présentées dans cette thèse sont basées sur un modèle en régime permanent fonctionnant à plein régime 7500 heures par année, le fonctionnement réel d'une centrale thermique implique des régimes transitoires et de charge partielle. En plus d'augmenter le coût d'investissement de près de 50 %, difficilement amortissable à charge partielle sauf pour une taxe sur le CO₂ nettement supérieure à 60 \$/tonne donc difficile à envisager, la capture de CO₂ ajoute un degré de complexité faisant en sorte qu'il soit sans doute préférable d'opérer ce type de centrale à charge élevée et stable. On évitera aussi la capture intermittente, pour éviter que le volume de vapeur basse pression à turbiner passe environ du simple au double²⁶ lorsqu'on arrête la capture de CO₂. En effet, il est impossible d'utiliser la même turbine à vapeur, à vitesse

²⁶ Par exemple, le modèle sans capture optimisé avec *EASY* (Fig.3.3 à gauche) produit 39,5 t/h de vapeur à 3,2 bar, en plus des 286,5 t/h provenant de la turbine moyenne pression. Pour le système de capture de CO₂ optimal présenté dans l'article, seulement 151,6 t/h de vapeur à 2.92 bar se rendent à la turbine basse pression, soit 46 % de la quantité précédente, près de la moitié.

de rotation fixe, pour utiliser efficacement un volume aussi variable de vapeur. Il faudrait investir considérablement pour une turbine, un alternateur et un condenseur auxiliaires dont le temps de démarrage élevé les empêcherait de participer à la réserve tournante²⁷.

Par contre, il peut être quand même intéressant de construire une centrale NGCC qui capture le CO₂ en période hors-pointe, mais cesse de capturer le CO₂ en période de pointe. Dans ce cas-ci, cela permettrait la production électrique de 40 MW supplémentaires, qui n'auraient plus à être fournis par des centrales dédiées à la pointe, moins efficaces et donc davantage polluantes, tout en permettant au système de capture de fonctionner assez longtemps pour être rentable. De plus, si la capture peut être désactivée rapidement, c'est autant de puissance ajoutée à la réserve tournante. C'est ce que rend possible la conception produisant de la vapeur très basse pression.

En effet, le système de capture de CO₂ tel que proposé dans l'article et à la Fig.4.7 produit une vapeur de volume semblable à celle qu'elle consomme, lorsque l'absorbant riche n'est pas divisé. Il devrait alors être possible, sans trop s'éloigner du point optimal d'opération, d'ajuster la pression du rebouilleur et le degré de surchauffe de la vapeur très basse pression de façon à ce que le volume de la vapeur produite soit identique à celui de la vapeur consommée. De plus, ce volume étant environ la moitié du volume total de vapeur basse pression, il devrait aussi être possible d'utiliser deux unités NGCC en parallèle (ou en tandem, voir la section 4.3.1) de façon à ce que la capture du CO₂ des deux unités utilise la totalité de la vapeur d'une seule d'entre elles. Cela est illustré à la Fig.4.8, qui montre le diagramme modifié de deux unités NGCC de General Electric avec turbines axiales. La boîte « capture » représente la Fig.4.7 du point de vue de la vapeur. L'unité du bas peut fonctionner à charge partielle au besoin, ajoutant un degré de liberté à l'optimisation, et donc une contrainte de moins au choix de la pression du rebouilleur.

Sur la Fig.4.8, la turbine LP opère avec un ratio de pressions près de 80, alors que la turbine VLP opère avec un volume de vapeur identique, mais un ratio de pressions entre 20 et 30. On peut supposer que la turbine VLP peut accepter de la vapeur LP avec un rendement correct même s'il lui faudrait 2-3 étages de plus idéalement, vu que le changement de ratio de pression par étage

²⁷ La réserve tournante représente la puissance instantanément en réserve sur un réseau électrique. Celle-ci doit toujours correspondre au moins à la plus grosse centrale sur le réseau, au cas où elle s'arrêterait brusquement. La réserve tournante peut engendrer des pertes importantes d'énergie, selon le type de centrale qui la supporte, mais pas dans ce cas-ci.

reste minime. Il devient alors possible d'arrêter la capture de CO_2 sans délai en ouvrant la soupape noire sur la Fig.4.8, ce qui libère la vapeur LP dans la turbine VLP. Comme l'effet dans la turbine est instantané, la puissance correspondante peut être incluse dans la réserve tournante.

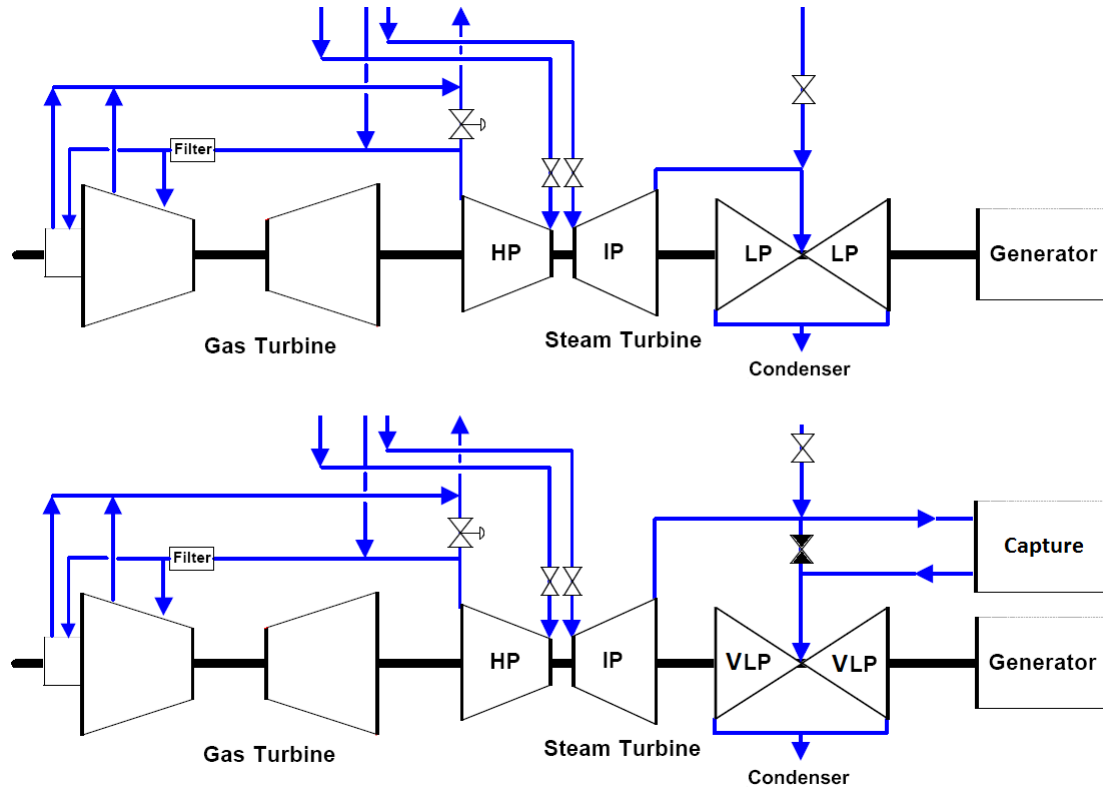


Figure 4.8 : Système NGCC d'environ 700 MW avec capture de CO_2 , pouvant passer à 800 MW en interrompant momentanément la capture, adapté de (Smith, Polukort, Maslak, Jones, & Gardiner, 2001)

En conclusion, les Fig.4.7 et 4.8 montrent que la production de vapeur très basse pression (VLP), en plus d'être avantageuse selon les conclusions de la section 4.2, s'intègre harmonieusement dans la conception pratique d'une centrale NGCC. Le seul inconvénient de la vapeur VLP est sa très faible densité. Cela peut éventuellement être remédié par l'utilisation d'un absorbant ayant une température de dégradation plus élevée, ce qui permettrait à la vapeur LP de prendre le rôle de la vapeur VLP, et à une vapeur intermédiaire (5 à 10 bar) de prendre le rôle de la vapeur LP. En dernier recours, une autre façon d'augmenter la densité de la vapeur VLP est d'utiliser un fluide de travail ayant une tension de vapeur plus élevée que l'eau.

CHAPITRE 5. ÉMISSIONS OPTIMALES DE GAZ À EFFET DE SERRE DANS LES CENTRALES NGCC EN INTÉGRANT L'ANALYSE DU CYCLE DE VIE (RÉSULTATS ÉCONOMIQUES)

Ce chapitre contient le deuxième article soumis avec cette thèse. Il a été publié dans la revue *Energy*. Il a été soumis le 3 avril 2011, resoumis le 19 septembre 2011, accepté le 23 octobre 2011 et mis en ligne le 22 novembre 2011. Quelques résultats complémentaires suivent l'article. La référence complète est donnée dans l'annexe 2.2. La politique des droits d'auteur d'*Elsevier* (elsevier.com/copyright) autorise la transcription intégrale de l'article dans cette thèse.

5.1 Présentation de l'article

L'article fait suite au précédent et s'adresse au même auditoire mais présente les résultats sous un angle différent. L'emphase porte sur l'estimation des coûts d'évitement des gaz à effet de serre et ce que l'ACV peut précisément apporter à cette estimation, en tant que source d'informations sur les émissions des processus d'arrière-plan. L'effet sur la prise de décisions est montré dans un cas précis où la capture de CO₂ entre en compétition avec une autre technologie d'évitement des gaz à effet de serre, soit la substitution du gaz naturel par un gaz synthétique biogénique. L'article présente le bénéfice économique qu'on peut tirer de l'ACV lorsqu'on doit concevoir un procédé dans un contexte où les fournisseurs seront éventuellement taxés pour leurs émissions. La revue exige des références numérotées dont la liste se trouve à la section 5.2.6.

5.2 Optimal Greenhouse Gas Emissions in NGCC Plants Integrating Life Cycle Assessment

Etienne Bernier, François Maréchal, Réjean Samson

Keywords: Life cycle assessment; global warming potential; multi-objective optimization;
carbon dioxide capture; emissions abatement cost

Abstract The optimal design of an energy-intensive process involves a compromise between costs and greenhouse gas emissions, complicated by the interaction between optimal process emissions and supply chain emissions. We propose a method that combines generic abatement cost estimates and the results of existing (LCA) life cycle assessment studies, so that supply chain

emissions are properly handled during optimization. This method is illustrated for a (NGCC) natural gas combined cycle power plant model with the following design and procurement options: procurement of natural gas from low-emissions producers, fuel substitution with (SNG) synthetic natural gas from wood, and variable-rate CO₂ capture and sequestration from both the NGCC and SNG plants. Using multi-objective optimization, we show two Pareto-optimal sets with and without the proposed LCA method. The latter can then be shown to misestimate CO₂ abatement costs by a few percent, penalizing alternate fuels and energy-efficient process configurations and leading to sub-optimal design decisions with potential net losses of the order of \$1/MWh. Thus, the proposed LCA method can enhance the economic analysis of emissions abatement technologies and emissions legislation in general.

Abbreviations

CO _{2eq}	Carbon dioxide equivalent
CCS	Carbon capture and sequestration
FNG	Fossil natural gas
GWP	Global warming potential (100-year CO _{2eq})
LCA	Life cycle assessment
MOO	Multi-objective optimization
NGCC	Natural gas combined cycle
MEA	Monoethanolamine
SNG	Synthetic natural gas

Nomenclature

α	Fraction of CO ₂ captured at the NGCC plant
ac_j	CO _{2eq} abatement cost for scenario j [USD/ton]
c_i	Cost of input i [USD/unit]
C_d	Depreciation rate of investment [USD/h]
$c_{el,j}$	Levelized cost of electricity for scenario j [USD/MWh]
$C_{O\&M}$	Cost of operation and maintenance [USD/h]
c_{el+t}	Levelized cost of electricity after tax [USD/MWh]
E	Power output [MW]
g_i	Life cycle GWP of input i [kg CO _{2eq} /unit]
$g_{el,j}$	GWP of electricity for scenario j [kg CO _{2eq} /MWh]
η_{SNG}	Wood-to-SNG conversion efficiency [% heating value]
mac_j	Marginal CO _{2eq} abatement cost for scenario j
m_i	Mass of input i [kg]
n_{SNG}	Number of SNG plants to feed one NGCC plant
t_{GWP}	Tax on CO _{2eq} emissions [USD/ton]
t_i	Tax on CO _{2eq} life cycle emissions as a fraction of the cost of input i
x_{SNG}	SNG fraction in the fuel blend (continuous decision variable)
y_1, y_2, y_3	Integer decision variables

5.2.1 Introduction

Environmental constraints are increasingly significant to all types of technical decision-making, including the design of energy-intensive processes and large energy conversion systems such as power plants. These constraints can apply to both process and supply chain emissions and therefore affect both process configuration and procurement decisions. Thus, process design is increasingly dependent on supply chain emissions knowledge, such as provided by LCA studies that consider the relevant parts of a cradle-to-grave analysis based on the ISO 14040 standard [1] for each material input to the process. *The challenge is then to properly integrate LCA in a process design optimization context in order to find process configurations that are truly optimal from a life cycle perspective.*

In many previous studies on chemical process design and energy conversion systems design, LCA is left out of the optimization because the environmental performance is considered to be an operational constraint and not a design objective [2]. LCA is then only used to compare different design scenarios outside any optimization methodology. Even when process emissions become an optimization objective, the life cycle environmental impact of fuels, chemicals or process equipment is generally still left outside the optimization [3]. In all these cases, emissions are not optimized on a life cycle basis.

In other instances, LCA is integrated into a (MOO) multi-objective optimization methodology in which one objective function is an LCA-based environmental indicator. Typically, the LCA is performed first, and the optimization problem is then formulated as a function of decision variables in the design space. In the formulation, the environmental performance is evaluated using a single impact category or a single-score method aggregating all impact categories [3]. The optimization algorithm then produces a set of Pareto-optimal configurations, which represent the best possible compromise between an economic and an environmental objective. One possible use of this set is to predict technological transitions as a function of future emissions tax levels, assuming the environmental objective coincides with the emissions being taxed [4]. Some variants of this methodology are found in the literature described below.

In the example of a boron refinery, the co-product yields and other design parameters have been optimized for total production, costs and (GWP) global warming potential using multi-objective

linear programming. For such an energy-intensive process, energy efficiency determines most of the impacts. Consequently, the other impact categories used as optimization objectives were found to be redundant with GWP [3,5,6]. More recently, the operating temperatures and pressures of an ethylene plant were optimized using total life cycle potential environmental impact and operating cost as objectives. In this case, the two objectives were converted into a single one by minimizing the utopia point distance [7]. In another case, the design of a waste biomass hydrothermal gasifier was optimized using thermo-economic objectives. A comparative LCA of the main process options included different impact methods and was performed after optimization [8]. In another study on the large-scale production of generic chemicals, the objective function was the joint probability of meeting a series of emission targets so as to avoid weighting different impact categories and manage impact method uncertainties [9].

It is also possible to extend the decision space to the structure of the supply chain network by optimizing plant size and location, choosing specific suppliers, etc. In the case of vinyl chloride and ethylene glycol production, two supply chain networks can be quite different but remain Pareto-optimal [2]. In a different study, the process configuration and the size of a SNG plant were optimized simultaneously using MOO and considering the LCA of wood transport logistics. For most gasification technologies, larger plants were shown to have more environmental impacts despite economies of scale [10].

The combination of MOO and LCA is considered useful because MOO helps to determine a compromise between economic and environmental objectives and avoid their subjective aggregation, while LCA ensures that the optimization does not simply shift burdens to other life cycle phases (materials extraction, manufacturing, transport etc.). Such emissions are referred to as *background* when they are remote from the decision space and not considered to be supplier-specific and therefore modeled by generic LCI databases such as *ecoinvent* [11].

The abatement potential of background emissions has not been considered by any known study, even though *combining MOO and LCA without background emissions optimization does not guarantee optimality from a life cycle perspective*. In such cases, the optimization algorithm can be misled to process configurations that under-utilize inputs for which *green* suppliers can be found or for which existing suppliers will eliminate emissions if taxed. This fails to minimize the overall environmental impact and misses the opportunity to put LCA to its most beneficial use,

since global Pareto-optimality ultimately requires reducing all emissions up to the point at which marginal abatement costs are uniform across the entire life cycle.

In order to optimize background emissions as part of the design, a method is needed to introduce them into the decision space without the complexity of recursively specifying suppliers and then determining specific emissions abatement technologies for thousands of processes. As initially explored in our previous study [12], this can be achieved by parameterizing generic emission abatement cost curves found in the literature, which can then compete within the optimization framework. Results obtained with this original approach have shown, for example, that the methane emissions of natural gas suppliers would be reduced by at least 30% in a context in which a post-combustion CO₂ capture process would be profitable, affecting the estimation of true capture costs.

This study shows how background emissions treatment affects decision-making following the multi-objective optimization of an energy conversion system at the conceptual design stage. In particular, it shows *the benefits that are directly attributable to LCA* by comparing Pareto sets obtained with and without information from LCA databases. A sensitivity analysis then retrospectively determines the appropriate level of detail required by the method.

The case study is a NGCC power plant for which the design options include various *green procurement*, fuel substitution and CO₂ capture combinations.

5.2.2 Method

The basic method of this study is to compare Pareto sets obtained using different objective function definitions depending on how background emissions from LCA are treated within the multi-objective optimization of an energy system, applied to the simulation framework described in Fig.5.1, which illustrates an NGCC power plant at the conceptual design stage. The design options include the procurement of (FNG) fossil natural gas from lower-emissions producers, post-combustion CO₂ capture at the NGCC plant at a variable rate, fuel blending with SNG from wood, and additional CO₂ capture at the SNG plants at a variable rate. Other pathways from wood to electricity or other energy products were not considered.

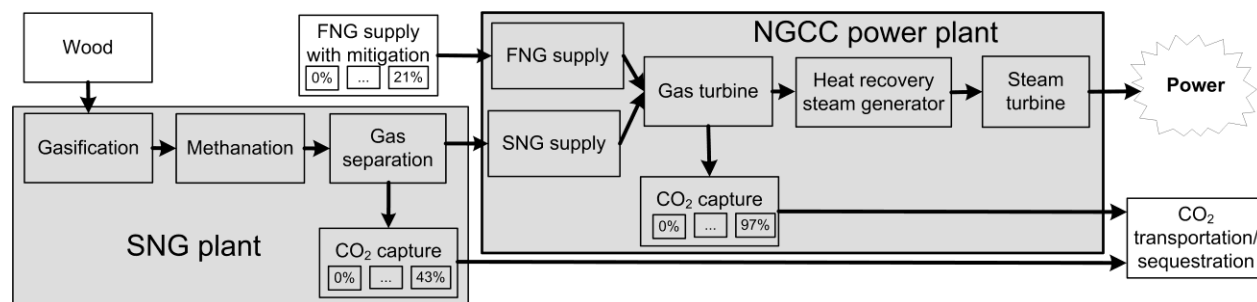


Figure 5.1 : Block diagram of energy system with CO₂ capture (shaded areas represent the decision space)

The framework contains the NGCC power plant model (section 5.2.2.1), the emissions model including FNG supply (sections 5.2.2.2 and 5.2.2.3) and the SNG plant model (section 5.2.2.4). Each model relies on the Pareto set of a previous MOO study without re-executing the underlying physical model, as illustrated in Fig.5.2. Using MOO, the framework can then generate new system-wide Pareto sets to investigate post-optimization decision-making as a function of different assumptions on background emissions. The objective functions are always the levelized cost of electricity and the corresponding GWP based on carbon dioxide equivalents (CO_{2eq}).

5.2.2.1 NGCC power plant model

The NGCC power plant model is based on the results of our thermo-economic optimization study [12], which itself is based on the 667MW_{th} General Electric STAG 107H/109H power plant. In the original study, post-combustion CO₂ capture was added using reversible absorption with (MEA) monoethanolamine. For the optimization, the gas turbine was considered as given while the CO₂ absorber size, the absorbent flow configuration and the thermal integration of CO₂ capture with the steam cycle were varied [12]. The simulation model used a flow-sheeting model, a separate process (thermal) integration model, a process equipment costing model and a life cycle emissions model. An evolutionary MOO algorithm based on queuing and clustering [13] was used to generate a comprehensive Pareto set of process configurations. Fig.5.3 illustrates 33 of them in terms of the objective functions of the original study [12]. When background emissions are not considered (*without LCA* in Fig.5.3), only un-captured CO₂ contributes to the GWP objective. Noticeable common features of the solutions are flue gas recirculation, a relatively wide absorber and the generation of additional steam below the MEA reboiler temperature [12].

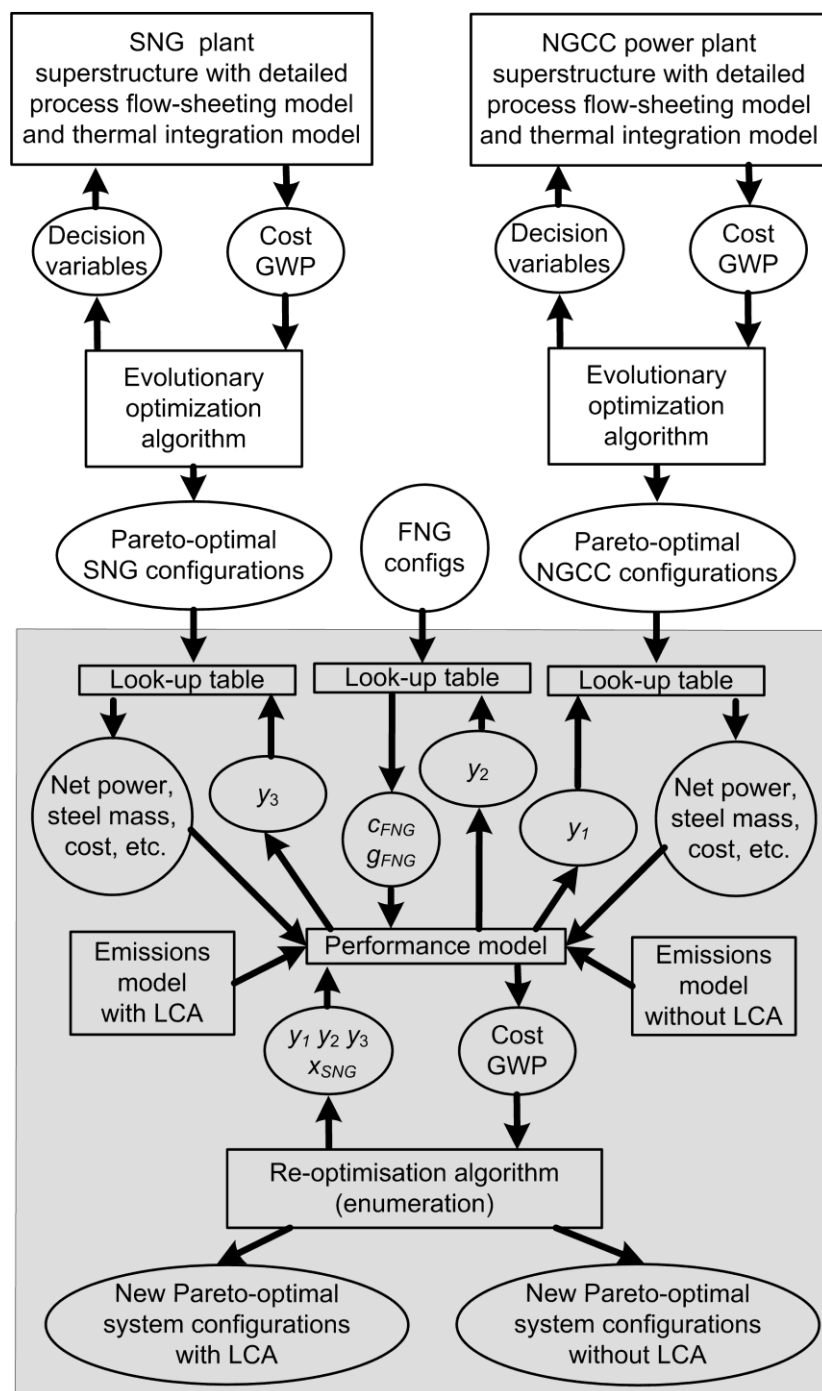


Figure 5.2 : Information flows within the simulation model (shaded area represents this study)

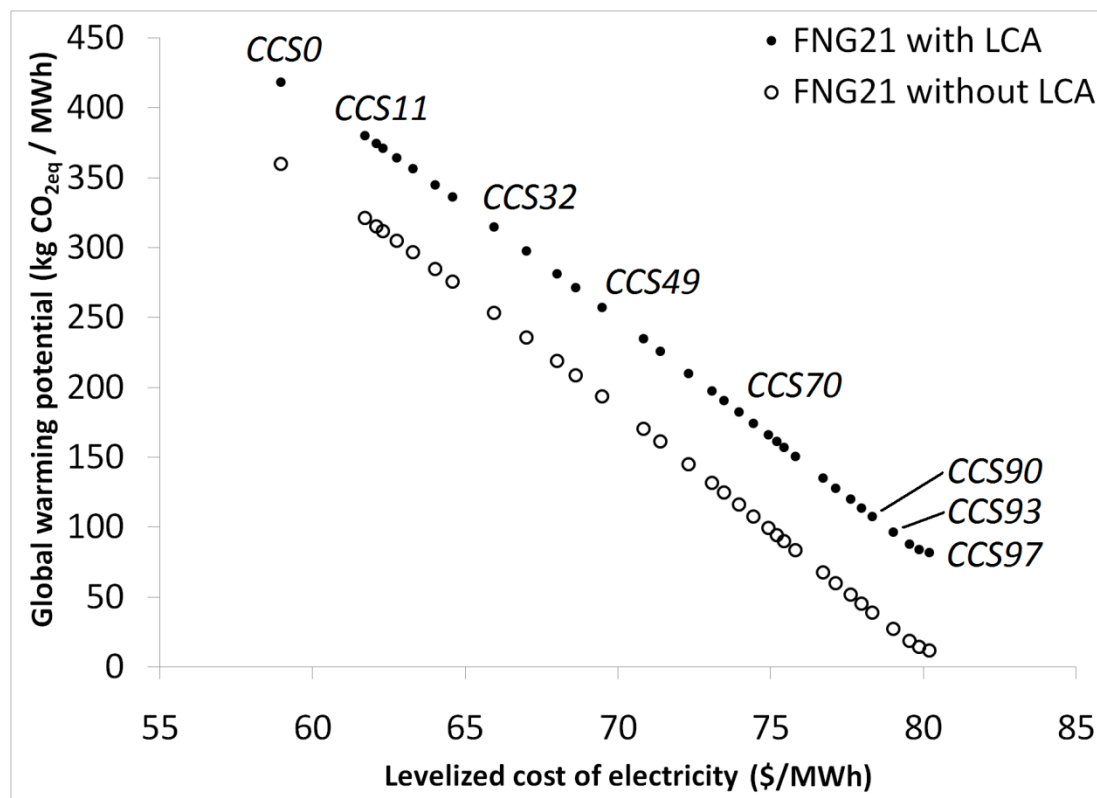


Figure 5.3 : Pareto-optimal configurations for the NGCC power plant with 33 CO₂ capture rates

The NGCC power plant model in this study is illustrated in Fig.5.2 as the look-up table on the right. It uses the 33 Pareto-optimal configurations of Fig.5.3, which each correspond to a CO₂ capture rate varying from 0% to 97% and a corresponding electricity production varying from 400 to 358 MW. They are labeled $y_1 = CCS0$ to $y_1 = CCS97$, y_1 being an integer decision variable selecting the CO₂ capture rate $\alpha(y_1)$. The economic and performance parameters of the configurations with 0% and 90% capture ($CCS0$ and $CCS90$) are summarized in Table 5-1.

5.2.2.2 NGCC power plant life cycle emissions excluding fuel supply

Since life-cycle GWP is the optimization objective and this study investigates the role of *background* processes, emissions data was obtained exclusively by extracting GWP results from existing LCA studies, including an in-house study of CO₂ capture based on proprietary data from GDF SUEZ and the *ecoinvent* database [11] in which the functional unit was the production of 1 kWh of electricity from a given 1 GW NGCC power plant with CO₂ capture using MEA. The study covered several elements of the life cycle of the power plant, including natural gas

production as a blend from seven countries, power plant construction and operation, absorbents, water, CO₂ drying, recompression and sequestration, among others. It accounted for infrastructure, transportation and disposal whenever applicable. The impact assessment method included GWP on a 100-year horizon using Intergovernmental Panel on Climate Change characterization factors. The results extracted for this study are expressed as a vector of 33 elementary processes, most of which are from the *ecoinvent v1.2* database. Although additional LCA data, including other impact categories, could be valuable in the decision-making process, they are outside the scope of this study.

Table 5-1 : Economic and performance parameters for the NGCC power plant and the SNG plants [12,16,17]

Type of plant Configuration label (y_1 or y_3)	Unit	NGCC CCS0	NGCC CCS90	<u>small</u> SNG0	<u>SNG</u> SNG30	<u>large</u> SNG0	<u>SNG</u> ^c SNG30
Size	MW _{th}	667	667	20	20	150	150
Lifetime	years	30	30	25	25	25	25
Debt service constant	%	11	11	10.3	10.3	7.8	7.8
Operation and maintenance ($C_{O\&M}$)	M\$/yr	9.60	14.04	2.92	2.99	5.75	7.09
Capacity factor	%	85.6	85.6	90	90	90	90
Investment	M\$	240	351 ^b	29.9	31.4	100	105
Cost of primary energy (c_{FNG0} or c_{wood})	\$/GJ	7.80	7.80	12.04	12.04	2.41	2.41
Cost of CO ₂ handling ($c_{handling}$) ^a	\$/ton	-	20.00	-	20.00	-	20.00
Cost of MEA absorbent (c_{MEA})	\$/kg	-	1.50	-	-	-	-
Electricity output (E)	MW	400.0	363.1	0.56	0.11	4.20	0.80
Thermodynamic efficiency, SNG (η_{SNG})	%	-	-	63.4	64.3	63.4	64.3
CO ₂ capture rate	kg/s	-	36.07	-	0.61	-	4.61

^a Comprises drying, final compression, transport, geological sequestration, and funding of the recapture of any expected sequestration leaks; values could differ depending on initial pressure, purity, flow rate and distance.

^b The difference with $CCS0$ comprises a component proportional to m_{SS} , a component based on the cost of the average additional heat exchanger, a credit for the smaller steam turbine, and an infrastructure component proportional to $\alpha^{0.65}$ [12].

^c Extrapolation from the performance of the smaller SNG plant model, assuming an investment proportional to $m_{wood}^{0.6}$.

Each material input to the system (fuel, stainless steel, absorbent, etc.) is considered as having an independent life cycle (different functional unit) whenever a different mathematical function of y_1 is required to express its flow rate. Their respective background GWPs (g_i) from the original study [12] are given in Table 5-2, which also includes the cost of the corresponding input (c_i) and

the weight of g_i expressed as a tax percentage (t_i , defined later). In effect, each g_i is equivalent to the final result of a complete, separate LCA study for the corresponding input, transportation included, in which the impact method selected was a single-issue method (GWP). Although captured CO_2 is a waste, its handling – including drying, final compression, transport over 1 000 km of pipeline and injection into a saline aquifer at sea – is considered an input [12]. The GWP of fossil natural gas (g_{FNG}) only includes background emissions and not the CO_2 product of combustion itself (g_{burn}). The CO_2 product of SNG combustion is deemed to be GWP-neutral.

Table 5-2 : Life-cycle GWP of the material inputs [10,12], their cost, and life-cycle GWP taxes (at \$62.30/ton CO_{2eq}) as a fraction of their cost

Input (delivered at NGCC plant)	Abbrev. <i>i</i>	g_i kg CO_{2eq}	c_i \$	t_i %
1 s NGCC power plant infrastructure	<i>infra</i>	0.084	0.98	0.5
1 s NGCC power plant O&M	<i>O&M</i>	0.051 ^a	0.36	0.9
1 kg carbon steel (untransformed)	<i>CS</i>	2.42	~ 1.00	15.1 ^b
1 kg stainless steel in column packing	<i>SS</i>	6.69	12.25	3.4
1 kg MEA w/o decomposition	<i>MEA</i>	3.40	1.50	14.1
1 kg CO_2 handling w/o leaks	<i>handling</i>	0.0105	0.02	3.3
1 GJ FNG (maximum, see Fig.5.4)	<i>FNG</i>	12.14	7.80	9.7
1 GJ FNG (minimum, see Fig.5.4)	<i>FNG</i>	9.57	7.83	7.6
1 GJ FNG (CO_2 combustion product)	<i>burn</i>	60.0 ^c	7.80	47.9 ^c
1 GJ wood + gasification, methanation	<i>wood</i>	3.66	12.04	1.9

^a Excluding flue gas (CO_2 , CH_4 and N_2O).

^b Significantly less for finished products such as machinery.

^c Depends on FNG composition, but taken as exact; not a background process.

In order for the GWP optimization objective (see section 5.2.2.5) to mimic the LCA of a MWh of electricity for each optimization iteration, each g_i is associated with the variable mass flow of the respective input (m_i) corresponding to full load operation in the power plant. Infrastructure-related flows (m_{infra} , m_{CS} , m_{SS}) are spread over 225 000 operating hours (7 500 h for 30 years), like in the original LCA study. Each m_i can be written as a piecewise linear function of the CO_2 capture rate $\alpha(y_1)$ because the optimal internal configuration was found to be almost invariant: only the diameters and flow rates vary for $0 < \alpha < 0.90$, and only the absorber height varies for $0.90 < \alpha < 0.97$ [12].

An important aspect of this model is the extension of the decision space to the mitigation of background emissions. Analysis of the LCA results [12] has shown that most of the background GWP mitigation potential is located in the life cycle of fossil natural gas (section 5.2.2.3). Accordingly, this study considers that all background emissions other than from FNG producers are unavoidable and taxable by default.

5.2.2.3 Fossil natural gas background emissions model including mitigation options

This case study fully integrates the emissions mitigation potential of FNG producers by adding a mitigation model defined by the Pareto set in Fig.5.4. It includes nine FNG configurations avoiding between 0% and 21% of the background emissions. They are labeled *FNG0* to *FNG21* and selected with the integer decision variable y_2 , corresponding to the middle look-up table in Fig.5.2. Note that the points *with LCA* in Fig.5.3 are based on *FNG21*.

In Fig.5.4, the large gap corresponds to the sequestration of CO₂ from FNG sweetening plants, avoiding 1.0 kg/GJ [12] at a cost of \$15/ton CO₂ [14]. The other points correspond to the elimination of up to 50% of the methane emissions of FNG producers, according to the generic abatement cost curve given in [15]. *FNG8-10* represent mitigation technologies in the \$0-15/ton CO_{2eq} abatement cost range, and *FNG19-21* represent technologies in the \$15-34/ton CO_{2eq} range.

5.2.2.4 Synthetic natural gas plant model

This study considers two SNG plant models with optional CO₂ capture: *small* (20 MW_{th}) and *large* (150 MW_{th}), both taken from a different study [10, 16, 17]. In practice, the optimal SNG plant size depends on local wood logistics [10].

In both models, wood biomass is gasified with steam at atmospheric pressure, and the gas is scrubbed with rape methyl ester. Methanation is performed using a nickel and aluminium oxide catalyst at atmospheric pressure. Excess heat is used to produce steam and electricity [10]. Finally, a membrane gas separation system purifies the SNG and CO₂ co-products, while the remaining gas is combusted and used internally to balance the process needs. The variable output balance between SNG, CO₂ and electricity depends primarily on the membrane system configuration [16].

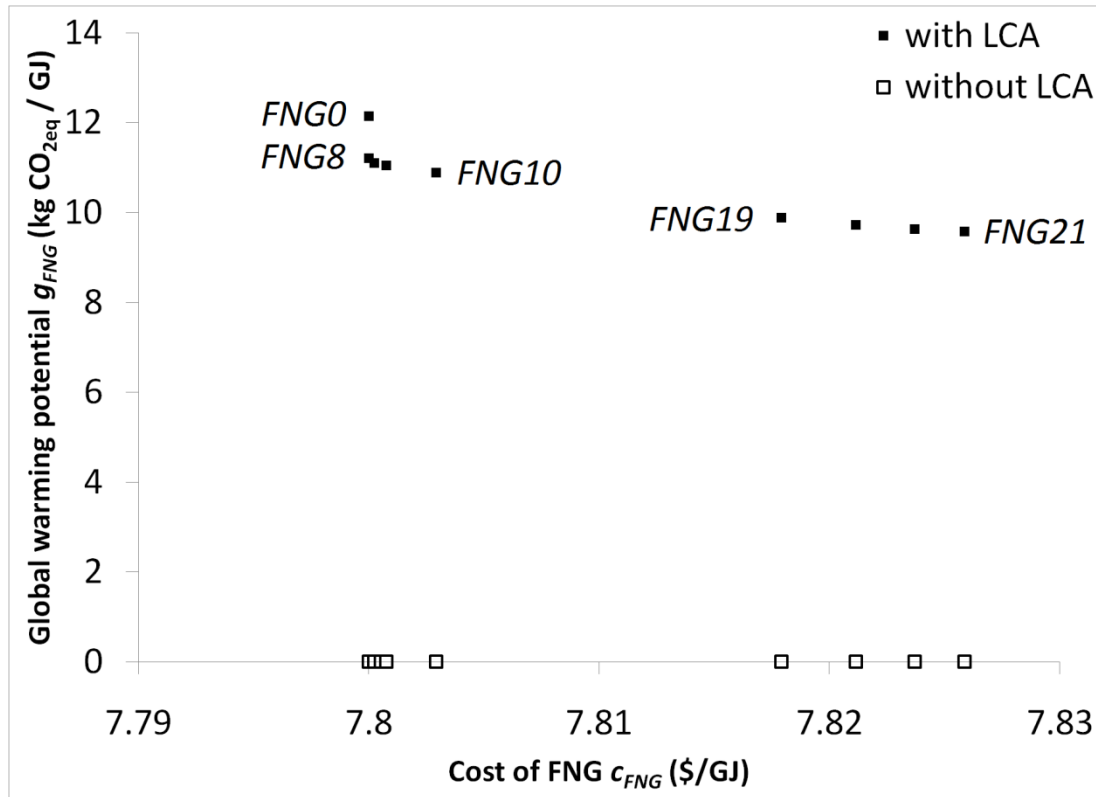


Figure 5.4 : Pareto-optimal configurations for the FNG upstream emissions with 9 levels of CO₂ and methane emissions (all background and nil without LCA)

An LCA was carried out using the *ecoinvent* database for the small plant and then extrapolated to the large one. The study included wood harvesting, treatment and transportation, plant infrastructure, flue gas and gas scrubbing agents [10]. Most of the impact is generated by equipment that is sized for the wood input and not the SNG output. Therefore, this study assumes that all SNG plant configurations will generate the same environmental impact per unit of wood, grouped under a single item in Table 5-2: g_{wood} . It also assumes that SNG and NGCC plants can share the same CO₂ transportation infrastructure.

The main design and operational parameters of the SNG plant were optimized in the original study [16] using a simulation platform similar to the NGCC study, with comparable objective functions expressed per unit SNG. Of the resulting comprehensive Pareto set for the small plant, 18 configurations are illustrated in Fig.5.5. SNG production varies from 12.7 to 13.1 MW, electricity production varies from 0.6 to -1.0 MW_e, and the CO₂ capture rate varies from 0% to 43% of the wood carbon input [16,17], hence the labels *SNG0* to *SNG43*. When background

emissions are not considered (*without LCA*), only captured CO₂ (biogenic) contributes to the environmental objective and leads to a negative CO₂ balance. The economic and performance parameters of the configurations with 0% and 30% capture (*SNG0* and *SNG30*) are summarized in Table 5-1. The 150 MW_{th} plant is thermodynamically equivalent to the 20 MW_{th} plant but benefits from lower investment and operating costs corresponding to savings of \$17/GJ_{wood} (Table 5-1). Note that the electricity co-product is given a value of \$180/MWh in Fig.5.5 but not in this model (section 5.2.2.5).

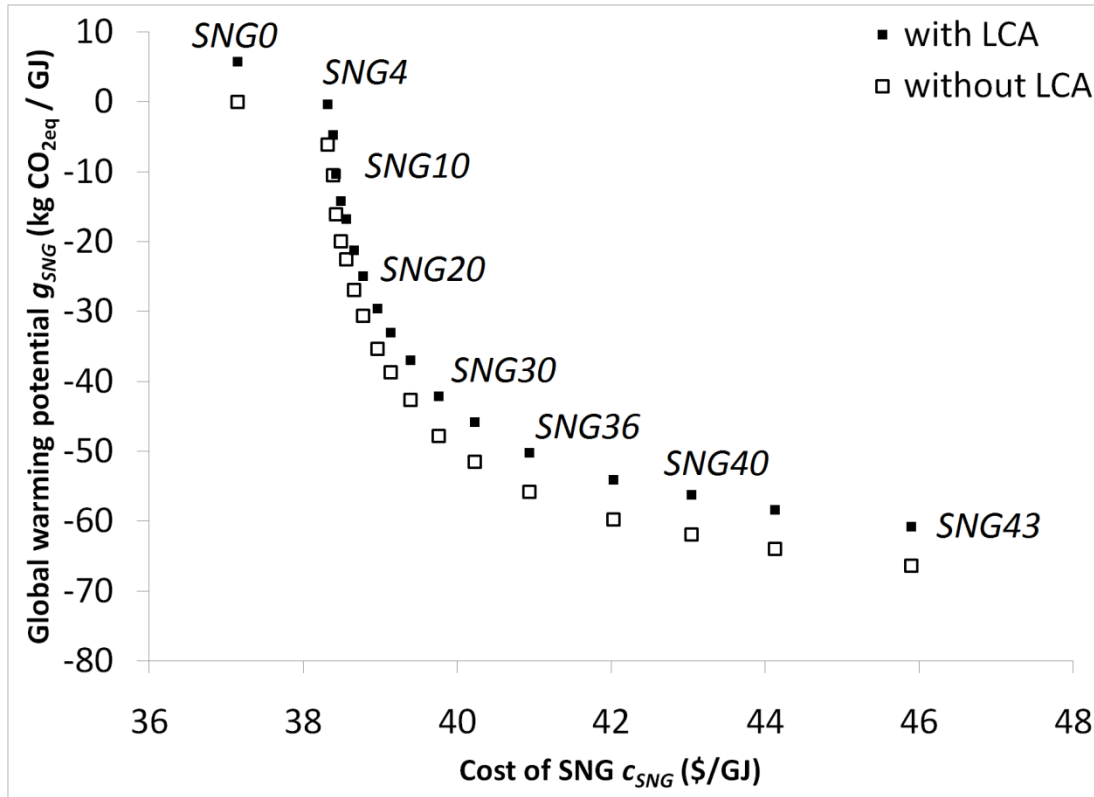


Figure 5.5 : Pareto-optimal configurations for the high-cost SNG plant with 18 CO₂ capture rates

To select the number and performance of SNG plants in the model (Fig.5.1), this study considers two SNG-related decision variables: y_3 and x_{SNG} . The y_3 integer decision variable corresponding to the left look-up table in Fig.5.2 selects one of the 18 Pareto-optimal configurations in Fig.5.5. The x_{SNG} continuous decision variable selects the SNG fraction in the fuel input to the NGCC power plant, so that the number of SNG plants required – not necessarily integer – can be written as $n_{SNG}(y_3, x_{SNG})$.

5.2.2.5 Objective function definitions

As indicated in Fig.5.2, this study uses lookup tables that represent the Pareto sets in Fig.5.3 (via y_1), Fig.5.4 (via y_2) and Fig.5.5 (via y_3). This way, the three integer variables in fact replace the large number of decision variables on each of the sub-problems. As long as each new objective function is a monotonic function of one of the objective functions of each sub-problem, the configurations that are Pareto-optimal for the overall problem are also Pareto-optimal with respect to all original decision variables.

The overall multi-objective optimization problem is formulated using two objective functions to be minimized: the levelized cost of electricity before any GWP tax (c_{el}) and the overall GWP of emissions per unit of electricity produced (g_{el}) at full load operation. For comparison purposes, two definitions are used for g_{el} depending on whether background processes from LCA are considered ($g_{el,LCA}$) or not ($g_{el,noLCA}$). This is expressed as:

$$\begin{aligned} \min(c_{el}, [g_{el,noLCA} | g_{el,LCA}]) &= f(y_1, y_2, y_3, x_{SNG}) \\ y_1 &= \{CCS0, \dots, CCS97\} \quad y_2 = \{FNG0, \dots, FNG21\} \\ y_3 &= \{SNG0, \dots, SNG43\} \quad 0 \leq x_{SNG} \leq 1 \end{aligned} \quad (\text{Eq.5.1}),$$

$$c_{el} = \frac{C_d^{NGCC}(y_1) + C_{O\&M}^{NGCC}(y_1) + C_{fuel} + \dot{m}_{handling}c_{handling} + \dot{m}_{MEA}(y_1)c_{MEA}}{\dot{E}_{NGCC}(y_1) + n_{SNG}(y_3, x_{SNG})\dot{E}_{SNG}(y_3)} \quad (\text{Eq.5.2}),$$

$$C_{fuel} = \dot{m}_{fuel}(1 - x_{SNG})c_{FNG}(y_2) + n_{SNG}(y_3, x_{SNG})C_{SNG} \quad (\text{Eq.5.2a}),$$

$$C_{SNG} = C_d^{SNG}(y_3) + C_{O\&M}^{SNG}(y_3) + \dot{m}_{wood}c_{wood} \quad (\text{Eq.5.2b}),$$

$$\dot{m}_{handling} = \alpha(y_1)\dot{m}_{fuel}g_{burn} + n_{SNG}(y_3, x_{SNG})\dot{m}_{CO_2}^{SNG}(y_3) \quad (\text{Eq.5.2c}),$$

$$g_{el,noLCA} = \frac{[1 - x_{SNG} - \alpha(y_1)]\dot{m}_{fuel}g_{burn} - n_{SNG}(y_3, x_{SNG})\dot{m}_{CO_2}^{SNG}(y_3)}{\dot{E}_{NGCC}(y_1) + n_{SNG}(y_3, x_{SNG})\dot{E}_{SNG}(y_3)} \quad (\text{Eq.5.3}),$$

$$g_{el,LCA} = g_{el,noLCA} + \frac{G_{fuel} + \dot{m}_{handling}g_{handling} + G_{other}(y_1)}{\dot{E}_{NGCC}(y_1) + n_{SNG}(y_3, x_{SNG})\dot{E}_{SNG}(y_3)} \quad (\text{Eq.5.4}),$$

$$G_{fuel} = (1 - x_{SNG})\dot{m}_{fuel}g_{FNG}(y_2) + n_{SNG}(y_3, x_{SNG})\dot{m}_{wood}g_{wood} \quad (\text{Eq.5.4a}),$$

where C_d is the investment depreciation rate of a plant per operating hour based on the parameters in Table 5-1; $C_{O\&M}$ is for operations and maintenance, including wages (Table 5-1); the fuel flow rate m_{fuel} is 2400 GJ/h; the wood flow rate m_{wood} is 72 GJ/h; the make-up MEA flow rate m_{MEA} varies between 0 and 20 kg/h; the SNG CO₂ flow rate is the amount captured only, per plant (Table 5-1); c_i are the input unit costs (Table 5-1); E is the net electrical output per plant (Table 5-1); g_i are life cycle GWP values (Table 5-2); and G_{other} includes the minor background GWP contributions from m_{infra} , $m_{O\&M}$, m_{CS} , m_{SS} and m_{MEA} , varying between 312 and 602 kg CO_{2eq}/h in total.

For any given system configuration, $g_{el,LCA}$ (Eq.5.4) is equivalent to the result of a complete LCA study for the global warming impact category, while $g_{el,noLCA}$ (Eq.5.3) can be considered to be an assessment of on-site emissions only. Methane and nitrous oxide emissions, as NGCC combustion products, could be included in either equation but were not in this particular study.

Using these definitions, the simulation model can be executed by enumeration (Fig.5.2) to generate a new Pareto set. For more complex problems, enumeration can be replaced by a MOO algorithm. Note that if E_{SNG} can be sold as *green* electricity at a price subsidized beyond GWP-related credits (as may be the case in some jurisdictions), it may be preferable to include E_{SNG} as a negative cost term rather than on the denominator of these equations.

Assuming that all life cycle emissions ($g_{el,LCA}$) will be subject to the same new GWP tax (t_{GWP}), a reasonable estimate of the levelized cost of electricity after tax (c_{el+t}) is:

$$c_{el+t} = c_{el} + t_{GWP} g_{el,LCA} \quad (\text{Eq.5.5}).$$

One can clearly see that c_{el+t} is underestimated when ignoring background emissions, potentially affecting subsequent decision-making.

5.2.2.6 Marginal abatement cost definitions

To simplify the discussion regarding the inclusion or exclusion of background emissions and how it affects decision-making, it is advisable to define the GWP abatement cost (ac_j) and GWP marginal abatement cost (mac_j) for a configuration j :

$$ac_{j,noLCA} = \frac{[c_{el}]_j - [c_{el}]_0}{[g_{el,noLCA}]_j - [g_{el,noLCA}]_0} \quad (\text{Eq.5.6}),$$

$$ac_{j,LCA} = \frac{[c_{el}]_j - [c_{el}]_0}{[g_{el,LCA}]_j - [g_{el,LCA}]_0} \quad (\text{Eq.5.7}),$$

$$mac_{j,noLCA} = \frac{[c_{el}]_j - [c_{el}]_{j-1}}{[g_{el,noLCA}]_j - [g_{el,noLCA}]_{j-1}} \quad (\text{Eq.5.8}),$$

$$mac_{j,LCA} = \frac{[c_{el}]_j - [c_{el}]_{j-1}}{[g_{el,LCA}]_j - [g_{el,LCA}]_{j-1}} \quad (\text{Eq.5.9}),$$

where scenario 0 is the base case without GWP mitigation efforts ($y_1 = CCS0$, $y_2 = FNG0$, $x_{SNG} = 0$) and scenario j is the j^{th} Pareto-optimal configuration by increasing order of marginal abatement cost. Note that the j_{\max} configurations form a subset of the Pareto set of Eq.5.1 in the shape of a convex polygon here called *convex subset*. Also note that $mac_{j,noLCA}$ (Eq.5.8) and $mac_{j,LCA}$ (Eq.5.9) may lead to different subsets.

The abatement cost represents the value of the GWP tax that will make the cost of electricity production (c_{el+i}) of configuration j equivalent to the base case, depending on whether or not taxes are considered to have an effect on the whole supply chain (Eq.5.7 and Eq.5.8). However, there is no relationship between the GWP tax rate and the abatement cost of the most profitable configuration since *marginal* abatement costs are determinant. Seeing as scenario j effectively minimizes c_{el+i} in the tax range $mac_{j,LCA} < t_{GWP} < mac_{j+1,LCA}$ only, Eq.5.9 appears more relevant for decision-making than Eq.5.6, Eq.5.7 or Eq.5.8.

Two mac values are defined in particular: for the smallest j that includes CO₂ capture and sequestration ($j = CCS$) and for the smallest j that includes the substitution of fossil natural gas by synthetic natural gas ($j = SNG$). Thus, the lowest GWP tax for which capture and SNG become profitable is given by $mac_{CCS,LCA}$ and $mac_{SNG,LCA}$, respectively.

5.2.2.7 Other indicators

Another indicator that will simplify the discussion is the expression of GWP taxes as a percentage of the current price of input i . It is given by t_i :

$$t_i(t_{GWP}) = t_{GWP} \frac{g_i}{c_i} \quad (\text{Eq.5.10}).$$

For a tax scenario in which CO₂ capture would break-even, t_i becomes a constant:

$$t_i = t_i \left(mac_{CCS,LCA} \right) = mac_{CCS,LCA} \frac{g_i}{c_i} \quad (\text{Eq.5.11}).$$

The t_i values range from 1% to 15% and are given in Table 5-2.

The break-even wood cost (c_{wood}^*) that makes SNG competitive with FNG, for a given tax level (t_{GWP}), is calculated in Eq.5.12:

$$c_{wood}^* = c_{wood} + \frac{[c_{el+t}]_1 - [c_{el+t}]_2}{\dot{m}_{wood}} \left(\frac{[\dot{E}_{NGCC}]_2}{[n_{SNG}]_2} + [\dot{E}_{SNG}]_2 \right) \quad (\text{Eq.5.12}),$$

where scenarios 2 and 1 respectively represent the unblended-SNG and unblended-FNG system configurations that minimize c_{el+t} for a given t_{GWP} . The break-even wood cost (c_{wood}^*) is given in terms of c_{el+t} instead of c_{FNG} in order to cancel out the electricity and CO₂ co-products of SNG. It can be calculated with and without background emissions in order to estimate the risk related to their neglect.

5.2.3 Results and discussion

Fig.5.6 shows selected FNG and SNG system configurations and their performances in terms of global warming potential ($g_{el,noLCA}$, Eq.5.3, or $g_{el,LCA}$, Eq.5.4) and levelized cost (c_{el} , Eq.5.2). The grey points illustrate the scaling of SNG configurations from 20MW_{th} to 150MW_{th}. When GWP is evaluated with background emissions (*LCA* in Fig.5.6), the minimum cost configuration is the FNG base case without any GWP mitigation ($y = 0F0$, $c_{el} = \$58.80/\text{MWh}$, $g_{el,LCA} = 434 \text{ kg CO}_2/\text{MWh}$), while the minimum GWP configuration is the SNG case with maximum CO₂ capture, resulting in a significant net CO₂ sequestration ($y = 97S43$, $c_{el} = \$362/\text{MWh}$, $g_{el,LCA} = -918 \text{ kg CO}_2/\text{MWh}$). The intermediate points include, first, the mitigation of background GWP; second, CO₂ capture at the NGCC plant with intermediate capture rates and unblended FNG; and last, unblended SNG with intermediate capture rates at both NGCC and SNG plants. The GWP difference between physically identical solutions evaluated with and without background emissions (*LCA* and *no LCA* in Fig.5.6) ranges from 30 to 70 kg CO_{2eq}/MWh.

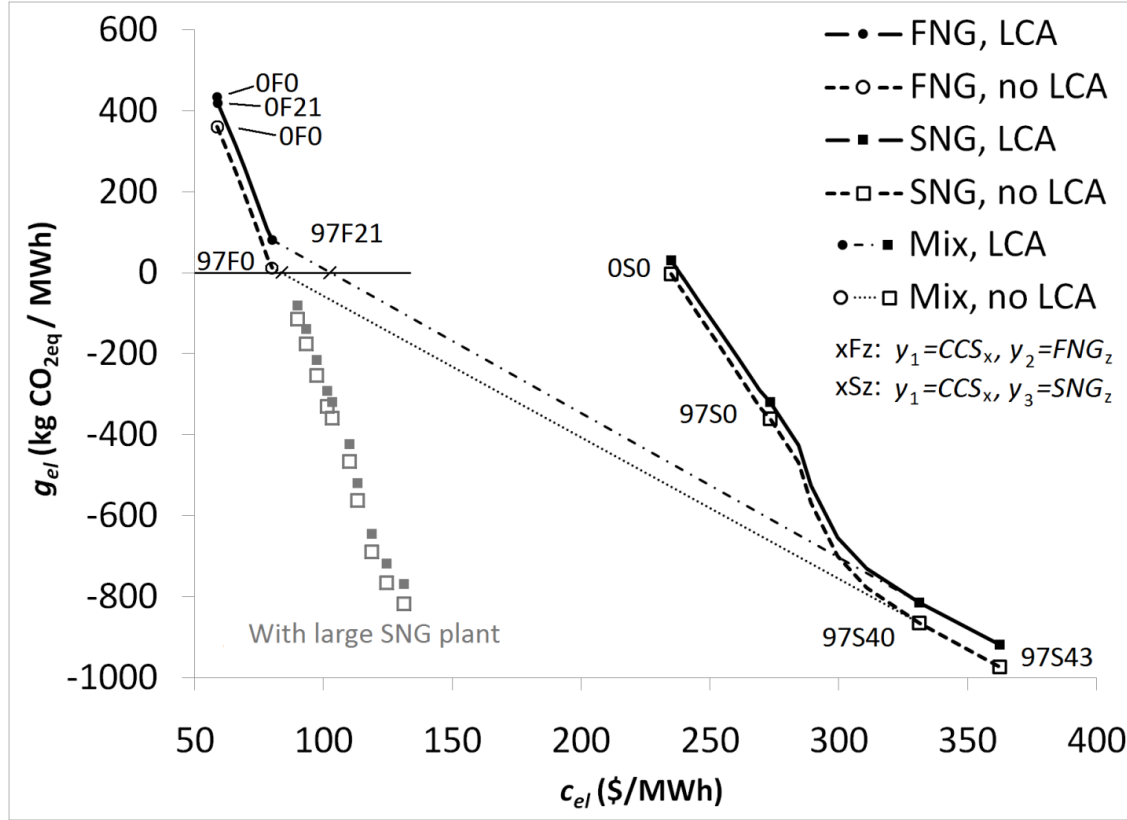


Figure 5.6 : Pareto-optimal system configurations with and without fuel mixing

When fuel blending is considered, preferable configurations are found along the line connecting the FNG configuration with 97% capture at the NGCC power plant and 21% reduction in background emissions (97F21) and the SNG configuration with 97% capture at the NGCC power plant and 40% capture at the 20 MW_{th} SNG plants (97S40). Thus, Pareto-optimality under fuel blending corresponds to constrained CO₂ capture rates with the blending rate as the only degree of freedom. Carbon-neutrality ($g_{el} = 0$) falls under such scenario and requires 1.45% SNG in the fuel blend from a local perspective (*no LCA*) or 9.7% from a life-cycle perspective (*LCA*).

The total cost after GWP taxes (c_{el+t} , Eq.5.5) can only be minimized by the convex subset $\{j_0 = 0F0, j_1 = 0F21, j_2 = 90F21, j_3 = 97F21, j_4 = 97S40, j_5 = 97S43\}$ using the smaller SNG plants (20MW_{th}) or alternatively by the convex subset $\{j_0 = 0F0, j_1 = 0F21, j_2 = 0S30, j_3 = 90S30, j_4 = 97S30, j_5 = 97S40\}$ using the larger SNG plants (150MW_{th}). Table 5-3 lists these configurations and the corresponding marginal abatement costs (mac_{CCS} and mac_{SNG}). From an emissions trading perspective, combinations of configurations from the subset are more attractive than the other Pareto-optimal solutions.

Table 5-3 : Optimal system configurations, expressed as effective capture rates at each plant, by SNG plant type and by GWP tax level

Min t_{GWP} \$/ton CO _{2eq}	Max t_{GWP} \$/ton CO _{2eq}	Fuel type	NGCC Plant (y_1) %	FNG Plant (y_2) %	SNG Plant (y_3) %
With small SNG plant					
0	34	FNG	0	0-21	N/A
34	62.30	FNG	0	21	N/A
62.30 ^a	280.21	FNG	90-97	21	N/A
280.21 ^b	280.21	Blend	97	21	40
280.21	∞	SNG	97	N/A	40-43
With large SNG plant					
0	34	FNG	0	0-21	N/A
34	61.11	FNG	0	21	N/A
61.11 ^c	61.11	Blend	0	21	30
61.11	62.10	SNG	0	N/A	30
62.10	88.92	SNG	90-97	N/A	30
88.92	∞	SNG	97	N/A	30-43

^a mac_{CCS} (Eq.5.9) (\$60.25/ton using Eq.5.8).

^b mac_{SNG} (Eq.5.9) (\$286.37/ton using Eq.5.8).

^c mac_{SNG} (Eq.5.9) (\$63.35/ton using Eq.5.8).

Fig.5.7 shows GWP (g_{el}) as a function of the total cost (c_{el+t}) including a \$61.50/ton CO_{2eq} tax, illustrating a situation in which it is cost-effective to capture CO₂ at the SNG plants but not at the NGCC plant (0S30). The grey points in Fig.5.6 are reproduced in Fig.5.7 for clarity, but only the black ones are Pareto-optimal. Since future GWP taxes on background emissions ($t_{GWP} \cdot g_{el,LCA} - t_{GWP} \cdot g_{el,noLCA}$) vary between \$2.03/MWh (0S0) and \$4.53/MWh (0F0), the 0S30 configuration becomes unattractive when the taxes are not considered (*no LCA* in Fig.5.7). LCA therefore not only provides a better definition of GWP in this case but also a better estimate of future costs, which affects decision-making.

Fig.5.8 shows the electricity cost after tax (c_{el+t}) as a function of the tax (t_{GWP}) for the best configurations using FNG and SNG, respectively. Blended-fuel configurations can be obtained by interpolation between the two curves, which cross at ($t_{GWP} = \$61.11/\text{ton CO}_{2eq}$, $c_{el+t} = \$84.51/\text{MWh}$). For each sequential technological transition, taxes (or CO₂ sequestration credits) decrease while costs increase by the same amount.

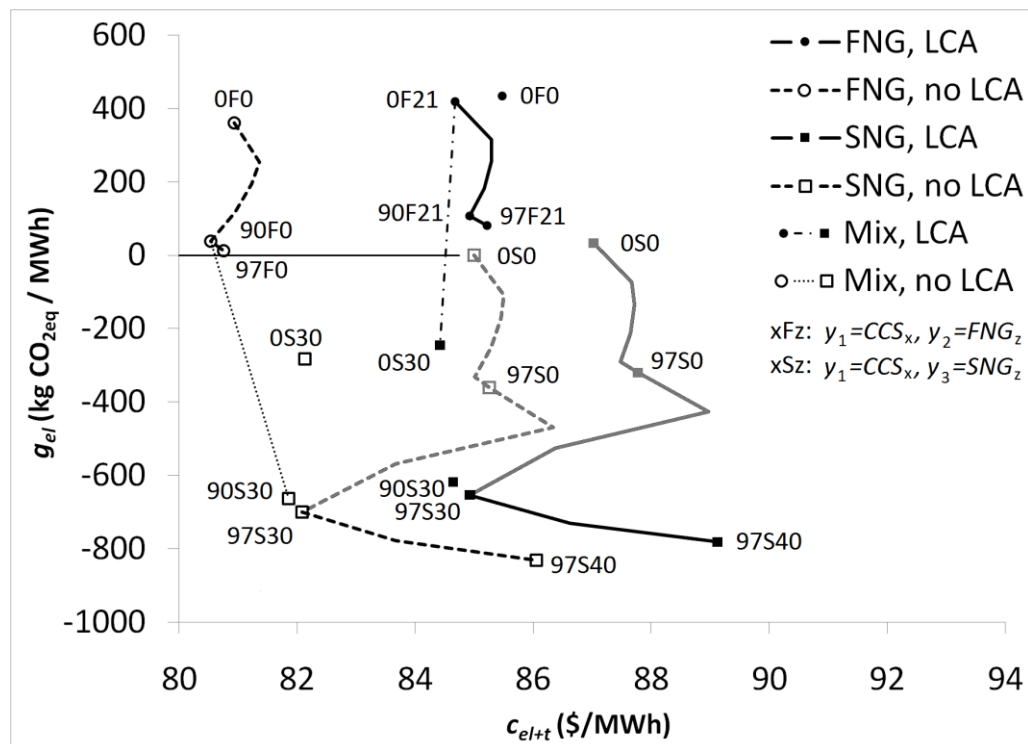


Figure 5.7 : Specific GWP vs. electricity cost, including a \$61.50/ton CO_{2eq} tax

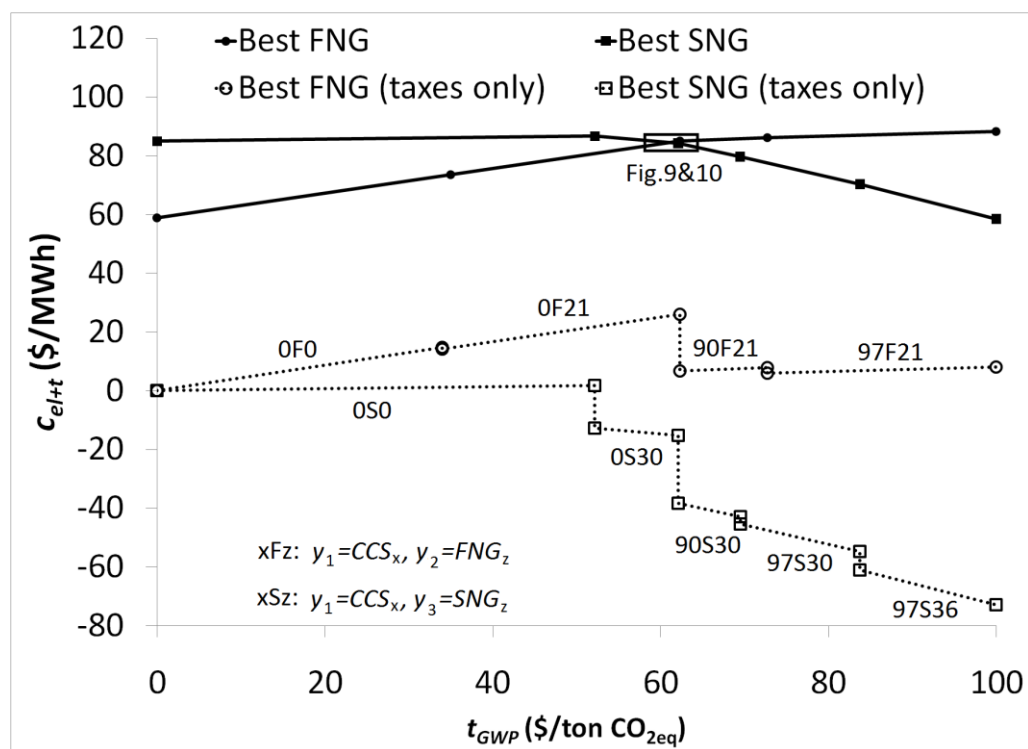


Figure 5.8 : Minimum electricity cost, including GWP taxes or credits (also shown separately), as a function of the tax

5.2.3.1 Impact of LCA assumptions on technological choices and procurement decisions

This section analyses the impacts of considering LCA to estimate GWP taxes on background emissions (unavoidable and avoidable) and the effect on decision-making. The key element is that LCA affects the break-even tax for technological transitions given by the marginal abatement costs (mac_{CCS} and mac_{SNG}). Decision-making is particularly affected when the expected tax level (t_{GWP}) is close to either mac_{CCS} or mac_{SNG} or both, as in Fig.5.7.

Fig.5.9 and Fig.5.10 show the cost after tax (c_{el+t}), as a function of t_{GWP} for the optimal system configuration as compared to the misinformed decision due to the lack of LCA (dashed line) or the improper consideration of avoidable background emissions (grey line, obtained by forcing $y_2 = FNG0$). Fig.5.9 illustrates the decision to capture CO₂ or not (no SNG option), while Fig.5.10 illustrates the decision to introduce the large SNG plants (150 MW_{th}).

In Fig.5.9, for a tax level between \$60.25/ton CO_{2eq} and \$62.30/ton CO_{2eq} ($= mac_{CCS}$), CO₂ capture (90F21) appears profitable only when background GWP taxes are ignored, especially for natural gas producers. The decision to capture anyway results in a net potential loss of up to \$0.64/MWh that is directly attributable to the lack of LCA. However, for slightly higher tax levels (grey triangle), LCA will effectively misguide a decision that would be appropriate without LCA, as predicted in the introduction, because natural gas producers can partly avoid taxes by reducing their own emissions (Fig.5.4), which cannot be predicted by LCA alone.

In Fig.5.10, the largest potential net loss (\$1.64/MWh) occurs when the expected future tax is \$63.35/ton CO_{2eq}. The loss arises from the missed opportunity to save on the GWP taxes passed on by natural gas producers by failing to invest in SNG plants.

It is important to note that in other systems, future taxes could be as overestimated with LCA as they are underestimated without LCA, either because input prices already discount these taxes or because 50% or more of the background GWP indicated by LCA is from avoidable emissions, in which case LCA would worsen most decisions (e.g. grey triangle larger than black in Fig.5.9). The probability of misguided decisions can be minimized by considering background emissions to be avoidable when in doubt. As a simple default rule for future studies, it is recommended to consider all greenhouse gases for which the median abatement cost per unit GWP is lower than for CO₂ (e.g. methane) to be avoidable unless proven otherwise.

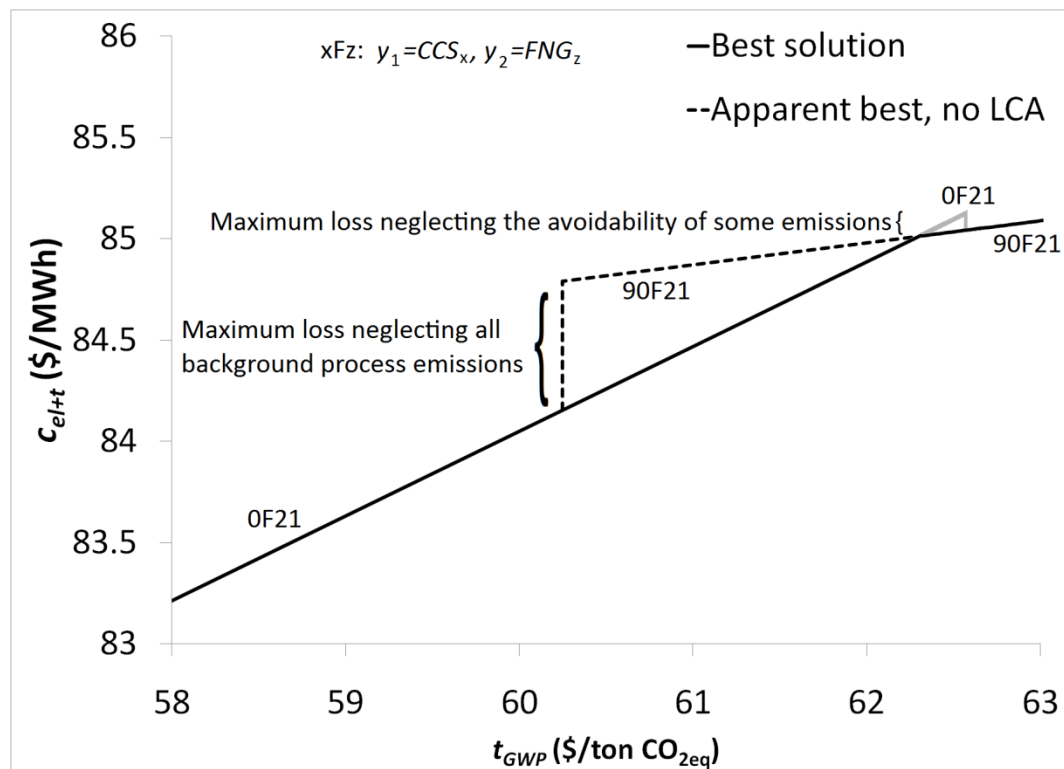


Figure 5.9 : Detail of the technological transition to CO_2 capture (no SNG)

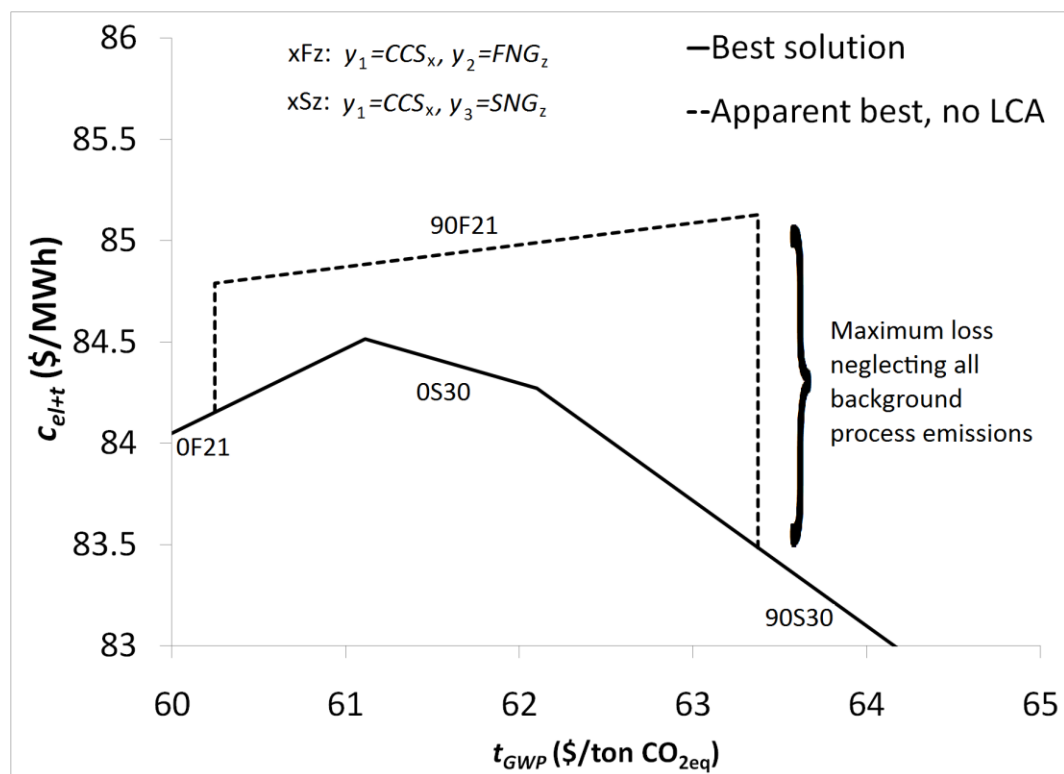


Figure 5.10 : Detail of the technological transition to SNG (large plant)

5.2.3.2 Impact of LCA assumptions on alternate fuel break-even cost estimations

Fig.5.11 shows the break-even wood cost (c_{wood}^*) as a function of the GWP tax (t_{GWP}) using Eq.5.12 and the cost values given in Table 5-1. Even without considering background emissions, c_{wood}^* increases with t_{GWP} because fuel substitution transfers an avoided tax ($g_{burn} \cdot t_{GWP}$) to wood producers.

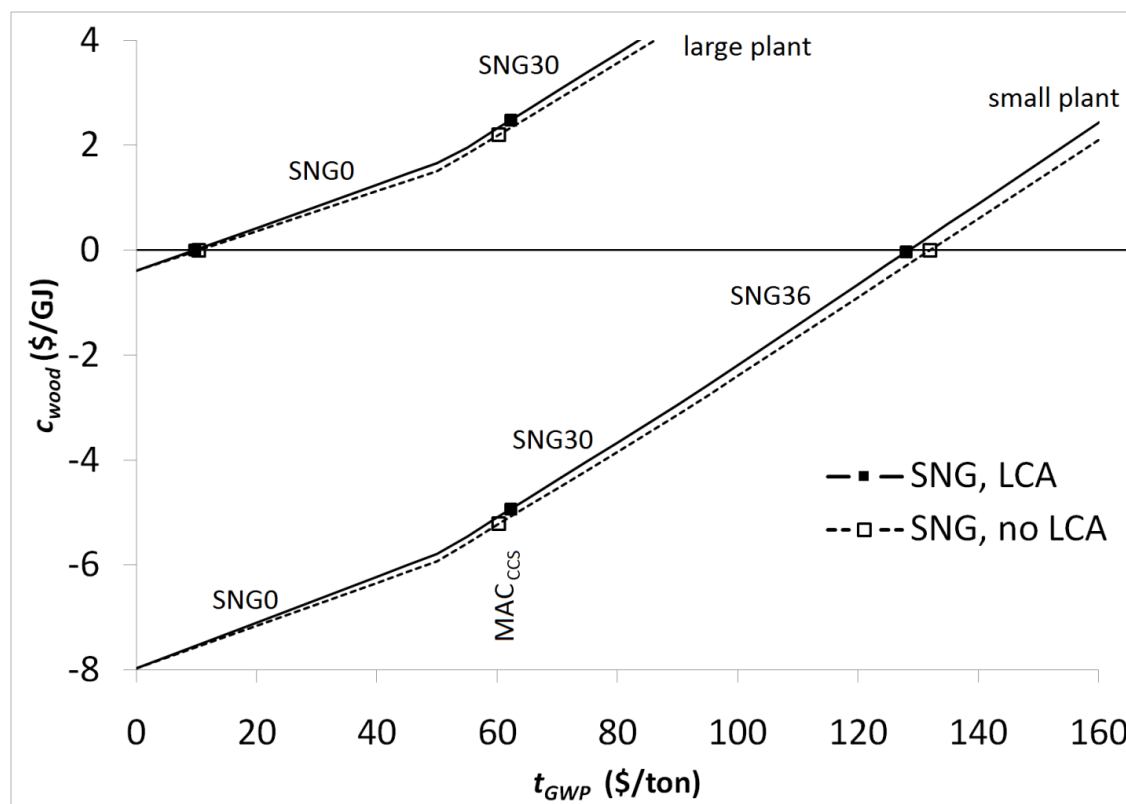


Figure 5.11 : Cost of wood for the break-even SNG producer, as a function of the GWP tax

Fig.5.11 shows that wood costs need to be subsidized when the GWP tax (t_{GWP}) is below \$9.70/ton CO_{2eq}. However, the situation appears worse without LCA (\$10.40/ton CO_{2eq}), because SNG emits less background GWP than FNG, even with mitigation. Similarly, if wood producers are considered to be in competition with CO₂ capture technology ($t_{GWP} = mac_{CCS}$), then LCA affects both the tax level and the amount of emissions being taxed. LCA thus reveals a hidden cost of \$0.71/GJ for natural gas, which then affects the break-even wood cost as well as the potential value of any other alternate fuel.

5.2.3.3 Impact of LCA assumptions on the optimal process configurations

Background emissions affect not only system-level decisions (section 5.2.3.1) but also process-level design ones, such as the optimal operating pressure of a CO₂ stripper or the optimal height of a CO₂ absorber. For example, once background GWP is considered, a lower CO₂ capture rate (90% instead of 93%) can be shown to be preferable despite the 11.53 kg CO₂/MWh no longer captured. Indeed, the 0.30 kg CO_{2eq}/MWh (plus 0.07 kg avoidable) no longer emitted by natural gas producers is sufficient to push the cost of the additional capture higher than the cost of the initial capture. However, LCA does not lead to significant savings in this case because, here, the difference between the correct decision and the misinformed decision is only incremental.

Energy-efficient configurations are favoured when considering LCA because fuel and related inputs have the highest background GWP per dollar in this case. More generally, considering LCA will predictably shift the optimal process configuration away from the highest- t_i (Eq.5.11) inputs.

5.2.3.4 Sensitivity analysis

LCA is subject to limitations and unquantifiable uncertainties due to data gaps, cut-off criteria in boundary definition and other methodological assumptions. A sensitivity analysis is the usual method to test assumptions in LCA [1]. The following sensitivity analysis compares the variations in the marginal abatement cost of CO₂ capture (mac_{CCS}) when calculated using different assumptions about the background emissions of each input (g_i). These variations are related to the size of the grey triangle in Fig.5.9 and used here to assess uncertainties and determine the level of detail (cut-offs) required for future LCAs in a similar context.

Table 5-4 shows mac_{CCS} values for different sets of assumptions: when individual g_i are removed from Eq.5.4, when there is an unexpected 5% leak of captured CO₂, when non-CO₂ emissions are not considered and when wind energy is used to reduce diesel consumption on an offshore CO₂ injection platform. The latter is an additional background CO₂ mitigation option similar to those in Fig.5.4, but for $g_{handling}$ instead of g_{FNG} .

Table 5-4 shows that of the 2.00\$/ton CO_{2eq} gap between $mac_{CCS,LCA}$ and $mac_{CCS,noLCA}$, \$1.13 is attributable to g_{FNG} and \$0.70 to $g_{handling}$. Table 5-4 also underlines the importance of CO₂ leaks,

since they have the largest potential impact on mac_{CCS} and decision-making, unless the leak occurs in the distant future and re-capture costs can be heavily discounted.

Table 5-4 : LCA sensitivity analysis for mac_{CCS} (based on 90% capture)

Scenario	mac_{CCS} \$/ton CO _{2eq}	error \$/ton CO _{2eq}
Best estimate	\$62.30	\$0.00
Neglecting g_{FNG}	\$61.17	−\$1.13
Neglecting $g_{handling}$	\$61.60	−\$0.70
Neglecting g_{SS}	\$62.30	\$0.00
Neglecting non-CO ₂ gases	\$62.09	−\$0.21
Neglecting all g_i	\$60.30	−\$2.00
Assuming $y_2 = FNG0$	\$62.57	+\$0.27
$g_{handling}$ with mitigation option ^a	\$62.24	−\$0.06
5% CO ₂ sequestration leak ^b	\$66.13	+\$3.83
$c_{handling} = \$25/\text{ton}$ instead of $\$20/\text{ton}$	\$68.06	+\$5.76
$c_{FNG} = \$10/\text{GJ}$ instead of $\$7.80/\text{GJ}$	\$66.62	+\$4.32

^a 50% wind energy for the off-shore CO₂ compressor.

^b No time discounting.

Other contributors in Table 5-4 have limited impacts and can be neglected, including non-CO₂ emissions (\$0.21/ton CO_{2eq}), infrastructure and equipment manufacturers (negligible), and mitigation options (\$0.27 for FNG producers, \$0.06 for CO₂ transporters and presumably vanishingly small for the others). Consequently, accuracy does not require a complex LCA in this context. For example, for an accuracy of $\pm \$1/\text{ton CO}_{2eq}$ in estimating mac_{CCS} , the following simple cut-off is sufficient: a CO₂ inventory of the major fuel production and CO₂ handling steps. Comparatively, Table 5-4 shows that mac_{CCS} is more sensitive to the uncertainty in the cost of natural gas (c_{FNG}) or the cost to handle CO₂ ($c_{handling}$).

5.2.4 Conclusion

The combined use of a process model, life cycle assessment (LCA) and multi-objective optimization solves the problem of cost-effectively reducing the life cycle global warming potential (GWP) of energy systems through the simultaneous optimization of process configuration and procurement decisions, including the possible mitigation of background emissions such

as methane emissions in the natural gas supply-chain. The combined method is particularly useful when suppliers are expected to be subject to future emissions taxes or an equivalent permit system at an unknown price per unit of GWP. Not only does the method provide a more complete picture of the environmental impacts, it also implicitly accounts for the potential effect of future taxes on input prices. This gives a measure of the uncertainty of the impacts of these taxes on decision-making and can be useful to energy producers, energy consumers and governments alike.

The NGCC power plant case study included the fossil natural gas (FNG) supply chain with mitigation options, the possibility of blending synthetic natural gas (SNG) produced from biomass, and options to capture CO₂ from the NGCC and SNG plants using monoethanolamine and membrane technologies, respectively. The recombination of separate results has shown system-wide Pareto-optimal configurations. It is then possible to rank all the mitigation options according to their break-even tax. Our analysis demonstrates that the first action taken will be for natural gas producers to mitigate at least 50% of their methane emissions and some of their CO₂ emissions. The next action will be to capture 90-97% of the CO₂ at the NGCC plant and then substitute FNG with SNG, but only with 30-40% CO₂ capture at the SNG plant. If biomass costs are low, the last two actions may compete with each other. Assuming that background emissions for which taxes will ultimately be paid by the consumer are correctly indicated in the LCA, results show that the break-even tax and the break-even biomass cost estimations are affected by these background emissions, and that LCA improves decisions in situations close to break-even. *The net benefit attributable to LCA can sometimes be higher than \$1/MWh.*

Results also show that LCA marginally shifts the optimum process configuration away from the highest GWP-per-dollar input. In this case, that input is natural gas, and LCA favours energy efficiency or fuel substitution. More generally, the results have shown that *the proper integration of LCA in a process optimization context requires careful consideration of all low-abatement-cost background emissions*. These emissions, which are expected to disappear once taxed, are best avoided until then with *green procurement* and not with overinvestment in process modifications. In order to avoid potential distortions when the process is optimized separately from the procurement, *it is recommended by default to exclude all background emissions that have an unknown abatement cost.*

5.2.5 Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the financial support of the industrial partners of the International Chair in Life Cycle Assessment (a research unit of the CIRAIG) and especially GDF SUEZ for the permission to use the LCA results. This research was also funded by a Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) graduate scholarship and the Fonds de recherche du Québec – Nature et technologies (FQRNT).

5.2.6 References

- [1] ISO 14040. Environmental management - Life cycle assessment - Principles and framework. Geneva, Switzerland: International Standards Organisation, 1997.
- [2] Hugo A, Pistikopoulos EN. Environmentally conscious long-range planning and design of supply chain networks. *Journal of Cleaner Production* 2005;13:1471-91.
- [3] Azapagic A. Life cycle assessment and its application to process selection, design and optimisation. *Chemical Engineering Journal* 1999;73:1-21.
- [4] Li H, Marechal F, Burer M, Favrat D. Multi-objective optimization of an advanced combined cycle power plant including CO₂ separation options. *Energy* 2006;31:3117–34.
- [5] Azapagic A, Clift R. The Application of Life Cycle Assessment to Process Optimisation. *Computers and Chemical Engineering* 1999;23:1509-26.
- [6] Azapagic A, Clift R. Life Cycle Assessment and Multiobjective Optimisation. *Journal of Cleaner Production* 1999;7:135-43.
- [7] Martinez P, Eliceche AM. Multi Objective Optimization Using Life Cycle Environmental Impact and Cost in the Operation of Utility Plants. *Computer Aided Chemical Engineering* 2009;27:1869-74.
- [8] Luterbacher JS, Fröling M, Vogel F, Marechal F, Tester JW. Hydrothermal Gasification of Waste Biomass: Process Design and Life Cycle Assessment. *Environ. Sci. Technol.* 2009;43:1578–83.

- [9] Guillen-Gosalbez G, Grossmann IE. A global optimization strategy for the environmentally conscious design of chemical supply chains under uncertainty in the damage assessment model. *Computers and Chemical Engineering* 2010;34:42-58.
- [10] Gerber L, Gassner M, Marechal F, 2009. Integration of LCA in a thermo-economic model for multi-objective process optimization of SNG production from woody biomass. In: Jezowski J, Thullie J, editors. 19th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Cracow, Poland. Oxford: Elsevier, 2009. p. 1405-10.
- [11] Frischknecht R, Jungbluth N, Althaus HJ, Doka G, Dones R, Heck T, et al. The ecoinvent Database: Overview and Methodological Framework. *International Journal of Life Cycle Assessment*. 2005;10:3-9.
- [12] Bernier E, Marechal F, Samson R. Multi-Objective Design Optimization of a Natural Gas Combined Cycle with Carbon Dioxide Capture in a Life Cycle Perspective. *Energy* 2010;35:1121-8.
- [13] Bolliger R, Favrat D, Marechal F. Advanced Power Plant Design Methodology using Process Integration and Multi-Objective Thermo-Economic Optimisation. In: *Proceedings of ECOS 2005*, Trondheim, Norway, 2005. p.777-84.
- [14] Simbolotti G. CO₂ Capture & Storage. IEA Energy Technology Essentials. Paris: International Energy Agency 2006;4. Fact Sheet ETE01. See also: <http://www.iea.org/Textbase/techno/essentials.htm>
- [15] US EPA. Report on U.S. Methane Emissions 1990-2020: Inventories, Projections, and Opportunities for Reductions, report no. 430-R-99-013. Washington, DC: Environmental Protection Agency, 1999.
- [16] Gassner M, Baciocchi R, Marechal F, Mazzotti M. Integrated design of a gas separation system for the upgrade of crude SNG with membranes. *Chemical engineering and processing* 2009;48:1391-404.
- [17] Gassner M, Marechal F. Thermo-economic process model for thermochemical production of Synthetic Natural Gas (SNG) from lignocellulosic biomass. *Biomass and Bioenergy* 2009;33:1587-604.

5.3 Résultats complémentaires

5.3.1 Relation entre la surestimation des émissions inévitables et les pertes potentielles qui en découlent

Une conclusion importante de la section précédente est qu'il est important de départager les émissions d'arrière-plan évitables et inévitables, dans un contexte d'optimisation d'un procédé, si on veut les intégrer tout en minimisant le risque d'empirer la prise de décisions. En effet, lorsque 50 % ou plus de ces émissions sont évitables, mais que l'algorithme d'optimisation les considère inévitables, les émissions probables (à l'arrière-plan après internalisation) deviennent alors autant surestimées avec l'ACV qu'elles auraient été sous-estimées sans l'ACV, ce qui annule tout gain de précision apporté par l'ACV. On se retrouve alors avec une situation, sur la Fig.5.9, où le triangle gris devient plus grand que le triangle noir. Il existe alors une large plage de niveaux de taxe où la décision prise avec ACV (ne pas capturer le CO₂, afin d'éviter des émissions en arrière-plan qui n'auraient même pas eu lieu) est moins bonne que la décision prise sans ACV (capturer le CO₂). Cette mauvaise décision engendre une perte économique et environnementale importante, vu qu'il faut alors payer une taxe sur de grandes quantités de CO₂ non capturé.

Cet exemple de la Fig.5.9 laisse entrevoir l'existence d'une relation entre le degré de sous-estimation ou de surestimation des émissions inévitables en arrière-plan, et le gain ou la perte économique qu'on peut attendre en introduisant les émissions d'arrière-plan dans le calcul des fonctions-objectifs à optimiser. Cette relation est illustrée à la Fig.5.12, pour le cas simplifié d'une optimisation avec un seul objectif, soit le coût incluant des taxes sur le carbone, et une seule variable de décision, soit le degré d'investissement dans l'efficacité énergétique. De plus, la relation entre l'investissement et la consommation énergétique est supposée quadratique aux environs de l'optimum. En l'absence de discontinuité, cette hypothèse est toujours valable pour les petites variations puisqu'il s'agit simplement des premiers termes d'une série de Taylor. La courbe pleine montre alors le coût lorsque la quantité d'émissions réellement taxées est correctement estimée, et chaque courbe pointillée montre le coût apparent lorsque la modélisation utilise une quantité différente d'émissions en arrière-plan, pour l'intrant énergétique.

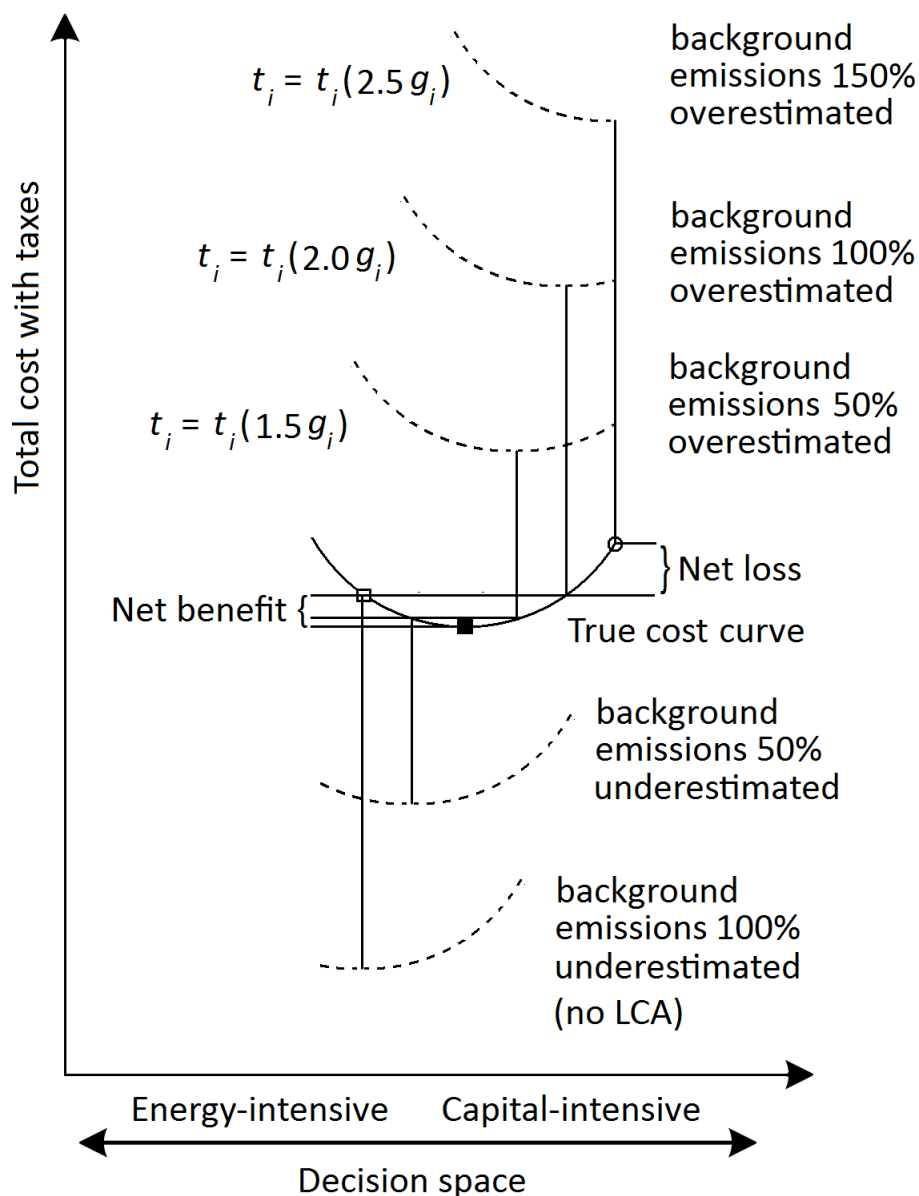


Figure 5.12 : Modèle du bénéfice ou de la perte liée à la surestimation ou la sous-estimation des émissions en arrière-plan

Relativement à la courbe pleine, chaque courbe pointillée est inclinée vers la gauche ou vers la droite, selon que les taxes sur l'intrant énergétique sont sous-estimées ou surestimées. (L'ajout d'une composante linéaire à une courbe quadratique donne l'effet d'une simple translation dont l'amplitude est proportionnelle au niveau de taxe.) La position du point de coût apparemment minimal est indiquée par un carré blanc dans le cas où les émissions en arrière-plan sont

négligées, par un carré noir dans le cas où elles sont correctement estimées, et par un cercle blanc dans le cas où elles sont surestimées de 150 %, ce qui correspond à une situation où 60 % des émissions inventoriées dans une ACV s'avèrent facilement évitables. Ces points sont rapportés sur la courbe pleine, c'est-à-dire en incluant les vraies taxes. On voit alors apparaître une relation linéaire entre l'erreur d'estimation des émissions en arrière-plan et l'erreur de décision (position sur l'axe horizontal), elle-même proportionnelle à la consommation d'énergie.

Sur la Fig.5.12, le bénéfice réalisable par l'apport de l'ACV correspond à l'écart vertical entre le carré blanc et le carré noir. De ce bénéfice, 75 % est réalisable lorsque l'ACV estime au moins 50 % de la totalité des émissions, ou à l'inverse lorsqu'au plus 33 % des émissions inventoriées sont facilement évitables (surestimation de 50 %). Le bénéfice est complètement perdu lorsque 50 % des émissions inventoriées sont facilement évitables (surestimation de 100 %). À 60 % évitables (surestimation de 150 %), la perte nette revient à 125 % du bénéfice. Cette relation entre l'erreur d'estimation et le bénéfice, elle-même quadratique comme on peut le voir sur la Fig.5.12, cause donc une amplification rapide des pertes potentielles lorsque la problématique des émissions évitables en arrière-plan est mal prise en compte.

La Fig.5.12 est généralisable à plusieurs variables de décision, vu que la série de Taylor est elle-même généralisable. Ainsi, le gradient du bénéfice après taxes dans l'espace de décision étant nul aux environs de l'optimum, il y aura encore une relation quadratique entre l'estimation des émissions en arrière-plan et le bénéfice réalisable par l'apport de l'ACV, tant que la contribution des taxes sur les émissions en arrière-plan ne représente qu'une petite variation des coûts totaux. La preuve analytique en est laissée aux plus motivés.

L'ajout des composantes d'ordre supérieur à la série de Taylor donnera une amplification encore plus dramatique des pertes potentielles, ce qui justifiera encore davantage de préférer la sous-estimation à la surestimation grâce à la recommandation donnée à la section 5.2.3.1. Ainsi, en considérant plusieurs types d'émissions comme étant évitables par défaut (la Fig.6.5 permet d'identifier lesquels), le surinvestissement dans l'efficacité énergétique peut être évité, de même que d'autres mauvaises décisions coûteuses. L'effort de collecte de données peut alors être dirigé vers la recherche d'émissions inévitables, ou vers l'amélioration du modèle des coûts, selon ce qui représente davantage d'incertitude absolue et donc le plus grand risque de pertes, plutôt que dirigé vers l'inventaire d'émissions dont la fraction évitable est probablement élevée.

5.3.2 Application au choix du taux de capture

Comme indiqué à la section 5.2.3.3, le coût apparent de capturer 3 % de CO₂ additionnel (93 % au lieu de 90 %) peut être supérieur ou inférieur à mac_{CCS} (le coût pour capturer les premiers 90 %), selon que les émissions en arrière-plan sont considérées ou non dans le calcul. Cela fournit donc un bon exemple de ce qui est illustré à la Fig.5.12. En effet, la configuration à 93 % peut être considérée intensive en énergie, alors que la configuration à 90 % peut être considérée intensive en capital, car les deux configurations utilisent exactement le même équipement, sauf pour une différence de hauteur d'absorbeur de 17 %. Comme la capture additionnelle se fait alors avec un investissement minime, cela correspond à une utilisation plus efficace du capital.

La Table 5-5, basée sur la nomenclature de la section 5.2, illustre en détails comment on peut arriver à un calcul erroné de mac_{CCS} en omettant les émissions en arrière-plan. Huit calculs différents de mac_{CCS} sont illustrés, avec c_{el} et g_{el} divisés en contributions provenant du gaz naturel et du capital (regroupé), pour chacune des six configurations pouvant entrer dans ce calcul. La contribution de $g_{handling}$ est considérée sans effet et n'est pas affichée car le choix du taux de capture n'affecte presque pas la quantité de CO₂ à transporter par unité de CO₂-équivalent évité.

Table 5-5 : Contribution des capitaux et du combustible au coût d'évitement de six configurations

y_1		$CCS0$	$CCS90$	$CCS93$	$CCS0$	$CCS90$	$CCS93$
y_2	Unité	$FNG0$	$FNG0$	$FNG0$	$FNG21$	$FNG21$	$FNG21$
c_{el}	\$ / MWh	58.80	78.15	78.84	58.96	78.32	79.01
$g_{el,noLCA}$ (Eq.5.3)	kg / MWh	360.00	38.92	27.39	360.00	38.92	27.39
$g_{el,LCA}$ (Eq.5.4)	kg / MWh	433.68	124.49	113.47	418.23	107.47	96.38
Capital dans c_{el} ^a	\$ / MWh	8.80	14.19	14.33	8.80	14.19	14.33
Capital dans $g_{el,LCA}$	kg / MWh	0.760	0.913	0.925	0.760	0.913	0.925
FNG dans c_{el}	\$ / MWh	46.80	51.55	51.79	46.96	51.72	51.96
FNG dans $g_{el,LCA}$	kg / MWh	72.90	80.30	80.67	57.45	63.28	63.58
Δ Capital/ $\Delta g_{el,noLCA}$ ^a	\$ / ton	-	16.79	16.63	-	16.79	16.63
Δ FNG/ $\Delta g_{el,noLCA}$	\$ / ton	-	14.79	15.00	-	14.82	15.03
$mac_{j,noLCA}$ (Eq.5.8)	\$ / ton	-	60.250	60.246^b	-	60.299	60.296
$mac_{j,LCA}$ (Eq.5.9)	\$ / ton	-	62.567	62.581	-	62.302^c	62.312

^a Basé sur le taux de dépréciation horaire de l'usine NGCC (C_d) ; le Δ est relatif à la configuration sans capture correspondante ($y_1 = CCS0$, $y_2 = y_2$)

^b Valeur la plus basse sans ACV; la capture de 93 % apparaît donc préférable par 0,004 \$ / ton

^c Valeur la plus basse avec ACV (= mac_{CCS}) confirmant que la capture de 90 % est préférable

Ainsi, la capture additionnelle de 3 % paraît avantageuse sans ACV puisqu'entre l'économie du capital à amortir et l'achat de combustible additionnel, quelques fractions de cent (¢) sont économisées par tonne d'émissions de CO₂ localement évitée. Cependant, ce combustible additionnel est associé à une quantité importante d'émissions en arrière-plan, tel qu'indiqué à la section 5.2.3.3, alors que l'utilisation plus efficace du capital correspond de son côté à des émissions négatives en arrière-plan, mais 25 fois moindres (0.012 kg CO_{2eq}/MWh pour le capital, comparé à 0.37 kg CO_{2eq}/MWh pour le gaz naturel, dont 0.07 kg évitables), ce qui n'arrive pas à compenser. On remarque ici que le chiffre 25 est du même ordre que le carré du ratio entre le t_i de l'intrant énergétique (t_{FNG}) et celui des intrants de capital (t_{infra} , t_{SS}), selon la Table 5-2.

Ramené sur la base d'une tonne d'émissions de CO₂ évitée sur le cycle de vie plutôt que localement, le faible gain se transforme en perte de plus de 1¢ par tonne. L'ACV favorise donc la configuration la plus efficace énergétiquement, soit la capture de 90 %. Toutefois, comme mentionné dans la section 5.2.3.3, le gain net attribuable à l'ACV est beaucoup moins intéressant dans ce cas-ci que dans le cas illustré à la Fig.5.9 (près de 1 \$/MWh), alors que d'autres incertitudes (sur le prix du gaz, sur le taux d'intérêt, *etc.*) occupent toujours la même place. On peut donc se demander, pour faire le meilleur choix possible entre la capture de 90 % ou 93 %, s'il ne vaudrait pas mieux consacrer le même effort à la réduction de ces incertitudes plutôt qu'à l'ACV. Cela voudrait dire que l'ACV serait davantage utile pour les grands choix discontinus (capturer le CO₂ ou non) que pour les détails incrémentiels de conception comme la hauteur de l'absorbeur.

Par contre, d'un point de vue théorique, il est intéressant de vérifier si la présence d'émissions évitables en arrière-plan peut aussi affecter le choix entre la capture de 90 % ou 93 %. Cet effet est sans doute petit, de la même façon que le triangle gris est plus petit que le triangle noir sur la Fig.5.9, vu que la majorité des émissions est inévitable dans ce cas-ci. En observant attentivement la Table 5-5, on remarque que la configuration avec capture de 90 % perd 0,004 \$/tonne CO_{2eq} de son avantage sur la configuration avec capture de 93 % lorsqu'on considère les émissions évitables [(62,581-62,567)-(62,312-62,302) = 0,004]. Il serait donc possible, en théorie, de montrer qu'une configuration intermédiaire avec capture de 91 % ou 92 % pourrait être avantageuse si on considère les émissions en arrière-plan, mais redevenir désavantageuse si on considère que ces émissions sont en partie évitables. Toutefois, le gain net du meilleur choix risque de ne pas être particulièrement intéressant vu qu'il serait du même ordre (0,004 \$/tonne CO_{2eq}).

CHAPITRE 6. OPTIMISATION DU CYCLE DE VIE DES PROCÉDÉS ÉNERGIVORES À L'AIDE DES ÉCO-COÛTS (RÉSULTATS ENVIRONNEMENTAUX)

Ce chapitre contient le dernier article inclus avec cette thèse. Il a été soumis à la revue *International Journal of LCA* le 10 novembre 2011. La référence complète est donnée dans l'annexe 2.3. La lettre à l'éditeur qui accompagne l'article mentionne que celui-ci a été retranscrit dans cette thèse, tel que soumis.

6.1 Présentation de l'article

Cet article, contrairement aux deux précédents, s'adresse à la communauté de l'ACV. Plutôt que d'examiner ce que l'ACV peut apporter aux résultats d'une optimisation, l'article s'intéresse plutôt à ce que l'optimisation peut apporter pour mettre les résultats d'ACV en contexte, d'autant plus que l'ACV doit souvent répondre à des questions pouvant effectivement être formulées comme un problème d'optimisation ; par exemple, comparer des scénarios pour identifier celui ayant le moins d'impacts. En particulier, l'utilisation de facteurs de pondération basés sur des coûts d'évitement optimisés facilite l'intégration des résultats d'ACV dans une optimisation, en plus de présenter plusieurs avantages en tant que méthode de score unique pour l'ACV en général. La présentation des résultats environnementaux du cas d'étude sert alors principalement à illustrer le propos. Il est à noter que les références à Bernier *et al.* (2008; 2010; 2012) correspondent respectivement aux sections A3.2, 4.2 et 5.2 de cette thèse.

6.2 Life Cycle Optimization of Energy-Intensive Processes Using Eco-costs

Etienne Bernier, François Maréchal, Réjean Samson

Keywords: Optimization, eco-cost, prevention cost, avoidance cost, weighting, internalization, CO₂ capture

Purpose. This study provides a general methodology to integrate LCA into a single- or multi-objective process design optimization context. It uses specific weightings for foreground and preventable and unpreventable background emissions in different impact categories. It is illustrated for a natural gas combined cycle power plant with three scenarios to reduce its carbon

dioxide emissions: CO₂ capture and sequestration or fuel substitution with biogas or synthetic gas from wood.

Methods. Because the opportunity to prevent emissions *elsewhere* is an implicit part of any process design decision space, the optimal solution cannot waste such opportunities and is shown to minimize total life cycle costs, including emission avoidance costs based on the optimal combination of prevention and compensation measures in the background system. To illustrate this using the power plant LCA; background emissions are taken from the *ecoinvent* database, their compensation costs are derived from the *Ecocosts 2007* impact assessment method and their prevention costs are estimated from the literature. The calculated avoidance costs (weightings) then show how the background system shapes the final choice of scenario.

Results and discussion. Unless prevention and compensation measures are applied, all three CO₂ reduction options partially shift environmental burdens to the background system. The corresponding minimum avoidance cost is highest overall for the biogas option, thus putting it at a disadvantage.

Energy efficiency is important to minimize total avoidance costs since they are dominated by background CO₂ for a vast majority of *ecoinvent* processes. To design any system that relies exclusively on these processes as inputs, using a CO₂-only background inventory simplifies prevention cost data gathering without being distortive during optimization, while the non-CO₂ background inventory is more useful later, for procurement decisions.

Conclusions. The proposed methodology ensures all types of design decisions integrate LCA without incorrectly assuming all emissions in the background system to be unavoidable. Within a context of future emission taxes or tradable permits, it adequately minimizes the total after-tax cost passed on by suppliers – a marketable benefit of LCA. Otherwise, it avoids over-investing in design modifications and wasting the opportunity to later adopt a sensible *green procurement* policy.

Recommendations. Since many LCA studies are equivalent to design optimization problems, the proposed weighting methodology provides a single-score impact method relevant to decision-making as well as a straightforward approach to LCA interpretation in terms of detailing the optimal combination of applicable design modifications, prevention measures and compensation measures.

6.2.1 Introduction

From a process designer's perspective, adopting a strategy that considers the environment as a *design objective* and not merely as a *constraint on operations* is useful to establish novel process configurations that achieve improved economic *and* environmental performances (Hugo and Pistikopoulos 2005), especially when economic and environmental performance criteria are optimized simultaneously from a life cycle perspective (Azapagic 1999). LCA becomes an effective evaluation tool to determine whether different process configuration iterations shift environmental impacts from one life cycle stage to another (raw materials extraction, transport, transformation, use, disposal etc.) or from one impact category to another (climate change, acidification, ecotoxicity, eutrophication etc.) during optimization.

However, a single-score LCA method alone cannot determine a unique optimal design solution because there is no consensus on weighting emissions with different prevention costs and/or those belonging to different impact categories. For example, when optimizing a power plant design, it is impossible to choose between larger and smaller heat exchangers without first arbitrarily weighting climate change and metal depletion impacts. At the same time, it is impossible to choose between a fuel supply option with high but preventable life cycle CH₄ emissions and a fuel supply option with low but unpreventable life cycle CH₄ emissions without first arbitrarily weighting these different CH₄ emissions. *To specifically address these two issues, a new weighting methodology is required to properly integrate LCA into a design optimization context, particularly for energy-intensive processes.*

Multi-objective optimization (MOO) has been widely used with LCA in a design optimization context. LCA is typically performed first, and the optimization problem is then formulated as a function of decision variables in the design space. In the formulation, the environmental performance is evaluated using economic and LCA-based indicators (Azapagic 1999). The optimization algorithm then produces a set of Pareto-optimal configurations representing the best possible compromise between two or more indicators. However, when the number of LCA-based indicators is high (e.g. one for each mid-point impact category), the hyper-dimensional results become difficult to interpret. The number can be reduced without introducing arbitrary weightings using techniques that minimize the utopia point distance (Martinez and Eliceche 2009) or maximize the joint probability of meeting a series of emission targets (Guillen-Gosalbez

and Grossmann 2010). Also, since most impact categories are correlated for energy-intensive processes (Azapagic and Clift 1999), some indicators may be considered interchangeable but exceptions would go unnoticed. However, even if a consensus on the indicators and methods existed, MOO would still only delay the problem of weighting until after optimization.

Comparatively, the *eco-costs* weighting methodology can merge LCA-based costs with other costs, leading to a single optimization objective that yields a unique optimal design solution. For each impact category, eco-costs are defined as the marginal prevention costs at the (regional or global) negligible risk level using the best available technology not entailing excessive costs (Vogtländer 2000). Within a category, a substance-specific eco-cost is proportional to the characterization factor of a reputable impact method and unrelated to its own prevention cost. In effect, eco-costs form a prevention-cost-weighted single-score method that is more appropriate for action-driven, as opposed to awareness-driven, LCAs (Vogtländer 2000). Eco-costs therefore potentially address the issue of weighting different impact categories but not the issue of weighting more or less preventable emissions.

At this point, a distinction is made between *foreground* emissions, which are optimized directly by the process designer, and *background* emissions, which are considered remote from the design space, non-supplier-specific and therefore modeled by inventory databases such as *ecoinvent* (Frischknecht et al. 2005). By definition, *background* emissions can only be optimized by suppliers themselves (e.g. under the pressure of future taxes or tradable emission permits or a green procurement policy to be determined later by the process designer). To optimize *foreground* emissions without distortion (i.e. without under-utilizing inputs for which *greener* suppliers can later be found or for which existing suppliers will eliminate emissions if taxed later), preventable *background* emissions must be weighed differently. From a process designer's perspective, weighting background emissions paradoxically requires knowing *first* which ones would be prevented at the global optimum, when in practice they will be optimized *later* by others.

To work around this paradox, process design optimization can rely on a mitigation model based on generic prevention cost curves from the literature applied to *background* emissions. For example, our previous work (Bernier et al. 2008; Bernier et al. 2010; Bernier et al. 2012) evaluated the break-even CO₂ tax required to make an optimized post-combustion CO₂ capture

process profitable in a natural gas combined cycle (NGCC) power plant and showed that this break-even CO₂ tax appears increased when considering the taxable background CO₂ and CH₄ emitted by natural gas producers and CO₂ transporters. But when considering that natural gas producers can also reduce their emissions in the mitigation model, the break-even tax increase appears partially offset, which, in turn, could affect design decisions such as the preferred CO₂ absorber height. The method successfully handled preventable *background* emissions but did not consider impact categories other than climate change, and it did not link the mitigation model directly to a LCA weighting methodology.

This article provides a theoretical framework for weighting avoidable and unavoidable background emissions in a design optimization context. It shows that the least distortive weighting for each substance is related to its eco-cost and often too low to affect design decisions, regardless of the *concern* for the corresponding impact category. This general methodology is illustrated for the case of a NGCC plant with three CO₂ reduction options.

6.2.2 Theory

Life cycle optimization, as proposed in this study, starts with the straightforward observation that process design modifications aimed at reducing life cycle environmental impacts are not optimal in any meaningful sense if they waste the opportunity to avoid more impacts *elsewhere*. Indeed, global Pareto-optimality ultimately requires that all emissions be reduced up to the point at which the marginal prevention costs per unit of impact are globally uniform (Bernier et al. 2012). The optimal design is therefore necessarily dependent on the optimal combination of prevention and compensation measures applicable to the *background* emissions of each input (fuel, acid, steel, etc.). This optimal combination is illustrated in Fig.6.1 in terms of how prevention and compensation are tradable against each other (i.e. marginal prevention costs). Note that lowercase variables are always input-specific.

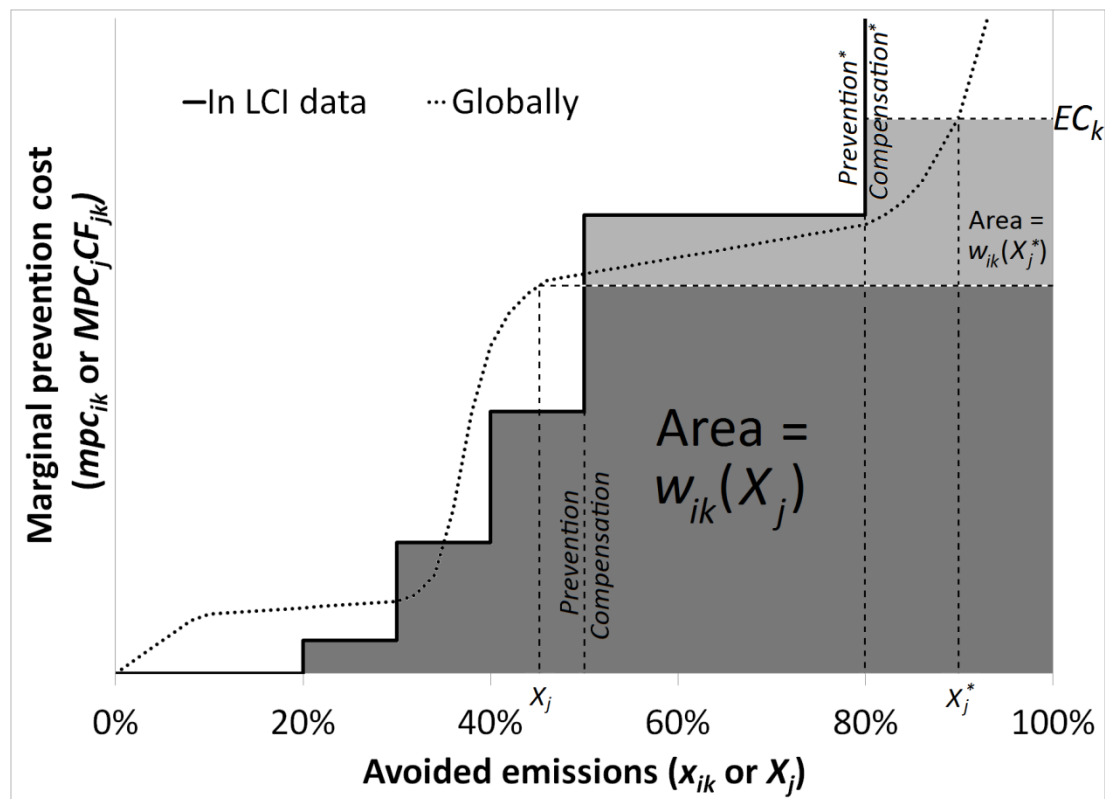


Figure 6.1 : Relationship between avoidance costs (w_{ik}) and hypothetical prevention costs

In Fig.6.1, $mpc_{ik}(x_{ik})$ indicates the marginal cost per unit mass to prevent the fraction x_{ik} of all substance k emissions throughout the input i background life cycle inventory (B-LCI). The discrete steps represent successive prevention technologies specific to input i ; for example, particulate filters for diesel trucks throughout the supply chain. Comparatively, the dashed curve $MPC_j(X_j) \cdot CF_{jk}$ indicates the marginal cost per unit impact to prevent the fraction X_j of all impacts in category j globally, including for substances other than k , multiplied by the characterization factor of substance k in category j . The soft steps represent widely applicable prevention technologies with similar costs in different regions; for example, particulate filters for all dust sources worldwide.

When the two curves reach the same height, prevention becomes advantageous *elsewhere at the margin* (compensation) rather than within the input i B-LCI. For example, when the global impact reduction target is 45% ($X_j = 0.45$), the optimal combination of measures for input i is 50% prevention and 50% compensation at an average avoidance cost represented by the dark area $w_{ik}(X_j)$ in Fig.6.1. When $X_j^* = 0.9$ instead, the optimal combination is 80% prevention and 20%

compensation at an average cost of $w_{ik}(X_j^*)$ – about 22% more. Here, the asterisk denotes the strict target called *negligible risk level* at which, by definition, $MPC_j \cdot CF_{jk}$ becomes the eco-cost (EC_k in Fig.6.1). In this case, EC_k is determined by whatever prevention technology is applicable to the 91st global impact percentile in category j . Mathematically, $w_{ik} (< EC_k)$ is expressed by:

$$w_{ik}(\vec{X}) = \int_0^1 \min \left\{ mpc_{ik}(x_{ik}), \max_j [MPC_j(\vec{X}) \cdot CF_{jk}] \right\} dx_{ik} \quad (\text{Eq.6.1}),$$

where \vec{X} is the vector of each global impact reduction target for all categories (a list of desired % reductions), while the \max_j function forbids double-counting between categories, as for eco-costs. Its calculation is straightforward as long as mpc_{ik} can be approximated with a generic continuous function instead of the complexity of recursively specifying suppliers and then determining specific emissions prevention technologies for thousands of processes in the B-LCI.

The w_{ik} can be summed over k to yield an input-specific avoidance cost w_i , or over i to yield a scenario-specific avoidance cost W_k for substance k :

$$w_i(\vec{X}) = \sum_k g_{ik} \cdot w_{ik}(\vec{X}) \quad (\text{Eq.6.2}),$$

$$W_k(\vec{y}_d, \vec{X}) = \sum_i M_i(\vec{y}_d) \cdot g_{ik} \cdot w_{ik}(\vec{X}) \quad (\text{Eq.6.3}),$$

where g_{ik} is the substance k final inventory for input i in the B-LCI database, M_i is the reference mass flow of input i for a given process configuration, and \vec{y}_d is a vector of discrete and continuous design decision variables (\vec{y}_d) such as reactor size, choice of material, operating temperature, number of compression stages, etc.

If c_i is the cost of input i , then ranking inputs by w_i / c_i is a good indicator of *hotspots*, and $c_i + w_i$ is a reasonable estimate of the future cost of input i after complying with the taxes or tradable emission permits pertaining to the \vec{X} targets. Although future prices are always uncertain, $c_i + w_i$ is assumed to be a better estimate than c_i alone, especially when markets for input i and compensation measures are competitive and ensure pricing proportional to the characterization factors *and* when c_i does not already internalize future compliance costs. Thus, if environmental damage is ever valued at more than $MPC_j(\vec{X})$ for each category, it will always be possible and optimal to spend $w_i(\vec{X})$ or $W_k(\vec{X})$ to avoid the corresponding emissions. This new information

helps to select a process configuration (\bar{y}_d) while expecting the suppliers to optimize their own impacts under the pressure of future taxes or tradable emission permits, or a *green procurement* policy to be determined later. It effectively provides a single-score LCA method for process design optimization.

In a single-objective process design optimization context, LCA is integrated by replacing c_i by $c_i + w_i$ and adding compensation costs for on-site (foreground) emission flows (F_k). The targets \bar{X} should match the expected emissions pricing or some set of voluntary targets, in which case the negligible risk levels (\bar{X}^*) are arguably the most coherent with a *green* design. Using \bar{X}^* , all emissions are valued at their eco-cost unless preventable at lower cost, and the optimization objective *obj* becomes:

$$obj = C(\bar{y}_d) + \sum_k F_k(\bar{y}_d) \cdot EC_k + \sum_i [c_i + w_i(\bar{X}^*)] \cdot M_i(\bar{y}_d) \quad (\text{Eq.6.4}),$$

where C represents non-input life cycle costs (wages, overhead etc.). On inspection, if the B-LCI is neglected ($w_i = 0$), the optimization algorithm will ignore *hotspot* inputs and likely yield a distorted configuration that over-utilizes them. Conversely, if the input-specific prevention costs (mpc_{ik}) are overestimated or removed from Eq.6.1, w_i will be too large in Eq.6.4 and the optimization algorithm will likely yield a distorted configuration that over-utilizes the inputs with emissions that are difficult to prevent, wasting resources that would have been better spent on the other inputs and additional prevention. Paradoxically, the level of distortion and waste could be worse with LCA than without, especially if w_i is overestimated by a factor of two or more. (Optimization based purely on LCA is distortive for similar reasons.) Consequently, an underestimation bias is recommended for all $mpc_{ik}(x_{ik})$ in order to guarantee that $c_i + w_i$ is a better future cost estimate than c_i despite uncertainties.

In a multi-objective optimization (MOO) context, certain environmental objectives are separated out of Eq.6.4 and considered independently. In addition to the benefit of thoroughly investigating on-site emissions, MOO is useful to consider separately the category for which the target uncertainty (ΔX_j) contributes the largest absolute uncertainty in Eq.6.4. Instead of a unique solution, this yields a Pareto-optimal set representing the best compromise between the objectives. (There is no real conflict between economic and environmental objectives since prevention costs always play a bridging role.)

In order to simultaneously optimize background and foreground emissions using MOO, procurement decision variables (y_{ik}) are required to model marginal prevention cost functions (mpc_{ik}). For example, the five mpc_{ik} steps in Fig.6.1 could be represented by five virtual suppliers for input i , with $y_{ik} = 5$ with the least emissions (g_{ik}) but accordingly more expensive (c_i). The n environmental objectives and the economic objective (obj_{n+1}) are then defined as:

$$\begin{aligned}
 obj_1 &= \sum_k \left[F_k(\bar{y}_d) + \sum_i M_i(\bar{y}_d) \cdot g_{ik}(y_{ik}) \right] CF_{1k} \\
 obj_2 &= \sum_k \left[F_k(\bar{y}_d) + \sum_i M_i(\bar{y}_d) \cdot g_{ik}(y_{ik}) \right] CF_{2k} \\
 obj_n &= \sum_k \left[F_k(\bar{y}_d) + \sum_i M_i(\bar{y}_d) \cdot g_{ik}(y_{ik}) \right] CF_{nk} \\
 obj_{n+1} &= \left\{ \begin{aligned} &C(\bar{y}_d) + \sum_k F_k(\bar{y}_d) \cdot [EC_k]_{j>n} \\ &+ \sum_i \left[c_i(\bar{y}_{ik}) + [w_i(\bar{X}^*)]_{j>n} \right] \cdot M_i(\bar{y}_d) \end{aligned} \right\}
 \end{aligned} \tag{Eq.6.5},$$

where each environmental objective is simply the LCA of the $(\bar{y}_{ik}, \bar{y}_d)$ iteration, and the economic objective considers only the remaining impact categories ($j > n$) to avoid double-counting. Note that the recommended underestimation bias implies the exclusion of all B-LCI emissions of unknown prevention cost.

Fig.6.2 illustrates a hypothetical dual-objective optimization ($n = 1$) with a decision space that includes seven process configurations (a - g) and three procurement options (1-3). As the global impact reduction target varies from the weakest ($X_j = 0$) to the strictest ($X_j = X_j^*$), the configurations a_1 , a_2 , a_3 , b_3 and c_3 successively minimize total life cycle costs ($MPC_j(X_j) \cdot obj_1 + obj_2$). Thus, MOO reveals that the a , b and c configurations are worthy of further consideration until the target X_j is specified. The others are worthless, even if Pareto-optimal, because a lower impact can be achieved at a better cost by compensation scenarios either between a_3 , b_3 and c_3 (solid line) or between c_3 and third parties guaranteed to provide opportunities at or below eco-cost (dashed line). Consequently, high-emissions suppliers (options 1-2) are likely to lose business, except for very weak targets, while manufacturers of low-emissions equipment (configurations d - e) are likewise out of luck because they over-emphasize expensive design modifications.

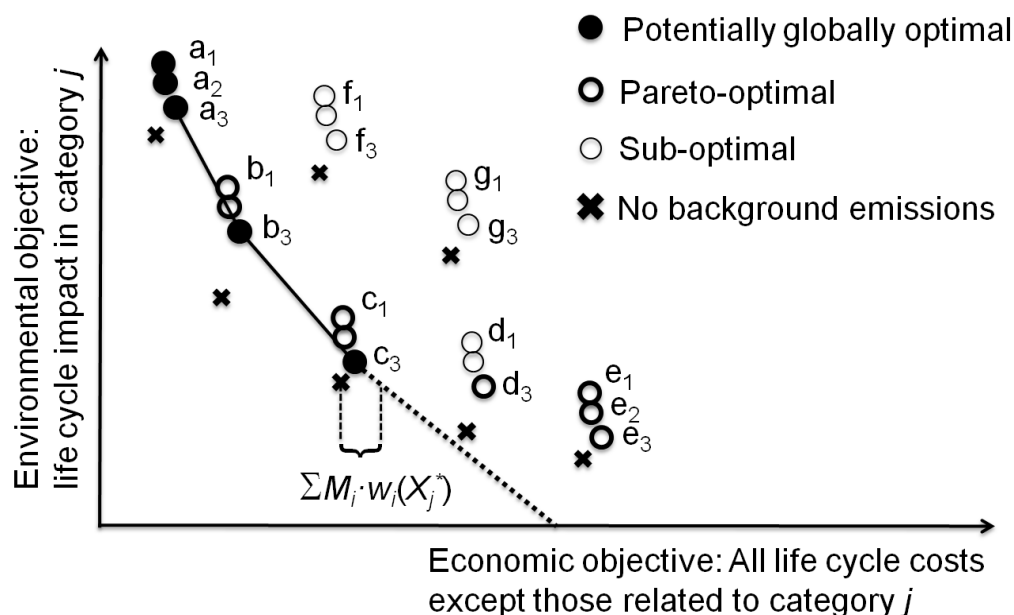


Figure 6.2 : Hypothetical multi-objective optimization result

Fig.6.2 also illustrates how both objectives would be underestimated when the B-LCI is neglected (x-marker). In this case, configuration *b*, which shifts a disproportionate amount of impact to the background ($b_1 \gg b_x$), incorrectly appears preferable to *c* for all possible targets, and LCA is required in order to decide. If a strict target is implemented after design but before construction, suppliers are likely to adopt option 3 and then pass down all their prevention costs, taxes and permit costs. Building *c* instead of *b* can then lead to net monetary savings directly attributable to LCA that were shown to exceed \$1/MWh in one instance (Bernier et al. 2012).

If *no* target is implemented, then life cycle optimization (single or multi-objective) at least provides process designs that are coherent with a voluntary target. The corresponding optimal combination of prevention and compensation measures can still be implemented later, with a *green procurement* policy providing sufficient incentives for suppliers to reduce their own emissions.

Beyond process design, life cycle optimization applies to any type of LCA-based decision-making, as long as the opportunity to avoid more impact elsewhere is considered an implicit part of the decision space. As a weighting factor in LCA, w_{ik} (Eq.6.1) does not require that a controversial value be assigned to environmental damage since it is constructed in a constrained-

damage paradigm. For the purpose of deciding between equally available re-design, prevention and compensation options, w_{ik} provides a reasonable basis for a relevant single-score method that reflects the additional problem of pollutants that are difficult to prevent. This type of method should impart less relative prominence to low-flow high-damage pollutants that are typically easier to prevent (per unit impact) since prevention costs (per unit mass) are unrelated to damage.

6.2.3 Methods

The basic method of this study is to provide upper-bound and lower-bound avoidance cost estimates (w_{ik}) for the B-LCI of a natural gas combined cycle (NGCC) power plant with CO₂ capture and alternate fuel options and investigate the relevance for decision-making.

6.2.3.1 Case study description and problem formulation

The base case is a 400MW NGCC power plant such as the General Electric STAG 107H/109H with three options to reduce its flue gas CO₂ emissions: 90% post-combustion CO₂ capture, fuel substitution with synthetic natural gas (SNG) from wood and fuel substitution with a biogas mix. Power plant operation is assumed to be independent of fuel type. Operation with an optimized CO₂ capture system is assumed to reduce the output to 363 MW (Bernier et al. 2010; Bernier et al. 2012). Fuel blends are not considered directly but can be interpolated from the results.

The post-combustion CO₂ capture system uses reversible absorption with monoethanolamine (MEA). Its design was optimized in our previous study (Bernier et al. 2010), emphasizing thermal integration, using a state-of-the-art simulation platform with an evolutionary MOO algorithm (Bolliger et al. 2005). The resulting Pareto set, including the 90% capture configuration selected for this study, featured flue gas recirculation, a relatively wide absorber and steam generation below the MEA reboiler temperature. The 90% capture configuration had the lowest prevention cost for climate change, at \$60.25/ton CO_{2eq} from a *local* perspective and \$62.30/ton CO_{2eq} from a *life cycle* perspective (approximately €0.045/kg CO_{2eq}), based on costs of \$7.80/GJ for natural gas and \$20/ton for CO₂ transportation and sequestration (Bernier et al. 2010).

Table 6-1 summarizes the input flows (M_i), equivalent to LCA reference flows, per MWh of net electricity output for all four scenarios in this study. Note that *capture* applies to all CO₂ passing

through capture equipment, while *transport* only applies to CO₂ passing through transport and sequestration. Additional CO₂ capture in the supply chain (B-LCI) is considered in section 6.2.3.4.

Table 6-1 : Input flows per MWh of net electricity output (reference flows)

Input	Scenario	Unit	Base case	90% capture	SNG	Biogas
NGCC power plant chemicals and infrastructure (M_{NGCC})		GJ/MWh	6.00	6.61	6.00	6.00
Fossil natural gas (M_{FNG})		GJ/MWh	6.00	6.61	0.00	0.00
Synthetic natural gas (M_{SNG})		GJ/MWh	0.00	0.00	6.00	0.00
Biogas mix (M_{biogas})		GJ/MWh	0.00	0.00	0.00	6.00
Capture chemicals and infrastructure ($M_{capture}$ @ 56 kg/GJ)		kg CO ₂ /MWh	0	370	0	0
Transportation and sequestration ($M_{transport}$ @ 50.4 kg/GJ)		kg CO ₂ /MWh	0	333	0	0

Fine-tuning the capture system configuration (absorber height, etc.) would be a possible optimization problem formulation. However, this study considers ranking the four scenarios to be an adequate optimization problem with a simple and illustrative design space.

6.2.3.2 Life cycle emissions inventory model

This study did not acquire new primary LCA data, since it investigates the role of *background* processes. Only NGCC flue gas emissions are considered as a *foreground* process, with flows (F_k in Eq.6.4 and Eq.6.5) for all scenarios assumed to be identical to the *ecoinvent v2.0* process *Natural gas, burned in combined cycle plant, best technology/RER* except for fossil CO₂, estimated at 56 kg/GJ for the base case (as in *ecoinvent*), 5.6 kg/GJ for the 90% capture scenario and 0 kg/GJ for the biogenic fuels.

Background emissions for 1 MWh (functional unit) of net electricity output (reference function) are compiled using the input mass flows M_i (reference flows) in Table 6-1 and the following B-LCI for each input (g_{ik}): for the three fuel production cycles ($i = FNG, SNG, biogas$), the B-LCI are the *ecoinvent v2.0* processes *Natural gas, high pressure, at consumer/RER*; *Methane, 96 vol.-%, from synthetic gas, wood, at plant/CH* and *Methane, 96 vol.-%, from biogas, high pressure, at*

consumer/CH, respectively. For the NGCC power plant infrastructure and chemicals ($i = \text{NGCC}$), the B-LCI is based on a modified version of the *ecoinvent v2.0* process *Natural gas, burned in combined cycle plant, best technology/RER*, in which the fuel production cycle and the on-site atmospheric emissions have been removed to avoid double-counting.

The CO₂ capture B-LCI ($i = \text{capture}$ and $i = \text{transport}$) are taken from an in-house study based on proprietary data from GDF SUEZ and the *ecoinvent v1.2* database in which the functional unit was the production of 1 kWh of electricity from a 1 GW NGCC power plant model that differs from the one in this study, with or without 90% CO₂ capture using MEA. The original data, also used in our previous studies (Bernier et al. 2008; Bernier et al. 2010; Bernier et al. 2012), covered several B-LCI elements including fuel production, power plant construction and operation, absorbents, water, CO₂ drying, recompression and sequestration, infrastructure, transportation, disposal, and more. The results for 1 kWh with and without CO₂ capture were expressed as vectors of 33 and 14 elementary processes, respectively. Of the 19 processes unique to capture, the present study assigns 7 to $i = \text{capture}$ and the other 12 to $i = \text{transport}$. A conversion factor of 881 kWh/MWh compensates the higher NGCC thermodynamic efficiency in this study.

6.2.3.3 Impact assessment and eco-cost calculation methodologies

This study uses the *Ecocosts 2007* impact assessment method developed by Vogtländer et al. (2000; 2001; 2002) and available at www.ecocostsvalue.com. Using *SimaPro 7.2.4* software, this method expresses LCA results directly in eco-cost (€). The seven impact categories considered are:

- GWP for climate change: The characterization factors are based on 100-year horizon global warming potentials from the Intergovernmental Panel on Climate Change. The eco-cost is €0.135/kg CO_{2eq}, based on the marginal technology of offshore wind energy substitution. Note that eco-costs exceed the cost of CO₂ capture technology, which occurs earlier in the global prevention cost curve (MPC_{GWP}).
- ACID for acidification: The characterization factors are from the University of Leiden CML-2 method. The eco-cost is €14.19/kg NH_{3eq} (€7.55/kg SO_{2eq}), based on the marginal technology of zero emission stables.

- EUTRO for eutrophication: The characterization factors are from the University of Leiden CML-2 method, excluding atmospheric emissions of NO_x and NH_3 to avoid double-counting with ACID. The eco-cost is €3.60/kg $\text{PO}_{4\text{eq}}$, based on the marginal technology of sustainable manure processing.
- SMOG for photochemical oxidation: The characterization factors are from the University of Leiden CML-2 method. The eco-cost is €8.90/kg $\text{C}_2\text{H}_{4\text{eq}}$, based on the marginal technology of low-emissions gasoline engines and refineries.
- DUST for particulate emissions (winter smog): The characterization factors are from the University of Michigan IMPACT 2002+ method. The eco-cost is €27.44/kg $\text{PM}_{2.5\text{eq}}$, based on the marginal technology of low-emissions diesel engines.
- ECOTOX for aquatic ecotoxicity: The characterization factors are from the University of Michigan IMPACT 2002+ method. The eco-cost is €802/kg Zn_{eq} (€0.000572/kg TEG_{eq}), based on the marginal technology of galvanized steel substitution by corrosion-resistant coating systems.
- CANCER for carcinogens (human health): The characterization factors are from the University of Michigan IMPACT 2002+ method. The eco-cost is €33.0/kg PAH_{eq} (€0.00933/kg $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_{\text{eq}}$) based on the marginal technology of industrial hydrocarbon emissions mitigation. Note that many prevention measures for DUST also remove carcinogens, helping to keep their eco-costs low.

Some of the preceding information was obtained by personal communication with Prof. Vogtländer. To avoid double-counting with GWP, there are no eco-costs for ozone depletion in the *Ecocosts 2007* method. Also, this study does not consider resource eco-costs (water, land, energy, minerals, etc.) to avoid double-counting scarcity rents in current resource prices.

Note that debating the choice of marginal technologies in the *Ecocosts 2007* method is beyond the scope of this study. The assumption is that these technologies, combined with all imaginable lower-cost technologies, are sufficient to bring emissions to a globally safe level. Stricter targets would increase eco-costs and increase the importance of prevention (mpc_{ik}) over compensation (MPC_j) for avoidance (Eq.6.1), but would not necessarily significantly increase the resulting avoidance costs (w_{ik}). This is analogous to the situation in Fig.6.1, where a 100% target

difference ($X_j^* = 0.90$ vs. 0.45) only results in a 22% weighting difference because prevention costs for the next available segment are not far above the previous eco-costs. Since, in this case, the B-LCI consists mostly of manageable large-scale point sources, it is reasonable that only a small fraction of prevention costs would far exceed current eco-costs, limiting the influence of target controversies on weightings.

6.2.3.4 Estimation of background emissions weightings

This study considers separate upper and lower bounds for prevention costs (mpc_{ik}) and global emission reduction targets (\vec{X}) because of their significant uncertainties. The \vec{X} upper bound is given by the *Ecocosts 2007* method, while the lower bound is zero except for GWP because a minimum GWP reduction target is required to make the 90% CO₂ capture scenario profitable (€0.045/kg CO_{2eq}). Using Eq.6.1, maximum and minimum avoidance costs (w_{ik}) are then defined as:

$$\max w_{ik} = \int_0^1 \min \{ mpc_{ik}^{\max}(x_{ik}), EC_k \} dx_{ik} \quad (\text{Eq.6.6}),$$

$$\min w_{ik} = \int_0^1 \min \{ mpc_{ik}^{\min}(x_{ik}), 0.045CF_{GWPk} \} dx_{ik} \quad (\text{Eq.6.7}).$$

As indicated earlier, literature on generic prevention costs specific to industry segments is ideal to estimate the marginal prevention cost functions (mpc_{ik}) considering thousands of emissions in the *ecoinvent* database. For example, Fig.6.3 describes the CH₄ prevention cost for North American natural gas producers in general ($i = \text{FNG}$, $k = \text{CH}_4$) as estimated by the U.S. Environmental Protection Agency (1999). Each step corresponds to the successive implementation of low-bleed pneumatics, green completions, compressor blow-down gas recovery, etc. The average prevention cost is \$6.90/ton CO_{2eq} (min = max = €0.13/kg CH₄) for the first half and unknown (but higher) for the rest.

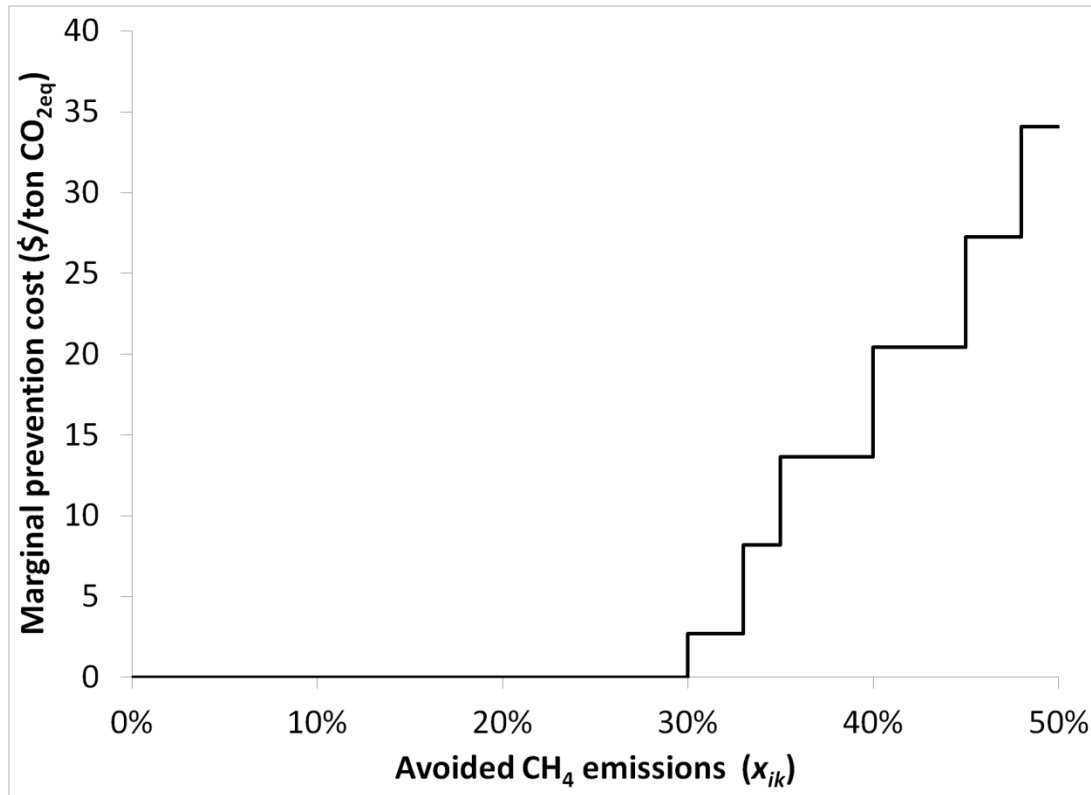


Figure 6.3 : Estimated prevention cost of CH₄ emissions in the natural gas industry sector

For the other large B-LCI contributors ($g_{ik} \cdot EC_k > \text{€}0.05/\text{GJ}$), the following observations are used to estimate prevention costs:

- (GWP) CO₂ from mobile, diffuse or small sources: Applicable capture technology is considered prohibitive ($mpc_{ik} > EC_k$ for the fraction of g_{ik} from such sources).
- (GWP) CO₂ from sequestration leaks: These emissions in the distant future represent questionable damage and/or their re-capture cost can be discounted ($mpc_{ik} \approx 0$ for the fraction of g_{ik} emitted from long-term leaks).
- (GWP) CO₂ from natural gas, synthetic gas and biogas purification: Purification provides highly concentrated CO₂ ready for sequestration at a cost potentially as low as €0.015/kg (Bernier et al. 2010; Simbolotti 2006) ($mpc_{ik} > \text{€}0.015/\text{kg}$ for the fraction of g_{ik} from natural gas purification). For example, if purification is done by membrane, the low-cost addition of a single stage allows for the simultaneous production of high-grade gas, high-grade CO₂ and an intermediate stream for combustion on-site (Gassner et al. 2009). The upper bound is uncertain because the applicable fraction of CO₂ in the *ecoinvent* data is also uncertain. The

capture of *biogenic* CO₂ is not considered at this point, but raises the possibility of negative prevention costs if sequestration is credited.

- (GWP) CO₂ from other sources: Based on the post-combustion capture technology presently studied, capture costs at least €0.045/kg for large-scale sources ($mpc_{ik} > €0.045/\text{kg}$ for the fraction of g_{ik} from other sources). The upper bound is uncertain because capture becomes increasingly prohibitive for smaller sources.
- (GWP) CH₄ from biogas purification: Significant resulting emissions can be avoided by low-cost flaring, by catalytic oxidation or by sending impure biogas directly to the NGCC plant ($mpc_{ik} \approx 0$ for the fraction of g_{ik} emitted during purification).
- (GWP) CH₄ from natural gas producers: Fig.6.3 already provides the first half of the prevention costs (€0.13/kg). For the other half, the prevention cost is at least €0.63/kg, which is the last step on Fig.6.3, with no upper bound ($mpc_{ik} > €0.38/\text{kg}$ on average for the fraction of g_{ik} that is from natural gas producers).
- (Many) CO, C₂H₄ and CH₄ from charcoal production: These combustible gases can be avoided by inexpensive combustion in excess O₂ ($mpc_{ik} \approx 0$ for the fraction of g_{ik} emitted during charcoal production).
- (ACID) SO_x and NO_x: The cost of flue gas desulfurization and selective catalytic reduction is low for large emitters that do not already use them. The upper bound is uncertain because the fraction of emissions in the *ecoinvent* data from such emitters is also uncertain. The lower bound is given by the reactant costs (lime and ammonia), about two orders of magnitude below eco-costs.
- (DUST) Particulates from wood gasifiers and diesel combustion (forestry equipment, offshore CO₂ compression stations, others): Prevention costs strongly depend on the exhaust gas initial dust concentration, which is difficult to estimate from the *ecoinvent* data (no bounds).
- (ECOTOX) Zn from canola cultivation: Such diffuse emissions of an essential nutrient from fertilizers and tire wear represent questionable damage in the distant future ($mpc_{ik} \approx 0$ for the fraction of g_{ik} emitted during cultivation).

- (Many) N_2O , NH_3 , NO_3 and PO_4 from canola cultivation: Data on the fertilizer management techniques specific to the *ecoinvent* dataset is insufficient to identify preventable or unpreventable emissions (no bounds).

Note that the preceding list is far from exhaustive and for illustrative purposes only. Also, SNG-related emissions will proportionally decrease as the technology matures and conversion efficiencies increase (Gassner et al. 2009; Gerber et al. 2009). Next generation gasification technologies could also substantially reduce NO_x and particulate emissions, but these reductions are not easily translated into substance-specific prevention costs.

6.2.3.5 Interpretation

In this study, LCA interpretation aims to determine the relative advantage of each scenario in terms of costs to avoid shifting environmental burdens to the background system. This is accomplished by manually comparing the scenario-specific avoidance costs (W_k), as would be done algorithmically in a larger design space. If *hotspot* inputs are identified for the impact categories that were not optimized in previous studies, then a design re-optimization is warranted.

6.2.4 Results

6.2.4.1 LCA results

Table 6-2 summarizes the LCA results using the *Ecocosts 2007* method. In the top section, the results are given for the inputs in Table 6-1 in traditional LCA units per thermal GJ. In the middle section, the results are given for the four scenarios in traditional LCA units according to the reference function. In the bottom section, the same results are given as eco-costs in €/MWh without any subsequent weighting.

Table 6-2 : LCA and eco-costs summary (bold = highest in category)

Impact category	GWP			ACID			EUTRO	SMOG	DUST	ECOTOX		CANCER
Unit	kg CO _{2eq}			kg SO _{2eq}			kg PO _{4eq}	kg C ₂ H _{4eq}	kg PM _{2.5eq}	kg TEG _{eq}		kg C ₂ H ₃ Cl _{eq}
Substance	CO ₂	CH ₄	Other	NO _x	SO _x	Other	All	All	All	Metal	Other	All
NGCC power plant infrastructure and chemicals (1 GJ)	0.1	0.0	0.0	0.000	0.001	0.000	0.0000	0.0000	0.0001	2	0	0.00
Fossil natural gas production (1 GJ)	7.5	3.9	0.0	0.016	0.023	0.001	0.0003	0.0013	0.0007	18	1	0.58
SNG production from wood (1 GJ)	9.7	1.0	0.8	0.080	0.020	0.012	0.0071	0.0092	0.0058	253	7	0.19
Biogas production from mix (1 GJ)	13.8	22.0	0.3	0.009	0.026	0.007	0.0003	0.0006	0.0009	26	1	0.13
Capture chemicals and infrastructure for CO ₂ (56 kg)	0.5	0.0	0.0	0.002	0.001	0.000	0.0000	0.0001	0.0003	2	0	0.00
Transportation and sequestration of CO ₂ (50.4 kg)	2.5	0.0	0.0	0.000	0.000	0.000	0.0000	0.0000	0.0000	3	0	0.00
Flue gas excluding CO ₂ (1 GJ foreground NGCC)	0.0	0.0	0.3	0.018	0.001	0.000	0.0000	0.0015	0.0005	0	0	0.03
Base scenario impact assessment (1 MWh)	381.6	23.9	2.1	0.207	0.141	0.009	0.0019	0.0175	0.0078	118	4	3.67
90% capture scenario impact assessment (1 MWh)	107.0	26.4	2.4	0.242	0.163	0.011	0.0026	0.0200	0.0110	161	7	4.07
SNG scenario impact assessment (1 MWh)	58.8	6.0	6.7	0.590	0.127	0.069	0.0428	0.0646	0.0383	1527	41	1.33
Biogas scenario impact assessment (1 MWh)	83.3	132.5	3.8	0.161	0.164	0.041	0.0019	0.0130	0.0092	165	5	0.95
Eco-costs EC_i (€/kg)	0.135			7.55			3.6	8.90	27.44	0.000572		0.00933
Base scenario eco-cost (€/MWh) Total: 58.20	51.52	3.22	0.28	1.56	1.07	0.07	0.01	0.16	0.22	0.07	0.00	0.03
90% capture scenario eco-cost (€/MWh) Total: 22.09	14.45	3.56	0.32	1.83	1.23	0.08	0.01	0.18	0.30	0.09	0.00	0.04
SNG scenario eco-cost (€/MWh) Total: 18.29	7.94	0.81	0.91	4.45	0.96	0.52	0.15	0.58	1.05	0.87	0.02	0.01
Biogas scenario eco-cost (€/MWh) Total: 32.89	11.25	17.88	0.52	1.22	1.24	0.31	0.01	0.12	0.25	0.09	0.00	0.01

Table 6-2 shows that 90% CO₂ capture increases the non-CO₂ impact by at least 10%, related to the decrease in power output and, to a lesser extent, to CO₂ transportation. SNG has the lowest total impact in GWP, but the highest in many categories because of gasification by-products and the production of charcoal and rape methyl ester for scrubbing.

When converting these impacts into eco-costs, the base case posts the highest eco-cost (€58.20/MWh), especially due to flue gas CO₂. The biogas scenario has the second highest eco-cost (€32.89/MWh), especially due to methane emissions during purification. However, avoidance cost calculations are required to translate these eco-costs into an optimal combination of prevention and compensation costs.

6.2.4.2 Avoidance costs (weightings)

Table 6-3 lists all B-LCI pollutants with a significant contribution in Table 6-2 ($g_{ik} \cdot EC_k > €0.01/\text{GJ}$), including their minimum and maximum avoidance costs (Eq.6.6, Eq.6.7) for each input. For each pollutant for each input, the largest data point (source localization) and its percentage contribution (within g_{ik}) are also identified. Table 6-3 shows that each pollutant is rather unique in terms of single-source contribution, total contribution and ease of prevention. Consequently, the ratio between avoidance costs and eco-costs can be as low as 0% to 0.6% (C₂H₄) and as high as 32% to 100% (CO₂ excluding long-term).

Table 6-3 : Avoidance costs for major pollutants (bold when maximum is lower than eco-cost)

Input	Category	Pollutant	$\frac{g_{ik}}{EC_k}$	Largest source	Contribution	EC_k	max w_{ik}	min w_{ik}
<i>i</i>	<i>j</i>	<i>k</i>	€/GJ	localization	% g_{ik}	€/kg	€/kg	€/kg
Natural gas production	GWP	CO ₂	1.01	Compressor stations	39%	0.135	0.135	0.043
	GWP	CH ₄	0.53	Pipelines	59%	3.38	1.76	0.38
	ACID	SO ₂	0.17	Sour gas turbine	77%	7.55	7.55	0.00
	ACID	NO _x	0.12	Compressor stations	45%	5.29	5.29	0.00
	DUST	Particulate	0.02	Diesel combustion (many)	61%	27.44	27.44	0.00
	ACID	H ₂ S	0.01	Upstream production	99%	14.19	14.19	0.00
	SMOG	C ₂ H ₆	0.01	Upstream production	46%	1.09	1.09	0.00
	CANCER	PAH	0.01	Upstream production	97%	33.00	33.00	0.00
CO ₂ transport sequestration	GWP	CO ₂	0.40	Sequestration leak	80%	0.135	0.023	0.008
	ACID	NO _x	0.02	Off-shore compressor	60%	5.29	5.29	0.00
	DUST	Particulate	0.01	Diesel combustion (many)	80%	27.44	27.44	0.00
	ACID	SO ₂	0.01	Coal power plants	33%	7.55	7.55	0.00
SNG production from wood	GWP	CO ₂	1.31	Diesel combustion (many)	35%	0.135	0.135	0.045
	ACID	NO _x	0.60	Gasification	53%	5.29	5.29	0.00
	DUST	Particulate	0.16	Diesel combustion (many)	42%	27.44	27.44	0.00
	ACID	SO ₂	0.15	Sulfuric acid production	20%	7.55	7.55	0.00
	GWP	CH ₄	0.13	Charcoal production	60%	3.38	1.35	0.00
	ECOTOX	Zn	0.12	Canola cultivation	46%	802	802	0.00
	GWP	N ₂ O	0.10	Canola cultivation	64%	40.23	40.23	0.00
	ACID	NH ₃	0.07	Canola cultivation	88%	14.19	14.19	0.00
	SMOG	CO	0.06	Charcoal production	44%	0.24	0.14	0.00
	EUTRO	NO ₃ ⁻	0.02	Canola cultivation	93%	0.36	0.36	0.00
	ACID	H ₂ S	0.02	Sanitary landfill	74%	14.19	14.19	0.00
	EUTRO	PO ₄ ⁻⁻⁻	0.01	Canola cultivation	23%	3.60	3.60	0.00
	SMOG	C ₂ H ₄	0.01	Charcoal production	99%	8.90	0.05	0.00
	GWP-odp	CFC-14	0.01	Aluminum for trailers	100%	998	998	0.00
Biogas mix production	GWP	CH ₄	2.98	Biogas purification	73%	3.38	0.90	0.00
	GWP	CO ₂	1.86	Boiler	66%	0.135	0.135	0.045
	ACID	SO ₂	0.20	Biogas purification	61%	7.55	7.55	0.00
	ACID	NO _x	0.06	Boiler	17%	5.29	5.29	0.00
	GWP	N ₂ O	0.04	Waste digest/compost	67%	40.23	40.23	0.00
	ACID	H ₂ S	0.03	Waste digest/compost	88%	14.19	14.19	0.00
	DUST	Particulate	0.02	Diesel combustion (many)	20%	27.44	27.44	0.00
	ACID	NH ₃	0.02	Waste digest/compost	93%	14.19	14.19	0.00
	ECOTOX	Cr	0.01	Electricity distribution	54%	259	259	0.00
NGCC infra chem	GWP	CO ₂	0.02	Diesel combustion (many)	38%	0.135	0.135	0.045

Fig.6.4, which combines the results of Table 6-2 and Table 6-3, shows the total *foreground* and *background* eco-costs for each scenario. For each pollutant, the maximum avoidance cost (max W_k) is indicated by removing the avoidable fraction in Fig.6.4. The minimum background avoidance cost (min W_k , not shown), as a fraction the maximum, is 32-33% for CO₂, 0-22% for CH₄ and negligible for all others. The real W_k values are somewhere in between, depending on the actual prevention costs and global impact reduction targets, and other uncertainties. Note that the min W_k for CO₂ and CH₄ combined is higher than the max W_k for all other substances combined, except for the SNG scenario. Avoiding background CO₂ and CH₄ is therefore costlier, and more important to the final choice of scenario, than avoiding other substances, even if the latter are considered so concerning that only the *negligible risk level* is deemed acceptable.

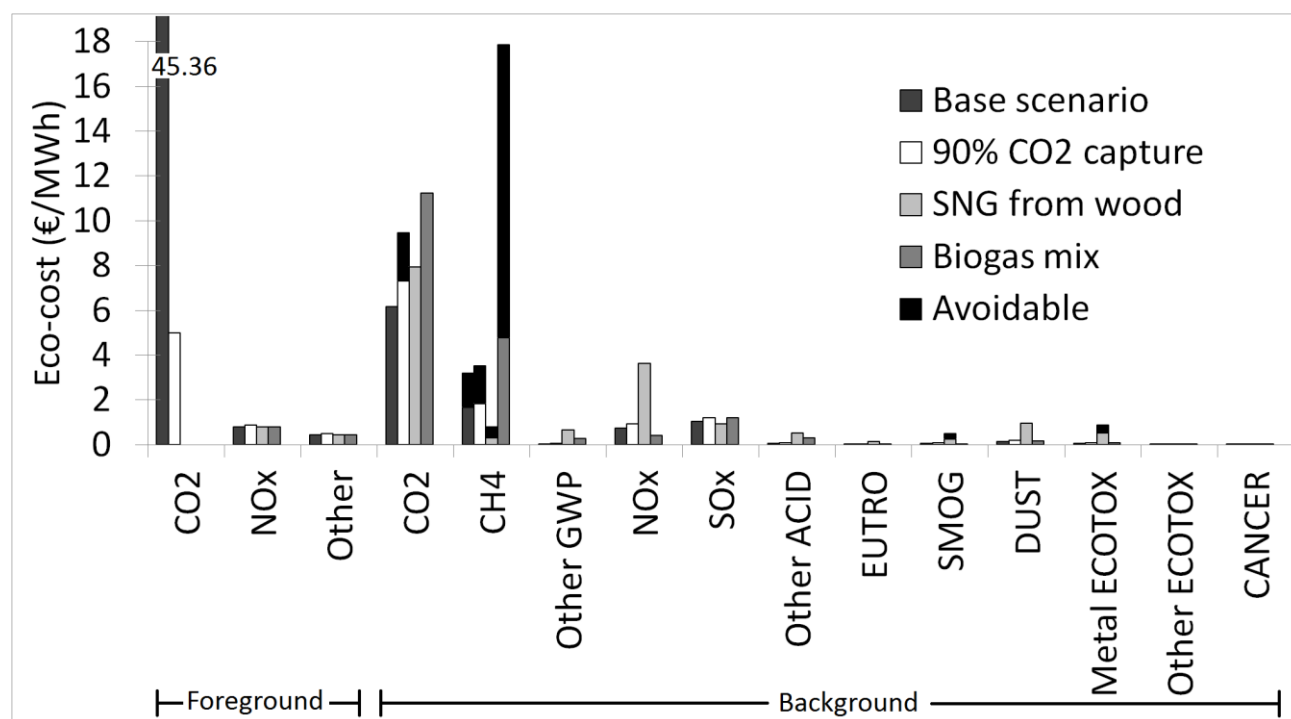


Figure 6.4 : LCA results for four NGCC power plant scenarios expressed as eco-costs

Under most circumstances, scenario ranking by total background avoidance costs is identical to the ranking by background CO₂ only, which is predominant. *Therefore, the LCA background component is least favourable to the biogas option within a wide range of prevention cost and global impact reduction target uncertainties. It is most favourable to the SNG option, which benefits from relatively low compensation costs for its high EUTRO, SMOG, DUST and ECOTOX impacts, and from a good improvement potential (conversion efficiencies, NO_x*

emissions, biogenic CO₂ sequestration). Of course, the final choice of scenario will depend on a detailed analysis of CO₂ sequestration economics, including from the purification of all three fuels.

6.2.4.3 Generalization to other energy-intensive processes

Fig.6.5 shows the distribution of eco-costs (without any subsequent weighting) for 3 850 *ecoinvent v2.0* processes with positive total eco-costs. In total, 70% have over 50% of their eco-costs in CO₂ alone, while less than 11% have over 50% of their eco-costs in another category, including many processes related to agriculture, mining and disposal. Therefore, a vast majority of *ecoinvent* processes can be qualified as *energy-intensive* in the sense that they reproduce the patterns observed in the case study: most eco-costs result from hydrocarbon combustion products, of which CO₂ is the largest contributor despite a relatively low eco-cost per unit mass.

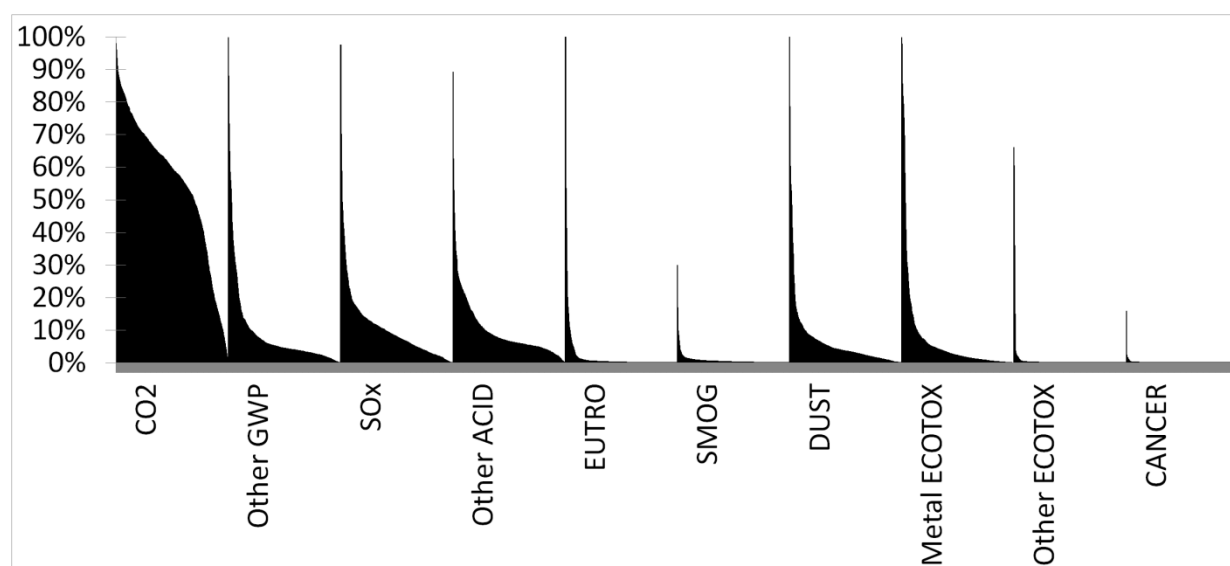


Figure 6.5 : Distribution of eco-costs over 3 850 *ecoinvent v2.0* processes

Furthermore, when avoidance costs are considered, CO₂ takes on even more relative importance. Indeed, CO₂ can only be prevented in significant amounts by capture from a small number of stationary sources. Comparatively, prevention costs are well below eco-costs for concentrated sources representing a significant fraction of Other GWP (CH₄ and HFCs), ACID (SO_x and NO_x) and DUST (particulates), while the need to prevent ecotoxicity is questionable for some metals because of long-term bioaccessibility considerations. Consequently, CO₂ will represent the

majority of background avoidance costs for many process designs in various industries even if they do not directly emit CO₂.

6.2.5 Discussion

In a process design optimization context, Fig.6.4 and Fig.6.5 convincingly illustrate why the non-CO₂ B-LCI is inconsequential to configuration decisions when all inputs are energy-intensive, regardless of the *concern* for a specific impact category. The cost to prevent or compensate background non-CO₂ emissions is too low to contribute significant terms to Eq.6.4 that could affect configuration decisions. Fig.6.2 illustrates the effect of low background prevention costs: all changes in procurement decisions (a_1 to a_2 to a_3) precede all changes in configuration decisions (a_3 to b_3 to c_3).

Consequently, as long as all inputs can be qualified as energy-intensive, the B-LCI component of the objective function(s) is expected to favour reasonably energy-efficient process configurations that minimize W_k for CO₂. For future design optimization studies, the use of a CO₂-only B-LCI – except for inputs that are not energy-intensive – would simplify prevention cost estimates while being less distortive than a full B-LCI incorrectly assumed to only contain unavoidable emissions.

Since CO₂ belongs to $j = \text{GWP}$, internal process configuration decisions relating to CO₂ capture or SNG gasification can be determined by a multi-objective optimization focused on life cycle costs and life cycle GWP, as done previously (Bernier et al. 2010; Bernier et al. 2012; Gerber et al. 2009). For these specific decisions and except for those directly affecting on-site non-CO₂ emissions, the consideration of additional impact categories would not have sufficient effect to warrant re-optimization, no matter the subjective concern assigned to each category.

6.2.6 Conclusion

This study provides a theoretical framework for choosing emission weightings in a process design optimization context (single-objective or multi-objective), especially for the secondary LCA data related to background processes in databases such as *ecoinvent*. Inadequate methodologies may over-emphasize expensive process modifications, by, for example, over-investing in energy efficiency or biogenic fuels while neglecting the opportunity to prevent,

neutralize, compensate or otherwise mitigate more environmental impacts in the background or elsewhere. Instead, we propose a *life cycle optimization* methodology focused on life cycle costs, including *foreground* and *background* emission avoidance costs. Its weightings are the integral of the minimum of two quantities: a compensation cost less than but related to eco-costs depending on a global impact reduction target, and an input-specific marginal prevention cost (preferably generic) with an underestimation bias. Bridging LCA and life cycle cost analysis, it is a valid methodology for any type of decision-making for which the opportunity to avoid more impacts elsewhere is implicitly considered to be a part of the decision space.

An NGCC power plant with three CO₂ reduction options (fuel substitution by synthetic natural gas or biogas and post-combustion CO₂ capture and sequestration) was chosen for the case study. While the final choice will depend on many considerations, we have shown that biogas is at a disadvantage because of its higher background avoidance costs, with predominant CO₂ and CH₄. Comparatively, synthetic gas is at an advantage because of its lower background avoidance costs despite having the worst environmental performance in most categories. Consequently, the subjective concern for each impact category is not the primary determinant for this decision or, more generally, for design decisions unrelated to foreground non-CO₂ emissions.

In many different systems, most inputs are *energy-intensive* because their own background avoidance costs are dominated by hydrocarbon combustion products and primarily CO₂. For the life cycle optimization of any design relying exclusively on such inputs, we have shown that a CO₂-only background life cycle inventory (B-LCI) is satisfactory and simplifies prevention cost data gathering. CO₂ B-LCI data reflect the potential future CO₂ taxes passed on by suppliers, making LCA attractive to industries that are not chiefly interested in environmental performance. Comparatively, non-CO₂ B-LCI data are more relevant in other contexts, including when working to determine an optimal combination of voluntary incentives for suppliers to reduce their own non-CO₂ emissions.

6.2.7 Recommendations

To facilitate optimization or design more generally, prevention cost data could play a role in future LCA databases by, for example, constituting an optional data field. The capacity to generate scenarios in which impacts are prevented up to a specified cost would be useful in many contexts, including macro-level simulations of future impacts.

Seeing that many LCA studies are effectively optimization problems, the weightings presented in this study (w_{ik}) can be considered valid for a single-score impact method, enabling the following straightforward LCA interpretation procedure detailing the *environmentally optimal* combination of design modifications, prevention measures and compensation measures for the final user:

- LCA is performed with an eco-cost method for each design option or scenario. The inventory is split in (1) CO₂, (2) foreground non-CO₂, (3) major background non-CO₂ (significant $g_{ik} \cdot EC_k$ compared to CO₂), and (4) minor background non-CO₂.
- In keeping with the previously recommended underestimation bias, prevention costs (mpc_{ik}) are modelled for (2) and (3), while (4) is assumed avoidable at no cost. Then, (2) and (3) are split between avoidable (2a and 3a) and unavoidable (2b and 3b) through comparison with eco-costs or user-requested targets. The discussion insists on the benefits of prevention for (2a), finding responsible suppliers for (3a), and compensation for (1), (2b) and (3b).
- Avoidance costs (single score) are presented as a potential hidden tax comprising prevention costs for (2a) and (3a) and compensation costs for (1), (2b) and (3b). If a life cycle cost analysis is also performed, the discussion shows whether a more expensive design option or scenario is justified by lower total life cycle costs. Otherwise, it is not *environmentally optimal* in any meaningful sense.

6.2.8 Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the financial support of the industrial partners of the International Chair in Life Cycle Assessment (a research unit of the CIRAIG) and especially GDF SUEZ for the permission to use the LCA results. This research was also funded by a Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) graduate scholarship and a Fonds de recherche du Québec – Nature et technologies (FQRNT) grant.

CHAPITRE 7. DISCUSSION GÉNÉRALE

Ce chapitre présente une discussion prospective des principales conclusions des chapitres précédents. Il vise à répondre en particulier à trois questions :

- Quel est la viabilité du procédé de capture de CO₂ en postcombustion, tant sur le plan économique qu'environnemental ?
- Quelles recommandations générales peut-on faire à propos de l'utilisation de l'ACV en contexte d'optimisation ?
- Jusqu'à quel point les conclusions de cette thèse s'appliquent à l'ACV plus généralement, sachant qu'elle sert autant à la prise de décisions qu'à la sensibilisation ?

Les trois sections de ce chapitre répondent à ces questions respectivement.

7.1 Capture de CO₂ en postcombustion

L'avenir des technologies de capture de CO₂ en postcombustion dépend de plusieurs enjeux, dont l'avenir des sources d'énergie fossiles dans la production d'électricité, l'avenir des autres technologies de capture de CO₂, et l'importance future accordée à la concentration atmosphérique de CO₂ comme enjeu environnemental et géopolitique. Il est assez probable que les technologies en postcombustion ne voient jamais le jour à grande échelle, ce qui n'empêche pas de discuter de la performance technique et environnementale de ce procédé.

7.1.1 Capturer le CO₂ ou l'éviter autrement ?

L'importance des émissions de CO₂ comme enjeu environnemental dépasse largement le cadre de cette thèse, bien que brièvement discutée à l'annexe A1.1.5. Admettons seulement que l'atmosphère et les océans, comme réservoir physique de CO₂, ont une capacité bien moindre que ce que représenterait la combustion de tous les hydrocarbures de la croûte terrestre, incluant les gisements non *économiques* aujourd'hui. La quantité de CO₂ émise devra alors un jour être contrainte, peu importe que le facteur limitant soit une hausse logarithmique de la température moyenne, l'épuisement de la capacité tampon du pH océanique, ou tout autre effet écotoxicologique. Dans ce cas, il existe peu d'alternatives à la séquestration géologique du CO₂, à moins de cesser toute utilisation d'énergie fossile. En effet, la production de CO₂ est thermodynamiquement requise pour l'utilisation énergétique des hydrocarbures fossiles, et la croûte terrestre est le seul endroit où il est techniquement possible de mettre d'aussi grandes quantités de CO₂ à l'abri de la biosphère à coût raisonnable.

Si l'on se fie à la modélisation de Vogtländer et Bijma (2000) pour déterminer les éco-coûts, la capture de CO₂ serait nécessaire pour ramener les émissions de gaz à effet de serre à un niveau de risque négligeable. En effet, cette méthode indique que l'éco-coût du CO₂ serait environ le triple du coût de sa capture tel qu'établi aux chapitres 4 et 5, c'est-à-dire environ 135 €/tonne d'après le coût de la technologie marginale, la production éolienne offshore. Cela indique que toutes les opportunités de capture de coût inférieur devraient éventuellement être exploitées. Que l'on soit d'accord ou non avec le choix de cette technologie marginale, il faudrait considérablement relâcher la définition du niveau de risque négligeable pour ramener l'éco-coût en-deçà du coût de capture, vu que les opportunités d'évitement à coût inférieur à la capture paraissent plutôt

limitées dans le modèle de (Vogtländer & Bijma 2000). Il ne serait donc pas réaliste de vouloir grandement diminuer les émissions de CO₂, tout en conservant les mêmes sources d'énergie, sans éventuellement passer par la capture. De ce point de vue, l'avenir de la capture semble prometteur.

Par contre, la courbe des coûts d'évitement est toujours susceptible d'être abaissée à mesure que de nouvelles technologies d'évitement apparaissent. Par exemple, la compagnie McKinsey propose une courbe davantage imaginative que celle utilisée dans la méthode *EcoCosts2007*. Entre autres, cette courbe permet l'ajout de plusieurs centrales nucléaires. Elle montre un potentiel d'évitement annuel de près de 15 milliards de tonnes de CO₂ en 2030, à un coût inférieur à celui de la capture (Enkvist, Naucler, & Rosander, 2007). Une méthode des éco-coûts qui serait basée sur cette courbe d'évitement pourrait donc potentiellement mener vers un éco-coût inférieur au coût de la capture du CO₂, rendant cette dernière contre-productive. Un tel scénario pourrait donc retarder l'avènement de la capture de plusieurs décennies, d'autant plus si la science du climat se précise entre temps et révisé à la baisse le facteur de rétroaction entre le CO₂ et la température moyenne.

À plus long terme, le niveau de risque environnemental posé par le CO₂ risque sans doute de s'aggraver, mais les autres options en compétition avec la capture risquent aussi de s'améliorer. La faisabilité économique de la capture du CO₂ dépend donc de l'évolution à long terme du niveau de risque environnemental posé par le CO₂ et de l'avantage comparatif de la capture de CO₂ par rapport aux autres méthodes d'évitement. Elle dépend aussi de l'existence à long terme d'un différentiel important de coût, sur le marché de l'électricité en vrac, entre le charbon, le gaz naturel et les sources d'énergie sans carbone. En effet, la capture du CO₂ n'est pratique que pour des sources stationnaires de grande taille, comme les centrales thermiques. La compétitivité à long terme de ces dernières est vulnérable aux percées technologiques dans le domaine du nucléaire, de la géothermie ou de l'énergie solaire, qui pourraient abaisser le prix de l'électricité au point d'éliminer la concurrence des énergies fossiles, avec ou sans capture de CO₂. L'évolution à long terme de la courbe d'évitement n'est pas prise en compte dans la méthodologie des éco-coûts, ce qui est déplorable vu que le changement climatique est une problématique sur le long terme et qu'il existe donc un aspect inter-temporel à l'optimisation de toute stratégie d'évitement du CO₂. Autrement dit, le coût d'évitement est plus important à long terme qu'à

court terme parce que le danger que le CO₂ pose dans l'immédiat est insignifiant comparativement au danger qu'il pose à long terme.

De plus, un autre élément temporel négligé par l'approche des éco-coûts est le taux d'escompte vu la possibilité d'échanger de l'évitement à court terme pour de l'évitement à long terme. En effet, le CO₂ ayant une longue demi-vie, il serait avantageux d'un point de vue environnemental d'en capturer deux tonnes dans un futur éloigné plutôt qu'une tonne dans un futur rapproché, à chaque fois que cet échange est possible. En effet, si on considère que c'est la température globale moyenne ultimement atteinte qui est la principale variable à observer (ce qui doit bien être le cas, puisque le consensus « scientifique » est qu'il ne faudrait pas que celle-ci augmente de plus de 2°C), et que ce maximum n'est pas atteint avant plus d'un siècle, alors la contribution au réchauffement à ce moment-là d'une tonne de CO₂ émise en 2015 ne sera pas très différente de celle d'une tonne émise en 2030. Il sera donc nettement avantageux de capturer et séquestrer deux tonnes de CO₂ en 2030 plutôt qu'une seule tonne en 2015, si c'est le choix qui se présente.

Or, de tels choix se présentent souvent, même dans une économie potentiellement en décroissance, à cause du développement technologique et de la valeur-temps²⁸. Pour capturer un maximum de CO₂, il faudrait donc paradoxalement retarder cette capture le plus possible, et concentrer nos efforts à moyen terme sur les options à plus faible coût d'évitement. Après tous les efforts déployés dans cette thèse pour optimiser la conception du procédé de capture, on arrive donc à la conclusion que le système optimal pourrait ironiquement être celui qu'on ne construirait pas de sitôt !

En résumé, l'avenir de la capture de CO₂ est incertain car cette technologie est en compétition simultanée avec toute une panoplie de technologies émergentes au coût imprévisible, allant de la géothermie au nucléaire à la reforestation, sans compter qu'il peut s'avérer avantageux de concentrer les efforts de prévention sur les autres gaz à effet de serre. De plus, cette compétition est inter-temporelle, vu que le même CO₂ peut être capturé tôt ou tard sans effet significatif sur le climat à long terme. Cela pourrait permettre de repousser indéfiniment la viabilité économique de

²⁸ Par exemple, un tuyau d'acier qui fournit un service utile, en attendant de capturer du CO₂, finira par rapporter un deuxième tuyau en échange de ce service. Ainsi, deux tuyaux permettraient de capturer deux fois plus de CO₂, même dans une économie en décroissance matérielle. Il y a donc un bénéfice environnemental important à attendre, pour une attente petite par rapport à la demi-vie du CO₂, tant que l'épargne est réellement investie en vue de la capture.

la capture, à mesure que les autres options prennent leur place. Tout ce qu'on peut dire pour le moment, c'est que la capture de CO₂ ne fait pas partie d'une solution globalement optimale tant que les technologies de coût d'évitement inférieur n'auront pas été implémentées, et il y en a plusieurs (Enkvist, Naucler, & Rosander, 2007). Dans ce contexte, c'est à long terme, donc avec un degré de maturité technologique élevé, qu'il est le plus pertinent de comparer les avantages techniques des différentes méthodes de capture de CO₂ : postcombustion, précombustion, oxycombustion et anaérocombustion (chemical looping).

7.1.2 Capture postcombustion vs autres méthodes de capture

Un déterminant majeur du coût à long terme des différentes technologies de capture de CO₂ est leur efficacité énergétique. En effet, à part le coût de transport et de séquestration, commun à toutes les technologies de capture, les principales composantes du coût total d'évitement sont les coûts d'investissement et de combustible (voir la Table 5-5 en particulier). Comme la littérature et les simulations l'ont montré (section 4.2), l'efficacité énergétique se trouve au cœur de l'optimisation du procédé, qui vise le meilleur compromis entre ces coûts.

La thermodynamique permet de décomposer la comparaison des technologies de capture en deux parties. On peut d'abord comparer le travail minimum requis pour effectuer la capture dans le contexte où opère chaque méthode (postcombustion, précombustion, oxycombustion ou anaérocombustion). Ensuite, on peut spéculer sur les difficultés que rencontrera chaque méthode, à long terme, pour atteindre son idéal thermodynamique respectif. Comme détaillé ici-bas, cet idéal est principalement déterminé par la pression partielle initiale de CO₂, ce qui donne un avantage théorique à toutes les formes de capture à haute pression. Cela pénalise alors la capture postcombustion, dont le potentiel d'amélioration est doublement limité par une faible pression partielle initiale de CO₂ et par une maturité technologique déjà relativement élevée.

Pour obtenir une idée du rendement exergetique de la capture de CO₂, on peut comparer la perte nette de production électrique, environ 6 % de l'exergie du gaz naturel dans le cas simulé, avec l'électricité requise en théorie (travail W) pour effectuer la capture avec une machine réversible. On peut effectuer ce calcul à partir de l'entropie de mélange du CO₂ avec l'air, ou en imaginant un compresseur isotherme pour lequel les autres gaz seraient invisibles, comme à l'équation 7.1 :

$$W = \int_{p_i}^{p_f} RT \ln\left(\frac{p_{out}}{p(n)}\right) dn = V \int_{p_f}^{p_i} (\ln p_{out} - \ln p) dp = V \left[p_i \left(1 + \ln \frac{p_{out}}{p_i}\right) - p_f \left(1 + \ln \frac{p_{out}}{p_f}\right) \right] \quad (\text{Éq.7.1}),$$

où R est la constante des gaz, T est la température ambiante absolue, p_{out} est la pression finale, V est le volume de fumée, et p_i et p_f sont la pression partielle de CO_2 avant et après la capture. L'équation suppose que le CO_2 est un gaz parfait, ce qui n'est pas valable pour les derniers étages de compression après capture et pour les re-compressions subséquentes, mais estime quand même correctement le travail de capture, qui se fait à basse pression. À toutes fins pratiques, le calcul ne dépend que du logarithme de p_i , peu importe la méthode de capture²⁹. Pour $p_{out} = 6300$ kPa, $p_i = 10$ kPa et $p_f = 1$ kPa, ce qui représente le contexte postcombustion tel que simulé, l'électricité requise est $64,7 \text{ kJ/m}^3$ ou $0,366 \text{ GJ/tonne}$ de CO_2 capturé. Comparativement, la perte de production électrique dans la centrale NGCC simulée, soit 40 MW pour capturer 36 kg/s de CO_2 , correspond à $1,11 \text{ GJ/tonne}$, environ le triple du minimum théorique. On peut donc attribuer un rendement de 33% au système de capture entier³⁰.

Si on veut calculer le rendement de la capture sans compression, on prendra plutôt $p_{out} = 101,3$ kPa, ce qui donne une valeur théorique de $0,155 \text{ GJ/tonne}$, qu'on comparera à une pénalité de $24,5 \text{ MW}$ plutôt que 40 MW , le reste étant la consommation du compresseur de CO_2 . Cela donne un rendement de 23% pour la partie strictement chimique du procédé. Ce rendement découle de toutes les pertes dans le cycle : pertes dans le transfert de chaleur à de grandes quantités d'eau inerte, pertes de force motrice dans l'absorbeur (cinétique lente), irréversibilités structurelles de l'absorbeur et du désorbeur. Dans ces conditions, analogues à celles d'une pompe à chaleur par absorption, un rendement de 23% dans l'ensemble n'est pas particulièrement mauvais. En particulier, l'absorbeur est coincé dans un mode de fonctionnement hautement

²⁹ D'une part, p_{out} est le même pour toutes les méthodes de capture et V est lui-même proportionnel à $1/p_i$. D'autre part, le terme en p_f est beaucoup plus petit que le terme en p_i . De plus, il ne faut pas perdre de vue qu'une partie de la production électrique provient du turbinage du CO_2 , qui annule en partie cette équation. Toutefois, il sera toujours avantageux en pratique de refroidir le CO_2 à haute pression et ensuite le re-comprimer, plutôt que de le turbiner, refroidir, compresser et re-comprimer, comme on fait en postcombustion. Turbiner pour re-comprimer sera toujours contre-productif vu que cela s'apparente à un mouvement perpétuel, comme déjà indiqué dans le cas de la vapeur.

³⁰ Il ne s'agit pas rigoureusement d'un rendement exergétique, vu que ce résultat est dépendant de la performance du cycle vapeur. Cependant, la différence ne devrait pas dépasser quelques %.

irréversible vu qu'en bas de 40°C la perte cinétique augmente, alors qu'en haut de 40°C la perte thermodynamique associée à la chaleur rejetée à l'environnement augmente. Le travail disponible aux températures internes de l'absorbeur, pouvant atteindre environ 80°C, est systématiquement irrécupérable même s'il est substantiel, surtout en hiver. À la limite, un cycle de Rankine organique à deux pressions pourrait récupérer ce travail *et* remplacer le rôle de la vapeur VLP.

Plusieurs auteurs voient ici l'occasion d'améliorer le rendement par la recherche d'un meilleur absorbant, en particulier avec une plus faible enthalpie de réaction (ΔH). Certains y vont même de projections de rendements futuristes en pleine violation des lois de la thermodynamique (Feron 2010 et réviseurs endormis). Pourtant, l'équation de Van't Hoff indique assez clairement que l'utilisation d'une plus faible enthalpie de réaction, dans un procédé nécessairement cyclique, se fera au détriment de la température et/ou de la pression du désorbeur. En effet, si on suppose que l'absorption de CO₂ se fait à température et pression partielle constantes, pour simplifier, alors cette équation devient :

$$R \ln \left(\frac{P_{CO_2}^{absorbeur}}{P_{CO_2}^{désorbeur}} \right) = -\Delta H_{réaction} \left(\frac{1}{T_{absorbeur}} - \frac{1}{T_{désorbeur}} \right) \quad (\text{Éq.7.2}),$$

où les températures sont évidemment absolues. On remarque tout de suite, en comparant avec Éq.7.1, que dans le cas d'un cycle réversible le travail net requis pour la capture est indépendant de ΔH , comme il se doit, vu que la pression de sortie et celle de l'absorbeur ne changent pas. :

$$\begin{aligned} \Delta W_{compresseur} + \Delta W_{Carnot} &= [W_{compresseur}]_1^2 + \left[\sum \Delta H \left(1 - \frac{T_o}{T} \right) \right]_1^2 \\ &= RT_o \left[\ln \left(\frac{P_{out}}{P_{CO_2}^{désorbeur}} \right) \right]_1^2 + [\Delta H_{réaction}]_1^2 \left[\left(1 - \frac{T_o}{T_{désorbeur}} \right) - \left(1 - \frac{T_o}{T_{absorbeur}} \right) \right] \\ &= RT_o \left[\ln \frac{P_{out}}{P_{CO_2}^{désorbeur}} \right]_1^2 + \left[\frac{-R \ln \left(\frac{P_{CO_2}^{absorbeur}}{P_{CO_2}^{désorbeur}} \right)}{\left(\frac{1}{T_{absorbeur}} - \frac{1}{T_{désorbeur}} \right)} \right]_1^2 T_o \left[\frac{1}{T_{absorbeur}} - \frac{1}{T_{désorbeur}} \right] \\ &= RT_o \left[\ln \frac{P_{out}}{P_{CO_2}^{désorbeur}} \right]_1^2 + RT_o \left[-\ln \left(\frac{P_{CO_2}^{absorbeur}}{P_{CO_2}^{désorbeur}} \right) \right]_1^2 = RT_o \left[\ln \frac{P_{out}}{P_{CO_2}^{absorbeur}} \right]_1^2 = 0 \end{aligned} \quad (\text{Éq.7.3}),$$

où ΔW_{Carnot} représente le travail rendu disponible (négatif) par la chaleur économisée à la température du désorbeur grâce au nouvel absorbant ($\Delta H_2 - \Delta H_1$), additionné du travail qui n'est plus disponible grâce à la même chaleur dégagée par l'absorbeur, et $\Delta W_{compresseur}$ représente le travail supplémentaire requis par le compresseur de CO_2 maintenant que le nouvel absorbant a fait diminuer la pression du désorbeur selon Éq.7.2.

Ce résultat n'est guère surprenant puisque c'est Carnot lui-même (1990) qui a démontré que tout cycle thermodynamique réversible devait avoir la même performance peu importe le fluide de travail, et il n'y a aucune raison pour que les absorbants de CO_2 échappent à ce principe. Plus généralement, si un rendement donné est atteignable avec un absorbant donné, alors le même rendement devrait pouvoir être atteignable avec n'importe quel autre absorbant grâce à une surface d'échange arbitrairement élevée. Pour la capture du CO_2 , changer d'absorbant peut être certes avantageux si cela améliore la cinétique, la solubilité, ou les irréversibilités structurelles. Toutefois, cela est *a priori* indépendant de l'enthalpie de réaction.

Au contraire, l'utilisation d'un absorbant d'enthalpie de réaction et/ou de température de désorption élevée comporte plusieurs avantages pratiques qui peuvent se traduire par une efficacité énergétique accrue. En augmentant la pression de désorption, cela diminue le travail du compresseur de CO_2 , et d'autant plus que la fraction de vapeur d'eau diminue dans le volumineux gaz à compresser. En contrepartie, compresser davantage l'absorbant liquide demande très peu de travail supplémentaire et ajoute peu aux irréversibilités existantes du système de capture. La situation est analogue à celle de l'électrolyse de l'eau : il vaut mieux le faire à la pression la plus élevée possible pour éviter la compression mécanique, même si cela fait augmenter la tension des électrodes selon le logarithme de la pression. Cela serait vrai même si le rendement de l'électrolyse n'était que de 23 % comme pour la capture de CO_2 , en autant que le rendement *marginal* à pression plus élevée dépasse le rendement isotherme d'un compresseur adiabatique aux prises avec un gaz fortement dilué par de la vapeur d'eau, potentiellement assez médiocre.

Comme il est souhaitable d'absorber et de désorber le CO_2 aux pressions les plus hautes possible, cela désavantage la capture en postcombustion par rapport aux alternatives puisque cela ampute nettement son potentiel d'amélioration. En effet, seulement environ 20 % des pertes exergetiques de la capture postcombustion sont de nature chimique (Geuzebroek, Schneiders, Kraaijveld, & Feron, 2004), le reste étant de nature physique (échanges de chaleur irréversibles, pertes de

charge, *etc.*) et provenant de composantes que l'on sait déjà très bien optimiser. À elle seule, l'amélioration de la cinétique ne peut donc pas faire une différence importante. L'utilisation d'un absorbant qui augmenterait la charge nette en CO_2 par unité de masse de solution permettrait de diminuer les débits d'écoulement et les puissances de chaleur à transférer, ce qui serait déjà plus prometteur. Mais il n'est pas évident qu'on puisse faire beaucoup mieux que les 5,4 % massiques déjà atteints avec le MEA. En effet, il faudrait augmenter significativement la charge molaire nette, déjà à 0,25 mol/mol, ainsi que la solubilité dans l'eau, déjà à 30 %, et cela sans augmenter la masse molaire de l'absorbant, ce qui laisse peu d'options.

Il n'y a donc aucun miracle possible en postcombustion en phase aqueuse. Même en doublant la performance de la capture de CO_2 avec le choix d'un absorbant et d'une configuration d'écoulement extraordinaires, ce qui ferait passer le rendement à 46 % selon le calcul précédent, cela n'ajouterait que 1,8 % au rendement thermodynamique global d'une centrale NGCC. La pénalité de 40 MW observée lors des simulations dépend donc bien davantage de la contrainte physique imposée par l'équation 7.1, que d'un manque d'innovation ou d'un mauvais choix d'absorbant. À long terme, ce constat avantagera les méthodes de capture à haute pression, car elles court-circuitent trois pertes importantes : les irréversibilités du passage dans une turbine à gaz imparfaite, les irréversibilités du passage dans un compresseur imparfait après capture, jusqu'à concurrence de ce qu'était la pression partielle à l'entrée de la turbine à gaz, et finalement l'irréversibilité structurelle de devoir utiliser un compresseur adiabatique plutôt qu'isotherme sans trop de possibilité d'utiliser la chaleur dégagée par ce compresseur.

Dans le cas en précombustion, en plus des avantages d'une pression partielle élevée, la température de séparation peut être choisie librement. Comparativement à la postcombustion, cela permet un plus grand choix technologique, ce qui peut éventuellement faciliter la cinétique, éliminer le solvant et son inertie thermique, et faciliter le couplage au cycle vapeur. De plus, il est plus facile en pratique de séparer le CO_2 d'un gaz 22 fois plus léger que lui (hydrogène) que d'un gaz 36 % plus léger que lui (azote). Bien entendu, il faut considérer le coût d'un réacteur additionnel pour transformer le monoxyde de carbone en CO_2 et hydrogène avant la séparation. De plus, la gazéification comme tel n'a pas vraiment de sens pour le gaz naturel car elle ne permet aucun gain de rendement. La capture en précombustion jouit donc d'un avantage comparatif avec le charbon.

L'anaérocombustion, en plus des mêmes avantages, peut opérer à la température de la turbine à gaz, ce qui lui permet de puiser un potentiel thermodynamique qu'il faut autrement sacrifier, c'est-à-dire le travail disponible depuis la température de l'équilibre chimique entre le gaz naturel et ses produits de combustion jusqu'à la température maximale admise par la turbine à gaz sans surchauffer. On peut donc s'attendre à ce que les technologies en précombustion et en anaérocombustion, passé un certain degré de maturation technologique, permettent éventuellement une pénalité électrique inférieure à 0,366 GJ/tonne, la limite infranchissable en postcombustion. Dans le cas de l'oxycombustion, l'avantage est moins évident, puisque la séparation de l'azote et du CO₂ est remplacée par le problème semblable de séparer l'azote et l'oxygène, initialement à pression ambiante.

En résumé, la pression partielle du CO₂ au moment de sa capture est le principal déterminant de la performance à long terme des différentes technologies de capture. La capture en précombustion et en anaérocombustion présentent l'avantage d'opérer à haute pression, en plus d'offrir des degrés de liberté supplémentaires dans le choix des températures, des pressions et des réactifs, le tout en l'absence d'importantes irréversibilités structurelles insurmontables évidentes. Elles risquent donc d'offrir une meilleure efficacité énergétique après maturation, et donc une meilleure performance économique et environnementale le jour où l'on voudra séquestrer le CO₂ à grande échelle, que la capture en postcombustion étudiée dans cette thèse.

7.1.3 Perspective environnementale

L'ACV de n'importe quel système de capture de CO₂ se ramène toujours à la même conclusion : la diminution des impacts dans la catégorie des changements climatiques se fait toujours au détriment de l'ensemble des autres catégories d'impacts vu que cela ajoute des intrants. De plus, c'est l'efficacité énergétique du procédé de capture qui détermine la majorité des impacts, en lien avec les impacts du combustible additionnel utilisé ou ceux de l'électricité³¹ ne pouvant plus être

³¹ Comme la consommation énergétique est sous forme d'électricité non produite, les impacts pourraient être à la rigueur ceux de n'importe quel « grid mix ». Dans un contexte où l'on pourrait vouloir comparer différents systèmes de capture dans différentes centrales électriques au charbon et au gaz, il n'est pas vraiment logique d'attribuer plus d'impacts à 1 MWh d'électricité non produite dans une centrale au charbon qu'à 1 MWh d'électricité non produite dans une centrale au gaz naturel. Cependant, la boîte de Pandore du « grid mix » n'ayant pas été ouverte dans les articles, elle ne le sera pas ici non plus.

produite. La contribution des autres intrants est beaucoup plus petite, et dans la mesure où ces intrants sont également énergivores, c'est-à-dire que la majorité des éco-coûts de leur propre cycle de vie provient de produits de combustion dont le CO₂, cette contribution affecte elle aussi principalement l'enjeu de l'efficacité énergétique. Il en serait peut-être autrement si, par exemple, la capture nécessitait un intrant de nature agricole, mais ce n'est vraisemblablement pas le cas pour l'ensemble des technologies énumérées dans la section précédente. Il est donc légitime de se demander si la consommation énergétique additionnelle justifie le gain environnemental offert par la capture, mais ce dilemme ne porte pas principalement sur le déplacement d'impacts d'une catégorie à l'autre. Plusieurs méthodes d'évitement consomment un peu d'énergie et ne sont pas à rejeter pour autant. Essentiellement, le dilemme se pose de la façon suivante : quels impacts environnementaux attribuer à de l'électricité consommée (sous forme d'électricité non-produite) pour rendre une partie de l'électricité restante plus verte ? Est-elle verte elle-même ?

D'une façon générale, il serait absurde de refuser de dépenser de l'électricité pour éviter les impacts environnementaux du secteur de l'électricité, sous prétexte qu'une dépense d'électricité entraîne des impacts. La solution est évidemment de dépenser toute l'électricité qu'il faut pour produire de l'électricité zéro-émission, dépense qui n'entraînera aucun impact puisque celui-ci aura été éliminé. La capture de CO₂, étant une étape intermédiaire vers l'électricité zéro-émissions, est un pas dans la bonne direction.

La validité de ce raisonnement est confirmée par la méthode des éco-coûts. En effet, la Table 6-2 montre que l'éco-coût évité par la capture de CO₂ (40,36 €/MWh à même la fumée, moins 3,64 €/MWh de GWP ailleurs dans le cycle de vie) est largement supérieur à l'éco-coût correspondant à l'augmentation des impacts dans les autres catégories (0,56 €/MWh dont 0,44 €/MWh dans la catégorie de l'acidification). La façon optimale d'éviter cette augmentation des impacts est donc de faire affaire avec des producteurs de gaz naturel qui minimisent leurs propres émissions, ou encore de faire l'achat de crédits d'émissions acides, mais pas de s'abstenir de capturer la CO₂.

7.1.4 Perspective méthodologique

La méthodologie d'optimisation développée dans cette thèse peut aussi bien s'appliquer à toutes les technologies de capture de CO₂. Une fois décidée la construction d'un système de capture,

peu importe la raison, il est certainement utile de procéder à son optimisation avec ACV, en appliquant toutes les recommandations du chapitre 4. En particulier, s'il s'agit d'un système en postcombustion similaire au cas d'étude, il faut examiner plus en détails la faisabilité technique et les bienfaits de la recirculation des fumées, de la production de vapeur très basse pression, et de l'utilisation d'un absorbeur extra large, avant de passer au design final. Toutefois, il ne faut pas s'attendre à ce qu'une telle optimisation fasse miraculeusement disparaître le coût énergétique de la capture postcombustion. Il faut plutôt s'attendre à ce que cela apporte de petites améliorations offrant individuellement un bon retour sur l'investissement. On peut s'attendre à la même chose de l'ACV, comme dans le cas illustré à la section 5.3.2.

Toutefois, passé le stade du design conceptuel, il devient avantageux de simplifier la méthodologie. À partir du moment où le réseau d'échangeurs de chaleur est connu, il n'est plus souhaitable d'utiliser *EASY*, car une description du coût individuel des échangeurs sera plus précise. De plus, si le seul objectif est de minimiser le coût d'évitement pour la catégorie des changements climatiques, alors l'optimisation multicritères n'est plus nécessaire non plus. Une optimisation monocritère peut très bien intégrer une cible fixe de réduction globale pour les autres catégories d'impacts, dans une perspective du cycle de vie, de façon analogue à l'équation 6.4. Il est donc possible d'envisager une méthode simplifiée d'optimisation à même le logiciel *ASPEN Plus*, où les échangeurs seraient définis explicitement et la fonction-objectif serait le ratio entre les coûts ajoutés par la capture, incluant les coûts d'évitement dans les autres catégories, et les impacts évités dans la catégorie des changements climatiques.

En conclusion, en supposant d'abord que l'énergie de source fossile puisse demeurer compétitive à long terme, la capture de CO₂ diminuerait les impacts environnementaux nets de façon rentable. Dans ce cas, il serait difficile pour les technologies en postcombustion de rivaliser à long terme avec les technologies en précombustion et en anaérocombustion, qui ont une meilleure efficacité énergétique en théorie et donc le meilleur potentiel d'amélioration à long terme en pratique, qui lui-même pourrait être exploré grâce aux méthodes d'optimisation présentées dans cette thèse. Pour chaque option, on s'attend à ce que les impacts environnementaux, dans les catégories autres que le changement climatique, augmentent en proportion de l'énergie consommée pour la capture, mais en quantité insuffisante pour représenter des coûts importants d'évitement.

7.2 Utilisation de l'ACV en contexte d'optimisation

Une des conclusions les plus importantes de ce projet de recherche est qu'il ne faut pas utiliser l'ACV n'importe comment lorsqu'on veut améliorer la conception d'un procédé. En particulier, lorsque plus de 50 % des impacts des émissions des processus d'arrière-plan sont facilement évitables, le fait de modifier un procédé afin de réduire ces impacts apparents peut s'avérer contre-productif à un tel point que la décision prise sans ACV peut avoir un meilleur bilan environnemental que la décision prise avec ACV. En effet, on risque de surpondérer les intrants dont les émissions en arrière-plan sont faciles à éviter et vice-versa, créant ainsi une conception du procédé distordue par rapport à celle qui correspond à une véritable minimisation des impacts sur tout le cycle de vie (voir la section 5.2.3.4, la Fig.5.8 et les explications supplémentaires dans la section 6.2.2). En principe, cette conclusion s'étend à toute la pratique de l'éco-conception puisque les mêmes distorsions peuvent y survenir.

Comparativement, plutôt que d'engendrer des distorsions, l'utilisation recommandée de l'ACV permet à la fois un gain économique et environnemental. Faisant écho à la section 6.2.2, cette section examine comment ce gain, observé pour le cas d'étude, est extrapolable à d'autres cas d'optimisation en ingénierie, pour d'autres procédés, et sans nécessairement qu'il s'agisse de conception, et ce que cela implique. La section 7.2.1 montre que le gain économique, pourtant souvent négligé par la communauté de l'ACV, peut être une excellente motivation pour financer la réalisation de l'ACV, même s'il est modeste à l'échelle de l'ensemble des coûts d'un grand projet d'ingénierie. Montrer un tel bénéfice économique de l'ACV répond à un des principaux objectifs de cette thèse. La section 7.2.2 revient sur le fait que ce ne sont pas toutes les substances ni toutes les catégories d'impacts qui contribuent significativement à ce gain. La section 7.2.3 montre sous quelles conditions l'optimisation multicritères peut être évitée par la formulation d'un seul objectif, afin de simplifier l'utilisation de l'ACV. La section 7.2.4 utilise ces résultats pour discuter de l'importance des considérations économiques dans une optimisation environnementale. Finalement, la section 7.2.5 donne la perspective d'un concepteur de procédés sur différents aspects de la méthodologie de l'ACV.

7.2.1 Bénéfice économique de l'ACV

Une des conclusions importantes de ce projet est que l'ACV, en tant que source d'informations sur les processus d'*arrière-plan* dans un contexte d'optimisation de la conception d'un procédé, permet un gain à la fois économique et environnemental. Ce gain peut être divisé comme suit :

- Un gain *primaire* qui provient du fait que le potentiel d'évitement d'impacts est toujours plus grand dans l'ensemble du cycle de vie du procédé que pour les émissions du procédé seulement. L'utilisation de l'ACV comme point de départ pour identifier ce potentiel d'évitement élargi permet d'élaborer une stratégie volontariste d'approvisionnement qui évitera davantage d'impacts³² – à moindre coût – qu'une stratégie focalisée sur le procédé lui-même (qu'il ne faut pas négliger non plus, quand même). Ce gain *primaire* n'existe que dans le cas de mesures volontaires car il serait capturé par les fournisseurs eux-mêmes dans le cas de mesures obligatoires pour tous.
- Un gain *secondaire* qui provient du fait que la conception de procédé est avantageuse si elle considère les impacts dans l'ensemble du cycle de vie plutôt que de négliger ceux des fournisseurs à l'arrière-plan. Ce gain existe lorsque les impacts à l'arrière-plan ne sont ni parfaitement corrélés au coût des intrants, ni déjà internalisés. Lorsqu'une taxe sur les émissions ou un système de permis échangeables, applicables à tous, entre en vigueur après la conception du procédé mais avant sa construction, le gain prend la forme de surcoûts qui ne seront plus refilés par les fournisseurs puisque l'utilisation des intrants ayant davantage d'impacts aura été réduite par une meilleure configuration du procédé.
 - Dans le cas d'améliorations incrémentielles de conception, l'espérance de ce gain est toujours positive mais pas nécessairement significative par rapport à d'autres incertitudes. Par exemple, pour la taille optimale d'une pièce d'équipement, une

³² Pour être optimale, la stratégie d'approvisionnement ne doit pas se limiter à changer les intrants pour d'autres ayant moins d'impact selon l'ACV. Elle doit aussi intégrer la possibilité de payer les fournisseurs actuels pour les convaincre de réduire leurs impacts, ou de chercher de nouveaux fournisseurs avec moins d'impacts pour les mêmes intrants. Pour faire une utilisation véritablement efficace du capital de sympathie à l'environnement – forcément limité – de l'entreprise, il faut alors trouver la combinaison qui maximise l'évitement d'impact pour un coût donné (Pareto-optimale) en considérant toutes les options comme faisant partie d'un même espace de décision.

valeur correcte (151 ± 20 mm) sera toujours préférable à une valeur biaisée par l'absence de données sur les impacts en arrière-plan (150 ± 20 mm), mais il sera quand même prioritaire de réduire d'autres incertitudes avant de trouver quelle taille minimise réellement les impacts du cycle de vie.

- En présence de discontinuités technologiques, tel qu'illustré à la section 5.2.3.1, un gain improbable mais élevé s'ajoute à l'espérance de gain. Par exemple, dans la Fig.5.10, la considération des processus d'arrière-plan inverse complètement les choix technologiques (capture et SNG), pour un gain économique substantiel, à condition d'être certain que la future taxe sur le CO₂ sera entre 61 et 62 \$/tonne. Toutefois, il aura quand même fallu fabriquer de toutes pièces un cas limite – le rabais de 17\$ exactement par GJ de bois – pour montrer un tel effet sur la prise de décisions. Dans des circonstances plus réalistes, la pénalité (taxe ou permis) pourrait être trop incertaine pour influencer la prise de décisions de cette façon.
- Dans un projet de plusieurs centaines de mégawatts, l'espérance de gain *secondaire* justifie toujours largement le coût d'acquisition des données d'arrière-plan. Par contre, cela ne doit pas se faire au détriment de l'amélioration des modèles et des prévisions économiques afin d'en réduire les incertitudes.

Dans ces circonstances, on peut se demander si le gain *secondaire*, qui a été le sujet principal de cette thèse, sera jugé pertinent par les industriels et pourra convaincre de faire affaire pour la réalisation d'une ACV, indépendamment du gain *primaire*. Toutefois, son existence théorique a été clairement démontrée par cette thèse, ce qui répond à l'hypothèse de recherche : l'espérance de gain est de l'ordre de 1 \$/MWh, multiplié par la probabilité d'une taxe entre 61 et 62 \$/tonne.

La *morale de l'histoire* est donc que l'ACV est nécessaire lorsqu'il est question d'adopter une politique d'achat ou d'approvisionnement « vert », à défaut que les impacts environnementaux des fournisseurs aient déjà été internalisés par une loi. Par contre, lorsqu'il est seulement question d'optimiser la conception d'un procédé, il est possible d'obtenir un résultat adéquat en pratique, tout en se passant de l'ACV, à condition 1) de calculer les coûts dans une perspective du cycle de vie, 2) d'estimer le coût futur des intrants énergétiques et énergivores avec un biais à la hausse, et 3) d'accorder aux émissions du procédé une valeur correspondant à leur éco-coût. En respectant ces conditions, la possibilité de gain supplémentaire grâce à l'ACV devient bien théorique.

7.2.2 Le poids relatif des différentes émissions et catégories d'impacts

Pour que les émissions des processus d'arrière-plan puissent exercer un poids significatif sur la conception d'un procédé ou sur les choix technologiques, il faut impérativement que leur coût d'évitement soit significatif comparativement aux coûts des intrants respectifs et à leur incertitude, tel qu'indiqué par le ratio w_i/c_i défini à la section 6.2.2. Autrement dit, l'intrant doit offrir une très faible valeur ajoutée par unité de coût d'évitement pour que ses impacts à l'arrière-plan deviennent le principal déterminant du choix de garder cet intrant en plus ou moins grande quantité. Puisque les résultats de la section 6.2.4.3 indiquent que les coûts d'évitement proviennent souvent très majoritairement du CO₂, on peut s'attendre à ce qu'un tel intrant, s'il existe, soit un produit très peu transformé qui demande beaucoup d'énergie à produire mais n'émet rien à l'utilisation (contrairement à un produit pétrolier), laissant ainsi toutes les émissions à l'arrière-plan, dont une grande quantité de CO₂. L'électricité et le ciment viennent à l'esprit, ce dernier émettant aussi beaucoup de CO₂ provenant autant du combustible que du calcaire.

Le site web de Vogtländer (www.ecocostsvalue.com) donne le ratio entre les éco-coûts (berceau-à-barrière) et le prix pour 473 produits. Ce ratio est toujours plus grand ou égal à w_i/c_i (section 6.2.2). Au haut de la liste se trouvent le chauffage domestique (2.0), la distribution du gaz naturel (ratio 2.0), la chaux (1.8), les céréales (1.8), le noir de carbone (1.7), la viande (1.7), et le raffinage du pétrole (1.7). La chaux et le noir de carbone seraient donc deux bons exemples d'intrants dont le prix reflète mal les coûts d'évitement, et qui seraient probablement sur-utilisés par un procédé ayant été optimisé sans connaissance des émissions en arrière-plan. Comparativement, les cinq autres produits de la liste ne sont pas couramment des intrants. De plus, les éco-coûts des céréales et de la viande ne correspondent pas aux coûts de prévention dans le cas où, par exemple, un simple engrais à diffusion lente permet l'évitement. Le ratio w_i/c_i serait alors inférieur au ratio donné, même pour les cibles de réduction d'impacts les plus sévères.

Pour les 466 autres produits, à mesure que le ratio entre les éco-coûts et les coûts diminue, et donc le ratio w_i/c_i aussi, il faut s'attendre à ce que l'effet des émissions en arrière-plan soit progressivement noyé dans les incertitudes sur les coûts, rendant l'ACV de moins en moins utile pour l'optimisation d'un procédé *en tant que source d'information sur l'arrière-plan*. En effet, les coûts d'évitement, même s'ils peuvent paraître faramineux du point de vue de l'émetteur en arrière-plan qui aimerait bien les esquiver, restent néanmoins négligeables dans le coût d'un

produit fini, surtout en ce qui a trait aux émissions autres que le CO₂. Cela est d'autant plus vrai pour les intrants d'un procédé industriel qui sont à forte valeur ajoutée, comme par exemple un équipement sophistiqué (compresseur, réacteur, *etc.*). Lorsque la valeur des coûts d'évitement du cycle de vie est petite devant la valeur de l'intrant, l'optimisation du cycle de vie se fera de préférence par des choix d'approvisionnement plutôt que des choix de conception, comme illustré à la section 6.2.5 pour les émissions autres que le CO₂ pour les intrants énergivores. Autrement dit, le gain *secondaire*, tel que défini dans la section précédente, s'estompe au moins aussi rapidement que le carré de w_i/c_i , de façon analogue à ce qui est illustré à la Fig.5.12. Il n'est donc pas nécessairement significatif pour l'ensemble des 466 produits, surtout pour les émissions autres que le CO₂.

Le CO₂ des processus d'arrière-plan représente un cas particulier, indépendamment du rôle du CO₂ à l'avant-plan dans le cas d'étude, pour deux raisons. Premièrement, comme expliqué la section 6.2.4.3, le CO₂ représente très souvent le principal coût d'évitement dans le cycle de vie d'un intrant. Deuxièmement, vu l'omniprésence du CO₂ dans le cycle de vie de chaque intrant, son coût d'évitement est partiellement corrélé aux prix. Or, seule la composante non-corrélée peut avoir un effet sur la conception d'un procédé ou sur les choix technologiques. En effet, on voit bien dans l'équation 6.4 que l'ajout ou le retrait des coûts d'évitement (w_i) ne donne aucun avantage à un intrant plutôt qu'un autre, s'ils ont tous le même ratio w_i/c_i . Si un effet sur la prise de décisions a pu être observé aux sections 5.2.3.1 (pour les choix technologiques) et 5.3.2 (pour la conception), c'est qu'il reste une composante en CO₂ non-corrélée aux prix des intrants, qui pousse alors la prise de décisions en faveur de l'efficacité énergétique du cycle de vie.

Ce biais est généralisable vu que c'est évidemment l'énergie elle-même qui représente le plus grand contenu énergétique par unité de valeur ajoutée. Ainsi, plus on accorde de valeur au CO₂ en arrière-plan, plus les décisions doivent tendre à éviter les intrants représentant peu de valeur ajoutée par rapport à leur contenu énergétique. Par exemple, en augmentant la taille d'un échangeur de chaleur au-delà du seuil de rentabilité, on sacrifie de la valeur ajoutée pour éviter du CO₂, mais si on n'exagère pas trop, on retrouvera une rentabilité supérieure grâce à un crédit d'évitement de CO₂. En ajoutant la valeur du CO₂ en arrière-plan dans le calcul des coûts du cycle de vie, l'effet sera toujours de favoriser l'efficacité énergétique.

Il est à noter que les bases de données d'ACV *mécanicistes*³³ comme *ecoinvent* ont le défaut bien connu de sous-estimer le cycle de vie des équipements. En effet, celles-ci ne considèrent, en première approximation, que les matériaux contenus dans les équipements installés, plutôt que l'ensemble des produits et services accompagnant leur fabrication. Selon l'approche hybride « input-output », les impacts des équipements seraient plutôt environ le triple³⁴. Ainsi, les écarts entre les t_i seraient diminués dans la Table 5-2, les valeurs déjà les plus faibles étant les seules à être augmenter significativement vu qu'elles contiennent une part élevée d'équipements (garnissage en acier inoxydable, infrastructures de la centrale et du transport de CO₂). Il faut donc éviter de surinvestir dans l'efficacité énergétique car la construction d'équipements comme les échangeurs de chaleur émet aussi beaucoup de CO₂. Si une base de données comme *ecoinvent* sous-estime systématiquement le CO₂ émis dans la fabrication d'équipements, alors l'utilisation d'une telle base de données en contexte d'optimisation aura systématiquement tendance à sur-utiliser ces équipements, par exemple avec des échangeurs trop gros.

Pour résumer, l'évitement du CO₂ à *l'arrière-plan* se fait principalement par des choix de conception favorisant l'efficacité énergétique mais pas trop, alors que l'évitement des autres substances à *l'arrière-plan* se fait principalement en choisissant des fournisseurs davantage consciencieux. La contribution de ces autres substances aux choix de conception est minime, mais ira dans la même direction que le CO₂ dans la mesure où ce sont encore les intrants énergivores qui ont la plus faible valeur ajoutée par unité de coût d'évitement dans les catégories correspondant à ces autres substances.

La différence entre le CO₂ et les autres substances n'a rien à voir avec l'importance que l'on peut accorder à chaque catégorie d'impacts en tant que préoccupation environnementale. Elle découle plutôt du fait que les émissions de CO₂ sont comparativement massives en général et poussent donc les coûts de prévention à la hausse. Bien que les éco-coûts, proportionnels aux dommages, ont un rôle à jouer pour établir un coût de compensation lorsque la prévention est impossible, tel qu'illustré à la Fig.6.1, il reste que ce sont les coûts de prévention qui constituent la fraction majoritaire de l'effet exercé par chaque substance sur la prise de décisions, surtout si la cible de réduction globale est elle-même élevée. En effet, si la fraction des impacts à prévenir est élevée

³³ Ce qualificatif sera décrit plus en détails à la section 7.3.2.

³⁴ Selon le séminaire « LCA Masterclass » du Dr Bo Weidema à Polytechnique.

pour les intrants *des autres* (grand X_j dans Fig.6.1), il est logique qu'elle le soit aussi pour *les nôtres* (grand x_{ik} dans Fig.6.1).

Comme le coût de prévention n'est pas corrélé au dommage, il est donc normal que le poids exercé sur la prise de décisions se corrèle davantage à la masse totale des émissions, pertinente pour la fraction majoritaire, plutôt qu'aux dommages, pertinents pour la fraction minoritaire. Par exemple, les réactifs représentent une partie importante du coût de prévention dans plusieurs cas (l'urée qu'il faut pour neutraliser les NO_x , la matière filtrante pour enlever les poussières, les produits qui servent à flocculer ou à précipiter la matière organique dans l'eau, *etc.*) et leur quantité n'a rien à voir avec les dommages. Autrement dit, même si l'abscisse de la Fig.6.1 est mesurée en unités de dommages, l'aire sous la courbe aura quand même tendance à se corrélérer à la masse totale des polluants plutôt qu'à leurs dommages. Si les impacts proviennent d'une petite masse très polluante, la partie gauche de la courbe sera généralement plus basse (faibles coûts de prévention par unité d'impacts) que si les impacts proviennent d'une grande masse de substances ayant moins d'impacts, vu que cela demande moins de réactifs, entre autres.

On peut donc conclure que la prédominance du CO_2 sur les coûts d'évitement à l'arrière-plan, et par conséquent le fait que la considération d'un système à l'arrière-plan soit généralement favorable à l'efficacité énergétique d'un procédé, ne sont pas des artefacts du choix de la capture de CO_2 comme procédé à l'étude. Ce sont plutôt des conséquences de la nature des enjeux environnementaux actuels, en particulier le fait que le CO_2 représente la plus grande fraction de la masse totale des émissions qui seront à prévenir à l'arrière-plan. On peut donc s'attendre à ce que ces conclusions soient généralisables au contexte plus général de l'éco-conception, tant que les enjeux seront les mêmes. C'est ce que l'on voit sur la Fig.6.5, où seule une petite minorité de processus déroge à cette règle. Ainsi, une bonne éco-conception, pour n'importe quel type de produit, devrait toujours être une conception qui s'appuie sur des fournisseurs consciencieux et qui tend vers l'efficacité énergétique, et non une conception dispendieuse qui gaspille l'opportunité d'éviter davantage d'impacts ailleurs. Une bonne éco-conception doit éviter de mettre une emphase excessive sur la réduction des émissions à l'avant-plan du détriment du reste du cycle de vie, mais elle doit aussi éviter de mettre une emphase excessive sur le remplacement des intrants par d'autres, sur la base trop étroite des résultats bruts de leur ACV.

7.2.3 Optimisation avec ACV, mais avec ou sans l'approche multicritères ?

Cette section examine la pertinence d'utiliser l'ACV avec l'approche multicritères, plutôt qu'avec une approche monocritère, toujours dans le contexte de l'optimisation de la conception d'un procédé. Comme indiqué à la section 6.2.2, la principale utilité de l'approche multicritères est de permettre de gérer quelques paramètres inconnus en montrant l'ensemble des solutions optimales formant différents compromis sur la plage d'intérêt pour chacun de ces paramètres inconnus. Dans le cas qui nous concerne, il s'agit de la pondération des catégories d'impacts, ou encore le coût d'évitement moyen ou marginal, le coût de prévention moyen ou marginal, ou la cible locale ou globale d'évitement. Comme ces quantités sont toutes des fonctions monotones les unes par rapport aux autres, elles ne représentent qu'une seule inconnue indépendante par catégorie d'impacts. De plus, deux types d'incertitudes affectent la cible globale de réduction d'impacts. Il y a l'incertitude sur la valeur de *niveau de risque négligeable* qui peut faire consensus, et l'incertitude sur la fraction de cette cible qui sera réellement atteinte et/ou qui est à considérer. Du point de vue de l'optimisation, cela revient encore au même. Il n'y a donc jamais besoin de plus d'une fonction-objectif par catégorie d'impacts.

De plus, le nombre de fonctions-objectif peut être inférieur au nombre de catégories car il ne sert à rien d'optimiser séparément celles qui représentent une trop petite incertitude de coût d'évitement en valeur absolue, soit parce que les quantités émises sont petites dans un système en particulier, soit parce que la cible globale de réduction d'impacts d'intérêt est connue avec précision. Pour ces catégories, il suffit de choisir une cible précise et de fusionner les coûts d'évitement correspondants avec les autres coûts. Dans le cas du procédé de capture de CO₂, ce choix est facile car la catégorie GWP est la seule pour laquelle les émissions d'avant-plan sont d'intérêt, puisque le CO₂ à capturer en fait partie, et la seule avec des coûts d'évitement significatifs à l'arrière-plan, même avec une cible sévère comme illustré à la Fig.6.4. Il est donc tout à fait approprié d'utiliser le coût du cycle de vie et le GWP du cycle de vie comme objectifs d'optimisation. De plus, si la seule cible globale de réduction de GWP d'intérêt est *celle qui rentabilise* tout juste le système de capture de CO₂, alors l'optimisation monocritère convient très bien, comme expliqué à la section 7.1.4, avec une fonction-objectif correspondant au coût d'évitement du GWP du cycle de vie lui-même. Autrement dit, il n'est pas vraiment intéressant de connaître toute la gamme de configurations du système de capture de CO₂ pouvant être

avantageuses lorsque le prix du permis échangeable d'émissions atteint 80 \$, 120 \$ ou 160 \$/tonne, lorsque l'on sait très bien que de tels prix ne seront pas atteints de sitôt.

Il existe donc plusieurs types de situation où une simple approche monocritère convient parfaitement et l'approche multicritère n'est aucunement requise, c'est-à-dire que les cibles de réduction font consensus dans leur ensemble : lorsque les incertitudes sur les seuils de risque négligeable sont faibles, lorsque c'est une législation attendue qui impose des cibles exactes, lorsque les coûts de prévention sont faibles par rapport aux coûts des intrants correspondants, et lorsque le procédé étudié est considéré *a priori* comme une technologie marginale. Ces types de situation couvrent une fraction importante de tous les cas de figure possibles.

En conclusion, l'approche proposée permet de recourir à l'optimisation multicritères seulement lorsque nécessaire, tout en considérant l'ensemble des catégories d'impacts d'une façon cohérente avec le contexte réel de la prise de décisions où l'opportunité d'échanger l'évitement d'impacts par-ci et par-là existe toujours dans les faits. Par le fait même, elle permet aussi une façon avantageuse de pondérer les catégories d'impacts en ACV. En effet, la pondération basée sur les coûts d'évitement optimisés, présentée à la section 6.2.7, permet automatiquement de confronter deux produits de prix différents et de voir si la différence de prix peut être justifiée par un gain environnemental, ou si elle devrait plutôt être consacrée directement à la prévention d'impacts *ailleurs*, et ce, sans négliger le potentiel de prévention propre à l'arrière-plan de chaque produit comparé. Pour ce faire, la pondération tient automatiquement compte du fait qu'une émission difficile à prévenir est plus problématique, à dommage égal, dans ce contexte. Par ailleurs, elle permet de contourner complètement l'étape controversée de pondération de la *valeur* des dommages. Cette étape est remplacée par la fixation d'une cible globale de réduction d'impacts pour chaque catégorie, soit selon la législation attendue, soit selon la cible de *niveau de risque négligeable*, selon le contexte. Déterminer cette cible de *niveau de risque négligeable* peut susciter encore un peu de controverse, mais reste un débat quand même beaucoup plus circonscrit vu qu'il porte sur le seuil des dommages plutôt que sur leur intensité.

7.2.4 L'importance relative des coûts et des éco-coûts

Cette section vise à clarifier le rôle des coûts non-environnementaux dans le contexte d'une optimisation des impacts environnementaux. En particulier, l'idée qu'une conception d'impact minimal puisse se définir sans égards aux coûts résulte d'une fausse dichotomie.

À l'exception de quelques intrants identifiés à la section 7.2.2, comme la chaux et le noir de carbone, la fonction-objectif proposée à l'équation 6.4 accorde généralement une valeur plus grande au coût d'un intrant qu'à ses impacts environnementaux représentés par leur coût d'évitement w_i . Ces quantités peuvent-elles être réellement agrégées pour autant ? Fondamentalement, la présence côte-à-côte des coûts et des coûts d'évitement est validée par le fait qu'il existe toujours des ressources, à la marge, qui peuvent être consacrées ou non à de l'évitement d'impacts. Par exemple, le même genre de tuyauterie peut servir à transporter du CO₂ ou peut servir à étendre un réseau de puits de gaz de schiste. Le même genre de tissu peut servir dans un filtre à particules fines ou il peut servir à fabriquer un autre produit. Sans doute plus important encore, le même ingénieur peut décider de consacrer sa carrière à la catalyse de la réduction des émissions des moteurs diesel, ou il peut la consacrer à la catalyse de diesel synthétique à partir du charbon. Il n'existe donc pas deux vases clos où pourraient s'optimiser séparément les choses économiques et environnementales, qu'il s'agisse de la conception d'un procédé, de l'éco-conception d'un produit, ou de tout autre type de décision.

Ainsi, la principale raison qu'on puisse donner en défaveur d'une optimisation (ou d'une éco-conception) basée directement sur la minimisation des résultats d'une ACV, sans égard aux coûts, dépasse largement la distinction entre les émissions évitables et inévitables des procédés d'arrière-plan et les distorsions que cela peut apporter. La principale raison est plutôt que l'ACV sans les coûts reste coupée d'une grande partie de ce que serait véritablement (mais indirectement) le *cycle de vie bien compris*, c'est-à-dire la totalité des coûts assimilables à une opportunité de prévenir des impacts environnementaux *ailleurs*. L'ACV employée seule en cours d'optimisation, faute de considérer la relation existant entre un *choix vert* particulier et l'effet qu'il a sur les moyens qui restent pour faire des *choix verts* ailleurs, se trouve alors à demander à l'algorithme de favoriser des *choix verts* mais dispendieux, dilapidant ainsi les ressources pourtant nécessaires pour pouvoir faire des *choix verts* ailleurs, au détriment de l'environnement.

Comparativement, une conception qui minimiserait les coûts du cycle de vie, même sans l'ACV, est déjà en quelque sorte une éco-conception, puisqu'on peut difficilement se tromper en choisissant les intrants au plus bas coût pour minimiser leurs impacts, maximisant ainsi les ressources restant disponibles pour de l'évitement d'impacts *ailleurs*. Les résultats de cette thèse ont montré, à certaines conditions, que l'optimum économique sans ACV et le véritable optimum ne diffèrent que très marginalement lorsqu'il est question de la conception d'un procédé, l'optimum sans ACV présentant un léger sous-investissement dans l'efficacité énergétique. Les conditions à respecter sont : assigner un éco-coût aux émissions locales lorsqu'une variable de décision les affecte, considérer que les fournisseurs minimisent leurs propres émissions quitte à leur imposer une politique d'approvisionnement conséquente s'il le faut, et vérifier que le procédé utilise uniquement des intrants énergivores (CO₂ majoritaire en éco-coûts). Lorsque ces conditions sont respectées, une décision prise sur des critères purement économiques serait donc plus avisée qu'une décision prise sur des critères purement environnementaux, même d'un point de vue strictement environnemental. De plus, l'optimum économique sans ACV peut être considérablement rapproché du véritable optimum si les prix futurs de l'énergie et des intrants énergivores sont estimés avec un biais à la hausse.

Il n'y a donc rien de fondamentalement contradictoire entre rentabilité, profit et performance environnementale ; au contraire, c'est lorsqu'elles sont non-rentables que la performance environnementale d'activités comme le recyclage ou l'énergie photovoltaïque peut être mise en doute. Par exemple, un investissement dans une centrale au charbon avec l'obligation contractuelle de compenser 101% de toutes ses émissions du cycle de vie aurait bien moins d'impacts environnementaux qu'un investissement dans l'énergie photovoltaïque qui s'avérerait moins rentable.

En conclusion, pour une éco-conception optimale ou autre décision similaire, l'analyse des coûts et l'ACV ont une importance égale dans la mesure où les deux sont nécessaires pour formuler correctement un problème d'optimisation. Dans ce contexte, ce projet a démontré que l'ACV sert principalement à identifier les émissions évitables et inévitables à l'arrière-plan. Cette étape est tout autant nécessaire que la suivante, qui est d'estimer le coût de prévention de ces émissions évitables et l'éco-coût de ces émissions inévitables. Par ailleurs, cette utilisation précise de l'ACV peut affecter la façon dont il est souhaitable de l'exécuter, sujet de la prochaine section.

7.2.5 Perspective méthodologique

Cette section vise à préciser quelle serait la façon idéale de conduire une ACV à l'avenir, pour que ses résultats ajoutent un maximum de valeur à toute prise de décision équivalente à un problème d'optimisation.

Le calcul des éco-coûts à partir des outils actuels d'ACV peut se faire simplement en important la méthode *EcoCosts2007* dans le logiciel *SimaPro*. Les facteurs de caractérisation ainsi importés, pour la plupart basés sur les méthodes *IMPACT 2002* et *CML* (section 6.2.3.3), évitent le double-comptage et intègrent déjà un calcul des éco-coûts davantage à jour que la publication initiale (Vogtländer & Bijma, 2000). Si la méthode *EcoCosts2007* peut sans doute être améliorée encore, par exemple par l'ajout de nouvelles catégories d'impacts ou par la régionalisation des catégories existantes, la façon d'exécuter l'ACV peut aussi être améliorée pour mieux s'arrimer à une approche d'optimisation, tant pour la phase de la collecte de l'inventaire que pour celles de l'évaluation des impacts et de l'interprétation des résultats.

La principale amélioration souhaitable est au niveau du calcul de l'inventaire. Dans la réalisation de ce projet, beaucoup de temps routinier a été consacré à se demander quelles émissions ont un coût de prévention inférieur à leur éco-coût, étape essentielle pour résoudre l'équation 6.1. Faute de temps, il a fallu faire des estimations grossières (section 6.2.3.4). Ainsi, afin de bonifier le rôle de l'ACV, les concepteurs de bases de données d'inventaire pourraient considérer la possibilité d'inclure le coût d'évitement comme donnée connexe à chaque donnée d'inventaire, au même titre que l'incertitude, la régionalisation ou d'autres paramètres souhaités. Cela permettrait non seulement d'automatiser et de préciser l'optimisation de l'approvisionnement, mais aussi d'ajouter des fonctionnalités particulièrement intéressantes aux bases de données, comme la possibilité de tracer l'évolution des impacts en fonction de taxes futures, par exemple.

Les méthodes d'évaluation des impacts peuvent aussi être améliorées en reconnaissant que le facteur de caractérisation sert parfois à établir la substituabilité de deux substances à dommage constant, comme c'est le cas avec les éco-coûts, et non pas toujours à comparer des dommages. La différence peut paraître subtile, et ses ramifications dépassent notre champ de compétence. On remarque toutefois que l'évaluation de la substituabilité *probable* de chaque substance, au seuil des dommages, crée moins de distorsions que l'évaluation d'un dommage *potentiel*, vu qu'il n'est

pas souhaitable de favoriser le remplacement de dommages incertains par des dommages certains. De plus, les dommages n'étant pas substituables d'une région à une autre, il pourrait être nécessaire de calculer un éco-coût par substance, par région et par catégorie d'impacts régionalisée. Toutefois, dans une logique où les émissions sont toujours diffuses et leur empreinte toujours virtuelle, une telle régionalisation d'inventaire est peut-être évitable si on fait l'hypothèse qu'il existe une empreinte écologique totale de risque négligeable. Il faudrait donc pouvoir dire : « le risque planétaire est négligeable, peu importe le lieu réel des retombées, si $Z \text{ km}^2$ peuvent en recevoir la totalité sans impacts excessifs. » L'éco-coût pourrait alors être défini pour les catégories *dommages* plutôt que les catégories *problèmes*³⁵.

Enfin, la phase d'interprétation de l'ACV peut à son tour s'adapter aux éco-coûts qu'il soit question ou non d'optimisation d'une conception ou d'un approvisionnement. Notamment, la démarche proposée dans la section 6.2.7 semble nettement avantageuse dès que l'ACV peut servir à une prise de décision équivalente à un problème d'optimisation.

L'utilisation de l'ACV dans un contexte d'optimisation peut aussi affecter certains choix méthodologiques de l'ACV vu que la quantité $(c_i + w_i)$ dans l'équation 6.4 vise principalement à estimer le coût futur de l'intrant i après internalisation des coûts d'évitement. En particulier, le

³⁵ Ceci impliquerait également une valeur monétaire unique pour le DALY (santé humaine). Cela est problématique vu que la santé d'un individu n'est pas substituable avec celle d'un autre, du moins du point de vue de celui qui perd au change. Par contre, ce problème est insoluble même en considérant les catégories *problèmes* car on ne peut pas faire une catégorie par individu! Il faudrait donc arriver à dire : « le risque pour la population est négligeable, peu importe qui prend la fraction prise (tant que c'est diffus), si Y individus peuvent la prendre sans perdre plus d'une année de vie chacun. » Bien entendu, rien n'empêche d'accorder d'abord une valeur monétaire au DALY, et ensuite de calculer Y à partir de la fraction prise de toutes les émissions dont le coût d'évitement dépasse cette valeur.

Il est à noter que les éco-coûts définis dans *EcoCosts2007*, lorsque ramenés sur une base de dommages avec *IMPACT 2002+*, correspondent à 4178 k€/DALY pour les produits organiques respiratoires, 39 k€/DALY pour les produits inorganiques respiratoires, et 3 k€/DALY pour les produits cancérigènes. Il faudrait donc des cibles globales de réduction d'impacts différentes pour harmoniser ces catégories. Par contre, cela ne change pas nécessairement grand-chose au calcul des coûts d'évitement (Eq.6.1) s'il y a peu d'émissions dont le coût de prévention est supérieur aux valeurs dans *EcoCosts2007*. Du point de vue de l'approche originale de Vogtlander, où les éco-coûts ne sont pas pondérés par la suite, il peut porter à confusion que l'éco-coût d'un groupe d'émissions soit hors de proportion avec le coût d'évitement de la majorité d'entre eux, comme c'est déjà le cas avec les gaz à effet de serre autres que le CO₂. L'utilisation d'une approche par catégories *problèmes* minimise cette confusion.

choix entre une ACV de type attributionnel (ACV-A) et conséquentiel (ACV-C) perd de son importance vu qu'en combinant le calcul des coûts et des éco-coûts, c'est le modèle économique qui dicte principalement les frontières du système et les règles d'imputation. Habituellement, le prix reflète le coût de la technologie marginale, et w_i doit donc être basé sur la même technologie marginale (ACV-C). Par contre, l'utilisation d'un w_i basé sur l'ACV-A est acceptable si c_i peut être considéré représenter le coût moyen de production, plus ou moins les incertitudes. Par exemple, n'importe quel « grid mix » composé d'hydroélectricité avec $c_i = 60$ \$/MWh et $w_i = 0$ \$/MWh, et de charbon avec $c_i = 40$ \$/MWh et $w_i = 20$ \$/MWh, donnera le même $(c_i + w_i)$. Cette capacité des éco-coûts de faire converger ce qui serait autrement des résultats divergents est également discutée dans la section A1.2.

Dans un contexte d'optimisation, l'idéal est toujours d'effectuer l'ACV en suivant les mêmes liens économiques que le calcul des coûts, avec un minimum de troncature, ce pour quoi l'approche hybride « input-output » en ACV est probablement la plus appropriée. Cette approche tronque les salaires mais cela ne pose pas de problème en supposant que les salaires futurs n'ont aucune corrélation avec les cibles globales de réduction d'impacts. En ce sens, il est donc correct que l'ACV ignore les impacts environnementaux attribuables aux salaires même s'ils font sans doute partie du *cycle de vie bien compris* énoncé plus haut.

Pour terminer, on remarque que la partie économique du calcul de l'équation 6.4 s'apparente à l'analyse des coûts du cycle de vie (ACCV). Le calcul des coûts d'évitement à l'arrière-plan est donc une passerelle idéale pour avantageusement rattacher l'ACCV et l'ACV à une méthode généralisée d'éco-conception basée sur l'optimisation de l'approvisionnement dans une perspective du cycle de vie. D'ailleurs, une telle méthode couvrirait largement le champ d'application traditionnel de l'ACV, vu que l'approvisionnement optimal est le but recherché (avoué ou non) par une partie de la clientèle de l'ACV. En fait, cela pourrait très bien être la seule méthode cohérente de *choix environnemental* au sens plus large, le sujet de la prochaine section.

7.3 ACV, optimisation et choix environnemental

Le but de cette section est de poursuivre la discussion sur un sujet beaucoup plus vaste que l'ingénierie et l'optimisation, soit le sujet du *choix environnemental* en général, que ce dernier s'assimile ou non à un problème d'optimisation. L'annexe 1 complète cette section.

Les sections 6.2 et 7.2 d'une part, et l'annexe 1 d'autre part, montrent deux chemins menant à la même conclusion : l'utilité d'une méthode de minimisation des coûts du cycle de vie incluant les coûts d'évitement, et la pertinence d'utiliser cette méthode plutôt que l'ACV (en isolation) pour aider certains types de décisions. Cette méthode est essentiellement celle de l'analyse des coûts du cycle de vie (ACCV), à laquelle on greffe des coûts d'évitement basés sur l'ACV et les éco-coûts. La minimisation des coûts totaux du cycle de vie (coûts non-environnementaux, coût d'évitement des émissions évitables et éco-coût des émissions inévitables) mène alors vers une décision rigoureusement optimale en fonction d'une série de cibles de réduction d'impacts à atteindre. La croisée de ces deux chemins fournit l'occasion de discuter un peu plus en détails du rôle idéal que devrait jouer l'ACV dans la prise de décisions (section 7.3.1), mais aussi dans un contexte de sensibilisation (section 7.3.2).

7.3.1 L'ACV et la prise de décisions

Le premier chemin menant de l'ACV à la prise de décisions est celui du cas d'étude. Il part d'un contexte d'optimisation de la conception d'un procédé où l'on veut agir efficacement, soit en prévision de futures taxes sur les émissions pouvant affecter toute la chaîne d'approvisionnement, soit simplement par souci éthique d'agir de façon logiquement compatible avec un objectif de minimisation globale des impacts. Ce chemin mène au constat que le prix d'un intrant représente un coût d'opportunité, ce qui inclut toujours l'opportunité d'éviter des impacts environnementaux ailleurs, opportunité qui se présente toujours *dans les faits*, comme indiqué aux sections 6.2.2 et 7.2.3. Comme le contexte rigoureux de l'optimisation ne permet pas d'arbitrairement exclure cette opportunité de l'espace de décision, on arrive à la conclusion que les coûts non-environnementaux font partie intégrante d'une optimisation environnementale et leur minimisation n'entre aucunement en contradiction avec les objectifs environnementaux. En

pratique, ces coûts non-environnementaux, qu'on peut déterminer par l'ACCV, exercent un poids majoritaire sur la prise de décisions. Les éco-coûts deviennent alors utiles pour établir quel poids supplémentaire exerce chaque catégorie d'impacts sur la prise de décisions, et éventuellement pour unifier tous ces coûts en un critère unidimensionnel d'optimisation tel que l'équation 6.4.

Le deuxième chemin emprunté, davantage philosophique, est celui de l'annexe 1. À partir d'une approche déductive rationaliste, ce chemin essaie de placer le concept de *choix environnemental* dans un cadre épistémologique qui lui convient. En constatant l'intersubjectivité des problèmes environnementaux, ce chemin essaie de départager ce qu'il est possible ou non de savoir à propos du *choix environnemental*, à l'abri de potentiels préjugés mécanicistes et autres jugements de valeur de l'analyste. Ce chemin mène à la conclusion qu'en l'absence d'une internalisation véritable des impacts, l'unique certitude est que l'achat d'un produit plus cher est toujours interchangeable avec l'achat d'un produit moins cher accompagné de la prévention véritable d'impacts, ce qui donne un avantage au produit le moins cher.

Dans le cadre épistémologique en question, le concept d'imputation n'aurait de sens qu'après une véritable internalisation, vu qu'il n'existe aucun lien causal entre le choix de l'un d'émettre et le choix de son client d'acheter son produit. L'imputation fonctionnerait plutôt en sens inverse : c'est la valeur accordée par le consommateur aux produits ou coproduits d'un procédé qui justifie par la suite les coûts de production y compris le coût d'évitement des impacts environnementaux. L'analyse du *choix environnemental* serait alors obligée de passer par l'analyse des coûts d'évitement, du moins si on veut éviter la divergence des résultats en fonction de l'incertitude de scénario. Comparativement à l'approche des éco-coûts, l'approche de l'annexe 1 remplace le technocratique *niveau de risque négligeable* par une nouvelle définition des seuils basée sur la totalité des impacts qui auraient été consentis unanimement par les personnes légitimement concernées sous un régime davantage respectueux du droit environnemental. Toutefois, les deux approches mènent à une conception de ce que *devrait être* la valeur marchande des émissions et leur différence n'est pas nécessairement significative en pratique, vu le niveau élevé d'incertitudes généralement accepté en ACV.

La croisée de ces deux chemins mène à un premier constat assez frappant : il serait irresponsable d'utiliser l'ACV pour appuyer des choix « verts » mais dispendieux. Par exemple, il n'y a rien de vert à ce qu'on oblige un programmeur à trier ses déchets, alors qu'il pourrait être en train de

programmer un robot capable d'en trier mille fois plus. Il n'y a rien d'automatiquement vert non plus aux activités comme le théâtre, qui exigent peu de matériel mais détournent un talent humain d'autres activités comme planter des arbres, construire des éoliennes ou remplacer des filtres à particules fines. Pour éviter de faire des recommandations erronées, une méthode de *choix environnemental* doit permettre de tenir compte de ces considérations directement, sans troncature lors de la construction des frontières du système étudié et lors du choix de règles d'imputation (voir section A1.2). La condition essentielle du *choix environnemental*, qui ne serait alors qu'une optimisation au sens large, serait donc que l'écart de coût soit compensé par un écart opposé de coût d'évitement, de façon à minimiser le coût total du cycle de vie. C'est ce que l'ACCV combinée aux éco-coûts permet alors de déterminer.

Par exemple, la Figure 7.1 illustre un *choix environnemental* hypothétique entre trois savons *a*, *b* et *c*. La courbe pleine illustre différentes solutions intermédiaires Pareto-optimales entre ces savons. De plus, la pente des lignes pointillées entre *a* et *a'* et entre *b* et *c* correspond à l'éco-coût des impacts illustrés sur l'ordonnée. Ainsi, dans l'exemple, le savon *a* comporte 3,00 \$ de coûts et 0,30 \$ d'éco-coûts pour un total de 3,30 \$, le savon *b* comporte 4,00 \$ de coûts et 0,10 \$ d'éco-coûts pour un total de 4,10 \$, et le savon *c* correspond au même total par coïncidence.

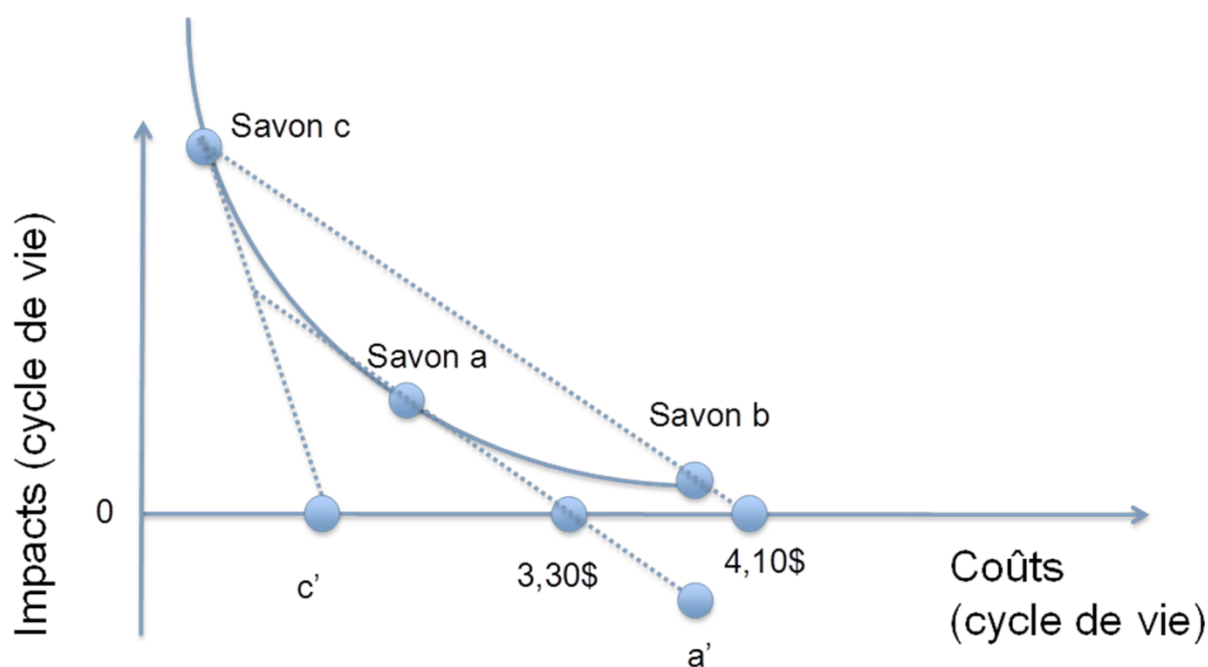


Figure 7.1 : Choix environnemental d'un savon

La Figure 7.1 permet de constater qu'une décision aussi simple que le choix de consommation d'un savon doit quand même respecter les mêmes principes que le choix plus complexe d'une configuration d'un procédé industriel de capture de CO₂. En effet, l'opportunité d'éviter des impacts *ailleurs* existe toujours et fait partie de l'espace de décision des choix simples comme complexes. Ainsi, même si le savon *a* a trois fois plus d'impacts que le savon *b* selon l'ACV, il s'agit quand même du meilleur *choix environnemental* car c'est celui qui minimise le coût total du cycle de vie y compris les coûts d'évitement de ces impacts. La raison de ce choix est que la différence de 0,80 \$ de coût total a elle-même des impacts qui doivent être considérés car ils ne pourront plus être évités *ailleurs*, même s'il n'est pas pertinent pour l'ACV de les mesurer.

Vu autrement, le savon *b* n'a pas réellement moins d'impacts vu qu'il existe une série de solutions le long de la ligne pointillée entre *a* et *a'* qui ont des impacts environnementaux inférieurs à *b* en réalité. Ces solutions correspondent à l'utilisation du savon *a* combiné à divers mécanismes de prévention ou de compensation des impacts environnementaux de son cycle de vie. Ces solutions apparaissent sur Figure 7.1 dès que l'espace de décision est en quelque sorte libéré de la troncature imposée par l'ACV. Vu qu'il ne sera jamais nécessaire de diminuer les impacts globaux en-deçà du niveau de risque négligeable, l'existence de ces solutions est garantie par le fait que la pente *a-a'* est donnée par les éco-coûts, donc le plafond des coûts d'évitement.

En particulier, le scénario *a'*, qui correspond au savon *a* avec une combinaison optimale de mesures de prévention et de compensation totalisant 4,00 \$, soit le coût du savon *b*, devient interchangeable avec *b* parce que la *valeur d'échange* est précisément ce qu'indique l'axe des coûts. Ainsi, il est impossible que le savon *b* soit réellement le meilleur choix, même d'un point de vue strictement environnemental, vu que le savon interchangeable *a'* a des impacts environnementaux inférieurs, et même nets négatifs en fait.

Comparativement au scénario *a'*, l'existence du savon *c'* sur la Figure 7.1 ne peut pas être garantie car la pente *c-c'* emprunte un évitement *facile*, par exemple un crédit d'émissions disponible présentement sur le marché. Le scénario *c'* représente certes un meilleur choix que *a* ou *b* mais le gain *c-c'* n'est pas *imputable* au savon *c*. En effet, dans le contexte d'une véritable internalisation des impacts environnementaux – seul contexte où le mot *imputable* puisse avoir un sens (voir section A1.2) – le savon *c* coûterait environ 4,10\$, comme le savon *b*, vu que les

crédits d'émissions se vendraient tous au même prix près de l'éco-coût³⁶. Le savon *a* demeure donc l'unique *choix environnemental* dans le sens où il permet toujours de minimiser les impacts, du fait qu'il se trouve à l'intersection de la courbe Pareto-optimale et de la tangente dont la pente représente les éco-coûts. La machinerie devrait donc être configurée pour produire (et offrir au consommateur) le savon *a*, quitte à le vendre 3,30 \$ pour permettre de compenser ses impacts environnementaux.

L'exemple de la Figure 7.1 illustre bien l'idée que le prix d'un produit puisse être le premier indicateur de ses impacts environnementaux, vu qu'il correspond à la partie souvent majoritaire tronquée par l'ACV. Ainsi, l'ACV sous-estime nettement les impacts environnementaux potentiels des activités dématérialisées en omettant qu'elles accaparent des ressources qui auraient pu servir à éviter des émissions *ailleurs*. Par exemple, un billet de théâtre de 62,30 \$ aura toujours au moins potentiellement les impacts d'une tonne de CO₂ qui n'a pas été évitée par la capture dans une centrale NGCC. Ou encore, selon les technologies marginales présentées à la section 6.2.3.3, les impacts de 3,4 kg d'ammoniac ou de 4,4 kg de phosphore non éliminés d'une ferme porcine, les impacts de 60 g d'émissions de zinc non évitées par la substitution d'acier galvanisé, ou encore les impacts de 3,3 kg de suie non filtrée de l'échappement d'un moteur de camion. Des contraintes physiques bien réelles empêchent d'obtenir un billet de théâtre et de prévenir l'un de ces impacts simultanément, à commencer par la disponibilité de la main d'œuvre.

En conclusion, les principes valables dans un contexte d'optimisation sont tout aussi valables pour les décisions les plus simples, comme le choix d'un savon ou d'un billet de théâtre. Si l'idée du *choix environnemental* veut dire quelque chose du tout, ce doit être le choix qui minimise les coûts totaux du cycle de vie, incluant les coûts d'évitement.

³⁶ 4,10 \$ est la somme des coûts actuels et des éco-coûts, en tant qu'estimation de la somme des coûts futurs, incluant permis ou taxes sur les émissions. En effet, dans un marché de permis d'émissions tendant vers l'équilibre, le prix devrait s'approcher du coût de prévention marginal, qui lui-même devrait s'approcher de l'Éco-coût à mesure que le plafond d'émissions est réduit jusqu'au niveau de risque négligeable. L'estimation de 4,10 \$ sera donc d'autant meilleure si le processus d'internalisation ramène le total des impacts au niveau de risque négligeable, tel que supposé dans la définition des éco-coûts. Le fait qu'il existe des mesures d'évitement plus *faciles* que d'autres crée alors une rente pour le vendeur du permis et non pour l'acheteur, d'où l'impossibilité d'arriver à *c'* dans ce cas.

7.3.2 L'ACV et la sensibilisation

Un différent champ d'application de l'ACV, lorsqu'il n'est pas trop question de prise de décisions, est le besoin spécifique de comprendre et de sensibiliser aux impacts environnementaux. Dans ce contexte, la façon idéale de conduire l'ACV pourrait être différente de l'approche proposée dans cette thèse, notamment pour le choix des règles d'imputation, et par conséquent le choix des frontières de l'inventaire du système. La question est alors essentiellement de savoir si d'autres règles peuvent être admises ou si cela ne serait qu'une porte d'entrée aux préjugés et jugements de valeur de l'analyste.

D'une certaine façon, le choix d'une méthodologie d'ACV peut dépendre de son audience, qui ne veut pas nécessairement passer par l'ACCV et les éco-coûts et pourrait préférer l'une des formes d'ACV traditionnelle. Comme l'ont remarqué Ekvall, Tillman et Molander (2005), l'ACV-A (attributionnelle) s'associe mieux à une éthique déontologique, alors que l'ACV-C (conséquentielle) s'associe mieux à une éthique téléologique. Si une personne demande une ACV parce qu'elle ne veut pas acheter de produits ayant transité dans une machine émettant du (2-(2-methoxymethylethoxy)methylethoxy)-propanol parce que la sonorité du mot lui donne de l'urticaire, alors le devoir de l'analyste est de lui fournir une analyse conforme à la situation.

Peu importe son choix éthique, l'audience devrait toutefois être bien informée que chaque variante de l'ACV (ACV-A, ACV-C, ACV hybride « input-output », ACCV avec éco-coûts) suit son propre jeu de règles pour tracer les frontières du système d'un produit, que ce soit en incluant ou en excluant la ventilation, l'éclairage, les produits nettoyant le plancher, le transport des employés, leurs voyages discrétionnaires, le logo illuminé du siège social de l'assureur, *etc.* Ces jeux de règles ne sont pas complètement arbitraires ; ils sont chacun le reflet d'une philosophie. À notre avis, ces différents jeux de règles se situent sur un continuum entre une conception mécaniciste et une conception catallactique de l'imputation, à défaut de trouver de meilleurs termes. Il s'agirait donc là du principal axe de différenciation de ces méthodes.

À l'extrême mécaniciste, le *cycle de vie* se limiterait hypothétiquement au sort des atomes qui se trouvaient dans le même gisement que les atomes du produit étudié. Tout le reste serait trop spéculatif pour être inclus, puisque chaque machine pourrait avoir produit d'autres produits de toute façon, chaque camion pourrait avoir transporté d'autres marchandises de toute façon, *etc.*

À l'extrême catallactique, le *cycle de vie* ne devrait comprendre que les émissions qui auraient pu être évitées en échange du produit, tel qu'indiqué par son prix. Tout le reste serait trop spéculatif pour être inclus, puisque cela demanderait une prédétermination du choix des autres de continuer d'émettre ou non. Les éco-coûts permettraient alors de traduire le prix en quantités d'émissions évitables en toutes circonstances, permettant ainsi d'exprimer le *cycle de vie* en termes habituels de flux causant des dommages auxquels on veut *sensibiliser*.

Dans l'hypothèse où toute règle d'imputation doit nécessairement se trouver entre ces deux conceptions mutuellement incompatibles, une approche intermédiaire est nécessairement partiellement erronée, notamment en supposant que les comportements humains peuvent être à la fois déterminés et indéterminés. L'analyste laisse alors place à ses propres jugements de valeur dans la recherche d'un « processus direct, abstrait ou pur d'imputation des valeurs » (section A1.1.2), par exemple en se demandant si la ventilation et l'éclairage servent davantage à un coproduit plutôt qu'un autre, tout en ignorant la contribution de la télé plasma de l'ouvrier. Voilà la principale critique qu'on puisse faire simultanément à l'ACV-A et l'ACV-C. Comme aucun théoricien de l'ACV ne semble prêt à pousser la logique mécaniciste jusqu'au bout, l'avenir méthodologique de l'ACV n'a qu'une direction possible : l'extrême catallactique.

Par exemple, ces conceptions offrent des réponses clairement contradictoires à la question du « grid mix », sujet sur lequel doit, bien entendu, se terminer toute discussion sur l'ACV qui se respecte. À l'extrême mécaniciste, les lois de Kirchhoff peuvent déterminer le sens d'écoulement de la puissance électrique, et ainsi indiquer qu'à Québec, mais pas à Montréal, l'électricité provient presque toujours des rivières Manicouagan, Outardes et Churchill, et presque jamais de Gentilly, de Sorel-Tracy ou d'une importation. Mais encore ici, aucun théoricien de l'ACV ne semble prêt à adopter cette logique. À l'extrême catallactique, le « grid mix » est essentiellement planétaire puisqu'une aluminerie pourra toujours déménager d'un endroit où l'électricité se vend cher vers un endroit où elle se vend moins cher, équilibrant ainsi tous les réseaux de la planète. La provenance d'un électron plutôt qu'un autre devient sans intérêt puisque personne ne peut modéliser les mécanismes biochimiques de la pensée des quelques ministres réellement capables de contraindre les capacités de production et d'interconnexion. Comme indiqué précédemment, tous les « grid mix » seraient alors aussi bons les uns que les autres tant que la somme des coûts de production et des coûts d'évitement tend vers le prix réel de l'électricité advenant une

internalisation complète des impacts environnementaux. Entre ces deux extrêmes opposés, on trouve surtout des « grid mix » établis selon des règles arbitraires, souvent alimentées par des préjugés nationalistes, qui n'ont pas leur place dans une analyse sérieuse.

Pour revenir au sujet de cette thèse, les impacts environnementaux de la capture de CO₂ correspondent principalement à ceux d'électricité *qui ne pourra plus être produite*. L'audience qu'on veut *sensibiliser* à ces impacts ne s'attend pas à ce qu'ils divergent selon que cette électricité provienne de la centrale thermique elle-même ou d'un « grid mix ». Il s'agit pourtant d'un fait indéterminé (sauf au sens des lois de Kirchhoff), puisqu'on ne pourra jamais savoir comment le réseau électrique aurait évolué si la capture de CO₂ n'avait jamais existé, et donc quelle partie du réseau aura réellement servi à combler le manque à gagner – ce qu'on pourrait appeler une incertitude de scénario. L'audience, pour se faire *sensibiliser* en toute confiance, n'est pas dupe et s'attend à un résultat qui converge vers une mesure d'impacts unique qui ne dépend pas d'une telle incertitude de scénario. C'est ce que permet l'approche recommandée à la section 6.2.7, qui semble donc toute indiquée même dans un contexte de *sensibilisation*.

En conclusion, la *sensibilisation* aux impacts environnementaux se fait logiquement en montrant comment ceux-ci émergent entre les individus, leurs jugements de valeur et les moyens qu'ils se donnent pour atteindre leurs fins, à partir d'une approche axiologiquement neutre basée sur une théorie convaincante de l'agir et de l'interagir humains, qui ne suit aucun modèle déterministe, et sans troncature des étapes du cycle de vie qui ne sont pas mécaniquement rattachées au système étudié. À notre avis, la comparaison des coûts et des coûts d'évitement fournit exactement cela, sous la forme d'un score unique qui ne passe pas par une étape subjective d'agrégation, qui fournit un résultat considéré comme intuitif par l'audience et facilitant la sensibilisation. Cette comparaison est axiologiquement neutre, à condition que le niveau de risque négligeable dans chaque catégorie d'impacts puisse être assimilé à la quantité qui aurait pu être consentie sous un régime davantage respectueux du droit environnemental.

Une telle approche, exemplifiée par l'analyse des coûts d'évitement, permettrait à l'ACV d'évoluer au-delà d'un exercice comptable, vers une approche de sensibilisation aux impacts environnementaux tels qu'ils sont, émergents et indéterminés.

CONCLUSION

Ce projet de recherche a permis de faire une *validation de principe* de l'intégration de données d'analyse du cycle de vie (ACV) dans un contexte d'optimisation, pour le cas d'étude de la conception d'un procédé de capture de CO₂ avec le 2-aminoéthanol. Cela s'est fait grâce à une plateforme de simulation permettant de générer diverses conceptions du procédé et de les évaluer en termes de coût et d'impacts environnementaux. L'effet net de l'ACV sur la conception a été démontré en comparant les meilleures conceptions selon que les impacts environnementaux sont évalués d'un point de vue local ou dans une perspective du cycle de vie, c'est-à-dire en négligeant ou non le système d'émissions en arrière-plan.

Dans certains cas, un bénéfice net attribuable à l'ACV a pu être estimé, répondant à l'objectif général du projet. De plus, les résultats de cette recherche ont mené à plusieurs observations sur les plans technique, économique et environnemental. Les plus originales sont résumées ici :

Sur le plan technique (conclusions pouvant être conditionnelles à la validation des modèles)

- Le diamètre optimal d'un absorbeur de CO₂ pourrait être assez élevé, donc peut-être plus près de la limite de l'assèchement que de la limite de la noyade. Il est donc important de ne pas fixer un diamètre trop bas au début d'une optimisation, ce qui pourrait amener tous les autres paramètres vers une configuration sous-optimale.
- La hauteur optimale du même absorbeur semble intimement liée au taux de capture. Si le coût des échangeurs de chaleur est assez élevé, il ne sera pas avantageux d'avoir un écoulement élevé permettant deux pincements chimiques en haut et en bas de l'absorbeur. Il sera préférable d'avoir un écoulement réduit absorbant davantage de CO₂ par unité de solvant. Lorsqu'il n'y a qu'un seul pincement chimique en bas, le taux de capture varie, à la marge, seulement en allongeant l'absorbeur pour en augmenter le temps de résidence.
- Il semble plus avantageux de capturer 90 % du CO₂ sur x % de la fumée plutôt que 0,9· x % du CO₂ sur 100 % de la fumée. Cela est contre-intuitif vu que la deuxième option augmente la pression partielle moyenne et facilite donc le travail. On en déduit que le débit supplémentaire de fumée peut être nuisible parce qu'il réduit le temps de résidence pour un investissement donné ou vice-versa, sans grand avantage lorsqu'il n'y a pas de

pincement chimique à la tête de l'absorbeur. Le taux optimal de capture serait donc toujours supérieur à 90%, sauf en l'absence de recirculation des fumées.

- Le bénéfice de complexifier le désorbeur a pu être exagéré dans le passé par des simulations avec un nombre insuffisant de variables de décision. Lorsque le désorbeur est bien intégré au cycle vapeur, la performance des configurations simples semble approcher celle des configurations complexes. Cela n'est pas surprenant vu que ce n'est pas à cet endroit que se génère l'entropie et que se dégrade donc l'efficacité énergétique.
- Le choix de l'absorbant doit se concentrer sur la cinétique, la solubilité et la température de dégradation. Selon les principes de Carnot et van't Hoff, l'enthalpie de réaction n'est pas un critère pertinent de sélection *a priori*. La température de dégradation est importante car la désorption à haute température et à haute pression permet une diminution du travail de compression et facilite le retour de vapeur à la turbine, diminuant d'autant plus le besoin de complexifier le désorbeur.
- Lorsque la conception du système de capture est ajustée pour retourner exactement le même volume de vapeur qu'elle consomme, mais à plus basse pression, cela donne plus facilement accès à des conceptions du cycle vapeur pouvant permettre la capture intermittente. Ceci pourrait présenter un bénéfice économique et environnemental en ajoutant une réserve tournante et une capacité de pointe à peu de frais.
- Plus généralement, la capture de CO₂ en milieux aqueux est pénalisante sur le plan thermodynamique pour plusieurs raisons : l'eau joue un rôle passif mais nécessite quand même d'être continuellement chauffée et refroidie, les basses températures ralentissent la réaction d'absorption, des pertes inévitables surviennent lors de la compression de CO₂ humide qui aurait été disponible à haute pression ailleurs, et aucune synergie n'est possible entre les différentes irréversibilités structurelles. En effet, la capture prend de la vapeur utilisable par les turbines pour ensuite relâcher une chaleur inutilisable parce que trop froide (sauf en cogénération ou, à la limite, avec un cycle de Rankine organique), alors qu'elle devrait idéalement utiliser de la chaleur inutilisable parce que trop chaude pour les turbines, pour ensuite relâcher une chaleur utilisable. Pour ces raisons, la capture en précombustion et la capture en anaérobicombustion pourraient vraisemblablement devenir davantage compétitives après avoir acquis une certaine maturité technologique.

Sur le plan économique (conclusions pouvant être affectées par des changements de prix)

- La capture est une façon raisonnablement économique de réduire les émissions de CO₂. Par contre, il ne faut pas surestimer la quantité de CO₂ évitée par unité de CO₂ capturé, ce qui affecte le coût réel d'évitement, qui est de l'ordre de 60 \$/tonne de CO₂ dans le modèle de simulation, mais serait plus élevé en dollars de 2011. La contribution des émissions à l'arrière-plan est d'environ +3 %, avant toute fuite de séquestration.
- La substitution du gaz naturel par un gaz synthétique dérivé du bois est également une façon raisonnable de réduire les émissions de CO₂. Toutefois, le coût réel d'évitement est plus élevé que pour la capture sauf si le prix du bois est très bas. Cette fois-ci, la contribution de l'arrière-plan tend à diminuer ce coût d'évitement. Pour un niveau de taxe sur le CO₂ donné, cela a pour effet de rajuster à la hausse le prix que les producteurs de bois peuvent espérer grâce à ce nouveau débouché.
- Dans ces conditions, il n'est pas souhaitable d'utiliser un combustible 100 % biogénique sans capture pour atteindre la neutralité en CO₂-équivalent sur la base du cycle de vie entier. Il est préférable de mélanger un faible pourcentage de gaz synthétique au gaz naturel, et de capturer le CO₂ tant à la centrale NGCC qu'à la gazéification du bois.
- L'ACV apporte un bénéfice économique direct via une prise de décisions améliorée en cas de taxe directe sur les gaz à effet de serre s'appliquant à tous. Dans le cas du choix de capturer le CO₂ ou non, le gain peut atteindre environ 0,64 \$/MWh lorsque le niveau de taxe est juste assez élevé pour donner faussement l'impression que la capture est rentable, faute d'ACV. Le gain imprévu provient de taxes sur les émissions des producteurs de gaz naturel et des transporteurs de CO₂ que ceux-ci refileront sans doute à leurs clients.
- Les émissions des producteurs de gaz naturel contribuent au calcul du coût d'évitement de façon relativement élevée, favorisant ainsi les configurations de meilleure efficacité énergétique, ce qui pourrait impliquer un taux de capture plus faible. Cependant, comme la configuration optimale se situe dans une zone sans discontinuité technologique, les changements apportés par l'ACV sont incrémentiels et peu convaincants. (La certitude d'un petit gain noyé dans les incertitudes est moins convaincante que la faible probabilité d'un gain de 0,64 \$/MWh, même si l'espérance de gain est probablement la même.)

Sur le plan environnemental

- La capture de CO₂ est une façon raisonnable de réduire les émissions de CO₂ d'un point de vue environnemental. Par contre, il ne faut pas surestimer la quantité de CO₂ évitée par unité de CO₂ capturé, vu que la capture occasionne des émissions de CO₂ ailleurs. La contribution de l'arrière-plan à cette quantité est d'environ -3 % sans considérer les fuites de séquestration.
- Toutes les méthodes de réduction du CO₂ transfèrent les impacts vers l'arrière-plan et/ou vers les autres catégories d'impacts. Il est donc nécessaire de pondérer les catégories d'impacts pour juger si ces méthodes en valent la peine. La pondération sur la base des coûts d'évitement est la plus logique car les opportunités d'évitement sont toujours implicitement disponibles dans un contexte d'optimisation. Pour le choix de capturer le CO₂ ou non, cette pondération attribue une importance négligeable aux autres catégories lorsqu'on suppose la substituabilité de tous les impacts d'une même catégorie.
- Ce pattern décisionnel où le CO₂ en arrière-plan a une importance modérée, alors que les autres polluants en arrière-plan ont une importance négligeable car leur évitement est très accessible, se répète pour plusieurs autres systèmes dans d'autres industries, allant jusqu'à l'éco-conception d'un simple produit de consommation. À part quelques cas reliés à l'agriculture, aux mines et à la gestion des déchets, la prévention de la majorité des émissions autres que le CO₂ est abordable par rapport au coût du produit fini. Paradoxalement, cela indique aussi que les choix de conception faits sur une base strictement économique sont souvent déjà quasi-optimaux d'un point de vue environnemental, même s'il faut leur ajouter des choix de prévention par la suite, bien entendu.
- En l'absence de futures taxes sur les émissions, le rôle de l'ACV dans le processus de conception d'un procédé est d'abord d'indiquer quels intrants constituent des points chauds environnementaux. Cependant, il peut être contre-productif de radicalement reconfigurer le procédé *si le seul but est d'éviter ces intrants*, alors qu'un léger biais en faveur de l'efficacité énergétique suffirait. L'expérience acquise dans ce projet indique que la découverte des points chauds est plutôt une opportunité d'élaborer une politique optimale d'approvisionnement permettant d'offrir à ses fournisseurs des incitatifs à réduire leurs propres émissions, en particulier pour les substances autres que le CO₂.

- En présence de futures taxes sur les émissions non déjà anticipées dans les prix, le rôle de l'ACV est de fournir une indication sur l'effet de ces taxes sur le coût des intrants. Cette information est d'autant plus utile qu'elle s'intègre aisément dans une optimisation monocritère traditionnelle, et permet de modestes gains économiques, comme indiqué précédemment, pouvant justifier le coût de réalisation d'une ACV même pour un industriel qui ne serait pas principalement intéressé par la performance environnementale.
- Même en dehors d'un contexte décisionnel, il est avantageux d'exprimer les résultats de l'ACV sous forme de coûts d'évitement qui *s'ajoutent* aux coûts non-environnementaux du cycle de vie. Notamment, cela contourne plusieurs difficultés méthodologiques liées à la troncature, à la subjectivité et à l'arbitraire des règles d'imputation en ACV.

En plus de répondre largement à l'objectif général du projet de recherche, ces observations montrent que le tour du sujet est relativement complet et aura finalement réussi à apporter davantage de réponses qu'à soulever de nouvelles questions. Même la définition de ce que constitue un *choix environnemental* semble plus claire que jamais, en espérant que cette clarté a pu être transmise par cette thèse.

En démontrant que l'utilisation de l'ACV dans un contexte décisionnel est très souvent équivalente à un problème d'optimisation, ce projet a permis d'élaborer une méthodologie originale d'*optimisation du cycle de vie* dont la portée est potentiellement très grande pour l'utilisation future de l'ACV en général. Bien entendu, plusieurs tâches restent à faire pour arrimer les leçons tirées de ce projet à la pratique courante de l'ACV au CIRAIG et ailleurs.

Recommandations pour la pratique de l'ACV

À défaut d'adopter une approche d'*optimisation du cycle de vie* à chaque occasion de réaliser une ACV, la première recommandation serait d'éviter de présenter le résultat d'une ACV comme un indicateur exclusif de la *performance environnementale* sans même avoir abordé l'analyse des coûts du cycle de vie. La question ici n'est pas d'affirmer que l'économie est davantage importante que l'environnement, mais bien de comprendre et transmettre l'idée que les coûts non-environnementaux ont eux-mêmes un effet sur la *performance environnementale* même s'il n'est pas pertinent pour l'ACV de le mesurer.

Une étape subséquente pour le CIRAIG pourrait être de jauger comment la pondération des impacts sur la base des coûts d'évitement permet de faciliter la communication des résultats de l'ACV destinés à la prise de décisions, autant auprès de la clientèle industrielle que du reste de la communauté de l'ACV. En parallèle, il faut jauger comment le calcul des coûts de prévention, nécessaire à cette pondération, peut être rendu suffisamment convivial et automatisé pour entrer dans la pratique courante de l'ACV, en attendant son intégration aux outils logiciels d'ACV.

En dernier lieu, si l'*optimisation du cycle de vie* est perçue comme offrant un potentiel suffisant, il faudrait l'intégrer stratégiquement au développement méthodologique de l'ACV. Cela implique d'effectuer davantage de recherches sur les coûts de prévention et sur les niveaux de risques négligeables, par souci de précision. Pour l'étape de l'inventaire, cela implique de veiller à l'intégration efficace de ces coûts de prévention aux bases de données. Pour l'évaluation des impacts, cela implique de réviser la façon de concevoir les facteurs de caractérisation, par exemple en considérant la substituabilité probable de chaque substance, au seuil des dommages, plutôt que la valeur des dommages potentiels respectifs. Aussi, la caractérisation des ressources épuisables devrait éviter le double comptage lorsque leur rareté est déjà internalisée aux coûts.

Recommandations pour le développement des procédés de capture de CO₂

Dans un autre ordre d'idées, les résultats de ce projet fournissent une piste originale pour améliorer l'efficacité énergétique des procédés de capture de CO₂ en milieu aqueux tout en diminuant la complexité du désorbeur. Cette amélioration consiste à récupérer la chaleur de l'absorbant en produisant de la vapeur dans un échangeur, plutôt que d'essayer à tout prix de ramener cette chaleur vers le désorbeur. Plus l'absorbant tolère une température élevée, plus les volumes de vapeur impliqués diminuent et plus l'idée devient attrayante. La validation initiale de cette piste peut se faire par simulation en utilisant la plateforme déjà utilisée dans ce projet.

Cette validation initiale peut être effectuée par optimisation directement dans le logiciel *ASPEN Plus*, en y ajoutant explicitement les principaux échangeurs selon le réseau présenté dans cette thèse, qui semble optimal. Cela éviterait la lourdeur de la plateforme *OSMOSE*, qui a été fort utile jusqu'ici sans nécessairement l'être pour la suite. Il faudrait alors une seule fonction-objectif (monocritère), qui serait le coût d'évitement du GWP dans une perspective du cycle de vie. Pour bien faire, le coût d'évitement dans les autres catégories d'impacts pourrait être considéré comme

un coût supplémentaire associé à chaque intrant, même si cela ne devrait pas affecter les résultats significativement. À cette étape, la priorité est de mieux départager les différentes configurations d'écoulement en les simulant séparément avec un degré de détails suffisant.

Ainsi, pour déterminer si la production de vapeur très basse pression à partir de l'absorbant chaud est préférable à la désorption à deux ou à trois pressions, il faudrait simuler ces trois configurations dans *ASPEN Plus*, séparément, avec un modèle des coûts assez précis pour permettre la comparaison. En particulier, il faudrait déterminer exactement quels types d'échangeurs permettraient la production et la surchauffe de vapeur très basse pression, et avec quelle perte de charge. Il faudrait également un inventaire détaillé des équipements supplémentaires requis pour une désorption à deux ou trois pressions plutôt qu'une. Ensuite, il faudrait estimer le coût de ces équipements en fonction de leur taille, ce qui compléterait le modèle. La configuration optimale, après avoir fait varier la taille et la pression des équipements, serait alors sans contredit celle qui minimise le coût d'évitement par unité de GWP.

Perspectives

Pour conclure sur une note optimiste, la réalisation de ce projet a permis de constater que les problèmes environnementaux seraient solubles, sans grand sacrifice de confort matériel, si seulement on avait la volonté politique de procéder de façon efficace, c'est-à-dire en adoptant les solutions par ordre croissant de coût de prévention. En effet, cela s'avère abordable, surtout pour les émissions autres que le CO₂, vu que cela évite des technologies contre-productives dilapidant les efforts que chacun est déjà prêt à consacrer à son environnement. Pour le CO₂, la prévention est certes un peu plus dispendieuse, mais sa problématique particulière permet d'attendre quelque temps l'amélioration des technologies de capture et des filières énergétiques sans carbone.

De plus, le catastrophisme environnemental ne semble pas toujours bien ancré dans l'analyse logique des conflits interpersonnels environnementaux. Un certain optimisme face au prétendu problème de l'épuisement des ressources naturelles est aussi de mise vu que le « marché » n'est peut-être pas toujours aussi « défaillant » que le laissent parfois entendre certains peut-être en manque de prétextes pour se mêler de la vie des autres. Le phénomène de la surconsommation est un sous-produit certes néfaste d'interventions politiques visant l'expansion perpétuelle du crédit, mais qui disparaîtra sans doute de lui-même au terme de la présente crise financière.

BIBLIOGRAPHIE

- Abu-Zahra, M. R. M., Niederer, J. P. M., Feron, P. H. M., & Versteeg, G. F. (2007). CO₂ capture from power plants. Part II. A parametric study of the economical performance based on mono-ethanolamine. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 1(2), 135-142.
- Abu-Zahra, M. R. M., Schneiders, L. H. J., Niederer, J. P. M., Feron, P. H. M., & Versteeg, G. F. (2007). CO₂ capture from power plants. Part I. A parametric study of the technical performance based on monoethanolamine. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 1(1), 37-46.
- Adams, D., & Davison, J. (2007). *Capturing CO₂*. Cheltenham: IEA Greenhouse Gas R&D Programme.
- Alie, C. F. (2004). *CO₂ Capture With MEA: Integrating the Absorption Process and Steam Cycle of an Existing Coal-Fired Power Plant*. University of Waterloo, Waterloo, ON.
- Amann, J.-M., Descamps, C., Kanniche, M., & Bouallou, C. (2006). Modeling of the CO₂ capture in post-combustion. *CHISA2006, Prague, République Tchèque*.
- Amini, S. H., Remmerswaal, J. A. M., Castro, M. B., & Reuter, M. A. (2007). Quantifying the quality loss and resource efficiency of recycling by means of exergy analysis. *Journal of Cleaner Production*, 15, 907-913.
- Anonymous. (1987). Carbon Dioxide Recovery from Gas Power Plant Flue Gas with Monoethanolamine. In *Process Economics Program Report 180: Carbon Dioxide Separation* (pp. 93-99): SRI International Consulting.
- Anonymous. (1999a). *Market-based NGCC* (No. DOE/FE-0400). Washington DC: Office of Fossil Energy.
- Anonymous. (1999b). *Natural Gas Systems*. Washington, DC: Environmental Protection Agency.
- Aroonwilas, A., & Veawab, A. (2007). Integration of CO₂ capture unit using single- and blended-amines into supercritical coal-fired power plants: Implications for emission and energy management. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 1(2), 143-150.
- Audet, C., Béchard, V., & Chaouki, J. (2008). Spent potliner treatment process optimization using a MADS algorithm. *Optim. Eng.*, 9, 143-160.
- Ayres, R. U. (1998). Eco-thermodynamics: economics and the second law. *Ecological Economics*, 26, 189-209.
- Azapagic, A. (1999). Life cycle assessment and its application to process selection, design and optimisation. *Chemical Engineering Journal*, 73, 1-21.
- Azapagic, A., & Clift, R. (1999a). The Application of Life Cycle Assessment to Process Optimisation. *Computers and Chemical Engineering*, 23, 1509-1526.
- Azapagic, A., & Clift, R. (1999b). Life Cycle Assessment and Multiobjective Optimisation. *Journal of Cleaner Production*, 7, 135-143.
- Baumgartner, S., & Arons, J. d. S. (2003). Necessity and Inefficiency in the Generation of Waste. *Journal of Industrial Ecology*, 7(2), 113-124.

- Bellerive, N. (2009). *Comparaison de la performance environnementale de la production thermique d'électricité avec et sans séquestration géologique du dioxyde de carbone*. École Polytechnique, Montréal.
- Bernow, S., Fulmer, M., Peters, I., Ruth, M., & Smith, D. (1997). *Carbon Taxes with Tax Reductions in Minnesota*. Boston, MA: Tellus Institute.
- Berthiaume, R., Bouchard, C., & Rosen, M. (2001). Exergetic evaluation of the renewability of a biofuel. *Exergy, an International Journal*, 1(4), 256-268.
- Block, W. (1998). Environmentalism and Economic Freedom: The Case for Private Property Rights. *Journal of Business Ethics*, 17, 1887-1899.
- Bochatay, D. (2005). *Combinaison d'un outil de modélisation thermo-économique et de l'approche d'analyse du cycle de vie*. EPFL, Lausanne.
- Bolliger, R., Favrat, D., & Marechal, F. (2005). Advanced Power Plant Design Methodology using Process Integration and Multi-Objective Thermo-Economic Optimisation. *ECOS 2005, Trondheim, Norway*.
- Bösch, M. E., Hellweg, S., Huijbregts, M., & Frischknecht, R. (2007). Applying Cumulative Exergy Demand (CExD) Indicators to the ecoinvent Database. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 12(3), 181-190.
- Bozzolo, M., Brandani, M., Traverso, A., & Massardo, A. F. (2003). Thermoeconomic Analysis of Gas Turbine Plants With Fuel Decarbonization and Carbon Dioxide Sequestration. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 125, 947-953.
- Braam, J., Tanner, T. M., Askham Nyland, C., Hendriks, N., Maurice, B. M., Helena, Vold, M. W., Helena, et al. (2001). Energy, Transport and Waste Models: Availability and Quality of Energy, Transport and Waste Models and Data. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 6(3), 135-139.
- Buchgeister, J., Meyer, L., & Schebek, L. (2007). Exergy analysis and LCA - A new approach to support the design for environment (DfE) of energy conversion processes. *LCA of Energy, Energy in LCA: SETAC Europe 14th LCA Case Studies Symposium*.
- Burgess, A. A., & Brennan, D. J. (2001). Application of life cycle assessment to chemical processes. *Chemical Engineering Science*, 56, 2589-2604.
- Carnot, S. (1990). *Réflexions sur la puissance motrice du feu*. Sceaux: Éditions Jacques Gabay.
- Cordato, R. (2004). Toward an Austrian Theory of Environmental Economics. *The Quarterly Journal of Austrian Economics*, 7(1), 3-16.
- Cornelissen, R. L. (1997). *Thermodynamics and sustainable development*. Twente, Enschede.
- Corrado, A., Fioroni, P., & Sciubba, E. (2006). Environmental assessment and extended exergy analysis of a “zero CO₂ emission”, high-efficiency steam power plant. *Energy*, 31, 3186–3198.
- Cousins, A., Wardhaugh, L. T., & Feron, P. H. M. (2011). A survey of process flow sheet modifications for energy efficient CO₂ capture from flue gases using chemical absorption. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 5, 605-619.

- Creyts, J. C. (2000). *Use of Extended Exergy Analysis as a Tool to Optimize the Environmental Performance of Industrial Processes*. University of California, Berkeley.
- DeVincintis, J. (2008). *Rate-Based Model of the CO₂ Capture Process by MEA using Aspen Plus*. Burlington, MA.
- Dewulf, J., Bösch, M. E., De Meester, B., Van der Vorst, G., Langenhove, H. V., Hellweg, S., et al. (2007). Cumulative Exergy Extraction from the Natural Environment (CEENE): a comprehensive Life Cycle Impact Assessment method for resource accounting. *Environ. Sci. Technol.*, 41, 8477–8483.
- Dewulf, J., & Langenhove, H. V. (2005). Integrating industrial ecology principles into a set of environmental sustainability indicators for technology assessment. *Resource, Conservation and Recycling*, 43, 419–432.
- Dewulf, J., Langenhove, H. V., Muys, B., Bruers, S., Bakshi, B. R., Grubb, G. F., et al. (2008). Exergy: Its Potential and Limitations in Environmental Science and Technology. *Environ. Sci. Technol.*, 42, 2221–2232.
- Dincer, I., & Rosen, M. (2007). *Exergy: Energy, Environment and Sustainable Development*. Oxford: Elsevier.
- Ekvall, T. (2000). A market-based approach to allocation at open-loop recycling. *Resources Conservation & Recycling*, 29, 91–109.
- Ekvall, T., & Finnveden, G. (2001). Allocation in ISO 14041- A Critical Review. *Journal of Cleaner Production*, 9, 197–208.
- Ekvall, T., Tillman, A.-M., & Molander, S. (2005). Normative ethics and methodology for life cycle assessment. *Journal of Cleaner Production*, 13, 1225–1234.
- Ekvall, T., & Weidema, B. P. (2004). System Boundaries and Input Data in Consequential Life Cycle Inventory Analysis. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 9(3), 161–171.
- El-Sayed, Y. M. (2003). *The Thermoconomics of Energy Conversions*. Oxford: Elsevier Ltd.
- Enkvist, P.-A., Naucler, T., & Rosander, J. (2007). A Cost Curve for Greenhouse Gas Reduction. *The McKinsey Quarterly*, 35–45.
- Favrat, D., & Maréchal, F. (2006). The Challenge of Introducing an Exergy Indicator in a Local Law on Energy. *ECOS2006, Aghia Pelagia, Crete, Greece*.
- Feron, P. H. M. (2010). Exploring the potential for improvement of the energy performance of coal fired power plants with post-combustion capture of carbon dioxide. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 4, 152–160.
- Finnveden, G. (2000). On the Limitations of Life Cycle Assessment and Environmental Systems Analysis Tools in General. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 5(4), 229–238.
- Finnveden, G., Hauschild, M., Ekvall, T., Guinee, J., Heijungs, R., Hellweg, S., et al. (2009). Recent developments in Life Cycle Assessment. *Journal of Environmental Management*, 91, 1–21.
- Finnveden, G., & Östlund, P. (1997). Exergies of Natural Resources in Life Cycle Assessment and Other Applications. *Energy*, 22(9), 923–931.

- Fraser, P., Stridbaeck, U., & Bertel, E. (2005). *Projected Costs of Generating Electricity*. Paris: International Energy Agency.
- Freguia, S. (2002). *Modeling of CO₂ Removal from Flue Gases with Monoethanolamine*. University of Texas at Austin, Austin, TX.
- Freguia, S., & Rochelle, G. T. (2003). Modeling of CO₂ capture by aqueous monoethanolamine. *AIChE Journal*, 49(7), 1676-1686.
- Frischknecht, R. (2000). Allocation in Life Cycle Inventory Analysis for Joint Production. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 5(2), 85-95.
- Frischknecht, R., Heijungs, R., & Hofstetter, P. (1998). Einstein's Lessons for Energy Accounting in LCA. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 3(5), 266-272.
- Frischknecht, R., Jungbluth, N., Althaus, H.-J., Doka, G., Dones, R., Heck, T., et al. (2005). The ecoinvent Database: Overview and Methodological Framework. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 10(1), 3-9.
- Gassner, M. (2010). *Process Design Methodology for Thermochemical Production of Fuels from Biomass. Application to the Production of Synthetic Natural Gas from Lignocellulosic Resources*. EPFL, Lausanne.
- Gassner, M., Baciocchi, R., Marechal, F., & Mazzotti, M. (2009). Integrated design of a gas separation system for the upgrade of crude SNG with membranes. *Chemical engineering and processing*, 48(9), 1391-1404.
- Gassner, M., & Marechal, F. (2008). Thermo-economic optimisation of the integration of electrolysis in synthetic natural gas production from wood. *Energy*, 33(2), 189-198.
- Gassner, M., & Marechal, F. (2009). Thermo-economic process model for thermochemical production of Synthetic Natural Gas (SNG) from lignocellulosic biomass. *Biomass and Bioenergy*, 33, 1587-1604.
- Georgescu-Roegen, N. (1971). *The Entropy Law and the Economic Process*. Cambridge: Harvard University Press.
- Gerber, L. (2008). *Multi-scale LCA for synthetic natural gas production from woody biomass*. EPFL, Lausanne.
- Gerber, L., Gassner, M., & Marechal, F. (2009). Integration of LCA in a thermo-economic model for multi-objective process optimization of SNG production from woody biomass. *19th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Cracow, Poland*.
- Gerber, L., Gassner, M., & Marechal, F. (2011). Systematic integration of LCA in process systems design: Application to combined fuel and electricity production from lignocellulosic biomass. *Computers and Chemical Engineering*, 35(7), 1265 - 1280.
- Geuzebroek, F. H., Schneiders, L. H. J., Kraaijeveld, G. J. C., & Feron, P. H. M. (2004). Exergy analysis of alkanolamine-based CO₂ removal unit with AspenPlus. *Energy*, 29, 1241-1248.
- Gleick, J. (1988). *Chaos : making a new science*. New York: Penguin.

- Gomes, G. L., Szklo, A., & Schaeffer, R. (2009). The impact of CO₂ taxation on the configuration of new refineries: An application to Brazil. *Energy Policy*, 37, 5519–5529.
- Gren, I. M., Jonzon, Y., & Lindqvist, M. (2008). *Cost of nutrient reductions to the Baltic Sea - technical report*. Uppsala: Swedish University of Agricultural Sciences (SLU).
- Grubb, G. F., & Bakshi, B. R. (2011). Appreciating the Role of Thermodynamics in LCA Improvement Analysis via an Application to Titanium Dioxide Nanoparticles. *Environ. Sci. Technol.*, 45, 3054–3061.
- Guillen-Gosalbez, G., & Grossmann, I. E. (2009). Optimal Design and Planning of Sustainable Chemical Supply Chains Under Uncertainty. *AIChE Journal*, 55, 99-121.
- Guillen-Gosalbez, G., & Grossmann, I. E. (2010). A global optimization strategy for the environmentally conscious design of chemical supply chains under uncertainty in the damage assessment model. *Computers and Chemical Engineering*, 34, 42-58.
- Haberl, H. (2001a). Accounting for the Energetic Metabolism of Societies: Concepts and Empirical Examples. *Journal of Industrial Ecology*, 5(1), 11-34.
- Haberl, H. (2001b). The Energetic Metabolism of Societies, Part II: Empirical Examples. *Journal of Industrial Ecology*, 5(2), 71-88.
- Haldi, P.-A., & Favrat, D. (2006). Methodological aspects of the definition of a 2kW society. *Energy*, 31, 3159–3170.
- Hau, J. L., & Bakshi, B. R. (2004). Promise and problems of emergy analysis. *Ecological Modelling*, 178, 215-225.
- Hau, J. L., Yi, H.-s., & Bakshi, B. R. (2007). Enhancing Life-Cycle Inventories via Reconciliation with the Laws of Thermodynamics. *Journal of Industrial Ecology*, 11(4), 5-25.
- Hermann, W. A. (2006). Quantifying global exergy resources. *Energy*, 31(12), 1685-1702.
- Hermanowicz, S. (2005). Entropy and Energy: Toward a Definition of Physical Sustainability. *Water Resources Center Archives. Working Papers*. (Paper swr_v2). Berkeley: University of California.
- Herring, H. (2006). Energy efficiency—a critical view. *Energy*, 31, 10–20.
- Hertwich, E. G., Aaberg, M., Singh, B., & Stromman, A. H. (2008). Life-cycle Assessment of Carbon Dioxide Capture for Enhanced Oil Recovery. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 16, 343-353.
- Hertwich, E. G., Hammit, J. K., & Pease, W. S. (2000). Forum: A Theoretical Foundation for Life-Cycle Assessment: Recognizing the Role of Values in Environmental Decision-making. *Journal of Industrial Ecology*, 4(1), 13-28.
- Holtz-Eakin, D. (2003). *Shifting the Cost Burden of a Carbon Cap-and-Trade Program*. Washington DC: Congressional Budget Office.
- Hüpen, B., & Kenig, E. Y. (2006). Absorption and desorption of hydrogen sulphide and carbon dioxide in packed columns: rigorous modelling and simulation. *CHISA2006, Prague, République Tchèque*.

- Hugo, A., & Pistikopoulos, E. N. (2005). Environmentally conscious long-range planning and design of supply chain networks. *Journal of Cleaner Production*, 13, 1471-1491.
- Huijbregts, M. A. J., Rombouts, L. J. A., Hellweg, S., Frischknecht, R., Hendriks, A. J., Van de Meent, D., et al. (2006). Is Cumulative Fossil Energy Demand a Useful Indicator for the Environmental Performance of Products? *Environ. Sci. Technol.*, 40(3), 641-648.
- Imputation (1987). In *The New Palgrave: A Dictionary of Economics*. Basingstoke : Palgrave Macmillan.
- ISO. (1997). *Environmental management - Life cycle assessment - Principles and framework* (No. ISO 14040:1997(E)). Genève: ISO.
- Jassim, M. S., Rochelle, G., Eimer, D., & Ramshaw, C. (2007). Carbon dioxide absorption and desorption in aqueous monoethanolamine solutions in a rotating packed bed. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 46(9), 2823-2833.
- Jassim, M. S., & Rochelle, G. T. (2006). Innovative absorber/stripper configurations for CO₂ capture by aqueous monoethanolamine. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45(8), 2465-2472.
- Kanniche, M., & Bouallou, C. (2006). CO₂ capture study in advanced Integrated Gasification Combined Cycle. *CHISA2006, Prague, République Tchèque*.
- Knox, R. S. (1999). Physical aspects of the greenhouse effect and global warming. *Am. J. Phys.*, 67, 1227-1238.
- Kotas, T. J. (1995). *The exergy method of thermal plant analysis*. Malabar: Krieger Publishing.
- Kvamsdal, H. M., & Rochelle, G. T. (2008). Effects of the temperature bulge in CO₂ absorption from flue gas by aqueous monoethanolamine. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 47(3), 867-875.
- Leites, I. L., Sama, D. A., & Lior, N. (2003). The theory and practice of energy saving in the chemical industry: some methods for reducing thermodynamic irreversibility in chemical technology processes. *Energy*, 28, 55-97.
- Li, H. (2006). *Environomic Modeling and Multi-Objective Optimisation of Integrated Energy Systems for Power and Cogeneration*. École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne.
- Li, H., Marechal, F., Burer, M., & Favrat, D. (2006). Multi-objective optimization of an advanced combined cycle power plant including CO₂ separation options. *Energy*, 31(15), 3117-3134.
- Luterbacher, J. S., Fröling, M., Vogel, F., Marechal, F., & Tester, J. W. (2009). Hydrothermal Gasification of Waste Biomass: Process Design and Life Cycle Assessment. *Environ. Sci. Technol.*, 43, 1578-1583.
- Marechal, F., & Kalitventzeff, B. (1999). Targeting the optimal integration of steam networks: Mathematical tools and methodology. *Computers and Chemical Engineering Supplement*, S133-S136.

- Martinez, P., & Eliceche, A. M. (2009). Multi Objective Optimization Using Life Cycle Environmental Impact and Cost in the Operation of Utility Plants. *Computer Aided Chemical Engineering*, 27, 1869-1874.
- Meyer, L., Tsatsaronis, G., Buchgeister, J., & Schebek, L. (2009). Exergoenvironmental analysis for evaluation of the environmental impact of energy conversion systems. *Energy*, 34, 75–89.
- Mueller, K. G., Court, A. W., & Besant, C. B. (1999). Energy life cycle design: a method. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 213(B), 415-419.
- Oyenekan, B. A., & Rochelle, G. T. (2005). *Performance of innovative stripper options for CO2 capture*, Cincinnati, OH, United States.
- Oyenekan, B. A., & Rochelle, G. T. (2006). Energy performance of stripper configurations for CO2 capture by aqueous amines. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45(8), 2457-2464.
- Oyenekan, B. A., & Rochelle, G. T. (2007). Alternative stripper configurations for CO2 capture by aqueous amines. *AIChE Journal*, 53(12), 3144-3154.
- Patzek, T. W. (2004). Thermodynamics of the Corn-Ethanol Biofuel Cycle. *Critical Reviews in Plant Sciences*, 23(6), 519-567.
- Peirce, M., Jones, H., Passant, N. R., & Holland, M. (2002). *Cost Curves for the Abatement of Heavy Metal, PAH and Dioxin Emissions*. Abingdon: Department for Environment, Food & Rural Affairs.
- Pelster, S., Favrat, D., & Von Spakovsky, M. R. (2001). The Thermoeconomic and Environomic Modeling and Optimization of the Synthesis, Design, and Operation of Combined Cycles With Advanced Options. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 123, 717-726.
- Pezzey, J. C. V. (2003). Emission Taxes and Tradeable Permits. *Environmental and Resource Economics*, 26, 329-342.
- Pickard, W. F. (2008). Geochemical constraints on sustainable development: Can an advanced global economy achieve long-term stability? *Global and Planetary Change*, 61, 285–299.
- Ramos-Martín, J., & Ortega-Cerdà, M. (2003). Non-Linear Relationship Between Energy Intensity and Economic Growth. *ESEE Conference Frontiers 2, Tenerife, Spain*.
- Rao, A. B., Rubin, E. S., & Berkenpas, M. B. (2004). *Technical Documentation: Amine-Based CO2 Capture and Storage Systems for Fossil Fuel Power Plant*. Pittsburgh: National Energy Technology Laboratory.
- Robinson, D. R., Fernandez, R., & Kantamaneni, R. K. (2003). Methane Emissions Mitigation Options in the Global Oil and Natural Gas Industries *3rd International Methane & Nitrous Oxide Mitigation Conference*.
- Rochelle, G. T., & Jassim, M. S. (2005). *Innovative absorber/stripper configurations for CO2 capture by aqueous monoethanolamine*, Atlanta, GA, United States.

- Rosen, M. (2002). Can exergy help us understand and address environmental concerns? *Exergy, an International Journal*, 2, 214-217.
- Santos da Silva, P. R., & Gonçalves Amaral, F. (2009). An integrated methodology for environmental impacts and costs evaluation in industrial processes. *Journal of Cleaner Production*, 17, 1339-1350.
- Schach, M.-O., Schneider, R., Schramm, H., & Repke, J.-U. (2010). Techno-Economic Analysis of Postcombustion Processes for the Capture of Carbon Dioxide from Power Plant Flue Gas. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 49, 2363-2370.
- Sciubba, E. (2001). Beyond thermoeconomics? The concept of Extended Exergy Accounting and its application to the analysis and design of thermal systems. *Exergy Int. J.*, 1(2), 68-84.
- Simbolotti, G. (2006). *CO2 Capture & Storage*. Paris: International Energy Agency.
- Smith, R. W., Polukort, P., Maslak, C. E., Jones, C. M., & Gardiner, B. D. (2001). *Advanced Technology Combined Cycles*. Schenectady, NY: General Electric.
- Soares, R., Toffoletto, L., & Deschênes, L. (2006). Development of weighting factors in the context of LCIA. *Journal of Cleaner Production*, 14, 649-660.
- Spiegelman, J. (2003). Beyond the Food Web: Connections to a Deeper Industrial Ecology. *Journal of Industrial Ecology*, 7(1), 17-23.
- Steen, B. (2006). Abiotic Resource Depletion Different perceptions of the problem with mineral deposits. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 11(1 Special), 49-54.
- Suh, S. (2004). Functions, commodities and environmental impacts in an ecological-economic model. *Ecological Economics*, 48, 451-467.
- Szargut, J. (2003). Anthropogenic and natural exergy losses (exergy balance of the Earth's surface and atmosphere). *Energy*, 28, 1047-1054.
- Szargut, J. (2005). *Exergy Method: Technical and Ecological Applications*. Southampton: WIT Press.
- Szargut, J., Morris, D. R., & Steward, F. R. (1988). *Exergy Analysis of Thermal, Chemical, and Metallurgical Processes*. New York: Hemisphere Publishing Corporation.
- Tobiesen, F. A., & Svendsen, H. F., & Juliussen, O. (2007). Experimental Validation of a Rigorous Absorber Model for CO2 Postcombustion Capture. *AIChE Journal*, 53(4), 846-865.
- Turton, R. (2003). *Analysis, synthesis, and design of chemical processes*. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall.
- Valero, A. (2006). Exergy accounting: Capabilities and drawbacks. *Energy*, 31, 164-180.
- Valero, A., Valero, A., & Arauzo, I. (2008). Evolution of the decrease in mineral exergy throughout the 20th century. The case of copper in the US. *Energy*, 33(2), 107-115.
- Vogtländer, J. G., & Bijma, A. (2000). A New Calculation Model for Interpreting the Results of an LCA, The 'Virtual Pollution Prevention Costs '99'. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 5(2), 113-124.

- Vogtländer, J. G., Bijma, A., & Brezet, H. C. (2002). Communicating the eco-efficiency of products and services by means of the eco-costs/value model. *Journal of Cleaner Production*, 10, 57-67.
- Vogtländer, J. G., Brezet, H. C., & Hendriks, C. F. (2001). The Virtual Eco-Costs '99, A Single LCA-Based Indicator for Sustainability and the Eco-Costs - Value Ratio (EVR) Model for Economic Allocation, A New LCA-Based Calculation Model to Determine the Sustainability of Products and Services. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 6(3), 157-166.
- Von Mises, L. (1985). *L'Action humaine, traité d'économie* (éd. française). Paris : Presses Universitaires de France.
- Wall, G., & Gong, M. (1997). On Exergetics, Economics and Optimization of Technical Processes to Meet Environmental Conditions. *International Conference on Thermodynamic Analysis and Improvement of Energy Systems, Beijing, China*.
- Weidema, B. (2000). Avoiding Co-Product Allocation in Life-Cycle Assessment. *Journal of Industrial Ecology*, 4(3), 11-33.
- Weidema, B. (2003). *Market information in life cycle assessment* (No. 863). Copenhagen: Danish Environmental Protection Agency.
- Yi, H. S., Hau, J. L., Ukidwe, N. U., & Bakshi, B. R. (2004). Hierarchical Thermodynamic Metrics for Evaluating the Environmental Sustainability of Industrial Processes. *Environmental Progress*, 23(4), 302-314.
- Yu, Y. S., Li, Y., Li, Q., Jiang, J., & Zhang, Z. X. (2009). An innovative process for simultaneous removal of CO₂ and SO₂ from flue gas of a power plant by energy integration. *Energy Conversion & Management*, 50, 2885-2892.
- Zvolinschi, A., Kjelstrup, S., Bolland, O., & van der Kooi, H. J. (2007). Exergy Sustainability Indicators as a Tool in Industrial Ecology: Application to Two Gas-Fired Combined-Cycle Power Plants. *Journal of Industrial Ecology*, 11(4), 85-98.

ANNEXE 1 – Les problèmes épistémologiques des sciences du choix environnemental

Le titre de cette annexe est un clin d'œil à l'œuvre de Ludwig von Mises, l'un des rares économistes du 20^e siècle à avoir écrit longuement sur les fondements épistémologiques de sa propre discipline. Pour mettre en contexte, l'école de pensée associée à von Mises, dite autrichienne, a correctement prédit la crise économique des années 1930, ainsi que celle qui ne fait probablement que commencer. Or, l'époque de l'holocauste ne fut pas la meilleure pour les économistes juifs autrichiens peu enclins à supporter l'intervention gouvernementale tous azimuts. Les leaders de l'époque ont préféré tendre leur oreille aux théories flatteuses de John Maynard Keynes, un économiste britannique dont la principale découverte fut que tous les prétextes sont bons pour hypothéquer le futur, puisque dans le futur nous serons tous morts.

Le précédent ainsi créé, c'est sans surprise que le cadre de pensée aujourd'hui ancré dans le monde financier, gouvernemental, médiatique et académique soit celui d'économistes faisant l'apologie de la pensée à court terme, de programmes sociaux construits sous le schéma d'une vente pyramidale, et de l'endettement perpétuel des États auquel on attache une richesse dangereusement illusoire. C'est d'ailleurs dans ce même cadre de pensée qu'on essaie futilement d'inscrire le développement durable. On comprend alors mieux pourquoi l'économie porte parfois le titre de *science funeste*.

Pourtant, science et économie se conjuguent très bien sur de bonnes assises épistémologiques. Von Mises, lui, articule sa réflexion autour du concept de dualisme méthodologique séparant le monde physique du monde de la décision humaine :

Ce que nous constatons en fait de jugements de valeur et d'actions d'hommes ne se prête pas à une analyse qui les dépasse. Nous pouvons honnêtement admettre ou croire qu'ils sont absolument liés à leurs causes et conditionnés par elles. Mais dès lors que nous ne savons pas comment les faits externes — physiques et physiologiques — produisent dans l'esprit humain des pensées déterminées et des volitions conduisant à des actes concrets, nous devons prendre acte d'un insurmontable dualisme méthodologique. Dans l'état actuel de nos connaissances, les thèses fondamentales du positivisme, du monisme et du panphysicisme sont simplement des postulats métaphysiques dépourvus de toute base scientifique et dénués à la fois de signification et d'utilité pour la recherche

scientifique. La raison et l'expérience nous montrent deux règnes séparés : le monde extérieur des phénomènes physiques, chimiques et physiologiques, et le monde intérieur de la pensée, du sentiment, du jugement de valeur, et de l'action guidée par l'intention. Aucune passerelle ne relie — pour autant que nous le voyions aujourd'hui — ces deux sphères. Des événements extérieurs identiques provoquent parfois des réponses humaines différentes, et des événements extérieurs différents provoquent parfois la même réponse humaine. Nous ne savons pas pourquoi.

En face de cet état de choses nous ne pouvons que nous abstenir de juger les thèses fondamentales du monisme et du matérialisme. Nous pouvons croire ou ne pas croire que les sciences naturelles parviendront un jour à expliquer la production d'idées, de jugements de valeur et d'actions déterminés, de la même manière qu'elles expliquent la production d'un composé chimique comme le résultat nécessaire et inévitable d'une certaine combinaison d'éléments. Tant que nous n'en sommes pas là, nous sommes forcés d'acquiescer à un dualisme méthodologique.

L'agir humain est l'un des agencements par lesquels le changement intervient. C'est un élément de l'activité et du devenir cosmiques. Par conséquent c'est légitimement un objet d'étude scientifique. Puisque — à tout le moins dans les conditions actuelles — nous ne pouvons le rattacher à ses causes, il doit être considéré comme un donné ultime et être étudié comme tel. (Von Mises, 1985)

En admettant ce dualisme méthodologique, faute de mieux, on doit alors conclure que chaque individu correspond à un unique *train de pensée* qui avance en parallèle des autres, sans aucun mécanisme capable d'en modifier la course de façon déterminante. La causalité de deux gestes humains doit donc être considérée comme couplée si elle provient du même individu ou d'individus agissant en commun, mais découplée sinon. On peut alors en tirer plusieurs conséquences pertinentes dans la quête d'une méthode idéale de *choix environnemental*, décrites dans les sections qui suivent.

A1.1 Conséquences du dualisme méthodologique

A1.1.1 La décision humaine individuelle comme singularité

Selon le dualisme méthodologique, la décision humaine individuelle est un phénomène singulier sans cause antérieure admise, autre que les préférences ordinales, changeantes et inaccessibles de l'individu. C'est par introspection que nous déterminons être la cause première du choix des mots

écrits dans cette thèse, et que nous confirmons alors notre capacité d'être à l'origine d'événements physiques. Cette introspection est une démarche scientifique valide. Ce qui serait non-scientifique serait d'imaginer que tous les comportements humains sont prédéterminés par d'obscures forces marxoïdes et seront un jour prévisibles par la science, par simple attachement idéologique à un préjugé mécaniciste contraire à l'expérience introspective, à la théorie du chaos et à la science des systèmes complexes en général.

Le monde observable, y compris les phénomènes d'impacts environnementaux, serait donc un continuum d'événements régis par les lois déterministes de la physique, découpé par des événements ponctuels correspondant à des décisions individuelles trop complexes pour être considérées déterminées, du moins par choix méthodologique. Les avancées de la neurobiologie ou de la statistique peuvent alors faire paraître certaines décisions comme prévisibles, mais cela n'affecte que la fréquence de ce découpage. Même si 99 % des choix qu'on croit faire s'avéraient n'être que de simples réflexes, la chaîne de causalité ne ferait que remonter un peu plus en arrière, sur le 1 % de véritables décisions qui restent. Que l'opérateur qui met la machine polluante en marche le fasse par réflexe ou non, ceux qui l'ont conçue, fabriquée, vendue, achetée, et installée ne sont pas tous des zombies et la chaîne de causalité doit débiter quelque part.

De ce point de vue, l'évolution de l'environnement naturel est entièrement prédéterminée par les lois de la physique, à l'exception de l'instant précis où un individu est susceptible de changer ses préférences. Le *choix environnemental* est donc fondamentalement un problème de coordination entre les décisions – sans cause – de certains individus (ceux qui mettent les machines en marche) et les préférences – sans cause – d'autres individus (ceux qui s'y opposent). Cette coordination est un phénomène de l'*interagir* humain en tant que cause première d'événements dans le monde physique, ce qui sera examiné plus en détails dans la section suivante. En termes simples, vu que les préférences environnementales font partie d'un plus grand ensemble de préférences guidant nos choix, c'est l'environnement qui fait partie de l'*économie* (dans son sens immatériel) et non le contraire. *L'intervention qui vise un résultat environnemental ne peut pas se faire dans un éther collectif; elle doit nécessairement se faire en faisant passer les préférences de certains avant celles des autres.* Le caractère intersubjectif des problèmes environnementaux est examiné plus en détails dans la section A1.1.5.

A1.1.2 Les phénomènes de marché et leur imputation

Selon le dualisme méthodologique, l'unité fondamentale de l'interagir humain est l'événement isolé et délibéré où deux individus, rarement davantage, prennent une décision commune, se serrent la main, et déclarent : « marché conclu ». Ce type de décision a les mêmes caractéristiques que la décision individuelle et peut donc être une cause première d'événements dans le monde physique, y compris les phénomènes d'impacts environnementaux. La coordination spontanée de ces décisions – la *catallaxie* ou simplement *le marché* (sans toutefois le personnifier) – représente un ordre naturel et immatériel indépendant de toute forme d'organisation sociétale.

Les phénomènes émergents de cet ordre, comme la croissance économique, l'intérêt, l'uniformité des prix, *etc.*, sont régis par des lois universelles (sens scientifique) qu'il est vain de vouloir changer. Par exemple, un embargo sur les œufs n'empêche rien de plus que si leur fragilité rendait leur transport impossible, une taxe de 15 % sur le gaz naturel n'empêche rien de plus qu'une fuite de 15 %, et une réglementation rendant impossible l'accès à un gisement minier n'empêche rien de plus qu'une couche de roc impénétrable. Par contre, on peut toujours critiquer les lois (sens juridique) que les individus se donnent, comme la définition des droits de propriété ou l'expansion de la masse monétaire³⁷. Le rôle de la science est alors de découvrir les lois universelles qui expliquent comment émergent certains phénomènes en aval des préférences individuelles, ce qui permet ensuite de se demander quelle forme d'organisation sociétale, en amont de la formation des préférences individuelles, peut atteindre au mieux certains objectifs.

De la même façon qu'elles sont imperméables aux législations, les lois universelles sont imperméables au choix de règles comptables. C'est aux règles de s'ajuster à la réalité que l'on veut observer et comprendre. Par exemple, les *avantages sociaux* d'un employé sont toujours logiquement à ses propres frais, peu importe l'apparence comptable d'une contribution de l'employeur. En effet, le processus d'embauche s'effectue toujours en comparant le coût

³⁷ Pour von Mises, les politiques monétaires forçant une expansion insoutenable du crédit sont la principale cause des cycles économiques. La première moitié du cycle crée une illusion de prospérité à court terme politiquement rentable. La deuxième moitié crée une illusion d'épuisement des ressources et permet un second gain politique lors de la recherche de boucs émissaires. Dans ce contexte, il est dommage que les adeptes de la décroissance ne se tournent pas vers la question plus pertinente de l'inflation et de la déflation.

d'embauche de l'employé avec l'utilité pour l'entreprise d'avoir ou non un employé de plus. Aucune règle comptable ne peut changer la logique derrière ce processus en définissant différemment le salaire brut ou net d'un employé.

La question parallèle du choix de règles d'imputation (affectation) demande une analyse semblable. Le dictionnaire *The New Palgrave: A Dictionary of Economics* (1987) définit l'imputation comme suit:

imputation. [... Imputation is related to] the process by which the subjective valuations and value-preferences of individual consumers 'impute' value to the goods being produced. [...] The rents of Champagne land are high because the consumers value the champagne highly, and not the other way round. 'Costs' of resources are reflections of the value of products foregone.

[... Value imputation is] a process of estimating how much of a product would be lost if the producer were deprived of one unit of a factor. [...] Working out the specifics is difficult because] by its nature subjective value is an expression of ordinal preferences and therefore can neither be added nor measured [unlike cardinals].

The modern theory of marginal productivity has [...] shown how values of products can be imputed back to productive factors. One exception is [when] two factors are each purely specific to a given product, then [...] there is still no principle by which the market can determine their relative prices except by arbitrary bargaining. [...]

The other important point is that values cannot be added or divided, and that the imputation process takes place, not automatically or precisely in an abstract realm of 'values', but only concretely and by [entrepreneurial] trial and error, in the realistic market process of changing prices. [...] There is no direct, abstract or pure process of imputing values.

Cette définition peut être clarifiée par l'exemple de l'imputation des coûts d'un vol d'avion entre différents passagers plus ou moins flexibles face aux conditions de leur trajet. En effet, l'émergence de prix différenciés démontre que les billets d'avion ont un coût de renonciation différent pour les passagers flexibles et pour les passagers inflexibles, ce qui sera vrai tant et aussi longtemps que le phénomène sera observable, peu importe l'opinion de l'observateur externe. Il s'en suit que certains coûts fixes – y compris une éventuelle compensation de la partie fixe des émissions de CO₂ – sont davantage imputables aux passagers inflexibles qu'aux passagers

flexibles. Il s'agit là d'un fait indiscutable et non d'une règle comptable pouvant être remise en question. C'est plutôt à notre compréhension des impacts environnementaux des trajets d'avion de s'ajuster à cette réalité observable. S'il n'y avait que des passagers inflexibles, beaucoup plus d'avions seraient remplis à moitié, ce qui émettrait davantage de CO₂ par passager.

L'imputation est un phénomène émergent de la catallaxie, résultat spontané d'un échange immatériel d'informations survenant à mesure que les individus interagissent tout en restant maîtres de leurs décisions respectives. On remarque que l'imputation concerne le futur immédiat, alors que la comptabilité mesure toujours ce qui est situé dans le passé et appartient donc à un domaine catégoriquement différent. Leurs règles ne s'établissent pas de la même façon.

Pour comprendre les impacts environnementaux et en arriver à une méthode de *choix environnemental*, le scientifique recherche, avec raison, un jeu simplifié de règles comptables. Toutefois, il ne doit jamais perdre de vue que son rôle n'est pas de fabriquer ces règles (constructivisme), au risque de les écarter de la réalité en plus de les teinter de jugements de valeur. Son rôle doit être axiologiquement neutre et se limiter à *découvrir* ces règles à partir d'une approche déductive rationaliste, même si cela le sort de sa zone de confort.

Par exemple, la phrase ci-haut « 'Costs' of resources are reflections of the value of products foregone » permet de faire un parallèle intéressant pour l'analyse environnementale. Si les coûts reflètent toujours la valeur de produits qui n'auront jamais existé, les impacts environnementaux *bien compris* d'un produit pourraient tout aussi bien correspondre à ceux d'émissions dont l'évitement n'aura pas eu lieu. En effet, rien n'empêche d'associer un lingot de cuivre aux impacts de ce que les mineurs n'auront pas pu faire autrement – planter des arbres, construire des éoliennes, ou nettoyer des filtres anti-poussière. Une telle règle d'imputation n'est pas pire qu'une autre car elle reflète une réalité concrète de l'agir humain, l'impossibilité de faire deux choses en même temps.

La phrase « there is no direct, abstract or pure process of imputing values » mérite aussi une attention particulière. Supposons qu'une usine produise les produits *A* et *B* et qu'une émission polluante provienne de la dernière étape de purification de *B*. Si les consommateurs de *B* sont inflexibles sur le prix (notamment, parce que *B* peut être produit de plusieurs autres façons, pensons à l'acide chlorhydrique), alors financer le traitement de ces émissions polluantes devient le problème des consommateurs de *A*. Il n'existe pas de processus indépendant d'imputation *des*

activités économiques à des fonctions permettant d'imputer l'émission à *B* sous prétexte que l'étape de purification y est mécaniquement reliée. L'imputation part toujours de la valeur accordée aux produits *A* et *B*, tout comme pour l'exemple du Champagne dans la définition. Même si le comptable constate à sa façon que c'est le prix élevé des terres qui justifie le prix élevé du Champagne, la causalité va dans l'autre direction.

En conclusion, comprendre comment s'imputent les impacts environnementaux dépasse très largement le débat entre les approches attributionnelle et conséquentielle en ACV. Ce n'est qu'une partie d'un plus grand débat entre économistes qui dure au moins depuis le *Methodenstreit* des années 1880. Il faut donc être prudent avant d'affirmer qu'un produit a moins d'impacts qu'un autre, alors qu'il existe un champ très vaste d'impacts pouvant être attribués.

A1.1.3 Empiricisme et rationalisme

Une autre conséquence du dualisme méthodologique est l'impossibilité de réaliser des expériences contrôlées sur l'agir humain, vu que chaque décision est considérée comme un événement singulier donc impossible à répéter. Conséquemment, une théorie économique n'est généralement pas falsifiable empiriquement. Au contraire, l'école autrichienne perçoit plutôt l'empiricisme des sciences humaines comme un vernis de démarche scientifique, utilisé à tout vent pour démontrer une chose et son contraire.

Comparativement, l'approche déductive rationaliste tente d'établir un raisonnement logique à partir d'axiomes qui paraissent évidents. Cela est certes périlleux, mais offre au moins la possibilité d'une réelle falsification, soit en montrant une faille logique dans le raisonnement, soit en invalidant un axiome. Selon ce critère de falsifiabilité, l'analyse du *choix environnemental* doit aussi passer par une approche déductive rationaliste.

Pour donner un exemple de comparaison entre les deux approches, on pourrait très bien trouver empiriquement une corrélation négative entre le salaire minimum légal et le taux de chômage. Cela pourrait être le cas si, en général, les périodes de chômage en baisse sont politiquement propices à une hausse du salaire minimum. Toutefois, cela ne saurait invalider le fait – apparemment contradictoire – qu'une hausse du salaire minimum doit nécessairement causer une hausse du taux de chômage. En effet, comme mentionné plus haut, le processus d'embauche s'effectue toujours en comparant le coût d'embauche de l'employé avec l'utilité pour l'entreprise

d'avoir ou non un employé de plus. Une personne deviendra alors inemployable dès que le salaire minimum légal passe au-dessus de son utilité. On peut toujours chercher une faille dans ce raisonnement logique, mais aucune démarche empirique ne pourra le contredire, faute de pouvoir reculer le temps pour garantir des conditions initiales identiques d'une expérience à l'autre. Il faut alors conclure que le taux de chômage peut certes baisser *malgré* une hausse du salaire minimum, mais jamais grâce à elle.

De la même façon, le raisonnement déductif peut être utile à la compréhension des problèmes environnementaux lorsque les méthodes empiriques laissent perplexe. Par exemple, il permet de résoudre rapidement l'énigmatique survie du porc, du bœuf et du poulet, les trois espèces les plus exterminées, les moins protégées et pourtant les moins menacées.

A1.1.4 Préférences affirmées et démontrées

Une conséquence du dualisme méthodologique est que les préférences affirmées ne peuvent être démontrées ni empiriquement ni déductivement. La verbalisation de tels souhaits fait partie du monde vaporeux de ce qui se dit de bon ton et de ce que les gens pensent être, plutôt que de la réalité observable de ce que les gens sont et font. Pour avoir un effet dans le monde physique, une préférence doit mener à une décision. C'est donc seulement en observant l'individu choisir *A* plutôt que *B* qu'on peut conclure qu'une préférence existe.

Ce constat ne se limite pas qu'aux choix marchands; il s'étend à l'ensemble des décisions individuelles. Par exemple, une personne peut souhaiter vivre vieille, mais ce n'est pas ce qu'elle *préfère* dans le sens où elle ne passe pas la totalité de sa vie à faire du vélo stationnaire, à manger du brocoli sans beurre, et à jardiner le brocoli en question. Elle prend quotidiennement des risques démontrant sa préférence pour une vie plus courte qui en vaut la peine, jusqu'à une certaine limite. Elle prend le risque de voyager, de faire des sports dangereux, de sortir voir des gens potentiellement contagieux, et de ne pas contracter d'assurance mur-à-mur pour garder les moyens de faire autre chose de plus excitant. Ainsi, l'assurance médicament obligatoire augmente empiriquement l'espérance de vie d'une population, mais au détriment d'une liberté de choix qui définit déductivement sa qualité de vie. En effet, nul ne sait comment chaque personne pondère sa longévité avec d'autres critères, puisque cette pondération est antérieure à la formation de ses préférences tel qu'observable par le choix de s'assurer ou non.

Ainsi, les méthodes de détermination des préférences qui s'apparentent aux sondages ou aux jeux sont généralement suspectes. En effet, malgré toute leur sophistication, en bout de ligne elles mesurent ce que les gens pensent préférer, hors de toute confrontation avec la réalité. Ceci inclut les méthodes de type « willingness to pay » et « willingness to accept » et leur application à l'évaluation des biens publics environnementaux, qu'on voudra donc utiliser avec prudence.

À cela s'ajoutent tous les problèmes théoriques de la formation de *préférences collectives*. Pour n'en nommer qu'un seul, on remarque leur intransitivité. Par exemple, supposons qu'on veuille déterminer les préférences d'une collectivité face au choix du traitement des matières résiduelles. Un premier groupe, préoccupé par le volume final des déchets, préférera le recyclage à l'incinération à l'enfouissement. Un deuxième groupe, préoccupé par le transport et le bilan énergétique, préférera l'incinération à l'enfouissement au recyclage. Un troisième groupe, préoccupé par les émissions atmosphériques, préférera l'enfouissement au recyclage à l'incinération. Ainsi, en autant qu'aucun groupe ne forme plus de 50 % de la population, la *préférence collective* sera étonnamment circulaire, avec chaque option jugée meilleure que les deux autres par une large majorité. Évidemment, les vraies préférences – individuelles – sont toujours transitives (si $A > B$ et $B > C$ alors $A > C$). Une analyse du *choix environnemental* peut donc difficilement passer par une mesure empirique de préférences collectives.

Le sujet des préférences démontrées est particulièrement pertinent pour déterminer si les gens valorisent réellement leur environnement naturel. L'observation du monde vaporeux de ce qui se dit et de ce que les gens pensent être en donne certainement l'impression puisque personne n'est contre l'environnement, ni contre la vertu d'ailleurs. Par contre, l'observation des choix individuels ressemble plutôt à une surconsommation de produits à la marque *verte* très imagée, dilapidant ainsi des ressources qui auraient peut-être dû servir à fabriquer un filtre à particules requis par une usine. Cette paradoxale ostentation reflèterait-elle une préférence pour le pouvoir de faire la morale et de se mêler de la vie des autres en évoquant l'environnement?

Comparativement, les gestes correspondant à une véritable préférence pour un environnement naturel – comme acheter un lot forestier pour la marche, l'ornithologie et la chasse aux squatteurs – sont peu pratiqués et demeurent perçus négativement comme un luxe typiquement bourgeois. L'idée ici n'est pas de tout ramener à une question marchande, mais bien de noter que les gestes posés envers l'environnement par les citadins à l'avant-garde *bio* et *écolo* rivalisent difficilement

avec ceux des ruraux qui renouvellent continuellement leur choix d'habiter cet environnement, exprimant ainsi une préférence démontrée par un sacrifice réel de confort matériel.

Face à ce constat, il serait tentant de conclure que l'individu moyen préfère un mode de vie qui ne respecte pas un critère objectif de durabilité, justifiant ainsi de le priver de son libre choix au nom de générations futures dont la conception serait virginale. Cependant, une telle conclusion négligerait que le choix de préserver son environnement naturel, le choix de conserver des ressources et le choix de faire des enfants sont faits par les mêmes individus; leur causalité n'est donc pas découplée. Pour voir ce que cela implique, on peut imaginer un monde hypothétique où l'environnement naturel serait cloisonné. Une population ne faisant que les enfants dont elle peut subvenir aux besoins, même si elle adopte un mode de vie très artificiel, se retrouverait dans une situation soutenable. Comparativement, une population adoptant un mode de vie très naturel, au point de ne pas utiliser de contraception, se retrouverait dans une situation désastreuse. En ce sens, ce ne sont pas les préférences de mode de vie qui causent problème, mais bien le manque de cloisonnement et ce que cela disloque dans la catallaxie.

A1.1.5 L'intersubjectivité des problèmes environnementaux

Le cadre du dualisme méthodologique offre une solide base logique pour l'analyse des causes et solutions aux problèmes environnementaux. Contrairement à l'approche traditionnelle des économistes face aux problèmes environnementaux, l'approche autrichienne :

[...] shifts the focus from maximizing the social value of output or equating price to marginal social cost, to efficient intra- and inter-personal plan formulation and execution, i.e., the internal consistency between the means that people use and the ends that they desire to achieve. Within this context, pollution problems that are indeed problems create an interpersonal conflict over the use of means and therefore obstruct efficient plan formulation and execution. Pollution is therefore not about harming the environment but about human conflict over the use of physical resources. Generally formulated, a pollution or environmental problem arises when individual or group A and individual or group B are simultaneously attempting or planning to use resource X for conflicting purposes. Unless emissions into the air, discharge into a river, or the extraction of fish from the ocean give rise to such a conflict then there is no economic, i.e., efficiency problem. (Cordato, 2004)

Ainsi, le même arbre ne peut pas, à la fois, servir de bois de chauffage à l'un et tenir la corde à linge de l'autre. Une seule personne peut mettre son plan à exécution et elle sera *de facto* propriétaire de l'arbre. Le même phénomène survient dès qu'il est question d'utiliser une ressource limitée, que ce soit la capacité d'une rivière à dissiper du phosphore excédentaire ou la capacité de l'océan à neutraliser le CO₂. Vu que le *train de pensée* humain est individuel, la partition virtuelle de l'environnement naturel en cloisons individuelles est un pré-requis de l'interagir humain, qu'un système légal le reconnaisse formellement ou non. Ces cloisons ne sont donc pas l'artifice d'un régime de propriété privée, mais plutôt un élément plus ou moins formel, mais essentiel, du bon voisinage dans toute société. Dès que ces cloisons deviennent imparfaites, il devient alors possible pour deux individus de formuler deux planifications mutuellement incompatibles pour l'utilisation de la même ressource naturelle. Ainsi naît chaque problème environnemental, qui s'observe entre les individus, pas dans la nature. C'est la seule chose axiologiquement neutre qu'on puisse dire à ce sujet, sachant que la causalité remonte nécessairement à l'instant où l'individu fait des choix à partir de ses préférences.

Fondamentalement, la résolution de chaque problème environnemental nécessite le désamorçage des planifications contradictoires. Le désamorçage le moins conflictuel, et donc le plus efficace pour diminuer le nombre de problèmes, consiste à exiger que les planifications ultérieures s'ajustent aux planifications antérieures et non le contraire. En pratique, cela correspond à régime de droit du premier occupant. Comparativement, l'imposition forcée du jugement d'une tierce partie, comme la réglementation, n'est pas efficace car elle ajoute au conflit en plus d'exproprier et de désengager les premiers intéressés par la conservation de cet environnement.

Dans bien des cas, le respect du droit du premier occupant améliorerait la protection de son environnement naturel et diminuerait la pollution puisque cela est souvent dans son intérêt, même si le résultat contraire est théoriquement possible. Ce droit est très restrictif puisqu'il implique que toute émission polluante nécessite le consentement unanime de ceux raisonnablement affectés par sa déposition, sans nécessairement qu'il y ait preuve de dommages. La déposition peut impliquer leur propre corps (peau, poumons), ou un terrain ou un cours d'eau dans le cas d'une utilisation antérieure à la source émettrice. De plus, sous un tel régime, le nouvel émetteur n'a aucun intérêt à rehausser sa cheminée ou autrement diluer ses émissions, puisque cela ne ferait qu'augmenter le nombre potentiel d'interlocuteurs avec qui devoir négocier.

Ici *raisonnablement* implique le jugement des pairs, qui n'ont pas nécessairement intérêt à ce que la moindre petite odeur de cuisine soit catégorisée comme une agression. On peut donc imaginer un *test du saboteur* où la victime présumée d'émissions toxiques, acidifiantes, eutrophisantes ou radioactives irait saboter la source en plaçant la légitime défense. Un jury serait alors contraint de déterminer les bornes acceptables des émissions dans la catégorie d'impacts en question.

En tant que jeu de l'esprit, ce *test du saboteur* est utile pour un tri préliminaire des catégories d'impacts environnementaux. Le cas du CO₂ est intéressant car il serait difficilement défendable de saboter n'importe quelle source en plaçant le *droit à un climat non-changeant*. Il faudrait donc trouver un autre moyen de légitimer les colporteurs de permis échangeables et autres intervenants autoproclamés qui dépendent du même droit. L'épuisement des ressources est aussi un cas intéressant car il a déjà été remarqué que le choix de conserver des ressources et le choix de faire des enfants sont faits par les mêmes individus. Il serait donc assez paradoxal de dicter aux premiers occupants ce qu'ils devraient ou non laisser à leurs enfants, afin de conserver, au nom des enfants du nouveau venu, les ressources que ce dernier ne veut pas conserver lui-même.

La tragédie de l'accès libre est sans doute la première instance de non-respect du droit du premier occupant. La résolution de cette tragédie nécessite l'apparition d'un droit d'exclure, qui est *de facto* un droit de propriété complètement opposé au collectivisme politique d'une certaine pensée environnementaliste. Cette contradiction est d'autant plus ironique que le droit du premier occupant était relativement bien intégré au droit coutumier britannique jusqu'en 1820 environ, alors que par la suite les législateurs, sous le couvert des idéaux collectivistes de l'époque, vinrent endosser la pollution comme étant nécessaire au bien commun de la majorité des consommateurs, n'en déplaise aux quelques égoïstes incommodés par la fumée (Block, 1998).

Enfin, ce sujet pourrait faire l'objet d'une thèse entière, mais pas en génie chimique³⁸. Ce qui est plutôt d'intérêt ici, c'est le rôle du premier occupant comme évaluateur légitime des impacts environnementaux. Ainsi, le *choix environnemental* repose ultimement sur une pondération individuelle et inobservable dans la tête du premier occupant, irréductible à des concepts objectifs et difficilement remplaçable par le jugement d'experts, ce qui pose tout un défi méthodologique.

³⁸ De plus, ce sujet a déjà été partiellement couvert dans l'annexe de notre proposition de recherche et dans notre travail de session pour le cours ECON591 à l'Université Concordia, bien que notre pensée ait évolué depuis.

A1.2 Méthodologie du choix environnemental

La section A1.1 fournit quelques outils de base pour placer l'analyse du *choix environnemental* dans un cadre épistémologique qui lui convient. Cela permet, d'une part, de préciser en quoi consiste ce *choix environnemental*, et d'autre part, d'établir ce qu'il est possible ou non de savoir analytiquement à son propos.

Ce cadre reconnaît d'abord que la quantité *globalement correcte* d'un impact est celle qui aurait été consentie unanimement par les personnes affectées – à l'intérieur d'une certaine limite de légitimité – si elles en avaient eu le libre choix. Cette quantité, indéterminable en absence d'une réelle internalisation, aurait émergé d'une sorte d'équilibre entre les coûts de prévention, le véritable « willingness to accept » des premiers occupants et le véritable « willingness to pay » des autres. Toute autre quantité, même inférieure, interfère avec les planifications individuelles et ne règle aucun conflit, donc aucun *problème* (section A1.1.5). Logiquement, dans ce cadre, le *choix environnemental* est celui qui ramène l'impact autant que possible vers une estimation raisonnable de cette quantité. Il s'agit en quelque sorte d'un problème d'optimisation.

Dans ce cadre, la *causalité* des impacts environnementaux débute toujours avec le choix individuel (section A1.1.1), qu'il s'agisse du résultat prévisible d'avoir installé un type de brûleur plutôt qu'un autre ou du déversement imprévisible suite au coup de pied de l'ouvrier frustré sur un baril. Par contre, l'*imputabilité* des mêmes impacts est un phénomène émergent de l'interagir humain et ne diffère pas de celle des autres coûts (section A1.1.2). Elle ne peut pas être établie arbitrairement sur la base d'un *préjugé mécaniciste* non plus. Les émissions d'un fournisseur d'assurance ne sont pas moins imputables que celles d'un fournisseur d'électricité, et ne font donc pas moins partie du *cycle de vie bien compris* du produit, seulement parce qu'elles ne sont pas mécaniquement rattachées au produit.

Si l'analyse du cycle de vie (ACV) peut certainement fournir des données utiles à l'analyse du *choix environnemental*, elle ne peut pas être l'unique base de ce choix. D'un côté, la méthodologie de la collecte de l'inventaire est trop tronquée³⁹ pour arriver à une vision juste de

³⁹ La troncature dépend des différentes conceptions de l'imputation et se reflète dans les reproches que les adeptes de l'ACV-A et de l'ACV-C se font mutuellement. Pour certains, l'ACV-A n'est pas utilisable pour générer de l'information sur les conséquences d'une action (Ekvall & Weidema, 2004) et ne permet même pas de jeu de règles

l'ensemble des impacts imputables à une décision, notamment les impacts n'ayant pas pu être évités *ailleurs*. De l'autre côté, la méthodologie d'évaluation des impacts en ACV s'efforce de mesurer les problèmes environnementaux dans la nature plutôt qu'entre les individus, sans égard aux questions sous-jacentes de droit individuel (section A1.1.5). Elle achoppe alors sur la question de la pondération, souvent nécessaire pour arriver à une conclusion sans ambiguïté et impossible à résoudre de façon objective sur la base de préférences affirmées (section A1.1.4). En plus, les frontières spatiales et temporelles de la chaîne de cause à effet des impacts contiennent leur propre lot de subjectivité et de troncature⁴⁰. L'ensemble de ces problèmes mène à la divergence des résultats de l'ACV, en fonction de l'*incertitude de scénario* ou d'autres choix méthodologiques. En fait, l'incertitude de scénario serait plutôt une indétermination inévitable, considérant que le rôle de l'émetteur est autonome dans le choix futur d'émettre ou non.

Comparativement à l'ACV employée seule, une méthodologie idéale d'analyse du *choix environnemental* devrait utiliser au mieux toute les informations disponibles et retourner un maximum possible d'informations, tout en admettant la portée limitée de ce qu'il est réellement possible de savoir. Elle devrait aussi se distinguer par sa *neutralité axiologique*, si elle veut

non-contradictaires (Weidema, LCA Masterclass). Même si l'ACV-C nécessite un consensus difficile à atteindre sur « an approach as to which marginals [to use] and in which way the system should be expanded », pour l'ACV-A « it appears equally questionable (if not more so) that the necessary consensus and acceptance can be obtained for an attributional approach to LCA that needs to apply and justify arbitrary allocations and choices of which averages to use » (Weidema, 2003). Au sujet de ces choix de frontière et de la troncature, on se rappellera que le Dr Weidema avait verbalement acquiescé à notre suggestion que les émissions d'un avion retournant chez eux les travailleurs d'un site minier pouvaient faire partie du cycle de vie du métal produit, même si les travailleurs paient eux-mêmes ce voyage facultatif. Par contre, la discussion ne s'est pas rendue jusqu'à son implication logique, que l'ensemble des dépenses discrétionnaires des employés et actionnaires, y compris la télé plasma, font aussi partie du cycle de vie. En effet, si la main d'œuvre n'était pas imputable au produit, le travail se ferait partout juste pour une tape sur l'épaule, et tous les revenus seraient des rentes, ce qui est théoriquement possible mais n'est pas observable en 2011.

⁴⁰ Par exemple, l'horizon temporel pour les changements climatiques. Aussi, le calcul de l'énergie (ou de l'exergie) nécessaire pour remplacer certaines ressources peut être influencé par des idées préconçues à propos du degré de l'épuisement de ces ressources, sujet abordé dans l'article "The applicability of the exergy concept in life cycle assessment methodology" référé à la section A2.5.

fournir une aide à la décision exclusivement scientifique. Cela veut dire que son apparente objectivité – notamment dans le choix des frontières du système analysé, tant pour l’inventaire que la chaîne d’impacts – ne doit pas dissimuler de jugements de valeur, même glorifiés par l’entremise des générations futures (section A1.1.4). Or, bien que la pollution puisse se mesurer objectivement par rapport à un équilibre antérieur des écosystèmes⁴¹, l’agrégation d’impacts environnementaux de durées différentes, de probabilités différentes, d’acceptabilité différente, *etc.* ne peut se faire par une méthode purement empirique (section A1.1.3), ni par un consensus d’experts jamais parfaitement neutres, ni par des sondages de « willingness to pay » ou de « willingness to accept », et dépend plutôt des préférences démontrables d’une population, qui ne sont pas collectives pour autant (section A1.1.4).

Ainsi, le *choix environnemental* doit dépendre de préférences individuelles, mais une méthodologie d’analyse de ce choix ne doit pas être biaisée par de telles préférences. Cette exigence paradoxale se résout simplement en laissant ces préférences à l’extérieur de la méthode. La section A1.1.5 donne un exemple des préférences de qui – le premier occupant – pourrait servir à évaluer les impacts de quelles émissions – celles qui auraient dû exiger son consentement selon ses pairs⁴². Les *facteurs de caractérisation* tels qu’utilisés en ACV sont donc acceptables dans la mesure où on peut raisonnablement s’attendre à ce qu’ils reflètent une évaluation qui fasse unanimité. En principe, il y aurait alors autant de catégories d’impacts qu’il existe de situations où cette évaluation ne fait pas unanimité.

Dans ce contexte, chaque impact non-consenti, du moins s’il passe le *test du saboteur* (section A1.1.5), ne devrait pas exister et c’est son coût d’évitement qui devrait être imputable. Comme l’imputation est un phénomène émergent de l’internalisation, ses règles doivent alors être découvertes en imaginant ce qu’il aurait survenu en cas d’internalisation, et non pas fabriquées arbitrairement, vu l’absence de lien causal entre le choix de l’un d’émettre et le choix de son

⁴¹ Quoique la définition d’un équilibre est parfois problématique pour un écosystème chaotique, sans compter qu’il y a un jugement de valeur dans le choix péché originel après lequel l’intervention humaine devient extérieure à ce supposé équilibre. Est-ce l’adoption du feu, de l’agriculture ou encore de la machine de Newcomen? Ou est-ce plutôt l’adoption des idées de John Locke et d’Adam Smith?

⁴² Ici le choix du premier occupant reflète une préférence normative pour l’efficacité que représente la minimisation des conflits. On peut le remplacer par quelqu’un d’autre sans enlever à la généralité du propos.

client d'acheter son produit (section A1.1.2). En l'absence de toute internalisation, l'unique certitude est que l'achat d'un produit plus cher est toujours interchangeable avec l'achat d'un produit moins cher accompagné de la prévention véritable d'impacts. Il en résulte que le prix d'un produit est toujours le premier indicateur de ses impacts environnementaux.

Comme c'est l'évitement qui devrait être imputable, c'est la valeur accordée aux coproduits finis qui permet de justifier le coût d'évitement des émissions. L'analyse des coûts d'évitement du cycle de vie devient alors nécessaire et suffisante pour qualifier le *choix environnemental* à l'abri des préjugés et des jugements de valeur de l'analyste. En plus, la considération des coûts et des coûts d'évitement sur un pied d'égalité fait disparaître l'incertitude de scénario et fait converger ce qui aurait autrement divergé. La seule incertitude qui reste dans ce cas, beaucoup plus circonscrite, est celle sur ce que coûterait vraiment un intrant ou un produit une fois l'ensemble des impacts environnementaux internalisés. Néanmoins, le résultat de l'internalisation reste fondamentalement indéterminé, notamment parce que sa résolution, avec sept milliards et plus de participants, sera toujours plus imaginative que l'ensemble des propositions d'un groupe d'experts. De plus, il est difficile de prédire quels impacts totaux seraient effectivement consentis ou non consentis.

À défaut de mieux, une méthodologie du *choix environnemental* devrait donc adapter les informations environnementales déjà disponibles au cadre épistémologique présenté, via la meilleure estimation possible des coûts d'évitement. La préférence irait alors pour le choix qui minimise les coûts totaux du cycle de vie.

ANNEXE 2 – LISTE DE COMMUNICATIONS

Cette annexe présente la bibliographie complète des communications d'importance réalisées au cours de ce projet, incluant celles qui ne sont pas incluses dans cette thèse.

A2.1 Article dans le chapitre 4 (publié, avec comité de lecture)

Bernier, E., Marechal, F., Samson, R., 2010. Multi-Objective Design Optimization of a Natural Gas Combined Cycle with Carbon Dioxide Capture in a Life Cycle Perspective. *Energy* 35, 1121-1128.

A2.2 Article dans le chapitre 5 (publié, avec comité de lecture)

Bernier, E., Marechal, F., Samson, R., 2012. Optimal Greenhouse Gas Emissions in NGCC Plants Integrating Life Cycle Assessment. *Energy* 37, 639-648.

A2.3 Article dans le chapitre 6 (soumis, avec comité de lecture)

Bernier, E., Marechal, F., Samson, R., 2012. Life Cycle Optimization of Energy-Intensive Processes Using Eco-costs. Soumis à: *Int J LCA*.

A2.4 Compte rendu de conférence dans l'annexe 3 (comité de lecture limité)

Bernier, E., Samson, R., Maréchal, F., 2008. Multi-objective Design Optimization of a NGCC Power Plant with CO₂ Capture Using Life Cycle Assessment Results, in: Ziębik, A., Kolenda, Z., Stanek, W. (Eds.), *ECOS 2008. The Silesian University of Technology*, Cracow-Gliwice, Poland, pp. 1339-1346.

A2.5 Comptes rendus de conférence (comité de lecture limité)

Bernier, E., Gerber, L., Maréchal, F., Samson, R., 2009. Life-Cycle Environomic Optimisation of NGCC Plant with Biogenic Fuel and CO₂ Capture, *WCCE8*, Montréal, Canada, pp. 1-6.

Bernier, E., Girardin, L., Maréchal, F., Samson, R., 2009. Life-Cycle Environomic Optimisation of NGCC Plant with CO₂ Capture, *WCCE8*, Montréal, Canada, pp. 1-5.

Bernier E The applicability of the exergy concept in life cycle assessment methodology. In: C.J. Koroneos, D.C. Rovas & A.Th. Dompros (eds.), ELCAS2011: Proceedings of the 2nd International Exergy, Life Cycle Assessment and Sustainability Workshop & Symposium, 19 - 21 June 2011, Nisyros Island, Greece, pp. 666-673 (*in absentia*).

A2.6 Présentations dans les conférences internationales

Bernier, E., Samson, R., 2007. Mesurer l'épuisement des ressources non-renouvelables: une approche thermodynamique, CYCLE2007, Montréal, Canada.

Bernier, E., Samson, R., Maréchal, F., 2008. Multi-objective Design Optimization of a NGCC Power Plant with CO₂ Capture Using Life Cycle Assessment Results, ECOS 2008, Cracovie, Pologne.

Bernier, E., Gerber, L., Maréchal, F., Samson, R., 2009. Life-Cycle Environomic Optimisation of NGCC Plant with Biogenic Fuel and CO₂ Capture, WCCE8, Montréal, Canada.

Bernier, E., Girardin, L., Maréchal, F., Samson, R., 2009. Life-Cycle Environomic Optimisation of NGCC Plant with CO₂ Capture, WCCE8, Montréal, Canada.

Bernier, E., Maréchal, F., Samson, R., 2009. Multi-Objective Process Design Optimization Using LCA, LCA IX, Boston, MA.

Bernier, E., Maréchal, F., Samson, R., 2010. Optimisation multicritères d'une centrale thermique avec analyse du cycle de vie, 78e congrès de l'ACFAS, Montréal, Canada.

A2.7 Affiche dans une conférence

Bernier, E., Maréchal, F., Samson, R., 2010. Multi-objective Process Design Optimization using LCA, CYCLE2010, Montréal, Canada.

A2.8 Affiches et présentations devant les partenaires du projet

Bernier, E., Samson, R., Deschênes, L., 2005. 2e loi de la thermodynamique et ACV: impact sur le calcul des émissions indirectes de CO₂, Rencontre technologique automne 2005, Montréal, Canada.

Bernier, E., Samson, R., Deschênes, L., 2006. Thermodynamique et méthodologie ACV, Rencontre technologique printemps 2006, Montréal, Canada.

Bernier, E., Samson, R., Deschênes, L., Maréchal, F., 2007. Application de résultats d'analyse du cycle de vie à l'optimisation d'une centrale NGCC avec capture de CO₂, Description de projet pour le LENI, Lausanne, Suisse.

Bernier, E., Samson, R., Deschênes, L., Maréchal, F., 2007. Application de résultats d'analyse du cycle de vie à l'optimisation d'une centrale NGCC avec capture de CO₂, Description de projet pour Gaz de France, Paris, France.

Bernier, E., Samson, R., Deschênes, L., Maréchal, F., 2007. Optimisation d'une centrale NGCC avec capture de CO₂ en tenant compte du cycle de vie, Rencontre technologique printemps 2007, Montréal, Canada.

Bernier, E., Samson, R., Maréchal, F., 2007. Optimisation d'une centrale NGCC avec capture de CO₂ en tenant compte du cycle de vie, Rencontre technologique automne 2007, Montréal, Canada.

Bernier, E., Samson, R., Maréchal, F., 2008. Optimisation d'une centrale NGCC avec capture de CO₂ en tenant compte du cycle de vie, Rencontre technologique printemps 2008, Montréal, Canada.

Bernier, E., Samson, R., Maréchal, F., 2008. Optimisation d'une centrale NGCC avec capture de CO₂ en tenant compte du cycle de vie, Rencontre technologique automne 2008, Montréal, Canada.

Bernier, E., Samson, R., Maréchal, F., 2009. Multi-Objective Design Optimization of CO₂ Capture in a Natural Gas Power Plant with a Life Cycle Perspective, Rencontre technologique printemps 2009, Montréal, Canada.

ANNEXE 3 – RÉSULTATS PRÉLIMINAIRES PRÉSENTÉS À ECOS2008

Ce chapitre contient l'article présentant les résultats préliminaires décrits à la section 3.4. Cet article a été publié dans les actes de la conférence *ECOS2008*. La référence complète est donnée dans l'annexe 2.4.

A3.1 Présentation de l'article

L'article est en quelque sorte un brouillon du chapitre 4. Il en partage les principales conclusions techniques. La principale différence est l'utilisation de la version 2004.1 d'*Aspen Plus* ainsi que d'un modèle des coûts d'investissement beaucoup plus rudimentaire. Par contre, l'origine et le traitement des données d'ACV y est mieux détaillée que dans le chapitre 4. Cette annexe ne contient pas de résultats complémentaires puisque c'est le chapitre 4 qui lui est complémentaire.

A3.2 Multi-objective Design Optimization of a NGCC Power Plant with CO₂ Capture Using Life Cycle Assessment Results

Etienne Bernier, Réjean Samson, François Maréchal

Keywords: Life cycle, Methodology, Multi-objective optimization, Carbon dioxide capture

Abstract Multi-objective optimisation methodology is ideally suited to incorporate environmental objectives in the optimal design of energy conversion systems. It is also desirable to optimise life-cycle emissions rather than local emissions only. However, using LCA results directly as an objective function gives sub-optimal designs, since inputs whose life-cycle emissions are easy to reduce are underused and vice-versa. We develop a method integrating LCA results in an optimisation framework, so that the optimal designs found are logically consistent with the aim of minimising global emissions. We then apply the method to the optimisation of a NGCC power plant with CO₂ capture, optimising column dimensions, solvent flow and heat exchange configuration with respect to two functions: cost and life cycle global warming potential. This method of using LCA results has an actual benefit since the cost of reducing local emissions cannot be lower than for global emissions.

Abbreviations

CO ₂	Carbon dioxide
CO _{2eq}	Carbon dioxide equivalent
GWP	Global Warming Potential
HP	High Pressure
IP	Intermediate Pressure
LCA	Life Cycle Assessment
LP	Low pressure
NGCC	Natural Gas Combined Cycle
MEA	Monoethanolamine
VLP	Very low pressure

Nomenclature

P_{CO_2}	Present value of future CO ₂ price, 30-year average, \$/ton
P_{column}	Incremental column investment cost, per unit packing mass, at 202kg/m ³ , \$/kg
P_{elec}	Present value of future CO ₂ -neutral electricity price, 30-year average, \$/MWh
P_{tr+seq}	Present value of future CO ₂ transportation and sequestration costs, 30-year average, \$/ton

A3.2.1 Introduction

Environmental constraints are increasingly important in all types of technical decision-making, including the design optimization of energy conversion systems such as large-scale power plants. Multi-objective optimization methodology is ideally suited to incorporate environmental information, as it does not require weighing different environmental and non-environmental objectives before optimization [1]. This is particularly useful when future emissions are expected to have a price, but an unknown price. In order to achieve an optimal design whose emissions are minimal, it is not only necessary to optimize on-site emissions and economic costs, but also life cycle emissions whenever not internalised. Life cycle assessment (LCA), as defined by ISO 14040 [2], is a method for measuring the overall impact of on-site and off-site emissions. Just as optimisation methodologies lack a life cycle perspective, LCA lacks an optimisation perspective. Indeed, LCA methodology systematically weighs emissions according to their measured impact rather than according to their abatement cost, even when the abatement cost is significantly lower than the impact. Consequently, using LCA results directly as an optimisation objective function gives a sub-optimal design, since inputs whose life cycle emissions are easy to reduce are underused and vice-versa.

This study first aims to develop a method for adapting LCA results to an optimization context, so that the local optimal design found is consistent with the aim of minimizing global emissions, making the LCA and the system design optimisation part of an integrated process. The method is then applied to a case study involving the optimization of a NGCC power plant with CO₂ capture using MEA, and its environmental impact. A similar study [1] also used a life cycle approach, but was not based on complete and adapted LCA results.

A3.2.2 Method

A3.2.2.1 Thermo-economic process design

A generic thermo-economic optimisation method is applied for studying the design of a NGCC power plant with CO₂ capture. The method, superstructure-based, is detailed in [3] and is implemented under the *OSMOSE* software platform developed at the Industrial Energy Systems Laboratory. It combines an *ASPEN Plus* model of the CO₂ absorption and desorption columns, a process integration model for the heat exchange network and steam turbines, and adapted LCA results to model the rest of the power plant life cycle. An evolutionary algorithm is then used to solve the multi-objective optimisation problem.

A3.2.2.2 Integrating LCA results in the process design optimisation

The method developed below is valid for process optimisation generally, and assumes that LCA results were obtained following ISO 14040 [2], for each independent input of the process, as well as for an un-optimised base case for the whole process. To avoid any sub-optimal solution, the process superstructure is gradually expanded to add key elementary processes from its life cycle with significant emission abatement potential. The rest of the life cycle is simply represented by its LCA results.

The first step is to define the environmental objective, based either on a single impact category such as GWP, or on a LCA impact assessment single-score method. The latter implicitly assumes that the weights of the impact categories within the single-score really represent a potential relative pricing, but that is not the rationale of typical single-score methods. It is preferred to use the base-case single-score result to find the dominant impact category, and use that category as the environmental objective.

The second step is to sort the elementary processes in the base-case LCA inventory by decreasing contribution to the environmental objective. Low-cost low-emission alternatives are found for all the contributors down the list, as long as they contribute significantly to overall emissions. For each alternative, the total cost and total impact are defined as a function of a decision variable. This is then included in the optimisation superstructure model used to compute the environmental and other objectives for the whole process.

For example, it is estimated that, in the American natural gas industry sector, 30% of all methane emissions can be avoided at practically no cost, 3% more at a cost of \$2.72/ton CO_{2eq}, 2% more at \$8.18, 5% more at \$13.64, 5% more at \$20.45, 3% more at \$27.27, and 2% more at \$34.09 [4]. These possible reductions will affect the design decision of an optimal NGCC power plant through its fuel input, but also other inputs such as cement, absorbent, *etc.* Therefore, the superstructure of the plant design has to be enriched in order to incorporate decisions that could affect the methane emissions of the natural gas production. In the superstructure, the elementary process “natural gas production” may be replaced by one of the following alternatives: 70% emitted and \$0/ton CO_{2eq} additional cost; 67% and \$0.08; 65% and \$0.25; 60% and \$0.93; 55% and \$1.95; 52% and \$2.77; or 50% and \$3.45. The process design decisions will therefore be considered together with the supply chain decisions by the optimisation algorithm that will choose which alternative depending on a new decision variable, which can be a simple integer “selector” variable, or can also be an emission price estimate. Each selectable alternative is potentially optimal, unlike a naive interpretation of LCA results (all emissions unavoidable), or no use of LCA results (emissions ignored).

Finally, the environmental objective function can be computed as follows: on-site emissions, plus LCA results for each input, minus reductions from each selected alternative. The economic objective function is computed as usual, plus the cost of each selected alternative.

A3.2.3 Case study

The 400 MW General Electric STAG 107H/109H cycle is used as a base case, of which approximately 130 MW is produced from the steam turbines. The optimisation superstructure covers the heat exchange network, steam turbines and CO₂ capture, while the gas turbine cycle is fixed outside the design space, and CO₂ handling (from drying to sequestration) is considered an independent input.

Fig.A3.2, suggests heat integration improvements. The heat given off in the CO₂ condenser contains a significant amount of usable exergy, obtainable by lowering the rich solvent preheating temperature, so that the top of the stripper can be used as an efficient heat exchanger, and using the hot lean solvent to produce VLP steam at the pre-heater temperature. Whether the VLP and LP level converge at the same pressure will determine the usefulness of the VLP level.

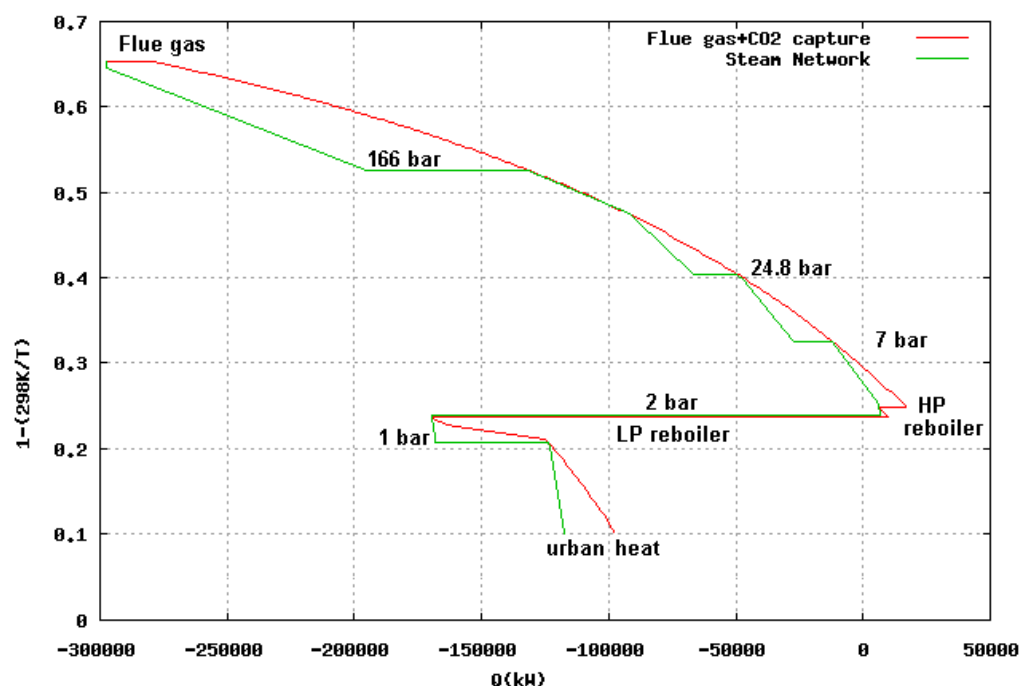


Figure A3.2 : Carnot composite curve of the steam cycle, excluding the bottom portion, for a NGCC power plant with CO₂ capture. Steam is partially condensed at 2 bar in a reboiler.

The resulting steam network is shown as the green (interior) curve on Fig.A3.2. The area between the curves corresponds to the exergy lost in heat transfer, which is not less than it would be in a NGCC power plant without capture, as expected since low-temperature CO₂ capture competes for exergy efficiently used by the steam turbine.

The only decision variables for the steam network are the VLP pressure and superheat levels. Flue gas composition assumes recirculation for CO₂ enrichment, with CO₂ production set to 144 t/h.

A3.2.3.2 Integrating LCA results

The LCA of a hypothetical un-optimised NGCC power plant with CO₂ capture using MEA was performed in a previous unpublished study in collaboration with Gaz de France. The study covered several elements of the power plant life cycle, including natural gas production as a mix from seven countries, power plant construction and operation (225 000 hours in 30 years), absorbents, water, CO₂ drying, recompression and sequestration, *etc.*, including infrastructure, transportation and disposal when applicable. Secondary data was obtained from the *ecoinvent 1.2* database and the *IMPACT2002+* method was used for impact assessment, except that GWP was calculated on a 100-year basis.

The study assumed a CO₂ capture rate of 90%, a power plant net thermodynamic efficiency of 48%, and a net output of 1 GW, which is quite different from the base case in this study. However, the LCA of the inputs can be reused for any other hypothetical NGCC plant as long as it is located in France with a similar CO₂ transportation distance. Although outside the scope of the original study, a single-score method, excluding the resource depletion impact category, can be used to summarise the results, as shown Table A3-1.

Table A3-1 : Life cycle impact assessment summary for NGCC power plant with 90% CO₂ capture, using the *IMPACT2002+* single-score. Remaining pollutants are mostly from off-site sources: natural gas extraction (1); sequestration leaks (2); offshore CO₂ compressor diesel engine (3).

Pollutant	Impact category	Contribution to single-score impact	Fraction off-site	Off-site sources
Carbon dioxide	Greenhouse gases	52%	68%	1,2
Nitrogen oxides	Respiratory inorganics	21%	52%	1,3
Methane	Greenhouse gases	9%	99%	1
Particulates 2.5 μ	Respiratory inorganics	5%	72%	1,3
Sulphur dioxide	Respiratory inorganics	4%	97%	1,3

Table A3-1 shows that despite a 90% CO₂ capture, CO₂ still contributes 52% to the total environmental impact of the plant, based on twelve weighted impact categories. Off-site emissions are more than twice as important as on-site emissions for all major pollutants except NO_x.

The proposed methodology confirms that GWP is the preferred environmental objective, especially since respiratory inorganics are arguably overweight in Table A3-1, being partly emitted in uninhabited areas. Table A3-1 also identifies three off-site processes that are major contributors to the life cycle environmental impact of the power plant, and candidates for the search of possible low-cost low-emissions alternatives to be used by the optimisation algorithm.

In the case of natural gas extraction, the CO₂ removed from the gas is relatively pure, and some of it likely offers potential for low-cost sequestration in a nearby depleted gas field. Also, a lot of methane emissions are presumably avoidable at a reasonable cost in Europe, as evidenced by [4] in a similar case. Because the natural gas input is not a function of the selected decision variables, the low-emissions alternatives do not need to be inserted in the superstructure.

CO₂ sequestration leaks are problematic because they are difficult to estimate, because they are potentially already internalised in the available P_{tr+seq} data, and because LCA lacks discounting. (LCA does not consider that the potential damage from CO₂ leaks in the distant future might be offset by future recapture efforts that have a very low present value.) This can be worked around by making sure P_{tr+seq} includes a provision for future recapture.

For the offshore CO₂ compressor, a different power source, such as a combined wind-diesel, would reduce all emissions including CO₂. However, this alternative can hardly be justified by emission prices if it cannot be justified by fuel price alone.

As it turns out in this case study, no low-emissions alternative enters the optimisation superstructure. Therefore, there is only a single possible value for the GWP of the power plant inputs: the value representing the original LCA results shown in Table A3-2.

Investigating low-emission alternatives remains important in the presence of high impact pollutants with a low abatement cost. CO₂ is peculiar because its abatement cost is never low, except in large-scale processes producing it highly concentrated.

Table A3-2 : Life-cycle GWP intensity of NGCC power plant inputs (kg CO_{2eq}/kg)

Input	GWP
Carbon steel	2.42
Stainless steel	6.69
Cooling water	8.46E-6
MEA w/o decomposition	3.40
CO ₂ handling w/o leaks	0.0101

A3.2.3.3 Calculation of the objective functions

In this study, two objectives are used, relative present cost (economic) and life-cycle GWP (environmental).

Cost includes the electricity production foregone, based on the P_{elec} constant; the investment cost of all three columns, based on the P_{column} constant; the CO₂ handling cost, based on the P_{tr+seq} constant; and an unknown constant representing fixed investment and operation costs such as fuel.

GWP includes the column packing stainless steel GWP, the CO₂ handling GWP, both taken from Table A3-2, uncaptured CO₂, and an unknown constant for the life cycle of the fixed investment and the fixed inputs MEA, cooling water, and natural gas. The GWP corresponding to the electricity production displaced is not included; this is why P_{elec} is based on CO₂-neutral electricity. Thus, a sensitivity analysis on P_{elec} can account for both the uncertainty on P_{elec} and the uncertainty on grid electricity GWP.

A3.2.4 Results

A3.2.4.1 Simulation results

Preliminary results show that the designs on the Pareto-optimal frontier, drawn on Fig.A3.3, have quite different configurations, possibly indicating that convergence is not complete after 500 iterations. The rich solvent preferably circulates in the top stripper first, the absorber inlets are preferably cold despite slower kinetics, and columns are preferably oversized relative to their

hydrodynamic limits. The LP and VLP levels converge around 2 bar and 1 bar respectively. However, there is no obvious preference for stripper pressure(s) or split flow fraction. Position *along* the Pareto-optimal frontier is strongly correlated with absorber height only.

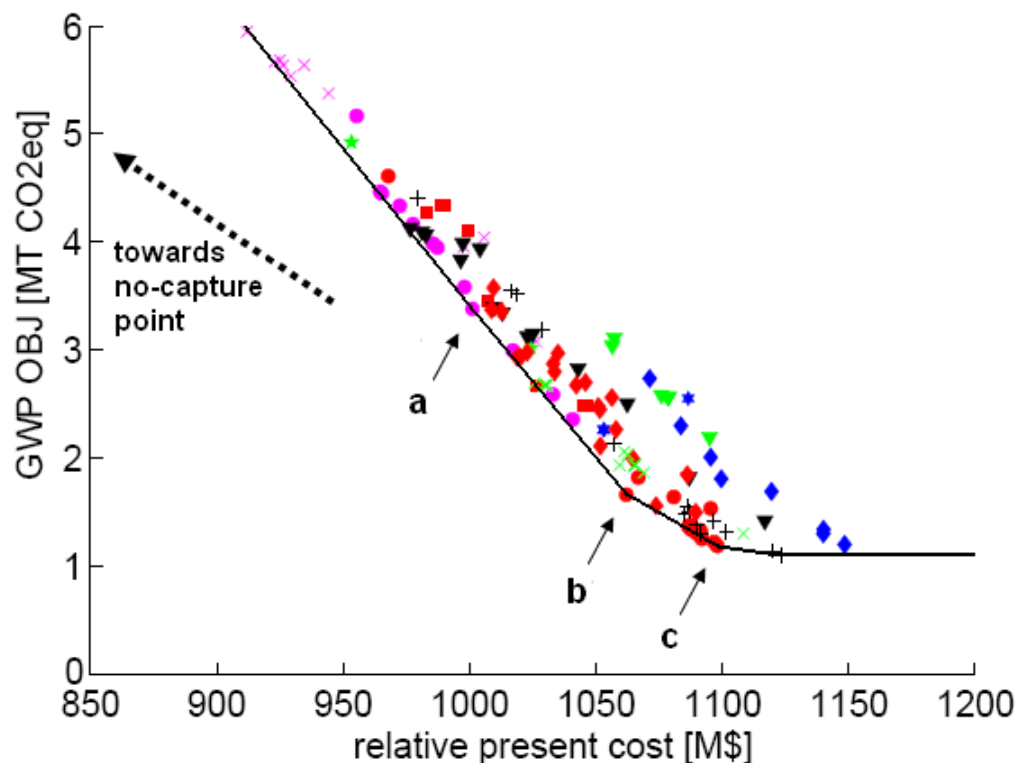


Figure A3.3 : Pareto Optimal Frontier. *a*, *b* and *c* point to the optimal design for low, medium and high P_{CO_2}

On Fig.A3.3, the *a*, *b* and *c* arrows point to optimal designs with capture rates of 90½%, 96% and 97½% respectively. The lost electricity production, relative to 400 MW without capture, is 8.9%, 9.3% and 9.9% respectively.

A3.2.4.2 Sensitivity analysis

Of more interest are the P_{CO_2} at which one optimal design or another should be built, and how that price is sensitive to the judicious use of LCA results. This is verified for the scenarios shown in Table A3-3.

Table A3-3 : Sensitivity analysis on the P_{CO2} transitions between preliminary designs

Scenario	P_{CO2} <i>a</i> to <i>b</i> transition	P_{CO2} <i>b</i> to <i>c</i> transition
Base case: $P_{elec} = \$50$, $P_{column} = \$15$, $P_{tr+seq} = \$20$	\$35.36	\$76.20
$P_{elec} = \$70$	\$39.66	\$98.16
$P_{elec} = \$30$	\$31.06	\$54.24
$P_{tr+seq} = \$30$	\$45.45	\$86.69
$P_{tr+seq} = \$15$	\$30.31	\$70.95
$P_{column} = \$25$	\$38.32	\$76.40
Neglecting CO ₂ handling life cycle	\$35.00	\$75.40
Neglecting stainless steel life cycle	\$35.29	\$76.19
Neglecting non-CO ₂ greenhouse gases	\$35.36	\$76.19
5% CO ₂ sequestration leak, no discounting	\$36.85	\$79.54
50% wind for offshore CO ₂ compressor (no cost)	\$35.33	\$76.12
Weighing in respiratory inorganics	\$35.96	\$77.54

The slope of the Pareto-optimal frontier indicates that the designs would be optimal for a P_{CO2} from \$34.81 to \$35.36 for *a*, \$35.36 to \$76.20 for *b*, and \$76.20 to \$275.49 for *c*. This does not mean that CO₂ capture is profitable at \$35/ton, as the tangent to the no-capture point is not explicit on Fig.A3.3. Rather, it means that since the cost to capture CO₂ with MEA is likely above \$35/ton, any plant so equipped should be designed to capture at least 96%. As can be expected, P_{CO2} depends more on P_{elec} and P_{tr+seq} than on P_{column} . Emissions from CO₂ handling are the only off-site emissions with significant influence on P_{CO2} .

A3.2.5 Conclusion

Low-temperature CO₂ capture in NGCC power plants using MEA is relatively inefficient because it competes with the steam turbine for the same exergy and because it requires to warm and cool large amounts of inert water. Nevertheless, significant improvements can be achieved with advanced flow configurations and with optimal integration with the steam cycle. Also, it is useful to optimise the fraction of CO₂ captured, and to do so in a life-cycle perspective. Preliminary results show the optimal capture rate to be around 96%.

LCA results are useful to identify significant off-site emission sources that can be included in the computation of a life-cycle environmental objective function, within a multi-objective optimisation framework. This use of LCA results has an actual benefit since the cost of reducing local emissions cannot be lower than for global emissions. Avoidable off-site emissions should not be ignored, especially when facing high-impact, low abatement cost pollutants. In the case of CO₂ capture in a NGCC plant, off-site emissions are all unavoidable and only emissions from CO₂ handling affect the result significantly.

A3.2.6 Acknowledgements

We would like to acknowledge Gaz de France for the permission to use LCA results. This research was funded by a NSERC Canada Graduate Scholarship and by the Fonds québécois de la recherche sur la nature et les technologies.

A3.2.7 References

- [1] Li, H. *et al.* *Multi-objective optimization of an advanced combined cycle power plant including CO₂ separation options*. Energy 2006;31:3117–3134.
- [2] *Environmental management – Life cycle assessment – Principles and framework*. International Standard ISO 14040, Geneva, Switzerland, 1997.
- [3] Bolliger, R., Favrat, D., and Marechal, F. *Advanced Power Plant Design Methodology using Process Integration and Multi-Objective Thermo-Economic Optimisation*, In Proceedings of ECOS 2005, Trondheim, Norway, June 20-22, 2005, p.777-784.
- [4] *Report on U.S. Methane Emissions 1990-2020: Inventories, Projections, and Opportunities for Reductions* EPA Report No. 430-R-99-013, Washington, DC, USA, 1999.
- [5] Aroonwilas A., Veawab A. *Integration of CO₂ capture unit using single- and blended- amines into supercritical coal-fired power plants: Implications for emission and energy management* International Journal of Greenhouse Gas Control. 2007;1:143-150.
- [6] Jassim M.S., Rochelle G.T. *Innovative Absorber/Stripper Configurations for CO₂ Capture by Aqueous Monoethanolamine*. Ind. Eng. Chem. Res. 2006;45:2465-2472.