



# Universidad Nacional Autónoma De México

Programa De Maestría y Doctorado En Ingeniería  
Química

Simulación de esquemas de proceso para la  
producción de gas de síntesis a partir de diferentes  
corrientes gaseosas

## T E S I S

Que para optar por el grado de:

Maestro en Ingeniería

Presenta:

**José David Pérez Trinidad**

Tutor principal:

Dr. Jorge Ancheyta Juárez, Instituto Mexicano del Petróleo

Ciudad Universitaria, CD. MX. Mayo 2023



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.







**UNAM-Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ®**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de vídeos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**JURADO ASIGNADO:**

Presidente: **Dr. Barragán Aroche José Fernando**

Secretario: **Dr. Hinojosa Gómez Humberto**

Vocal: **Dr. Muñoz Moya José Antonio D.**

1er. suplente: **Dr. López Aguilar José Esteban**

2do. suplente: **Dr. Ancheyta Juárez Jorge**

La tesis se realizó en el Instituto Mexicano del Petróleo, Ciudad de México.

Director de tesis:

**DR. JORGE ANCHEYTA JUÁREZ**

---



# Dedicatoria

Quiero dedicar este escrito a las personas mas importantes de mi vida, son mis pilares y no quiero que nunca me falten:

A mis padres, por darme la vida. Mami, gracias por enseñarme los valores de la honestidad y la rectitud, siempre seré tu niño. Papá, gracias por tu constante apoyo y por siempre estar orgulloso de mi. Gracias a ambos por sentar las bases de la persona que soy.

A mi hermana Ivette, por darle alegría a mi vida. Eres mi mayor regalo y el más duradero. Gracias por aguantarme y quererme tal como soy.

A Miaumor Viviana, mi compañera de vida. Por amarme, cuidarme y creer en mi, incluso en los momentos en que yo mismo no lo hacía. Por jamás dejar que me rinda. Eres mi motor para seguir adelante. Sin ti esto no sería posible.

Gracias a todos por tenerme paciencia. Prometo no volverlos a hacer esperar tanto de nuevo.



# Agradecimientos

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por acogerme entre sus filas. Por hacer mi sueño realidad. Por volverme Puma de corazón.

Al Dr. Jorge Ancheyta, por su paciencia, apoyo y creer en mi potencial.

Al Dr. Fernando Barragán, por recordarme de lo que soy capaz y ayudarme a no dejar este esfuerzo abandonado.

Al CONACYT, por su apoyo económico.

A Miaumor Viviana, por todos tus ánimos.



# Índice general

|   |           |
|---|-----------|
| Índice de tablas  | IV        |
| Índice de figuras   | VI        |
| Resumen   | 1         |
| Abstract  | 3         |
| Objetivos   | 5         |
| <b>1. Introducción</b>  | <b>7</b>  |
| 1.1. Antecedentes . . . . .   | 7         |
| 1.2. Planteamiento del problema . . . . .                           | 10        |
| 1.3. Metodología . . . . .  | 11        |
| 1.4. Estructura del trabajo . . . . .                               | 12        |
| <b>2. Marco teórico</b>   | <b>13</b> |
| 2.1. Generalidades del gas natural . . . . .                        | 13        |
| 2.1.1. Clasificación . . . . .                                      | 14        |
| 2.1.2. Constituyentes . . . . .                                     | 16        |
| 2.1.3. Procesamiento . . . . .                                      | 18        |
| 2.1.4. Quema y venteo . . . . .                                     | 22        |
| 2.2. Combustibles Líquidos: Proceso <i>Gas-To-Liquids</i> . . . . . | 24        |
| 2.2.1. Proceso Fischer-Tropsch . . . . .                            | 25        |
| 2.3. Gas de síntesis . . . . .                                      | 27        |
| 2.3.1. Reformado con vapor: <i>SMR</i> . . . . .                    | 28        |
| 2.3.2. Oxidación parcial . . . . .                                  | 29        |
| 2.3.3. Reformado Autotérmico: <i>ATR</i> . . . . .                  | 31        |
| 2.3.4. Oxidación parcial catalítica: <i>CPO</i> . . . . .           | 33        |
| 2.3.5. Elección de la tecnología . . . . .                          | 34        |
| 2.4. Simulación de procesos . . . . .                               | 37        |

|           |  |            |
|-----------|--|------------|
| 2.4.1.    | Pasos para realizar una simulación de procesos . . . . . | 38         |
| 2.4.2.    | Aspen HYSYS . . . . .                                    | 41         |
| <b>3.</b> | <b>Definición del esquema de simulación</b>              | <b>43</b>  |
| <b>4.</b> | <b>Simulaciones</b>                                      | <b>47</b>  |
| 4.1.      | Producción de oxígeno . . . . .                          | 47         |
| 4.1.1.    | Descripción . . . . .                                    | 47         |
| 4.1.2.    | Simulación . . . . .                                     | 51         |
| 4.2.      | Cogeneración . . . . .                                   | 52         |
| 4.2.1.    | Descripción . . . . .                                    | 56         |
| 4.2.2.    | Simulación . . . . .                                     | 58         |
| 4.3.      | Desalinización . . . . .                                 | 62         |
| 4.3.1.    | Descripción . . . . .                                    | 64         |
| 4.3.2.    | Simulación . . . . .                                     | 65         |
| 4.4.      | Endulzamiento de gas . . . . .                           | 69         |
| 4.4.1.    | Descripción . . . . .                                    | 69         |
| 4.4.2.    | Simulación . . . . .                                     | 71         |
| 4.5.      | Reformado de gas . . . . .                               | 73         |
| 4.5.1.    | Descripción . . . . .                                    | 79         |
| 4.5.2.    | Simulación . . . . .                                     | 79         |
| 4.6.      | Deshidratación de gas . . . . .                          | 81         |
| 4.6.1.    | Descripción . . . . .                                    | 81         |
| 4.6.2.    | Simulación . . . . .                                     | 83         |
| <b>5.</b> | <b>Resultados</b>  | <b>85</b>  |
| 5.1.      | Producción de oxígeno . . . . .                          | 85         |
| 5.2.      | Cogeneración . . . . .                                   | 88         |
| 5.3.      | Desalinización . . . . .                                 | 92         |
| 5.4.      | Endulzamiento de gas . . . . .                           | 94         |
| 5.5.      | Reformado de gas . . . . .                               | 96         |
| 5.6.      | Sistema de deshidratación . . . . .                      | 103        |
| <b>6.</b> | <b>Discusión</b>   | <b>105</b> |
| <b>7.</b> | <b>Conclusiones</b>                                      | <b>113</b> |
| <b>A.</b> | <b>Errores en modelo de <math>K_{eq}</math></b>          | <b>115</b> |
|           | <b>Referencias</b>                                       | <b>119</b> |

# Índice de tablas

|  |    |
|--|----|
| 1.1. Principales países por volumen de quema de gas natural . . . .  | 10 |
| 2.1. Reacciones del proceso Fisher-Tropsch . . . . .   | 27 |
| 2.2. Reacciones de reformado con vapor . . . . .   | 28 |
| 2.3. Reacciones de formación de carbón . . . . .   | 29 |
| 2.4. Reacciones de oxidación parcial . . . . .   | 30 |
| 2.5. Resultados de reactor ATR piloto . . . . .  | 32 |
| 2.6. Composición de gas de síntesis para diferentes procesos . . . .                                       | 37 |
| 2.7. Sistemas típicos y correlaciones recomendadas . . . . .   | 42 |
| 4.1. Condiciones de corrientes en planta de oxígeno . . . . .  | 49 |
| 4.2. Condiciones de equipos en planta de oxígeno . . . . .   | 50 |
| 4.3. Condiciones de equipos en planta de cogeneración . . . . .  | 54 |
| 4.4. Composición de gas natural para esquema de cogeneración . .   | 58 |
| 4.5. Condiciones de equipos en planta de desalinización . . . . .  | 62 |
| 4.6. Reacciones tradicionales de un reactor ATR . . . . .  | 74 |
| 4.7. Sistema de reacciones simplificado . . . . .  | 74 |
| 4.8. Modelos cineticos de las reacciones en un reactor ATR . . . .   | 76 |
| 4.9. Parámetros cinéticos de Arrhenius y constantes de equilibrio<br>de reacción. . . . .                  | 76 |
| 4.10. Parametros de Van't Hoff de adsorción de especies . . . . .  | 76 |
| 4.11. Rearreglo de los modelos cinéticos . . . . .   | 77 |
| 4.12. Coeficientes de nuevas correlaciones para $k'$ y $K_{eq}$ . . . . .                                  | 77 |
| 4.13. Condiciones de referencia a la entrada de dos reactores ATR<br>industriales . . . . .                | 78 |
| 4.14. Parametros cineticos del reformado de etano y propano . . . .  | 78 |
| 4.15. Parametros y modelo cinetico para la oxidación total (combus-<br>tión) del etano y propano . . . . . | 79 |
| 4.16. Condiciones de corrientes en planta de deshidratación . . . .  | 83 |
| 5.1. Resultados de la simulación de la planta de oxígeno . . . . .   | 86 |

|      |   |     |
|------|---|-----|
| 5.2. | Resultados simulación planta cogeneración . . . . .   | 88  |
| 5.3. | Resultados simulación planta desalinización . . . . .   | 92  |
| 5.4. | Condiciones de salida en el reactor ATR A . . . . .   | 96  |
| 5.5. | Resultados de corrientes en planta de deshidratación . . . . .  | 103 |
| 6.1. | Error relativo porcentual de la simulación de la planta de oxígeno  | 106 |
| 6.2. | Error relativo porcentualde la simulación de la planta de cogeneración . . . . .                              | 107 |
| 6.3. | Comparativa de condiciones de salida en el reactor ATR A . . . . .  | 111 |
| 6.4. | Comparativa de condiciones de salida en el reactor ATR B . . . . .  | 112 |
| 6.5. | Error relativo en planta de deshidratación . . . . .  | 112 |
| A.1. | Comparativa del error absoluto entre modelos de predicción de $K_{equilibrio}$ en la reacción WGS. . . . .    | 116 |
| A.2. | Comparativa del error absoluto entre modelos de predicción de $K_{equilibrio}$ en la reacción SMR I. . . . .  | 117 |
| A.3. | Comparativa del error absoluto entre modelos de predicción de $K_{equilibrio}$ en la reacción SMR II. . . . . | 117 |

# Índice de figuras

|   |    |
|---|----|
| 1.1. Historico de la producción de hidrocarburos en México . . . . .                                      | 8  |
| 1.2. Producción e importacion de gas natural seco . . . . .   | 8  |
| 1.3. Producción de gas natural por origen . . . . .   | 9  |
| 1.4. Ubicación de los pozos de producción de gas . . . . .  | 9  |
| 2.1. Clasificación del gas natural . . . . .  | 14 |
| 2.2. Esquema de procesamiento de gas natural . . . . .  | 19 |
| 2.3. Alternativas en el transporte de gas natural . . . . .   | 24 |
| 2.4. Procesos <i>Gas-To-Liquids</i> . . . . .   | 26 |
| 2.5. Esquema de un reactor ATR . . . . .  | 31 |
| 2.6. Clasificación del gas natural . . . . .  | 33 |
| 2.7. Configuraciones para la producción del gas de síntesis . . . . .                                     | 34 |
| 2.8. Economía de escala en la producción de gas de síntesis . . . . .                                     | 35 |
| 2.9. Proporciones H <sub>2</sub> /CO para diversos procesos de producción de<br>gas de síntesis . . . . . | 36 |
| 2.10. Metodología de simulación . . . . .   | 40 |
| 2.11. Pantalla de carga de Aspen HYSYS . . . . .  | 41 |
| 3.1. Diagrama de bloques del sistema de gas de síntesis . . . . .   | 45 |
| 4.1. Esquema de la planta de oxígeno . . . . .  | 48 |
| 4.2. Esquema de la planta de cogeneración . . . . .   | 53 |
| 4.3. Esquema de la planta de desalinización . . . . .   | 63 |
| 4.4. Termocompresor . . . . .   | 65 |
| 4.5. Entorno de la simulación del termocompresor de vapor . . . . .                                       | 68 |
| 4.6. Esquema de la planta de desulfuración . . . . .  | 70 |
| 4.7. Esquema del sistema de reformado ATR . . . . .   | 80 |
| 4.8. Esquema del sistema de deshidratación . . . . .  | 82 |
| 5.1. Simulación de la planta de oxígeno . . . . .   | 87 |
| 5.2. Simulación de la planta de cogeneración . . . . .  | 91 |
| 5.3. Simulación de la planta de desalinización . . . . .  | 93 |

|  |     |
|--|-----|
| 5.4. Caso de estudio del absorbedor con amina . . . . .  | 94  |
| 5.5. Perfil de la concentración de absorción de H <sub>2</sub> S . . . . .                                   | 95  |
| 5.6. Perfil de la concentración de desorción de H <sub>2</sub> S . . . . .                                   | 95  |
| 5.7. Perfil de la concentración de desorción de CO <sub>2</sub> . . . . .                                    | 96  |
| 5.8. Simulación de la planta de desulfuración . . . . .  | 97  |
| 5.9. Cinética de la oxidación del metano, Parte A. . . . .   | 98  |
| 5.10. Cinética de la oxidación del metano, Parte B. . . . .  | 98  |
| 5.11. Cinética de la reacción WGS. . . . .   | 99  |
| 5.12. Perfil de concentraciones en reactor ATR A . . . . .   | 100 |
| 5.13. Perfil de concentraciones en reactor ATR B . . . . .   | 100 |
| 5.14. Perfil de temperatura en el reactor ATR A . . . . .  | 101 |
| 5.15. Perfil de temperatura en el reactor ATR B . . . . .  | 101 |
| 5.16. Esquema del sistema de reformado . . . . .   | 102 |
| 5.17. Simulación de la planta de deshidratación . . . . .  | 104 |
| 6.1. Comparativa de las presiones en cada uno de los evaporadores<br>del sistema de desalinización . . . . . | 110 |

# Resumen

En este trabajo, se presenta un esquema conceptual para la conversión de gas natural húmedo a gas de síntesis, acompañado de la simulación de los procesos involucrados.

Se llevó a cabo una investigación sobre la composición y procesamiento del gas natural, con el objetivo de determinar los sistemas de purificación requeridos.

Además, se realizó una revisión del proceso Fischer-Tropsch y la composición adecuada del gas de síntesis para dicho proceso. Se evaluaron diversas tecnologías existentes para la producción de gas de síntesis, analizando las características de los procesos y las composiciones típicas obtenidas en cada tecnología. También, se llevó a cabo un estudio breve sobre la simulación de procesos.

A partir del análisis de la información obtenida, se propuso un esquema conceptual para la obtención de gas de síntesis, describiendo cada paso y proponiendo un esquema general basado en la bibliografía.

Posteriormente, se realizó la simulación de los procesos propuestos utilizando el software Aspen HYSYS. Las simulaciones obtenidas se compararon con datos de la bibliografía y con datos reales con el objetivo de validar los modelos propuestos en este trabajo.

**Palabras clave:** Gas natural, Gas de síntesis, Esquema conceptual, Simulación, Proceso Fischer-Tropsch, Aspen HYSYS.



# Abstract

In this work, a conceptual framework for the conversion of wet natural gas to synthesis gas is presented, accompanied by process simulations.

An investigation was conducted on the composition and processing of natural gas, aiming to determine the required purification systems.

Furthermore, a review of the Fischer-Tropsch process and the appropriate composition of synthesis gas for this process was carried out. Various existing technologies for synthesis gas production were evaluated, analyzing process characteristics and typical compositions obtained in each technology. A brief study on process simulation was also conducted.

Based on the analysis of the obtained information, a conceptual framework for synthesis gas production was proposed, describing each step and proposing a general scheme based on the literature.

Subsequently, the proposed processes were simulated using Aspen HYSYS software. The obtained simulations were compared with literature data and real data to validate the proposed models in this work.

**Keywords:** Natural gas, Synthesis gas, Conceptual framework, Simulation, Fischer-Tropsch process, Aspen HYSYS.



# Objetivos

## Objetivo principal

Desarrollar un esquema conceptual para la conversión de gas natural húmedo a gas de síntesis, que pueda ser aplicada a diferentes corrientes gaseosas, acompañado de la simulación de los procesos involucrados.

## Objetivos específicos

- Realizar una investigación sobre la composición y procesamiento del gas natural para determinar los sistemas de purificación requeridos.
- Realizar una revisión del proceso Fischer-Tropsch y determinar la composición adecuada del gas de síntesis para dicho proceso.
- Evaluar diversas tecnologías existentes para la producción de gas de síntesis, analizando las características de los procesos y las composiciones típicas obtenidas en cada tecnología.
- Realizar un estudio breve sobre la simulación de procesos.
- Obtener un modelo cinético, junto con sus constantes, para realizar la simulación de la reacción de conversión de gas natural a gas de síntesis en el entorno Aspen HYSYS.
- Comparar las simulaciones obtenidas con datos de la bibliografía y con datos reales para validar los modelos propuestos en este trabajo.



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Antecedentes

En los últimos años, se ha observado una disminución en la producción de hidrocarburos en el país, como se puede evidenciar a través de estudios previos [1][2]. Específicamente, se ha registrado una disminución del 51.9 % en la producción de petróleo y un 32.2 % en la producción de gas, tal como se ilustra en la Figura 1.1 [3] .

Según las tendencias actuales, se estima que para el resto del año 2022 habrá una disminución del 2.33 % en la extracción de petróleo y una recuperación del 0.54 % en la extracción de gas en comparación al año 2021 [1] [3]. Sin embargo, se ha observado un aumento constante en la demanda energética nacional, lo que ha llevado a un aumento en las importaciones de gas natural. Actualmente, se importa cerca del 68 % del gas natural seco utilizado en el país, como se muestra en la Figura 1.2 [4].

En cuanto al origen del gas producido en el país, la mayor parte proviene de la extracción de gas natural asociado (Figura 1.3), debido a que la mayoría de los pozos productivos se encuentran en zonas marítimas, como se ilustra en la Figura 1.4.

A nivel internacional, México ocupa el octavo lugar en cuanto a quema de gas natural se refiere (Tabla 1.1) [5]. En los últimos 10 años, se ha registrado un incremento del 50 % en la quema de gas natural, pasando de 3.89 mil millones de metros cúbicos a 6.51 mil millones de metros cúbicos en 2021. Este aumento se debe a que la producción de petróleo está ocurriendo en pozos con proporciones más altas de gas/petróleo y sin el aprovechamiento del gas, lo que provoca que el excedente de gas sea quemado.

En los últimos años, el enfoque de México se ha centrado en la seguridad energética. Sin embargo, el aumento en la producción de petróleo ha conllevado

## 1.1. ANTECEDENTES

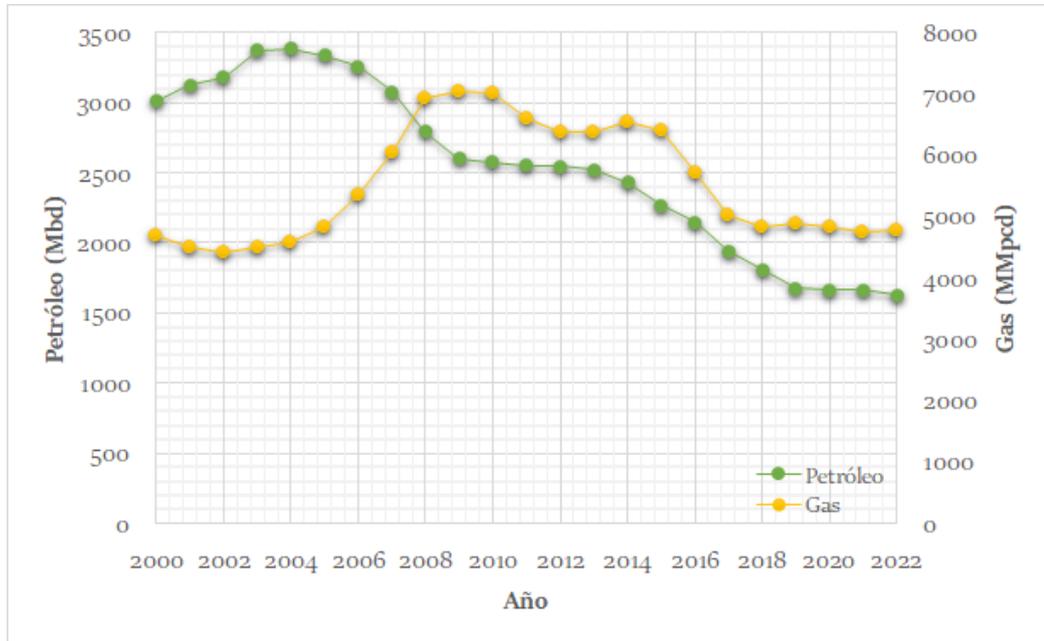


Figura 1.1: Histórico de la producción de hidrocarburos en México en miles de barriles diarios (petróleo) y millones de pies cúbicos diarios (gas) [1][2].

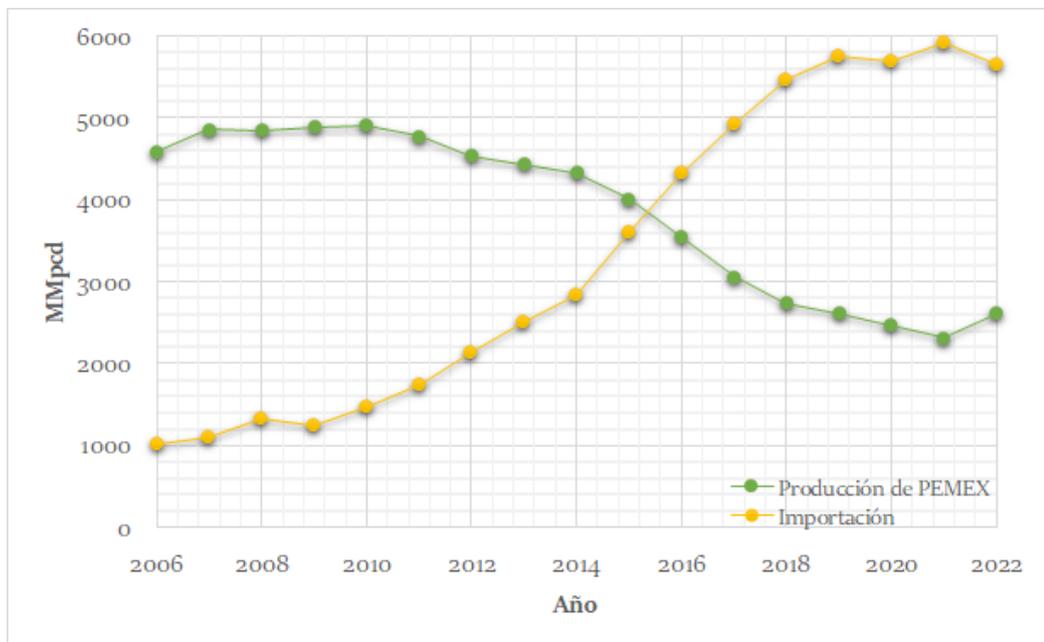


Figura 1.2: Comparativa de la producción e importación de gas natural seco

## CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

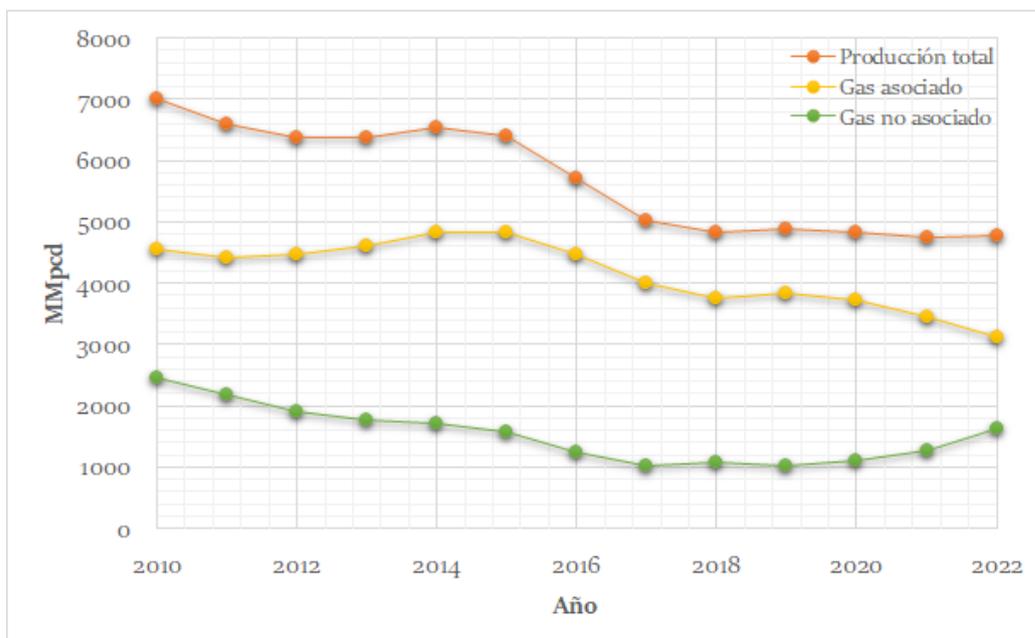


Figura 1.3: Producción total de gas natural por origen, en millones de pies cúbicos diarios.

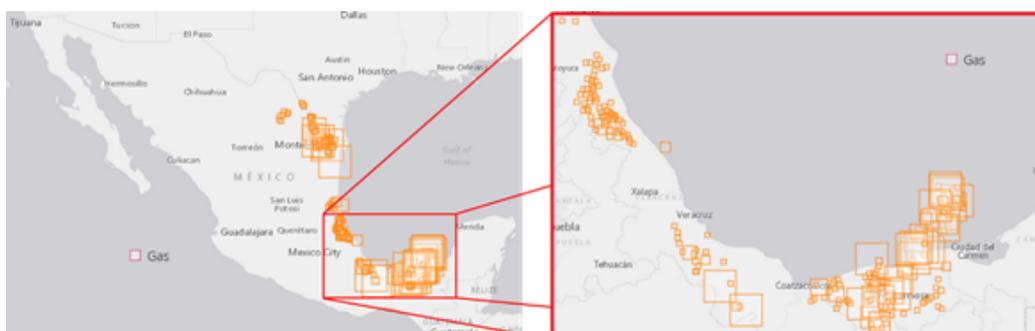


Figura 1.4: Ubicación de los pozos de extracción de gas en México

## 1.2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Tabla 1.1: Principales países por volumen de quema de gas natural [5], en mil millones de metros cúbicos

| País              | Año   |       |       |       |       |
|-------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                   | 2017  | 2018  | 2019  | 2020  | 2021  |
| 1.-Rusia          | 19.92 | 21.28 | 23.21 | 24.13 | 25.41 |
| 2.-Iraq           | 17.84 | 17.82 | 17.91 | 17.37 | 17.80 |
| 3.-Irán           | 17.67 | 17.28 | 13.78 | 13.26 | 17.38 |
| 4.-Estados Unidos | 9.48  | 14.07 | 17.29 | 11.81 | 8.78  |
| 5.-Venezuela      | 7.00  | 8.22  | 9.54  | 8.59  | 8.19  |
| 6.-Algeria        | 8.80  | 9.01  | 9.34  | 9.32  | 8.16  |
| 7.-Nigeria        | 7.65  | 7.44  | 7.83  | 7.20  | 6.63  |
| 8.-México         | 3.79  | 3.89  | 4.48  | 5.77  | 6.51  |
| 9.-Libia          | 3.91  | 4.67  | 5.12  | 2.47  | 5.97  |
| 10.-China         | 1.56  | 1.82  | 2.02  | 2.72  | 2.49  |

un aumento en la quema de gas natural. Al mismo tiempo, las importaciones de gas natural han aumentado. Por lo tanto, se hace evidente que la recuperación del gas que actualmente se quema puede desempeñar un papel importante en la independencia energética del país.

## 1.2. Planteamiento del problema

El aumento de la quema de gas natural asociado en México en los últimos años ha generado preocupación debido a la disminución de la producción de gas en el mismo periodo. En este contexto, es crucial encontrar alternativas para mitigar la quema de este gas.

Una de las posibles soluciones es la conversión del gas natural en gas de síntesis, que ofrece la oportunidad de aprovechar este recurso de una forma más eficiente (como por ejemplo su conversión en crudo ligero por el proceso Fischer-Tropsch).

Sin embargo, para implementar esta solución de manera efectiva, es importante contar con información relevante que respalde la toma de decisiones y el diseño de estrategias futuras.

Por lo tanto, el problema de investigación de esta tesis se define como la necesidad de realizar una simulación del proceso de transformación del gas natural en gas de síntesis, con el objetivo de brindar información relevante que pueda ser utilizada en la toma de decisiones y el diseño de futuras estrategias para mitigar la quema de gas asociado en México, en vista de la preocupación generada por la disminución de la producción de gas en los últimos años.

### 1.3. Metodología

La metodología propuesta incluye la revisión bibliográfica, la evaluación de tecnologías existentes, la simulación de procesos utilizando el software Aspen HYSYS, y la validación de los modelos propuestos mediante la comparación de los resultados simulados con datos de la bibliografía y datos reales, tal y como se describe a continuación:

- Investigación de la composición y procesamiento del gas natural: Se llevará a cabo una revisión de la literatura relacionada con la composición y procesamiento del gas natural, con el objetivo de determinar los sistemas de purificación requeridos para la conversión a gas de síntesis.
- Revisión del proceso Fischer-Tropsch y la composición adecuada del gas de síntesis: Se realizará una revisión del proceso Fischer-Tropsch y se determinará la composición adecuada del gas de síntesis requerida para dicho proceso, basándose en la literatura científica y técnica disponible.
- Evaluación de tecnologías existentes: Se realizará una evaluación de diversas tecnologías existentes para la producción de gas de síntesis, analizando las características de los procesos y las composiciones típicas obtenidas en cada tecnología. Esto se llevará a cabo mediante la revisión de estudios de caso y análisis comparativo de las ventajas y desventajas de cada tecnología.
- Estudio breve sobre la simulación de procesos: Se llevará a cabo un estudio breve sobre la simulación de procesos, con el objetivo de familiarizarse con las herramientas de simulación y los conceptos relevantes para la simulación de los procesos de conversión de gas natural húmedo a gas de síntesis.
- Propuesta de un esquema conceptual: A partir del análisis de la información obtenida en los pasos anteriores, se propondrá un esquema conceptual para la obtención de gas de síntesis.
- Simulación de los procesos propuestos: Se utilizará el software Aspen HYSYS para simular los procesos propuestos en el esquema conceptual. Se ajustarán los parámetros de simulación basados en la información obtenida de la revisión bibliográfica y se llevarán a cabo simulaciones detalladas de los procesos de conversión de gas natural húmedo a gas de síntesis.

## 1.4. ESTRUCTURA DEL TRABAJO

- Validación de los modelos propuestos: Se compararán los resultados obtenidos de las simulaciones con datos de la bibliografía y con datos reales disponibles en la literatura o provenientes de experimentos previos, con el objetivo de validar los modelos propuestos en este trabajo. Se realizará un análisis comparativo de los resultados simulados con los datos reales para evaluar la precisión y confiabilidad de los modelos.

### 1.4. Estructura del trabajo

El presente trabajo está organizado en 6 capítulos:

Capítulo 2: Generalidades sobre el gas natural, el proceso Fischer-Tropsch, gas de síntesis y simulación de procesos.

Capítulo 3: Esquema básico del proceso de producción de gas de síntesis a partir de gas natural húmedo.

Capítulo 4: Descripción de cada uno de los procesos propuestos involucrados, así como la descripción del proceso de simulación en Aspen HYSYS de cada uno de ellos.

Capítulo 5: Resultados de las simulaciones planteadas.

Capítulo 6: Discusión de los resultados.

Capítulo 7: Conclusiones del presente trabajo.

# Capítulo 2

## Marco teórico

### 2.1. Generalidades del gas natural

El término gas natural se refiere a un gas rico en hidrocarburos, el cual se puede encontrar en campos de producción de petróleo, en campos de producción carbonífera y evidentemente en campos de producción de gas natural. En estado puro es inodoro e incoloro. Es un gas combustible y desprende una gran cantidad de energía durante su combustión con una emisión de dióxido de azufre despreciable, las emisiones de óxidos nitrosos y dióxido de carbono es baja a comparación con otros combustibles fósiles [6].

Se origina por alguno o por la acción conjunta de los siguientes procesos: termogénico, biogénico y abiogénico [7]: El proceso termogénico involucra la descomposición relativamente lenta de material orgánico depositado en cuencas sedimentarias, bajo la influencia de temperaturas y presiones asociadas a su profundidad. Como resultado de esta descomposición se produce petróleo y gas natural, el cual se denomina metano termogénico. En el proceso biogénico el metano se forma por la acción de microorganismos (bacterias metanogénicas) sobre el material orgánico durante la deposición de los sedimentos y la fase temprana de su sepultura. En el proceso abiogénico, el material de origen es gas volcánico (con poco o nulo material orgánico), así, el metano es formado por la reducción de dióxido de carbono durante el enfriamiento del magma, generalmente en sistemas hidrotérmicos durante la interacción agua-roca. Los gases formados por estos procesos migran a través de diversas fallas y fisuras subterráneas hasta llegar a un depósito de gas natural, el cual consiste en un área de almacenamiento natural donde existen rocas permeables y porosas rodeadas a su vez de materiales impermeables, así, una vez que alcanzan el depósito, las rocas porosas contienen el gas, mientras las rocas impermeables forman un sello el cual les permite seguir migrando ya sea

## 2.1. GENERALIDADES DEL GAS NATURAL

vertical o lateralmente.

### 2.1.1. Clasificación

El gas natural puede ser clasificado de acuerdo a su origen o a su composición química [8]; como se muestra en la Figura 2.1. Partiendo de la clasificación en base a su origen [9], podemos encontrar:

- **Gas convencional:** Existe en depósitos profundos que están o bien asociados a petróleo crudo (gas asociado) o contiene poco o nulo petróleo crudo (gas no asociado).

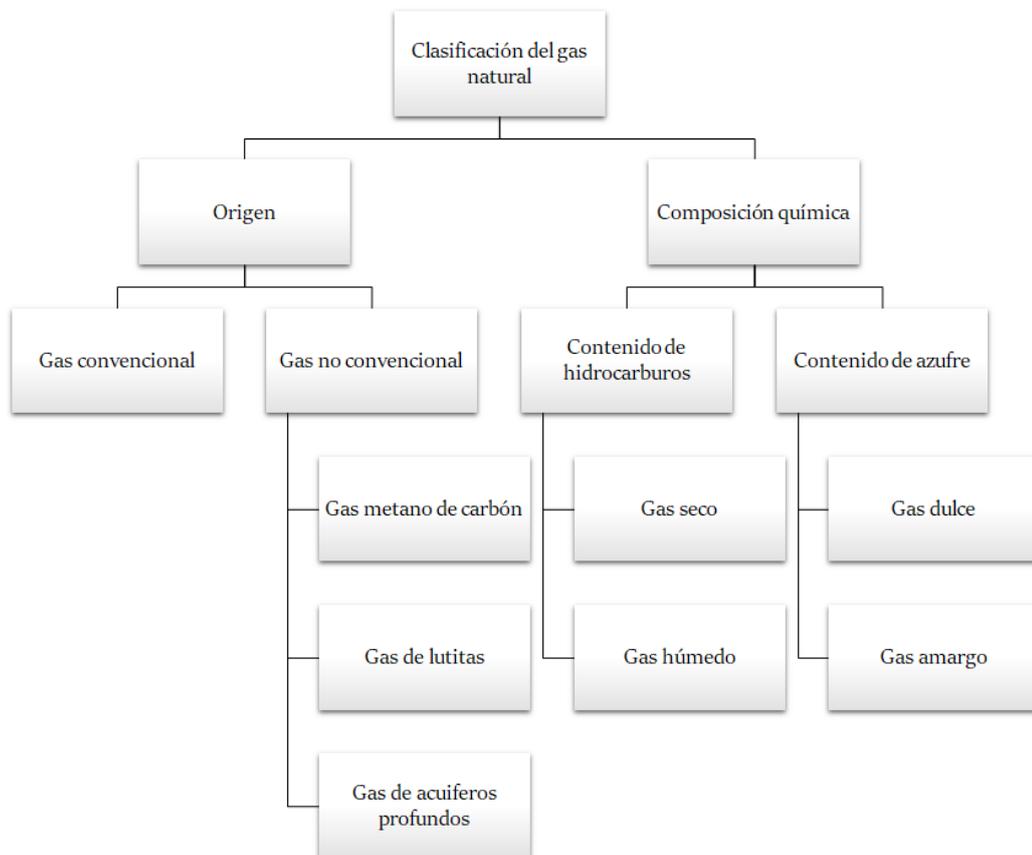


Figura 2.1: Diagrama de clasificación del gas natural [7].

- **Gas asociado:** También llamado gas húmedo, coexiste en la roca reservoria con el petróleo. Puede presentarse en diversas formas, como gas disuelto en el petróleo o como una capa de gas yaciendo

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

sobre el petróleo. Usualmente es pobre en metano y rico en otros constituyentes parafínicos de mayor peso molecular. Generalmente, la corriente de gas (gas rico) tiene alta proporción de Condensados de Gas Natural (*NGLs: Natural Gas Liquids*), los cuales contienen  $C_{2+}$ , los productos  $C_{5+}$  son comúnmente referidos como gasolina natural o gas condensado.

- Gas no asociado: También llamado gas de pozo o gas seco, se extrae de formaciones geológicas que generalmente contienen poco o nada de petróleo crudo o hidrocarburos (condensados de gas) que tengan un punto de ebullición mayor que el metano. Este gas es frecuentemente rico en metano y con composición molecular notablemente ligera. También puede darse el caso de estar compuesto exclusivamente de gases no-hidrocarburos, tales como dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno. Nótese que, después del procesamiento de gas, el metano será producido en un estado puro sin importar si el estado del gas puro es asociado o no asociado.
- **Gas no convencional:** Existen varios tipos de gas no convencional, entre los que se encuentran [7]:
  - Gas de lutitas (*Shale gas*): Se encuentra en lutitas de baja permeabilidad, areniscas impermeables, limonitas, carbonatos arenosos, calizas, dolomitas y depósitos de tiza. El metano producido en dichos reservorios no está asociado al petróleo. Este gas puede ser originado por un proceso termogénico, biogénico y/o por una mezcla de ambos procesos.
  - Gas metano de carbón: También conocido como metano de mina de carbón, se encuentra en minas de carbón y se forma durante el proceso de carbonificación. Durante del proceso de formación termogénico en lechos de carbón se forma por la acción del incremento de presión y temperatura en la materia orgánica enterrada la cual es lentamente transformada en carbón. Los procesos bacterianos forman otro tipo de gas conocido como metano biogénico en lechos de carbón, en los carbones termalmente inmaduros. El principal constituyente del gas de lechos de carbón es metano, con cantidades menores de etano, dióxido de carbono, nitrógeno, sulfuro de hidrógeno y dióxido de azufre.
  - Gas de acuíferos profundos: Es encontrado durante la migración del gas a través de los acuíferos la roca reservoria; los acuíferos entonces son altamente saturados con metano. La solubilidad del

## 2.1. GENERALIDADES DEL GAS NATURAL

metano en el agua es pequeña, así el contenido de gas contenido en los acuíferos es grandemente influenciado por la presión, salinidad y temperatura.

A su vez, partiendo de la clasificación del gas de acuerdo a su composición química, se puede clasificar con base en su contenido de hidrocarburos y de azufre:

- **Contenido de hidrocarburos:** El gas natural puede ser clasificado de acuerdo a su contenido de hidrocarburos. El gas seco (o no asociado) consiste mayormente de metano con pequeñas o nulas cantidades de  $C_{2+}$ , mientras que el gas húmedo (o gas asociado) contiene constituyentes  $C_{2+}$  mayores al 10 % vol.
- **Contenido de azufre:** En esta clasificación el gas puede ser dulce o amargo. El gas dulce contiene una cantidad despreciable o incluso nula cantidad de azufre, mientras que el gas amargo contiene cantidades inaceptables de  $H_2S$  (más de  $5 \frac{mg}{Nm^3}$ ).

### 2.1.2. Constituyentes

Los constituyentes del gas natural varían de acuerdo al reservorio en el que este se encuentra. Los constituyentes pueden ser hidrocarburos y no-hidrocarburos; de esta forma, la composición del gas natural nunca es constante [9].

- **Constituyentes hidrocarburos:** El metano puede asociarse con hidrocarburos parafínicos como etano, propano, los butanos y una pequeña proporción de  $C_{5+}$  [8]. También puede contener aromáticos como el benceno, tolueno y xilenos.
- **Constituyentes no hidrocarburos:** Los constituyentes no-hidrocarburos del gas natural pueden ser clasificados como diluyentes, contaminantes y materia sólida. Los diluyentes son gases no combustibles (como  $CO_2$ ,  $N_2$ , He) que reducen el poder calorífico del gas. Pueden ser usados como complementos del gas cuando sea necesario reducir el poder calorífico del gas.
  - El dióxido de carbono puede llegar de varias maneras: Durante la sedimentación, por acción de degradación bacteriana anaeróbica de restos orgánicos en sedimentos recientes a través de un mecanismo bioquímico; por un mecanismo orgánico, involucrando la reacción

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

entre los residuos resultantes de la degradación del kerógeno (hidrocarburos y carboníferos) con agua a profundidades extremas, y/o durante la reducción de sulfatos por hidrocarburos a grandes profundidades; y por un mecanismo inorgánico, involucrando descomposición térmica de carbonatos a temperaturas por encima de los 200°C.

- El nitrógeno puede llegar al gas por varias vías: A través de la reducción bacteriana de nitratos disueltos en el agua (presentes en tierras y sedimentos); a través de la degradación térmica de materia orgánica; y desde aire atrapado, el cual es la principal fuente de nitrógeno en sedimentos recientes.
  - El helio tiene dos isotopos,  $^3\text{He}$  y  $^4\text{He}$ , los cuales tienen un origen inorgánico. A medida que aumenta la profundidad de la fuente de helio, también aumenta su proporción promedio en la tierra. El  $^3\text{He}$  llega a los reservorios por la degasificación del manto, la capa entre el núcleo y la corteza terrestre. En contraste, el  $^4\text{He}$  es formado por la desintegración radioactiva de materiales presentes en la corteza terrestre. Si el gas contiene un porcentaje mayor al 0.3% de helio, se define como gas rico en helio.
  - El agua llega frecuentemente desde reservorios de gas y de petróleo. Dependiendo de las condiciones termodinámicas en el reservorio y las especies químicas presentes; el gas puede presentarse disuelto en el agua o en el petróleo. La concentración de los gases en el agua comprende rangos que van desde trazas y hasta la saturación.
  - El hidrógeno se produce durante el craqueo térmico de los kerógenos e hidrocarburos a grandes profundidades debido a que la energía requerida es mayor que para la formación del metano. Los niveles de hidrógeno producidos no son suficientes para causar problemas.
  - Se considera que el oxígeno es el único componente que no es producido naturalmente. Las válvulas con fugas y las tuberías en los sistemas de recolección y distribución que operan a presión atmosférica son las fuentes principales de oxígeno.
  - Los gases inertes como argón, kriptón, neón y xenón, puede estar presente en el gas, donde su fuente puede ser aire atrapado. Estos gases pueden quedar después de que el oxígeno en el aire atrapado es consumido por bacterias dejando únicamente a los gases inertes.
- **Contaminantes:** Son gases que son perjudiciales para la producción y equipos de transporte, además de ser impurezas indeseables. Estos contaminantes pueden ser:

## 2.1. GENERALIDADES DEL GAS NATURAL

- **Compuestos azufrados:** El sulfuro de hidrógeno puede formarse durante la reducción de iones sulfato disueltos en agua por medio de acción bacteriana en sedimentos recientes por algún mecanismo bioquímico. También puede formarse por degradación térmica en kerógenos ricos en azufre a grandes profundidades. Diferentes especies azufradas pueden presentarse en el gas, como sulfuro de carbonilo (COS), bisulfuro de carbón (CS<sub>2</sub>), azufre elemental, y mercaptanos (RSH), donde R representa a un grupo alcano, por ejemplo, metil mercaptano (CH<sub>3</sub>SH), etil mercaptano (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>SH), etc., si la concentración de H<sub>2</sub>S es mayor al 2-3 %.
- **Mercurio:** Se forma por la reducción o degradación térmica del sulfuro de mercurio en contacto con hidrocarburos. Tiene una alta afinidad al carbón tanto como a los sulfuros. Puede presentarse en diversas formas, tales como elemental, compuestos organometálicos, tales como dimetilmercurio, metil-etilmercurio o mercurio inorgánico tal como HgCl o HgCl<sub>2</sub>.
- **Arsénico:** Puede encontrarse en operaciones tanto de gas como de petróleo, y se cree que se produce como resultado de la formación de gas geológico. No solo existe como arsano (H<sub>3</sub>As) sino también como trialquilarsinas, como trimetilarsina ((CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>As), dimetil-etilarsina ((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>)As), trietilarsina ((CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>As) y trifetilarsina (As(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)<sub>3</sub>). Los compuestos arseniosos también pueden encontrarse en sistemas de gas natural crudo.

### 2.1.3. Procesamiento

Se requieren diferentes procesos para la limpieza del gas natural crudo para alcanzar la especificación de las líneas de transporte y para propósitos ambientales una vez que se quema el gas [10]. El procesamiento del gas es aplicado al gas natural crudo con los siguientes objetivos:

- Purificación del gas natural de aquellos materiales que puedan inhibir su uso como combustible.
- Separación de componentes valiosos del gas que puedan ser usados como materia prima de procesos petroquímicos, combustibles (como el propano), o gases industriales (como el etanol o el helio).
- Licuefacción del gas natural para ser transportado o almacenado.

En las plantas de gas, las unidades de operación dependerán de la composición del gas, facilidad de tratamiento y la especificación del producto

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

requerido. Es por ello que existen varios tipos de operaciones unitarias en las plantas de gas natural. En algunos casos varios de las etapas mostradas en la Figura 2.2 pueden ser integradas en una unidad u operación llevada a cabo en un diferente orden o localización (en campo o planta), o puede incluso no ser requerida. Entre otras etapas de procesamiento de gas, los representados en la Figura 2.2 son:

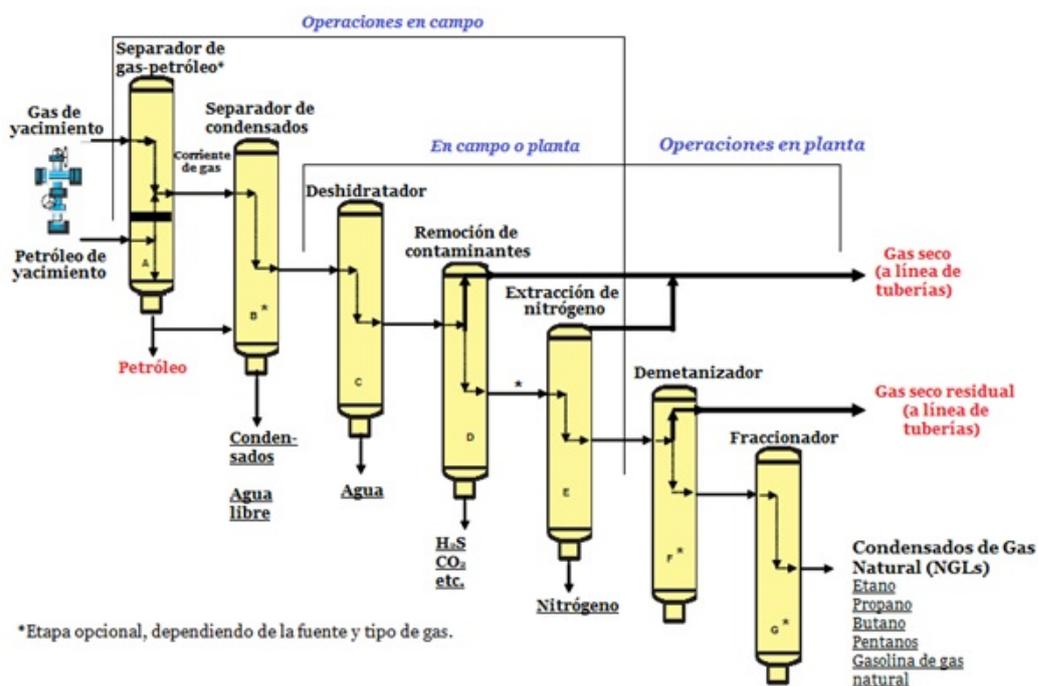


Figura 2.2: Esquema generalizado del procesamiento de gas natural [10]

- A) Separador de gas-petróleo: En muchos casos, el alivio de presión en la boca del pozo causará una separación natural de gas del petróleo (usando un tanque cerrado convencional, donde la gravedad separa los hidrocarburos de gas del petróleo más pesado). Sin embargo, en algunos casos, se necesita un proceso de separación de gas y petróleo de múltiples etapas para separar la corriente de gas del petróleo crudo. Estos separadores de gas y petróleo son recipientes cilíndricos normalmente cerrados, montados horizontalmente con entradas en un extremo, una salida en la parte superior para eliminar el gas y una salida en la parte inferior para eliminar el petróleo. La separación se logra calentando y enfriando alternativamente (por compresión) la corriente de flujo a través de múltiples pasos. Un poco de agua y condensado, si está presente, también se extraerá a medida que avance el proceso.

## 2.1. GENERALIDADES DEL GAS NATURAL

- B) Separador de condensados: Los condensados se eliminan con mayor frecuencia de la corriente de gas en la boca del pozo mediante el uso de separadores mecánicos. En la mayoría de los casos, el flujo de gas hacia el separador proviene directamente de la boca del pozo, ya que el proceso de separación de gas y petróleo no es necesario. La corriente de gas ingresa a la planta de procesamiento a alta presión (600 psig o más) a través de un colector de entrada de agua donde se elimina el agua libre del gas, luego de lo cual se dirige a un separador de condensados. El condensado extraído se dirige a los tanques de almacenamiento en el sitio.
- C) Deshidratador: Se necesita un proceso de deshidratación para eliminar el agua, que puede causar la formación de hidratos. Los hidratos se forman cuando un gas o líquido que contiene agua libre experimenta condiciones específicas de temperatura y/o presión. La deshidratación es la eliminación de esta agua del gas natural producido y se logra mediante varios métodos. Entre estos se encuentra el uso de sistemas de etilenglicol (inyección de glicol) como mecanismo de absorción para eliminar el agua y algunos sólidos de la corriente de gas. Alternativamente, se puede utilizar la deshidratación por adsorción, utilizando torres deshidratadoras de lecho seco, que contienen desecantes como gel de sílice y alúmina activada, para realizar la extracción.
- D) Remoción de contaminantes: La eliminación de contaminantes incluye la eliminación de sulfuro de hidrógeno (ácido sulfhídrico), dióxido de carbono, vapor de agua, helio y oxígeno. La técnica más utilizada es dirigir primero el flujo a través de una torre que contiene una solución de amina. Las aminas absorben compuestos de azufre del gas natural y pueden reutilizarse repetidamente. Después de la desulfuración, el flujo de gas se dirige a la siguiente sección, que contiene una serie de tubos-filtro. A medida que la velocidad de la corriente se reduce en la unidad, la separación primaria de los contaminantes restantes se produce debido a la gravedad. La separación de partículas más pequeñas ocurre a medida que el gas fluye a través de los tubos, donde se combinan en partículas más grandes que fluyen hacia la sección inferior de la unidad. Además, a medida que la corriente de gas continúa a través de la serie de tubos, se genera una fuerza centrífuga que elimina aún más el agua restante y las pequeñas partículas sólidas.
- E) Extracción de nitrógeno: Una vez que el sulfuro de hidrógeno y el dióxido de carbono se procesan a niveles aceptables, la corriente se dirige a una unidad de eliminación de nitrógeno (*Nitrogen Rejection*

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

*Unit: NRU*), donde se deshidrata aún más utilizando lechos de tamiz molecular. En la NRU, la corriente de gas es dirigida a través de una serie de pasos a través de una columna y un intercambiador de calor de aleta de placa de aluminio soldado. Mediante un proceso criogénico el nitrógeno se separa y se descarga a la atmosfera. Otro tipo de unidad NRU separa metano e hidrocarburos más pesados del nitrógeno usando un solvente absorbente. El metano absorbido y los hidrocarburos más pesados se eliminan rápidamente del disolvente al reducir la presión en la corriente de procesamiento en múltiples etapas de descompresión de gas. El líquido de la etapa de regeneración instantánea se devuelve a la parte superior del absorbedor de metano como disolvente pobre. El helio, si lo hay, se puede extraer de la corriente de gas a través de la difusión de membrana en una unidad de adsorción por cambio de presión (PSA).

- F) Demetanizador (separación de metano): El proceso de desmetanización de la corriente de gas puede ocurrir como una operación separada en la planta de gas o como parte de la operación de NRU. Los métodos de procesamiento y absorción criogénicos son algunas de las formas de separar el metano de los NGLs. El método criogénico es mejor en la extracción de líquidos más ligeros, como el etano, que el método de absorción alternativo. Esencialmente, el procesamiento criogénico consiste en reducir la temperatura de la corriente de gas a alrededor de  $-84.5^{\circ}\text{C}$  ( $-120^{\circ}\text{F}$ ). Si bien hay varias formas de realizar esta función, el proceso turboexpansor es más efectivo, utilizando refrigerantes externos para enfriar la corriente de gas. La rápida caída de temperatura que el expansor es capaz de producir condensa los hidrocarburos en la corriente de gas, pero mantiene el metano en su forma gaseosa. El método de absorción, por otro lado, utiliza un aceite absorbente “magro” para separar el metano de los NGLs. Mientras la corriente de gas pasa a través de una torre de absorción, el aceite de absorción absorbe una gran cantidad de NGLs. El aceite de absorción “enriquecido”, que ahora contiene NGLs, sale de la torre en la parte inferior. El aceite enriquecido se alimenta a destiladores donde la mezcla se calienta por encima del punto de ebullición de los NGLs, mientras que el aceite permanece líquido. El aceite se recicla mientras que los NGLs se enfrían y se dirigen a una torre fraccionadora. Otro método de absorción que se usa con frecuencia es el método de absorción refrigerada donde el aceite magro se enfría en lugar de calentarse, una característica que mejora un poco las tasas de recuperación.

## 2.1. GENERALIDADES DEL GAS NATURAL

- G) Fraccionador: Aquí se separan de los diversos NGLs presentes en la corriente de gas restante, utiliza los puntos de ebullición variables de los hidrocarburos individuales en la corriente, los cuales son prácticamente todos NGLs. El proceso ocurre en etapas a medida que la corriente de gas avanza a través de varias torres donde las unidades de calentamiento elevan la temperatura de la corriente, haciendo que los diversos líquidos se separen y salgan a tanques de almacenamiento específicos.

### 2.1.4. Quema y venteo

Cuando existe gas natural asociado al crudo, se presentan diversos retos relacionados a su explotación, procesamiento, almacenamiento, y transporte desde el punto de extracción hasta los centros de consumo. Las empresas en estas situaciones solo manejan dos alternativas: darle un uso al gas o simplemente quemarlo y/o ventearlo. A veces incluso, es frecuente que no se repare en ello, y se prefiera sincronizar la producción para tener una quema permanente y sostenida, minimizando la quema y/o venteo.

Algunos de los factores que se toman en cuenta para tomar una u otra decisión son [11]:

- **Volumen:** Una muy baja relación gas/petroleo, de modo que no se justifique económicamente enviarlo a tierra.
- **Calidad:** Aunque el principal componente de este gas sea metano, la presencia de contaminantes como azufre u otros implica inversiones adicionales para su remoción.
- **Localización:** Alcanzar la factibilidad económica puede ser aún mas difícil cuando los campos de producción son remotos y/o mar adentro, donde no existe una infraestructura apropiada ni para su transporte ni líneas de transmisión eléctrica para usarlo como fuente de generación eléctrica.
- **Transporte y distribución:** La existencia o no de líneas de distribución entre los puntos de extracción y los de consumo son muy importantes, ya que el desarrollo de esta infraestructura puede incrementar sustancialmente los costos. Incluso pueden existir otras limitaciones relacionadas como por ejemplo leyes locales que limiten nuevos proyectos en materia de infraestructura de transporte y distribución o restricciones para utilizar la infraestructura ya existente.

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

- **Comercialización, estructura y desarrollo de los mercados:** Existen escenarios en los cuales los precios del gas o de la electricidad generada ya se encuentran regulados de forma que afecten negativamente la viabilidad económica, incluso el mercado en este sentido puede ser muy pequeño o inexistente, de forma que no se justifique realizar proyectos de desarrollo de infraestructura eléctrica.

Estas características han históricamente generado la percepción hacia el gas asociado como un factor negativo de la producción de petróleo y, consecuentemente, la quema y venteo como prácticas habituales, provocando que esto sea la principal causa de los gases quemados y/o venteados a nivel mundial.

Para disminuir estas cantidades, a nivel mundial se han propuesto varias alternativas económicas para el uso de este gas, cuyas principales ideas han sido:

- Reinyectarlo en los yacimientos para utilizarlos en el futuro.
- Reinyectarlo en los yacimientos, para mejorar la recuperación de petróleo.
- Utilizarlo en el sitio para la generación de energía eléctrica.
- Transportarlo a algún lugar donde su uso sea mas eficiente, la forma de ser transportado dependerá del volumen transportado y la distancia a recorrer (Figura 2.3).

Independientemente de la causa, la quema y/o venteo constituyen un desaprovechamiento del recurso gaseoso, debido a que, entre otros, sus usos pueden ser:

- Generación de calor en uso doméstico.
- Combustible para generadores eléctricos
- Insumo para industrias.
- Reinyección con fines de recuperación secundaria.

Respecto a sus consecuencias ambientales, la quema y/o venteo liberan una serie de sustancias que son responsables muy fuertemente del cambio climático. El cual depende de la composición del gas, la disposición del gas (si se está venteando o quemando), y eficiencia del quemador en el caso de la quema.

## 2.2. COMBUSTIBLES LÍQUIDOS: PROCESO *GAS-TO-LIQUIDS*

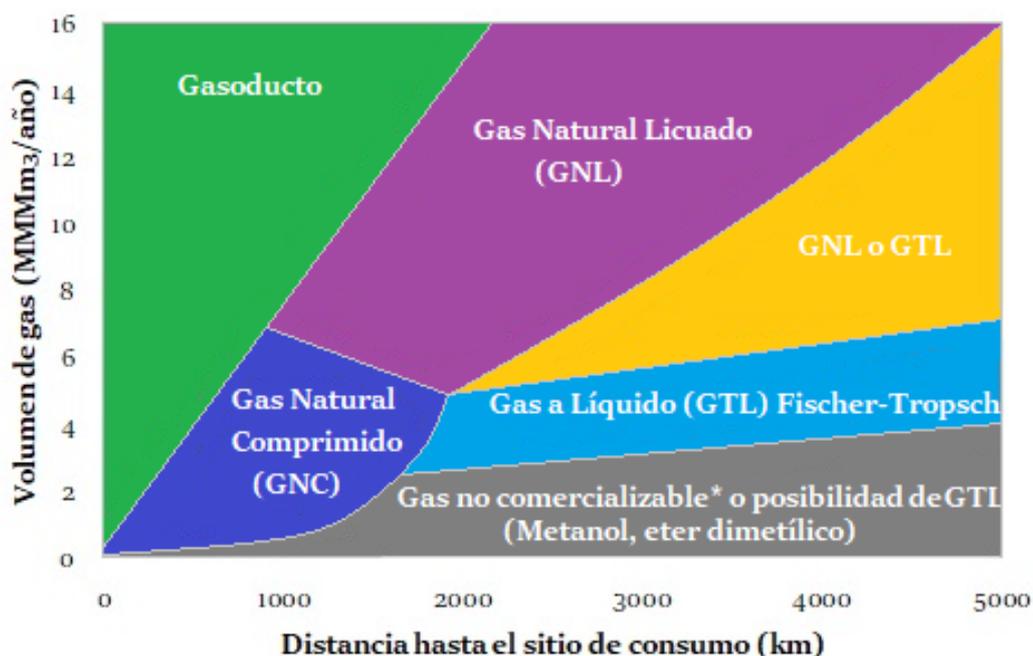


Figura 2.3: Alternativas para el transporte de gas natural en función del volumen (miles de millones de metros cúbicos anuales) y la distancia del sitio de extracción al de consumo (km) [11].

\*El gas no comercializable se refiere al gas que se considera inutilizable debido a diversas razones, tales como: volúmenes bajos o en sitios de extracción muy lejanos que dificulten su comercialización.

La disposición del gas genera impactos ambientales muy diferenciados: La quema del gas generalmente ocurre en instalaciones especiales para su combustión, donde el principal producto es  $\text{CO}_2$ ; mientras que en el venteo, la emisión del gas es directa, emitiéndose principalmente metano. El efecto sobre el ambiente es mucho mayor en el venteo, la diferencia la constituye el Potencial de Calentamiento Global, el cual es entre 28 a 36 veces mayor en el metano que en el  $\text{CO}_2$  [11].

## 2.2. Combustibles Líquidos: Proceso *Gas-To-Liquids*

Una solución para evitar la quema y/o venteo de gas natural, cuando este se encuentra a largas distancias del punto de consumo y a bajos, moderados y altos volúmenes es la transformación del mismo en combustibles líquidos o

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

bien conocidos como *Gas-To-Liquids (GTL)* (Figura 2.3).

Estos combustibles poseen ventajas inherentes en términos de ser más fácilmente almacenados, transportados y medidos que el gas natural. También son más fáciles de procesar y limpiar por medios químicos y catalíticos, con la ventaja adicional de estar mejor adaptados a las infraestructuras modernas, ya que los medios de transporte más poderosos y eficientes generalmente se diseñan para funcionar solamente con combustible muy limpio y de baja viscosidad.

La transformación del gas natural en combustibles líquidos puede hacerse vía directa y vía indirecta [8].

La conversión directa del gas natural implica el acoplamiento oxidativo del gas para producir hidrocarburos superiores como el etileno. Estos productos olefínicos (es decir, hidrocarburos que contienen la función  $-C = C$ ) pueden convertirse en combustibles líquidos mediante procesos de oligomerización catalítica, como se practica actualmente en las industrias petrolera y petroquímica.

La conversión indirecta implica la transformación previa del gas natural en una mezcla de  $CO$  y  $H_2$  denominada *Gas de síntesis* (el cual se discutirá más adelante), en esta línea se han desarrollado 2 líneas principales: el proceso Fischer-Tropsch y síntesis de metanol, aunque ambas son generalmente referidas como *Síntesis Fischer-Tropsch* (Figura 2.4).

### 2.2.1. Proceso Fischer-Tropsch

El proceso Fischer-Tropsch es un proceso para la conversión del gas de síntesis en combustibles líquidos y materias primas para la industria química [8]. Es muy versátil en lo que respecta a su materia prima, ya que el gas de síntesis puede obtenerse desde carbón, gas natural o materiales similares con contenido de carbono.

En la década de 1920, este proceso permitió a Alemania producir combustibles líquidos de forma doméstica a partir de sus abundantes reservas de carbón y compensar su falta de recursos petroleros. De forma que, mientras los Aliados controlaban los mayores suministros petroleros en todo el mundo, Alemania y Japón utilizaron ampliamente esta tecnología para producir combustibles *ersatz* (sustitutos) durante la Segunda Guerra Mundial. Después de la Segunda Guerra Mundial, las compañías estadounidenses y británicas comenzaron a utilizar el proceso Fischer-Tropsch para producir combustibles sintéticos. Sin embargo, los altos costos de capital y operación a comparación del petróleo barato y ampliamente disponible en la época incitó a tomarle menos importancia al proceso [12].

## 2.2. COMBUSTIBLES LÍQUIDOS: PROCESO *GAS-TO-LIQUIDS*

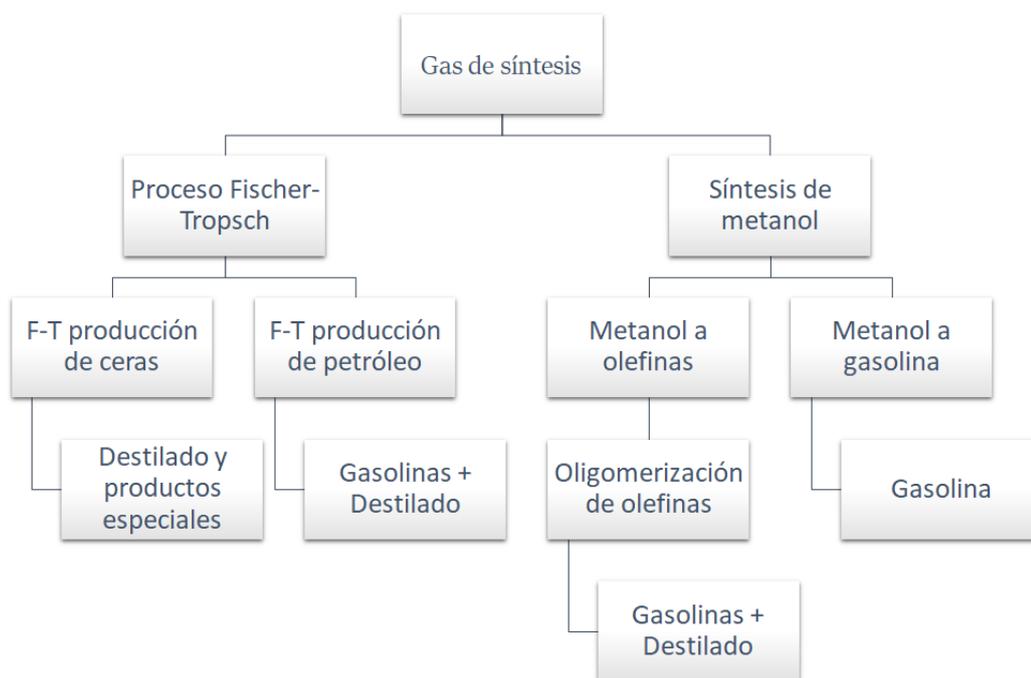


Figura 2.4: Diagrama de los procesos Gas-To-Liquids [8].

El interés en el proceso Fischer-Tropsch se reavivó durante la crisis energética de la década de 1970, pero especialmente en Sudáfrica durante su aislamiento bajo el régimen del Apartheid. Años de desarrollo han resultado en mejores catalizadores y una mejor ingeniería. Entre algunos ejemplos de esto se puede citar a la empresa Sasol en Sudáfrica, que utiliza gas de síntesis del carbón y gas natural para producir una variedad de productos de petróleo sintético, incluyendo la mayor parte del diésel que se consume en Sudáfrica.

Los combustibles sintéticos producidos por los procesos Fischer-Tropsch actualmente son más caros que los producidos a partir del petróleo, sin embargo bajo ciertas condiciones en el futuro el proceso puede ser redituable. Este proceso merece especial atención cuando las reservas de carbón sean significativamente disponibles y baratas; y cuando el gas natural es abundante. A largo plazo, la producción de hidrocarburos basados en carbón será mayor que la basada en petróleo.

### Química del proceso

El proceso de síntesis de hidrocarburos por el proceso Fischer-Tropsch puede compararse a un proceso de polimerización, resultando en una distribución de longitudes de cadena en los productos.

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

En general, esta distribución incluye desde hidrocarburos ligeros como metano ( $\text{CH}_4$ ), etano ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ), propano ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ) y butano ( $\text{C}_4\text{H}_{10}$ ); nafta ( $\text{C}_5\text{H}_{12}$  a  $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ ); keroseno y diesel ( $\text{C}_{13}\text{H}_{28}$  a  $\text{C}_{22}\text{H}_{46}$ ); ceras de bajo peso molecular ( $\text{C}_{23}\text{H}_{48}$  a  $\text{C}_{32}\text{H}_{66}$ ) y ceras de alto peso molecular ( $> \text{C}_{33}\text{H}_{68}$ ).

Como puede inferirse, la síntesis implica una gran cantidad de reacciones que pueden resumirse en forma general en la Tabla 2.1.

De las reacciones mostradas, la formación de oxigenados es muy pequeña, tanto que puede considerarse despreciable. Sin embargo, es de interés histórico que la reacción de Fischer-Tropsch originalmente se concentraba en los oxigenados [13].

Si los productos de la reacción general de Fischer-Tropsch contienen alcanos o alquenos (con cualquier número de átomos de carbono, desde 1 hasta  $40^+$ ) y  $\text{H}_2\text{O}$  o  $\text{CO}_2$ , depende principalmente de:

Tabla 2.1: Reacciones comunes en un proceso Fischer-Tropsch [13].

| Reacción general      | $n\text{CO} + m\text{H}_2 \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} n\text{C}_1 - \text{C}_{40+} \text{alcanos} \\ \text{C}_1 - \text{C}_{40+} \text{alquenos} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{H}_2\text{O} \\ \text{CO}_2 \end{array} \right\}$ |
|-----------------------|---|
| Formación de          | Reacción  |
| Parafinas             | $n\text{CO} + (2n + 1)\text{H}_2 \longrightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+2} + n\text{H}_2\text{O}$   |
| Olefinas              | $n\text{CO} + 2n\text{H}_2 \longrightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n} + n\text{H}_2\text{O}$   |
| Aromáticos            | $(6 + n)\text{CO} + (2n + 9)\text{H}_2 \longrightarrow \text{C}_{6+n}\text{H}_{6+2n} + (6 + n)\text{H}_2\text{O}$   |
| Alcoholes             | $n\text{CO} + 2n\text{H}_2 \longrightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+2}\text{O} + (n - 1)\text{H}_2\text{O}$   |
| Compuestos oxigenados | $n\text{CO} + 2n\text{H}_2 \longrightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+2}\text{O} + (n - 1)\text{H}_2\text{O}$   |

- La proporción  $\frac{\text{H}_2}{\text{CO}_2}$  en el gas de síntesis.
- Catalizador.
- Tipo de reactor.
- Condiciones del proceso.

### 2.3. Gas de síntesis

El gas de síntesis es una mezcla de hidrógeno, monóxido de carbono y dióxido de carbono. También puede contener nitrógeno si se utilizará en la síntesis de amoníaco. Es un intermediario en la industria química y es usado en la síntesis de un amplio rango de químicos y combustibles, como fuente de hidrógeno puro y monóxido de carbono.

## 2.3. GAS DE SÍNTESIS

Puede producirse generarse a partir de casi cualquier fuente de carbono, pasando desde gas natural y derivados del petróleo hasta carbón y biomasa por oxidación con vapor y oxígeno. Así, representa una materia importante para dar mas flexibilidad a la industria química y a la manufactura de combustibles sintéticos.

La transformación en gas de síntesis produce además calor. En la mayoría de las plantas, el calor es utilizado en operación de la planta misma. Como alternativa, el calor puede ser exportado, aunque no es siempre necesario.

Existen varias tecnologías para la generación de gas de síntesis, las más significativas se describirán a continuación.

### 2.3.1. Reformado con vapor: *SMR*

El reformado con vapor *Steam Metane Reforming (SMR)*, es la reacción entre vapor de agua e hidrocarburos para crear una mezcla de  $H_2$ ,  $CO_2$  y  $CO$  [14]. El vapor puede ser sustituido con  $CO_2$  como reactante. Las reacciones de reformado son acompañadas por una reacción de conversión a agua (*Water-Gas-Shift Reaction WGSR o WGS*).

El término no debe ser confundido con el reformado catalítico usado para la conversión de hidrocarburos parafínicos a hidrocarburos de alto octanaje como isoalcanos y aromáticos. Así, un mejor término podría ser “oxigenólisis” debido a que la reacción involucra la ruptura de enlaces  $C - H$  y  $C - C$  por medio de especies oxigenadas. Las reacciones más comunes se muestran en la Tabla 2.2.

Tabla 2.2: Reacciones de reformado con vapor [14].

|      | Reacción   | $-\Delta H_{298}^0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ |
|------|--|--|
| (R1) | $CO + H_2O \longleftrightarrow CO_2 + H_2$               | 41   |
| (R2) | $CH_4 + H_2O \longleftrightarrow CO + 3H_2$              | -206   |
| (R3) | $C_nH_m + nH_2O \longleftrightarrow nCO + (n + 0.5m)H_2$ | < 0  |
|      | $CH_4 + CO_2 \longleftrightarrow 2CO + 2H_2$             | -247   |
|      | $CH_4 + 2H_2O \longleftrightarrow CO_2 + 4H_2$           | -165   |

Los estudios catalíticos muestran que de las 5 reacciones mostradas solo las 3 primeras reacciones son termodinámicamente independientes (indicadas como R1, R2 y R3) y las otras 2 pueden ser establecidas por combinación lineal de las reacciones R1 y R2, siendo R1 la reacción WGS y R2 el reformado por vapor del metano.

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

El término reformado con vapor también se usa para la reacción entre el vapor y alcoholes (metanol y etanol) así como las reacciones en fase líquida con carbohidratos o biomasa. La reacción R3 en la Tabla 2.2 es la reacción inversa de la síntesis Fischer-Tropsch, pero la conversión de los hidrocarburos de mayor peso molecular pueden considerarse como irreversibles a las temperaturas normales del reformado.

Los hidrocarburos de mayor peso molecular reaccionan en la superficie metálica a componentes C1 o forman depósitos carbonosos, a temperaturas superiores a los 600-650 °C, las reacciones catalíticas pueden ser acompañadas de craqueo catalítico. Como se observa las reacciones son reversibles y no tendrán conversión completa. Generalmente solo la última reacción se considera irreversible, así, a la salida, habrá metano y vapor sin convertir.

Adicionalmente, a las reacciones de reformado también se puede formar carbón, las reacciones se muestran en la Tabla 2.3.

Tabla 2.3: Reacciones de formación de carbón [14].

| Reacción   | $-\Delta H_{298}^0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ |
|--|--|
| $\text{CH}_4 \longleftrightarrow \text{C} + 2\text{H}_2$                   | -75  |
| $2\text{CO} \longleftrightarrow \text{C} + \text{CO}_2$                    | 172  |
| $\text{CO} + \text{H}_2 \longleftrightarrow \text{C} + \text{H}_2\text{O}$ | 131  |
| $\text{C}_n\text{H}_m \longrightarrow n\text{C} + 0.5m\text{H}_2$          | $< 0$  |

### 2.3.2. Oxidación parcial

Una alternativa para el reformado es agregar oxígeno a la alimentación y así obtener el calor necesario por reacción de combustión. De esta forma se obtiene calor por la reacción propia en vez de aportarla totalmente por un medio externo.

La oxidación parcial puede ser llevada a cabo de tres formas [14]:

- Oxidación parcial no catalítica (*Non-catalytic partial oxidation: POX*)
- Reformado autotérmico (*Autothermal Reforming: ATR*)
- Oxidación parcial catalítica (*Catalytic partial oxidation: CPO*)

La oxidación parcial no catalítica (POX) necesita de una alta temperatura para asegurar una conversión completa del metano y para reducir la formación de coque. Es normal la formación de un poco de coque y se remueve en un

### 2.3. GAS DE SÍNTESIS

sistema de depuración después del reactor de oxidación parcial. De este proceso se obtiene un gas con una relación típica  $H_2/CO = 1.7 - 1.8$ . La gasificación de fracciones pesadas de petróleo, carbón y biomasa pueden y han incrementado su rol de importancia y disponibilidad, mientras que el gas natural, a futuro, se volverá menos disponible.

El proceso de reformado autotérmico (ATR) es un híbrido de la oxidación parcial y reformado con vapor, utilizando un quemador y una cama catalítica para llevar el gas al equilibrio. Esto permite disminuir la temperatura máxima y así disminuir también el consumo de oxígeno. Sin embargo, la alta temperatura de las unidades POX pueden resultar en menores contenidos de metano y dióxido de carbono en el gas producido que en el ATR.

La disminución de coque en el ATR puede ser eliminada por adición de una cantidad de vapor de agua a la alimentación y con un diseño especial del quemador. El vapor no puede ser añadido en los procesos no catalíticos debido al riesgo de incrementar la formación de coque debido a la disminución de temperatura resultante. Esto significa menos flexibilidad en la composición de los gases formados por las unidades POX.

En la oxidación parcial catalítica (CPO) las conversiones químicas se llevan a cabo en un reactor catalítico sin un quemador. En todos los casos de oxidación parcial, se presentan algunas de las reacciones mostradas en la Tabla 2.4. Las reacciones de oxidación son irreversibles bajo todas las condiciones de interés práctico.

Tabla 2.4: Reacciones de la oxidación parcial del metano [14].

| Reacción   | $-\Delta H_{298}^0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ |
|--|--|
| $CH_4 + 0.5O_2 \longleftrightarrow CO + 2H_2$    | -36  |
| $CH_4 + O_2 \longleftrightarrow CO + H_2O + H_2$ | 278  |
| $CH_4 + 1.5O_2 \longleftrightarrow CO + 2H_2O$   | 519  |
| $CH_4 + 2O_2 \longleftrightarrow CO_2 + 2H_2O$   | 802  |

La reacción global en un reactor de oxidación parcial es altamente exotérmica y no es necesario que se supla calor al reactor. Las reacciones de oxidación parcial pueden ser acompañadas por craqueo de hidrocarburos o deshidrogenación oxidativa hacia compuestos no saturados, incluyendo olefinas, poliaromáticos y coque. El control del balance de calor y la formación de coproductos son las consideraciones principales en el diseño de los reactores de oxidación parcial.

### 2.3.3. Reformado Autotérmico: *ATR*

El reactor ATR (*Autothermal Reforming*) consiste en un quemador, una cámara de combustión, y una cama catalítica de lecho fijo en un recipiente compacto con revestimiento refractario (Figura 2.5).

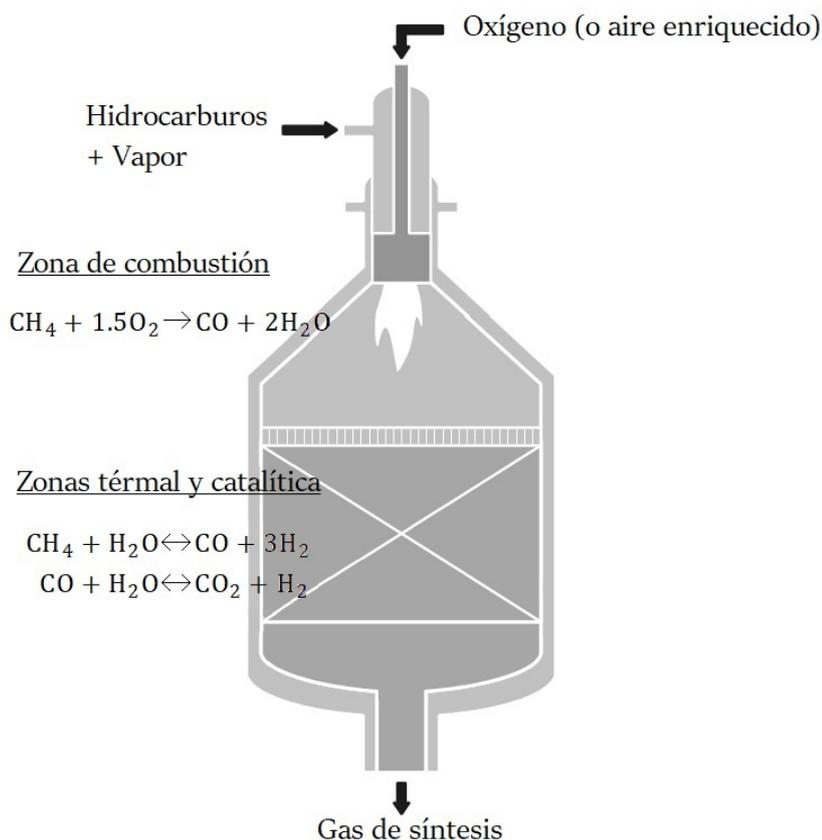


Figura 2.5: Esquema de un reactor ATR [14].

Independientemente de si el quemador es térmico o catalítico, o si se utiliza un lecho de catalizador fijo o fluidizado, la composición del gas de salida estará determinado por el equilibrio termodinámico a la temperatura de salida, que a su vez estará determinado por el balance de calor adiabático.

La alimentación consiste de hidrocarburos, vapor de agua, y oxígeno o aire. De manera opcional puede adicionarse dióxido de carbono a la corriente de hidrocarburos. La mezcla de hidrocarburos y vapor es precalentada y mezclada con oxígeno en el quemador. Puede ser ventajoso agregar un prerreformador para eliminar el crackeo térmico de hidrocarburos mas pesados en el precalentador.

### 2.3. GAS DE SÍNTESIS

Una flama en estado turbulento que asegure un mezclado intensivo es esencial para prevenir la formación de coque. El quemador también debe diseñarse para prevenir temperaturas excesivas en el metal y asegurar un mayor tiempo de vida del mismo.

Generalmente, la proporción  $O_2$  a carbón en la corriente de hidrocarburos es de 0.5 – 0.6 con oxígeno como oxidante y la temperatura del centro de la flama debe ser superior a 2000 °C. De esta forma el diseño de la cámara de combustión debe hacerse de forma que minimice la transferencia de calor desde la flama hacia el quemador.

Las reacciones de combustión térmica son muy rápidas. La subestoequiometría de la combustión del metano es un proceso complejo con muchas reacciones con radicales. El patrón de reacción depende del tiempo de residencia y de la distribución de temperatura. Así, es importante acoplar los modelos cinéticos con simulaciones de la dinámica de fluidos en el reactor vía post-procesamiento o directamente acomplándose en cálculos más avanzados.

La subestoequiometría de la reacción señala el riesgo de formación de coque como resultado de las reacciones de pirolisis con acetileno e hidrocarburos policíclicos aromáticos como sus precursores. La formación de coque comenzará por debajo de una cierta relación de vapor de agua/carbón dependiendo de la presión y otros parámetros de operación. Sin embargo, los datos en la Tabla 2.5 muestran los resultados de una prueba piloto sin coque (100 Nm<sup>3</sup>NG/h).

Tabla 2.5: Composición del gas de salida de un reactor piloto ATR a bajo  $H_2O/C$ .  $H_2O/C = 0.21$ ,  $O_2/C = 0.59$ ,  $P = 24.5\text{bar}$ ,  $T_{\text{sal}} = 1057\text{ °C}$  [8].

| Compuesto        | % Volumen |
|------------------|-----------|
| H <sub>2</sub>   | 56.8      |
| N <sub>2</sub>   | 0.2       |
| CO               | 29.0      |
| CO <sub>2</sub>  | 2.9       |
| CH <sub>4</sub>  | 1.0       |
| H <sub>2</sub> O | 10.1      |

La reacción de reformado del metano y la WGS también ocurren térmicamente en la zona de combustión, pero para la reacción del reformado esta sucede muy lejos del equilibrio, mientras que la WGS se mantiene cerca del equilibrio.

Los precursores de coque y el metano residual se convierten por reformado y por reacciones WGS en la cama catalítica. Estas reacciones se encuentran en equilibrio en el gas que sale de la cama catalítica y en el reactor ATR. El tamaño del catalizador y su forma se optimiza de tal manera que cuente

con suficiente actividad y baja caída de presión para lograr el diseño de un reactor compacto. El catalizador también debe ser capaz de alcanzar altas temperaturas sin degradarse o debilitarse, y tampoco debe emitir componentes volátiles a las condiciones en que se halle expuesto. Se ha probado que los catalizadores con níquel o magnesio-alúmina cumplen a cabalidad los requerimientos.

### 2.3.4. Oxidación parcial catalítica: *CPO*

En un reactor CPO (*Catalytic partial oxidation*) los reactantes son premezclados y las reacciones ocurren en el reactor de oxidación catalítica sin un quemador, a diferencia del ATR (Figura 2.6).

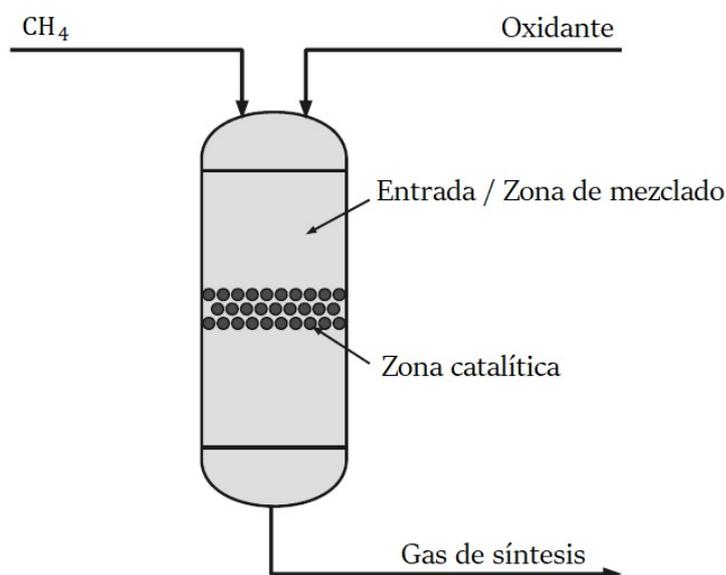


Figura 2.6: Diagrama de clasificación del gas natural [14].

Cuando se opera a 20 bar y relación  $O_2/NG = 0.56$ , es posible alcanzar conversiones estables cercanas al equilibrio termodinámico. Las mediciones de las conversiones en los reactores CPO reportadas en la literatura raramente muestran las conversiones respecto a las del equilibrio termodinámico, estas generalmente se reportan como selectividades al hidrógeno y al monóxido de carbono, aunque el gas producido en la mayoría de las situaciones se encuentra cercano al equilibrio para las reacciones de reformado y de WGS. Por lo tanto, los datos de selectividad deberían ser complementados con un enfoque al equilibrio termodinámico, ya que las selectividades reportadas pueden ser engañosas.

### 2.3. GAS DE SÍNTESIS

Si la reacción se realiza por el método CPO, se requiere la misma temperatura de salida en el reactor CPO que en un ATR para alcanzar los mismos rendimientos para flujos dados de gas de alimentación. Como el CPO requiere de una temperatura de precalentamiento mas baja (aproximadamente 250 °C) que el ATR (aproximadamente 650 °C), significa que el método CPO inherentemente tiene un mayor consumo de oxígeno por tonelada de producto que el ATR. Así, el método CPO es menos factible para la operación a gran escala. Sin embargo, un reactor CPO es atractivo para unidades pequeñas y descentralizadas.

#### 2.3.5. Elección de la tecnología

La elección de la tecnología es dictada por la necesidad de una alta conversión, los requerimientos en la composición del gas de síntesis y por la escala de operación.

Para la síntesis de metanol, el reformador tubular sería el más barato a bajas capacidades mientras que se vería favorecido el ATR para altas capacidades 2.7. Esto es debido a que la economía de escala es diferente para el reformador tubular y la planta de oxígeno requerida 2.8. Para un rango de capacidad intermedia, la solución óptima sería una combinación de un reformador tubular y un reformador secundario con oxígeno.

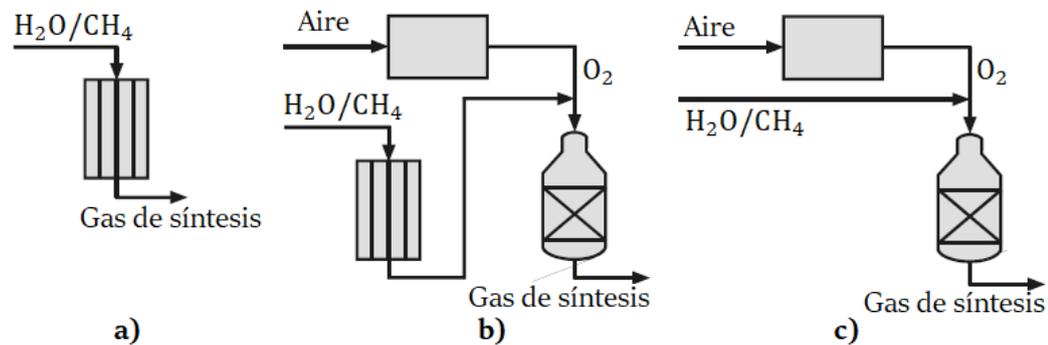


Figura 2.7: Diversas configuraciones para la producción de gas de síntesis: a) Reformador tubular, b) Combinación de reformador tubular y reformador secundario con oxígeno, c) Reactor ATR [14].

Si la capacidad necesaria es muy alta, los reactores ATR y POX son las elecciones adecuadas. El reactor ATR tiene un menor consumo de oxígeno que el POX. El reactor POX tiene un contenido ligeramente más bajo de metano y de  $CO_2$  en el gas producido. CPO tiene un mayor consumo de oxígeno que el ATR y puede ser difícil hacer una escalación del premezclado

de los reactantes.

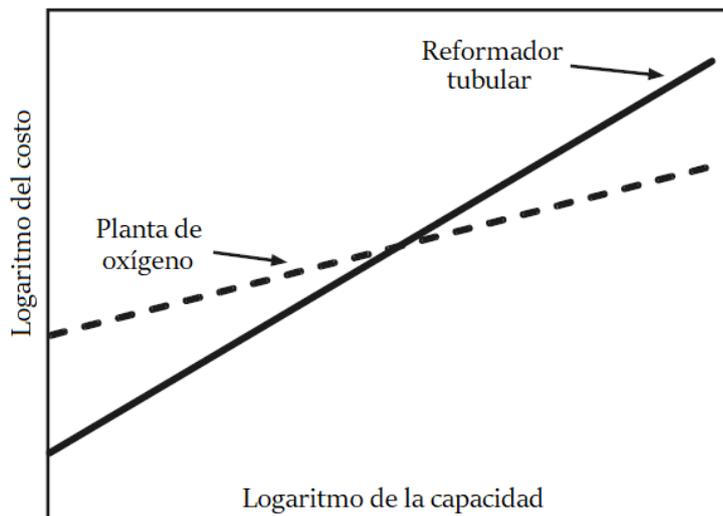


Figura 2.8: Economía de escala en la producción de gas de síntesis [14].

La reacción de reformado (Reacción R2 en la Tabla 2.2) resultan en un producto con una proporción de  $H_2O/CO$  cercano a 3. El vapor puede ser reemplazado por  $CO_2$  resultando en una proporción  $H_2/CO$  cercana a 1. La adición de oxígeno en ATR y POX da una proporción  $H_2/CO$  más baja.

La proporción  $H_2/CO$  puede ser variada en un amplio rango, como se muestra en la Figura 2.9, ya que las reacciones de reformado están acopladas a la reacción WGS. En la producción de hidrógeno, el proceso de reformado es seguido por WGS en presencia de catalizadores de hierro y/o cobre a bajas temperaturas (210-330 °C) para asegurar la conversión completa del monóxido de carbono. La conversión del metano está restringida por la termodinámica de las reacciones de reformado.

Las reacciones endotérmicas de reformado de vapor (o  $CO_2$ ) deben de llevarse a cabo a altas temperaturas y bajas presiones para alcanzar una conversión máxima.

Por ejemplo, las plantas de hidrógeno modernas normalmente se diseñan para bajas proporciones de vapor/carbono, aunque proporciones mas altas (de 4 a 5 moléculas de  $H_2O$  por átomo de carbono) resultan en una mayor conversión de los hidrocarburos. Sin embargo, una baja relación de vapor a carbono (típicamente de 2.5 o menor) reduce el flujo másico a través de la planta, la producción de vapor y los equipos necesarios para ello. La menor inversión es así obtenida para plantas diseñadas para bajas proporciones vapor/carbono.

### 2.3. GAS DE SÍNTESIS

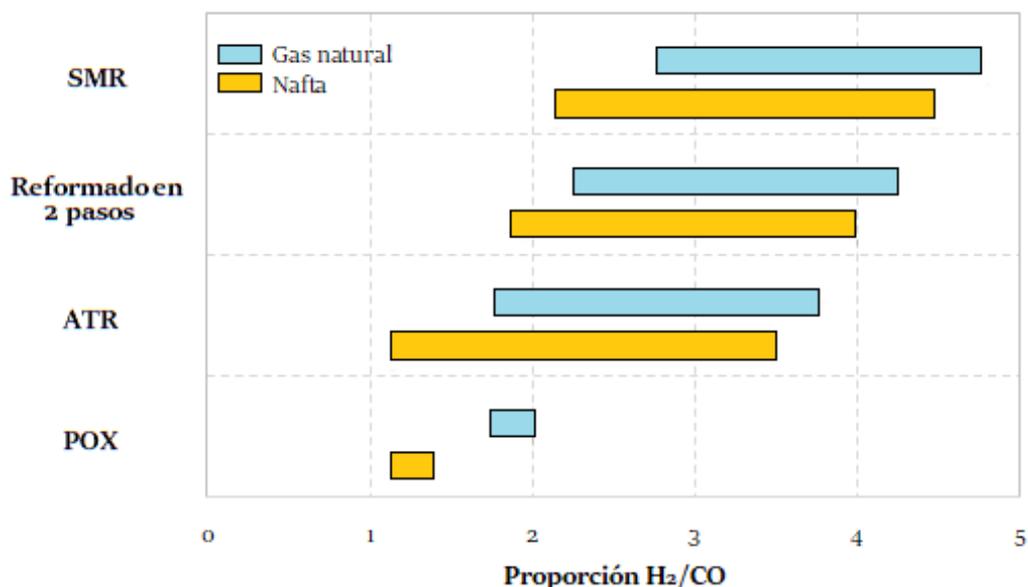


Figura 2.9: Proporciones H<sub>2</sub>/CO para diversos procesos de producción de gas de síntesis. SMR= Steam Methane Reforming (Reformado con vapor), ATR= Autothermal Reforming (Reformado Autotérmico), POX= Partial Oxidation (Oxidación Parcial) [14].

En principio, una baja relación vapor/carbono incrementa la cantidad de metano sin convertir del reformado, pero esto puede ser compensado incrementando la temperatura de salida del reformador, generalmente a 920 °C. En las plantas de síntesis, el metano sin convertir fluye con el gas de síntesis. El metano sin convertir implica unidades de producción mas grandes y resulta en restricciones en las proporciones de reciclo debido a la acumulación de gas metano inerte en el gas de síntesis, el cual reduce las presiones parciales de los componentes del gas de síntesis.

El reformado estequiométrico de acuerdo a las ecuaciones de la Tabla 2.2 en las proporciones de H<sub>2</sub>O/CH<sub>4</sub> o CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> cercanas a 1 son muy raramente alcanzables, debido a que podría resultar en una conversión incompleta a las presiones que son económicas para las plantas industriales de síntesis (20-50 bar). Esto también se cumple para mezclas CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O. Otras restricciones están relacionadas al riesgo de formación de coque cuando hay poco oxidante presente.

Los requerimientos de la composición del gas de síntesis varían con con la síntesis en cuestión, como se muestra en la Tabla 2.6.

Tabla 2.6: Composición de gas de síntesis para diferentes procesos [8].

| Proceso                             | Composición estequiométrica                               | Correactantes |
|-------------------------------------|---|---------------|
| Amoniaco                            | $M = \frac{H_2}{N_2} = 3$                                 |               |
| Metanol                             | $M = \frac{H_2 - CO_2}{CO + CO_2} = 2$                    |               |
| DME de hidrocarburos                | $M = \frac{H_2 - CO_2}{CO + CO_2} = 2$                    |               |
| DME de gas de carbón                | $M = \frac{H_2}{CO} = 1$                                  |               |
| Fischer-Tropsch de alta temperatura | $M = \frac{H_2 - CO_2}{CO + CO_2} = 2$                    |               |
| Fischer-Tropsch de baja temperatura | $M = \frac{H_2}{CO} \cong 2$                              |               |
| SNG                                 | $M = \frac{H_2 - CO_2}{CO + CO_2} = 3$                    |               |
| Ácido acético                       | CO  | Metanol       |
| Alcoholes superiores                | $M = \frac{H_2}{CO} = 1$                                  | Olefinas      |
| Hidrógeno industrial                | 99.99H <sub>2</sub>                                       |               |
| Hidrogeno de PEMFC                  | < 50 ppm CO   |               |
| Gas reducido (mineral de hierro)    | $M = \frac{CO_2 + H_2O}{H_2 + CO + CO_2 + H_2} \leq 0.05$ |               |

## 2.4. Simulación de procesos

La simulación de procesos es una actividad fundamental en la ingeniería de procesos. Es diseñar un modelo operacional de un sistema que nos permita producir experimentos con este modelo, con el propósito de entender el comportamiento del sistema o de evaluar estrategias alternativas para el desarrollo u operación de este y debe ser capaz de reproducir aspectos seleccionados del comportamiento del sistema modelado con un grado aceptado de precisión.

Simular implica modelar así como ajustar modelos sobre datos experimentales. Un modelo de simulación sirve para realizar “experimentos virtuales”. El modelado es la característica clave en cada simulación, aunque esta no sea tan visible en la amplia mayoría de los casos, al estar incorporada en la tecnología del software.

A pesar de sus ventajas, es importante recordar que es solamente una representación aproximada de la realidad, con cierto nivel de precisión, y no la realidad en si misma. Este es el motivo por el que el usuario debe ser siempre capaz de evaluar la confiabilidad de los datos entregados por el software de simulación usado.

Cuando se enfoca a la ingeniería de procesos, los principales productos a obtener son los diagramas de flujo de procesos, los cuales son descripciones sistemáticas de los flujos de materia y energía de una planta de procesos, con

## 2.4. SIMULACIÓN DE PROCESOS

el objetivo de diseñar una nueva planta o la mejorar el rendimiento de alguna ya existente.

Debido a sus alcances, el comportamiento del sistema simulado tiene la más alta prioridad. El modelado de las unidades individuales debe estar subordinada a los objetivos del sistema. La simulación tiene diferentes objetivos en diseño y operación, pero estos objetivos coinciden cuando el conocimiento adquirido en la operación de una planta ya existente sirve para mejorar su diseño o para desarrollar un nuevo proceso.

En lo que respecta al diseño el primer objetivo es una investigación sistemática de diferentes alternativas que pueden ser desarrolladas para un problema de diseño dado.

El diseño implica métodos sistemáticos cuyo principal mérito es permitir objetivos óptimos cuando ya se ha llegado al diseño detallado de las unidades. Dentro de muchas soluciones se selecciona un caso base y se somete a integración, dimensionamiento y optimización. Adicionalmente, la simulación de casos en estado estacionario y en estado dinámico puede ayudar a entender la dinámica del proceso, y sobre esta base ayudar en la implementación de una estrategia del control de la planta.

La creación de diagramas de flujo de procesos tiene mayor demanda en operación, debido a que tiene que reflejar el comportamiento de una planta ya existente sometida a varias perturbaciones. Los datos de la planta deben reconciliarse contra los modelos matemáticos del software de simulación. Una vez más, el modelado y precisión debe estar subordinado a los objetivos, así como el monitoreo del desempeño de la planta, mantenimiento, etc.

### 2.4.1. Pasos para realizar una simulación de procesos

Los pasos a seguir en una simulación de procesos dependen del problema específico, la habilidad del usuario y de los datos disponibles, sin embargo hay algunas características comunes que pueden aplicarse en buena parte de los problemas de esta índole.

1. **Definición:** Realizar un análisis preliminar del problema (ver Figura 2.10):
  - Esquematizar un diagrama de flujo de procesos (*Process Flow Diagram PFD*) de forma que sea compatible con las capacidades del software escogido y acorde a los objetivos seleccionados.
  - Dividir el diagrama de flujo en varios sub-diagramas, si es necesario.
  - Analizar el modelo de simulación para cada unidad del diagrama.

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

- Determinar la secuencia en la que se realizará la simulación.
  - Determinar los componentes químicos que se utilizarán, identificando aquellos que serán definidos por el usuario y fracciones de petróleo (en caso de que sean necesario usarlos).
  - Analizar los problemas de modelado termodinámico con respecto al diagrama global, sub-diagramas y unidades clave.
  - Analizar las especificaciones y grados de libertad de unidades complejas.
2. **Ingreso de datos:** Depende principalmente de la tecnología del software. Esta actividad normalmente se realiza en la interfaz gráfica del usuario:
- Determinar los modelos termodinámicos. Verificar los parámetros de los modelos.
  - Seleccionar los componentes, desde la base de datos estándar o los definidos por el usuario.
  - Especificar los flujos de entrada.
  - Especificar las unidades (análisis de los grados de libertad).
  - Inicializar los flujos iniciales y unidades difíciles. Nótese que las especificaciones correctas no siempre significan especificaciones factibles.
3. **Ejecución:** Una correcta ejecución se da cuando los criterios de convergencia son cumplidos en el diagrama de flujo y al nivel de las unidades, se debe prestar particular atención al historial de convergencia por si se necesita corregir algún problema:
- Verificar los algoritmos de convergencia y parámetros, cambiarlos si es necesario.
  - Verificar los errores de convergencia y los límites de las variables.
  - Revisar el historial de convergencia.
4. **Resultados:** Una simulación entrega una gran cantidad de resultados. Los más importantes son:
- Reporte de flujos (balance de materia y energía), incluyendo el reporte de convergencia del diagrama.
  - Reporte de unidades, incluyendo balance material y energético, también como el reporte de convergencia de las unidades.

## 2.4. SIMULACIÓN DE PROCESOS

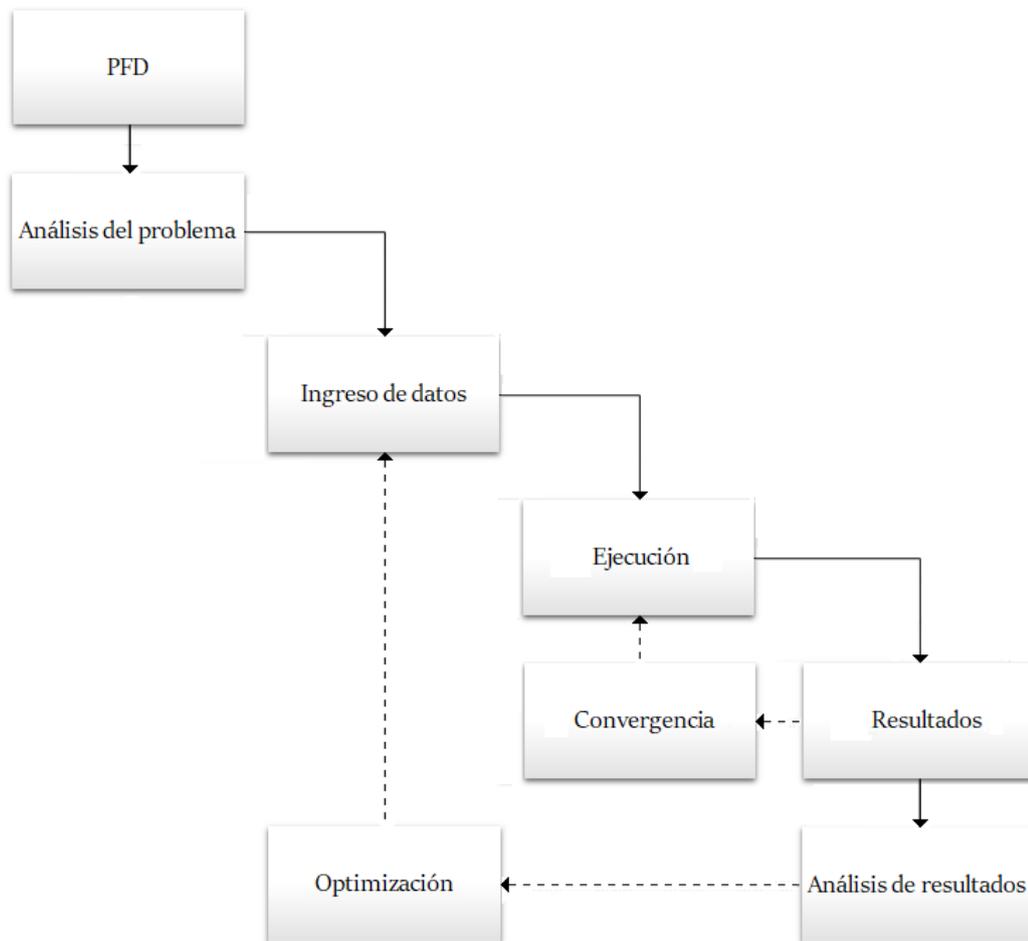


Figura 2.10: Metodología para una simulación en estado estacionario.

- Índice de rendimiento de las unidades.
- Tablas y gráficas de las propiedades físicas.

La representación gráfica de los resultados pueden tomar varias formas. Generalmente los software de simulación proveen sus propias herramientas de análisis, ya sea de los resultados detallados, como de los flujos internos o tablas de propiedades.

5. **Análisis de resultados:** Diversas herramientas de análisis permiten obtener más valor de los resultados obtenidos. Entre las más usadas se encuentra el *análisis de sensibilidad*. Este consiste generalmente en registrar la variación de algunas “variables muestreadas” en función de algunas “variables manipuladas”. La interpretación de estos resultados

## CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

puede ser aprovechada directamente, como observar tendencias, correlacionar o pre-optimizar. Otra herramienta de análisis son los *Casos de Estudio* pueden ser empleados para investigar escenarios (combinaciones) de varias variables del diagrama.

Finalmente, el trabajo de simulación puede ser refinado por medio de alguna *Optimización multivariable*. Un uso mas avanzado de las capacidades de la simulación de procesos es el *Análisis de control* de las unidades individuales o de una estrategia de *Control global* de la planta.

### 2.4.2. Aspen HYSYS

Aspen HYSYS es un software de simulación enfocado en petroleo y gas, refinación y en ingeniería de procesos. Cuenta con un solucionador robusto, una amplia gama de operaciones y entornos de trabajo.

Las versiones más recientes permiten [2.11](#):



Figura 2.11: Pantalla de carga de Aspen HYSYS v8.8

## 2.4. SIMULACIÓN DE PROCESOS

- Mejorar el diseño y el rendimiento del equipo.
- Monitorear problemas de seguridad y operacionales en la planta
- Analizar la capacidad de procesamiento y las condiciones de operación.
- Identificar oportunidades de ahorro de energía y reducir las emisiones de gases de efecto invernadero.
- Realizar una evaluación económica para obtener ahorros en el diseño del proceso.

Las unidades de proceso menos comunes pueden programarse en el entorno de simulación por medio del lenguaje VBA (Visual Basic con Aplicaciones).

Cuenta con diversos "paquetes de fluidos" que es el nombre que reciben los modelos físicos y termodinámicos en Aspen HYSYS y cuyo uso dependerá de los componentes a usar y las que reacciones que serán llevadas a cabo en el proceso (Tabla 2.7).

Tabla 2.7: Sistemas típicos y correlaciones recomendadas.

| Tipo de sistema                                   | Paquete de fluidos recomendado |
|---|--------------------------------|
| Deshidratación con Trietilen Glicol (TEG)         | PR                             |
| Aguas amargas                                     | PR, Sour PR                    |
| Sistemas de gras criogénico                       | PR, PRSV                       |
| Separación de aire                                | PR, PRSV                       |
| Torres de destilación de crudo                    | PR                             |
| Torres al vacío                                   | PR                             |
| Sistemas con alta concentración de H <sub>2</sub> | PR, ZJ, GS                     |
| Sistemas de vapor                                 | ASME Steam                     |
| Sistemas químicos                                 | PRSV                           |

## Capítulo 3

# Definición del esquema de simulación

### Elección del tipo de reformado de gas

El reactor de conversión de gas natural a gas de síntesis se abordará mediante una simulación de la reacción de reformado autotérmico (ATR), debido a que las relaciones de  $\frac{H_2}{CO_2}$  (Figura 2.7) obtenidas mediante este método se encuentran dentro del rango necesario ( $\approx 1.75$ – $\approx 3.75$ ) para el esquema de reacción Fisher-Tropsch de baja temperatura (Tabla 2.6). Cabe destacar que se ha realizado previamente un estudio sobre este esquema de reacción en el Instituto Mexicano del Petróleo (IMP).

Estas reacciones requieren de un medio oxidante, el cual puede ser suministrado a través de aire enriquecido o oxígeno en estado puro. Debido a que se ha observado que se obtienen mejores rendimientos utilizando oxígeno como oxidante, se optará por esta opción en la simulación, lo cual implicará también la simulación de una planta de oxígeno.

### Sistemas de purificación

En este caso en particular se ha observado que no será necesario incluir todos los sistemas de purificación mostrados en la Figura 2.2, debido a que en ningún caso base se encuentran presentes todos los contaminantes mostrados. Por lo tanto, para la limpieza de este gas se utilizará únicamente un separador de condensados y un sistema para eliminar los compuestos azufrados.

## **Servicios auxiliares**

Para el suministro de agua utilizada en los servicios del sistema, se considerará obtenerla a través de un proceso de desalinización de agua de mar, debido a que se supondrá que el sistema se encuentra en una ubicación cercana a mar abierto.

Asimismo, se empleará un sistema de cogeneración con el fin de obtener tanto electricidad como vapor de agua para calentamiento. Este sistema permitirá la generación simultánea de energía eléctrica y térmica, lo cual optimizará la eficiencia energética del sistema y contribuirá a su sustentabilidad en términos de aprovechamiento de recursos.

## **Esquema del sistema**

De manera general, el sistema se configurará de acuerdo a lo ilustrado en la Figura 3.1, la cual presenta una representación esquemática del diseño propuesto. Esta figura visualiza de manera resumida la configuración y los componentes principales del sistema que será objeto de simulación en el presente estudio.

### CAPÍTULO 3. DEFINICIÓN DEL ESQUEMA DE SIMULACIÓN

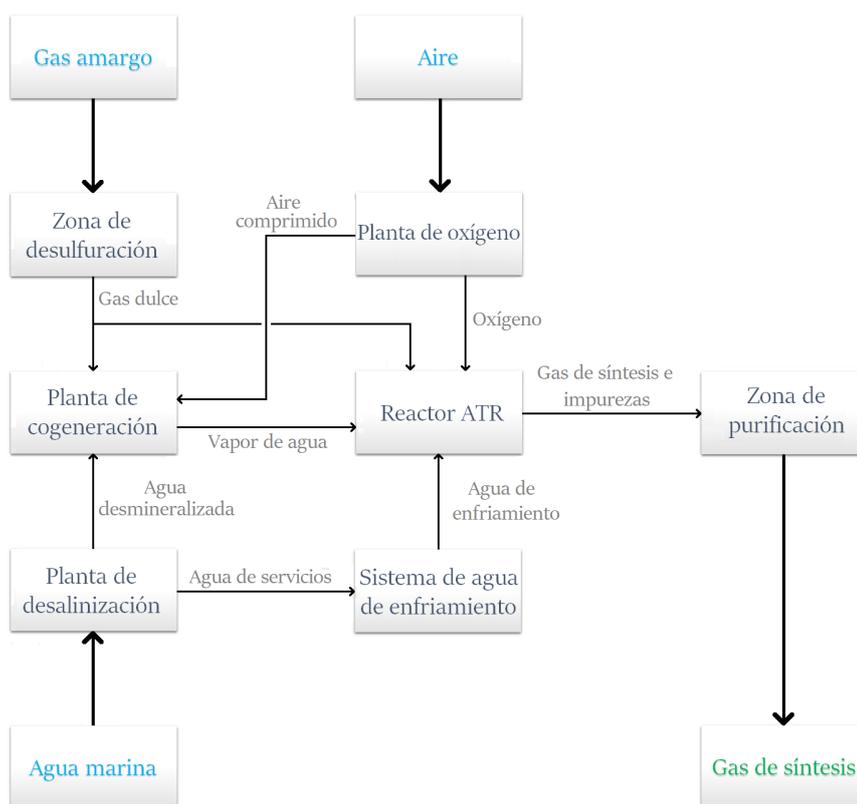


Figura 3.1: Diagrama de bloques del sistema de gas de síntesis, todos los servicios requeridos de electricidad y de vapor de calentamiento se proveerán desde la planta de cogeneración, y de igual manera el agua de enfriamiento desde el sistema de agua de enfriamiento



# Capítulo 4

## Simulaciones

### 4.1. Producción de oxígeno

La sección inicial en someterse a simulación fue la planta de oxígeno, dado que su proceso no implica reacciones químicas y la composición del aire (materia prima utilizada en esta planta) consta únicamente de unos pocos elementos, lo que facilita su balance de materia.

Se utilizó como referencia para esta simulación el trabajo de Ebrahimi y colaboradores [15], del cual se tomó su diagrama esquemático, su caracterización termodinámica, composición de corrientes y especificaciones de equipos (Figura 4.1, Tabla 4.1 y Tabla 4.2).

Este modelo de simulación permite obtener grandes cantidades de oxígeno puro, nitrógeno para aire de instrumentos, así como flujos elevados de aire comprimido, el cual será utilizado posteriormente para alimentar el proceso de cogeneración.

#### 4.1.1. Descripción

Una corriente de aire a temperatura y presión ambiente es succionada por un compresor (Figura 4.1), donde experimenta un aumento de temperatura y presión. Luego, al salir del compresor, el aire es enfriado nuevamente a temperatura ambiente mediante el uso de agua de enfriamiento. Posteriormente, este proceso de compresión y enfriamiento se repite. A la salida del segundo intercambiador, el flujo de aire se divide en dos corrientes, una de las cuales se somete a un proceso adicional de compresión y enfriamiento.

Ambos flujos de aire ingresan a un intercambiador criogénico de calor multiflujo, donde son enfriados utilizando los productos finales del proceso, alcanzando temperaturas inferiores a  $-160^{\circ}\text{C}$ . A través de válvulas estranguladoras, las corrientes son ajustadas a presiones similares, y debido al efecto



CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

Tabla 4.1: Condiciones de corrientes en planta de oxígeno [15]

| Corriente | $\dot{m}$<br>(kg/hr) | T<br>(°C) | P<br>(kPa) | Composición (% mol) |                |                |                  |
|-----------|----------------------|-----------|------------|---------------------|----------------|----------------|------------------|
|           |                      |           |            | Ar                  | O <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> | H <sub>2</sub> O |
| 1         | 360,000              | 25        | 101.3      | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 2         | 360,000              | 143.9     | 268        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 3         | 360,000              | 30        | 258        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 4         | 360,000              | 154.2     | 669        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 5         | 360,000              | 30        | 659        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 6         | 115,200              | 30        | 659        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 7         | 115,200              | 30        | 659        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 8         | 115,200              | 109.7     | 1210       | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 9         | 115,200              | 24.7      | 1200       | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 10        | 115,200              | -163.8    | 1190       | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 11        | 115,200              | -172.8    | 659        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 12        | 244,800              | -164.1    | 649        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 13        | 244,800              | -164.1    | 649        | 1                   | 21             | 78             | -                |
| 14        | 214,511              | -171.9    | 649        | 1.39                | 34.77          | 63.84          | -                |
| 15        | 214,511              | -180.6    | 639        | 1.39                | 34.77          | 63.84          | -                |
| 16        | 214,511              | -192.5    | 106        | 1.39                | 34.77          | 63.84          | -                |
| 17        | 145,489              | -178.6    | 517        | 0.45                | 1.68           | 97.87          | -                |
| 18        | 145,489              | -185.7    | 507        | 0.45                | 1.68           | 97.87          | -                |
| 19        | 145,489              | -195.5    | 106        | 0.45                | 1.68           | 97.87          | -                |
| 20        | 68,483               | -182.7    | 106        | 0.01                | 99.99          | -              | -                |
| 21        | 68,483               | -182.6    | 480        | 0.01                | 99.99          | -              | -                |
| 22        | 68,483               | 0.1       | 470        | 0.01                | 99.99          | -              | -                |
| 23        | 291,517              | -192.4    | 106        | 1.1                 | 4.69           | 94.21          | -                |
| 24        | 291,517              | -175      | 103.5      | 1.1                 | 4.69           | 94.21          | -                |
| 25        | 291,517              | 27        | 101.3      | 1.1                 | 4.69           | 94.21          | -                |
| 26        | 1,296,000            | 20        | 101.3      | -                   | -              | -              | 100              |
| 27        | 1,296,000            | 20        | 330        | -                   | -              | -              | 100              |
| 28        | 1,296,000            | 21.73     | 320        | -                   | -              | -              | 100              |
| 29        | 1,296,000            | 29.5      | 310        | -                   | -              | -              | 100              |
| 30        | 1,296,000            | 36.6      | 300        | -                   | -              | -              | 100              |

#### 4.1. PRODUCCIÓN DE OXÍGENO

Tabla 4.2: Condiciones de equipos en planta de oxígeno [15]

| Compresores    | Factor de compresión            | Eficiencia adiabática          |
|----------------|---------------------------------|--------------------------------|
| Comp1          | 2.645                           | 80 %                           |
| Comp2          | 2.593                           | 76 %                           |
| Comp3          | 1.836                           | 72 %                           |
| Bombas         | Factor de compresión            | Eficiencia adiabática          |
| Pump1          | 3.257                           | 85 %                           |
| Pump2          | 4.528                           | 80 %                           |
| Valvulas       | Caída de presión                |                                |
| Tvalve1        | 531 kPa                         |                                |
| Tvalve2        | 401 kPa                         |                                |
| Tvalve3        | 533 kPa                         |                                |
| Tvalve4        | 0 kPa                           |                                |
| Columnas       | Número de platos                | Caída de presión               |
| HPC            | 50                              | 132 kPa                        |
| LPC            | 60                              | 0 kPa                          |
| Intercambiador | Caída de presión en lado coraza | Caída de presión en lado tubos |
| HEX1           | 10 kPa                          | 10 kPa                         |
| HEX2           | 10 kPa                          | 10 kPa                         |
| HEX3           | 10 kPa                          | 10 kPa                         |
| MHEX1          | 10 kPa                          | 10 kPa                         |
| MHEX2          | 10 kPa                          | 10 kPa                         |

Joule-Thomson, experimentan un ligero enfriamiento. Luego, ingresan a una torre de platos criogénica de alta presión, donde la corriente que ha pasado por un tercer proceso de compresión (la más fría y con mayor presión) entra por la parte inferior de la torre, mientras que la otra corriente ingresa por la parte superior.

Los fondos de esta torre salen ligeramente enriquecidos en oxígeno (% mol > 30) y el domo con una gran concentración de nitrógeno (% mol > 95). Después entran en un segundo intercambiador de calor multiflujo, en donde disminuyen aún más su temperatura con los productos del domo de la torre de baja presión. Fondo y domo de la torre de alta presión, respectivamente, atraviesan una válvula estranguladora cada uno, donde de nueva cuenta disminuyen su temperatura y se ajustan sus presiones para su entrada a la torre de baja presión.

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

Ambas corrientes entran en la torre de baja presión, cuyo reboiler es calentado utilizando la energía térmica cedida por el condensador de la torre de alta presión, es decir, el condensador de la torre de alta presión funciona como el reboiler de la torre de baja presión.

El domo de la torre de baja presión, rico en nitrógeno, es enviado al segundo intercambiador de calor multiflujo, aumentando su temperatura mientras enfría a los productos de la torre de alta presión, después de lo cual ingresa al primer intercambiador multiflujo. El fondo de la torre de baja presión, compuesto casi completamente de oxígeno, es bombeado al primer intercambiador multiflujo.

Ambos productos, nitrógeno enriquecido y oxígeno puro, enfrían a las alimentaciones al sistema, pasando el oxígeno a fase gaseosa, y saliendo ambos productos del sistema.

### 4.1.2. Simulación

Se eligió el paquete de fluidos *Peng-Robinson* para los componentes del aire listados en la Tabla 4.1, en tanto, para el agua de enfriamiento se eligió el paquete *ASME Steam*, y se declaró solamente agua pura en su lista de componentes.

Las corrientes se definieron tal y como se indica en la bibliografía. A la corriente de agua de enfriamiento (Figura 5.1) se le adicionó una función lógica *Adjust* para que su flujo másico siempre sea el exacto requerido para que el agua salga a una temperatura de 36.6 °C. Los intercambiadores de calor fueron definidos del tipo *Simple End Point*. Los compresores son centrífugos con definición de la eficiencia adiabática. Los intercambiadores MHEX 1 y 2 se definieron como intercambiadores *LNG Exchanger*.

La separación de la corriente 5 en las corrientes 6 y 7 se definió en el separador SP1 en una fracción fija correspondiente a las indicadas en la bibliografía, de esta manera, si el flujo de aire cambia, la división de las corrientes se realizará siempre en la misma proporción.

La torre de destilación HPC se definió inicialmente como una torre de absorción con reflujo integrado, y se operó hasta que las corrientes 14 y 17 cumplieran con las condiciones deseadas. Al mismo tiempo, la torre LPC se definió como una torre de absorción con evaporador integrado, utilizando las corrientes 16 y 19 como alimentación para su primera corrida, según lo definido en la bibliografía. Para su segunda corrida, se utilizaron los productos de la torre HPC hasta que las corrientes 20 y 23 convergieran en las condiciones deseadas.

Posteriormente, se accedió al entorno de simulación de cada una de estas torres, con el propósito de obtener datos como los flujos másicos devueltos

## 4.2. COGENERACIÓN

a cada torre, la temperatura del condensador y del evaporador, y la carga térmica de cada uno.

De esta forma se logró integrar ambas torres, permitiendo que el condensador de la torre de alta presión funcione como el evaporador de la torre de baja presión.

La integración energética entre estas torres se llevó a cabo mediante un intercambiador de calor y un tanque flash. En el intercambiador, las cabezas de la torre de alta presión (HPC) ingresan como corriente caliente y se condensan por completo con los fondos de la torre de baja presión (LPC). El condensado se divide, una parte regresa a la torre HPC como reflujo, mientras que el resto (corriente 17) se envía a la torre LPC.

Los fondos de la corriente LPC entran al mismo intercambiador como corriente fría; sin embargo, a diferencia de las cabezas de la torre HPC, este intercambio térmico no es suficiente para provocar un cambio total de fase, es decir, no se reevapora la totalidad de los fondos. Por lo tanto, son enviados a un tanque flash donde se separan las fases formadas. La totalidad de la fase vapor es devuelta al fondo de la torre LPC, mientras que el resto (fase líquida) es bombeada al primer intercambiador criogénico para finalmente alcanzar una temperatura cercana a la ambiente y salir del sistema.

## 4.2. Cogeneración

La base utilizada para la simulación de la planta de cogeneración fue el trabajo de Paoli [16], el cual presenta una amplia variedad de modelos de ciclos de cogeneración, así como sus respectivas optimizaciones. En la presente tesis se utilizó un modelo de turbina de gas con ciclo combinado de triple presión con recalentamiento, por dos motivos. En primer lugar, este modelo permitirá obtener vapor de agua a alta, media y baja presión en un futuro, derivando parte de estas corrientes al proceso para servir como medio de calentamiento. En segundo lugar, este modelo se describe con la mayor eficiencia térmica y, además, el esquema de cogeneración por sí solo permitirá suplir las necesidades de energía eléctrica del proceso.

El diagrama de simulación, así como los datos obtenidos de Paoli [16], se muestran en la Figura 4.2, la Tabla 4.3 y la Tabla 4.4.

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

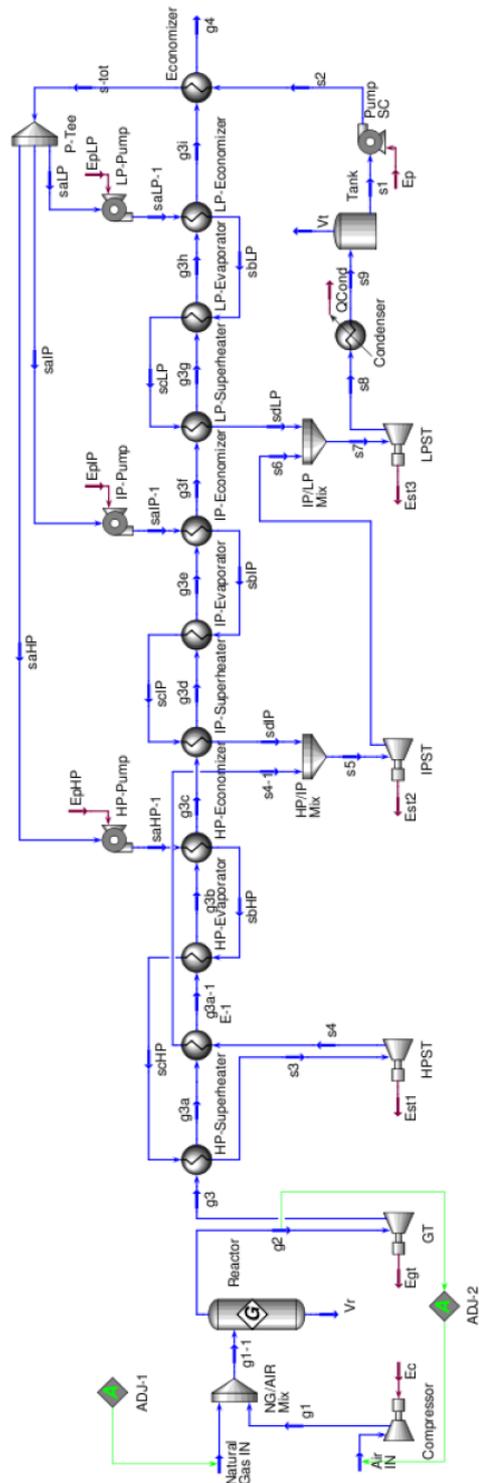


Figura 4.2: Esquema de la planta de cogeneración [16]

## 4.2. COGENERACIÓN

Tabla 4.3: Condiciones de equipos en planta de cogeneración

| Parametro                       | Propiedad           | Resultado            | Unidad |
|---------------------------------|---------------------|----------------------|--------|
| Gas natural                     | Flujo másico        | $1.4333 \times 10^4$ | kg/h   |
|                                 | Presión             | 21.00                | bar    |
| Aire                            | Flujo másico        | $6.826 \times 10^5$  |        |
|                                 | Presión             | 1.00                 | bar    |
| Compresor                       | $\eta$ adiabática   | 88.00                | %      |
|                                 | $\eta$ politrópica  | 91.67                | %      |
|                                 | Energía             | $8.84 \times 10^4$   | kW     |
| Reactor                         | $\eta$              | 99.99                | %      |
|                                 | P ent.              | 21.00                | bar    |
|                                 | T sal.              | 1250.00              | °C     |
| Turbina de gas                  | $\eta$ adiabática   | 90.00                | %      |
|                                 | $\eta$ politrópica  | 86.65                | %      |
|                                 | Energía             | $1.49 \times 10^5$   | kW     |
|                                 | T sal.              | 630.3                | °C     |
| Economizador de alta presión    | UA                  | $6.19 \times 10^5$   | kJ/h°C |
|                                 | $\Delta P$ Coraza * | 0.05                 | bar    |
|                                 | $\Delta P$ Tubos *  | 0.20                 | bar    |
|                                 | T ent. agua         | 111.4                | °C     |
|                                 | T sal. gas          | 302.7                | °C     |
| Evaporador de alta presión      | UA                  | $7.04 \times 10^5$   | kJ/h°C |
|                                 | T ent. agua         | 309.9                | °C     |
|                                 | T sal. gas          | 405.7                | °C     |
| Recalentador                    | UA                  | $1.24 \times 10^5$   | kJ/h°C |
|                                 | T ent. agua         | 341.6                | °C     |
|                                 | T sal. agua         | 450.00               | °C     |
|                                 | T sal. gas          | 540.3                | °C     |
| Sobrecalentador de alta presión | UA                  | $3.80 \times 10^5$   | kJ/h°C |
|                                 | T ent. agua         | 309.8                | °C     |
|                                 | T sal. agua         | 564.4                | °C     |
|                                 | T sal. gas          | 563.4                | °C     |
| Economizador de media presión   | UA                  | $3.68 \times 10^5$   | kJ/h°C |
|                                 | T ent. agua         | 110.3                | °C     |
|                                 | T sal. gas          | 211.8                | °C     |
| Evaporador de media presión     | UA                  | $1.56 \times 10^6$   | kJ/h°C |
|                                 | T ent. agua         | 220.2                | °C     |

*Continúa en la página siguiente*

CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

| Parametro                        | Propiedad          | Resultado           | Unidad |
|----------------------------------|--------------------|---------------------|--------|
|                                  | T sal. gas         | 230.2               | °C     |
| Sobrecalentador de media presión | UA                 | $1.16 \times 10^5$  | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua        | 219.8               | °C     |
|                                  | T sal. agua        | 290.0               | °C     |
|                                  | T sal. gas         | 297.4               | °C     |
| Economizador de baja presión     | UA                 | $1.34 \times 10^5$  | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua        | 110.00              | °C     |
|                                  | T sal. gas         | 156.1               | °C     |
| Evaporador de baja presión       | UA                 | $1.32 \times 10^6$  | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua        | 150.3               | °C     |
|                                  | T sal. gas         | 160.3               | °C     |
| Sobrecalentador de baja presión  | UA                 | $5.96 \times 10^4$  | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua        | 148.7               | °C     |
|                                  | T sal. agua        | 200.00              | °C     |
|                                  | T sal. gas         | 209.5               | °C     |
| Economizador                     | UA                 | $7.76 \times 10^5$  | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua        | 29.3                | °C     |
|                                  | T sal. agua        | 110.0               | °C     |
|                                  | T sal. gas         | 97.7                | °C     |
| Agua                             | Flujo másico       | $1.247 \times 10^5$ | kg/h   |
|                                  | Presión            | 2.20                | bar    |
| Bomba de alta presión            | $\eta$ adiabática  | 75.00               | %      |
|                                  | $\Delta P$         | 98.00               | bar    |
|                                  | Trabajo            | 308.323             | kW     |
|                                  | Flujo              | $7.980 \times 10^4$ | kg/h   |
| Bomba de media presión           | $\eta$ adiabática  | 75.00               | %      |
|                                  | $\Delta P$         | 21.26               | bar    |
|                                  | Trabajo            | 22.98               | kW     |
|                                  | Flujo              | $1.322 \times 10^5$ | kg/h   |
| Bomba de baja presión            | $\eta$ adiabática  | 75.00               | %      |
|                                  | $\Delta P$         | 3.00                | bar    |
|                                  | Trabajo            | 2.06                | kW     |
|                                  | Flujo              | $1.322 \times 10^5$ | kg/h   |
| Turbina de vapor de alta presión | $\eta$ adiabática  | 90.00               | %      |
|                                  | $\eta$ politrópica | 88.28               | %      |
|                                  | Trabajo            | $9.01 \times 10^3$  | kW     |
|                                  | P. salida          | 22.86               | bar    |

*Continúa en la página siguiente*

## 4.2. COGENERACIÓN

| Parametro                         | Propiedad          | Resultado          | Unidad |
|-----------------------------------|--------------------|--------------------|--------|
| Turbina de vapor de media presión | $\eta$ adiabática  | 90.00              | %      |
|                                   | $\eta$ politrópica | 88.03              | %      |
|                                   | Trabajo            | $1.12 \times 10^4$ | kW     |
|                                   | P. salida          | 4.4                | bar    |
| Turbina de vapor de baja presión  | $\eta$ adiabática  | 90.00              | %      |
|                                   | $\eta$ politrópica | 88.80              | %      |
|                                   | Trabajo            | $1.95 \times 10^4$ | kW     |
|                                   | P. salida          | 0.09               | bar    |
| Condensador                       | $\Delta P$         | 0.05               | bar    |
|                                   | Carga térmica      | $2.77 \times 10^8$ | kJ/h   |
| Bomba                             | $\eta$ adiabática  | 75.00              | %      |
|                                   | $\Delta P$         | 2.20               | bar    |
|                                   | Trabajo            | 9.93               | kW     |

\* La caída de presión de todos los intercambiadores es la misma en los lados tubos y lados coraza.

### 4.2.1. Descripción

Un flujo de aire a presión y temperatura atmosférica ingresa a un compresor (Figura 4.2), donde su presión y temperatura aumentan. Luego, se mezcla con un flujo de gas natural a la misma presión pero a temperatura ambiente, y ambos flujos entran a un quemador donde se lleva a cabo el proceso de combustión. La relación gas natural/aire es controlada con el fin de:

- Realizar una combustión completa suministrando una pequeña cantidad de aire en exceso.
- Evitar que la temperatura de los gases comprometa la estructura del sistema.
- Prevenir la formación de  $NO_x$ .

Los gases de combustión ingresan a una turbina de gas donde se expanden, reducen su temperatura y generan electricidad. Los gases exhaustos son dirigidos a una chimenea, que en este caso representa una red de intercambiadores de calor, donde suministran energía térmica sucesivamente a diversas corrientes de agua/vapor, disminuyendo progresivamente su temperatura hasta alcanzar una temperatura de salida controlada mediante la cantidad de gas natural suministrada al inicio, para finalmente salir del sistema.

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

En el lado del ciclo de vapor, los condensados del tanque de degasificación/almacenamiento son bombeados hacia un economizador (intercambiador de calor), donde su temperatura aumenta ligeramente. Este economizador es el último paso que atraviesan los gases exhaustos de combustión antes de salir del sistema. La corriente ligeramente precalentada se divide en tres partes, y cada una se bombea a una presión determinada según la calidad de vapor deseada para cada uno de estos flujos (vapor de alta, media y baja presión).

Los gases de combustión ingresan a una turbina de gas donde se expanden, reducen su temperatura y generan electricidad. Los gases exhaustos son dirigidos a una chimenea, que en este caso representa una red de intercambiadores de calor, donde suministran energía térmica sucesivamente a diversas corrientes de agua/vapor, disminuyendo progresivamente su temperatura hasta alcanzar una temperatura de salida controlada mediante la cantidad de gas natural suministrada al inicio, para finalmente salir del sistema.

En el lado del ciclo de vapor, los condensados del tanque de degasificación/almacenamiento son bombeados hacia un economizador (intercambiador de calor), donde su temperatura aumenta ligeramente. Este economizador es el último paso que atraviesan los gases exhaustos de combustión antes de salir del sistema. La corriente ligeramente precalentada se divide en tres partes, y cada una se bombea a una presión determinada según la calidad de vapor deseada para cada uno de estos flujos (vapor de alta, media y baja presión).

El flujo de baja presión ingresa a un calentador, donde alcanza la temperatura de saturación, luego pasa a un siguiente intercambiador donde alcanza la condición de vapor saturado, y posteriormente entra a un tercer intercambiador donde alcanza el estado de vapor sobrecalentado. Los flujos de media y alta presión siguen procesos idénticos. Estos flujos obtienen su energía térmica de secciones sucesivamente más calientes de la chimenea de los gases exhaustos de combustión, comenzando desde el sobrecalentador de alta presión en la sección más caliente (directamente desde la salida de la turbina de gas) hasta la más fría (justo antes del economizador).

Después de recalentarse, el vapor de alta presión pasa por una turbina de vapor (donde genera electricidad) hasta alcanzar la presión de media, parte del flujo se condensa y luego se recalienta en un intercambiador ubicado entre el sobrecalentador y el evaporador de alta presión. Este vapor recalentado se mezcla con el vapor sobrecalentado de media presión, para luego pasar a otra turbina de vapor, donde alcanzan la presión de baja. Los exhaustos se mezclan con el vapor sobrecalentado de baja presión y pasan por una última turbina de vapor hasta alcanzar una presión inferior a la atmosférica.

Después, los gases exhaustos de la turbina de baja presión entran a un condensador, en donde alcanzan la fase de líquido subenfriado, para finalmente regresar al tanque de almacenamiento y degasificación.

## 4.2. COGENERACIÓN

### 4.2.2. Simulación

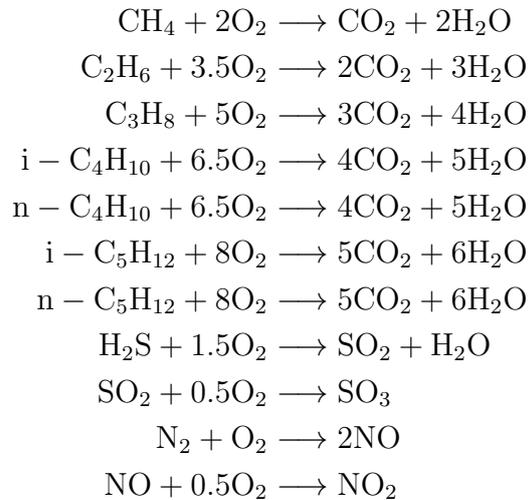
Esta parte de la simulación involucra una serie de reacciones de combustión del gas natural. Debido a la base de simulación utilizada, se utilizó la composición del gas natural mostrada en la Tabla 4.4.

Tabla 4.4: Composición de gas natural para el esquema de cogeneración [16]

| Componente           | Formula                        | % mol |
|----------------------|--------------------------------|-------|
| Metano               | CH <sub>4</sub>                | 91.79 |
| Etano                | C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>  | 5.58  |
| Propano              | C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>  | 0.97  |
| i-Butano             | C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> | 0.03  |
| n-Butano             | C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> | 0.02  |
| i-Pentano            | C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> | 0.05  |
| n-Pentano            | C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> | 0.05  |
| Dióxido de carbono   | CO <sub>2</sub>                | 0.08  |
| Nitrógeno            | N <sub>2</sub>                 | 1.42  |
| Sulfuro de hidrógeno | H <sub>2</sub> S               | 0.01  |

Se definieron dos listas de componentes:

- Ciclo de vapor: Se definió únicamente agua para este ciclo, y el paquete de fluidos utilizado fue ASME Steam.
- Lado gas: Se definieron los componentes del gas natural, y se utilizó el paquete de fluidos Peng-Robinson. Además, se definieron las siguientes reacciones con sus respectivos productos:



## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

Se comienza definiendo un flujo de gas a 2100 kPa y 25°C. Además, se define un flujo de aire a 25°C y 100 kPa, el cual es enviado a un compresor de aire (SC.Comp) con una eficiencia adiabática del 88 % (Figura 5.2). En este compresor, el aire se calienta, lo cual es beneficioso en este caso, ya que era necesario precalentarlo antes de introducirlo en el reactor de combustión. Ambos flujos, a la misma presión, se mezclan y se inyectan en un reactor de Gibbs (GBR-100).

En el reactor de equilibrio, se carga el paquete de reacciones mencionadas anteriormente para esta etapa, lo que permite que ocurra la combustión del gas natural y sus componentes.

Los gases de reacción salen del reactor y su temperatura de combustión se controla mediante un control lógico *Adjust*, en el cual la cantidad de aire suministrado al proceso se ajusta para mantener la temperatura de salida de los gases de combustión a 1250°C. Los gases calientes y a presión luego pasan a través de una turbina de gas (SC\_GT) con una eficiencia adiabática del 90 % (como todas las turbinas en la simulación), a la cual se le define la presión de salida y la eficiencia adiabática. Los gases, ahora a menor presión y temperatura, están listos para entrar en el ciclo de vapor.

Antes de definir la primera corriente de gas que interactúa con el ciclo de vapor, es conveniente, para fines de simulación, comenzar a definir otras etapas del ciclo.

Para elegir en qué parte del ciclo empezar a simular, se analizó el circuito completo y se decidió comenzar en un punto en el que las condiciones sean totalmente conocidas, fijas y no se vean afectadas por la definición de los flujos siguientes. Por lo tanto, se empezó con un *Recycle* en el punto en el que los condensados ingresan al tanque de degasificación (SC\_Tank). En este punto, la presión está definida por la salida de la turbina de vapor de baja presión y su caída en el condensador. La temperatura también está definida, ya que al definirse el flujo de salida del condensador como líquido saturado (y al tener ya definida la presión), esta se define automáticamente.

Posteriormente, el flujo se introduce en el tanque de degasificación (SC\_Tank), el cual se simula utilizando un tanque flash. Se define una salida gaseosa y una líquida, siendo la salida líquida dirigida a la primera bomba (SC\_Pump) con suficiente presión para atravesar el economizador (Economizer) en este primer intercambiador, y en todos los intercambiadores utilizados en el proceso se define como de *Single End Point* con una caída de presión de 20 kPa por paso en los tubos y de 5 kPa por paso en la coraza, y el flujo de agua siempre pasa por el lado de los tubos.

Se define la temperatura de salida del agua como 110°C. En este punto, no se especifica ningún flujo de calentamiento en el lado de la coraza, solo se indica la carga térmica utilizada.

## 4.2. COGENERACIÓN

El flujo se envía a un separador (P-Tee), donde se divide en tres partes con relaciones de 0.64 y 0.22 en comparación con el flujo de entrada para los flujos de alta y media presión, respectivamente. El flujo destinado a baja presión se define en Aspen HYSYS por diferencia.

La salida se envía a una bomba (SC\_LP-Pump) donde se aumenta su presión a 504 kPa. En esta bomba, el segundo parámetro a definir es la eficiencia adiabática, que se establece en un 75 %. Esta eficiencia se utiliza en todas las bombas del sistema.

Luego se envía al economizador de baja presión (LP-Economizer), donde se calienta hasta una temperatura cercana a la de saturación a esta presión (150.3 °C). Nuevamente, solo se indica la carga térmica en el lado de la coraza, pero se define la caída de presión del flujo en ese lado (5 kPa)

El flujo cerca de la saturación se dirige al evaporador de baja presión (LP-Evaporator), donde, además de tener definidas las respectivas caídas de presión, únicamente se define el estado termodinámico de salida del flujo, es decir, vapor saturado. El sistema automáticamente determina la temperatura de salida del flujo. Al igual que en todos los intercambiadores en esta etapa inicial, solo se define la carga térmica utilizada en el lado de la coraza.

Luego, el flujo en fase vapor se dirige al sobrecalentador de baja presión (LP-Superheater), donde alcanza una temperatura de 200°C.

El mismo procedimiento se aplica al vapor de presión intermedia, el cual es dirigido a una bomba (SC\_IP-Pump) para alcanzar la presión media de 2330 kPa. Posteriormente, el vapor se dirige al sobrecalentador de media presión (IP-Superheater), donde alcanza una temperatura de 290°C.

Similarmente, el vapor de presión de alta presión es dirigido a una bomba (SC\_HP-Pump) para alcanzar la presión de 10,004 kPa. Luego, el vapor es enviado al sobrecalentador de alta presión (HP-Superheater), donde alcanza una temperatura de 564.4°C. Posteriormente, el vapor de alta presión es dirigido a la turbina de vapor de alta presión (SC\_HPST), donde se expande hasta alcanzar la presión de 2,286 kPa, generando energía eléctrica y enfriándose en el proceso.

Luego de la expansión en la turbina de vapor de alta presión, el vapor es dirigido a un recalentador intermedio (E-1) ubicado entre el sobrecalentador de alta presión (HP-Superheater) y el evaporador de alta presión (HP-Evaporator). En este recalentador, el vapor se calienta hasta alcanzar una temperatura de salida de 450°C.

El vapor recalentado se mezcla con vapor sobrecalentado de media presión y ambos ingresan juntos a la turbina de vapor de media presión (SC\_IPST), expandiéndose hasta alcanzar una presión de 440 kPa. Durante este proceso de expansión, se genera energía eléctrica y el vapor se enfría. El vapor exhausto de la turbina de vapor de media presión se mezcla luego con el vapor

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

sobrecalentado de baja presión, y ambos ingresan a la turbina de vapor de baja presión (SC\_LPST), expandiéndose hasta alcanzar una presión de 9 kPa.

El vapor exhausto proveniente de la turbina de vapor de baja presión se dirige al condensador (SC\_Condenser), donde se condensa utilizando agua de enfriamiento a una presión de 500 kPa y una temperatura de 25°C. Se utiliza suficiente flujo de agua de enfriamiento para asegurar que ésta no se caliente más allá de los 30°C. El vapor de agua se condensa en el condensador y se convierte en líquido saturado. Este líquido saturado se conecta con el *Recycle* inicial, cerrando así el ciclo del sistema.

Una vez que se ha definido la carga térmica de todos los intercambiadores, se puede continuar con el flujo de gases calientes provenientes de la turbina de gas (SC\_GT). Este flujo de gases se conecta al sobrecalentador de alta presión (HP-Superheater), y debido a que la carga térmica ya ha sido definida previamente, la temperatura de salida de los gases de este intercambiador se calcula automáticamente.

Posteriormente, el flujo de gases se conecta sucesivamente al resto de los intercambiadores en la siguiente secuencia:

- Sobrecalentador de alta presión (HP-Superheater)
- Recalentador (E-1)
- Evaporador de alta presión (HP-Evaporator)
- Economizador de alta presión (HP-Economizer)
- Sobrecalentador de media presión (IP-Superheater)
- Evaporador de media presión (IP-Evaporator)
- Economizador de media presión (IP-Economizer)
- Sobrecalentador de baja presión (LP-Superheater)
- Evaporador de baja presión (LP-Evaporator)
- Economizador de baja presión (LP-Economizer)
- Economizador (Economizer)

Como las cargas térmicas quedan predefinidas por el flujo másico del agua del ciclo de vapor, las temperaturas de salida de los gases de combustión quedan definidas en automático. Por lo tanto, la temperatura de salida de los gases a la salida del economizador (Economizer) puede controlarse, bien con

### 4.3. DESALINIZACIÓN

una cantidad fija de gas se varía la cantidad de agua en el ciclo de vapor o viceversa. Para seguir el modelo de Paoli [16], se usó la segunda opción, se toma una cantidad fija de vapor a generar y por medio de una función lógica *Adjust* se calcula la cantidad de gas natural necesaria que la temperatura de salida de los gases del último intercambiador sea de 104°C. Temperatura lo suficientemente alta para que el agua generada en la combustión no se condense.

### 4.3. Desalinización

La metodología utilizada en esta sección se basó en el artículo científico de Maha et al. [17], el cual describe la simulación de una planta de desalinización real y proporciona datos para comparar el proceso real con los resultados obtenidos en la simulación realizada en el presente estudio.

El diagrama de la planta de desalinización utilizado en el artículo se muestra en la Figura 4.3, mientras que las especificaciones de los equipos utilizados se detallan en la Tabla 4.5.

Tabla 4.5: Condiciones de equipos en planta de desalinización [17]

| Parámetro                   | Propiedad                    | Resultado | Unidad |
|-----------------------------|------------------------------|-----------|--------|
| Agua marina                 | Flujo másico                 | 220,000   | kg/h   |
|                             | Temperatura                  | 28        | °C     |
|                             | Presión                      | 3         | bar    |
|                             | Salinidad                    | 39,000    | ppm    |
| Vapor impulsor              | Flujo másico                 | 3,000     | kg/h   |
|                             | Temperatura                  | 170       | °C     |
|                             | Presión                      | 5         | bar    |
| Condensador                 | Caída de presión lado tubo   | 0.3       | bar    |
|                             | Caída de presión lado coraza | 0         | bar    |
|                             | Caída de temperatura         | 6         | °C     |
| Termocompresor              | Presión de salida            | 0.25      | bar    |
| Evaporadores                | Temperatura evaporador 1     | 60        | °C     |
|                             | Temperatura evaporador 2     | 50        | °C     |
|                             | Temperatura evaporador 3     | 40        | °C     |
| Agua marina de enfriamiento | Flujo másico                 | 160,000   | kg/h   |
| Alimentación a los efectos  | Flujo másico                 | 20,000    | kg/h   |

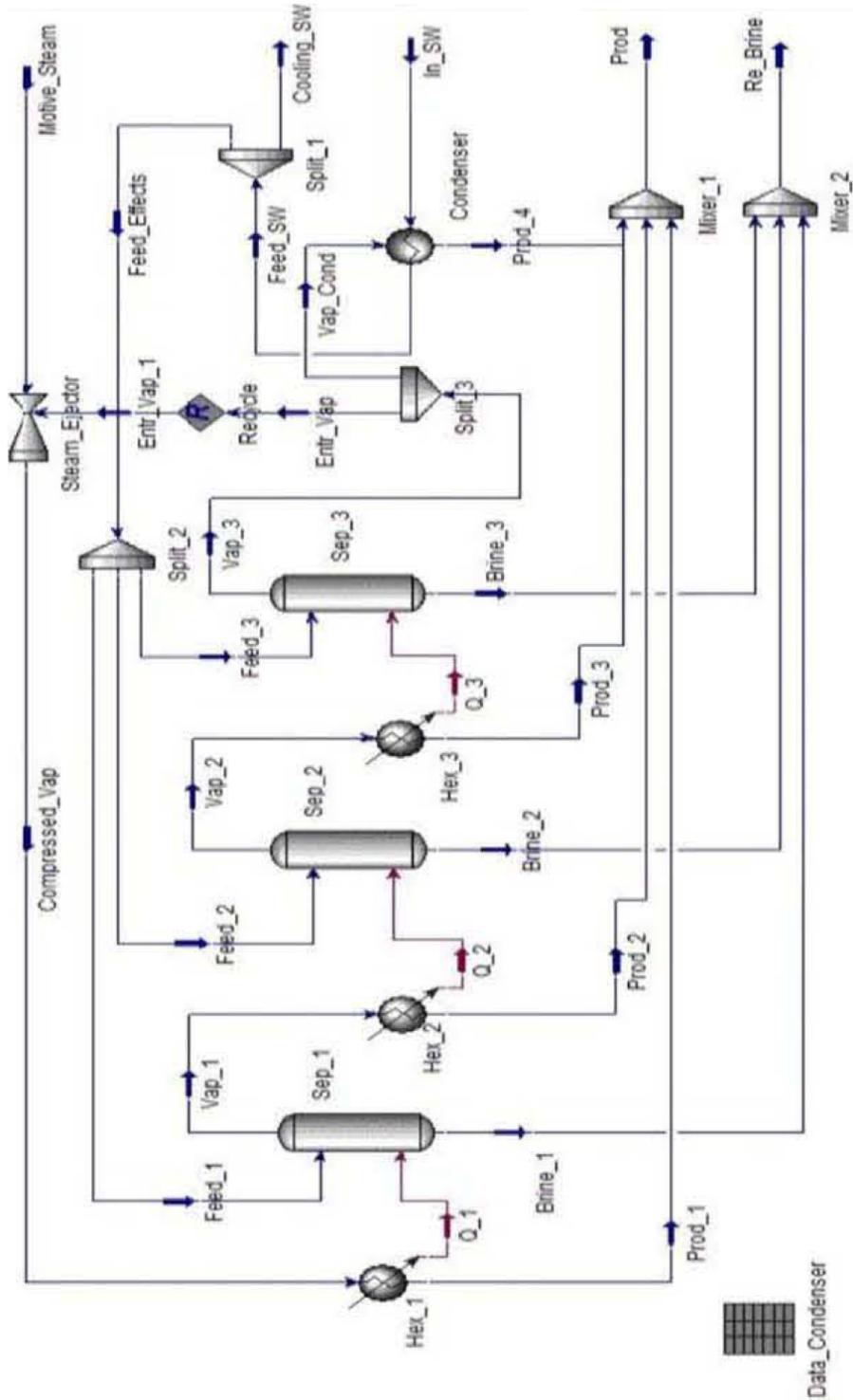


Figura 4.3: Esquema de la planta de desalinización [17]

## 4.3. DESALINIZACIÓN

### 4.3.1. Descripción

Agua marina, recién bombeada y a temperatura ambiente, ingresa al sistema como agua de enfriamiento para condensar vapor del sistema. La mayor parte de este flujo se retorna al mar, mientras que el resto, ligeramente precalentado, se divide en tres porciones iguales, cada una de las cuales se dirige a uno de los tres evaporadores flash.

La primera porción de agua, en forma de un fino rocío, entra al primer evaporador, el cual se encuentra a una presión menor y una temperatura mayor que el agua marina, y se mantiene calentado con vapor. El cambio en las condiciones termodinámicas produce una evaporación instantánea en una porción del agua salina, obteniéndose vapor de agua puro en la parte superior del tanque y una salmuera concentrada en la parte inferior del tanque.

El vapor de agua obtenido en el primer tanque flash se utiliza como medio de calentamiento en el segundo tanque flash, donde se condensa totalmente en el proceso. El segundo tanque flash se encuentra a una presión menor que el primer efecto, lo que resulta en otro fenómeno de evaporación flash.

El vapor de agua obtenido en el segundo efecto se utiliza como medio de calentamiento en el tercer y último efecto, donde se condensa de igual forma. En este tanque, la presión es todavía menor que en el segundo efecto, lo que resulta en otro fenómeno de destilación flash. Se obtiene vapor y salmuera concentrada en este tercer efecto, siguiendo el mismo proceso de evaporación y condensación. La salmuera concentrada resultante de los tres efectos se recopila y se devuelve al mar como desecho del proceso.

El vapor obtenido en este último efecto se divide en dos porciones. Una de estas porciones se condensa con el agua salina recién bombeada al sistema, lo que contribuye a precalentarla antes de su entrada a los evaporadores flash. Esta condensación del vapor con el agua salina recién bombeada ayuda a mejorar la eficiencia del proceso al aprovechar el calor latente del vapor para calentar el agua de alimentación antes de su entrada a los evaporadores flash, lo que reduce la demanda de energía para calentar el agua de alimentación y mejora el rendimiento general del sistema de desalinización.

La segunda porción de este vapor entra a un turbocompresor de vapor, donde se le inyecta vapor sobrecalentado para aumentar su temperatura y, lo que es más importante, aumentar su presión. Este proceso de compresión del vapor mediante el turbocompresor es similar al funcionamiento de una tobera, como se muestra en la Figura 4.4. El turbocompresor de vapor es un equipo mecánico que utiliza la energía del vapor para comprimirlo y aumentar su presión, lo que permite obtener un vapor de mayor presión que se utiliza como medio de calentamiento en el proceso de desalinización.

El vapor obtenido en el turbocompresor se dirige al primer efecto del

sistema de desalinización, donde se utiliza como medio de calentamiento. Los condensados obtenidos en los diferentes efectos del sistema se mezclan y se retiran del sistema como productos del proceso.

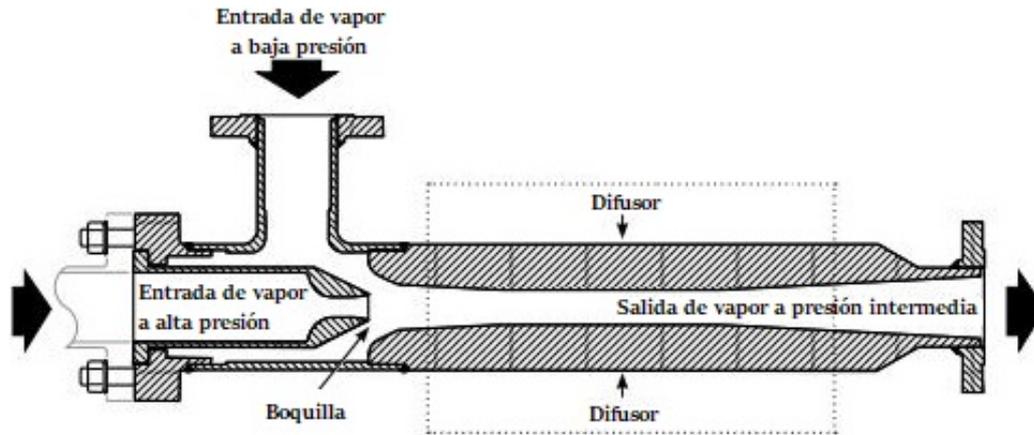


Figura 4.4: Esquema de un termocompresor

### 4.3.2. Simulación

Para el modelado de los componentes en el sistema, se establece una lista que incluye únicamente a los componentes  $H_2O$  y  $NaCl$ , debido a que son los constituyentes principales de la solución salina utilizada en este estudio. Se selecciona el paquete de fluidos NRTL (Non-Random Two-Liquid) como el más apropiado para representar el comportamiento de esta solución salina en el sistema, basándose en el trabajo previo de Maha y col. [17].

Se utiliza un flujo de agua con una salinidad de 39,000 ppm (equivalente a un porcentaje en masa del 3.9%), a una temperatura de  $28^{\circ}C$  y una presión de 3 bar, como se muestra en la Figura 5.3. Este flujo de agua se dirige a un intercambiador de calor de tipo tubo y coraza, con una caída de presión del lado de los tubos de 0.3 bar.

En esta etapa de la simulación, aún no se ha definido el flujo del lado de la coraza ni su carga térmica. Sin embargo, debido a que se indica que el mayor cambio de temperatura en este intercambiador es de  $6^{\circ}C$  en ambos lados (tanto el lado de los tubos como el lado de la coraza), se asume para esta primera aproximación un aumento de temperatura de  $3^{\circ}C$ .

Se realiza una división del flujo caliente después del intercambiador de calor, en donde el 27.27% del flujo entrante (equivalente a 60 ton/h) se envía a los evaporadores flash, mientras que el resto se desecha y se retira del sistema. El flujo destinado a los evaporadores se divide en tres partes iguales, y cada

### 4.3. DESALINIZACIÓN

una de ellas se dirige a un evaporador, representado en este caso como un tanque flash con un flujo térmico de entrada.

En esta primera aproximación, se proporciona el calor necesario para condensar 3,000 kg/h de un flujo de vapor a una presión de 0.25 bar (la presión a la que debe salir el flujo del turbocompresor de vapor), lo que resulta en la evaporación de una porción de la solución salina alimentada al primer evaporador flash. La presión en este tanque se ajusta hasta que la temperatura de salida del vapor sea de 60°C.

El flujo de vapor generado en el primer evaporador flash se envía a un enfriador, donde se le extrae energía térmica hasta que se condensa completamente y se obtiene líquido saturado. El flujo de calor extraído se dirige a un segundo tanque flash con flujo térmico de entrada, y se repite el procedimiento anterior ajustando la presión del tanque de manera que la temperatura de salida del vapor sea de 50°C. Posteriormente, se repite el procedimiento en el tercer tanque flash, ajustando la presión del tanque para que la temperatura de salida del vapor sea de 40°C.

Las salmueras concentradas de los tanques flash se unen y se sacan del sistema.

Las salmueras concentradas de los tanques flash se combinan y se retiran del sistema. El último flujo de vapor del tercer tanque flash se conecta a una función lógica de *Recycle* para evitar problemas de flujos no definidos en caso de cambios en los flujos siguientes. La salida de la función de *Recycle* se dirige a un divisor de flujo. Dado que aún no se ha determinado el flujo exacto para cada parte (uno se enviará al termocompresor y otro al condensador principal), se divide en un porcentaje del 50 % para cada flujo. Dado que ya se ha especificado un flujo definido que se enviará al condensador, se dirige a éste y se condensa. Dado que se está proporcionando una carga térmica para esta condensación, se elimina la especificación del aumento de temperatura de 3°C definido anteriormente, y ahora el cambio de temperatura en este flujo de entrada está determinado únicamente por la carga térmica proporcionada.

El flujo restante de vapor se dirige al termocompresor de vapor.

Se define una corriente de vapor impulsor para el termocompresor con un caudal de 3,000 kg/h, una presión de 5 bar y una temperatura de 170°C.

- **Simulación del termocompresor de vapor:** En el artículo se describe que para la simulación del termocompresor de vapor, se hizo un enlace con el software *MATLAB*:
  - Desde *Aspen HYSYS* se le envían los datos termodinámicos de los flujos que entran al termocompresor.

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

- En *MATLAB* se realizan las operaciones para calcular los datos termodinámicos del flujo de salida del termocompresor.
- Estos cálculos se devuelven a *Aspen HYSYS* para continuar con la simulación.

En este estudio, la simulación del termocompresor de vapor prescinde de la utilización de cálculos en el entorno de *MATLAB*. En su lugar, se ha llevado a cabo un análisis de las ecuaciones previamente enviadas a *MATLAB*, concluyendo que dichos cálculos pueden ser realizados en el entorno de *Aspen HYSYS*.

De acuerdo con la Figura 4.4, se infiere que el termocompresor opera bajo los principios de conservación de masa y energía, donde la presión de salida se modifica para alcanzar un valor intermedio entre las corrientes de baja y alta presión.

Por lo tanto, si:

$vi$  = Vapor impulsor

$vc$  = Vapor comprimido

$vb$  = Vapor de baja presión

Entonces:

$$\begin{aligned}\dot{m}_{vi} + \dot{m}_{vb} &= \dot{m}_{vc} \\ \dot{m}_{vi}h_{vi} + \dot{m}_{vb}h_{vb} &= \dot{m}_{vc}h_{vc} \\ \dot{m}_{vc}h_{vc} &= \dot{m}_{vi}h_{vi} + \dot{m}_{vb}h_{vb} \\ h_{vc}(\dot{m}_{vi} + \dot{m}_{vb}) &= \dot{m}_{vi}h_{vi} + \dot{m}_{vb}h_{vb}\end{aligned}$$

La entalpía específica de la corriente de salida del termocompresor puede calcularse a partir de la mezcla de las corrientes de entrada. Para llevar a cabo esta simulación, se creó un subentorno de simulación (*Subflowsheet*) en el software *Aspen HYSYS*, que incluye dos corrientes de entrada (conocidas como corriente de baja presión y corriente de alta presión, respectivamente) como se muestra en la Figura 4.5.

Dentro de este subentorno de simulación, las corrientes de entrada se mezclan y combinan sus propiedades, llegando a un estado de equilibrio termodinámico en el termocompresor. A partir de este equilibrio, se obtienen los valores de la entalpía específica de la corriente de salida del termocompresor, permitiendo así simular su comportamiento en el sistema.

### 4.3. DESALINIZACIÓN

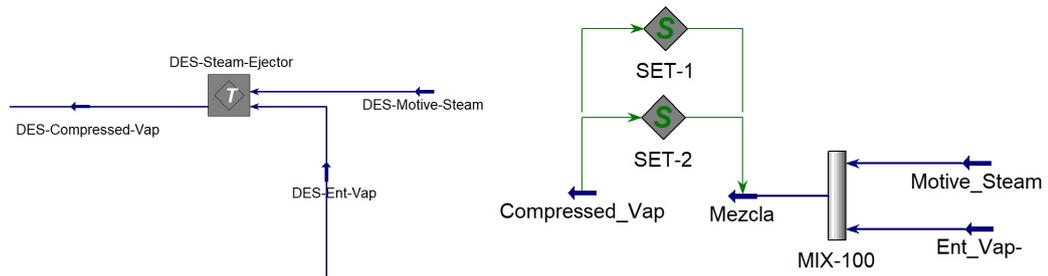


Figura 4.5: Vista exterior e interior del entorno de simulación del termostato de vapor

El flujo másico de la mezcla formada en el termostato de vapor será igual al flujo total eyectado por el termostato de vapor. De manera similar, la entalpía específica de esta mezcla, ya sea en términos molares o másicos, será igual a la entalpía específica de la mezcla formada.

Por lo tanto, se utiliza una corriente predefinida con una composición molar específica (por ejemplo, 100% de agua, utilizando el paquete de fluidos *ASME Steam*), y una presión definida que representa las condiciones industriales reales del proceso (por ejemplo, 0.25 bar) para el vapor eyectado por el termostato de vapor. A esta corriente predefinida se le "trasladan" las propiedades de flujo másico y entalpía específica generadas por la mezcla de las corrientes de entrada.

Este traslado se realiza mediante dos funciones lógicas *Set*, una para establecer el flujo másico y otra para establecer la entalpía específica. Una vez que se ha establecido la presión del sistema y la entalpía específica, el flujo queda definido termodinámicamente, y su temperatura se determina automáticamente.

Este flujo obtenido se define como la salida del subentorno de simulación, representando así el producto del termostato de vapor en el proceso de simulación.

El flujo de salida del termostato de vapor se dirige a un enfriador, donde se condensa y se lleva al estado de líquido saturado. La carga térmica liberada en este intercambiador se utiliza para calentar el primer tanque flash y se sustituye por la carga térmica definida en la primera aproximación del proceso.

El flujo de líquido saturado obtenido en este paso se mezcla con los condensados obtenidos en el segundo y tercer evaporador flash, así como con el condensado obtenido en el primer intercambiador simulado.

Una vez concluida esta primera aproximación, el único grado de libertad restante es la proporción de flujo en el divisor que alimenta al condensador y

el termocompresor de vapor, el cual se ajusta hasta obtener el flujo indicado por Maha y col. (19,432 kg/h) [17]. Una vez obtenido este flujo total de producto, se reajustan las presiones en los tanques flash hasta que el vapor de cada tanque flash salga a 60°C, 50°C y 40°C, respectivamente. Una vez reajustadas las presiones, se vuelve a ajustar el divisor hasta obtener el flujo determinado de salida, repitiéndose este proceso hasta que las condiciones cumplan con las especificaciones. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 5.3.

## 4.4. Endulzamiento de gas

Se prevé que el gas (como materia prima) arrastre varios contaminantes, siendo los más importantes los compuestos azufrados. Con este fin, se considera una sección dedicada a la conversión del gas *amargo* (rico en azufrados) a gas *dulce* (sin compuestos azufrados).

Las bases de esta sección se fundamentaron en los trabajos previos de Erdmann y col. [18] y de Sharif y col. [19]. Del trabajo de Erdmann y col. [18] se tomaron las condiciones de operación del proceso, mientras que del trabajo de Sharif y col. [19] se obtuvieron algunas condiciones específicas para la utilización de MDEA, ya que el estudio de Erdmann y col. [18] se centró en la deshidrodesulfuración con MEA.

### 4.4.1. Descripción

Gas amargo ingresa a un tanque flash, donde se eliminan los líquidos que pueda arrastrar (Figura 4.6). Luego, el gas entra en una columna de absorción por la parte inferior de la misma, y comienza a ascender en contraflujo con una mezcla de amina-agua que ingresa desde la parte superior de la columna a una temperatura ligeramente superior a la del gas. En esta sección, los compuestos azufrados reaccionan con las aminas presentes en la corriente líquida, siendo absorbidos y arrastrados hacia el fondo de la columna.

Los gases limpios, libres de compuestos azufrados, continúan ascendiendo en la columna y finalmente son liberados del proceso.

La mezcla de solventes, que ahora está enriquecida con compuestos azufrados, sale por la parte inferior de la torre y pasa a través de una válvula de estrangulamiento. Luego, ingresa a un tanque flash donde se ventean los compuestos azufrados gaseosos que puedan haberse liberado debido a la caída de presión.

La solución de aminas, que contiene los compuestos azufrados, pasa a través de un intercambiador de calor donde se calienta mediante otra co-

#### 4.4. ENDULZAMIENTO DE GAS

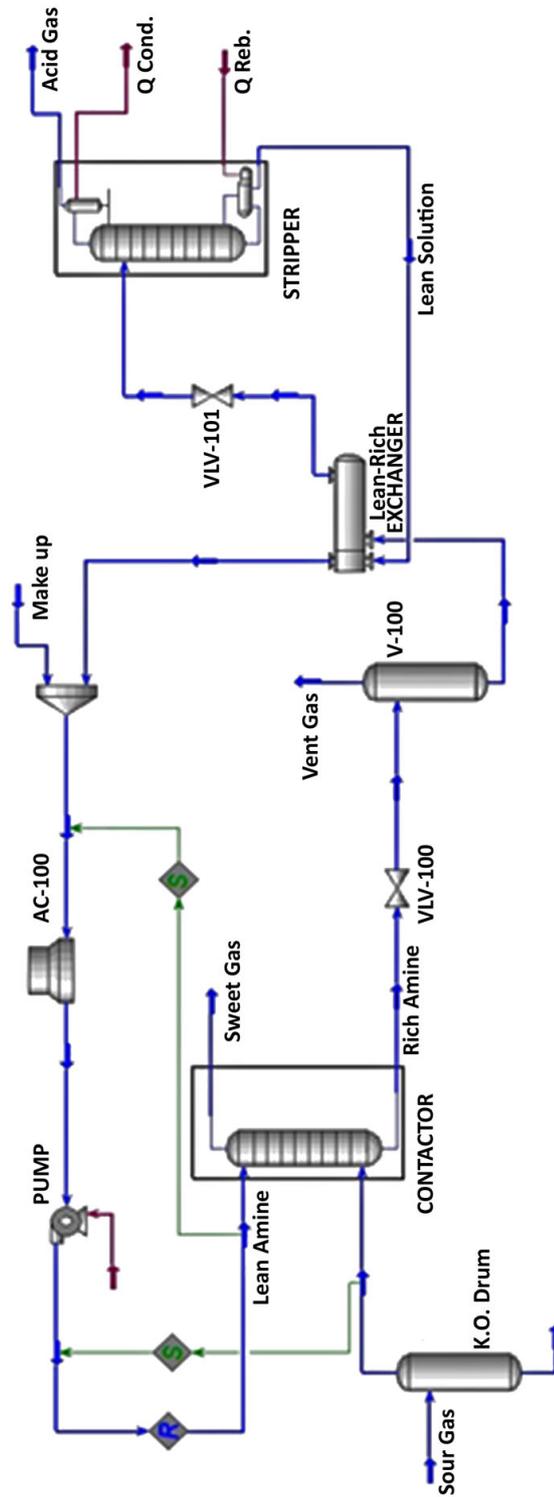


Figura 4.6: Esquema de la planta de desulfuración [19]

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

rriente del ciclo de purificación de amina. Luego, atraviesa una válvula de estrangulamiento para regular su presión antes de ingresar a una columna desorbedora.

En la columna desorbedora, la solución de aminas con compuestos azufrados ingresa por la parte superior de la torre, que se encuentra a baja presión. Esto permite la desorción de los gases azufrados que están disueltos en la solución. Como resultado, los compuestos azufrados se desorben y salen por la parte superior de la torre, arrastrando consigo una parte del agua y amina de la solución. Por otro lado, se obtiene una corriente de aminas libre de azufrados en el fondo de la columna.

Después de salir de la columna desorbedora, la solución de aminas pasa por el mismo intercambiador de calor por el que pasó antes de entrar a la torre, cediendo energía térmica a la corriente que ingresará a la torre y, al mismo tiempo, enfriándose en el proceso.

Posteriormente, a la solución se le repone agua y aminas perdidas debido a la evaporación durante el proceso. Además, se ajusta su temperatura mediante un enfriador con flujo de aire.

Finalmente, la corriente se bombea y se envía como alimentación a la columna de absorción de azufrados, cerrando así el ciclo de purificación de aminas para eliminar los compuestos azufrados del gas. Este proceso de absorción y desorción se repite en un ciclo continuo para mantener la solución de aminas en condiciones adecuadas para la eliminación eficiente de los contaminantes azufrados del gas natural.

### 4.4.2. Simulación

Se seleccionó el paquete de fluidos *Acid Gas* debido a su capacidad para soportar diferentes aminas comúnmente utilizadas en este tipo de procesos, como MEA, DEA, MDEA, entre otras. La lista de componentes considerados en este caso abarcó desde  $C_1$  hasta  $C_8$ . La elección del agente absorbente MDEA se basó en su alta selectividad hacia el  $H_2S$  y su menor selectividad hacia el  $CO_2$  [18]. Además, MDEA tiene una menor presión de vapor en comparación con MEA, lo que permite su uso en concentraciones de hasta el 60 % en peso sin una pérdida apreciable de vaporización. MDEA también tiene un bajo calor específico, baja reactividad térmica y química con  $H_2S$  y  $CO_2$ , mayor resistencia a la degradación térmica y química, y es esencialmente no corrosivo. Además, MDEA tiene una baja miscibilidad con hidrocarburos [20]. Las reacciones químicas entre  $H_2S / H_2O$ ,  $H_2S / DEA$  y  $H_2O / DEA$  ya están incluidas en el paquete de fluidos previamente mencionado [18].

Se utilizó un flujo con la composición descrita por Sharif y col. [19], así como las condiciones reportadas por Erdmann y col. [18] (30 °C y 68.9 bar),

#### 4.4. ENDULZAMIENTO DE GAS

como base para llevar a cabo la simulación del proceso de absorción con MDEA. Este flujo se introduce en un tanque donde se lleva a cabo una separación flash, como se muestra en la Figura 5.8.

Se estableció una mezcla de MDEA y agua con una concentración del 50 % en peso, y se utilizó un flujo de 210 galones por minuto (aproximadamente 50660 kg/h) en la entrada del proceso. Para evitar pérdidas por condensación de hidrocarburos, se definió una temperatura de entrada de la mezcla de amina fresca que es 5 °C mayor que la temperatura del gas amargo de entrada. Por lo tanto, la temperatura de entrada se estableció en 35 °C. La presión de entrada se fijó en 68.65 bar.

Se utilizó una columna absorbidora con 20 platos, donde la mezcla de amina se introduce por la parte superior y el gas de entrada por la parte inferior de la columna, permitiendo el contacto entre ambas mezclas. La presión en la torre de absorción se definió de acuerdo a la presión de la mezcla de amina de entrada.

A través de un estudio de casos (Figura 5.4), se determinó que el flujo óptimo de la solución de amina de entrada a la torre es de 45000 kg/hr, con el objetivo de minimizar las pérdidas por evaporación de MDEA en la parte superior de la torre y reducir la fracción molar de H<sub>2</sub>S en el flujo de salida.

El gas resultante de la parte superior de la torre de absorción presenta una concentración menor a 10<sup>-11</sup> molar y una temperatura de 35.12°C.

El flujo proveniente del fondo de la torre, el cual es rico en H<sub>2</sub>S, se somete a una reducción de presión mediante una válvula estranguladora y se lleva a un tanque flash, donde la presión se disminuye a 4 kg/cm<sup>2</sup> con el objetivo de eliminar los hidrocarburos disueltos en la solución.

Posteriormente, la solución se calienta hasta alcanzar una temperatura de 70°C para facilitar la desorción del gas H<sub>2</sub>S de la solución. Este calentamiento se realiza mediante el uso de una corriente de amina proveniente de la torre de desorción de gas.

La solución pasa por una nueva válvula estranguladora para regular su presión de entrada a la segunda torre, donde llega a 16 psia.

Ingresa por el cuarto plato a una columna de baja presión (4 kg/cm<sup>2</sup>) donde por medio de un calentamiento libera los gases absorbidos. Por la parte superior de la torre sale el gas H<sub>2</sub>S y se controla su la temperatura del reboiler para minimizar perdidas de H<sub>2</sub>O y de amina por evaporación.

En una primera instancia se simula con una torre de destilación, una vez encontrado la temperatura óptima del reboiler (por medio de un estudio de casos) y los flujos de la torre, se simula con una torre de absorción y 2 intercambiadores de calor (uno que será un condensador y otro un reboiler) seguido cada uno de un tanque flash (para separar las fases líquidas y gaseosas de regreso a la torre).

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

Se cuidan varios aspectos en la torre: que la concentración de  $\text{H}_2\text{S}$  en la mezcla de amina regenerada sea menor a  $1 \times 10^{-7}$  y la de  $\text{CO}_2$  menor a  $1 \times 10^{-3}$ . Que la temperatura en el reboiler de la torre tampoco debe exceda los  $126.5 \text{ }^\circ\text{C}$  para impedir la degradación de la MDEA, y que la temperatura en ninguna parte de la torre (a excepción del condensador) disminuya a menos de  $110 \text{ }^\circ\text{C}$  para impedir la corrosión con  $\text{CO}_2$ .

Posteriormente pasan por intercambiador proceso-proceso en donde el flujo de salida de la torre de regeneración se enfría con el flujo de salida de la columna absorbidora.

La corriente, que en este punto tiene una concentración de MDEA mayor al 50 % (debido a las pérdidas por evaporación de agua en la columna regeneradora), se mezcla con una corriente de agua líquida a  $25 \text{ }^\circ\text{C}$  y la misma presión de la corriente MDEA-Agua regenerada, con el propósito de bajar su concentración másica al 50 %, la cantidad de agua a agregar se controla con una función lógica *ADJUST*.

Posteriormente entra a un intercambiador de calor que lo enfría por medio de un flujo de aire, en donde alcanza una temperatura de  $35 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Finalmente entra a un bomba que eleva su presión hasta  $70 \text{ kg/cm}^2$ .

### 4.5. Reformado de gas

El sistema de reformado puede ser definido por dos secciones independientes: zona de combustión, y zona termal y catalítica, con las reacciones mostradas en la Tabla 2.2 y la Figura 2.5.

Varios estudios se han realizado simulando cada sección independientemente, en los que se divide en dos o tres secciones [21], [22], [23]:

1. En la zona de combustión se lleva a cabo la reacción de oxidación parcial.
2. En la zona termal los gases realizan reacciones en fase gaseosa antes de atravesar la zona catalítica.
3. Los productos de la zona termal entran en la zona catalítica, en donde llevan a cabo el resto de reacciones de reformado en fase heterogénea.

Se ha sugerido tradicionalmente, para fines de simulación [22], suponer que la combustión parcial del metano (POX) es una reacción que sucede lo suficientemente rápido en la entrada del reactor, y que es el la primera que se lleva a cabo.

## 4.5. REFORMADO DE GAS

En la región térmica del reactor, se postula que se llevan a cabo las reacciones de Water Gas-Shift (WGS) y Reformado con Vapor en fase Homogénea (SMR). Se asume que la reacción de WGS alcanza rápidamente el equilibrio termodinámico debido a su alta velocidad, a diferencia de la reacción de SMR, que ocurre lejos de su propio equilibrio. Sin embargo, se debe suponer una desviación del equilibrio para que los resultados de la simulación concuerden con los datos experimentales previamente reportados [22].

Finalmente, los gases ingresan al catalizador de lecho fijo, donde se lleva a cabo la reacción catalítica de Water Gas-Shift (WGS) y dos reacciones de Reformado con Vapor en fase Heterogénea (SMRH) a lo largo del reactor, como se muestra en la Tabla 4.6.

Tabla 4.6: Reacciones tradicionales de un reactor ATR

| Zona del reactor | Reacciones                                   | Estequiometría  |
|------------------|--|---|
| Combustión       | Oxidación parcial (POX)                      | $\text{CH}_4 + 1.5\text{O}_2 \longleftrightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$ |
| Zona termal      | Water Gas-Shift (WGS)                        | $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \longleftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$     |
|                  | Reformado con vapor homogéneo (SMR)          | $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \longleftrightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$    |
| Zona catalítica  | Water Gas-Shift (WGS)                        | $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \longleftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$     |
|                  | Reformado con vapor heterogéneo I (SMRH I)   | $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \longleftrightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$    |
|                  | Reformado con vapor heterogéneo II (SMRH II) | $\text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O} \longleftrightarrow \text{CO}_2 + 4\text{H}_2$ |

Con el objetivo de evitar suposiciones acerca de las desviaciones del equilibrio en la reacción de Reformado con Vapor en fase Homogénea (SMR), se ha propuesto que todas las reacciones que tienen lugar en el reactor ocurren en fase heterogénea, y se asigna una velocidad de reacción catalítica a la reacción de combustión, en lugar de asumir que ocurre de forma instantánea, como se ha sugerido en un estudio previo [24]. En este caso, la reacción de oxidación no sería de oxidación parcial, sino de oxidación completa, como se muestra en la Tabla 4.7.

En este trabajo, las reacciones de reformado autotérmico se basarán en las cinéticas obtenidas del estudio realizado por Halabi y col. [24], el cual es una adaptación de los trabajos previos de Xu y Froment [25] y Trimm y Lam [26]. Estas cinéticas fueron desarrolladas para un catalizador de base níquel, con una densidad de 1870 kg/m<sup>3</sup>.

Tabla 4.7: Sistema de reacciones simplificado

| Zona del reactor      | Reacciones                                   | Estequiometría  |
|-----------------------|--|---|
| Totalidad del reactor | Oxidación completa (TOX)                     | $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \longleftrightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$ |
|                       | Water Gas-Shift (WGS)                        | $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \longleftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$     |
|                       | Reformado con vapor heterogéneo I (SMRH I)   | $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \longleftrightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$    |
|                       | Reformado con vapor heterogéneo II (SMRH II) | $\text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O} \longleftrightarrow \text{CO}_2 + 4\text{H}_2$ |

Los modelos cinéticos se muestran en la Tabla 4.8. Los parámetros cinéticos

de Arrhenius y los de adsorción de Van't Hoff y de se muestran en las Tablas 4.9 y 4.10, respectivamente.

Las cuatro ecuaciones se agregaron en un set de reacciones catalíticas en HYSYS, con algunas consideraciones, que se explicaran a continuación:

### Reacción de oxidación total del metano (Combustión del metano TOX)

Esta reacción se dividió en 2 reacciones independientes, ya que las especificaciones de HYSYS no permiten agregar dos términos complementarios en el sentido directo de una reacción (Apéndices 5.9 y 5.10). Ambas partes son importantes ya que la primera refleja la interacción entre metano adsorbido y oxígeno adsorbido y la segunda entre metano adsorbido y oxígeno gaseoso [?].

### Reacciones de reformado y Water Gas-Shift

Para fines de simulación, las 3 últimas ecuaciones de la Tabla 4.8 se reordenaron como se muestra en la Tabla 4.11, en donde se observa que los cocientes  $\frac{k_i}{K_i}$  equivalen a la  $k'$  en sentido inverso para cada reacción.

Aunque los términos utilizados para el cálculo de las constantes de equilibrio ( $K_{equilibrio}$ ) mostrados en la cuarta columna de la Tabla 4.10 permiten obtener estimaciones aceptables, se decidió aprovechar los datos experimentales precargados en la base de datos de Aspen HYSYS para obtener estimaciones más precisas de estos valores. Esto permitirá una mayor precisión en la simulación del proceso de reformado autotérmico en el reactor y una mejor representación de las condiciones reales del sistema.

Utilizando los datos experimentales de la base de datos de HYSYS, se desarrollaron diversas correlaciones para mejorar la precisión de las constantes de equilibrio ( $K_{equilibrio}$ ) y las razones de velocidad de reacción a equilibrio ( $\frac{k_i}{K_i}$ ), especialmente en el rango de temperaturas de 400-1200°C, que es el intervalo donde ocurren las reacciones de reformado.

Los resultados se muestran en la Tabla 4.12 y los Apéndices A.1, A.2, A.3 y 5.11.

Para comprobar el modelo, se realizó la comparativa con los resultados experimentales mostrados por los trabajos de Piña y col. [22] y Nezhad y col. [23], basados en las condiciones experimentales descritas por Christensen y Primdahl (Tabla 4.13).

Los resultados se muestran en las Tablas 5.4 y ??.

#### 4.5. REFORMADO DE GAS

Tabla 4.8: Modelos cinéticos de las reacciones en un reactor ATR [24].

| Reacción | Cinética  |
|----------|---|
| TOX      | $R_{TOX} = \frac{k_{TOX}^a p_{CH_4} p_{O_2}}{(1 + K_{CH_4}^C p_{CH_4} + K_{O_2}^C p_{O_2})^2} + \frac{k_{TOX}^b p_{CH_4} p_{O_2}}{1 + K_{CH_4}^C p_{CH_4} + K_{O_2}^C p_{O_2}}$ |
| WGS      | $R_{WGS} = \frac{k_{WGS}}{p_{H_2}} \left( p_{CO} p_{H_2O} - \frac{p_{H_2} p_{CO_2}}{K_{WGS}} \right) \left( \frac{1}{\Omega^2} \right)$   |
| SMRH I   | $R_{SMRHI} = \frac{k_{SMRHI}}{p_{H_2}^{2.5}} \left( p_{CH_4} p_{H_2O} - \frac{p_{H_2}^3 p_{CO}}{K_{SMRHI}} \right) \left( \frac{1}{\Omega^2} \right)$                           |
| SMRH II  | $R_{SMRHII} = \frac{k_{SMRHII}}{p_{H_2}^{3.5}} \left( p_{CH_4} p_{H_2O}^2 - \frac{p_{H_2}^4 p_{CO_2}}{K_{SMRHII}} \right) \left( \frac{1}{\Omega^2} \right)$                    |
| Donde:   | $\Omega = 1 + K_{CO} p_{CO} + K_{H_2} p_{H_2} + K_{CH_4} p_{CH_4} + K_{H_2O} \frac{p_{H_2O}}{p_{H_2}}$  |

Tabla 4.9: Parámetros cinéticos de Arrhenius y constantes de equilibrio de reacción [24].

| Reacción         | $k_{0j}$<br>mol/(kg <sub>cat</sub> s)         | $E_j$<br>mol | $K$   |
|------------------|---|--------------|---|
| TOX <sup>a</sup> | $8.11 \times 10^5$                            | 86,000       | -   |
| TOX <sup>b</sup> | $6.68 \times 10^5$                            | 86,000       | -   |
| WGS              | $5.43 \times 10^5$                            | 67,130       | $\exp\left(\frac{4,400}{T} - 4.036\right) \text{ bar}^{-1}$     |
| SMRH I           | $1.17 \times 10^{15}$                         | 240,100      | $\exp\left(\frac{-26,830}{T} + 30.114\right) \text{ bar}^{0.5}$ |
| SMRH II          | $2.83 \times 10^{14}$                         | 243,900      | $K_{SMRHII} = K_{WGS} K_{SMRHI} \text{ bar}^{0.5}$              |
| Donde:           | $k = k_{0j} \exp\left(\frac{-E_j}{RT}\right)$ |              | T en Kelvin   |

Tabla 4.10: Parámetros de Van't Hoff de adsorción de especies [24].

| Molécula          | $K_{0i}$ (bar <sup>-1</sup> )                                 | $\Delta H_i$ (J/mol) |
|-------------------|---|----------------------|
| CH <sub>4</sub>   | $6.65 \times 10^{-4}$   | -38,280              |
| CO                | $8.23 \times 10^{-5}$   | -70,650              |
| H <sub>2</sub>    | $6.12 \times 10^{-9}$   | -82,900              |
| H <sub>2</sub> O  | $1.77 \times 10^5$ (bar)                                      | 88,680               |
| CH <sub>4</sub> * | $1.26 \times 10^{-1}$   | -27,300              |
| O <sub>2</sub> *  | $7.78 \times 10^{-7}$   | -92,800              |
| Donde:            | $K_i = K_{0i} \times \exp\left(\frac{-\Delta H_i}{RT}\right)$ |                      |

\*En la reacción de combustión total (TOX)

Tabla 4.11: Rearreglo de los modelos cinéticos

| Reacción | Cinética  |
|----------|---|
| WGS      | $R_{WGS} = \left( k_{WGS} \frac{p_{CO} p_{H_2O}}{p_{H_2}} - k'_{WGS} p_{CO_2} \right) \left( \frac{1}{\Omega^2} \right)$                                  |
| SMRH I   | $R_{SMRHI} = \left( k_{SMRHI} \frac{p_{CH_4} p_{H_2O}}{p_{H_2}^{2.5}} - k'_{SMRHI} p_{H_2}^{0.5} p_{CO} \right) \left( \frac{1}{\Omega^2} \right)$        |
| SMRH II  | $R_{SMRHII} = \left( k_{SMRHII} \frac{p_{CH_4} p_{H_2O}^2}{p_{H_2}^{3.5}} - k'_{SMRHII} p_{H_2}^{0.5} p_{CO_2} \right) \left( \frac{1}{\Omega^2} \right)$ |
| Donde:   | $k'_i = k_i / K_i$  |

 Tabla 4.12: Coeficientes de nuevas correlaciones para  $k'$  y  $K_{eq}$ 

| Reacción | $k'_{0j}$<br>mol/(kg <sub>cat</sub> s)  | $E'_j$<br>J/mol | $\beta$  | A          | B         | C           |
|----------|---|-----------------|----------|------------|-----------|-------------|
| WGS      | $2.77075 \times 10^{11}$  | 111,669.74      | -1.17308 | 5,386.89   | -13.35995 | 1.20016     |
| SMRH I   | 844,398.26  | 24,848.04       | -1.17500 | -25,887.44 | 21.03796  | 1.17645     |
| SMRH II  | $1.13374 \times 10^{11}$  | 73,252.35       | -2.35904 | -20,509.16 | 7.74783   | 2.36781     |
| Donde:   | $k' = \frac{k_i}{K_i} = k'_{0j} \exp\left(\frac{-E'_j}{RT}\right) \times T^\beta$ |                 |          |            |           | T en Kelvin |
|          | $K_{eq} = \exp\left(\frac{A}{T} + B + C \ln(T)\right)$                            |                 |          |            |           |             |

## Reacciones de reformado y oxidación de etano y propano

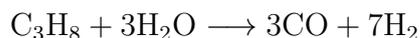
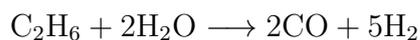
Una vez validado el sistema de reacciones para el metano, se decidió agregar un prerreformador en el cual el etano y el propano presentes en en gas natural, se conviertan a  $CH_4$ ,  $CO_2$  e  $H_2$ , debido a que la presencia de etano y/o propano favorece la aparición de hulla en las reacciones de oxidación del reactor ATR, por lo tanto, la eliminación de estos componentes es un fenómeno deseado, estas reacciones de reformado suceden a temperatura mas bajas que la del reformado autotérmico del metano [28], y se ven acompañadas de las reacciones de reformado de metano y la reacción WGS. Por lo tanto, las reacciones que suceden en el prerreformador son:

## 4.5. REFORMADO DE GAS

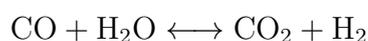
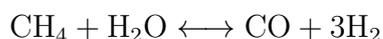
Tabla 4.13: Condiciones de referencia a la entrada de dos reactores ATR industriales [27].

| Parametro                         | Reactor A | Reactor B |
|-----------------------------------|-----------|-----------|
| Diametro interno (m)              | 1.0       | _*        |
| Longitud (m)                      | 0.74      | 0.35      |
| <b>Alimentación</b>               |           |           |
| Flujo de Gas (Nm <sup>3</sup> /h) | 3500      | -         |
| Temperatura (°C)                  | 550       | 973.15    |
| Presión (bar)                     | 25        | 21        |
| H <sub>2</sub> O/C                | 1.4       | 0.6       |
| CO <sub>2</sub> /C                | 0.02      | 0.12      |
| O <sup>2</sup> /C                 | 0.54      | 0.59      |

\*Valores no reportados



Adicionales :



Se utilizaron las reacciones cinéticas reportadas por Liyan Ma.[29], y que se muestran en la Tabla 4.14, las cinéticas también están basadas en un catalizador base níquel (Ni/MgO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) con un área BET de 15.5 m<sup>2</sup>/g, como aproximación, se usó la misma densidad que para el catalizador anterior (1870 kg/m<sup>3</sup>).

Tabla 4.14: Parametros cineticos del reformado de etano y propano [29].

| Hidrocarburo | Parámetros cinéticos   |                           |      |       |      |      |
|--------------|--|---------------------------|------|-------|------|------|
|              | k <sub>0</sub> (mol/m <sup>2</sup> h kPa <sup>α+β</sup> )  | E <sub>a</sub> (kcal/mol) | α    | β     | δ    | θ    |
| Metano       | 152.5  | 14.3                      | 0.96 | -0.17 | 0.25 | 1.00 |
| Etano        | 30488  | 19.2                      | 0.95 | -0.46 | 0.38 | 1.00 |
| Propano      | 2.1428×10 <sup>14</sup>  | 45.3                      | 0.93 | -0.53 | 0.86 | 1.00 |
| Modelo:      | $\frac{-d(RH)}{dt} = \frac{k_0 e^{-\frac{E_a}{RT}} P_{HC}^\alpha P_{H_2O}^\beta}{1 + \theta P_{H_2}^\delta}$ |                           |      |       |      |      |

Adicional a las reacciones pasadas se usaron de nueva cuenta las cinéticas de las reacciones SMR I del metano y la reacción WGS descritas anteriormente.

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

Finalmente, se agregaron las reacciones de oxidación catalítica de las trazas de etano y propano que no hayan reaccionado en el prerreformador y que hayan ingresado en el reactor ATR. Las cinéticas de estas reacciones siguen las leyes de potencias. El modelo y los parámetros cinéticos se muestran en la Tabla 4.15.

Tabla 4.15: Parámetros y modelo cinético para la oxidación total (combustión) del etano y propano [30].

| Hidrocarburo | Parámetros cinéticos   |                                  |          |         |
|--------------|--|----------------------------------|----------|---------|
|              | $k$ ( $\text{mol}/\text{m}^2 \text{ h kPa}^{\alpha+\beta}$ ) | $E_a$ ( $\text{kJ}/\text{mol}$ ) | $\alpha$ | $\beta$ |
| Etano        | $3.49 \times 10^5$   | 80.4                             | 1.1      | -0.6    |
| Propano      | $1.87 \times 10^9$   | 104.7                            | 1.1      | -0.6    |
| Modelo:      | $-\frac{d(RH)}{dt} = k(RH)^\alpha(O_2)^\beta$                |                                  |          |         |

### 4.5.1. Descripción

Después de tener el sistema prerreformador-reformador, se usó un sistema de integración de energía (Figura 4.7), adaptado del trabajo de Faraz Q. y col. [21].

Gas natural a 400 °C y vapor a 300 °C son mezclados y calentados hasta alcanzar 598 °C. Una corriente de oxígeno puro entra y se eleva su temperatura hasta alcanzar los 200 °C, todas las corrientes se encuentran a 2,500 kPa.

La mezcla gas natural/vapor y la corriente de oxígeno se introducen en el sistema de reacción donde los gases abandonan el reactor de reformado a una temperatura de 750 °C.

La mezcla de gases calientes calienta la mezcla gas natural/vapor antes de entrar al sistema de reacción para posteriormente calentar la corriente de oxígeno que entrará al sistema de reacción.

Los gases se siguen enfriando y entran a un sistema donde se les elimina la humedad presente, posteriormente se le elimina el metano, el cual se recircula y se mezcla con el sistema de alimentación al prerreformador. Finalmente la mezcla sale del sistema.

### 4.5.2. Simulación

Se usó el paquete de fluidos Peng-Robinson. En un sistema a 2,100 kPa (Figura 5.16) una corriente de vapor a 300 °C se mezcla con una corriente de gas natural a 400 °C, y la mezcla se calienta hasta alcanzar los 500 °C y entra a un prerreformador, en donde el etano y propano presentes se descomponen

#### 4.5. REFORMADO DE GAS

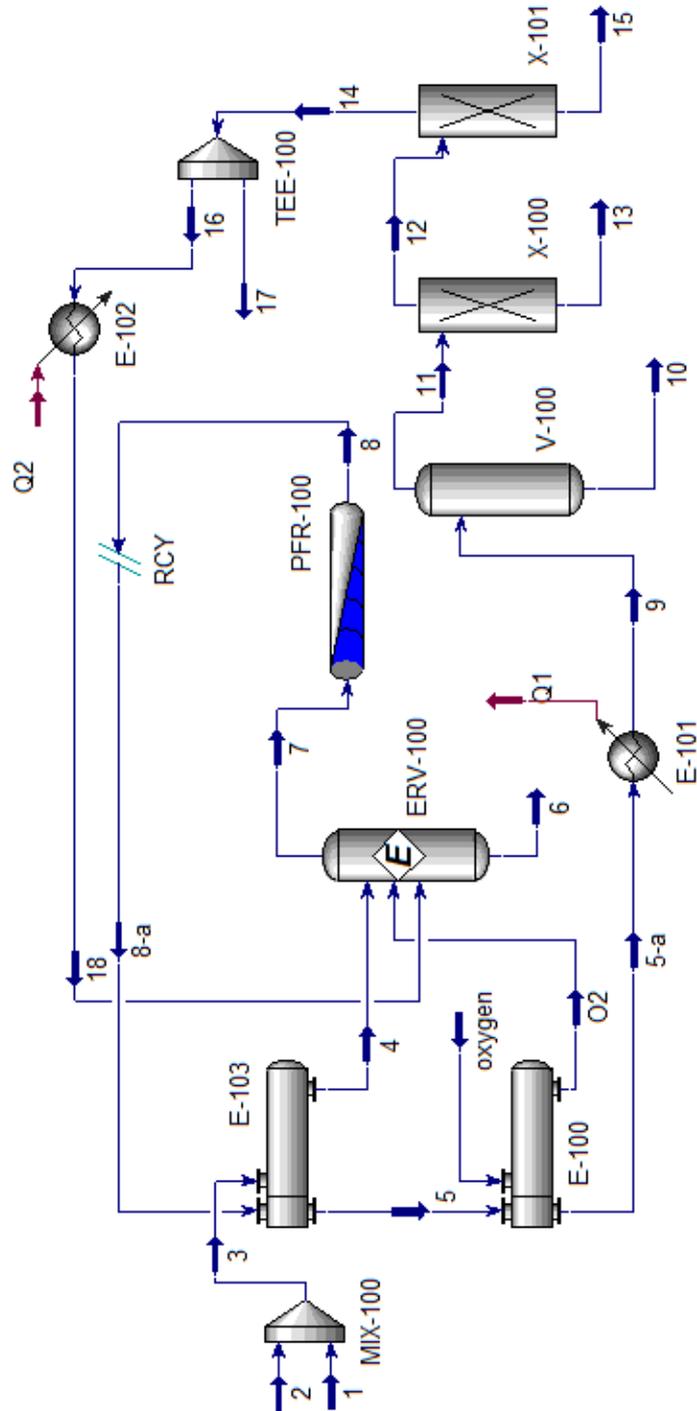


Figura 4.7: Esquema del sistema de reformado ATR

## CAPÍTULO 4. SIMULACIONES

en CO e H<sub>2</sub>, inmediatamente ocurren dos reacciones más, parte del CO y del H<sub>2</sub>O sufren la reacción WGS y forman CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>, sin embargo H<sub>2</sub> y CO sufren la reacción de reformado de CH<sub>4</sub> en el sentido inverso (reacción de metanación), formando CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>O.

Los gases con pocas muy pocas cantidades de etano y propano salen del prerreformador y se calientan hasta alcanzar la temperatura de 598 °C.

Oxígeno entra al sistema y se calienta hasta los 200 °C, en donde se mezclan con los gases prerreformados calentados a 598 °C, la mezcla entra al reactor ATR, en donde ocurren las reacciones de oxidación del metano (y del etano y propano restante), en donde alcanzan temperaturas cercanas a los 1600 °C, el calor de la combustión activa la reacción de reformado en donde se convierte en CO y H<sub>2</sub>.

Los gases calientes salen del reactor en donde calientan los gases de entrada al reactor ATR, los gases de entrada al prerreformador y al flujo de oxígeno en ese orden. Después los gases salen y abandonan el sistema de reacción.

### 4.6. Deshidratación de gas

Los gases generados en la etapa previa se caracterizan por encontrarse a alta temperatura y contener una considerable cantidad de agua. La presencia de esta alta humedad en el gas afecta negativamente al sistema de reacción Fischer-Tropsch, inhibiendo el avance de las reacciones y reduciendo la eficiencia del proceso. Por lo tanto, el siguiente paso en el proceso es el diseño y simulación de un sistema de deshidratación del gas. Este sistema se basa en el trabajo previo realizado por Rachid y col. [31], que propone el uso de TEG (trietilenglicol) como absorbente químico para la deshidratación del gas, con el objetivo de eliminar la humedad presente en el gas y mejorar las condiciones para el proceso de reacción Fischer-Tropsch.

El esquema del sistema y las especificaciones de equipos se muestran en la Figura 4.8 y la Tabla 4.16.

#### 4.6.1. Descripción

Gas húmedo a baja temperatura y alta presión entra por la parte inferior de una torre de absorción, (Figura 4.8) en donde entra en contacto con TEG, se deshidrata y sale por la parte superior de la torre, finalmente pasa por un intercambiador de calor proceso-proceso en donde eleva ligeramente su temperatura.

TEG entra por la parte superior de la torre de absorción y sale por el fondo rico en H<sub>2</sub>O, flujo se calienta actuando como condensador de la torre

#### 4.6. DESHIDRATACIÓN DE GAS

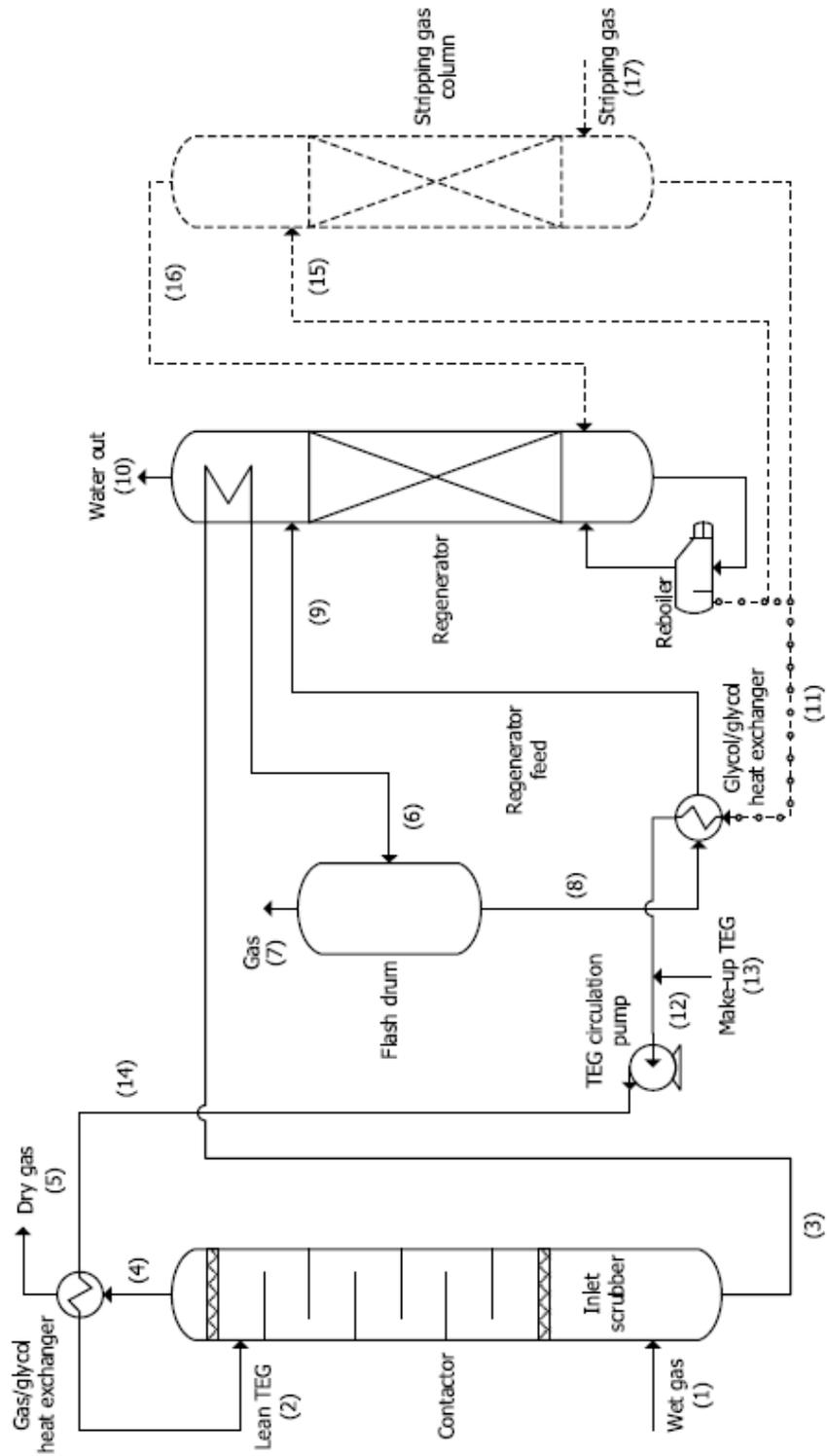


Figura 4.8: Esquema del sistema de deshidratación

Tabla 4.16: Condiciones de corrientes en planta de deshidratación [31]

| Corriente | $\dot{m}$<br>(kg/s)     | T<br>°C | P<br>(kPa) | Composición (% mol) |           |           |
|-----------|-------------------------|---------|------------|---------------------|-----------|-----------|
|           |                         |         |            | $C_1 + C_2$         | $H_2O$    | TEG       |
| 1         | 19.1904                 | 37.75   | 4137       | 0.9981030           | 0.0018970 | -         |
| 2         | 0.6733                  | 46.15   | 4137       | -                   | 0.0100009 | 0.9899991 |
| 3         | 0.7071                  | 39.15   | 4137       | 0.0007841           | 0.0565523 | 0.9426637 |
| 4         | 19.1566                 | 39.65   | 4137       | 0.9998331           | 0.0001645 | 0.0000024 |
| 5         | 19.1566                 | 40.75   | 4137       | 0.9998331           | 0.0001645 | 0.0000024 |
| 6         | 0.7071                  | 49.45   | 532        | 0.0007841           | 0.0565523 | 0.9426637 |
| 7         | $4.6576 \times 10^{-4}$ | 49.45   | 532        | 0.9944687           | 0.0055237 | 0.0000076 |
| 8         | 0.7066                  | 49.45   | 532        | 0.0001291           | 0.0565859 | 0.9432850 |
| 9         | 0.7066                  | 155.95  | 101        | 0.0001291           | 0.0565859 | 0.9432850 |
| 10        | 0.0333                  | 101.65  | 101        | 0.0027346           | 0.9971554 | 0.0001100 |
| 11        | 0.6732                  | 202.05  | 101        | -                   | 0.0099991 | 0.9900009 |
| 12        | 0.6732                  | 71.85   | 101        | -                   | 0.0099991 | 0.9900009 |
| 13        | $3.7036 \times 10^{-6}$ | 71.85   | 101        | -                   | 0.0099991 | 0.9900009 |
| 14        | 0.6732                  | 81.25   | 4137       | -                   | 0.0099991 | 0.9900009 |

de regeneración. Después disminuye su presión y entra a un tanque flash en donde se separan la mayor parte de los hidrocarburos disueltos en forma de gas.

Los líquidos con TEG pasan por otro intercambiador proceso-proceso donde se calienta con los fondos de la torre regeneradora. Vuelve a disminuir su presión hasta alcanzar la presión atmosférica y entra a la torre regeneradora.

De la parte superior de la torre regeneradora se expulsa el  $H_2O$  absorbido en la torre de absorción por la parte inferior sale TEG enriquecido, intercambia calor con la mezcla que entrará por la parte superior de la torre regeneradora enfriándose en el proceso. Al TEG enriquecido se le repone TEG fresco y se comprime hasta alcanzar la presión de la torre de absorción, finalmente intercambia calor con el flujo de salida superior de la torre de absorción, entra por la parte superior de la torre de absorción cerrando el ciclo.

#### 4.6.2. Simulación

Se definió una lista con los componentes necesarios, dado a que se utilizará glicol, el paquete de fluidos elegido es *Glycol package*. Se definieron dos corrientes con las composiciones y condiciones termodinámicas descritas por Rachid [31], de las cuales una (el gas) entra por la parte inferior de la torre de absorción y otra (glicol) entra por la parte superior (Figura 5.17). La torre se encuentra a 4137 kPa y cuenta con 2 etapas.

Se hace pasar la corriente de glicol que sale por la parte inferior de

#### 4.6. DESHIDRATACIÓN DE GAS

la torre por un intercambiador de calor (DHO-HEX-01), en una primera instancia se define la cantidad de calor intercambiado como 0 kJ/hr, es decir, sin calentamiento, ya que este debe funcionar como el condensador de la torre regeneradora, la cual en este punto aún no se encuentra definido. Después de ello se definió que la corriente pase por una válvula estranguladora, disminuyendo su presión hasta alcanzar 532 kPa, formandose 2 fases, estando la fase gaseosa compuesta por los hidrocarburos arrastrados en la torre absorbadora. Las fases se separan haciendo entrar a las corrientes en un separador (tanque) flash.

Las corrientes liquidas entran a otro intercambiador de calor proceso-proceso (DHO-HEX-02), en donde se fija su temperatura de salida por medio de una función logica *Adjust* para alcanzar una temperatura de 155.95 °C en la corriente que entrará en la torre regeneradora.

La corriente pasa por una nueva válvula estranguladora hasta alcanzar la presión de 1 atmósfera. La corriente de este punto es la descrita anteriormente, la cual debe alcanzar 155.95 °C a la salida de la válvula.

La corriente entra a la torre regeneradora, la cual se haya a 1 atmósfera de presión y cuenta con 2 etapas. Las especificaciones de esta torre son la temperatura del condensador y del reboiler, fijándose en 101.65 y 202.05 °C respectivamente. Por la parte superior de la torre sale la humedad absorbida en la torre absorbadora, arrastrando una pequeña cantidad de glicol.

El flujo de calor del condensador, por medio de una función lógica *Recycle* se envía al condensador, con lo que se define definitivamente el condensador de la torre regeneradora. La corriente de glicol regenerado pasa por el intercambiador de calor (DHO-HEX-02) sirviendo como medio de calentamiento, enfriándose en el proceso.

Después de ello esta corriente entra a un mezclador, en donde se mezcla con una corriente fresca de glicol hasta alcanzar un flujo de 0.6732 kg/s, esta adición de glicol tiene como objetivo reponer la cantidad perdida en la parte superior de la torre regeneradora debido a la absorción del agua del gas húmedo. Esta corriente, a 1 atmósfera de presión, entra a una bomba para elevar su presión hasta los 4137 kPa de la torre regeneradora.

Finalmente, antes de entrar a la torre regeneradora, pasa por un intercambiador de calor proceso-proceso (DHO-HEX-03), donde se enfría hasta una temperatura de 46.15 °C, la otra corriente del intercambiador es la corriente gaseosa de salida de la torre absorbadora. La corriente a 46.15 °C entra a una función lógica *Recycle*, siendo la corriente de salida la corriente que entra a la torre absorbadora, donde se cierra el ciclo de deshidratación.

# Capítulo 5

## Resultados

### 5.1. Producción de oxígeno

Los resultados se muestran en la Tabla [5.1](#), estos fueron comparados con los valores reportados por Ebrahimi y col. [[15](#)].

El esquema de simulación se muestra en la Figura [5.1](#).

## 5.1. PRODUCCIÓN DE OXÍGENO

Tabla 5.1: Resultados de la simulación de la planta de oxígeno

| Corriente | $\dot{m}$<br>(kg/hr) | T<br>(°C) | P<br>(kPa) | Composición (% mol) |                |                |                  |
|-----------|----------------------|-----------|------------|---------------------|----------------|----------------|------------------|
|           |                      |           |            | Ar                  | O <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> | H <sub>2</sub> O |
| 1         | 360,000              | 25.00     | 101.33     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 2         | 360,000              | 143.01    | 268.00     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 3         | 360,000              | 30.00     | 258.00     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 4         | 360,000              | 153.17    | 669.01     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 5         | 360,000              | 30.00     | 659.01     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 6         | 115,200              | 30.00     | 659.01     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 7         | 115,200              | 30.00     | 659.01     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 8         | 115,200              | 109.14    | 1209.93    | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 9         | 115,200              | 24.70     | 1199.93    | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 10        | 115,200              | -164.10   | 1189.93    | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 11        | 115,200              | -173.07   | 658.93     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 12        | 244,800              | -163.80   | 649.00     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 13        | 244,800              | -163.80   | 649.00     | 1.00                | 21.00          | 78.00          | -                |
| 14        | 214,518              | -171.86   | 649.00     | 1.52                | 34.87          | 63.61          | -                |
| 15        | 214,518              | -180.60   | 639.00     | 1.52                | 34.87          | 63.61          | -                |
| 16        | 214,518              | -192.44   | 106.00     | 1.52                | 34.87          | 63.61          | -                |
| 17        | 145,493              | -178.60   | 517.00     | 0.27                | 1.53           | 98.20          | -                |
| 18        | 145,493              | -185.70   | 507.00     | 0.27                | 1.53           | 98.20          | -                |
| 19        | 145,493              | -195.29   | 106.00     | 0.27                | 1.53           | 98.20          | -                |
| 20        | 79,111               | -182.75   | 106.00     | 0.01                | 99.99          | 00.00          | -                |
| 21        | 79,111               | -182.59   | 479.97     | 0.01                | 99.99          | 00.00          | -                |
| 22        | 79,111               | 13.60     | 469.97     | 0.01                | 99.99          | 00.00          | -                |
| 23        | 280,833              | -194.94   | 106.00     | 1.23                | 1.36           | 97.41          | -                |
| 24        | 280,833              | -174.64   | 103.50     | 1.23                | 1.36           | 97.41          | -                |
| 25        | 280,833              | 29.98     | 101.33     | 1.23                | 1.36           | 97.41          | -                |
| 26        | 1,399,120            | 20.00     | 101.33     | -                   | -              | -              | 100.00           |
| 27        | 1,399,120            | 20.01     | 330.02     | -                   | -              | -              | 100.00           |
| 28        | 1,399,120            | 21.73     | 320.02     | -                   | -              | -              | 100.00           |
| 29        | 1,399,120            | 29.50     | 310.02     | -                   | -              | -              | 100.00           |
| 30        | 1,399,120            | 36.60     | 300.02     | -                   | -              | -              | 100.00           |

## CAPÍTULO 5. RESULTADOS

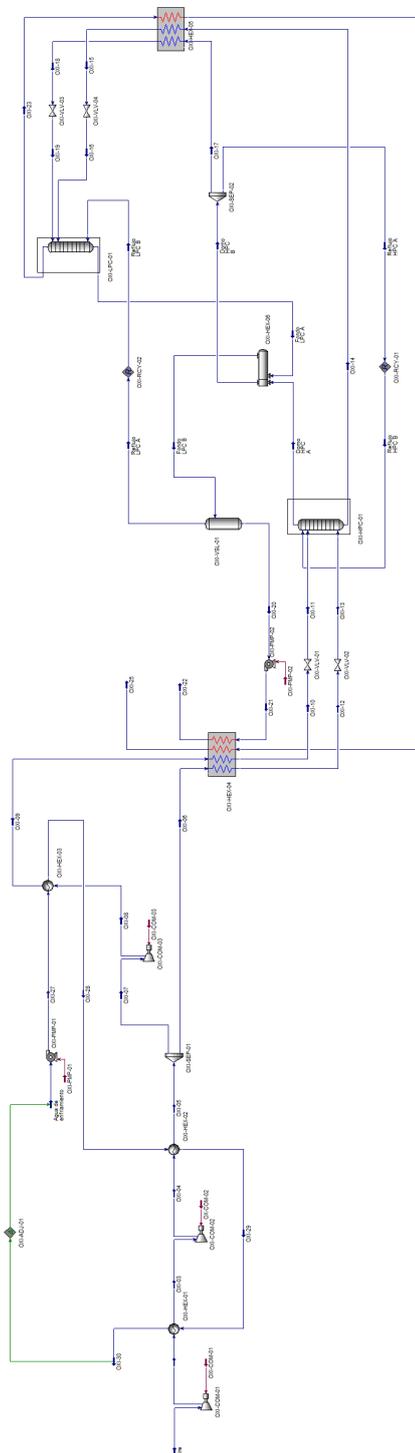


Figura 5.1: Simulación de la planta de oxígeno

## 5.2. COGENERACIÓN

### 5.2. Cogeneración

Los resultados se muestran en la Tabla 5.2, se calculó el error porcentual para evaluar la precisión de la simulación, tal y como se muestra en la Tabla 6.2.

La simulación se muestra en la Figura 5.2

El estudio realizado por Paoli [16] se enfoca en un arreglo específico bajo ciertas condiciones de estudio, y mediante el uso de un enfoque basado en casos y análisis exergético, se obtuvieron condiciones óptimas para el sistema. En el presente trabajo, se replicaron las condiciones óptimas previamente establecidas por Paoli, las cuales fueron presentadas en la Tabla 4.3.

Tabla 5.2: Resultados de la simulación de la planta de cogeneración

| Parametro                    | Propiedad           | Resultado            | Unidad |
|------------------------------|---------------------|----------------------|--------|
| Gas natural                  | Flujo másico        | $1.4333 \times 10^4$ | kg/h   |
|                              | Presión             | 21.00                | bar    |
| Aire                         | Flujo másico        | $6.9207 \times 10^5$ | kg/h   |
|                              | Presión             | 1.00                 | bar    |
| Compresor                    | $\eta$ adiabática   | 88.00                | %      |
|                              | $\eta$ politrópica  | 91.67                | %      |
|                              | Energía             | $8.995 \times 10^4$  | kW     |
| Reactor                      | $\eta$              | 99.99                | %      |
|                              | P ent.              | 21.00                | bar    |
|                              | T sal.              | 1250.00              | °C     |
| Turbina de gas               | $\eta$ adiabática   | 90.00                | %      |
|                              | $\eta$ politrópica  | 86.68                | %      |
|                              | Energía             | $1.492 \times 10^5$  | kW     |
|                              | T sal.              | 632.93               | °C     |
| Economizador de alta presión | UA                  | $4.698 \times 10^5$  | kJ/h°C |
|                              | $\Delta P$ Coraza * | 0.05                 | bar    |
|                              | $\Delta P$ Tubos *  | 0.20                 | bar    |
|                              | T ent. agua         | 111.4                | °C     |
|                              | T sal. gas          | 307.6                | °C     |
| Evaporador de alta presión   | UA                  | $6.873 \times 10^5$  | kJ/h°C |
|                              | T ent. agua         | 309.8                | °C     |
|                              | T sal. gas          | 409.8                | °C     |

*Continúa en la página siguiente*

CAPÍTULO 5. RESULTADOS

| Parametro                        | Propiedad         | Resultado           | Unidad |
|----------------------------------|-------------------|---------------------|--------|
| Recalentador                     | UA                | $1.235 \times 10^5$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 341.51              | °C     |
|                                  | T sal. agua       | 450.00              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 543.52              | °C     |
| Sobrecalentador de alta presión  | UA                | $4.698 \times 10^5$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 309.78              | °C     |
|                                  | T sal. agua       | 564.40              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 566.48              | °C     |
| Economizador de media presión    | UA                | $3.244 \times 10^5$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 110.30              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 217.30              | °C     |
| Evaporador de media presión      | UA                | $1.252 \times 10^6$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 219.87              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 234.96              | °C     |
| Sobrecalentador de media presión | UA                | $1.038 \times 10^5$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 219.87              | °C     |
|                                  | T sal. agua       | 290.00              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 302.23              | °C     |
| Economizador de baja presión     | UA                | $1.069 \times 10^5$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 110.04              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 162.07              | °C     |
| Evaporador de baja presión       | UA                | $1.057 \times 10^6$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 150.30              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 166.24              | °C     |
| Sobrecalentador de baja presión  | UA                | $4.948 \times 10^4$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 149.04              | °C     |
|                                  | T sal. agua       | 200.00              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 214.99              | °C     |
| Economizador                     | UA                | $9.295 \times 10^5$ | kJ/h°C |
|                                  | T ent. agua       | 110.00              | °C     |
|                                  | T sal. agua       | 110.00              | °C     |
|                                  | T sal. gas        | 104.03              | °C     |
| Agua                             | Flujo másico      | $1.247 \times 10^5$ | kg/h   |
|                                  | Presión           | 2.20                | bar    |
| Bomba de alta presión            | $\eta$ adiabática | 75.00               | %      |
|                                  | $\Delta P$        | 98.00               | bar    |
|                                  | Trabajo           | 308.35              | kW     |
|                                  | Flujo             | $7.980 \times 10^4$ | kg/h   |

*Continúa en la página siguiente*

## 5.2. COGENERACIÓN

| Parametro                         | Propiedad          | Resultado           | Unidad |
|-----------------------------------|--------------------|---------------------|--------|
| Bomba de media presión            | $\eta$ adiabática  | 75.00               | %      |
|                                   | $\Delta P$         | 21.26               | bar    |
|                                   | Trabajo            | 22.994              | kW     |
|                                   | Flujo              | $2.743 \times 10^4$ | kg/h   |
| Bomba de baja presión             | $\eta$ adiabática  | 75.00               | %      |
|                                   | $\Delta P$         | 3.00                | bar    |
|                                   | Trabajo            | 2.065               | kW     |
|                                   | Flujo              | $1.746 \times 10^4$ | kg/h   |
| Turbina de vapor de alta presión  | $\eta$ adiabática  | 90.00               | %      |
|                                   | $\eta$ politrópica | 88.28               | %      |
|                                   | Trabajo            | $9.014 \times 10^3$ | kW     |
|                                   | P. salida          | 22.86               | bar    |
| Turbina de vapor de media presión | $\eta$ adiabática  | 90.00               | %      |
|                                   | $\eta$ politrópica | 88.03               | %      |
|                                   | Trabajo            | $1.118 \times 10^4$ | kW     |
|                                   | P. salida          | 4.4                 | bar    |
| Turbina de vapor de baja presión  | $\eta$ adiabática  | 90.00               | %      |
|                                   | $\eta$ politrópica | 88.04               | %      |
|                                   | Trabajo            | $1.948 \times 10^4$ | kW     |
|                                   | P. salida          | 0.09                | bar    |
| Condensador                       | $\Delta P$         | 0.05                | bar    |
|                                   | Carga térmica      | $2.773 \times 10^8$ | kJ/h   |
| Bomba                             | $\eta$ adiabática  | 75.00               | %      |
|                                   | $\Delta P$         | 2.20                | bar    |
|                                   | Trabajo            | 10.12               | kW     |

\* La caída de presión de todos los intercambiadores es la misma en los lados tubos y lados coraza.

## CAPÍTULO 5. RESULTADOS

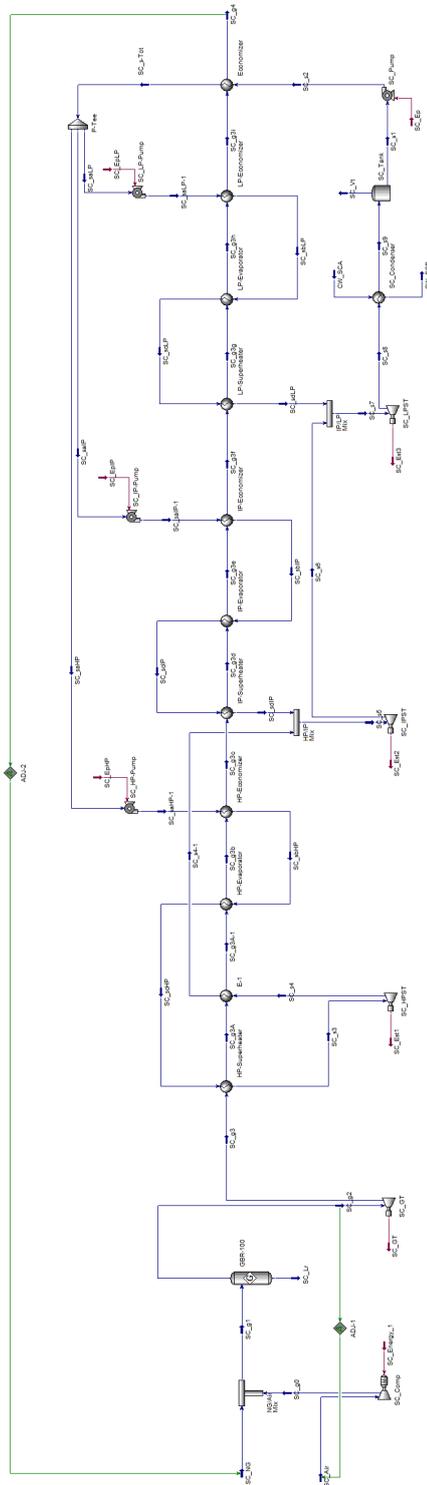


Figura 5.2: Simulación de la planta de cogeneración

### 5.3. DESALINIZACIÓN

## 5.3. Desalinización

Los resultados se muestran en la Tabla 5.3. La simulación se muestra en la Figura 5.3.

En la Figura 6.1 se comparan las presiones de los evaporadores simulados en este trabajo, las industriales y los resultados reportados por Maha y col. [17].

Tabla 5.3: Resultados de la simulación de la planta de desalinización

| Parametro               | Propiedad                             | Resultado | Unidad               |
|-------------------------|---------------------------------------|-----------|----------------------|
| Evaporador flash 1      | Vapor de calentamiento                | 6,831     | kg/h                 |
|                         | Vapor generado                        | 6,069     | kg/h                 |
|                         | Carga térmica                         | 4,640     | kW                   |
|                         | Coefficiente de transferencia térmica | 1.7774    | kW/m <sup>2</sup> °C |
|                         | Presión                               | 19.58     | kPa                  |
| Evaporador flash 2      | Vapor de calentamiento                | 6,069     | kg/h                 |
|                         | Vapor generado                        | 5,358     | kg/h                 |
|                         | Carga térmica                         | 3,983     | kW                   |
|                         | Coefficiente de transferencia térmica | 1.7807    | kW/m <sup>2</sup> °C |
|                         | Presión                               | 12.14     | kPa                  |
| Evaporador flash 3      | Vapor de calentamiento                | 6,069     | kg/h                 |
|                         | Vapor generado                        | 5,006     | kg/h                 |
|                         | Carga térmica                         | 3,553     | kW                   |
|                         | Coefficiente de transferencia térmica | 1.8120    | kW/m <sup>2</sup> °C |
|                         | Presión                               | 7.26      | kPa                  |
| Condensador             | Vapor de calentamiento                | 1,174     | kg/h                 |
|                         | Carga térmica                         | 786       | kW                   |
|                         | Coefficiente de transferencia térmica | 2.9891    | kW/m <sup>2</sup> °C |
| Termocompresor de vapor | Temperatura de salida del vapor       | 91.45     | °C                   |
|                         | Vapor comprimido                      | 3,831     | kg/h                 |
|                         | Coefficiente de rendimiento           | 6.47      |                      |
|                         | Coefficiente de compresión            | 3.44      |                      |



#### 5.4. ENDULZAMIENTO DE GAS

### 5.4. Endulzamiento de gas

Para determinar la cantidad óptima de amina, se llevó a cabo un estudio de casos en el cual se analizó el flujo másico de amina utilizada en función de la concentración de  $H_2S$  en el gas endulzado, así como la cantidad de amina utilizada en función del flujo de salida de gas. Esto se debe a que parte del gas es arrastrado por la amina a contracorriente, lo cual requiere mantener un equilibrio adecuado entre la composición del gas de salida y las pérdidas por arrastre. La representación gráfica de este estudio de casos se muestra en la Figura 5.4.

Una vez determinada la cantidad óptima de amina a utilizar, se procedió a obtener el perfil de absorción de  $H_2S$  en la torre absorbedora de  $H_2S$ . El perfil de absorción se representa gráficamente en la Figura 5.5.

De manera similar, se obtuvieron los perfiles de concentración de  $H_2S$  y  $CO_2$  en la torre regeneradora de amina. Estos perfiles se representan gráficamente en la Figura 5.6 y la Figura 5.7, respectivamente.

La simulación se muestra en la Figura 5.8.

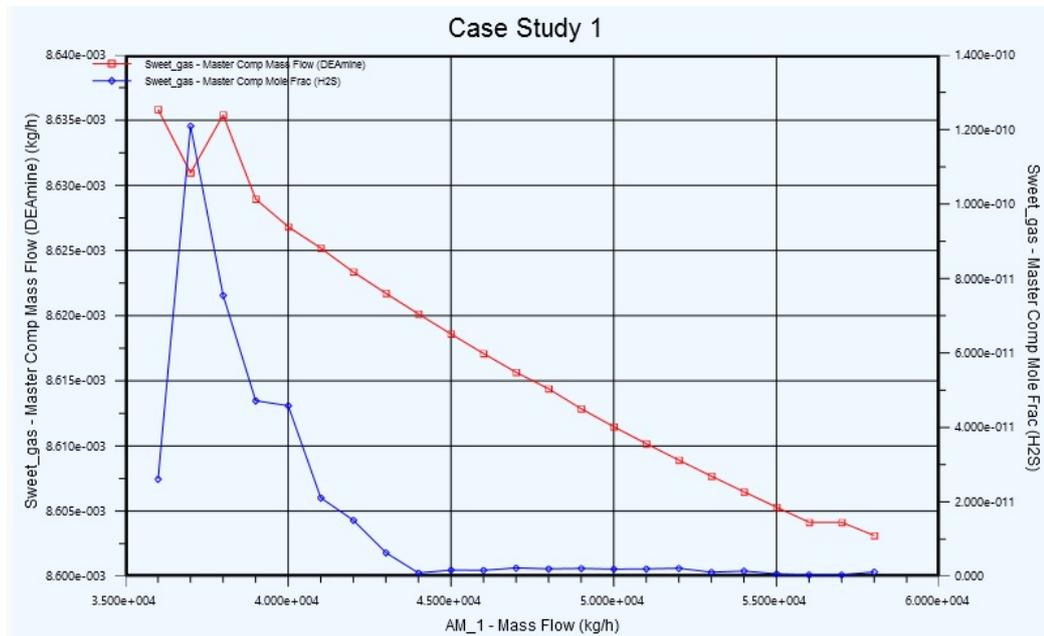


Figura 5.4: Caso de estudio del absorbedor con amina

## CAPÍTULO 5. RESULTADOS



Figura 5.5: Perfil de la concentración de absorción de H<sub>2</sub>S

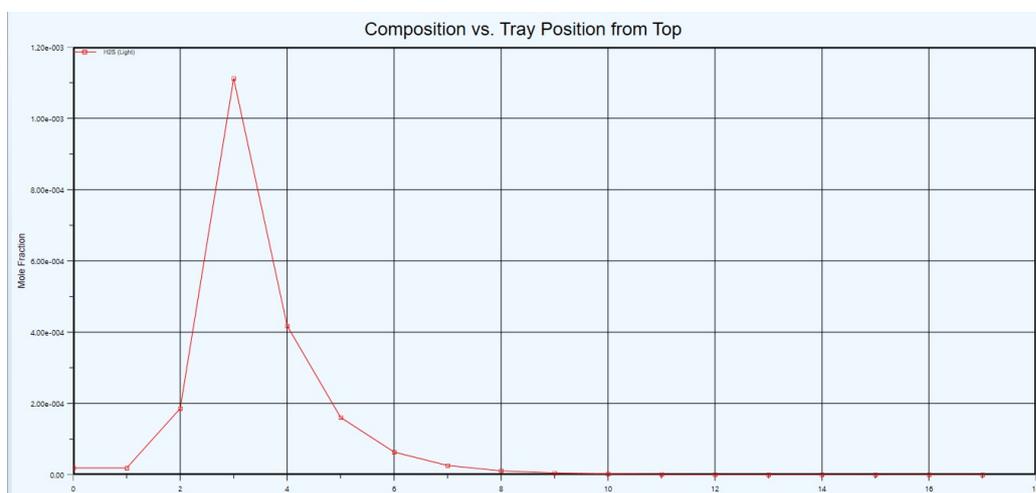


Figura 5.6: Perfil de la concentración de desorción de H<sub>2</sub>S en la torre de regeneración

## 5.5. REFORMADO DE GAS

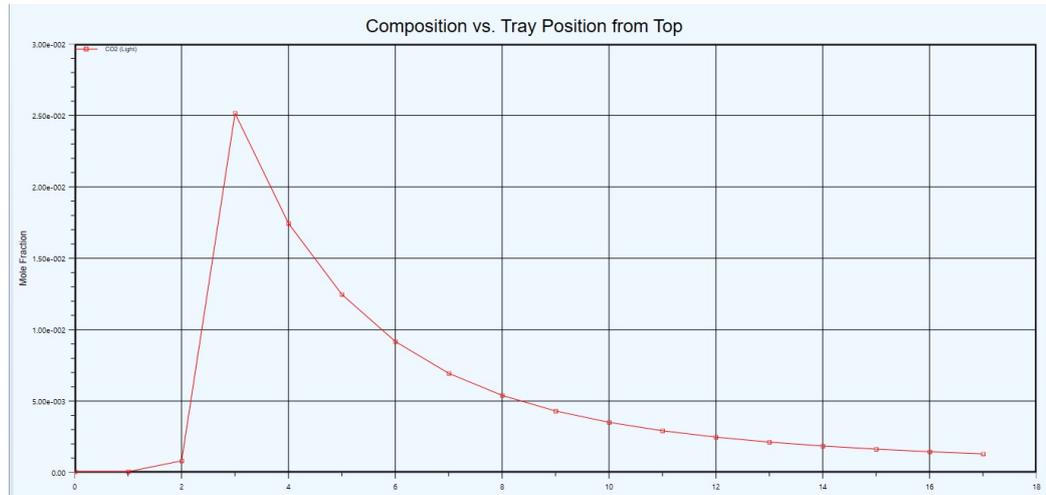


Figura 5.7: Perfil de la concentración de desorción de CO<sub>2</sub> en la torre de regeneración

## 5.5. Reformado de gas

En la Figura 5.9, Figura 5.10 y Figura 5.11, se muestra el modo de introducción de las cinéticas encontradas en el entorno Aspen HYSYS.

En la Figura 5.12 y 5.13, se muestran los perfiles de concentraciones de componentes en cada uno de los reactores.

En la Figura 5.14 y la Figura 5.15, se presentan los perfiles de temperaturas en los reactores.

En la Tabla 5.4 se presentan los resultados obtenidos del presente trabajo. El esquema de simulación se presenta en la Figura 5.16.

Tabla 5.4: Condiciones de salida en el reactor ATR A.

| Propiedad                     | Reactor A | Reactor B |
|-------------------------------|-----------|-----------|
| Temperatura (°C)              | 950       | 1025.21   |
| Presión (bar)                 | 25        | 21        |
| H <sub>2</sub> (% base seca)  | 66.0      | 62.2      |
| N <sub>2</sub> (% base seca)  | 1.2       | 0.00      |
| CO (% base seca)              | 22.1      | 30.41     |
| CO <sub>2</sub> (% base seca) | 9.2       | 6.74      |
| Ar (% base seca)              | 0.1       | 0.00      |
| CH <sub>4</sub> (% base seca) | 1.4       | 0.63      |
| H <sub>2</sub> O (% mol)      | 28.7      | 19.51     |

## CAPÍTULO 5. RESULTADOS

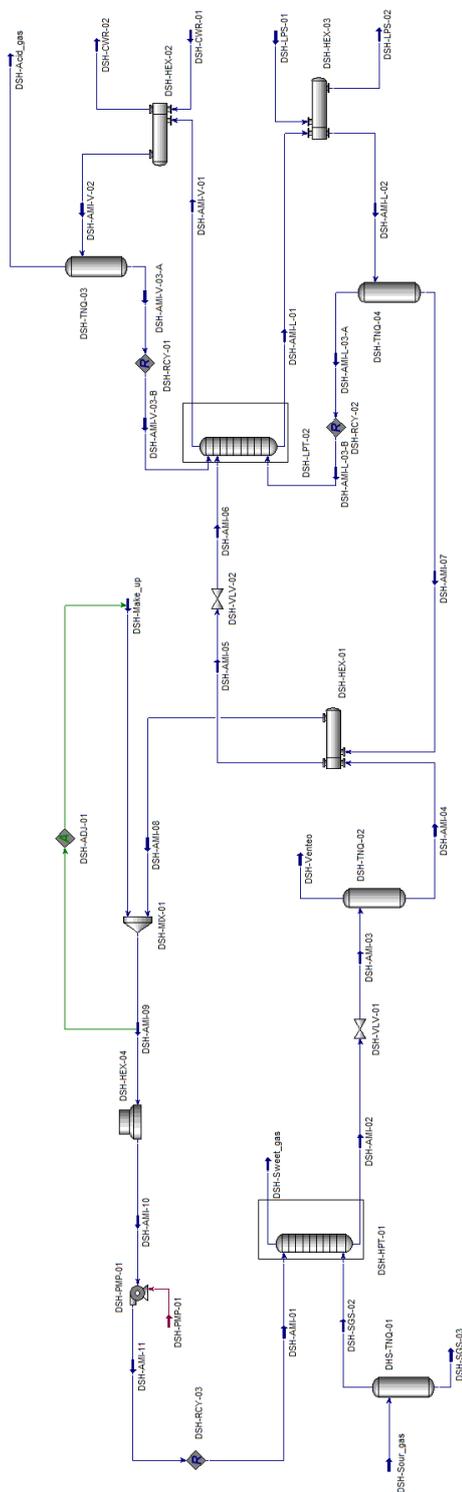


Figura 5.8: Simulación de la planta de desulfuración

## 5.5. REFORMADO DE GAS

Heterogeneous Catalytic Reaction

Stoichiometry Reaction Rate

Numerator

Forward Reaction

|   |            |
|---|------------|
| A | 8.1100e+05 |
| E | 86000      |
| B | 0.00000    |

Reverse Reaction

|    |         |
|----|---------|
| A' | 0.00000 |
| E' | 0.00000 |
| B' | 0.00000 |

| Components | Forward Order | Reverse Order |
|------------|---------------|---------------|
| Methane    | 1.000         | 0.0000        |
| Oxygen     | 1.000         | 0.0000        |
| CO2        | 0.0000        | 0.0000        |
| H2O        | 0.0000        | 0.0000        |
| <empty>    |               |               |

$$R_{TOX} = \frac{k_{TOX}^a p_{CH_4} p_{O_2}}{(1 + K_{CH_4}^C p_{CH_4} + K_{O_2}^C p_{O_2})^2 + \frac{k_{TOX}^b p_{CH_4} p_{O_2}}{1 + K_{CH_4}^C p_{CH_4} + K_{O_2}^C p_{O_2}}}$$

Denominator

| Component Exponents |             | Methane | Oxyg    | Denominator Exponent |
|---------------------|-------------|---------|---------|----------------------|
| A                   | 0.12600     | 1.0000  |         | 2                    |
| E                   | -27300      |         |         |                      |
|                     | 7.7800e-007 |         | 0.00000 |                      |
|                     | <empty>     | <empty> | <empty> |                      |

Ready Kinetics Help

Figura 5.9: Introducción de la cinética de la oxidación total del metano, Parte A.

Heterogeneous Catalytic Reaction

Stoichiometry Reaction Rate

Numerator

Forward Reaction

|   |            |
|---|------------|
| A | 6.8200e-05 |
| E | 86000      |
| B | 0.00000    |

Reverse Reaction

|    |         |
|----|---------|
| A' | 0.00000 |
| E' | 0.00000 |
| B' | 0.00000 |

| Components | Forward Order | Reverse Order |
|------------|---------------|---------------|
| Methane    | 1.000         | 0.0000        |
| Oxygen     | 1.000         | 0.0000        |
| CO2        | 0.0000        | 0.0000        |
| H2O        | 0.0000        | 0.0000        |
| <empty>    |               |               |

$$R_{TOX} = \frac{k_{TOX}^a p_{CH_4} p_{O_2}}{(1 + K_{CH_4}^C p_{CH_4} + K_{O_2}^C p_{O_2})^2 + \frac{k_{TOX}^b p_{CH_4} p_{O_2}}{1 + K_{CH_4}^C p_{CH_4} + K_{O_2}^C p_{O_2}}}$$

Denominator

| Component Exponents |             | Methane | Oxyg    | Denominator Exponent |
|---------------------|-------------|---------|---------|----------------------|
| A                   | 0.12600     | 1.0000  |         | 1                    |
| E                   | -27300      |         |         |                      |
|                     | 7.7800e-007 |         | 0.00000 |                      |
|                     | <empty>     | <empty> | <empty> |                      |

Ready Kinetics Help

Figura 5.10: Introducción de la cinética de la oxidación total del metano, Parte B.

Heterogeneous Catalytic Reaction

Stoichiometry Reaction Rate

Numerator

Forward Reaction

| Components | Forward Order | Reverse Order |
|------------|---------------|---------------|
| CO         | 1.000         | 0.0000        |
| Hydrogen   | -1.000        | 0.0000        |
| Methane    | 0.0000        | 0.0000        |
| H2O        | 1.000         | 0.0000        |
| CO2        | 0.0000        | 1.000         |
| <empty>    |               |               |

Reverse Reaction

| Components | Forward Order | Reverse Order |
|------------|---------------|---------------|
| A          | 5.4300e+05    |               |
| E          | 67130         |               |
| B          | 0.00000       |               |

Reverse Reaction

| Components | Forward Order | Reverse Order |
|------------|---------------|---------------|
| A'         | 2.7708e+011   |               |
| E'         | 1.1167e+005   |               |
| B'         | -1.1731       |               |

$$R_{WGS} = \left( k_{WGS} \frac{p_{CO} p_{H_2O}}{p_{H_2}} - k'_{WGS} p_{CO_2} \right) \left( \frac{1}{\Omega^2} \right)$$

Denominator

Component Exponents

| Component Exponents | E [kJ/kgmole] | CO      | Hydro   |
|---------------------|---------------|---------|---------|
| A                   | 8.2300e-005   | 1.0000  |         |
|                     | 6.1200e-009   | 0.00000 |         |
|                     | 6.6500e-004   | 0.00000 |         |
|                     | 1.7700e+005   | 0.00000 |         |
| <empty>             | <empty>       | <empty> | <empty> |

Denominator Exponent: 2

Delete Row

Ready

Kinetics Help

Figura 5.11: Introducción de la cinética de la reacción WGS.

## 5.5. REFORMADO DE GAS

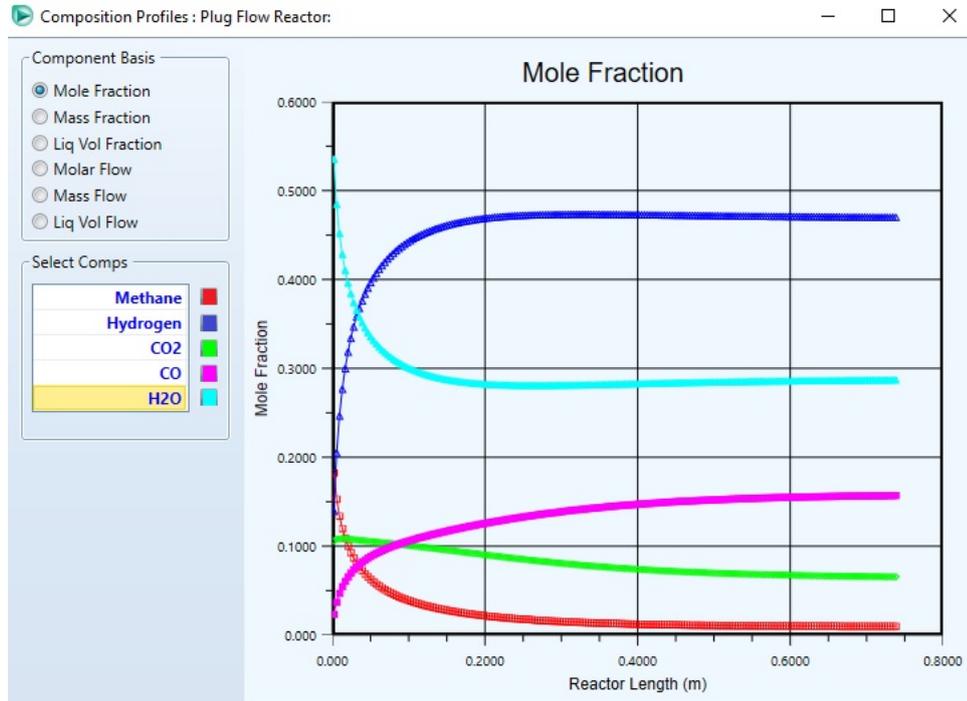


Figura 5.12: Perfil de concentraciones en el reactor ATR A

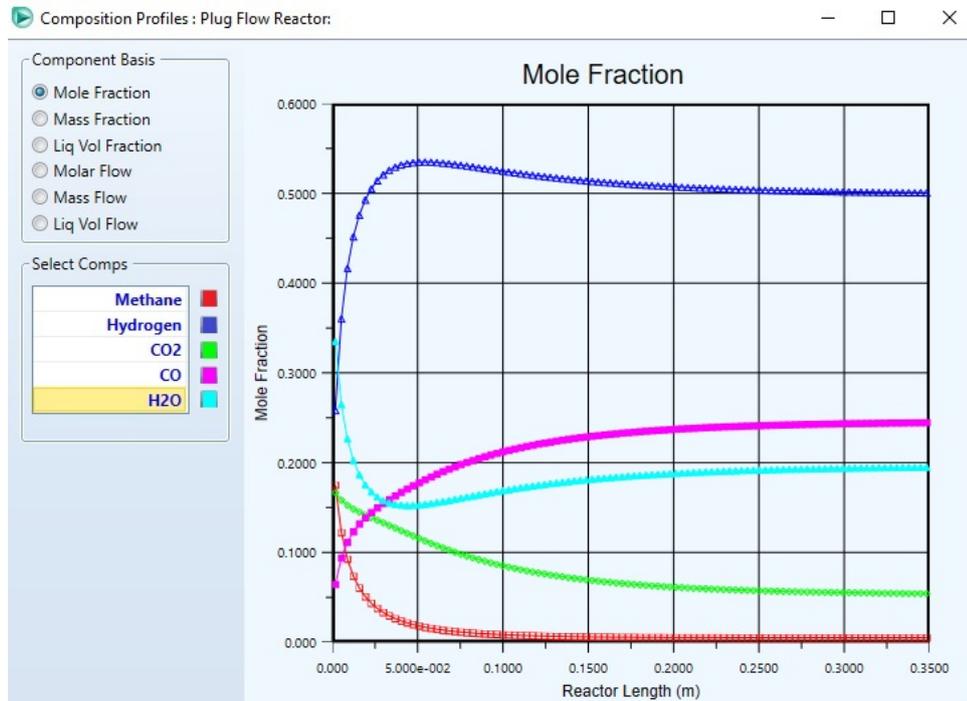


Figura 5.13: Perfil de concentraciones en el reactor ATR B

## CAPÍTULO 5. RESULTADOS

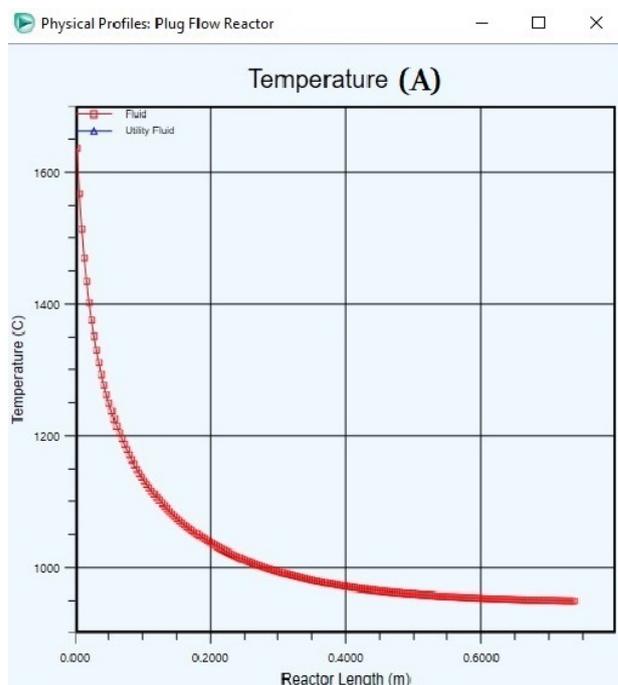


Figura 5.14: Perfil de temperaturas en el reactor ATR A

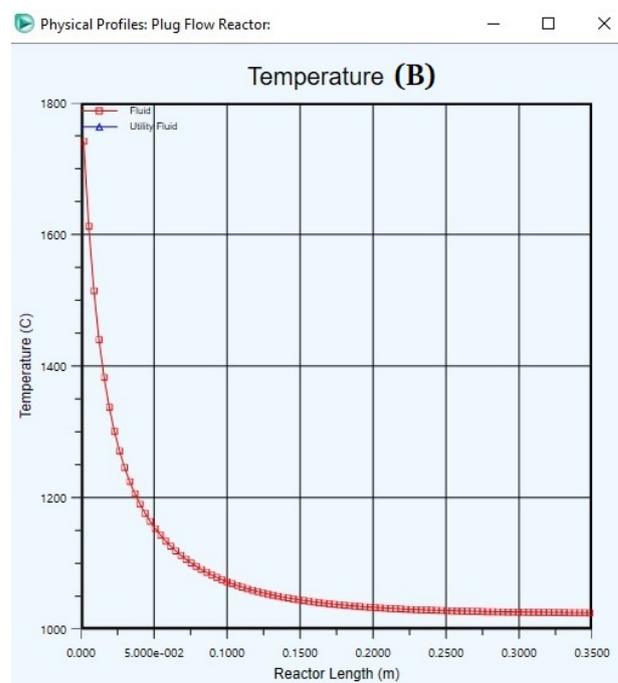


Figura 5.15: Perfil de temperatura en el reactor ATR B

## 5.5. REFORMADO DE GAS

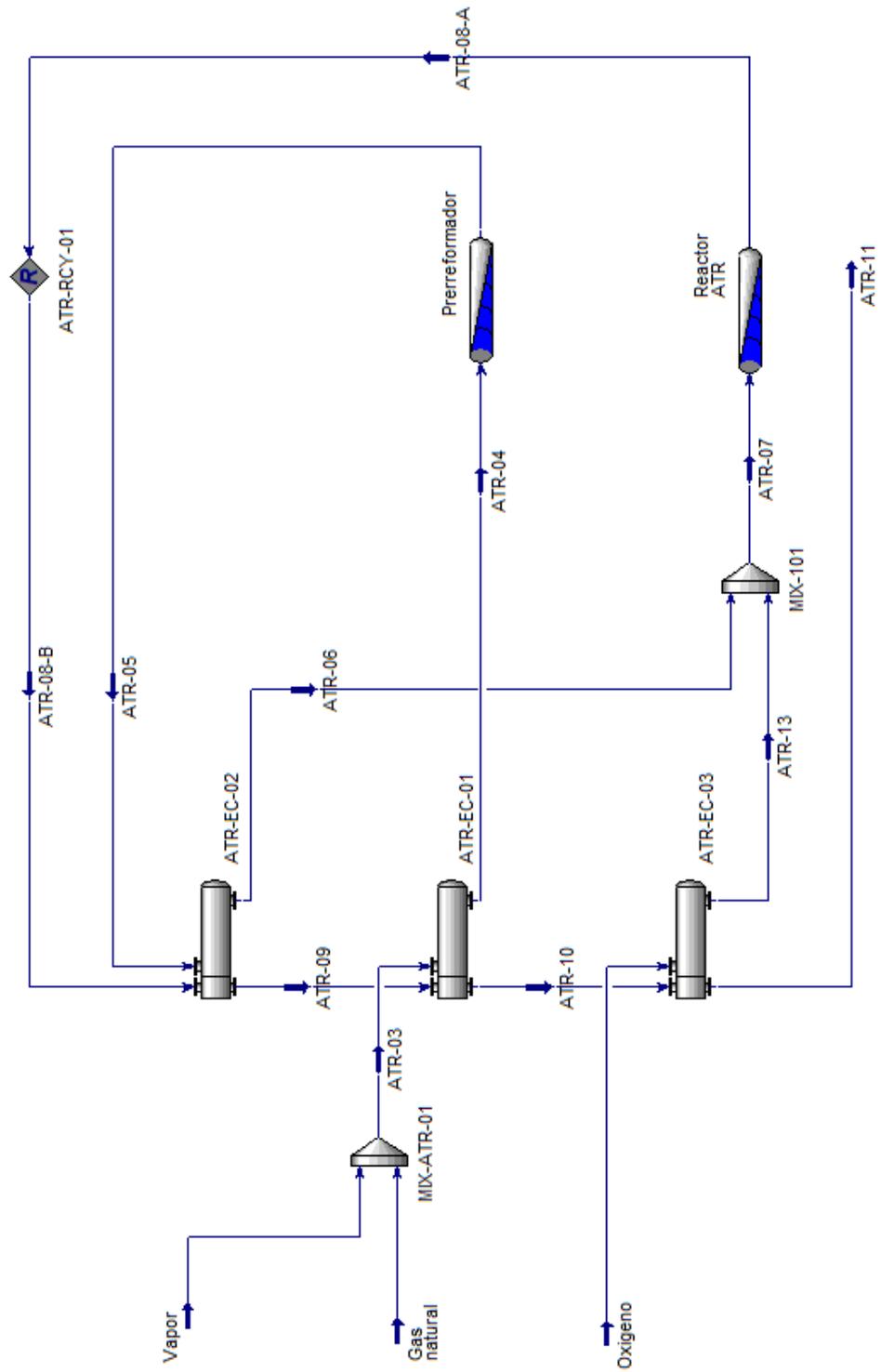


Figura 5.16: Esquema del sistema de reformado

## 5.6. Sistema de deshidratación

Los datos obtenidos de la simulación de esta sección se muestran en la Tabla 5.5 y el esquema de la simulación se muestra en la figura Figura 5.17.

Tabla 5.5: Resultados de corrientes en planta de deshidratación

| Corriente | $\dot{m}$<br>(kg/s) | T<br>°C | P<br>(kPa) | Composición (% mol) |          |          |
|-----------|---------------------|---------|------------|---------------------|----------|----------|
|           |                     |         |            | $C_1 + C_2$         | $H_2O$   | TEG      |
| 1         | 19.1904             | 37.75   | 4137       | 0.998103            | 0.001897 | 0        |
| 2         | 0.6725              | 46.15   | 4137       | 0                   | 0.01     | 0.99     |
| 3         | 0.7027              | 39.21   | 4137       | 0.000591            | 0.051914 | 0.947495 |
| 4         | 19.1602             | 39.63   | 4137       | 0.999654            | 0.000345 | 1.10E-08 |
| 5         | 19.1602             | 40.63   | 4137       | 0.999654            | 0.000345 | 1.10E-08 |
| 6         | 0.7027              | 49.51   | 4137       | 0.000591            | 0.051914 | 0.947495 |
| 7         | 0.000417            | 49.51   | 532        | 0.998046            | 0.001954 | 1.82E-07 |
| 8         | 0.702283            | 49.51   | 532        | 1.42E-07            | 0.051944 | 0.948056 |
| 9         | 0.702283            | 155.95  | 101        | 1.42E-07            | 0.051944 | 0.948056 |
| 10        | 0.029787            | 101.65  | 101        | 3.36E-06            | 0.99988  | 0.000117 |
| 11        | 0.6732              | 202.05  | 101        | 1.49E-07            | 0.01     | 0.99     |
| 12        | 0.6732              | 72.01   | 101        | 1.49E-07            | 0.01     | 0.99     |
| 13        | 0.000004            | 72.01   | 101        | 0                   | 0.001    | 0.999    |
| 14        | 0.6732              | 81.06   | 4137       | 1.49E-07            | 0.01     | 0.99     |

## 5.6. SISTEMA DE DESHIDRATACIÓN

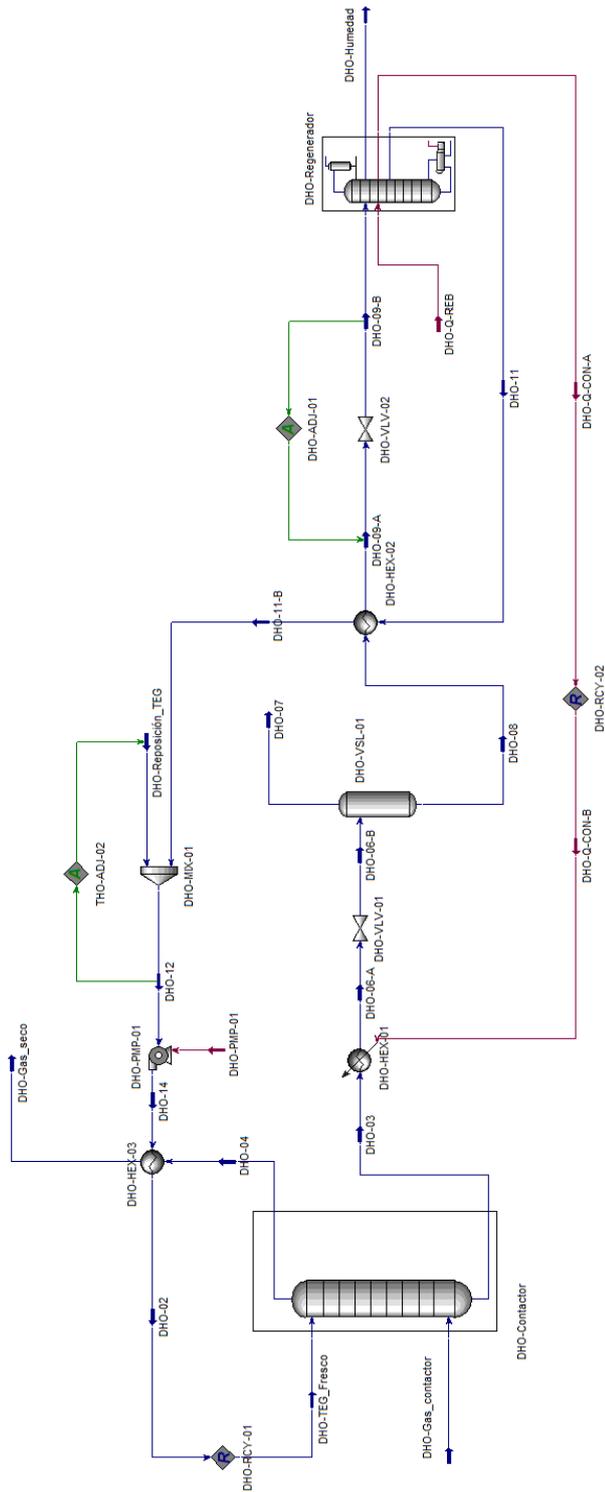


Figura 5.17: Simulación de la planta de deshidratación

# Capítulo 6

## Discusión

Para el sistema de producción de oxígeno se calculó el error porcentual para evaluar la precisión de la simulación, tal y como se muestra en la Tabla 6.1.

A lo largo de este modelo planteado se encuentran bastantes diferencias en las diferentes corrientes, hasta la corriente 13 estas diferencias no exceden del 1%. Es a partir de la corriente 14 en donde los componentes minoritarios se desvían en una cantidad porcentual mucho mayor, parte de estas discrepancias se atribuye a los métodos numéricos utilizados para resolver los sistemas de destilación en las torres criogénicas, así como a la necesidad de converger estos resultados entre sí.

Aunado que este estudio se privilegió el obtener mayor flujo másico de las corrientes 20, 21 y 22, que son en las que se obtiene precisamente el oxígeno en la concentración deseada, lo cual invariablemente afectó al flujo másico de las corrientes 23, 24 y 25 al disminuir su proporción e invariablemente afectar su balance de materia, lo que provoca los mayores errores porcentuales en la composición.

Sin embargo, esto en vez de representar un problema, representa una ventaja, ya que se obtiene un modelo más eficiente en la producción de oxígeno.

En este modelo estudiado se sugiere que el sistema de compresión pueda ser modificado para que en la segunda etapa se desvíe una fracción del aire de entrada al sistema de cogeneración a la presión necesaria para este sistema. Ya que el aire destinado al sistema de cogeneración debe ser precalentado antes de ingresar al sistema, de esta manera, parte del calentamiento necesario se obtendría mediante la compresión del aire, lo cual representa una estrategia de ahorro energético.

El oxígeno producido por este sistema sería dirigido entonces al sistema de reformado del gas de síntesis. El nitrógeno obtenido como subproducto

puede ser empleado como fuente de aire para instrumentación neumática.

Tabla 6.1: Error relativo porcentual de la simulación de la planta de oxígeno

| Corriente | $\dot{m}$ |           | T         |           | P  E.R.  (%) |                |                |                  |
|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|--------------|----------------|----------------|------------------|
|           | E.R.  (%) | E.R.  (%) | E.R.  (%) | E.R.  (%) | Ar           | O <sub>2</sub> | N <sub>2</sub> | H <sub>2</sub> O |
| 1         | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.03      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 2         | 0.00      | 0.21      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 3         | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 4         | 0.00      | 0.24      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 5         | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 6         | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 7         | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 8         | 0.00      | 0.15      | 0.01      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 9         | 0.00      | 0.00      | 0.01      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 10        | 0.00      | 0.27      | 0.01      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 11        | 0.00      | 0.27      | 0.01      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 12        | 0.00      | 0.28      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 13        | 0.00      | 0.28      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | 0.00           | 0.00           | -                |
| 14        | 0.00      | 0.04      | 0.00      | 9.35      | 0.29         | 0.36           | -              | -                |
| 15        | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 9.35      | 0.29         | 0.36           | -              | -                |
| 16        | 0.00      | 0.07      | 0.00      | 9.35      | 0.29         | 0.36           | -              | -                |
| 17        | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 40.00     | 8.93         | 0.34           | -              | -                |
| 18        | 0.00      | 0.00      | 0.00      | 40.00     | 8.93         | 0.34           | -              | -                |
| 19        | 0.00      | 0.27      | 0.00      | 40.00     | 8.93         | 0.34           | -              | -                |
| 20        | 15.52     | 0.06      | 0.00      | 0.00      | 0.00         | -              | -              | -                |
| 21        | 15.52     | 0.01      | 0.01      | 0.00      | 0.00         | -              | -              | -                |
| 22        | 15.52     | 4.94      | 0.01      | 0.00      | 0.00         | -              | -              | -                |
| 23        | 3.66      | 3.15      | 0.00      | 11.82     | 71.00        | 3.40           | -              | -                |
| 24        | 3.66      | 0.37      | 0.00      | 11.82     | 71.00        | 3.40           | -              | -                |
| 25        | 3.66      | 0.99      | 0.03      | 11.82     | 71.00        | 3.40           | -              | -                |
| 26        | 7.96      | 0.00      | 0.03      | -         | -            | -              | 0.00           | -                |
| 27        | 7.96      | 0.00      | 0.01      | -         | -            | -              | 0.00           | -                |
| 28        | 7.96      | 0.00      | 0.01      | -         | -            | -              | 0.00           | -                |
| 29        | 7.96      | 0.00      | 0.01      | -         | -            | -              | 0.00           | -                |
| 30        | 7.96      | 0.00      | 0.01      | -         | -            | -              | 0.00           | -                |

Se propone llevar a cabo un nuevo estudio de casos para determinar la relación óptima de gas de salida del sistema de desulfuración (endulzamiento) que se destinará a los sistemas de cogeneración y reformado, con el objetivo de garantizar que se cubran las necesidades de generación de potencia eléctrica, de vapor de calentamiento, y de gas de síntesis.

Se calculó el error porcentual para evaluar la precisión de la simulación del sistema de cogeneración, como se muestra en la Tabla 6.2.

## CAPÍTULO 6. DISCUSIÓN

Tabla 6.2: Error relativo porcentual de la simulación de la planta de cogeneración

| <b>Parametro</b>                | <b>Propiedad</b>   | <b> E.R.  (%)</b> |
|---------------------------------|--------------------|-------------------|
| Gas natural                     | Flujo másico       | 0.00              |
|                                 | Presión            | 0.00              |
| Aire                            | Flujo másico       | 1.39              |
|                                 | Presión            | 0.00              |
| Compresor                       | $\eta$ adiabática  | 0.00              |
|                                 | $\eta$ politrópica | 0.00              |
|                                 | Energía            | 1.75              |
| Reactor                         | $\eta$             | 0.00              |
|                                 | P ent.             | 0.00              |
|                                 | T sal.             | 0.00              |
| Turbina de gas                  | $\eta$ adiabática  | 0.00              |
|                                 | $\eta$ politrópica | 0.03              |
|                                 | Energía            | 0.13              |
|                                 | T sal.             | 0.29              |
| Economizador de alta presión    | UA                 | 24.1              |
|                                 | $\Delta P$ Coraza  | 0.00              |
|                                 | $\Delta P$ Tubos   | 0.00              |
|                                 | T ent. agua        | 0.00              |
| Evaporador de alta presión      | T sal. gas         | 0.85              |
|                                 | UA                 | 2.37              |
|                                 | T ent. agua        | 0.02              |
|                                 | T sal. gas         | 0.60              |
| Recalentador                    | UA                 | 0.40              |
|                                 | T ent. agua        | 0.01              |
|                                 | T sal. agua        | 0.00              |
|                                 | T sal. gas         | 0.40              |
| Sobrecalentador de alta presión | UA                 | 23.63             |
|                                 | T ent. agua        | 0.00              |
|                                 | T sal. agua        | 0.00              |
|                                 | T sal. gas         | 0.37              |
| Economizador de media presión   | UA                 | 11.85             |
|                                 | T ent. agua        | 0.00              |
|                                 | T sal. gas         | 1.13              |

*Continúa en la página siguiente*

| <b>Parametro</b>                 | <b>Propiedad</b>  | <b> E.R.  (%)</b> |
|----------------------------------|-------------------|-------------------|
| Evaporador de media presión      | UA                | 19.74             |
|                                  | T ent. agua       | 0.07              |
|                                  | T sal. gas        | 0.95              |
| Sobrecalentador de media presión | UA                | 10.52             |
|                                  | T ent. agua       | 0.01              |
|                                  | T sal. agua       | 0.00              |
| Economizador de baja presión     | T sal. gas        | 0.85              |
|                                  | UA                | 20.22             |
|                                  | T ent. agua       | 0.01              |
| Evaporador de baja presión       | T sal. gas        | 1.39              |
|                                  | UA                | 19.92             |
|                                  | T ent. agua       | 0.00              |
| Sobrecalentador de baja presión  | T sal. gas        | 1.37              |
|                                  | UA                | 16.98             |
|                                  | T ent. agua       | 0.08              |
| Economizador                     | T sal. agua       | 0.00              |
|                                  | T sal. gas        | 1.14              |
|                                  | UA                | 19.78             |
| Agua                             | T ent. agua       | 0                 |
|                                  | T sal. agua       | 0.00              |
|                                  | T sal. gas        | 1.71              |
| Bomba de alta presión            | Flujo másico      | 0.00              |
|                                  | Presión           | 0.00              |
|                                  | $\eta$ adiabática | 0.00              |
|                                  | $\Delta P$        | 0.00              |
| Bomba de media presión           | Trabajo           | 0.01              |
|                                  | Flujo             | 0.00              |
|                                  | $\eta$ adiabática | 0.00              |
|                                  | $\Delta P$        | 0.00              |
| Bomba de baja presión            | Trabajo           | 0.06              |
|                                  | Flujo             | 79.25             |
|                                  | $\eta$ adiabática | 0.00              |
| Bomba de baja presión            | $\Delta P$        | 0.00              |
|                                  | Trabajo           | 0.24              |
|                                  | Flujo             | 86.79             |

*Continúa en la página siguiente*

## CAPÍTULO 6. DISCUSIÓN

| <b>Parametro</b>                  | <b>Propiedad</b>   | <b> E.R.  (%)</b> |
|-----------------------------------|--------------------|-------------------|
| Turbina de vapor de alta presión  | $\eta$ adiabática  | 0.00              |
|                                   | $\eta$ politrópica | 0.00              |
|                                   | Trabajo            | 0.04              |
|                                   | P. salida          | 0.00              |
| Turbina de vapor de media presión | $\eta$ adiabática  | 0.00              |
|                                   | $\eta$ politrópica | 0.00              |
|                                   | Trabajo            | 0.18              |
|                                   | P. salida          | 0.00              |
| Turbina de vapor de baja presión  | $\eta$ adiabática  | 0.00              |
|                                   | $\eta$ politrópica | 0.86              |
|                                   | Trabajo            | 0.10              |
|                                   | P. salida          | 0.00              |
| Condensador                       | $\Delta P$         | 0.00              |
|                                   | Carga térmica      | 0.11              |
| Bomba                             | $\eta$ adiabática  | 0.00              |
|                                   | $\Delta P$         | 0.00              |
|                                   | Trabajo            | 1.91              |

Se determinó que, en general, los errores en los procesos no exceden el 3%, con la excepción de las bombas de media y alta presión, y las UA de los intercambiadores.

Se observó que en la Tabla 4.3 la suma de los flujos de la bomba de alta, media y baja presión no coincide con el flujo de entrada total de agua, lo cual podría deberse a un error de tipeado en el trabajo previo de Paoli [16]. Sin embargo, se encontró que en la simulación obtenida en el presente estudio, la eficiencia adiabática ( $\eta$ ), la caída de presión ( $\Delta P$ ) y el trabajo ejercido coinciden con un error menor al 1%. Para corregir la diferencia en las UA de los intercambiadores, se sugiere cambiar el diseño de los mismos para que coincida con lo reportado en la bibliografía.

En el contexto del sistema de cogeneración, se ha observado que se obtienen casi todos los servicios necesarios para el proceso, incluyendo electricidad y vapor de calentamiento a alta, media y baja presión. Sin embargo, se sugiere que el sistema debe adaptarse para permitir derivaciones en puntos donde se requiera la extracción de vapor, lo cual implicará modificar algunas condiciones del proceso. Es importante asegurarse de que se respeten las caídas de temperatura de los gases de salida a través de cada intercambiador, así

como el aumento de temperatura del agua, con el fin de evitar la condensación de vapor de agua en los gases emitidos por la chimenea de la caldera.

En relación a los resultados obtenidos del sistema de desalinización, se observa que el trabajo de Maha y col. [17] presenta dos particularidades distintivas en comparación con las anteriores simulaciones:

- Uno de los equipos necesarios para la simulación, el termocompresor, no se encuentra en la base de datos del simulador, lo que ha requerido la adopción de nuevas estrategias para su simulación. En el artículo original se resuelve mediante el uso de MATLAB, mientras que en este trabajo se ha desarrollado su simulación de otra forma, el cual se describe detalladamente en la Sección 4.3.2.
- Además, Maha y col. [17] proporciona datos de una planta real en la cual se basa su simulación, lo cual permite realizar una comparativa de los resultados obtenidos en este trabajo con los datos reales y los datos de la simulación original.

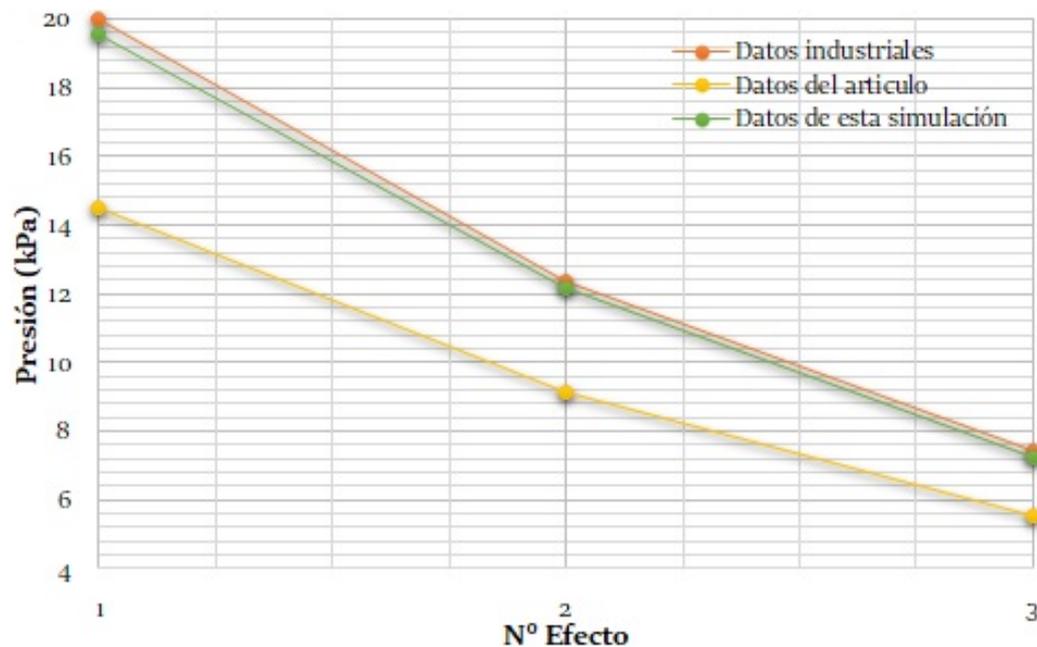


Figura 6.1: Comparativa de las presiones en cada uno de los evaporadores del sistema de desalinización

Se muestra en la Figura 6.1 las presiones de los evaporadores simulados en este estudio, así como las obtenidas en plantas industriales y los resultados

## CAPÍTULO 6. DISCUSIÓN

reportados por Maha y col. [17]. Se puede observar que los resultados obtenidos en este trabajo son más consistentes con los datos industriales en comparación con los obtenidos mediante el uso del enlace *MATLAB-HYSYS* para la simulación del termocompresor.

En consecuencia, los resultados obtenidos en este estudio se ajustan de manera precisa a los datos de la planta física, lo que valida la precisión del modelo de simulación de este sistema, incluyendo el modelo del termocompresor discutido previamente.

En la Tabla 6.3 y en Tabla 6.4 se muestran las comparativas de las concentraciones y condiciones de salida en los reactores simulados.

En la Tabla 6.5 se muestra el error relativo del sistema de deshidratación, únicamente se observan errores mayores al 10% en las trazas de los componentes, los cuales son componentes no significativos a la corriente total.

Tabla 6.3: Comparativa de condiciones de salida en el reactor ATR A [22].

| <b>Condiciones industriales</b><br><b>Parametro</b> | <b>Artículo [22]</b> |              |                    | <b>Simulación</b> |                    |
|---|----------------------|--------------|--------------------|-------------------|--------------------|
|   | <b>Valor</b>         | <b>Valor</b> | <b> E.R.   (%)</b> | <b>Valor</b>      | <b> E.R.   (%)</b> |
| Temperatura (°C)                                    | 950                  | 950          | -                  | 950               | -                  |
| Presión (bar)                                       | 25                   | 25           | -                  | 25                | -                  |
| H <sub>2</sub> (% base seca)                        | 65                   | 64.5         | 0.77               | 66.0              | 1.54               |
| N <sub>2</sub> (% base seca)                        | 1.2                  | 1.2          | 0.00               | 1.2               | 0.00               |
| CO (% base seca)                                    | 22.9                 | 23.1         | 0.87               | 22.1              | 3.49               |
| CO <sub>2</sub> (% base seca)                       | 9.7                  | 9.3          | 4.12               | 9.2               | 5.15               |
| Ar (% base seca)                                    | 0.1                  | 0.1          | 0.00               | 0.1               | 0.00               |
| CH <sub>4</sub> (% base seca)                       | 1.1                  | 1.8          | 63.64              | 1.4               | 27.27              |
| H <sub>2</sub> O (% mol)                            | 22.9                 | 29.7         | 1.02               | 28.7              | 2.28               |

Tabla 6.4: Comparativa de condiciones de salida en el reactor ATR B [23].

| Condiciones industriales<br>Parametro | Articulo [23] |         | Simulación |         |            |
|---------------------------------------|---------------|---------|------------|---------|------------|
|                                       | Valor         | Valor   | E.R.   (%) | Valor   | E.R.   (%) |
| Temperatura (°C)                      | 1049.85       | 1163.85 | 10.86      | 1025.21 | 2.35       |
| Presión (bar)                         | 21            | 21      | -          | 21      | -          |
| H <sub>2</sub> (% base seca)          | 62.1          | 58.44   | 5.89       | 62.2    | 0.19       |
| N <sub>2</sub> (% base seca)          | 0             | 0       | 0.00       | 0.00    | 0.00       |
| CO (% base seca)                      | 31.1          | 35.13   | 12.96      | 30.41   | 2.21       |
| CO <sub>2</sub> (% base seca)         | 6.4           | 6.4     | 0.00       | 6.74    | 5.38       |
| Ar (% base seca)                      | 0.0           | 0.0     | 0.00       | 0.00    | 0.00       |
| CH <sub>4</sub> (% base seca)         | 0.4           | 0.04    | 90.00      | 0.63    | 56.69      |
| H <sub>2</sub> O (% mol)              | 19.5          | 24.6    | 26.15      | 19.51   | 0.06       |

Tabla 6.5: Error relativo en planta de deshidratación

| Corriente | $\dot{m}$<br>(kg/s) | T<br>°C | P<br>(kPa) | Composición (% mol) |                  |       |
|-----------|---------------------|---------|------------|---------------------|------------------|-------|
|           |                     |         |            | $C_1 + C_2$         | H <sub>2</sub> O | TEG   |
| 1         | 0.00                | 0.00    | 0.00       | 0.00                | 0.00             | 0.00  |
| 2         | 0.12                | 0.00    | 0.00       | 0.00                | 0.01             | 0.00  |
| 3         | 0.62                | 0.15    | 0.00       | 24.63               | 8.20             | 0.51  |
| 4         | 0.02                | 0.05    | 0.00       | 0.02                | 109.73           | 99.54 |
| 5         | 0.02                | 0.29    | 0.00       | 0.02                | 109.73           | 99.54 |
| 6         | 0.62                | 0.12    | 0.00       | 24.63               | 8.20             | 0.51  |
| 7         | 10.47               | 0.12    | 0.00       | 0.36                | 64.63            | 97.6  |
| 8         | 0.61                | 0.12    | 0.00       | 99.89               | 8.20             | 0.51  |
| 9         | 0.61                | 0.00    | 0.00       | 99.89               | 8.20             | 0.51  |
| 10        | 10.55               | 0.00    | 0.00       | 99.88               | 0.27             | 6.36  |
| 11        | 0.00                | 0.00    | 0.00       | 0.00                | 0.01             | 0.00  |
| 12        | 0.00                | 0.22    | 0.00       | 0.00                | 0.01             | 0.00  |
| 13        | 8.00                | 0.22    | 0.00       | 0.00                | 90               | 0.91  |
| 14        | 0.00                | 0.23    | 0.00       | 0.00                | 0.01             | 0.00  |

# Capítulo 7

## Conclusiones

Cada uno de los procesos obtenidos del esquema conceptual del proceso para el reformado de gas natural a partir de gas crudo pueden ser simulados en su totalidad en el software Aspen HYSYS.

El uso de software adicional (tal como MATLAB) puede funcionar de soporte de las simulaciones, sin embargo, no es estrictamente necesario su uso para obtener resultados que simulen los procesos reales.

Los procesos mostrados en el presente trabajo no son necesariamente los únicos para lograr los objetivos en cuestión de la obtención del gas de síntesis (por ejemplo podrían explorarse diversas tecnologías en la obtención del agua marina tal como la ósmosis inversa). La comparativa técnica de las tecnologías mostradas puede abordarse en futuros estudios y la decisión de cual de éstas tomar debe abordarse desde un enfoque económico.

Se recomienda acoplar los procesos simulados con el fin de un estudio de sensibilidad de diversos tipos de condiciones de gases de entrada y capacidades del proceso, para obtener las condiciones óptimas del proceso con la suficiente robustez que permita el uso de la simulación en una gran variedad de casos.

Se ha logrado obtener un modelo más eficiente en la producción de oxígeno mediante la modificación del sistema de compresión. Además, se ha propuesto llevar a cabo un nuevo estudio de casos para determinar la relación óptima de gas de salida del sistema de desulfuración que se destinará a los sistemas de cogeneración y reformado, con el objetivo de garantizar que se cubran las necesidades de generación de potencia eléctrica, de vapor de calentamiento, y de gas de síntesis. También se ha determinado que, en general, los errores en los procesos no exceden el 3%.

Asimismo el proceso obtenido debe ser acoplado a la simulación del proceso Fischer-Tropsch previamente obtenida en el Instituto Mexicano del Petróleo, de forma que acopladas puedan finalmente conducir a un análisis económico integrado.





# Apéndice A

## Errores en modelo de $K_{eq}$

Tabla A.1: Comparativa del error absoluto entre modelos de predicción de  $K_{equilibrio}$  en la reacción WGS.

| T<br>° C          | $K_{eq}$<br>HYSYS | $K_{eq}$<br>Van't Hoff | Error relativo <br>% | $K_{eq}$<br>Correlación | Error relativo <br>% |
|-------------------|-------------------|------------------------|----------------------|-------------------------|----------------------|
| 426.6667          | 9.03              | 9.50                   | 5.21                 | 9.02                    | 0.09                 |
| 454.4444          | 7.05              | 7.47                   | 6.00                 | 7.05                    | 0.05                 |
| 482.2222          | 5.61              | 5.98                   | 6.65                 | 5.61                    | 0.06                 |
| 510.0000          | 4.55              | 4.87                   | 6.95                 | 4.55                    | 0.05                 |
| 537.7778          | 3.749             | 4.014                  | 7.08                 | 3.750                   | 0.03                 |
| 565.5556          | 3.130             | 3.354                  | 7.16                 | 3.134                   | 0.12                 |
| 593.3335          | 2.653             | 2.835                  | 6.86                 | 2.652                   | 0.03                 |
| 621.1111          | 2.270             | 2.421                  | 6.66                 | 2.271                   | 0.04                 |
| 648.8889          | 1.966             | 2.088                  | 6.19                 | 1.965                   | 0.06                 |
| 676.6667          | 1.720             | 1.816                  | 5.56                 | 1.716                   | 0.21                 |
| 704.4444          | 1.512             | 1.592                  | 5.28                 | 1.512                   | 0.02                 |
| 732.2224          | 1.340             | 1.406                  | 4.90                 | 1.343                   | 0.23                 |
| 760.0000          | 1.202             | 1.250                  | 3.96                 | 1.202                   | 0.03                 |
| 787.7778          | 1.080             | 1.118                  | 3.49                 | 1.082                   | 0.20                 |
| 815.5556          | 0.9813            | 1.0055                 | 2.47                 | 0.9806                  | 0.07                 |
| 843.3333          | 0.8940            | 0.9093                 | 1.71                 | 0.8937                  | 0.04                 |
| 871.1111          | 0.8192            | 0.8264                 | 0.87                 | 0.8187                  | 0.06                 |
| 898.8889          | 0.7540            | 0.7544                 | 0.05                 | 0.7536                  | 0.05                 |
| 926.6667          | 0.6970            | 0.6916                 | 0.78                 | 0.6969                  | 0.02                 |
| 954.4444          | 0.6470            | 0.6365                 | 1.62                 | 0.6471                  | 0.01                 |
| 982.2222          | 0.6037            | 0.5880                 | 2.60                 | 0.6032                  | 0.08                 |
| 1037.7778         | 0.5305            | 0.5068                 | 4.46                 | 0.5297                  | 0.15                 |
| 1093.3333         | 0.4712            | 0.4422                 | 6.16                 | 0.4711                  | 0.02                 |
| 1148.8889         | 0.4233            | 0.3899                 | 7.89                 | 0.4237                  | 0.08                 |
| 1204.4444         | 0.3843            | 0.3471                 | 9.68                 | 0.3847                  | 0.11                 |
| <b>100×RMSRE*</b> |                   | -                      | 5.41                 | -                       | 0.10                 |

\*Error relativo cuadrático medio

APÉNDICE A. ERRORES EN MODELO DE  $K_{EQ}$

Tabla A.2: Comparativa del error absoluto entre modelos de predicción de  $K_{equilibrio}$  en la reacción SMR I.

| T<br>° C         | $K_{eq}$<br>HYSYS      | $K_{eq}$<br>Van't Hoff | Error relativo <br>% | $K_{eq}$<br>Correlación | Error relativo <br>% |
|------------------|------------------------|------------------------|----------------------|-------------------------|----------------------|
| 426.6667         | $2.659 \times 10^{-4}$ | $2.680 \times 10^{-4}$ | 0.78                 | $2.620 \times 10^{-4}$  | 1.46                 |
| 482.2222         | $4.338 \times 10^{-3}$ | $4.494 \times 10^{-3}$ | 3.61                 | $4.354 \times 10^{-3}$  | 0.38                 |
| 537.7778         | $4.900 \times 10^{-2}$ | $5.122 \times 10^{-2}$ | 4.54                 | $4.953 \times 10^{-2}$  | 1.08                 |
| 593.3333         | 0.4098                 | 0.4273                 | 4.27                 | 0.4146                  | 1.17                 |
| 648.8889         | 2.679                  | 2.761                  | 3.05                 | 2.699                   | 0.74                 |
| 704.4444         | 14.26                  | 14.43                  | 1.17                 | 14.26                   | 0.03                 |
| 760.0000         | 63.43                  | 63.11                  | 0.50                 | 63.19                   | 0.38                 |
| 815.5556         | 242.6                  | 237.5                  | 2.11                 | 241.4                   | 0.50                 |
| 871.1111         | 816.6                  | 785.7                  | 3.79                 | 811.9                   | 0.57                 |
| 926.6667         | 2464                   | 2327                   | 5.57                 | 2447                    | 0.68                 |
| 982.2222         | 6755                   | 6259                   | 7.34                 | 6706                    | 0.72                 |
| 1037.7778        | 17010                  | 15484                  | 8.97                 | 16910                   | 0.59                 |
| 1093.3333        | 39670                  | 35584                  | 10.30                | 39630                   | 0.10                 |
| 1148.8889        | 86640                  | 76628                  | 11.56                | 87060                   | 0.48                 |
| 1204.4444        | 178400                 | 155766                 | 12.69                | 180575                  | 1.22                 |
| <b>100×RMSRE</b> | -                      | -                      | 6.57                 | -                       | 0.78                 |

Tabla A.3: Comparativa del error absoluto entre modelos de predicción de  $K_{equilibrio}$  en la reacción SMR II.

| T<br>° C         | $K_{eq}$<br>HYSYS      | $K_{eq}$<br>Van't Hoff | Error relativo <br>% | $K_{eq}$<br>Correlación | Error relativo <br>% |
|------------------|------------------------|------------------------|----------------------|-------------------------|----------------------|
| 426.6667         | $2.401 \times 10^{-3}$ | $2.546 \times 10^{-3}$ | 6.03                 | $2.364 \times 10^{-3}$  | 1.56                 |
| 482.2222         | $2.434 \times 10^{-2}$ | $2.689 \times 10^{-2}$ | 10.50                | $2.445 \times 10^{-2}$  | 0.46                 |
| 537.7778         | $1.837 \times 10^{-1}$ | $2.056 \times 10^{-1}$ | 11.94                | $1.858 \times 10^{-1}$  | 1.14                 |
| 593.3333         | 1.087                  | 1.211                  | 11.42                | 1.100                   | 1.18                 |
| 648.8889         | 5.267                  | 5.763                  | 9.42                 | 5.305                   | 0.72                 |
| 704.4444         | 21.56                  | 22.96                  | 6.51                 | 21.57                   | 0.03                 |
| 760.0000         | 76.24                  | 78.86                  | 3.43                 | 75.96                   | 0.37                 |
| 815.5556         | 238.1                  | 238.8                  | 0.30                 | 236.8                   | 0.53                 |
| 871.1111         | 669.0                  | 649.3                  | 2.94                 | 664.9                   | 0.60                 |
| 926.6667         | 1717                   | 1609                   | 6.30                 | 1706                    | 0.67                 |
| 982.2222         | 4078                   | 3680                   | 9.75                 | 4046                    | 0.78                 |
| 1037.7778        | 9024                   | 7848                   | 13.03                | 8959                    | 0.72                 |
| 1093.3333        | 18693                  | 15734                  | 15.83                | 18671                   | 0.12                 |
| 1148.8889        | 36675                  | 29878                  | 18.53                | 36880                   | 0.56                 |
| 1204.4444        | 68559                  | 54064                  | 21.14                | 69454                   | 1.31                 |
| <b>100×RMSRE</b> | -                      | -                      | 11.30                | -                       | 0.83                 |



# Referencias

- [1] Comisión Nacional de Hidrocarburos. Producción nacional de petróleo y gas. *Centro Nacional de Información de Hidrocarburos*, 2019. [7](#), [8](#)
- [2] PEMEX. Distribución de gas natural. *Anuario Estadístico 2017*, 2018. [7](#), [8](#)
- [3] Comisión Nacional de Hidrocarburos. Tablero de producción de petróleo y gas. *Centro Nacional de Información de Hidrocarburos*, 2019. [7](#)
- [4] Secretaría de Energía. Balance de gas natural. *Estadísticas de Hidrocarburos*, 08 2019. [7](#)
- [5] Global Gas Flaring Reduction Partnership. *2022 Global Gas Flaring Tracker Report*. The World Bank, 2022. [7](#), [10](#)
- [6] British Petroleum. *Technology choices for a Secure, Affordable and Sustainable Energy Future*. British Petroleum, 2015. [13](#)
- [7] S. Faramawy, T. Zaki, and A.A.-E. Sakr. Natural gas origin, composition, and processing: A review. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 34:34 – 54, 2016. [13](#), [14](#), [15](#)
- [8] J. G. Speight. *Liquids Fuels from Natural Gas*, chapter 5, pages 157–178. Taylor and Francis Group, CRC Press, 2007. [14](#), [16](#), [25](#), [26](#), [32](#), [37](#)
- [9] A. Rojey, C. Jaffret, S. Cornot-Gandolphe, B. Durand, S. Julian, and M. Valais. *Natural Gas: Production, processing, transport*. Editions Technip, 1997. [14](#), [16](#)
- [10] Energy Information Administration. Natural gas processing: The crucial link between natural gas production and its transportation to market. *Energy Information Administration*, 2006. [18](#), [19](#)

## REFERENCIAS

- [11] Maria Elena Ayuso. Análisis de las prácticas de quema y vento de gas natural asociado: Óbstatulos y avances en latinoamérica. *Revista de Energía de Latinoamérica y el Caribe*, 2017. 22, 24
- [12] J. G. Speight. *Introduction to fuel flexible energy*, chapter 1, pages 3–27. Woodhead Publishing, 2015. 25
- [13] Xiuli Wang and Michael Economides. *Advanced Natural Gas Engineering*. Gulf Publishing Company, 2009. 27
- [14] Jens Rostrup-Nielsen and Lars J. Christiansen. *Concepts in Syngas Manufacture*. Imperial College Press, 2011. 28, 29, 30, 31, 33, 34, 35, 36
- [15] Armin Ebrahimi, Mosa Meratizaman, Hamed Reyhani, Omid Pourali, and Majid Amidpour. Energetic, exergetic and economic assessment of oxygen production from two columns cryogenic air separation unit. *Energy*, 90, 07 2015. 47, 48, 49, 50, 85
- [16] Nicola Paoli. Simulation models for analysis and optimization of gas turbine cycles. 52, 53, 58, 62, 88, 109
- [17] B.Maha, S. Ali, and B.B. Ammar. Modeling and simulation of multi-effect desalination plant (SIDEM Unit). In *2017 International Conference on Green Energy Conversion System (GECS)*, 2017. 62, 63, 65, 69, 92, 110, 111
- [18] Eleonora Erdmann, Liliana Ale Ruiz, Julieta Martínez, Juan P. Gutierrez, and Enrique Tarifa. Endulzamiento de gas natural con aminas. simulación del proceso analisis de sensibilidad paramétrico. *Avances en Ciencias e Ingeniería*, 2012. 69, 71
- [19] Sajjad Sharif Dashti, Ahmad Shariati, and Mohammad Reza Khosravi Nikou. Sensitivity analysis for selection of an optimum amine gas sweetening process with minimum cost requirement. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 10(5):709–715, 2015. 69, 70, 71
- [20] Arthur L. Kohl. Alkanolamines for hydrogen sulfide and carbon dioxide removal. *Gas Purification*, page 54, 1997. 71
- [21] Faraz Qasim, Jae Sun Shin, Jong Hwa Jeong, and Sang Jin Park. An optimization study on syngas production and economic evaluation. *MATEC Web of Conferences*, 36, 2016. 73, 79

## REFERENCIAS

- [22] Juliana Piña and Daniel Borio. Modeling an simulation of an autothermal reformer. *Latin American applied research*, 36:289–294, 10 2006. [73](#), [74](#), [75](#), [111](#)
- [23] M. Nezhad, Soosan Rowshanzamir, and Mohammad Eikani. Autothermal reforming of methane to synthesis gas: Modeling and simulation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34:1292–1300, 02 2009. [73](#), [75](#), [112](#)
- [24] M. Halabi, M.H.J.M. Croon, J. Schaaf, Paul Cobden, and J. Schouten. Modeling and analysis of autothermal reforming of methane to hydrogen in a fixed bed reformer. *Chemical Engineering Journal*, 137:568–578, 04 2008. [74](#), [76](#)
- [25] J. Xu G.F. Froment. Methane steam reforming, methanation and water–gas shift: I. intrinsic kinetics. *American Institute of Chemical Engineers*, 35:88–96, 1989. [74](#)
- [26] D. L. Trim C. W. Lam. The combustion of methane on platinum - alumina fibre catalyst - i: Kinetics and mechanism. *Chemical Engineering Science*, 35:1405–1413, 1980. [74](#)
- [27] Christensen T. S. and Primdahl I. I. Improve syngas production using autothermal reforming. *Hydrocarbon Processing*, 73:39–46, 3 1994. [78](#)
- [28] Benjamin T. Shädel, Matthias Duisberg, and Olaf Deutschmann. Steam reforming of methane, ethane, propane, butane, and natural gas over a rhodiúm-based catalyst. *Catalysis Today*, 142:42–51, 04 2009. [77](#)
- [29] Liyan Ma. B. E. Hydrogen production from steam reforming of light hydrocarbons in an autothermal system. *Tesis doctoral: University of New South Wales*, Sydney, Australia, 1995. [78](#)
- [30] L. Ma, D.L. Trimm, and C. Jiang. The desing and testing of an autotermal reactor for the conversion of light hydrocarbons to hydrogen i. the kinetics of the catalytic oxidation of light hydrocarbons. *Applied Catalysis A: General*, 138:275–283, 5 1996. [79](#)
- [31] Rachid Chebbi, Muhammad Qasim, and Nabil Abdel Jabbar. Optimization of triethylene glycol dehydration of natural gas. *Energy Reports*, 5:723–732, 11 2019. [81](#), [83](#)
- [32] Comisión Reguladora de Energía. Norma Oficial Mexicana NOM-001-SECRE-2010. Especificaciones del gas natural. *Diario Oficial de la Federación*, México, DF., 2010.

## REFERENCIAS

- [33] J. G. Speight. *Origin and Production*, chapter 2, page 40. Gulf Professional Publishing, 2019.
- [34] J. G. Speight. *Unconventional gas*, chapter 3, page 91. Gulf Professional Publishing, 2019.