

ESTRATEGIA DE CONTROL *FEEDBACK* PARA UN REACTOR DE METANACIÓN:

ANÁLISIS MEDIANTE SIMULACIÓN CON ASPEN HYSYS

Eliana Paola Jimenez Aguirre

Propuesta de trabajo de grado para optar al título de Ingeniero Químico

Modalidad Trabajo de investigación

Director: Giovanni Morales Medina

Doctor en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2025

## Tabla de contenido

Introducción .....	7
1. Objetivos.....	9
1.1 Objetivo General.....	9
1.2 Objetivos específicos.....	9
2. Marco teórico.....	9
2.2 Tecnología Power-to-Gas .....	12
2.3 Planta piloto PtG en Holanda .....	13
2.4 Diseño de estrategia de control Aspen Hysys.....	15
3. Estado del arte.....	15
4. Metodología.....	17
4.1 Fase 1. Desarrollo de la simulación en estado estacionario: .....	18
4.2 Fase 2. Respuestas de simulación en lazo abierto: .....	19
4.3 Fase 3. Desempeño con la estrategia de control <i>feedback</i> : .....	20
5. Resultados .....	23
5.2 Simulación en modo dinámico.....	28
5.2.1 Respuesta en lazo abierto.....	29
5.2.2 Respuesta en lazo cerrado reactores adiabáticos .....	32
5.2.3 Respuesta en lazo cerrado reactores con enfriamiento .....	34
6 Conclusiones.....	41
Recomendaciones .....	42
Referencias bibliograficas .....	43

## Lista de figuras

Figura 1. Conversión global de CO <sub>2</sub> (concentración de CH <sub>4</sub> ) reportada por la planta piloto de metanación en Rozenburg, Holanda. ....	14
Figura 2. Enfoque metodológico aplicado para el desarrollo de la investigación .....	17
Figura 3. Simulación de metanación desarrollada en Aspen HYSYS .....	19
Figura 4. Respuesta obtenida en caso base en lazo abierto.....	20
Figura 5. Sistema de cuatro reactores con estrategia de control feedback.....	22
Figura 6. Sistema de dos reactores con enfriamiento .....	22
Figura 7. Comparación de la simulación con el proyecto The Netherlands .....	27
Figura 8. Respuestas en lazo abierto para temperatura de salida de los reactores, conversión, flujo de CO <sub>2</sub> a la salida de los reactores y flujo de H <sub>2</sub> O en los flash, ante perturbación escalón	30
Figura 9. Distribución de temperatura en los reactores R1, R2, R3 y R4 con un cambio del 30% en la válvula de TIC-1.....	32
Figura 10. Respuestas dinámicas de temperatura, conversión y flujos molares con control en lazo cerrado.....	33
Figura 11. Perfiles de los reactores en estado estacionario en lazo cerrado .....	34
Figura 12. Respuestas dinámicas de temperatura, conversión y flujos molares en lazo cerrado	37
Figura 13. Perfiles de los reactores en modo dinámico en lazo cerrado.....	38
Figura 14. Diferentes valores de ganancia para R1 .....	39
Figura 15. Diferentes valores de ganancia para R2 .....	40

## Lista de tablas

Tabla 1. Características del reactor de metanación en la configuración adiabática.....	10
Tabla 2. Datos de conversión global, calor retirado e introducido y agua separada.....	25
Tabla 3. Datos en estado estacionario y dinámico .....	28
Tabla 4. Perturbaciones en lazo abierto .....	30
Tabla 5. Perturbaciones en lazo cerrado .....	36

## Resumen

Título: Estrategia de control *feedback* para un reactor de metanación: análisis mediante simulación con Aspen HYSYS\*

Autor: Eliana Paola Jimenez Aguirre\*\*

Palabras Claves: Perturbación, Lazo abierto, Lazo cerrado, Conversión, Temperatura

Descripción: El documento presenta un estudio sobre la implementación de una estrategia de control *feedback* para un reactor de metanación utilizando simulación en Aspen HYSYS. Este proceso convierte dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) e hidrógeno (H<sub>2</sub>) en metano (CH<sub>4</sub>), contribuyendo al almacenamiento de energía renovable y la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero. La investigación aborda tres objetivos específicos: desarrollar un modelo base en estado estacionario, verificar las respuestas del sistema en lazo abierto ante perturbaciones y comparar el desempeño con y sin lazo de control *feedback*.

El modelo base incluyó cuatro reactores PFR en serie, cada uno con intercambiadores de calor y separadores de agua, proporcionando condiciones iniciales que garantizaron una conversión acumulativa de hasta el 96 %. En simulación dinámica en lazo abierto, el sistema mostró tiempos de estabilización entre 80 y 325 minutos bajo perturbaciones como cambios en flujo, temperatura y relación H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>, destacando la necesidad de un control activo para mejorar la estabilidad.

El lazo de control *feedback* mejoró significativamente la estabilidad y la precisión del sistema, especialmente al manejar cambios en la entrada de reactivos. Sin embargo, en condiciones base, el tiempo de estabilización fue de 3836 minutos, evidenciando limitaciones en el diseño del lazo de control. Este análisis subrayó la importancia de optimizar las estrategias de control para equilibrar eficiencia, estabilidad y tiempos de respuesta. En conclusión, la simulación demostró la efectividad de un esquema de control *feedback* para estabilizar procesos exotérmicos como la metanación, mostrando su potencial para aplicaciones industriales en generación de combustibles sintéticos. Se recomienda ajustar los parámetros del lazo de control y realizar validaciones experimentales para mejorar aún más el desempeño del sistema.

---

\*Trabajo de grado.

\*\*Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Ingeniería Química. Director: Giovanni Morales Medina. PhD en Ingeniería Química.

## Abstract

Description: The paper presents a study on the implementation of a feedback control strategy for a methanation reactor using simulation in Aspen HYSYS. This process converts carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ) and hydrogen ( $\text{H}_2$ ) into methane ( $\text{CH}_4$ ), contributing to renewable energy storage and greenhouse gas emissions reduction. The research addresses three specific objectives: to develop a steady-state base model, to verify the open-loop responses of the system to perturbations, and to compare the performance with and without a feedback control loop.

The base model included four PFR reactors in series, each with heat exchangers and water separators, providing initial conditions that ensured a cumulative conversion of up to 96%. In open-loop dynamic simulation, the system showed stabilization times between 80 and 325 minutes under perturbations such as changes in flow, temperature, and  $\text{H}_2/\text{CO}_2$  ratio, highlighting the need for active control to improve stability.

The feedback control loop significantly improved the stability and accuracy of the system, especially when handling changes in the reagent input. However, under baseline conditions, the stabilization time was 3836 minutes, evidencing limitations in the control loop design. This analysis underlined the importance of optimizing control strategies to balance efficiency, stability, and response times. In conclusion, the simulation demonstrated the effectiveness of a feedback control scheme to stabilize exothermic processes such as methanation, showing its potential for industrial applications in synthetic fuel generation. Adjustment of the control loop parameters and experimental validations are recommended to further improve the system performance.

## Introducción

El exceso de combustibles fósiles ha producido altas emisiones de CO<sub>2</sub>, impulsando el cambio climático. Es crucial actuar rápidamente con una transición energética y leyes ambientales más estrictas a nivel mundial (Beñat *et al.*, 2020). El Panel Intergubernamental del Cambio Climático, confirma el impacto de los gases de efecto invernadero y sugiere limitar el calentamiento global a 1,5°C para 2100, requiriendo reducciones significativas en las emisiones de CO<sub>2</sub> y otros gases (Chauvy *et al.*, 2021). Una alternativa para el uso del CO<sub>2</sub> corresponde a la generación de gas natural sintético por medio de la metanación. La metanación convierte CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub> en CH<sub>4</sub>, tomando el dióxido de carbono de flujos de biogás, gas de síntesis y gases de chimenea (hornos del cemento y otras industrias) (Chauvy *et al.*, 2019). Desde el punto de vista operativo, la eficiencia y estabilidad de los reactores pueden variar debido a la exotermicidad de la reacción, por lo cual se requiere la implementación de estrategias de control para la seguridad y el rendimiento del proceso.

El proceso de metanación es efectuado industrialmente en un reactor de lecho fijo, cuyo catalizador puede ser de níquel o rutenio con soporte de alúmina (Lara & Muñoz, 2020). La eliminación del calor generado puede realizarse externamente mediante una chaqueta de enfriamiento y un exceso de H<sub>2</sub> en la mezcla reaccionante. El sistema de control de la metanación usualmente considera una estrategia *feedback*, para la cual se define la variable controlada como la conversión de CO<sub>2</sub> o la concentración de CO<sub>2</sub> a la salida, mientras la variable manipulada puede corresponder a la temperatura del refrigerante y/o el caudal de H<sub>2</sub> entrante al reactor (Chauvy *et al.*, 2019; Bremer *et al.*, 2019). Es importante mencionar que, el flujo de H<sub>2</sub> puede ser una variable manipulada debido a que este flujo se encuentra en exceso respecto al CO<sub>2</sub>, por lo cual, presenta la característica de ser un portador de energía térmica en el proceso (*heat carrier*). Por otro lado,

la eficiencia y la estabilidad de una estrategia de control en una operación industrial pueden ser analizadas y predichas aplicando simuladores. De hecho, Colelli *et al.* (2024) analizaron por simulación la respuesta en dos sistemas de metanación con diferente número de reactores, obteniendo los desempeños respectivos y definiendo escenarios de conversiones y tiempos de control favorables para la metanación. Con lo anterior, el desarrollo de una simulación en un programa comercial como Aspen HYSYS puede permitir la predicción y el análisis de las respuestas del proceso de metanación ante una estrategia de control *feedback*. Adicionalmente el desarrollo de una simulación con estrategia de control aporta en el saber hacer en la ingeniería nacional.

Por otra parte, la información relacionada con sistemas de reacción de metanación a escala industrial son de difícil consecución. Alternativamente, los sistemas en planta piloto pueden ser utilizados para el análisis de los desempeños de la metanación. Al respecto, Vlap *et al.* (2015) presentan los resultados de un proyecto de demostración de la tecnología PtG (*power-to-gas*) basada en la reacción de metanación a escala planta piloto en Holanda, compartiendo los aspectos dimensionales y los desempeños térmicos del proceso. Asimismo, Colelli *et al.* (2024) presentan los resultados de una estrategia de control *feedback* en un sistema hipotético de metanación a nivel industrial, sin presentar alguna validación de los resultados.

En este contexto, el presente documento expone los resultados más relevantes del desarrollo de una simulación en Aspen HYSYS para el análisis de las respuestas de reactores PFR de lecho fijo. con una estrategia de control *feedback*. La pregunta de investigación corresponde a, ¿cuáles respuestas conlleva la aplicación de una estrategia de control *feedback* en la planta piloto de metanación ante diferentes perturbaciones tipo escalón?

## 1. Objetivos

### 1.1 Objetivo General

Analizar la estabilidad y los tiempos de respuesta de un reactor de metanación con una estrategia de control *feedback* ante diferentes perturbaciones mediante simulación en Aspen HYSYS.

### 1.2 Objetivos específicos

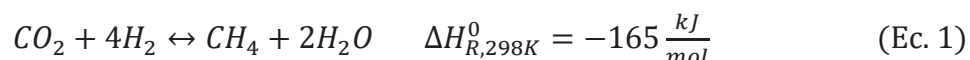
- Desarrollar una simulación de la operación de metanación en estado estacionario utilizando el programa Aspen HYSYS, obteniendo un modelo base para la codificación del lazo de control *feedback*.
- Verificar las respuestas del modelo base en simulación dinámica en lazo abierto ante una perturbación tipo escalón en cada variable de entrada, estableciendo el requerimiento de un lazo de control *feedback*.
- Comparar el desempeño del modelo base con un lazo de control *feedback* en términos de estabilidad y tiempos de respuesta ante cambios en las condiciones de operación.

## 2. Marco teórico

### 2.1 Metanación

Es un proceso químico que convierte el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y el hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) en metano ( $\text{CH}_4$ ) mediante reacciones catalíticas. Este proceso es de gran interés en el contexto de la sostenibilidad energética, ya que permite almacenar energía renovable en forma de metano, un combustible que puede ser utilizado en diversas aplicaciones, incluyendo la generación de electricidad y el transporte (Goeppert *et al.*, 2018). La reacción de metanación es fuertemente

exotérmica (-165 kJ/mol), lo que crea un importante cuello de botella para la operación dinámica debido a la resistencia térmica generada por el catalizador. Este proceso se lleva a cabo mediante una reacción exotérmica denominada reacción de Sabatier, según:



La Figura en apéndices A6 ilustra una configuración adiabática de 5 reactores industriales de metanación de lecho fijo en serie. Entre cada reactor se presenta retiro de energía para establecer un control de temperatura; también, entre los reactores se cuenta con un sistema de separación de agua para el aumento en la conversión. En la figura se presentan los flujos de las especies utilizadas. Por su parte, en la tabla 1 se presenta el dimensionamiento para cada reactor que se encuentra en la figura 1, con una condición de entrada al sistema de 255 °C y 1500 kPa, procesando 31,23 kmol/h de CO<sub>2</sub> y 7,8 kmol/h de H<sub>2</sub>.

Tabla 1

Características del reactor de metanación en la configuración adiabática.

Reactor	Tubos	Caudal (m <sup>3</sup> /s)	u <sub>g</sub> (m/s)	L (m)	T <sub>salida</sub> (°C)	V <sub>tubo</sub> (m <sup>3</sup> )	V <sub>catalizador</sub> (m <sup>3</sup> )	GHSV (h <sup>-1</sup> )
1	80	0,0009	1,89	1,6	490	0,0008	0,0324	65455,65
2	60	0,0005	1,04	1,6	470	0,0008	0,0243	42779,61
3	30	0,0013	2,60	1,6	430	0,0008	0,0121	37881,73
4	20	0,0009	1,83	2,4	385	0,0012	0,0121	17944,61
5	50	0,0002	0,42	2,4	279	0,0012	0,0304	6108,85

*Nota: tomada de Colelli, L., Bassano, C., Verdone, N., Segneri, V., & Vilaridi, G. (2024).*

Un modelo matemático para este sistema puede ser propuesto por medio de la consideración de reactores tipo PFR (*Plug Flow Reactors*) con variación axial y estado dinámico, cuyas ecuaciones de balance de metano, H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> corresponden a (Levenspiel, 1999):

$$\frac{\partial C_{CH_4}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{CH_4}}{\partial z} = r_{CH_4} \quad (\text{Ec. 2})$$

$$\frac{\partial C_{H_2}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{H_2}}{\partial z} = -4r_{CH_4} \quad (\text{Ec. 3})$$

$$\frac{\partial C_{CO_2}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{CO_2}}{\partial z} = -r_{CH_4} \quad (\text{Ec. 4})$$

Donde,  $C_{CH_4}$ ,  $C_{CO_2}$  y  $C_{H_2}$  corresponden a las concentraciones de cada especie,  $u$  es la velocidad del fluido en el reactor,  $z$  es la coordenada espacial a lo largo del reactor y  $r_{CH_4}$  es la velocidad de reacción del metano tipo LHHW (Langmuir-Hinshelwood–Hougen-Watson). Esta velocidad para catalizadores de Ni en la reacción de metanación se define como (Elnashaie y Elshishini, 1994):

$$r = \frac{k}{P_{H_2}^{3.5} (DEN)^2} \left( P_{CH_4} P_{H_2O}^2 - \frac{P_{H_2}^4 P_{CO_2}}{k_{eq}} \right) \quad (\text{Ec. 5})$$

En el cual,

$$DEN = 1 + K_{CO} P_{CO} + K_{H_2} P_{H_2} + K_{CH_4} P_{CH_4} + \frac{K_{H_2O} P_{H_2O}}{P_{H_2}} \quad (\text{Ec. 6})$$

Constante de equilibrio

$$k_{eq} = 10266,76 \exp \left( -\frac{22430}{T} + 26,057 \right) \frac{\text{kmol} \cdot \text{kPa}}{\text{kg} \cdot \text{h}} \quad (\text{Ec. 7})$$

Constante cinética

$$k = 2,290 \times 10^{16} \exp \left( -\frac{29336,0}{T} \right) \frac{\text{kmol} \cdot \text{kPa}}{\text{kg} \cdot \text{h}} \quad (\text{Ec. 8})$$

Constantes de equilibrio de absorción

$$K_{CH_4} = 6,65 \times 10^{-6} \exp \left( \frac{4604,28}{T} \right) \text{ kPa}^{-1} \quad (\text{Ec. 9})$$

$$K_{H_2O} = 1,77 \times 10^3 \exp\left(-\frac{10666.35}{T}\right) \text{ kPa}^{-1} \quad (\text{Ec. 10})$$

$$K_{H_2} = 6,12 \times 10^{-11} \exp\left(\frac{9971.13}{T}\right) \text{ kPa}^{-1} \quad (\text{Ec. 11})$$

La constante de equilibrio de la reacción de metanación de CO<sub>2</sub> sigue la relación dada en la (Ec. 7), mientras que la ecuación cinética se trata como una ecuación de tipo Arrhenius (Ec. 8). El Apéndice A presenta una tabla con otros tipos de catalizadores utilizados en la metanación.

Las ecuaciones anteriores son resueltas junto con la ecuación del balance de energía. El balance de energía para reactores de PFR en estado dinámico se define según (Levenspiel, 1999):

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \frac{\partial(\dot{m} C_p T)}{\partial V} = \dot{Q} - \sum \Delta H_r * r \quad (\text{Ec. 12})$$

Donde,  $\rho$  es la densidad del fluido (kg/m<sup>3</sup>),  $C_p$  es la capacidad calorífica específica (J/kg·K),  $T$  la temperatura del fluido (K),  $\dot{m}$  el Flujo másico (kg/s),  $V$  el volumen del reactor (m<sup>3</sup>),  $\Delta H_r$  es la entalpía de reacción para cada reacción (J/mol) y  $\dot{Q}$  es la tasa de transferencia de calor (W), la cual se define como,

$$\dot{Q} = h A_s (T_{pared} - T) \quad (\text{Ec. 13})$$

Donde,  $h$  el Coeficiente de transferencia de calor (W/m<sup>2</sup>·K),  $A_s$  el área de intercambio térmico (m<sup>2</sup>),  $T_{pared}$  la temperatura de la pared (K) y  $T$  la temperatura del fluido (K).

## 2.2 Tecnología Power-to-Gas

La metanación no solo contribuye a la producción de combustibles limpios, sino que también ayuda a mitigar las emisiones de CO<sub>2</sub> al utilizar este gas de efecto invernadero como materia prima (Rönnebeck & Müller, 2020). Además, la integración de la metanación en sistemas energéticos puede facilitar la conversión de fuentes de energía renovables intermitentes en un

combustible más manejable y almacenable (Huber *et al* 2006). Integrada en sistemas Power-to-Gas (PtG), la metanación facilita la conversión de energía eléctrica en gases como H<sub>2</sub> o CH<sub>4</sub>, permitiendo su almacenamiento y transporte en la red de gas natural existente. Esto mejora la gestión de fuentes de energía renovables intermitentes al transformarlas en combustibles manejables y almacenables a gran escala (Huber *et al* 2006). En apéndice A7 se ilustra cómo el sistema PtG facilita la integración de energías renovables y sus aplicaciones.

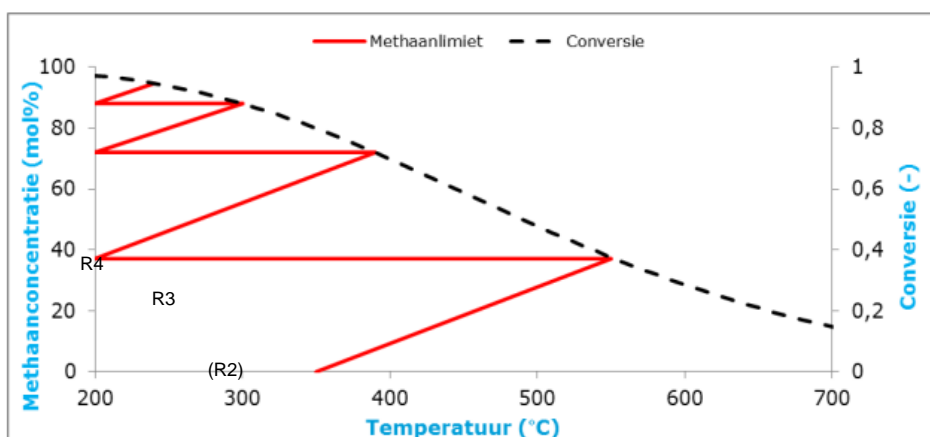
### 2.3 Planta piloto PtG en Holanda

El proyecto PtG en Rozenburg, Holanda, utiliza tecnología avanzada para convertir excedentes de electricidad en gas sintético a través de un proceso piloto que incluye tres módulos principales: un electrolizador, un sistema de metanación y equipos auxiliares (Vlap *et al.*, 2015). El electrolizador, basado en tecnología de membrana de intercambio de protones (PEM), descompone agua en hidrógeno y oxígeno, con una capacidad de 8,3 kWe, produciendo 1,1 Nm<sup>3</sup>/h de hidrógeno y alcanzando una eficiencia energética del 46,7%. La metanación se realiza en cuatro reactores de lecho fijo, fabricados en acero inoxidable, con un volumen total de 4,22 L y operando en un rango de temperatura de 150 a 700 °C. Estos reactores utilizan catalizadores con contenidos variables de óxido de níquel (entre el 11% y el 54%), para maximizar la conversión de H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>O. Este proceso presenta una eficiencia energética teórica máxima del 73%, logrando una conversión de hidrógeno a metano superior al 90% y produciendo agua como subproducto, la cual constituye aproximadamente el 70% del flujo másico saliente. Además, el sistema cuenta con tecnologías para el tratamiento del gas, control operativo y de seguridad, asegurando la calidad del gas para su inyección en redes y el cumplimiento de los estándares ambientales (Vlap *et al.*, 2015). Los datos dimensionales del proyecto power to gas (pGt) en Rozenburg, Holanda, se presentan en el Apéndice A.

La operación de esta planta piloto conlleva a los rendimientos mostrados en la Figura 3. En esta figura, la concentración de metano (línea roja) y la conversión de reactivos a metano (línea punteada negra) varían con la temperatura y el orden del reactor. El flujo de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2$  de alimentación ingresa al primer reactor (R1) a  $350^\circ\text{C}$  generando una conversión de  $\text{CO}_2$  del 38% y sale a  $550^\circ\text{C}$ . Posteriormente, el flujo es enfriado a  $200^\circ\text{C}$  antes de ingresar al segundo reactor (R2), en el cual la conversión global alcanza valores de 75% a  $398^\circ\text{C}$ . Luego, el flujo de salida de R2 es enfriado a  $200^\circ\text{C}$  para su alimentación al tercer reactor (R3), en donde la conversión global alcanza el valor de 85% a  $320^\circ\text{C}$ . Por último, el flujo de salida de R3 es enfriado a  $200^\circ\text{C}$  para su ingreso al cuarto reactor, en el cual se alcanza una conversión acumulada del 95% a  $250^\circ\text{C}$ . Los resultados reportados por Vlap *et al* (2015) (Figura 3) pueden ser utilizados para la validación del modelo matemático de la reacción de metanación, representado por las ecuaciones 2 - 13.

Figura 1

*Conversión global de  $\text{CO}_2$  (concentración de  $\text{CH}_4$ ) reportada por la planta piloto de metanación en Rozenburg, Holanda.*



*Nota: Tomada de Vlap, H., Holstein, J.B., van der Steen, A. y Grond, L. (2015).*

## 2.4 Diseño de estrategia de control Aspen Hysys

El programa HYSYS utiliza la siguiente ecuación como ley control del PID (AspenTech, 2000):

$$OP(t) = K_c \left( E(t) + \frac{1}{\tau_i} \int E(t) dt + \tau_d \frac{dE(t)}{dt} \right) \quad (\text{Ec. 16})$$

Donde,  $OP(t)$  es la señal de salida del controlador en función del tiempo y  $E(t)$  es el error entre el set point y el valor del parámetro a controlar. El controlador puede ser definido a través de las constantes de ganancia,  $K_c$ , constante integral,  $\tau_i$ , y ganancia derivativa,  $\tau_d$ .

Aspen HYSYS se rige por la ecuación antes mencionada y  $\tau_i$  se encuentra en el denominador, por lo que si se aumenta  $\tau_i$  se está reduciendo la ganancia integral. El propio manual de HYSYS proporciona una tabla con los parámetros recomendados de un PID según el equipo que se esté controlando.

## 3. Estado del arte

Bremer *et al.* (2019) estudiaron el desempeño de reactores de lecho fijo para la metanación, destacando el impacto de la configuración del reactor y las multiplicidades de estado estacionario en la operación del sistema. La exotermicidad de la reacción puede generar múltiples estados estables e inestables, influenciados por las capacidades caloríficas de los catalizadores y los puntos calientes en el sistema. En su análisis, los autores implementaron un control *feedback* de composición por manipulación de la temperatura del refrigerante. Según los autores, esto resulta útil ante restricciones operativas como la vida útil del catalizador. Bremer *et al.* señalaron la importancia de investigar aspectos como la difusión y la capacidad calorífica para diseñar reactores dinámicos optimizados.

Colelli et al. (2024) estudiaron el escalado del proceso Sabatier en Aspen Plus, comparando configuraciones adiabática y refrigerada para procesar 925 Nm<sup>3</sup>/h (750 H<sub>2</sub> y 175 CO<sub>2</sub>) a 15 bar y 250 °C. En la configuración adiabática, modelaron cinco reactores en serie, controlando la temperatura en los tres primeros mediante vapor e intercambiadores de calor. En la configuración refrigerada, definieron dos reactores en paralelo con válvulas y enfriamiento por agua vaporizada. Las simulaciones dinámicas mostraron que la configuración refrigerada fue más rápida y efectiva frente a perturbaciones (-5%, -30%, +5% de H<sub>2</sub>), cumpliendo especificaciones en estado estacionario y destacando diferencias clave en el control y comportamiento dinámico.

Vlap et al (2015) En el proyecto PtG en Rozenburg, Holanda, cuatro reactores de lecho fijo calentados eléctricamente con catalizadores de níquel con distintas concentraciones de óxido de níquel (NiO) convirtieron H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> en CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>. Diseñados con acero inoxidable 316 L y un sistema de capas para optimizar la transferencia de calor, el primer reactor controló el aumento de temperatura inicial, mientras los posteriores mejoraban la eficiencia. Aunque la conversión no fue completa, la eficiencia energética alcanzó un 35%, optimizada a temperaturas de 200-250 °C. El sistema demostró un arranque rápido, alcanzando capacidad máxima en 40 minutos.

Sharifian (2016) analiza un sistema PtG como solución para almacenar energía renovable, enfocándose en la producción de metano sintético (SNG) a partir de hidrógeno generado por electrólisis y metanación con CO<sub>2</sub>. Los autores evaluaron la electrólisis alcalina y de membrana de intercambio de protones (PEM), mostrando variaciones en eficiencia y capacidad según la tecnología y disponibilidad energética. La metanación fue simulada en Aspen Plus, utilizando los reactores de Gibbs y PFR, observándose que el rendimiento depende de la proporción H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> y de un control de la temperatura en el rango 200-250 °C para evitar desactivación del catalizador. La simulación consideró la purificación de metano mediante separación de agua y remoción de

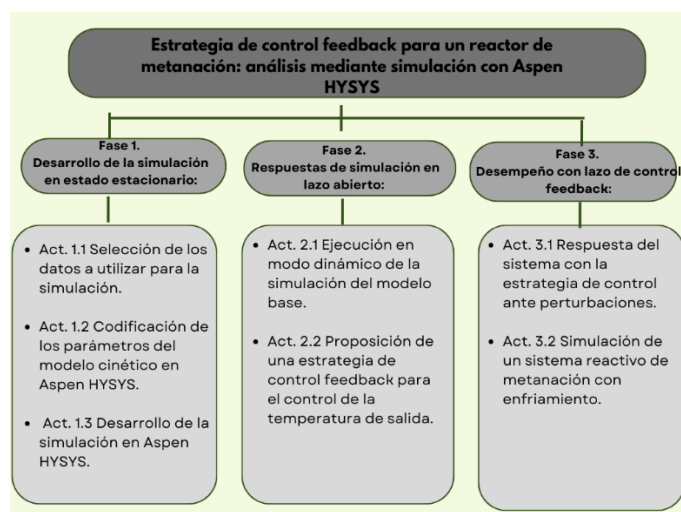
CO<sub>2</sub>, logrando una pureza del 98% (pureza requerida para inyección en redes de gas). La eficiencia global del sistema fue del 35%, destacando el potencial del PtG para almacenamiento estacional y estabilización energética.

Moioli *et al.* (2019) analizan la reacción de Sabatier como una etapa clave en la tecnología PtG, enfocándose en las condiciones necesarias para activar y optimizar el sistema reactivo. Utilizando catalizadores de Ru/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, el estudio computacional evalúa cómo variables como la temperatura de entrada, la presión y la velocidad espacial del gas (GHSV) influyen en la eficiencia y estabilidad del sistema. Según los autores, la reacción se activa a partir de una temperatura de alimentación de 210 °C a 10 bar con una GHSV de 3000 h<sup>-1</sup>. En reactores con sistemas de enfriamiento, la gestión adecuada del calor producido permite alcanzar mayores tasas de conversión y controlar los puntos calientes. El estudio propone un diseño de reactor en etapas, con enfriamiento intermedio y alimentación dosificada de CO<sub>2</sub>, lo que mejora la estabilidad operativa y permite una conversión casi total del CO<sub>2</sub>.

#### 4. Metodología

Figura 2

*Enfoque metodológico aplicado para el desarrollo de la investigación*



#### 4.1 Fase 1. Desarrollo de la simulación en estado estacionario:

*Act. 1.1 Selección de los datos a utilizar para la simulación.* Se estableció una lista de componentes que incluyó H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>. Para la simulación del proceso de metanación se eligió el paquete termodinámico “Soave-Redlich-Kwong”. Este paquete se emplea en simulaciones y optimizaciones para calcular las propiedades de equilibrio entre fases vapor y líquido (Libretexts, 2022). Las dimensiones y las condiciones de operación son presentadas en las tablas 1.

*Act. 1.2 Codificación de los parámetros del modelo cinético en Aspen HYSYS.* Para poder definir los parámetros cinéticos se consideró la cinética de Xu y Froment las cuales son las ecuaciones de la (Ec. 2) hasta la (Ec. 13) ya que se adapta bien a plataformas de simulación como Aspen HYSYS, facilitando el análisis computacional y la optimización de procesos. En el apéndice B se ilustran el PFD codificado en aspen HYSYS. La reacción de metanación fue codificada en Aspen HYSYS de tipo cinética con las especificaciones anteriores.

*Act. 1.3 Desarrollo de la simulación en Aspen HYSYS.* La simulación de metanación fue desarrollada en el programa Aspen HYSYS V14.0, con licencia académica para la UIS. Se utilizaron 4 reactores PFR adiabáticos con dimensiones y especificaciones que se encuentran en la tabla 1; en cada reactor se codificó un enfriador (*cooler*) y un calentador (*heater*) con un *flash* para la separación del agua, similar a las configuraciones presentadas en Valp *et al.* (2015) y Colelli *et al.* (2024). En la figura 5 se ilustra la simulación de metanación realizada en aspen HYSYS.

#### 4.2 Fase 2. Respuestas de simulación en lazo abierto:

*Act. 2.1 Ejecución en modo dinámico de la simulación del modelo base.* Se realizaron 5 perturbaciones al sistema en lazo abierto: para flujo +20% y 10%, relación  $H_2/CO_2$  entre 3 y 5 y T entrada al primer reactor de +30%. En la figura 4 se presenta una imagen de la simulación en modo dinámico con diferentes ventanas de respuesta.

*Act. 2.2 Proposición de una estrategia de control feedback para el control de la temperatura de salida.* En la figura 7 se presenta la estrategia de control compuesta por 11 lazos de control *feedback*. Entre estos se incluyó un controlador de flujo para la alimentación (con un compresor). Además, 4 controladores de temperatura de salida de reactores y 3 controladores de temperatura de salida de los enfriadores. También, 3 controladores de nivel de líquido en las salidas de cada *flash* para un adecuado equilibrio de fases y separación de agua generada.

Figura 3

*Simulación de metanación desarrollada en Aspen HYSYS*

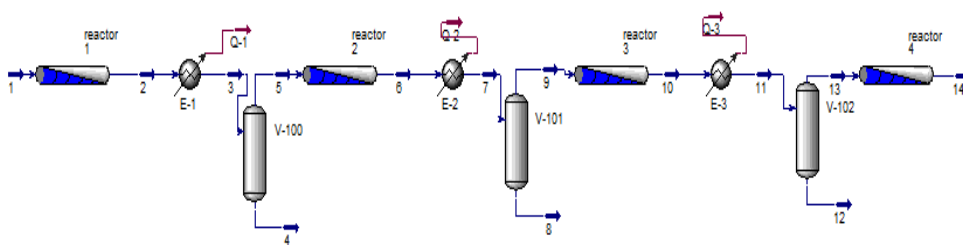




Figura 5

*Sistema de cuatro reactores con estrategia de control feedback.*

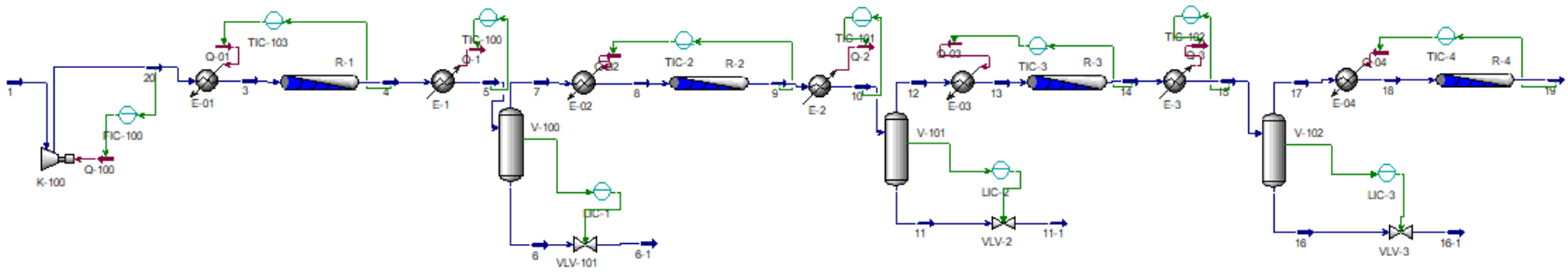
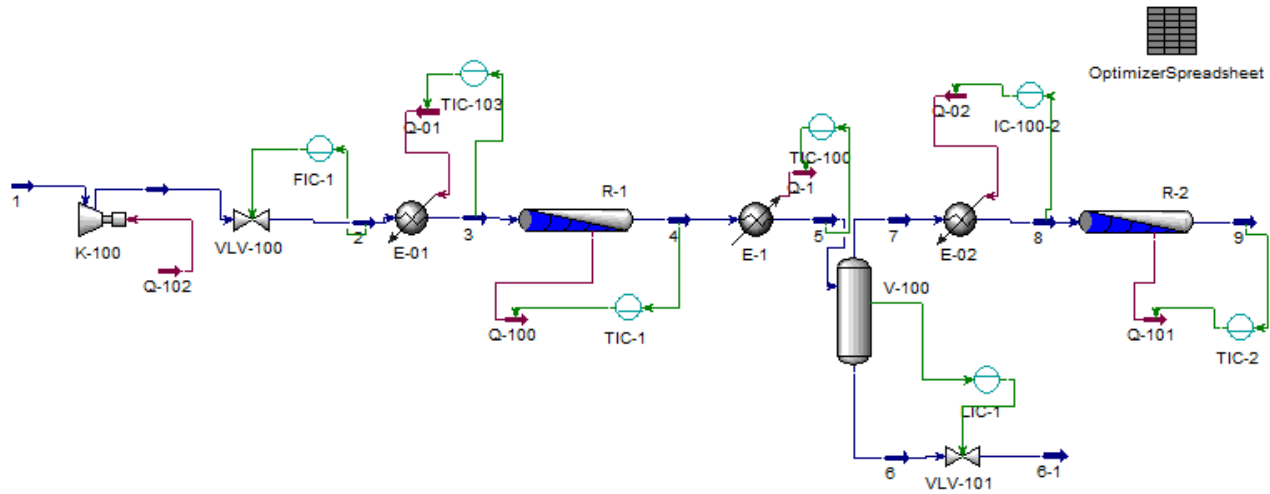


Figura 6

*Sistema de dos reactores con enfriamiento*



## 5. Resultados

### 5.1 Simulación en estado estacionario

En la figura 9 se presentan los perfiles de temperatura obtenidos para los cuatro reactores del sistema de metanación (Figura 7). Comparando los perfiles es posible afirmar que, la temperatura en los reactores va disminuyendo. En el primer reactor se alcanzó una conversión global del 52% de CO<sub>2</sub>, la cual coincide con los autores Moiola *et al.* (2019); la figura de Moiola *et al.* (se presenta en el apéndice A4) muestra que a una temperatura de entrada de 200 °C la conversión está por encima del 30% con una temperatura de salida por encima de 650 °C, lo cual valida lo obtenido con Aspen HYSYS.

Los flujos de salida, en kmol/h, del primer reactor corresponden a 14,8781 de H<sub>2</sub>, 3,7120 de CO<sub>2</sub>, 8,1761 de H<sub>2</sub>O y 4,0880 de CH<sub>4</sub>. A continuación, el flujo pasa a un intercambiador de calor (cooler), donde se reduce la temperatura a 5 °C, lo que implica un flujo de energía de 355 kJ/h. Seguidamente, el flujo prosigue al *flash* para separar toda el agua y finalmente pasa por un intercambiador de calor (heater) para calentarla a 230 °C e ingresar al siguiente reactor. En el reactor 2 se puede observar que la temperatura va disminuyendo progresivamente y la conversión va aumentando ya en el reactor 3 y 4 se ve un cambio bastante significativo tanto en la disminución de la temperatura debido a que ya ocurrió la reacción casi por completo. Los perfiles de temperatura para el sistema adiabático (apéndice ia) coinciden con los reportados por Colelli *et al.*, (2024), mostrados en el Apéndice A5.

La solución de la ecuación de equilibrio (Ec. 7) reporta una conversión de 98,38% para una temperatura de 675,9 °C, lo cual es similar a lo obtenido con Aspen HYSYS. Esta conversión también coincide con lo reportado por Moiola *et al.*, (2019). Considerando lo anterior, el primer

reactor no alcanza el equilibrio debido al aumento excesivo de su temperatura, lo cual desplaza el equilibrio químico hacia los reactivos. Esto ocurre porque la reacción de metanación es reversible y exotérmica, lo que significa que un incremento en la temperatura favorece la formación de los reactivos en lugar de los productos, según el principio de Le Chatelier. Como resultado, aunque las condiciones cinéticas puedan ser favorables, la conversión de  $\text{CO}_2$  a  $\text{CH}_4$  se ve limitada por las restricciones termodinámicas impuestas por la temperatura elevada del sistema. La implementación de un control térmico eficiente en el reactor, como sistemas de enfriamiento intermedios pueden mitigar este efecto.

En la figura que se encuentra en apéndice IB podemos observar la variación del flujo molar de distintos compuestos ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ) a lo largo de la longitud de cuatro reactores (Reactores 1 a 4) en un sistema de lazo abierto. En el Reactor 1, los flujos manifiestan una baja conversión debido a un incremento elevado en la temperatura (Figura 10A). En el Reactor 2, ocurre una disminución significativa de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2$  a partir de los 45 cm de longitud, con un aumento de  $\text{CH}_4$  y  $\text{H}_2\text{O}$ , reflejando reacciones más activas. Los Reactores 3 y 4 presentan comportamientos similares al Reactor 2, con un mayor nivel de conversión a medida que avanza la longitud del reactor.

La tabla 2 muestra los valores obtenidos para la conversión global en cada reactor del sistema, junto con la energía térmica extraída en los intercambiadores de calor y la cantidad de agua eliminada en los separadores. Estos datos permiten evaluar el rendimiento del sistema en términos de conversión, gestión térmica y separación de productos. En apéndice D se pueden analizar las figuras con la conversión, el calor retirado e introducido y el agua separada, reportadas por Aspen HYSYS.

Tabla 2

*Datos de conversión global, calor retirado e introducido y agua separada*

Sistema	Parámetro	Valor	Unidad
Reactor R-1	Conversión global	52	%
Reactor R-2	Conversión global	80	%
Reactor R-3	Conversión global	91	%
Reactor R-4	Conversión global	96	%
Intercambiador (cooler) E-1	Calor retirado	355	Kw
Intercambiador (cooler) E-2	Calor retirado	196	Kw
Intercambiador (cooler) E-3	Calor retirado	117,7	Kw
intercambiador (heater) E-01	Calor adicionado	59,09	Kw
intercambiador (heater) E-02	Calor adicionado	46,83	Kw
intercambiador (heater) E-03	Calor adicionado	55,76	Kw
intercambiador (heater) E-04	Calor adicionado	52,70	Kw
Separador (Flash) V-100	Agua retirada	8,1621	kgmole/h
Separador (Flash) V-101	Agua retirada	4,2175	kgmole/h
Separador (Flash) V-102	Agua retirada	1,7521	kgmole/h

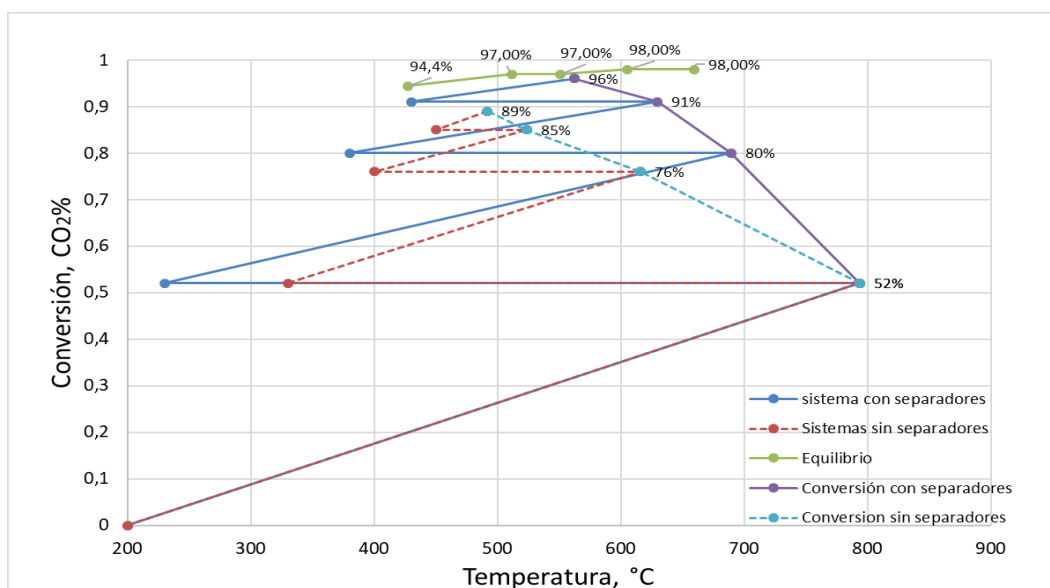
Nota. Los valores corresponden a los datos obtenidos de los reactores, intercambiadores y separadores de la simulación en Aspen HYSYS con una temperatura de 200 °C y 1500 kPa.

En la figura 11 se compara la tendencia de la conversión global de CO<sub>2</sub> con la temperatura de cada reactor para los sistemas con y sin separación de agua entre los reactores, el equilibrio y la conversión. El sistema con separadores muestra una conversión significativamente mayor, alcanzando un 96% a 562,1°C, mientras que el sistema sin separadores se estabiliza a una

conversión de 36% a partir de esa temperatura. La línea de equilibrio refleja el límite máximo, y se observa que el uso de separadores incrementa la conversión al acercarse más al equilibrio. En el reactor 1, la conversión y la temperatura son iguales para ambos sistemas; Sin embargo, en los reactores 2, 3 y 4, las diferencias son significativas. En el sistema sin separadores, la conversión varía de 52% a 89% entre 330°C y 491,7°C, mientras que en el sistema con separadores la conversión mejora a un rango de 52% a 96% entre 230°C y 562,1°C, reflejando una mayor cercanía a la línea verde del equilibrio. Los resultados son acordes respecto a los esperados con el principio de Le Chatelier.

Figura 10

Comparación de sistemas con y sin separadores de agua respecto al equilibrio

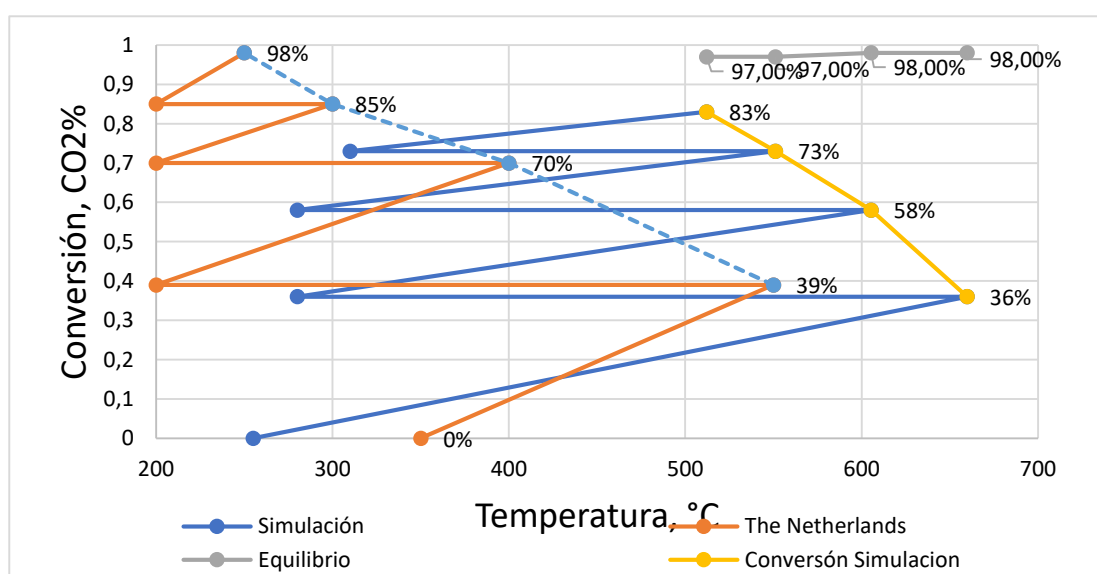


Por otro lado, en la figura 12 tenemos la comparación de la simulación con lo reportado por Vlap *et al.* (2015). Según la figura, la simulación con Aspen HYSYS reporta mayor temperatura de salida de los reactores y menor conversión de CO<sub>2</sub>. Sin embargo, la información dada por Vlap *et al.* (2015) no se especifica si los reactores emplean chaquetas de enfriamiento

para alcanzar altas conversiones a bajas temperaturas. Esta incertidumbre plantea desafíos técnicos, pero no impide el diseño y establecimiento de un sistema de control. Se recomienda realizar validaciones experimentales adicionales que permitan verificar los parámetros de operación y, en el futuro, lograr las conversiones deseadas.

Figura 7

*Comparación de la simulación con el proyecto The Netherlands*



Por otra parte, el impacto de la presión del sistema en las condiciones de operación de un reactor de metanación, manteniendo constantes las demás variables de entrada, fue evaluada por medio de la simulación. Las presiones seleccionadas fueron de 500 y 800 kPa, con el objetivo de analizar el comportamiento del reactor y comparar los resultados con los reportados por Moiola *et al.* (2019). La simulación realizada en Aspen HYSYS mostró que, para una presión de 500 kPa, la temperatura de salida alcanzó los 743,9 °C y se obtuvo una conversión de CO<sub>2</sub> del 60%. Al aumentar la presión a 800 kPa, la temperatura de salida se incrementó a 766,2°C y la conversión de CO<sub>2</sub> mejoró ligeramente hasta el 63%. Estos resultados coinciden con las

observaciones de Muioli *et al.* (2019), quienes señalan que un aumento en la presión puede mejorar la conversión debido al desplazamiento del equilibrio químico hacia los productos en reacciones que involucran una disminución en el número de moles de gas. Sin embargo, también destacaron la necesidad de gestionar eficientemente el calor generado, ya que el aumento de temperatura puede limitar la conversión debido a las restricciones termodinámicas.

La conversión global de los cuatro reactores adiabáticos en serie, con los parámetros dimensionales reportados por Colelli *et al.* (2024), corresponde a 96%, reflejando el desempeño acumulado del sistema bajo las condiciones operativas establecidas. Este resultado está influenciado por factores como la presión, temperatura y la gestión térmica mediante intercambiadores de calor. Aunque no se alcanza el 100% debido a las limitaciones termodinámicas y cinéticas, la configuración es eficiente y podría optimizarse con estrategias como la recirculación de reactivo. La comparación de los resultados de la simulación desarrollada en Aspen HYSYS soporta la representación del sistema de metanación analizado en el presente documento.

## 5.2 Simulación en modo dinámico

En la tabla 3 se detallan las conversiones y las temperaturas de salida de cada reactor obtenidas con la simulación en estado estacionario y con la simulación estabilizada en modo dinámico. Según esta tabla, los valores son muy similares entre estos estados, con lo cual la simulación dinámica puede ser utilizada en el análisis de las respuestas transitorias del sistema de metanación.

Tabla 3

*Datos en estado estacionario y dinámico*

Estado	Reactor (R)	Conversión final (%)	Temperatura final (°C)
Estacionario	R1	51,92	799
	R2	56,72	691,8
	R3	49,38	659,4
	R4	53,99	578,5
Dinámico	R1	51,74	800,5
	R2	56,15	695,6
	R3	49,31	661,8
	R4	53,3	584,4

### 5.2.1 Respuesta en lazo abierto

La tabla 4 presenta las diferentes perturbaciones realizadas para el proceso de metanación, mostrando su impacto en la conversión de estado final (%) y la temperatura final en los reactores R1, R2, R3 y R4. Para el caso base, las conversiones oscilan entre 49,31% y 56,15%, con temperaturas finales decrecientes desde 800,5 K en R1 hasta 584,4 K en R4. Al incrementar el flujo en un 20%, la conversión disminuye en R3 y R4, con temperaturas más bajas, reflejando una tendencia inversa (Apéndice G3). Al reducir el flujo en un 10%, la conversión aumenta notablemente en R3 y R4 (62,00% y 77,10%). Cuando la concentración de  $H_2/CO_2$  aumenta a 5, se obtiene una conversión significativamente alta, alcanzando 99,89% en R4, con un comportamiento de primer orden y temperaturas similares al caso base. En cambio, con  $H_2/CO_2=3$ , la conversión disminuye drásticamente, llegando a 11,78% en R4, también bajo un comportamiento de primer orden. De otro lado, al reducir la temperatura de entrada en R1 un 30% se presenta una conversión decreciente (comportamiento inverso) y con una leve disminución en temperaturas. En el Apéndice G se presentan las figuras que evidencian las respuestas obtenidas con cada perturbación realizada.

Tabla 4

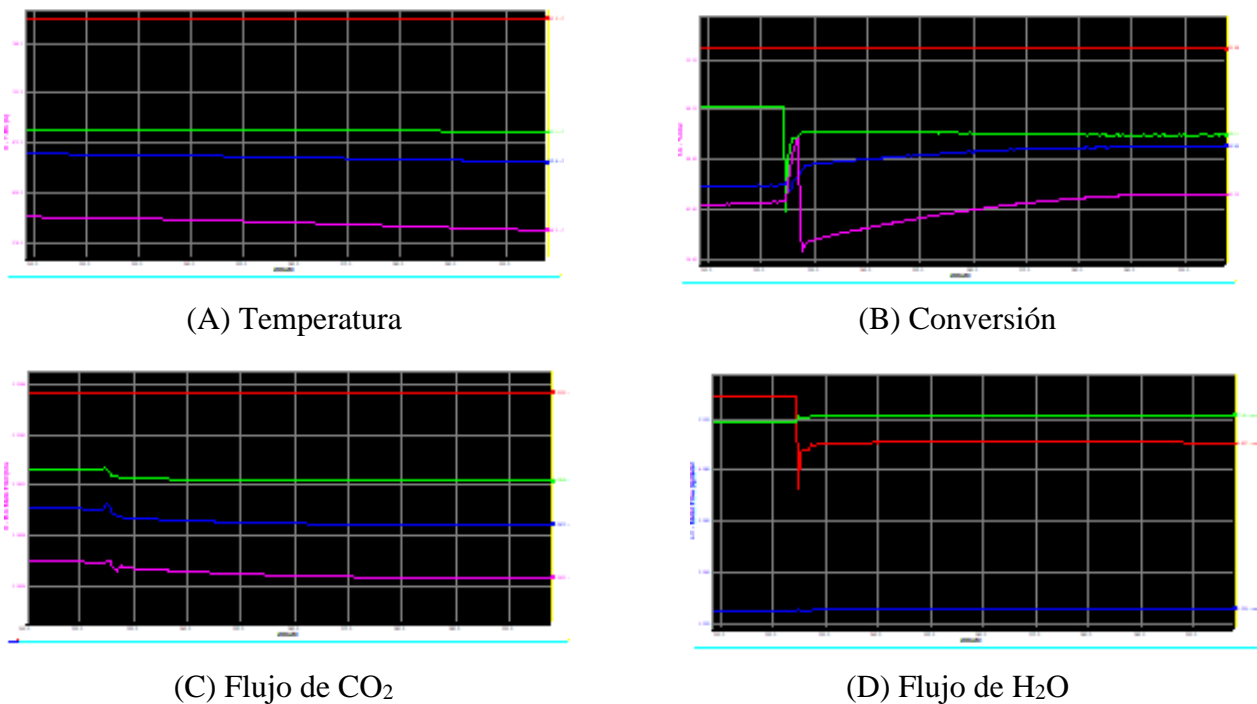
*Perturbaciones en lazo abierto*

Cambio	Conversión estado final %				Respuesta	Temperatura Final (°C)				Tiempo de estabilización (minuto)
	R1	R2	R3	R4		R1	R2	R3	R4	
Base (39,23 kmol/h H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub> =4 25°C)	51,7	56,1	49,3	53,3	-	800,5	695,6	661,8	584,4	180
1) Flujo +20%	52,5	49,4	44,5	44,6	Inversa	792,2	688,1	628,8	562,8	80
2) Flujo -10%	51,8	45,2	62,0	77,1	Inversa	792,1	681,5	651,3	590,6	325
3) H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub> = 5	61,0	78,2	95,3	99,8	Primer Orden	800,9	697,8	659,0	584,9	220
4) H <sub>2</sub> /CO <sub>3</sub> = 3	40,7	34,7	20,0	11,7	Primer Orden	800,1	698,9	656,3	584,5	230
5) T-entrada R1= 30%	51,9	48,4	43,4	38,5	Inversa	791,7	683,8	660,5	599,4	-

En la figura 8 se analiza la respuesta del sistema ante un cambio escalón de -10% en el flujo de alimentación. La Figura 8A muestra que la temperatura permanece estable dentro del rango operativo, sin variaciones significativas. En la Figura 8B, correspondiente a la conversión, se observa una acción inversa en todos los reactores excepto en el primero, donde no se registran cambios. La Figura 8C revela que el flujo de CO<sub>2</sub> presenta alteraciones en la mayoría de los reactores, mientras que el reactor 1 se mantiene constante. La Figura 8D evidencia un cambio abrupto en el flujo de H<sub>2</sub>O en el reactor 1.

Figura 8

*Respuestas en lazo abierto para temperatura de salida de los reactores, conversión, flujo de CO<sub>2</sub> a la salida de los reactores y flujo de H<sub>2</sub>O en los flash, ante perturbación escalón*

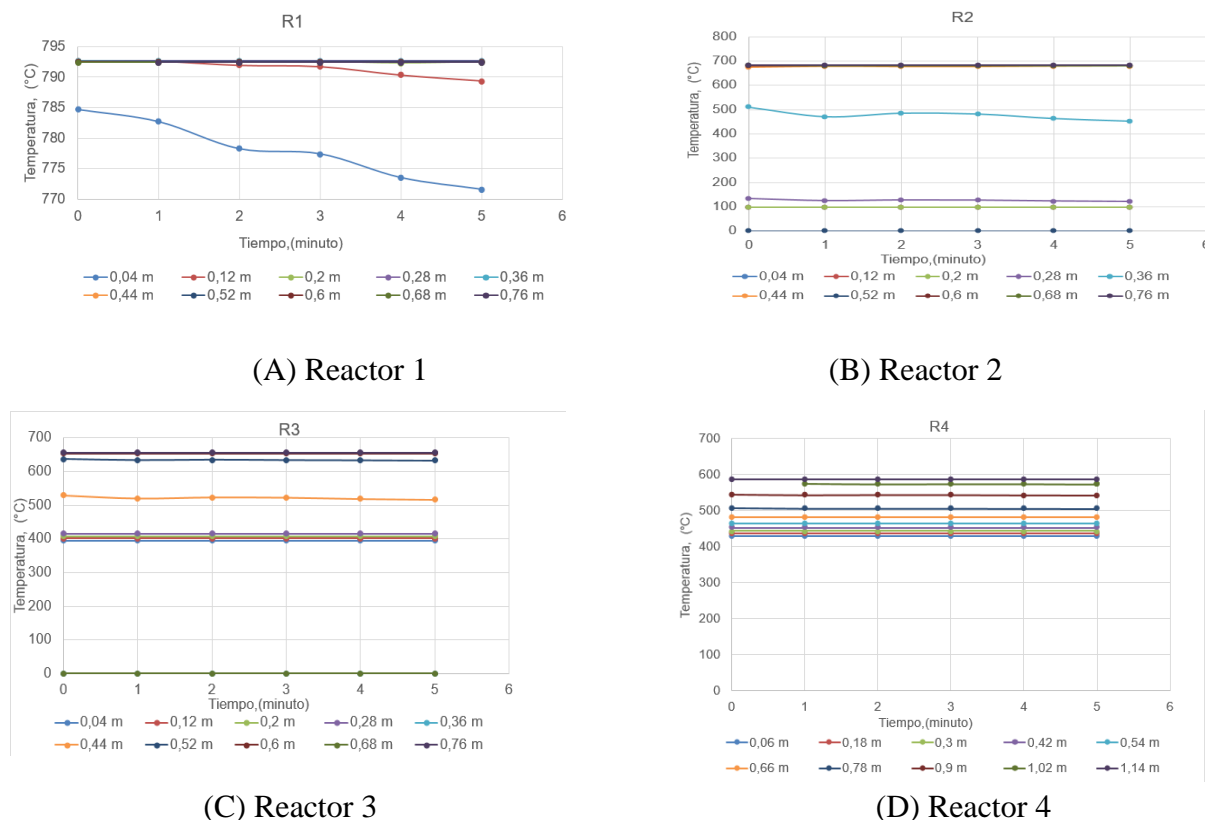


La figura 9 muestra la variación de temperatura a lo largo del tiempo y la longitud para cada reactor (R1, R2, R3 y R4), con un cambio escalón del 30% en la temperatura de entrada a R1. En el eje Y se representa la temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ), y en el eje X la longitud en metros. En Reactor 1 (A), la temperatura disminuye progresivamente a medida que avanza el tiempo, especialmente en posiciones cercanas al inicio de la longitud (0.04 m), mientras que otras posiciones se mantienen estables. En Reactor 2 (B), la temperatura permanece relativamente constante a lo largo del tiempo, con ligeras diferencias entre posiciones a lo largo de la longitud. En Reactor 3 (C), las temperaturas son prácticamente constantes en todas las posiciones evaluadas, indicando estabilidad térmica. Finalmente, en Reactor 4 (D), las temperaturas también muestran un comportamiento estable en todas las posiciones a lo largo de la longitud, sin variaciones significativas. La apertura del 30% en la temperatura de entrada de R1 afecta principalmente al primer reactor, observándose una disminución notable en la temperatura inicial y menor impacto

en los reactores posteriores, dando así una acción inversa inestable ya que a lo largo de tiempo esta se vuelve inestable.

**Figura 9**

*Distribución de temperatura en los reactores R1, R2, R3 y R4 con un cambio del 30% en la válvula de TIC-1*



5.2.2 Respuesta en lazo cerrado reactores adiabáticos

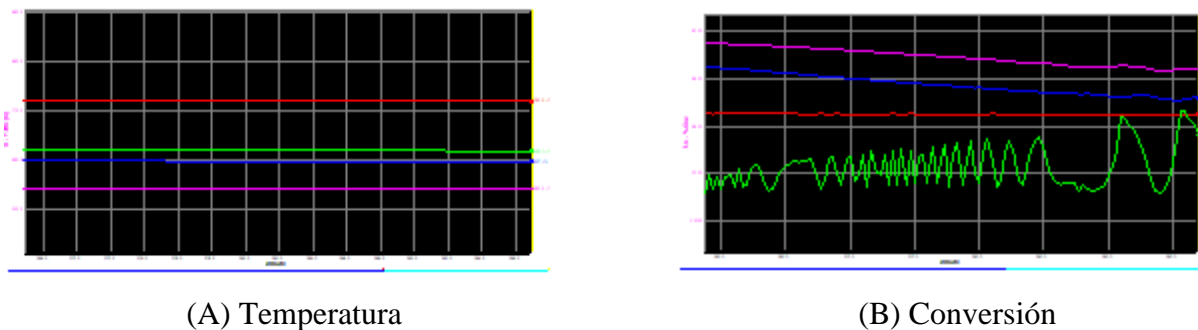
La tabla 4 (Apéndice E) detalla los lazos de control del sistema presentado en la Figura 8, diferenciados en controladores de flujo molar (FCI-1), temperatura (TIC-1 a TIC-4) y de porcentaje de volumen líquido (LIC-1 a LIC-3). El FCI regula el flujo molar en la entrada del primer reactor seguidamente los TIC regulan la temperatura de salida de los reactores (R-1 a R-4), manipulando el flujo de energía mediante válvulas de servicio industrial con acción directa y rango de operación entre 250-650 °C. En caso de falla, estas válvulas se cierran para evitar

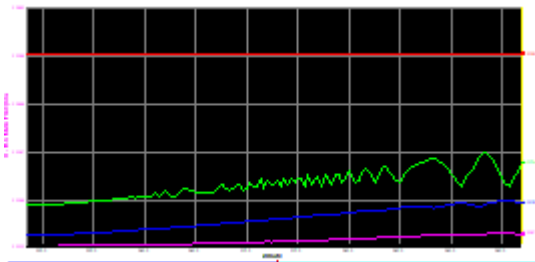
excesos energéticos. Por su parte, los LIC controlan el porcentaje de volumen líquido en los separadores (V-100, V-101, V-102), ajustando el flujo de agua mediante válvulas de líquido con acción inversa y un rango operativo de 10%-90%. En fallas, estas válvulas se abren para prevenir acumulaciones de líquido. Los rangos de variables manipuladas se expresan en kJ/h para los TIC y en kgmole/h para los LIC, asegurando la estabilidad y eficiencia del sistema. También, la Tabla del Apéndice E1 presenta los parámetros de sintonización de los controlares que son  $K_c$  y  $T_i$

Las temperaturas por encima de  $700^{\circ}\text{C}$  pueden conllevar a que la reacción de metanación genere coque, con la degradación del respectivo producto (Vlap *et al.*, 2015). Por lo anterior, el esquema de control debe buscar un *setpoint* inferior a  $700^{\circ}\text{C}$  en la temperatura de salida de los reactores. La Figura 10 presenta las respuestas del sistema de control en lazo cerrado para alcanzar el *setpoint* de  $700^{\circ}\text{C}$  en la salida de los reactores. Según esta figura, el sistema de control conlleva a inestabilidad en los reactores, por lo cual, el *setpoint* no es factible en los reactores adiabáticos. Esto también puede ser inferido a partir de las respuestas obtenidas en lazo abierto para un cambio en la apertura de la válvula asociada al lazo TIC-1.

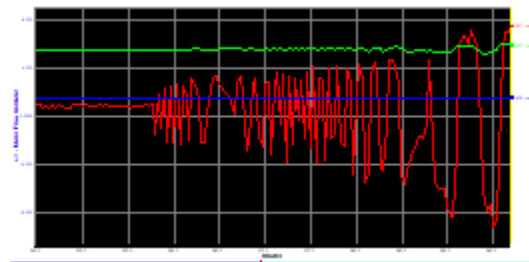
Figura 10

*Respuestas dinámicas de temperatura, conversión y flujos molares con control en lazo cerrado*





(C) Flujo de CO<sub>2</sub>



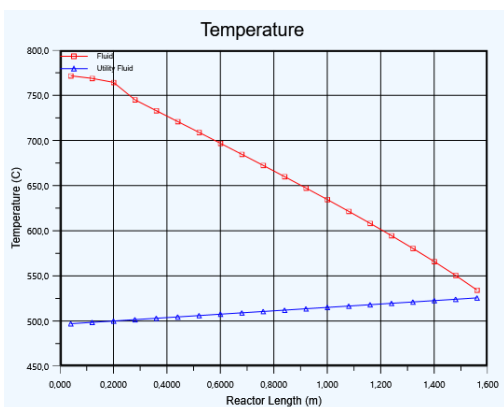
(D) Flujo de H<sub>2</sub>O

5.2.3 Respuesta en lazo cerrado reactores con enfriamiento

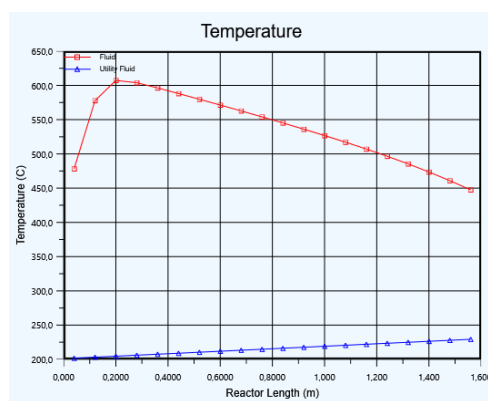
La Figura 8 ilustra el PFD desarrollado para los reactores de metanación con enfriamiento. En la figura 11 se presentan los perfiles de temperatura, flujo molar y composición de los componentes principales a lo largo de los dos reactores con enfriamiento, en un análisis realizado sin aplicar el sistema en modo dinámico. Los gráficos muestran cómo varían estos parámetros en función de la longitud del reactor, permitiendo identificar tendencias clave en el comportamiento del proceso, como la disminución de la temperatura y del flujo molar, así como la evolución de las fracciones molares de los compuestos involucrados.

Figura 11

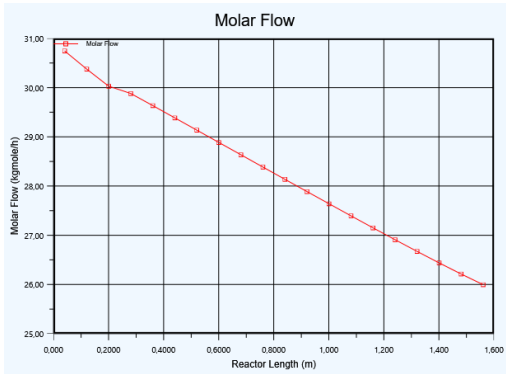
*Perfiles de los reactores en estado estacionario en lazo cerrado*



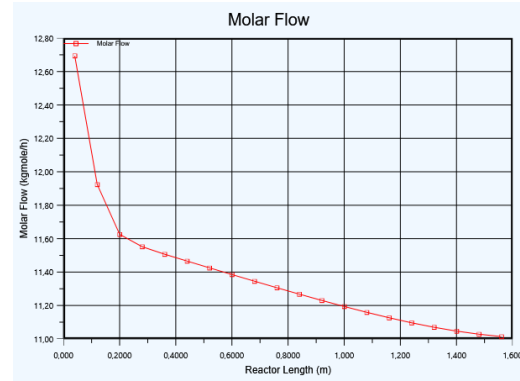
(A) Temperatura reactor 1



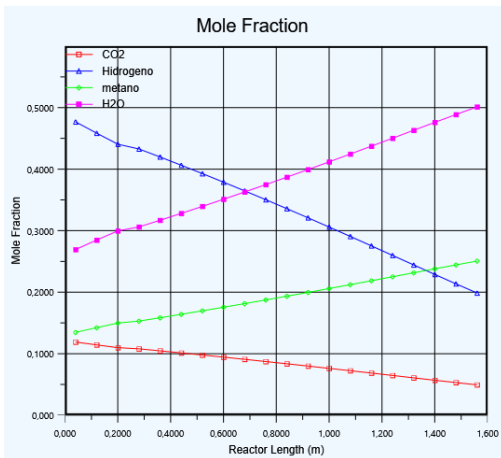
(B) Temperatura reactor 2



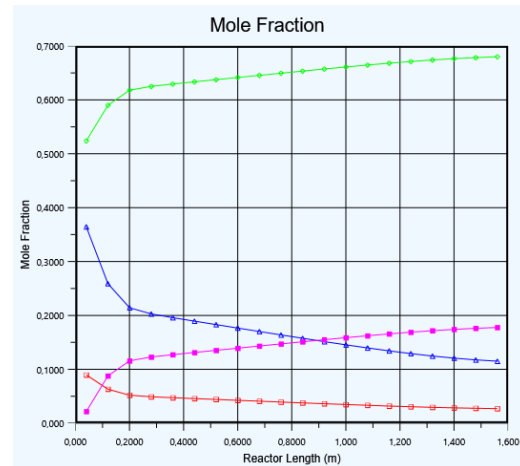
(C) Flujo molar reactor 1



(D) Flujo molar reactor 2



(E) Composición reactor 1



(F) Composición reactor 2

En la tabla 5 se pueden observar que en condiciones base, las conversiones en los reactores R1 y R2 fueron de 83,64 % y 76,09 %, respectivamente, con temperaturas finales de 531, 4 °C y 447,5 °C y un tiempo de estabilización prolongado de 3836 minutos. Al aumentar el flujo en un 10 %, la respuesta fue inversa, alcanzándose temperaturas finales de 529,8 °C y 453,4 °C, con un tiempo de estabilización de solo 10 minutos. Por otro lado, al reducir el flujo en un 10 %, las conversiones apenas variaron y las temperaturas aumentarán ligeramente a 535,1 °C y 450,2 °C, con un tiempo de estabilización de 20 minutos. Cuando la relación H2/CO2 fue ajustada a 5, las conversiones aumentaron notablemente a 95,41 % en R1 y 99,85 % en R2, con un comportamiento de primer orden y temperaturas finales de 525,8 °C y 452,9 °. Sin embargo, con

una relación H<sub>2</sub>/CO<sub>3</sub> de 3, las conversiones cayeron significativamente a 65,46 % y 24,15 %, mostrando también un comportamiento de primer orden, con temperaturas finales de 531,1 °C y 457,2 °C. Finalmente, al aumentar la temperatura de entrada en R1 en un 30 %, las conversiones permanecieron casi constantes, con un comportamiento de primer orden y temperaturas finales de 535,1 °C y 449,8 °C, estabilizándose en 10 minutos. En apéndice E podemos observar las figuras que muestran las respuestas de cada perturbación realizada en cada caso.

Tabla 5

*Perturbaciones en lazo cerrado*

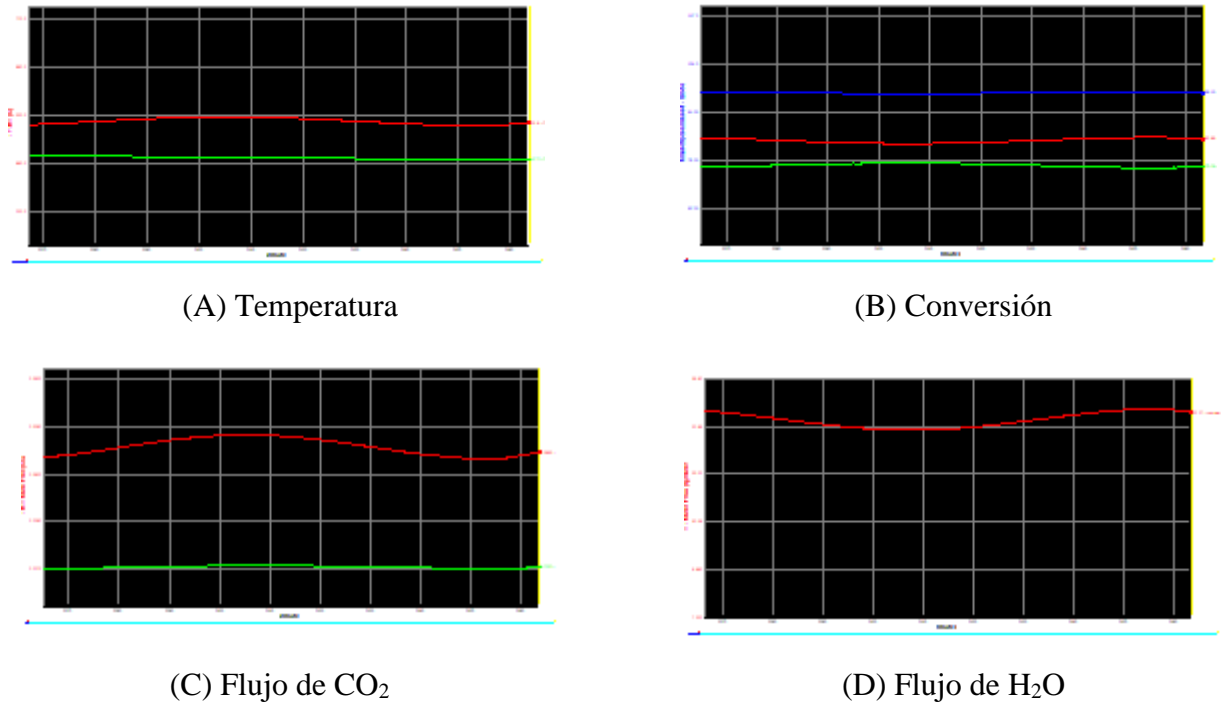
Perturbación	Conversión, %		Respuesta	Temperatura Final (°C)		Tiempo de estabilización (minutos)
	R1	R2		R1	R2	
Base (39,23 kmol/h H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub> =4 25°C)	83,64	76,09		531,4	447,5	3836
1) Flujo +10%	83,92	73,57	inversa	529,8	453,4	10
2) Flujo -10%	83,37	76,37		535,1	450,2	20
3) H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub> = 5	95,41	99,85	primer orden	525,80	452,90	10
4) H <sub>2</sub> /CO <sub>3</sub> = 3	65,46	24,15	primer orden	531,10	457,20	10
5) T-entrada R1= 30%	83,34	76,11	primer orden	535,1	449,80	10

En la figura 12 se presentan las respuestas dinámicas de temperatura, conversión y flujos molares de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O en un sistema operado en lazo cerrado con modo dinámico. El sistema alcanzó una conversión global del 96%, distribuyéndose en un 88,7% en el primer reactor (R1) y un 78,8% en el segundo reactor (R2). Estos resultados evidencian una mayor eficiencia en comparación con el sistema de cuatro reactores sin enfriamiento, logrando una conversión global significativamente superior. El perfil dinámico de temperatura muestra cómo el sistema se

estabiliza gracias al enfriamiento, favoreciendo una mayor conversión, mientras que los flujos de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$  reflejan las variaciones transitorias hasta alcanzar el equilibrio operativo.

Figura 12

*Respuestas dinámicas de temperatura, conversión y flujos molares en lazo cerrado*

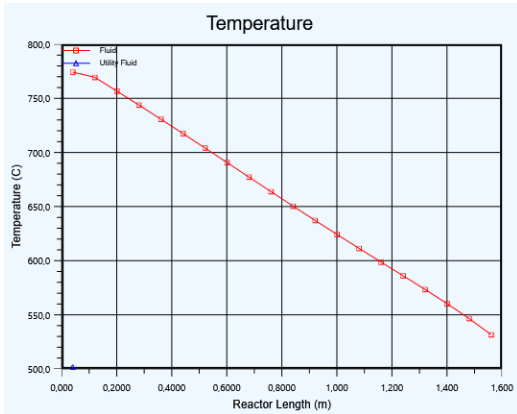


En la figura 13 se presentan los perfiles de temperatura, flujo molar y composición en modo dinámico, destacando diferencias significativas respecto a los obtenidos en estado estacionario. El perfil de temperatura en modo dinámico muestra variaciones abruptas al inicio del reactor debido a la respuesta transitoria, mientras que en estado estacionario disminuye de manera uniforme. El flujo molar, en modo dinámico, presenta una reducción más irregular al inicio, en contraste con la disminución constante observada en estado estacionario, reflejando ajustes transitorios en las tasas de reacción. Finalmente, los perfiles de composición muestran fluctuaciones iniciales más marcadas en modo dinámico, especialmente en las fracciones molares

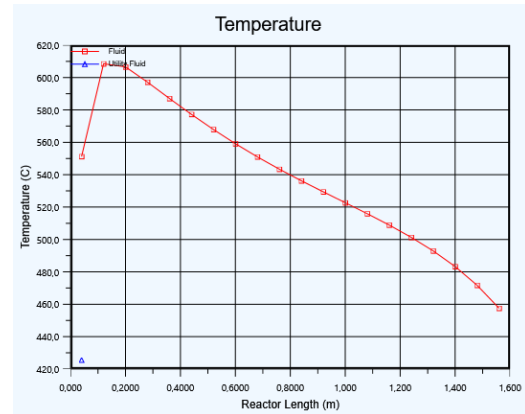
de reactantes y productos, lo que indica un periodo de ajuste antes de estabilizarse, a diferencia de los perfiles estacionarios que son más lineales y predecibles.

Figura 13

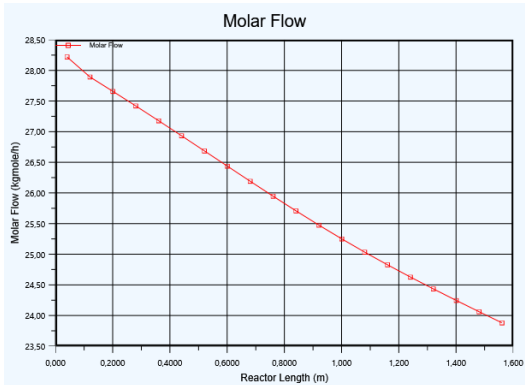
*Perfiles de los reactores en modo dinámico en lazo cerrado*



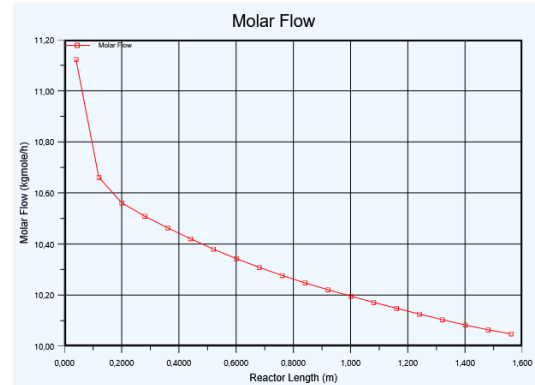
(A) Temperatura reactor 1



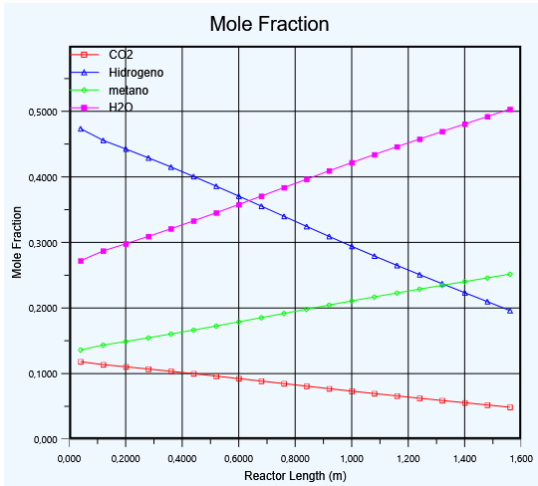
(B) Temperatura reactor 2



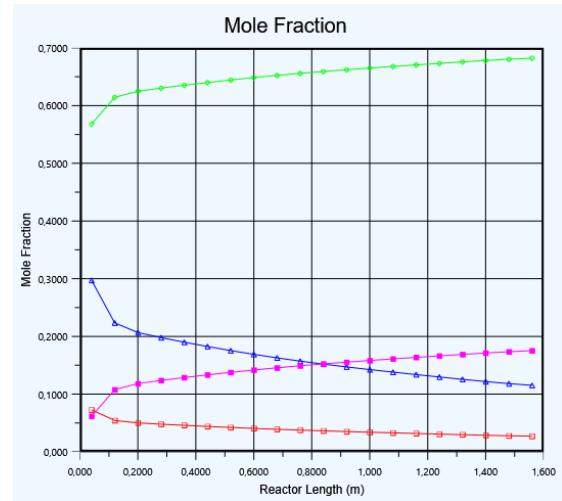
(C) Flujo molar reactor 1



(D) Flujo molar reactor 2



(E) Composición reactor 1

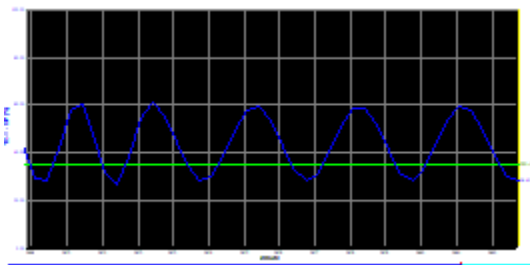


(F) Composición reactor 2

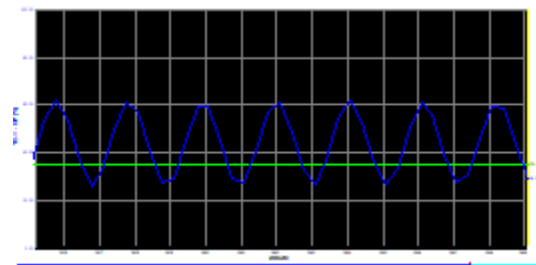
En la figura 14 se ilustran diferentes valores de ganancia que afectan la respuesta dinámica del sistema en R1. Con ganancia  $K_c=1$ , las oscilaciones son moderadas y estables; con  $K_c=2$ , se intensifican, acercándose a la inestabilidad y teniendo menor amplitud. Las oscilaciones disminuyen y el sistema es más estable, y con  $K_c=0,1$ , las oscilaciones son mínimas y rápidamente amortiguadas, también tienen mayor amplitud, aunque con una respuesta más lenta.

Figura 14

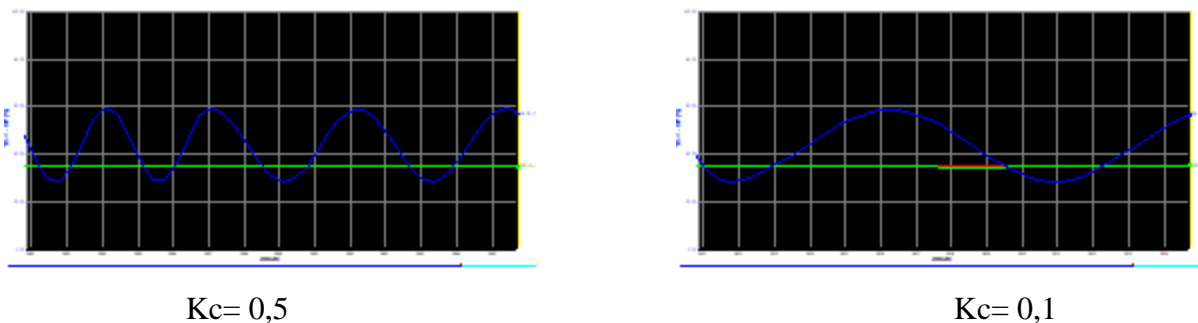
*Diferentes valores de ganancia para R1*



$K_c=1$



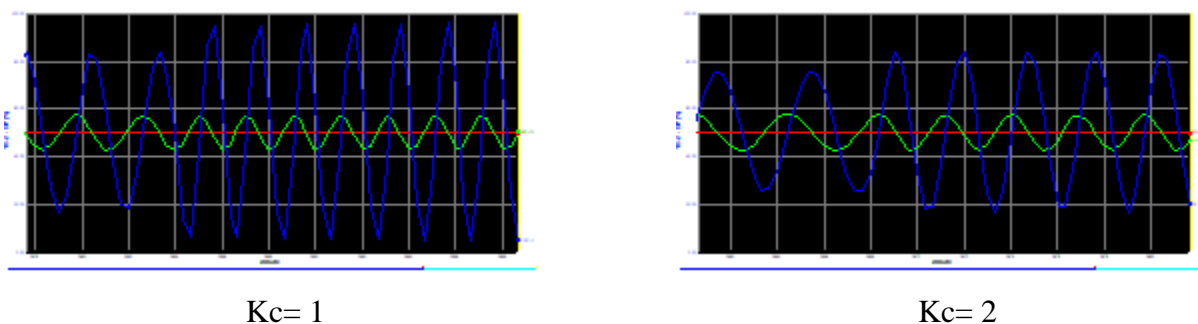
$K_c=2$

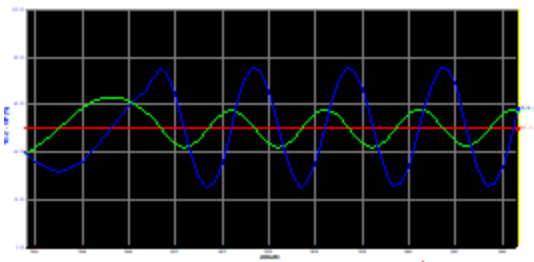
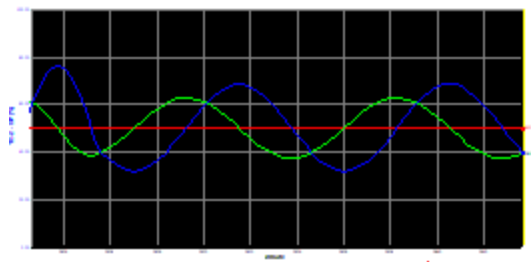


En la figura 15 se ilustran diferentes valores de ganancia que afectan la respuesta dinámica del sistema en R2. Se puede observar una diferencia bastante significativa con R1 ya que la amplitud de cada ganancia es mayor a las obtenidas con R2, esta diferencia se da porque los valores de tiempo integral y derivativo son diferentes para cada uno. Para R1 el tiempo integral tiene un valor de 0,001 y para el tiempo derivativo de 0,0001, para R2 el tiempo integral es de 0,0005 y el tiempo derivativo de 0,0001 siendo menores que los de R1. Según la Figura 20, la ganancia última para el controlador de R2 se encuentra entre 0,5 y 1. Es importante obtener un valor de ganancia ideal para así obtener un Offset pequeño más o menos de 0,5, este disminuye a medida que se aumenta la ganancia.

Figura 15

*Diferentes valores de ganancia para R2*



 $K_c = 0,5$  $K_c = 0,1$ 

## 6 Conclusiones

Se desarrolló un modelo base del proceso de metanación en estado estacionario utilizando Aspen HYSYS, logrando establecer las condiciones iniciales necesarias para el análisis dinámico y el diseño del lazo de control *feedback*. Este modelo permitió identificar las conversiones y temperaturas finales en todos los reactores como parámetros clave del proceso, proporcionando una referencia sólida para evaluar el impacto de las perturbaciones y los ajustes operativos en la estabilidad y eficiencia del sistema.

En la simulación dinámica en lazo abierto, el sistema respondió de manera diversa a perturbaciones tipo escalón, mostrando tiempos de estabilización rápidos (325 a 80 minutos) en la mayoría de los escenarios evaluados. Sin embargo, estas respuestas también evidenciaron fluctuaciones significativas en las conversiones y temperaturas, lo que subrayó la necesidad de un control activo para garantizar la estabilidad ante variaciones externas y un sistema de enfriamiento con dos reactores para así obtener la mayor conversión posible.

Los cuatro reactores adiabáticos fueron descartados debido a que no llegaba al *setpoint* de 700°C debido a esto se optó por los dos reactores con sistema de enfriamiento.

Los desempeños en lazo cerrado con los dos reactores con sistema de enfriamiento se estabilizaban, pero a gastos de un tiempo considerablemente prolongado (3836 minutos). Esto

sugiere que, aunque el lazo de control *feedback* es efectivo para reducir la variabilidad, su diseño debe mejorar para equilibrar estabilidad y tiempos de respuesta más eficientes frente a cambios en las condiciones de operación.

### Recomendaciones

Se recomienda realizar más estudios que aborden la influencia de los tiempos integral y derivativo en los lazos de control. Además, es importante analizar en detalle la integración de sistemas adiabáticos y sistemas con enfriamiento para mejorar la estabilidad y eficiencia del proceso de metanación. Esto incluiría evaluaciones experimentales que validen los resultados simulados, permitiendo ajustes en el diseño de los controladores para mejorar el desempeño global del sistema.

## Referencias bibliograficas

- Ahmed Gamal, Khoulood Jlassi, Yahia H. Ahmad, Mengqi Tang , Siham y. Al-Qaradawi, Mohamed M. Chehimi, Kenneth I. Ozoemena , Abubakr M. Abdullah. (2024). *Catalizadores soportados en carbono para la metanización del dióxido de carbono: una revisión.* ScienceDirect, de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2212982024002166>
- AspenTech. (2000). *Guía de operación HYSYS.* Aspen Technology.
- Beñat, P. A., Antonio, G. M. J., Tecnología, F. C. Y., & F, Z. E. T. (2020). *Estrategias de operación para la gestión del calor en la reacción de metanación de CO<sub>2</sub>.* <https://addi.ehu.es/handle/10810/38519>
- Elnashaie, SSEH (1994). Modelado, simulación y optimización de reactores catalíticos industriales de lecho fijo.
- Huber, G. W., Iborra, S., & Corma, A. (2006). Synthesis of Transportation Fuels from Biomass: Chemistry, Catalysts, and Engineering. *Chemical Reviews*, 106(9), 4044-4098. <https://doi.org/10.1021/cr068360d>
- Jens Bremer y Kai Sundmacher. (2019). *Extensión del rango de operación mediante control de puntos calientes para reactores de metanización catalítica de CO<sub>2</sub>* (1.<sup>a</sup> ed.). [https://www.researchgate.net/publication/332336259\\_Operation\\_Range\\_Extension\\_via\\_Hot-Spot\\_Control\\_for\\_Catalytic\\_CO\\_2\\_Methanation\\_Reactors](https://www.researchgate.net/publication/332336259_Operation_Range_Extension_via_Hot-Spot_Control_for_Catalytic_CO_2_Methanation_Reactors)
- Jiahui Yu, Bingge Feng, Shuai Liu, Mud Xueliang, Edward Lester, Tao Wu. (2022). *Catalizador de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> altamente activo para la metanización de CO<sub>2</sub> mediante la descomposición del precursor Ni-MOF@ Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> mediante plasma frío.* ScienceDirect, de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0306261922004408>

Jochen AH Dreyer ,Peixin Li,Linghai Zhang,Gein Khai Beh,Runduo Zhang,Patrick H.-L.

Siéntate ,Wey Yang Teoh. (2017). *Influencia de la reducibilidad del soporte de óxido en la metanización de CO<sub>2</sub> sobre catalizadores basados en Ru*. ScienceDirect, de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0926337317307464>

Laura, B. C. V., & Carlos, M. I. J. (2020, 7 julio). *Modelización de un reactor de metanación para la generación de metano sintético*. <https://addi.ehu.es/handle/10810/49821>

Leonardo Colelli y , Claudia Bassano , Nicola Verdone , Valentina Segneri , Giorgio Vilardi Y. (2024). *Power-to-Gas: Análisis de procesos y estrategias de control para sistemas de metanización catalítica dinámica*. ScienceDirect, de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0196890424001985>

Levenspiel, O. (1999). *Ingeniería de reacciones químicas* (3rd ed.). Wiley.

Libretexts. (2022, 2 noviembre). *10.4: Soave-Redlich-Kwong EOS (1972)*. LibreTexts Español. [https://espanol.libretexts.org/Ingenieria/Ingenier%C3%ADa\\_Qu%C3%ADmica/Relaciones\\_de\\_Fase\\_en\\_Ingenier%C3%ADa\\_de\\_Embalses\\_\(Adewumi\)/10%3A\\_EOS\\_c%C3%BAbicos\\_y\\_su\\_comportamiento\\_II/10.04%3A\\_Soave-Redlich-Kwong\\_EOS\\_\(1972\)](https://espanol.libretexts.org/Ingenieria/Ingenier%C3%ADa_Qu%C3%ADmica/Relaciones_de_Fase_en_Ingenier%C3%ADa_de_Embalses_(Adewumi)/10%3A_EOS_c%C3%BAbicos_y_su_comportamiento_II/10.04%3A_Soave-Redlich-Kwong_EOS_(1972))

Moioli, E., Gallandat, N., y Züttel, A. (2019). *Sensibilidad paramétrica en la reacción de Sabatier sobre Ru/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: determinación teórica de los requisitos mínimos para la activación del reactor*.

Olah, GA, Goeppert, A., y Surya Prakash, GK (2018). *Más allá del petróleo y el gas: la economía del metanol* . Wiley.

Penghui Yan, Hong Peng , Xuankun Wu, Hesamoddin Rabiee , Yilun Weng, Muxina Konarova,

Juan Vogrin , Alexandra Rozhkovskaya, Zhonghua Zhu. (2024). *Impacto de diversos materiales de zeolita en los catalizadores de níquel en la metanización de CO<sub>2</sub>*.

ScienceDirect,

de

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021951724001520>

Reacción de Sabatier para minimizar el CO<sub>2</sub> en la atmósfera — Steemit. (s. f.). Steemit.

<https://steemit.com/spanish/@tavorm/reaccion-de-sabatier-para-minimizar-el-co2-en-la-atmosfera>.

Rémi Chauvy A , Damien Verdonck y , Lionel Dubois B , Diane Thomas B , Guy de Weireld.

(2021). *Viabilidad técnico-económica y sostenibilidad de un proceso integrado de captura y conversión de carbono a gas natural sintético*. ScienceDirect, de

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S221298202100055X?via%3Dihub>

Rémi Chauvy ,Lionel Dubois ,Paul Lybaert ,Diane Thomas ,Guy de Weireld. (2019). *Producción*

*de gas natural sintético a partir de dióxido de carbono industrial*. ScienceDirect, de

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0306261919319361?via%3Dihub>

Sharifian, S. (2016). *Simulación de procesos de sistemas Power-to-Gas* [Tesis [http :](http://www.ub.tuwien.a.at)

[//www.ub.tuwien .a.at](http://www.ub.tuwien.a.at)].

Venkata Sai Sriram Mosali , Graeme Puxty , Michael D. Horne , Alan M. Bond, Jie Zhang.

(2024). *Metanización electroquímica selectiva de dióxido de carbono utilizando un catalizador CU/ZN derivado de sulfuro*. ScienceDirect, de

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013468623017991>

Vlap, H., Holstein, J., van der Steen, A. y Grond, L. (2015). *supuestos técnicos, demostración tecnológica y resultados del proyecto p2g*, de <https://proyectos.to.nl//esto/a/upl/público/5b7/54a/624/5b754a624582f744.pdf>.