

Modelo Matemático para Determinar las Emisiones de Gases de Efecto Invernadero en Plantas
de Endulzamiento de Gas Natural con Aminas

William Fernando Noriega Anaya

Trabajo de Grado para Optar al Título de Magíster en Ingeniería de Hidrocarburos

Director

Manuel Enrique Cabarcas Simancas

Magíster en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas
Escuela de Ingeniería de Petróleos
Maestría en Ingeniería de Hidrocarburos
Bucaramanga

2026

Dedicatoria

A Dios por ser mi apoyo espiritual y darme salud para culminar este posgrado.

A mi mamá Luz Marina Anaya por ser el motor de mi vida, mi maestra y mi modelo de perseverancia y valentía. Por enseñarme a ser una mejor persona cada día y a luchar por mis sueños, por todo su apoyo, su sacrificio, su amor y por todo y mucho más.

A mi hermano Carlos Hernán Noriega por su apoyo incondicional, sus enseñanzas, su compañía, sus consejos y su motivación para terminar esta maestría.

A toda mi familia por su constante compañía, apoyo, consejo y su impulso por no dejar a medias este estudio.

A mis compañeros y amigos, quienes con su compañía, apoyo y palabras de aliento me motivaron a no desistir y a concluir este estudio.

William Fernando Noriega Anaya

Agradecimientos

Agradezco a la Universidad Industrial de Santander por brindarme la oportunidad de adelantar mi formación académica como Magíster en Ingeniería de Hidrocarburos, así como a los profesores que, con su guía y ejemplo, contribuyeron a mi crecimiento tanto personal como profesional.

Quiero expresar mi agradecimiento al Ingeniero Manuel Enrique Cabarcas Simancas director de esta investigación por su tiempo, dedicación, motivación, paciencia, compromiso, orientación y liderazgo para desarrollar este proyecto, sus consejos y sugerencias fueron de gran importancia para la culminación de esta investigación.

Agradezco profundamente a mi familia por su apoyo incondicional y motivación constante, por creer en mí y sus enseñanzas. Su aliento y confianza me dieron la fuerza necesaria para llevar este estudio hasta el final.

Expreso gratitud a la Vicerrectoría de Investigación y Extensión de la Universidad Industrial de Santander, así como al Grupo de Investigación de Modelamiento de Procesos de Hidrocarburos de la Universidad Industrial de Santander, por su apoyo en la realización de este trabajo de investigación.

Contenido

Introducción	13
1 Objetivos e Hipótesis	15
1.1 Objetivo general.....	15
1.2 Objetivos específicos	15
1.3 Hipótesis	15
2 Fundamentos del cambio climático y gases de efecto invernadero (GEI).....	16
2.1 Introducción al cambio climático.....	16
2.2 Emisiones de GEI	18
2.2.1 Emisiones en el sector de los hidrocarburos	19
2.2.2 Fuentes de emisiones de GEI en la industria de los hidrocarburos.....	20
2.2.3 Cálculo de emisiones en la industria de los hidrocarburos	20
2.2.3.1 Cálculos de Nivel 1.....	22
2.2.3.2 Cálculos de Nivel 2.....	23
2.2.3.3 Cálculos de Nivel 3.....	23
2.3 Hacia el desarrollo de un modelo matemático de emisiones	25
3 Procesos de endulzamiento de gas natural.....	26
3.1 Clasificación de procesos de endulzamiento de gas	27
3.2 Descripción del proceso de endulzamiento del gas natural con aminas	29
4 Modelos matemáticos y simulación de procesos	31

4.1	Simulación de procesos en Aspen HYSYS	32
4.2	Diseño de experimentos	33
4.3	Análisis de diseños factoriales	35
5	Diseño experimental y variables de estudio.....	38
5.1	Definición del problema y objetivos del diseño	39
5.2	Variables de estudio.....	39
5.2.1	Variables independientes (factores de control).....	40
5.2.2	Variables dependientes (respuestas del modelo)	40
5.2.3	Variables de control (constantes del diseño experimental).....	40
5.3	Metodología del diseño experimental.....	41
5.3.1	Selección del diseño factorial	41
5.4	Caso base de simulación	43
5.5	Enfoque de análisis estadístico	47
6	Resultados y análisis de simulaciones	49
6.1	Resultados de las simulaciones en Aspen HYSYS.....	49
6.2	Análisis estadístico de resultados.....	57
6.2.1	Modelo de regresión lineal múltiple	58
6.2.2	Modelo de regresión cuadrática completa	62
6.2.3	Modelo de regresión cuadrático parcial	67
6.3	Validación del modelo matemático	73

6.3.1	Coeficiente de determinación (R^2).....	73
6.3.2	Error estándar de estimación (SEE).....	74
6.3.3	Análisis de residuales.....	75
6.3.4	Comparación con datos de simulación.	76
6.4	Discusión de resultados.....	77
6.5	Limitaciones.....	78
7	Conclusiones	80
8	Recomendaciones	82
	Referencias bibliográficas.....	84

Lista de Tablas

Tabla 1 Factor de emisión de CH ₄	24
Tabla 2 Especificaciones típicas de transporte de gas por tubería en distintas regiones del mundo	26
Tabla 3 Características de las aminas	28
Tabla 4 Valores empleados en la matriz de experimentos.....	42
Tabla 5 Cromatografía extendida y datos del gas de entrada.	44
Tabla 6 Especificaciones de la torre de absorción.....	46
Tabla 7 Especificaciones del intercambiador de calor.....	46
Tabla 8 Especificaciones de la unidad de regeneración.....	46
Tabla 9 Resultados Case Study - Emisiones de CO ₂ y CH ₄	54
Tabla 10 Resultados Case Study - Emisiones de CO ₂ y CH ₄ y especificación de gas dulce.....	54
Tabla 11 Resultados del análisis de varianza (ANOVA) para el CO ₂ y CH ₄ para regresión lineal en las simulaciones del proceso de endulzamiento con DEA.....	59
Tabla 12 Los valores de los coeficientes para la regresión lineal de CO ₂ y CH ₄	61
Tabla 13 Resultados del análisis de varianza (ANOVA) para el CO ₂ y CH ₄ para la regresión cuadrática en las simulaciones del proceso de endulzamiento con DEA	62
Tabla 14 Los valores de los coeficientes para la regresión cuadrática completa de CO ₂ y CH ₄ ..	66
Tabla 15 Resultados del análisis de varianza (ANOVA) para el CO ₂ y CH ₄ para la regresión cuadrática parcial en las simulaciones del proceso de endulzamiento con DEA	68
Tabla 16 Los valores de los coeficientes para la regresión cuadrática parcial de CO ₂ y CH ₄	71

Lista de Figuras

Figura 1	Árbol de decisión para escoger la metodología de cálculo de emisiones.....	22
Figura 2	Diagrama de flujo de proceso de una planta convencional de endulzamiento de gas natural con aminas.	30
Figura 3	Diagrama de Pareto de efectos estandarizados.....	36
Figura 4	Distribución de escenarios de simulación en la matriz experimental (Temperatura del gas vs. Presión de absorción)	42
Figura 5	Diagrama del modelo de simulación en Aspen Hysys de una planta de endulzamiento de gas natural con DEA.	44
Figura 6	Modulo del HYSYS Case Study – Variable Selection.....	51
Figura 7	Modulo HYSYS Case Study - Setup.....	51
Figura 8	Modulo HYSYS Case Study - Results.....	52
Figura 9	Porcentaje de CO ₂ en el gas dulce vs Temperatura	55
Figura 10	Concentración de H ₂ S en el gas dulce vs Temperatura	55
Figura 11	Comportamiento de las emisiones de GEI	56
Figura 12	Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para CO ₂ (arriba) y CH ₄ (abajo) para la regresión lineal.....	60
Figura 13	Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para CO ₂ (arriba) y CH ₄ (abajo) para la regresión cuadrática completa.....	64
Figura 14	Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para CO ₂ (arriba) y CH ₄ (abajo) para la regresión cuadrática parcial.	69

Figura 15 Gráfico de residuos para el modelo de emisiones de CO ₂ en función de los valores predichos.....	75
Figura 16 Gráfico de residuos para el modelo de emisiones de CH ₄ en función de los valores predichos.....	76

Lista de Apéndices

Los apéndices están disponibles en el Repositorio Institucional

Apéndice A. Código fuente del software.

Apéndice B. Manual de Diseño del Software.

Apéndice C. Manual de Usuario del Software.

Resumen

Título: Modelo matemático para determinar las emisiones de gases efecto invernadero (gei) en plantas de endulzamiento de gas natural con aminas.*

Autor: William Fernando Noriega Anaya**

Palabras Clave: Endulzamiento de gas natural, dietanolamina (DEA), emisiones de CO₂, emisiones de CH₄, modelo matemático, gases de efecto invernadero.

Descripción: Este estudio presenta el desarrollo de un modelo matemático para la cuantificación de emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) en plantas de endulzamiento de gas natural que utilizan dietanolamina (DEA) como solvente. La investigación responde a la necesidad de contar con herramientas más precisas que integren variables operativas críticas, dado que metodologías convencionales, como los factores de emisión del IPCC, no reflejan la variabilidad de las condiciones específicas de operación.

Para tal fin, se realizaron 324 simulaciones en Aspen HYSYS, aplicando un diseño factorial completo en el que se variaron parámetros como presión y temperatura del gas de alimentación, caudal de gas, concentración y flujo de DEA, así como la temperatura del rehervidor. Los datos obtenidos fueron analizados estadísticamente mediante regresión cuadrática, lo que permitió generar modelos predictivos para el flujo másico de CO₂ y CH₄.

La validación del modelo frente a los resultados de simulación mostró un error absoluto entre 0,0 % y 3,7 %, junto con coeficientes de determinación (R²) superiores al 99,9 %, confirmando su precisión y confiabilidad. El análisis reveló que variables como la temperatura del rehervidor y el caudal de gas tienen una influencia directa en las emisiones, mientras que sus interacciones resultan determinantes para la eficiencia global del proceso.

Estos hallazgos demuestran que las condiciones operativas afectan de manera significativa la absorción y posterior liberación de GEI durante el proceso de regeneración de la amina, evidenciando la necesidad de enfoques multivariantes en el diseño y control de plantas.

En conjunto, el modelo constituye una herramienta práctica y robusta para apoyar la toma de decisiones en la industria, contribuyendo a la optimización de procesos, reducción de emisiones y cumplimiento de compromisos ambientales internacionales.

* Trabajo de grado.

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería de Petróleos. Director: Manuel Enrique Cabarcas Simancas, Msc. en Ingeniería Química.

Abstract

Title: Mathematical Model to Determine Greenhouse Gas (GHG) Emissions in Natural Gas Sweetening Plants with Amines.*

Author: William Fernando Noriega Anaya**

Keywords: Natural gas sweetening, diethanolamine (DEA), CO₂ emissions, CH₄ emissions, mathematical model, greenhouse gases.

Description: This study presents the development of a mathematical model for the quantification of greenhouse gas (GHG) emissions in natural gas sweetening plants using diethanolamine (DEA) as a solvent. The research addresses the need for more accurate tools that integrate critical operating variables, since conventional methodologies, such as the IPCC emission factors, do not reflect the variability of specific operating conditions.

To this end, 324 simulations were carried out in Aspen HYSYS, applying a full factorial design in which parameters such as feed gas pressure and temperature, gas flow rate, DEA concentration and flow, as well as reboiler temperature were varied. The data obtained were statistically analyzed using quadratic regression, which enabled the generation of predictive models for the mass flow of CO₂ and CH₄.

Model validation against simulation results showed an absolute error between 0.0% and 3.7%, along with coefficients of determination (R^2) above 99.9%, confirming its accuracy and reliability. The analysis revealed that variables such as reboiler temperature and gas flow rate have a direct influence on emissions, while their interactions are decisive for the overall efficiency of the process.

These findings demonstrate that operating conditions significantly affect the absorption and subsequent release of GHG during the amine regeneration process, highlighting the need for multivariate approaches in plant design and control.

Overall, the model constitutes a practical and robust tool to support decision-making in the industry, contributing to process optimization, emission reduction, and compliance with international environmental commitments.

* Master's Thesis

** Faculty of Physical-Chemical Engineering. School of Petroleum Engineering. Supervisor: Manuel Enrique Cabarcas Simancas, MSc. in Chemical Engineering.

Introducción

El cambio climático constituye uno de los principales retos globales de la actualidad. Su origen está estrechamente vinculado al incremento de las concentraciones atmosféricas de gases de efecto invernadero (GEI), resultado de procesos industriales, la quema de combustibles fósiles y el uso intensivo de recursos energéticos. El más reciente informe del Panel Intergubernamental de Cambio Climático (IPCC, 2023) advierte que los niveles de CO₂ son los más altos de la historia reciente y el tiempo para actuar se agota. Responder a este desafío global requiere una transformación económica inmediata y sin precedentes en todos los sectores de la economía global.

De acuerdo con el United Nations Environment Programme (UNEP, 2024), aproximadamente el 75% y el 16% de las emisiones globales son de CO₂ y CH₄, respectivamente. La industria de hidrocarburos es una de las principales responsables, pues emite volúmenes significativos durante el procesamiento, dificultando así el avance hacia los compromisos internacionales de mitigación. En el caso particular del gas natural, procesos como el endulzamiento con aminas generan emisiones fugitivas de CO₂ y CH₄, cuya magnitud puede ser incluso superior a las estimaciones convencionales, como lo señalan Alvarez et al. (2018).

En este escenario, el gas natural ocupa un lugar central como energético de transición. Su uso se ha expandido debido a su disponibilidad, eficiencia y menores emisiones en comparación con otros combustibles fósiles. Sin embargo, la presencia de contaminantes como CO₂ y sulfuro de hidrógeno (H₂S) en el gas natural impone la necesidad de procesos de tratamiento que aseguren un producto de venta seguro, competitivo y con bajo impacto ambiental. Las plantas de endulzamiento de gas natural cumplen un rol estratégico en este contexto, al permitir la remoción de impurezas que afectan la calidad del gas, sin embargo, su operación, implica emisiones fugitivas

de CO₂ y metano (CH₄) que deben ser cuantificadas, evaluadas y controladas para garantizar la sostenibilidad del sector.

La cuantificación de estas emisiones se ha abordado mediante metodologías de referencia como las propuestas por el IPCC (2019) para la cuantificación y reporte de emisiones de GEI, sin embargo presentan limitaciones al no considerar de manera detallada las condiciones operacionales de cada planta. Ante esta problemática, el presente trabajo tiene como objetivo formular y validar un modelo matemático para predecir las emisiones de CO₂ y CH₄ en plantas de endulzamiento de gas natural con DEA. El modelo se fundamenta en un diseño experimental con simulaciones en Aspen HYSYS e incorpora variables operacionales clave, como presión, temperatura, caudal de alimentación y condiciones del solvente. Con ello, se busca aportar una herramienta predictiva aplicable en escenarios reales de operación y que, además, sienta las bases para la optimización de procesos y la exploración de otros solventes como monoetanolamina (MEA) y metildietanolamina (MDEA).

El alcance de esta tesis se centra en el análisis de emisiones de CO₂ y CH₄ en procesos de absorción con DEA, utilizando simulaciones de Aspen HYSYS como fuente de datos. El gas tratado se evalúa bajo especificaciones comerciales internacionales, asegurando concentraciones máximas de 2 % de CO₂ y 4 ppm de H₂S. Si bien el estudio se restringe a este solvente y a un rango definido de condiciones operativas, los resultados constituyen una base que puede ser extendida a otras tecnologías y solventes, así como integrada en modelos de gestión ambiental y cálculo de huella de carbono en el sector energético.

1 Objetivos e Hipótesis

1.1 Objetivo general

Desarrollar un modelo matemático que permita determinar las emisiones de gases efecto invernadero (GEI) en plantas de endulzamiento de gas natural con aminas.

1.2 Objetivos específicos

Describir las metodologías para determinar la huella de carbono en plantas de endulzamiento de gas natural.

Simular un proceso de una planta típica de endulzamiento de gas natural con aminas, para realizar el estudio de sensibilidad paramétrica respecto a las emisiones de GEI.

Plantear un modelo matemático para cuantificar las emisiones de GEI en plantas de endulzamiento de gas natural con aminas.

Codificar un software que permita cuantificar las emisiones de gases efecto invernadero teniendo en cuenta las diferentes variables operaciones en plantas de endulzamiento de gas natural con aminas.

1.3 Hipótesis

Las condiciones operacionales de una planta de endulzamiento de gas natural con aminas —tales como el flujo de amina, la concentración y tipo de amina, el flujo de gas, la presión y temperatura de la torre de absorción y la temperatura del rehervidor— influyen significativamente en la absorción de CO_2 y CH_4 en la solución de amina y, en consecuencia, en el flujo másico de emisiones de gases de efecto invernadero generadas durante el proceso de endulzamiento de gas natural.

2 Fundamentos del cambio climático y gases de efecto invernadero (GEI)

Las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) se han identificado como una de las principales causas del calentamiento global y el cambio climático, y su control se ha vuelto una prioridad para las naciones y las industrias. En este contexto, el sector de los hidrocarburos desempeña un papel crucial, ya que sus actividades conllevan a la emisión significativa de GEI. En este primer capítulo, se abordarán las generalidades sobre las emisiones de gases de efecto invernadero sentando las bases para comprender su impacto en el medio ambiente y en el calentamiento global, se explorará la huella de carbono como indicador clave para medir las emisiones, se analizarán las emisiones de GEI a nivel global y por sectores, y se profundizará en las emisiones específicas del sector de los hidrocarburos.

2.1 Introducción al cambio climático

Los gases de efecto invernadero (GEI) son compuestos presentes en la atmósfera, de origen natural y antropogénico, que tienen la capacidad de absorber y retener la radiación infrarroja emitida por la superficie terrestre, contribuyendo a mantener una temperatura media estable en el planeta (Benavides & León, 2007). Este fenómeno, conocido como **efecto invernadero**, resulta esencial para la vida en la Tierra; sin embargo, el incremento sostenido de la concentración de estos gases debido a actividades humanas ha intensificado dicho efecto, provocando un proceso acelerado de calentamiento global.

De acuerdo con el Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (PNUMA, 2020), la quema de combustibles fósiles, la deforestación, la agricultura intensiva y diversas actividades industriales han incrementado significativamente las concentraciones de GEI en la atmósfera. Los principales compuestos responsables de este fenómeno son el dióxido de carbono (CO₂), el metano (CH₄), el óxido nitroso (N₂O) y los gases fluorados (US EPA, 2022). Entre ellos,

el CO₂ y el CH₄ se consideran los más relevantes por su abundancia y elevado impacto climático, siendo el metano un gas con un potencial de calentamiento global considerablemente mayor que el del CO₂ en horizontes temporales de 20 a 100 años (Kweku et al., 2018).

El calentamiento global es la consecuencia directa de este aumento en la concentración de GEI, que retienen más radiación de la que el sistema climático puede equilibrar de manera natural. Si bien el efecto invernadero es un proceso beneficioso en condiciones normales, desde la era preindustrial las emisiones de origen humano han generado alteraciones significativas en el clima.

En 2021, el Informe del IPCC advierte que, de mantenerse las tendencias actuales, en las próximas décadas se intensificarán los impactos del cambio climático en todas las regiones del mundo. Entre los efectos más destacados se incluyen: incremento en la frecuencia e intensidad de las olas de calor, prolongación de las estaciones cálidas y reducción de las frías, episodios de precipitaciones extremas con mayor riesgo de inundaciones y sequías más severas. Asimismo, se proyecta un aumento continuo del nivel del mar debido al deshielo de glaciares y casquetes polares, así como la degradación del permafrost y la pérdida de la capa de nieve.

No obstante, el mismo informe señala que una reducción rápida, profunda y sostenida de las emisiones de CO₂ y otros GEI podría limitar de manera significativa los impactos del cambio climático. Para ello, se requieren acciones urgentes, coordinadas y a gran escala que involucren a todos los sectores de la economía global. En este sentido, la cuantificación de las emisiones se convierte en un requisito indispensable, pues constituye la base para identificar las principales fuentes, evaluar el desempeño ambiental de cada sector y diseñar estrategias efectivas de mitigación

2.2 Emisiones de GEI

Reducir las emisiones globales de GEI representa uno de los desafíos más urgentes y apremiantes que enfrenta nuestro planeta para hacer frente a los cambios climáticos. Según el Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (PNUMA, 2022) las emisiones globales totales de GEI promediaron 54.4 gigatoneladas de CO_{2e} (GtCO_{2e}) entre 2010 y 2019.

Estas emisiones se distribuyen en cinco sectores económicos a nivel global: Suministro de energía, industria, agricultura y otros cambios en el uso de la tierra, transporte y uso directo de energía en edificios; los cuales reflejan la estructura productiva y de consumo de la sociedad contemporánea. En el año 2020, el sector energético constituyó el principal contribuyente, responsable de aproximadamente el 34% de las emisiones, derivadas predominantemente de la generación de electricidad y calor mediante la combustión de fósiles. Le sigue el sector industrial (24%), asociado a procesos productivos y emisiones derivadas de reacciones químicas. El sector agrícola, forestal y otros usos del suelo representó alrededor del 22%, con significativas emisiones de metano (CH₄) y óxido nitroso (N₂O). El transporte, con un 15%, se erige como otro pilar fundamental, basado casi en su totalidad en combustibles derivados del petróleo. Por último, el sector de los edificios, con el 6%, contribuye mayoritariamente a través del consumo energético para calefacción, refrigeración y electricidad.

Finalmente, es relevante destacar que las emisiones de metano derivadas de la cría de ganado, los vertederos y las emisiones fugitivas de metano en el sector de los hidrocarburos y carbón también son fuentes globales significativas con impactos de calentamiento a corto plazo (Dhakal et al., 2022).

2.2.1 Emisiones en el sector de los hidrocarburos

La industria del petróleo y gas es una de las principales fuentes de emisiones de GEI, ya que durante el procesamiento de hidrocarburos se liberan emisiones significativas de dióxido de carbono, metano y óxido nitroso. De acuerdo con IPIECA et al. (2011), el CO₂ y el CH₄ constituyen los principales GEI emitidos por este sector, siendo este último especialmente crítico debido a su alto potencial de calentamiento global, 84 veces superior al del CO₂ en un horizonte de 20 años.

La Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA, 2010) sugiere analizar las emisiones de la industria de hidrocarburos en dos segmentos diferenciados: petróleo y gas natural. Si bien cada uno emplea procesos y equipos específicos, ambos comparten la característica de emitir GEI en diversas etapas operativas.

En el sector, la quema y venteo de gas natural se ha considerado por muchos años como un procedimiento eficaz de disposición, sin embargo, esta práctica ha sido un factor de preocupación cada vez más fuerte por su contribución a las emisiones de gases efecto invernadero (Delgado, 2018). Los procesos orientados a cumplir las especificaciones de transporte por tubería y a obtener líquidos de mayor valor agregado incluyen actividades como deshidratación, endulzamiento y fraccionamiento del gas, junto con eventos no rutinarios que pueden originar emisiones de CO₂ y CH₄ mediante el venteo a la atmósfera (Kidnay et al., 2019), adicionalmente, las fugas en equipos constituyen otra fuente relevante de emisiones fugitivas de metano (Bradbury et al., 2015).

Sin embargo, entre todos estos procesos, el endulzamiento con aminas se considera como una de las etapas de estudio en términos de emisiones de GEI, ya que este método de remoción de gases ácidos concentra grandes volúmenes de CO₂ y CH₄ que son posteriormente venteados, convirtiendo a las plantas de tratamiento con aminas en un foco prioritario para la cuantificación y mitigación de emisiones dentro de la industria del gas natural.

2.2.2 Fuentes de emisiones de GEI en la industria de los hidrocarburos

Según Bradbury et al. (2015), las emisiones de GEI en la industria se pueden clasificar en dos grupos. Por un lado, están las emisiones relacionadas con la combustión, que son principalmente emisiones de CO₂ debido al uso de petróleo y gas natural como combustible en diversos equipos (como calentadores, motores, hornos, etc.). Por otro lado, se encuentran las emisiones fugitivas o por venteo, que son emisiones tanto intencionales como no intencionales, relacionadas con el diseño de los equipos y sistemas, así como con el desgaste o daño de estos.

Las emisiones venteo del gas natural son una fuente directa de gases de efecto invernadero, debido a la liberación de CH₄ y CO₂. El venteo comprende todas las descargas tecnológicas o intencionales del gas a la atmósfera, incluidas las descargas de emergencia, las descargas procedentes de las unidades de tratamiento del petróleo y del gas y el CO₂ eliminado del gas natural por las unidades de endulzamiento en las plantas de procesamiento del gas (API,2009).

En este contexto, la industria de los hidrocarburos se enfrenta al desafío de establecer objetivos ambientales concretos que permitan cuantificar y reducir su impacto, con especial atención a las operaciones vinculadas al tratamiento del gas natural. El control de emisiones fugitivas, así como de las prácticas de quema y venteo, resulta esencial dado que constituyen una fuente significativa de emisiones de CO₂ y CH₄ a la atmósfera.

2.2.3 Cálculo de emisiones en la industria de los hidrocarburos

Las emisiones fugitivas procedentes de la industria de petróleo y gas natural suelen ser difíciles de cuantificar debido a la diversidad del sector, a la gran cantidad y variedad de fuentes de emisiones, a las amplias variaciones en los niveles de control de las emisiones, y a la disponibilidad limitada de datos acerca de las fuentes de emisión.

En cuanto al cálculo de las emisiones de GEI en el sector de los hidrocarburos, el Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC, 2006) publicó una guía metodológica para el cálculo de las estas que van desde la aplicación de factores de emisión genéricos hasta el seguimiento directo de las emisiones de GEI. En el capítulo 4 se proporcionan directrices para cuantificar y estimar las emisiones fugitivas en diferentes sectores y subsectores de la industria. Allí se describe en detalle las diferentes opciones y enfoques disponibles para estimar las emisiones fugitivas en cada sector. Se proporcionan directrices paso a paso, que incluyen la identificación y clasificación de fuentes de emisión, la recopilación de datos de actividad y consumo, y la aplicación de factores de emisión apropiados.

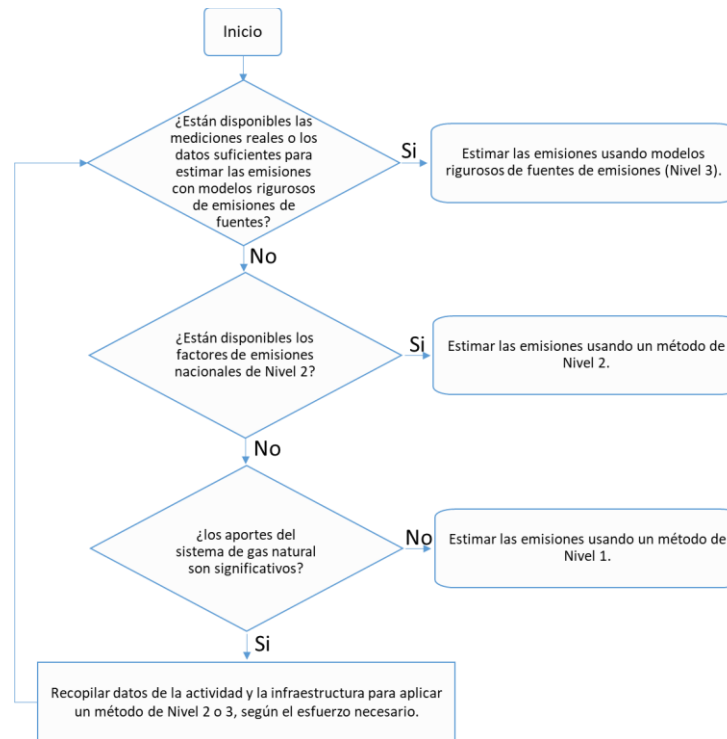
En el capítulo también se documenta un árbol de decisión (Figura 1) que ayuda a seleccionar el método apropiado para el cálculo de las emisiones fugitivas, considerando tres niveles de acuerdo con la disponibilidad de información. Esto permite adaptar el enfoque de cálculo según la disponibilidad y confiabilidad de los datos necesarios. Sin embargo, también se recomienda realizar actualizaciones y revisiones de los factores de emisión a medida que se avanza en la investigación y se obtienen nuevos datos.

El proceso básico de decisión conlleva a verificar en primer lugar si están disponibles fácilmente los datos detallados necesarios para aplicar un método de Nivel 3 y, si es así, aplicarlo; de lo contrario, verificar si están disponibles fácilmente los datos detallados necesarios para aplicar un método de Nivel 2 y aplicarlo; de lo contrario, determinar si la categoría es principal y si la subcategoría específica que está analizándose es significativa, sobre la base de las definiciones del IPCC de principal y significativa y, de ser así, retroceder y recopilar los datos necesarios para aplicar un método de Nivel 3 o 2; si no es así, aplicar un método de Nivel 1. El método de Nivel 1 es el más sencillo de aplicar, pero es susceptible de incertidumbres sustanciales y fácilmente

puede estar en error por un orden de magnitud o más. Por este motivo, se lo debe usar únicamente como último recurso.

Figura 1

Árbol de decisión para escoger la metodología de cálculo de emisiones



Nota: 2006 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories

2.2.3.1 Cálculos de Nivel 1.

El nivel 1 comprende la aplicación de los factores de emisión por defecto correspondientes a un parámetro de la actividad representativo (normalmente la producción) para cada segmento o subcategoría aplicable de la industria del petróleo y gas natural del país. Para la estimación de emisiones fugitivas de un segmento industria se sigue las siguientes ecuaciones:

$$E_{gas, segmento} = A_{segmento} * EF_{gas, segmento}$$

$$E_{gas} = \sum E_{gas, segmento}$$

$$E_{gas, segmento} = \text{emisiones anuales de } CO_2, CH_4 \text{ o } NO_2 \text{ (toneladas)}$$

$$EF_{gas,segmento} = \text{Factor de emisión para } CO_2, CH_4 \text{ o } NO_2 \left(\frac{\text{toneladas}}{\text{unidad de actividad}} \right)$$

$$A_{segmento} = \text{Valor de actividad (unidad de actividad)}$$

En los cuadros 4.2.4 y 4.2.5 de la Sección 4.2.2.3 del 2006 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories se presentan los factores de emisión por defecto disponibles de Nivel 1. Estos factores se relacionan con diferentes actividades relacionadas con la cadena de valor de gas y petróleo porque estos datos son las únicas estadísticas mundiales que están disponibles en forma coherente.

2.2.3.2 *Cálculos de Nivel 2.*

El Nivel 2 consiste en utilizar las ecuaciones de Nivel 1 con factores de emisión específicos del país.

2.2.3.3 *Cálculos de Nivel 3.*

El Nivel 3 comprende la aplicación de una evaluación rigurosa por tipo primario de fuente (p. ej., venteo, quema en antorcha, escapes fugitivos del equipo, pérdidas por evaporación y liberaciones accidentales) en el nivel de cada instalación. Entre los tipos principales de datos que se utilizarían en una evaluación de Nivel 3 se incluyen datos de inventario de las instalaciones, incluida una evaluación del tipo y la cantidad de equipos o unidades de proceso de cada planta, y los principales controles de emisión; un inventario de pozos e instalaciones menores de los yacimientos; un análisis específico del gas de proceso, quemado en tea y venteo para cada subcategoría; la producción de gas ácido en el nivel de la planta, análisis y datos de disposición; entre otros datos.

Según el API (2009) describe que las unidades de endulzamiento de gas natural pueden ventilar directamente el CO_2 y CH_4 en el tope de la unidad de regeneración. Para los estos sistemas, las emisiones de CO_2 se pueden estimar mediante el balance de materiales utilizando el

rendimiento conocido y las concentraciones de CO₂ de las corrientes de gas de entrada y salida, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$E_{CO_2} = \left[\left(\frac{\text{Volumen}}{\text{año}} * CO_2 \% \text{molar} \right)_{\text{gas entrada}} - \left(\frac{\text{Volumen}}{\text{año}} * CO_2 \% \text{molar} \right)_{\text{gas salida}} \right] * \frac{44 \text{ lb } CO_2}{379.3 \text{ scf } CO_2}$$

$$E_{CO_2} = \text{Flujo masico de } CO_2 \text{ por año (libras)}$$

$$\text{Volumen} = \text{volumen de gas a condiciones estandar (scf)}$$

$$CO_2 \% \text{molar} = \text{concentracion molar de } CO_2 \text{ en el gas}$$

Mientras que las emisiones de CH₄ se estiman aplicando el factor de emisión de la Tabla 1 y se calcula usando la metodología para el cálculo de nivel 1.

$$E_{CH_4} = \frac{\text{SCF gas entrada}}{\text{año}} * EF_{CH_4}$$

Tabla 1

Factor de emisión de CH₄

Fuente	Factores de emisión para CH₄^a	Factores de emisión para CH₄^b
		0.0185
Venteo de CH ₄ en una planta de endulzamiento (Acid Gas Removal, AGR)	965 SCF/106 SCF gas tratado	toneladas/MMSCF gas tratado
		0.654 tonelada/106 m ³ gas tratado
	33.794 SCFD/unidad AGR	0.6482 tonelada/día-unidad AGR

Nota: a) Myers & Harrison, (1996). b) Conversión de factores de emisión para CH₄ a condiciones estándar 60°F and 14.7 psia.

En conclusión, el sector de los hidrocarburos desempeña un papel fundamental en las emisiones globales de GEI siendo una de las principales fuentes de emisiones a nivel mundial. La dependencia continua de los combustibles fósiles y la demanda creciente de energía representan

un desafío en la búsqueda de una transición hacia una economía baja en carbono. Sin embargo, también existen oportunidades para reducir las emisiones mediante la implementación de nuevas tecnologías y la incorporación de herramientas que permitan cuantificar las emisiones de GEI e identificar oportunidades de reducción en las actividades del sector.

2.3 Hacia el desarrollo de un modelo matemático de emisiones

El cambio climático es consecuencia directa del aumento sostenido de las concentraciones de GEI, principalmente CO₂ y CH₄, derivados en gran medida de la actividad humana. La evidencia científica confirma que estos gases intensifican el efecto invernadero natural, alterando el balance energético del planeta y generando impactos ambientales, económicos y sociales de gran magnitud.

Si bien se han establecido acuerdos internacionales y metodologías de referencia para cuantificar y reportar las emisiones, dichas herramientas presentan limitaciones cuando se aplican a procesos industriales específicos. En el caso del sector de hidrocarburos, las emisiones fugitivas y de venteo constituyen una de las principales fuentes de CO₂ y CH₄, pero su estimación suele basarse en factores genéricos que no reflejan adecuadamente las condiciones operativas reales de las plantas.

En particular, los procesos de endulzamiento de gas natural con aminas, aunque indispensables para garantizar la calidad comercial del gas, representan un punto crítico de emisiones que todavía carece de modelos predictivos ajustados a su dinámica operacional. Esta brecha metodológica resalta la necesidad de desarrollar herramientas matemáticas más precisas, capaces de incorporar variables clave del proceso (flujo, presión, temperatura y características del solvente) para estimar con mayor exactitud las emisiones de GEI.

De esta manera, el análisis realizado en este capítulo sustenta la justificación del presente trabajo: la formulación de un modelo matemático específico para plantas de endulzamiento con aminas, que no solo contribuya a una mejor comprensión del impacto ambiental de estos procesos, sino que también ofrezca una herramienta práctica para la industria en la toma de decisiones orientadas a la cuantificación y de forma indirecta a la mitigación y gestión de emisiones.

3 Procesos de endulzamiento de gas natural

El gas natural está compuesto por una mezcla de hidrocarburos, principalmente metano, pero también contiene etano, propano, butano y otros alcanos superiores. El gas natural también contiene impurezas como vapor de agua, algunos componentes sulfurados, dióxido de carbono, nitrógeno y otros hidrocarburos más pesados. La composición del gas natural depende de la fuente desde donde es extraído (Martínez, 2000).

El tratamiento del gas natural consiste en separar los distintos hidrocarburos e impurezas del gas natural con el fin de alcanzar las condiciones técnicas para transportarlo por tubería y comercializarlo (Stewart & Arnold, 2011). En la tabla 2 se muestran las especificaciones típicas de transporte de gas por tubería. Usualmente, el contenido total de H₂S máximo es de 4 ppm y el contenido CO₂ es 2% volumen en el gas.

Tabla 2

Especificaciones típicas de transporte de gas por tubería en distintas regiones del mundo

Especificaciones	USA^a	UK^a	Australia^b	Colombia^c
Contenido de agua máximo (lbm H ₂ O/MMSCF)	7	3	4	6
Contenido total de H ₂ S máximo (ppm)	4	4	3	4

Contenido total de azufre máximo (ppm)	16	38	35	16
Contenido CO ₂ , máximo en % volumen	4	2.5	3	2
Contenido de oxígeno máximo en % volumen	0.2	0.2	0.15	0.10

Nota: a) BP, (2011). b) Australian Energy Market Operator, (2017). c) Comisión de Regulación de Energía y Gas – CREG. (1999).

3.1 Clasificación de procesos de endulzamiento de gas

La eliminación del gas ácido, principalmente el sulfuro de hidrógeno (H₂S) y el dióxido de carbono (CO₂) es fundamental, ya que generan corrosión y afectan los equipos aguas abajo; además, el H₂S es extremadamente tóxico y peligroso, inclusive puede afectar la salud del personal.

En Stewart & Arnold (2011) menciona que se han desarrollado varios procesos para el endulzamiento del gas natural y se caracterizan principalmente por el tipo de absorbente utilizado.

1) Absorción química: el gas que se va a endulzar entra en contacto a contracorriente con una solución acuosa que reacciona exotérmicamente con los gases ácidos, para formar un subproducto que es soluble en el solvente; las aminas y los carbonatos son los usados en esta categoría. 2) Absorción física: se basan en la solubilidad del gas dentro de un solvente físico, sin que se presenten reacciones químicas, la mayoría de solventes físicos son patentados y de uso propio de las empresas. 3) Absorción físico-química: se trabaja con la combinación de solventes físicos y químicos. 4) Adsorción física mediante tamices moleculares y 5) Permeación por membranas y se basa en diferencias en las tasas de difusión de las moléculas de gas dentro de los materiales de la membrana.

En general, los procesos con aminas son muy utilizados debido a su gran capacidad de remoción, bajo costo, flexibilidad en el diseño y operación del proceso. En el caso de las alcanolaminas, presentan un grupo hidroxilo que reduce la presión de vapor e incrementa la solubilidad en el agua, y un grupo amino con la basicidad necesaria para la absorción del gas ácido en solución.

Las alcanolaminas son componentes derivados del amoníaco (NH_3), bases orgánicas en las que uno, dos o tres grupos alquilo pueden sustituir a los hidrógenos del amoníaco para dar lugar a moléculas de amina primaria, secundaria y terciaria, respectivamente. La monoetanolamina (MEA), la dietanolamina (DEA) y la metildiethanolamina (MDEA) son un ejemplo de cada uno de los tipos de aminas. Abdel-aal et al (2003), las aminas primarias son las más fuertes para reaccionar con los gases ácidos, pero los enlaces estables que se forman hacen que sea difícil recuperarlas por separación; las aminas secundarias tienen una capacidad razonable para la absorción de gases ácidos y se recuperan fácilmente, y las aminas terciarias tienen una capacidad menor, pero son más selectivas para la absorción de H_2S . Es muy importante, en los procesos de endulzamiento, las condiciones de operación del proceso dependen del tipo de amina utilizada. En la tabla 3 se presentan algunas de esas condiciones.

Tabla 3

Características de las aminas

Propiedades de la amina	MEA	DEA	DGA	MDEA
Concentración de solvente (%w)	15-20	20-35	45-65	40-55
Rango de temperatura del rehervidor (°F)	225-260	230-260	250-270	230-270

Carga	ácida	(moles	0.35	0.5	0.3	0.4
GA/moles	amina)					

Nota: Abdel-aal et al (2003).

De acuerdo con Abbas et al. (2011), las soluciones con DEA son de las más utilizadas en la industria, principalmente porque resultan menos costosas de instalar y operar. Este solvente presenta una menor tasa de corrosión y menores requerimientos energéticos en la etapa de regeneración, lo que lo convierte en una opción más eficiente para operaciones continuas en plantas de procesamiento de gas natural. Asimismo, la DEA reacciona con COS y CS₂, y los productos de esta reacción pueden regenerarse. Otro aspecto favorable es su baja presión de vapor, que reduce las pérdidas por evaporación, junto con un menor calor de reacción, lo que facilita su regeneración en comparación con la MEA.

3.2 Descripción del proceso de endulzamiento del gas natural con aminas

En la figura 2, se ilustra el proceso de la absorción química de los gases ácidos empleando una solución acuosa de amina. Según Stewart & Arnold (2011), el endulzamiento es llevado a cabo en un sistema compuesto por una torre de absorción y una unidad de regeneración.

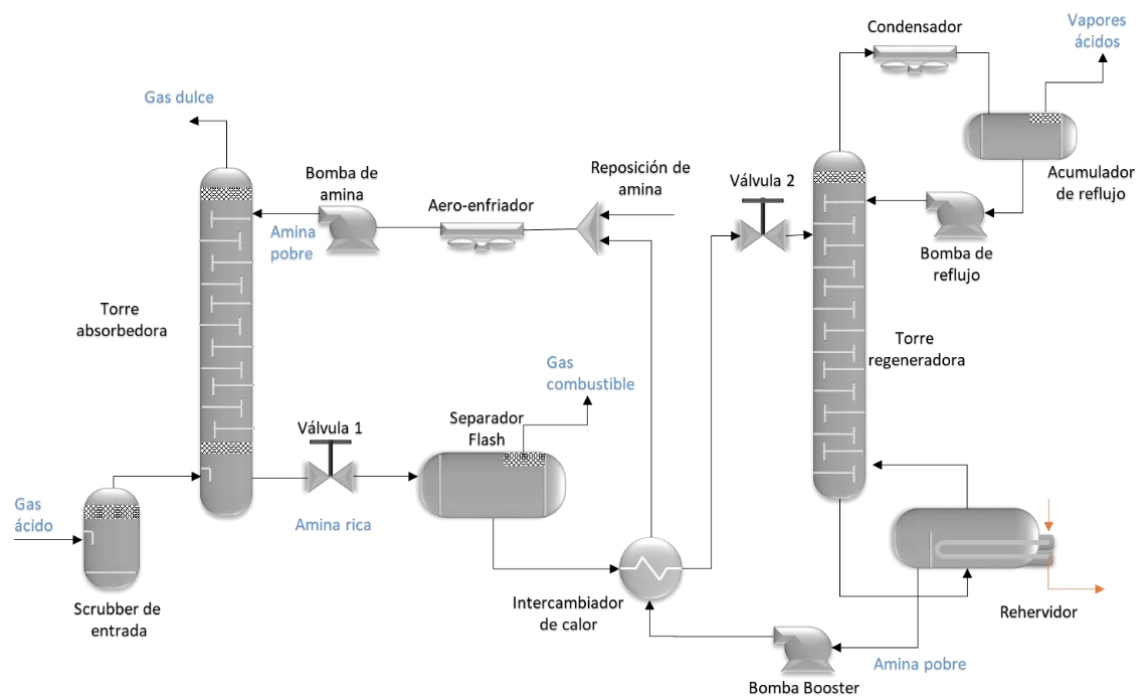
Un scrubber de entrada removerá el agua o hidrocarburos líquidos condensados arrastrados por el gas con el fin de evitar problemas operacionales en los equipos.

La corriente de gas libre de líquidos y la solución de amina entran en contacto a contracorriente en la torre de absorción, de platos o empaques, que opera a alta presión y baja temperatura para favorecer la reacción entre el gas ácido y la amina. En esta torre, los componentes ácidos del gas reaccionan exotérmicamente con la amina, ocurre un intercambio de masa y forman un subproducto que es soluble en la fase líquida que es conocido como “amina rica”. Por el tope de esta torre se obtiene el gas dulce que cumple con las especificaciones de contenido de gases ácidos para el transporte, y la amina rica sale por el fondo de la torre.

Este es un proceso de regeneración continua de la amina, es decir la reacción de los gases ácidos con la amina es reversible bajo condiciones de baja presión y alta temperatura en la unidad de regeneración. El valor máximo de la temperatura se da para el rango de temperatura de degradación la amina empleada. Con este fin, se reduce la presión de la corriente de amina rica y se desgasifica en un separador flash donde se remueven algunas cantidades de hidrocarburos y otros gases que fueron absorbidos por la amina.

Figura 2

Diagrama de flujo de proceso de una planta convencional de endulzamiento de gas natural con aminas.



Nota: Adaptado y modificado de Stewart & Arnold, (2011).

Luego, la amina rica es precalentada en un intercambiador de calor, donde la amina rica aprovechara el calor sensible de la amina pobre para aumentar su temperatura y reducir el consumo energético en el rehervidor.

Finalmente, la amina rica entra en la torre regeneración donde el calor del rehervidor calienta la amina para generar una corriente de vapor que rompe los enlaces entre la amina y los gases ácidos para formar un subproducto conocido como “amina pobre”. Los vapores ácidos ascienden por la torre hacia un condensador de reflujo el cual retira la energía añadida por el rehervidor. Los vapores ácidos son eliminados por el tope de la unidad de regeneración luego que se han separado de la amina en el acumulador de reflujo. La amina pobre que se obtiene se enfría y presuriza para realimentarla por el tope de la torre de absorción.

4 Modelos matemáticos y simulación de procesos

En los capítulos anteriores se expusieron tanto la problemática global de las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) como las limitaciones de los métodos convencionales de cálculo, particularmente aquellos propuestos por el IPCC, que no consideran de manera detallada las condiciones específicas de operación de cada planta. Ante esta situación, el presente capítulo introduce la simulación de procesos en Aspen HYSYS y la aplicación de un diseño de experimentos (DOE) como respuesta metodológica para superar dichas restricciones. La modelación matemática y la simulación de procesos constituyen herramientas esenciales en la ingeniería, ya que permiten representar, analizar y predecir el comportamiento de sistemas complejos sin necesidad de recurrir únicamente a pruebas experimentales. A través de estas metodologías, es posible comprender la influencia de las variables operacionales sobre los resultados de un proceso y, en consecuencia, optimizar su desempeño técnico, económico y ambiental.

En el caso particular del tratamiento de gas natural, la simulación computacional ofrece ventajas significativas al posibilitar el análisis de diferentes escenarios operativos bajo condiciones controladas, reduciendo costos y riesgos asociados a la experimentación directa. En concordancia

con autores como Al-Lagtah et al. (2015), Gutiérrez et al. (2017) y Samiun et al. (2025), programas como Aspen HYSYS se han consolidado como plataformas de referencia para la industria del petróleo, debido a su capacidad de modelar procesos de separación y reacción, entre ellos el endulzamiento de gas con aminas. Por su parte, la construcción de modelos matemáticos, complementada con la simulación, facilita el estudio de las interacciones entre parámetros operacionales y su influencia sobre las variables de respuesta en estudio, generando insumos cuantitativos que permiten no solo entender el comportamiento del sistema, sino también formular herramientas predictivas aplicables a la optimización de procesos.

En este contexto, el presente capítulo aborda **los** fundamentos teóricos y metodológicos de la modelación matemática y la simulación en ingeniería de procesos, con especial énfasis en su aplicación al endulzamiento de gas natural con DEA. Asimismo, se presentan los principios del diseño de experimentos (DOE) y los métodos estadísticos de análisis, que servirán de base para el desarrollo y validación del modelo matemático propuesto en esta investigación.

4.1 Simulación de procesos en Aspen HYSYS

La simulación de procesos es una herramienta clave en ingeniería de procesos para representar virtualmente plantas y sistemas industriales, permitiendo diseñar, analizar y optimizar operaciones mediante balances de masa, energía, equilibrios de fase y reacciones químicas. En este contexto, Aspen HYSYS sobresale como el simulador preferido en la industria, especialmente simulaciones de procesos del petróleo, gas y refinación, gracias a su capacidad de modelado en estado estacionario y dinámico dentro de una misma plataforma, sirviendo para el diseño de plantas y el análisis operativo de las mismas. (Aspen Technology Inc, 2012).

HYSYS se ha consolidado como una herramienta indispensable para la industria química y de procesos. Su aplicación en el ámbito del diseño ingenieril permite la optimización de procesos

y el monitoreo continuo del desempeño de los procesos. Esta versatilidad permite a los usuarios aprovechar una plataforma de modelado a lo largo de todo el ciclo de vida de una instalación, proceso o equipo, maximizando su eficiencia, garantizando la consistencia de la información y facilitando la toma de decisiones.

Este software incorpora modelos termodinámicos rigurosos y consistentes, que constituyen la base de todo modelado de procesos al permitir calcular con precisión las propiedades de los fluidos, acceder a bases de datos especializadas, realizar cálculos de equilibrio (flash) y estimar propiedades. Su arquitectura basada en componentes no solo es fundamental para simular con exactitud el comportamiento de las corrientes y las operaciones unitarias dentro de HYSYS, sino que además facilita la integración y el complemento de estas capacidades termodinámicas en otras aplicaciones de software externas, garantizando así la coherencia entre todas las herramientas de ingeniería.

Para la simulación de plantas de endulzamiento de aminas se usa el paquete termodinámico Acid Gas junto con el tipo de cálculo de eficiencia. Este paquete, desarrollado por Aspen Technology Inc. (2012), combina la ecuación de estado de Peng-Robinson para la fase vapor con el modelo de coeficiente de actividad electrolyte non-random two-liquid (eNRTL) para representar la termodinámica de electrólitos. Asimismo, incorpora bases de datos de propiedades físicas específicas para soluciones acuosas de aminas, lo que permite describir con mayor precisión los procesos de absorción y desorción de gases ácidos en sistemas de endulzamiento de gas (Gutiérrez et al., 2017).

4.2 Diseño de experimentos

Según Domínguez y Castaño (2016) el diseño estadístico de experimentos se debe usar como una metodología que permite plantear distintas estrategias para seleccionar, controlar,

analizar e interpretar diferentes condiciones de estudio en un fenómeno de una manera objetiva y sistemática.

Un buen diseño experimental es uno en el que los efectos de las condiciones seleccionadas y manipuladas en el sistema experimental pueden ser cuantificados y entendidos sin confusión con efectos ruidosos operando en el sistema experimental dando lugar a mediciones de ciertas características denominadas variables de respuesta.

Con lo anterior, se plantea la necesidad de evaluar las condiciones de operación que tienen un efecto significativo en alguna de las variables de interés mediante el planteamiento de una estructura de tratamiento de un diseño experimental el cual consiste en el conjunto de tratamientos que el experimentador ha seleccionado para estudiar y/o comparar. Puede haber estructuras con un factor o varios factores; pueden considerarse todos los tratamientos (diseño factorial) o un subconjunto del total de tratamientos según el interés del experimentador (diseño factorial incompleto).

Factor. Una variable de interés controlada hasta cierto punto por el experimentador, de la que se desea estudiar sus efectos en una o varias respuestas.

Nivel. Modalidad específica dentro de un factor. Por ejemplo, si el factor es el tiempo de operación, el interés puede ser estudiar la respuesta del proceso durante tres periodos diferentes. En este caso se dice que el factor tiene tres niveles.

Tratamiento. Se refiere a cada una de las combinaciones de los niveles de varios factores aplicados conjuntamente a las unidades experimentales.

Unidad experimental. Individuo, objeto o unidad de material a la que se le aplica un tratamiento, a ésta se le miden las variables respuesta bajo estudio.

Efecto principal. Indica la contribución que cada factor tiene sobre las variables de respuesta. Ésta se mide evaluando el cambio que se produce en la respuesta al modificar los niveles del factor.

4.3 Análisis de diseños factoriales

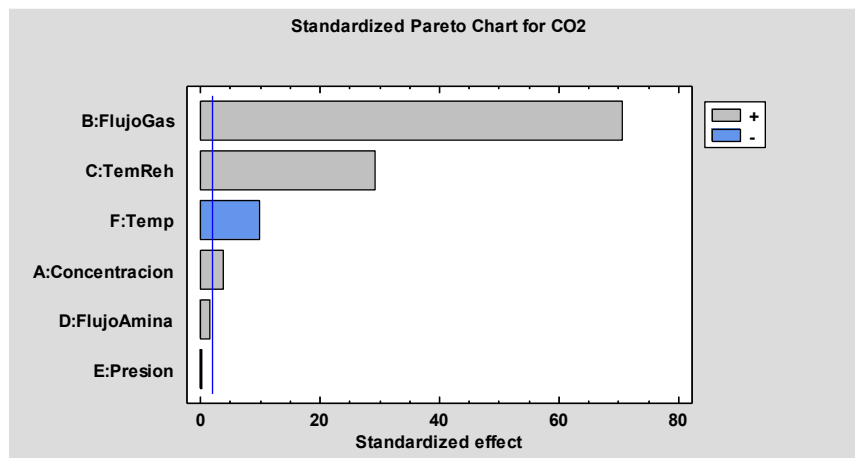
En el marco del análisis de los diseños de experimentos factoriales, se emplean herramientas estadísticas que permiten identificar, cuantificar y validar el efecto de las variables operacionales sobre la variable de respuesta. Dentro de estas herramientas, el diagrama de Pareto de efectos estandarizados y las regresiones matemáticas cumplen un papel complementario y esencial.

El diagrama de Pareto se utiliza como un medio gráfico para jerarquizar la importancia relativa de los factores y de sus posibles interacciones. A través de la comparación de los efectos estandarizados con un umbral de significancia estadística, esta herramienta permite discriminar cuáles variables tienen una influencia relevante sobre la respuesta y cuáles pueden considerarse despreciables. De este modo, el análisis de Pareto contribuye a reducir la complejidad del modelo, enfocando la atención en los parámetros que explican la mayor variabilidad del sistema (Antony, 2023).

En Blanchet et al. (2022), los diagramas de Pareto de efectos estandarizados (figura 3) muestran, en orden descendente, la magnitud de los efectos que cada variable operativa (A, B, C, D, E y F) y sus interacciones (cuando se estudian) ejercen sobre las variables de respuesta analizadas. Estos diagramas permiten identificar si un efecto contribuye al aumento de la respuesta (representado en gris) o a su disminución (representado en azul). Asimismo, incluyen una línea de referencia que señala cuáles efectos son estadísticamente significativos en relación con la respuesta estudiada. del efecto, es decir, si el valor de respuesta promedio aumenta o disminuye.

Figura 3

Diagrama de Pareto de efectos estandarizados



El diagrama de Pareto es una herramienta flexible que se puede adaptar a diferentes situaciones y contextos. Se ha utilizado con éxito en gestión de proyectos, planificación estratégica, gestión de inventarios, análisis de ventas y otros campos. Su simplicidad y eficacia lo convierten en un recurso valioso para profesionales de diversas disciplinas (Chávez et al., 2024).

Posteriormente, las regresiones se aplican para construir un modelo matemático que relacione la variable de salida con los factores significativos previamente identificados. Existen diferentes tipos de regresión (Nuñez et al., 2011) —como la lineal simple, lineal múltiple, polinómica, logística o no lineal— cuya elección depende de la naturaleza de los datos, la forma de la relación entre las variables y el objetivo del análisis. El modelo obtenido no solo permite cuantificar la magnitud y dirección de los efectos principales y de las interacciones, sino que además facilita la evaluación de la bondad de ajuste mediante indicadores estadísticos como el coeficiente de determinación (R^2), el R^2 ajustado y las pruebas de significancia de los coeficientes. De esta manera, se verifica la capacidad predictiva del diseño factorial y se dispone de una herramienta útil para estimar la variable de interés bajo diferentes condiciones operativas.

La modelación matemática y la simulación de procesos se consolidan como herramientas fundamentales para entender, comprender y predecir el comportamiento de sistemas complejos en la industria de hidrocarburos. En este capítulo se expusieron los fundamentos de la modelación aplicada a procesos de ingeniería, destacando cómo la integración de ecuaciones matemáticas, técnicas de simulación y métodos estadísticos permite analizar la influencia de múltiples variables operativas en el desempeño de los procesos.

El uso de plataformas como Aspen HYSYS constituye un recurso estratégico, al posibilitar la representación detallada de operaciones como la absorción y regeneración de aminas, y al proporcionar datos confiables para el desarrollo de modelos predictivos. Asimismo, la incorporación de herramientas estadísticas como la regresión multivariable y el análisis de Pareto permite identificar las variables más significativas y establecer relaciones cuantitativas entre las condiciones operacionales y las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI).

La revisión de estudios previos evidencia avances importantes en la modelación de procesos con aminas, aunque también pone de manifiesto limitaciones relacionadas con la aplicabilidad de modelos genéricos a condiciones particulares de operación. Esta brecha metodológica refuerza la necesidad de desarrollar un modelo matemático específico que incorpore las particularidades del proceso de endulzamiento con aminas (DEA).

En consecuencia, el presente trabajo se orienta a formular y validar un modelo predictivo de emisiones de CO_2 y CH_4 en plantas de endulzamiento, integrando simulación en Aspen HYSYS y análisis estadístico. El siguiente capítulo aborda el diseño experimental y la definición de variables de estudio, etapa clave para estructurar el modelo propuesto y evaluar de manera sistemática el efecto de los parámetros operativos sobre las emisiones.

Como parte de los productos derivados de esta investigación y en cumplimiento de los objetivos específicos, se desarrolló un software de diseño que implementa el modelo matemático propuesto para la predicción de emisiones de CO₂ y CH₄ en plantas de endulzamiento con aminas. Su descripción detallada, incluyendo la estructura de codificación y los lineamientos de uso, se presenta en el Anexo A.

5 Diseño experimental y variables de estudio

El diseño experimental constituye una herramienta esencial en la ingeniería de procesos, ya que permite evaluar de manera sistemática la influencia de múltiples variables sobre el comportamiento de un sistema. En investigaciones orientadas al desarrollo de modelos matemáticos, el diseño experimental no solo facilita la identificación de los factores más relevantes, sino que también optimiza los recursos al reducir el número de pruebas necesarias para alcanzar conclusiones estadísticamente significativas.

En el caso del tratamiento de gas natural mediante procesos de endulzamiento con aminas, las condiciones operativas ejercen un impacto directo sobre la eficiencia de remoción de gases ácidos y, de manera particular, sobre las emisiones fugitivas de dióxido de carbono (CO₂) y metano (CH₄). La complejidad de estas interacciones hace indispensable recurrir a un enfoque experimental factorial que permita identificar los parámetros de mayor influencia y establecer relaciones cuantitativas entre las variables de operación y las emisiones resultantes.

El presente capítulo describe el diseño experimental propuesto para esta investigación, el cual se fundamenta en simulaciones realizadas en Aspen HYSYS. Se definen las variables de estudio —independientes, dependientes y de control— y se justifica la selección de un diseño factorial como estrategia metodológica para analizar los efectos principales y de interacción.

Finalmente, se presentan los criterios de análisis estadístico que permitirán validar los resultados y sentar las bases para la construcción del modelo matemático.

5.1 Definición del problema y objetivos del diseño

La hipótesis de esta investigación plantea que las condiciones operacionales de una planta de endulzamiento de gas natural con aminas —incluyendo el flujo y concentración del solvente, el tipo de amina empleada, el caudal de gas, la presión y temperatura de la torre de absorción, así como la temperatura del rehervidor— afectan directamente la absorción de CO₂ y CH₄ en la amina y, por ende, determinan el nivel de emisiones de GEI liberadas a la atmósfera.

En este contexto, el problema central consiste en que las metodologías tradicionales de cuantificación de emisiones, como las directrices del IPCC o los factores de emisión estándar, no incorporan de manera detallada las particularidades operativas de cada planta, lo cual limita la precisión en la estimación de las mismas.

Por lo anterior, el objetivo de este diseño experimental es evaluar de manera sistemática el efecto de las variaciones en las condiciones operativas sobre las emisiones de CO₂ y CH₄, a fin de generar información robusta que permita formular un modelo matemático predictivo. Este modelo busca no solo estimar el flujo másico de GEI en plantas de endulzamiento con aminas, sino también servir como herramienta de gestión ambiental y optimización operativa en el sector del gas natural.

5.2 Variables de estudio

El diseño experimental propuesto en esta investigación se estructura en torno a la definición de variables que permiten analizar el impacto de las condiciones operacionales sobre las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) en procesos de endulzamiento de gas natural con amina. Estas variables se clasifican en independientes, dependientes y de control, de acuerdo con su función en el diseño metodológico.

5.2.1 Variables independientes (factores de control)

Corresponden a los parámetros operativos de la planta que pueden modificarse y cuya variación se evaluará en las simulaciones:

- Tipo de amina empleada: DEA como solvente principal, con posibilidad de comparar MEA y MDEA en fases posteriores.
- Flujo de amina circulante (DEA): cantidad de solvente en recirculación, expresada en gpm.
- Concentración de DEA en solución (% peso): proporción de amina en la mezcla acuosa.
- Flujo de gas de alimentación: cantidad de gas ácido que ingresa al sistema, en MMSCFD.
- Presión de operación de la torre de absorción: valor de presión en la torre contactora.
- Temperatura de la torre de absorción: valor de temperatura en la torre contactora.
- Temperatura del rehervidor: condición clave para la regeneración de la amina.

5.2.2 Variables dependientes (respuestas del modelo)

Son los resultados que se desean medir y analizar, a partir de las variaciones en las condiciones operacionales:

- Flujo másico de CO₂ en el tope de la unidad regeneradora (lb/h).
- Flujo másico de CH₄ en el tope de la unidad regeneradora (lb/h).
- Cumplimiento de especificaciones de gas tratado: Máximo 2 % de CO₂ en el gas dulce y máximo 4 ppm de H₂S.

5.2.3 Variables de control (constantes del diseño experimental)

Se mantienen fijas durante el desarrollo de las simulaciones, a fin de garantizar la comparabilidad de resultados:

- Composición del gas de alimentación: definida a partir de una mezcla típica de gas ácido.
- Número de etapas de la torre de absorción y regeneración.
- Configuración del sistema de regeneración: relación amina-agua, diseño base del rehervidor.
- Propiedades termodinámicas empleadas en HYSYS: paquete *Acid Gas – Chemical Solvents* con ecuación de estado Peng-Robinson y demás modelos termodinámicos.

5.3 Metodología del diseño experimental

El diseño experimental constituye el eje metodológico que permite evaluar de manera sistemática el efecto de las variables operativas sobre las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) en el proceso de endulzamiento de gas natural con dietanolamina (DEA). Dado que el sistema involucra múltiples parámetros interdependientes, se requiere una estrategia que permita analizar tanto los efectos individuales como las posibles interacciones entre variables.

En esta investigación se adoptó un diseño factorial, ya que este enfoque ofrece la posibilidad de estudiar simultáneamente varios factores y sus interacciones (Montgomery, 2017), optimizando el número de corridas necesarias frente a un diseño univariado.

5.3.1 Selección del diseño factorial

Se identificaron seis variables operativas críticas para evaluar su impacto en la emisión de GEI, como el CH_4 y el CO_2 . Estas variables fueron seleccionadas por su influencia directa en la eficiencia del proceso de absorción química con DEA y las emisiones asociadas.

El diseño experimental se fundamentó en un enfoque factorial completo, lo que permitió analizar tanto los efectos individuales de cada variable como las interacciones entre ellas. Además,

los rangos considerados para cada parámetro se ajustaron a los estándares industriales típicos (Tabla 4).

Tabla 4

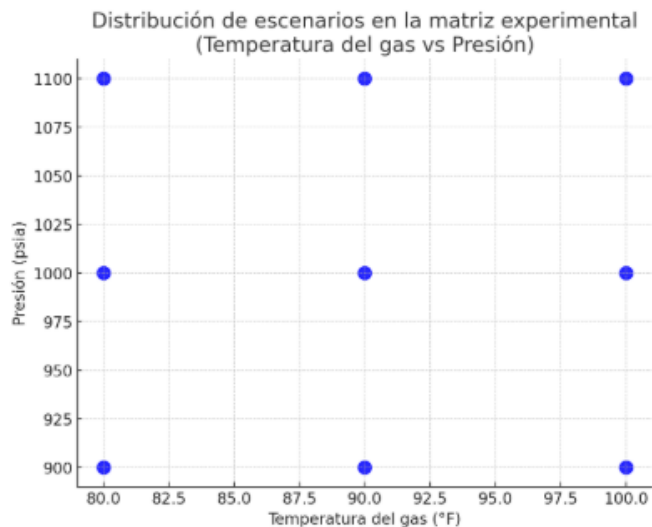
Valores empleados en la matriz de experimentos.

Parámetro	Valor
Flujo de gas de entrada (MMSCFD)	50, 100 y 150
Presión del gas (psia)	900, 1000 y 1100
Temperatura del gas (°F)	80, 90 y 100
Temperatura del rehervidor (°F) (Abdel-aal et al, 2003)	230 y 255
Concentración en peso amina (%w) (Abdel-aal et al, 2003)	25, 30 y 35
Tasa de circulación de amina (USGPM)	2 valores

La combinación de estos niveles generó una matriz experimental de 324 simulaciones, lo que permitió una exploración exhaustiva del espacio operativo. Cada combinación de variables se modeló en estado estacionario utilizando el paquete de propiedades *Acid Gas – Chemical Solvents*, el cual proporciona una representación precisa de la termodinámica de la amina en el proceso de absorción química. El objetivo principal fue optimizar el proceso para garantizar que el gas dulce obtenido cumpla con las especificaciones de calidad y normativas ambientales, asegurando un contenido máximo de CO₂ de 2% en composición molar y de H₂S de 4 ppm, valores críticos cumplir con los estándares de seguridad. Adicionalmente, se buscó cuantificar las emisiones fugitivas de CH₄ y CO₂, con el fin de evaluar el impacto ambiental y proponer estrategias de mitigación.

Figura 4

Distribución de escenarios de simulación en la matriz experimental (Temperatura del gas vs. Presión de absorción)



La Figura 4 representa un esquema simplificado de la matriz experimental utilizada en el desarrollo de la investigación. En este caso, se ilustra la distribución de escenarios en función de dos de las variables de control más relevantes: la temperatura del gas de alimentación ($^{\circ}\text{F}$) y la presión de absorción (psia). Cada punto corresponde a una corrida de simulación individual, lo que permite visualizar la combinación sistemática de los niveles de operación.

Este diseño experimental garantiza la exploración estructurada del espacio operativo, asegurando que se cubran tanto las condiciones más favorables para la absorción de gases ácidos como aquellas menos eficientes. De esta manera, es posible identificar tendencias claras en el comportamiento del proceso y cuantificar el impacto de las condiciones operativas sobre la calidad del gas dulce y las emisiones de GEI.

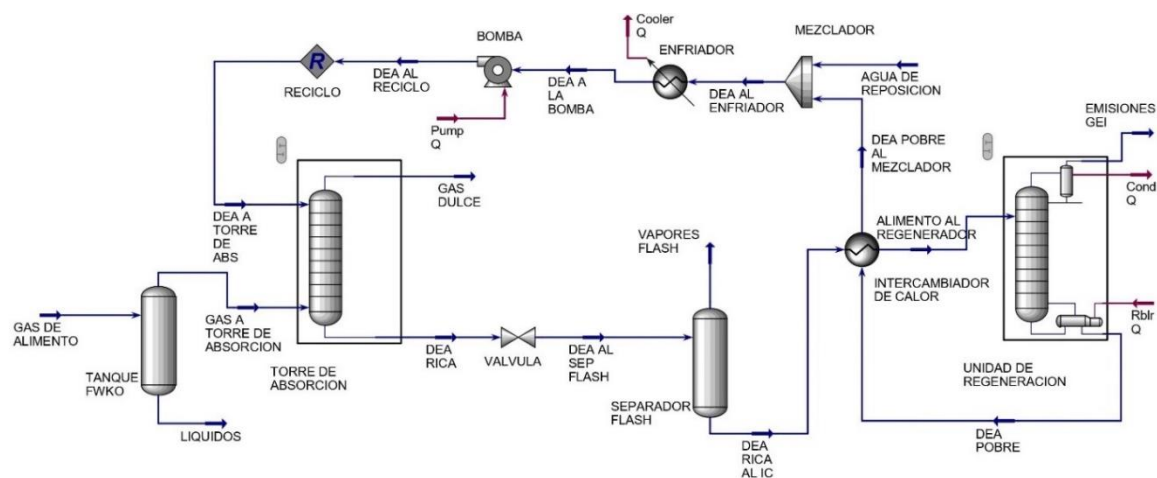
5.4 Caso base de simulación

A continuación, se presenta la configuración inicial de una simulación del proceso de endulzamiento de gas natural utilizando DEA como amina (Figura 5), que se empleará como punto de partida para explorar el comportamiento de las emisiones de CO_2 y CH_4 en la corriente del tope de la unidad de regeneración. Para llevar a cabo la simulación, se utilizó el software de simulación de procesos Hysys (versión 10, Aspen Technology, bajo licencia académica institucional en los

computadores del CENTIC de la Universidad Industrial de Santander) junto con el paquete de propiedades "Acid Gas - Chemical Solvents", que permite modelar las reacciones que ocurren en el proceso de endulzamiento de gas natural.

Figura 5

Diagrama del modelo de simulación en Aspen Hysys de una planta de endulzamiento de gas natural con DEA.



Nota: Aspen HYSYS – ASPEN TECH. (2003).

En el presente estudio, se define el escenario base del proceso de endulzamiento de gas natural utilizando como datos de entrada la composición del gas, la tasa de flujo del gas, la presión y la temperatura especificadas en la Tabla 5. Para remover los gases ácidos presentes en el gas natural, se emplea una solución de DEA al 25% en peso como medio absorbente.

Tabla 5

Cromatografía extendida y datos del gas de entrada.

Temperatura (°F)	75	Presión (psia)	1000
Flujo molar (MMSCFD)	25		
Componente	Fracción molar	Componente	Fracción molar

Metano	0,9439812	Ciclohexano (6)	0,0000030
Etano	0,0018267	2-Metillhexano (7)	0,0000059
Propano (3)	0,0006916	n-Heptano (7)	0,0000040
i-Butano (4)	0,0004831	Tolueno (7)	0,0000336
n-Butano (4)	0,0001245	n-Octano (8)	0,0000227
Neo-Pentano (5)	0,0000030	Etilbenceno (8)	0,0000168
i-Pentano (5)	0,0001729	m-Xileno (8)	0,0000049
n-Pentano (5)	0,0000336	p-Xileno (8)	0,0000049
2.2-Dimethylbutane (6)	0,0000010	o-Xileno (8)	0,0000109
Ciclopentano (5)	0,0000084	n-Nonano (9)	0,0002025
2.3-Dimetilbut (5)	0,0000084	Decanos (10)	0,0000464
Isohexano (6)	0,0000158	Undecanos (11)	0,0000148
3-Metilpentano (6)	0,0000128	Dióxido de Carbono	0,0277891
n-Hexano (6)	0,0000119	Oxígeno	0,0000168
Metilciclopentano (6)	0,0000020	H ₂ O	0,0120530
Isoheptano (7)	0,0000474	Nitrógeno	0,0086900
Benceno (6)	0,0000010	H ₂ S	0,0036554

Los parámetros operativos y las especificaciones de diseño del proceso de endulzamiento de gas natural con aminas se adaptaron del tutorial de “Acid Gas Sweetening with DEA” (AspenTech, 2003). La columna de absorción de amina es una parte crítica de la planta de endulzamiento, y debe cumplir con ciertas especificaciones de temperatura y presión de las corrientes, las cuales se encuentran resumidas en la Tabla 6. La amina rica que sale del fondo de la torre absorbadora se dirige hacia una válvula, donde se reduce la presión a 90 psia. Los gases que se evaporan de la amina rica se separan en el tanque flash con el fin de evitar la generación de espuma en el equipo siguiente. Posteriormente, la amina rica debe ser regenerada, lo cual se logra

instalando la unidad de regeneración de amina después del intercambiador de calor de amina, donde se precalienta antes de entrar en la unidad de regeneración. Los datos operacionales del intercambiador de calor y de la unidad de regeneración se describen en las Tablas 7 y 8, respectivamente

Tabla 6

Especificaciones de la torre de absorción.

Parámetro	Valor
Presión en el tope de la torre de absorción (psia)	995
Presión en la base de la torre de absorción (psia)	1000
Número de etapas de la torre de absorción	20
Temperatura estimada en el tope de la torre (°F)	100
Temperatura estimada en la base de la torre (°F)	160

Tabla 7

Especificaciones del intercambiador de calor.

Parámetro	Valor
Tipo de intercambiador de calor	Tubos y coraza
Temperatura de salida lado tubos (°F)	203
Caída de presión lado tubos (psi)	10
Caída de presión lado coraza (psi)	10

Tabla 8

Especificaciones de la unidad de regeneración.

Parámetro	Valor
Etapas de la columna de despojo	18

Tipo de condensador de cima	Full Rflx
Caída de presión en el condensador (psi)	2,5
Presión del condensador (psia)	27,5
Presión del rehervidor (psia)	31,5
Temperatura del condensador de cima (°F)	210
Temperatura del rehervidor (°F)	260

En el proceso de endulzamiento de gas natural con aminas, es esencial agregar agua de reposición mediante un mezclador para evitar la pérdida de concentración de la amina debido a la eliminación de agua junto con el gas dulce. La corriente de agua de reposición se encargará de mantener y respaldar la concentración de la amina en el proceso. Es importante destacar que estas corrientes deben mezclarse a la misma presión. La torre de regeneración trabaja a altas temperaturas, lo que resulta en la salida de la amina pobre en forma caliente. Para evitar una disminución en su capacidad de absorción de los gases ácidos, no se puede introducir la amina pobre directamente a la torre absorbadora. Para solucionar este problema, se utiliza un enfriador para reducir la temperatura de la amina recirculada, aproximadamente 20°F por encima de la temperatura de entrada de la corriente gaseosa en la torre absorbadora, empleando la función lógica SET. Luego, la amina pobre enfriada se bombea a la presión del absorbador y se introduce en la parte superior del absorbador. Por último, la corriente de amina pobre que se estimó inicialmente se reemplazará por la nueva corriente de amina pobre calculada y se ejecutarán hasta que el ciclo de la función RECYCLE converja.

5.5 Enfoque de análisis estadístico

Los resultados obtenidos de las simulaciones en Aspen HYSYS serán procesados y analizados mediante herramientas estadísticas especializadas, utilizando software como StatGraphics. El análisis se centrará en evaluar la influencia de cada variable independiente sobre

las emisiones de CO₂ y CH₄, aplicando técnicas de regresión y validación estadística. Inicialmente, se desarrollarán modelos de regresión lineal múltiple, con el fin de identificar relaciones directas entre las condiciones operativas y las respuestas del sistema. Posteriormente, se implementarán modelos de regresión cuadrática completa, que permitan capturar los efectos de curvatura y las interacciones de segundo orden. Como refinamiento, se aplicará una regresión cuadrática ponderada, en la cual las variables tendrán un peso proporcional a su significancia según el análisis de Pareto. Finalmente, se procederá al desarrollo y validación del modelo matemático predictivo, verificando su ajuste a los datos simulados mediante indicadores como el coeficiente de determinación (R^2) y el error cuadrático medio (RMSE). Este enfoque garantiza la construcción de un modelo robusto, confiable y representativo de las emisiones de GEI en plantas de endulzamiento de gas natural.

El diseño experimental planteado en este capítulo establece la estructura metodológica necesaria para evaluar de manera rigurosa el efecto de las condiciones operativas sobre las emisiones de CO₂ y CH₄ en procesos de endulzamiento de gas natural con DEA. La definición clara de variables independientes, dependientes y de control, junto con la adopción de un diseño factorial y el uso de simulaciones en Aspen HYSYS, garantizan la obtención de datos consistentes y representativos. Asimismo, la aplicación de técnicas estadísticas avanzadas mediante software especializado como StatGraphics permitirá analizar la influencia de cada variable, construir modelos de regresión lineal y cuadrática, y validar un modelo matemático predictivo ajustado a los resultados simulados. Con ello, se sientan las bases para el siguiente capítulo, donde se presentarán los resultados de las simulaciones y el análisis detallado de las emisiones de GEI bajo distintos escenarios operativos.

6 Resultados y análisis de simulaciones

Los resultados derivados del diseño experimental y de las simulaciones realizadas en Aspen HYSYS constituyen la base cuantitativa para evaluar el efecto de las condiciones operativas sobre las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) en el proceso de endulzamiento de gas natural con dietanolamina (DEA). A partir del esquema metodológico definido en el Capítulo 4, se ejecutaron simulaciones variando parámetros operacionales como el caudal y concentración de amina, la presión, temperatura y el flujo de gas de alimentación y la temperatura del rehervidor.

El análisis de estos resultados busca identificar las relaciones entre los factores operativos y las emisiones de dióxido de carbono (CO_2) y metano (CH_4), de manera que se puedan cuantificar los efectos principales y de interacción. Para ello, los datos obtenidos se procesaron con apoyo de herramientas estadísticas, lo cual permitió aplicar modelos de regresión lineal y cuadrática, así como determinar la significancia relativa de cada variable mediante diagramas de Pareto.

En este capítulo se presenta, en primera instancia, los resultados de las simulaciones bajo los distintos escenarios operativos evaluados. Posteriormente, se expone el análisis estadístico aplicado a los datos, incluyendo la validación del modelo matemático propuesto, con el fin de ofrecer una herramienta predictiva para la estimación del flujo masico de GEI en plantas de endulzamiento de gas natural.

6.1 Resultados de las simulaciones en Aspen HYSYS

Con el fin de garantizar la consistencia de los resultados y la reproducibilidad del estudio, se estableció un conjunto de condiciones base para la simulación del proceso de endulzamiento de gas natural en Aspen HYSYS. Estas condiciones corresponden a un caso de referencia descrito en el capítulo anterior a partir del cual se evaluaron las variaciones operativas consideradas en el diseño experimental.

Estas condiciones base sirvieron como punto de referencia para el análisis de sensibilidad y la ejecución del diseño factorial descrito en el Capítulo 4. A partir de este escenario, se aplicaron variaciones en las variables independientes con el fin de identificar su influencia sobre las emisiones de CO₂ y CH₄, así como sobre el cumplimiento de las especificaciones del gas tratado ($\leq 2\%$ CO₂ y ≤ 4 ppm H₂S).

En el HYSYS, la ventana principal de simulación (**Simulation Environment**) permite construir el diagrama de flujo del proceso de endulzamiento (Figura 5), donde se insertan las corrientes de entrada y salida, así como los equipos principales: torre de absorción y regeneración, intercambiadores, rehervidores, bombas y separadores. Esta vista gráfica constituye la representación central del proceso y actúa como punto de acceso a las demás herramientas de configuración.

La ventana Case Study en Aspen HYSYS (Figura 6) constituye una herramienta fundamental para la ejecución de análisis paramétricos y de sensibilidad, ya que permite seleccionar las variables independientes (factores de entrada) y las variables dependientes (respuestas del sistema) que serán evaluadas en este estudio experimental. Desde este panel es posible automatizar el cambio de condiciones de operación y registrar los resultados de emisiones de CO₂ y CH₄ bajo distintos escenarios.

En la parte superior de la ventana se listan las variables independientes, es decir, aquellas condiciones de operación que se modifican para observar su efecto sobre el desempeño del sistema. En el caso de la simulación base, se incluyeron las variables identificadas en la matriz de experimentos. Por otro lado, en la parte inferior de la ventana se presentan las variables dependientes, que representan las respuestas del sistema frente a los cambios en las condiciones

de operación. Para este estudio, estas incluyen flujos másicos y fracciones molares de los principales componentes en las corrientes de gas ácido y gas dulce.

Figura 6

Modulo del HYSYS Case Study – Variable Selection

The screenshot shows the 'Variable Selection' window in HYSYS. It has tabs for 'Variable Selection', 'Case Study Setup', 'Results', and 'Plots'. The 'Variable Selection' tab is active. It contains two tables: 'Independent Variables' and 'Dependent Variables'. Each table has columns for 'Name', 'Tag', 'Current Value', 'Units', and 'Delete'. There are 'Find Variables' buttons above each table and scroll arrows on the right side.

Independent Variables					
	Name	Tag	Current Value	Units	Delete
1	REGENERATOR - Spec Value (Temperature - 2)		230,0	F	X
2	DEA TO CONTACTOR - Std Ideal Liq Vol Flow		1500	USGPM	X
3	SOUR GAS - Pressure		900,0	psia	X
4	SOUR GAS - Temperature		80,00	F	X

Dependent Variables					
	Name	Tag	Current Value	Units	Delete
1	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (CO2)		26652,7530	lb/hr	X
2	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (DEAmine)		0,0000	lb/hr	X
3	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (H2O)		999,8934	lb/hr	X
4	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (H2S)		7533,9427	lb/hr	X
5	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (Methane)		44,3893	lb/hr	X
6	ACID GAS - Master Comp Mass Frac (CO2)		0,7551		X
7	ACID GAS - Master Comp Mass Frac (DEAmine)		0,0000		X
8	ACID GAS - Master Comp Mass Frac (H2O)		0,0283		X
9	ACID GAS - Master Comp Mass Frac (H2S)		0,2134		X
10	ACID GAS - Master Comp Mass Frac (Methane)		0,0013		X
11	SWEET GAS - Master Comp Mole Frac (CO2)		0,0009		X

En el módulo *Case Study Setup* (Figura 7) se establecieron los rangos operativos de cada una de las variables seleccionadas para el estudio. Posteriormente, se configuraron y ejecutaron las corridas de simulación correspondientes a los diferentes casos definidos, garantizando la cobertura completa del diseño experimental.

Figura 7

Modulo HYSYS Case Study - Setup

Variable Selection		Case Study Setup	Results	Plots			
Case Study Type	Number of States	Number of Bases	<input type="radio"/> Unidirectional <input type="radio"/> Bidirectional	<input type="button" value="Run"/> <input checked="" type="checkbox"/> Reset after run			
Nested	36						
Name	Tag	Current Value	Units	Start	End	Step Size	#Steps
REGENERATOR - Spec Value (Temperature - 2)		230,0	F	230,0	255,0	25,00	2
DEA TO CONTACTOR - Std Ideal Liq Vol Flow		1500	USGPM	1500	1550	50,00	2
SOUR GAS - Pressure		900,0	psia	900,0	1100	100,0	3
SOUR GAS - Temperature		80,00	F	80,00	100,0	10,00	3

La Figura 8, correspondiente a la pestaña *Results*, en la cual se presenta en formato tabular los resultados de todas las simulaciones generadas por el *Case Study*. Cada fila de la tabla representa un *Case* o escenario específico, definido por una combinación única de los niveles asignados a las variables, previamente seleccionadas en *Variable Selection* y configuradas en *Case Study Setup*.

Figura 8

Modulo HYSYS Case Study - Results

Variable Selection		Case Study Setup	Results	Plots						
Failed Cases: 0	Show: All	<input checked="" type="checkbox"/> Transpose results	<input type="button" value="Send to Excel"/>							
State	REGENERATOR - Spec Value (Temperature - 2) [F]	DEA TO CONTACTOR - Std Ideal Liq Vol Flow [USGPM]	SOUR GAS - Pressure [psia]	SOUR GAS - Temperature [F]	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (CO2) [lb/hr]	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (DEAmine) [lb/hr]	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (H2O) [lb/hr]	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (H2S) [lb/hr]	ACID GAS - Master Comp Mass Flow (Methane) [lb/hr]	ACID Cor
Case 1	230,0	1500	900,0	80,00	26611,7997	0,0000	999,9868	7533,0349	44,3454	
Case 2	230,0	1500	900,0	90,00	26453,6470	0,0000	994,6870	7492,9282	40,5530	
Case 3	230,0	1500	900,0	100,0	26156,5054	0,0000	984,4692	7465,0640	36,7579	
Case 4	230,0	1500	1000	80,00	26641,0133	0,0000	1000,2169	7555,8145	44,5658	
Case 5	230,0	1500	1000	90,00	26441,2181	0,0000	993,8374	7503,7035	40,6420	
Case 6	230,0	1500	1000	100,0	26178,2951	0,0000	984,1639	7466,5202	36,7538	
Case 7	230,0	1500	1100	80,00	26626,9156	0,0000	1000,1074	7551,7401	44,6526	
Case 8	230,0	1500	1100	90,00	26441,9249	0,0000	993,8023	7501,5693	40,7193	
Case 9	230,0	1500	1100	100,0	26190,2512	0,0000	984,3987	7462,0453	36,8045	
Case 10	230,0	1550	900,0	80,00	26682,1629	0,0000	1002,0916	7536,7909	47,0888	
Case 11	230,0	1550	900,0	90,00	26513,5933	0,0000	996,7595	7517,6032	43,2028	
Case 12	230,0	1550	900,0	100,0	26269,7441	0,0000	988,0840	7477,5074	39,3843	
Case 13	230,0	1550	1000	80,00	26671,3764	0,0000	1001,7692	7558,4541	47,1615	
Case 14	230,0	1550	1000	90,00	26502,8743	0,0000	995,9931	7511,2421	43,2888	
Case 15	230,0	1550	1000	100,0	26284,5215	0,0000	987,5744	7450,1832	39,4212	
Case 16	230,0	1550	1100	80,00	26650,6039	0,0000	1002,3751	7561,1348	47,3008	
Case 17	230,0	1550	1100	90,00	26512,2236	0,0000	996,2348	7506,6330	43,3568	
Case 18	230,0	1550	1100	100,0	26279,4656	0,0000	987,4377	7446,4433	39,4799	

Las primeras columnas organizan las variables independientes o de entrada del sistema: la temperatura del regenerador, el caudal de DEA hacia el contactor, y las condiciones de presión y temperatura del gas de alimentación. Estos parámetros varían para cada caso de acuerdo con el

diseño experimental establecido, permitiendo cuantificar su efecto individual y colectivo sobre el comportamiento del proceso de endulzamiento de gas con DEA.

A continuación, se detallan las variables dependientes o de respuesta, asociadas al flujo másico de los componentes en la corriente de gas ácido en el tope de la unidad de regeneración de la aminor. Estas incluyen dióxido de carbono (CO_2), sulfuro de hidrógeno (H_2S), metano (CH_4) y agua (H_2O), además de la amina (DEA), cuyo valor ideal debe ser nulo para garantizar la integridad del solvente y minimizar pérdidas. La comparación sistemática entre casos permite analizar el impacto de las variaciones operativas en la composición final del gas de salida, crucial para evaluar la eficiencia del proceso en la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero.

El análisis de la tabla consiste, por tanto, en examinar cada fila como un experimento discreto y contrastar los valores de salida con las condiciones de entrada definidas. Por ejemplo, al mantener constante el caudal de DEA y variar la presión del gas, se puede identificar la influencia de esta variable sobre el flujo másico de CO_2 y H_2S . De igual forma, al modificar la temperatura del gas o incrementar el flujo de DEA hacia el absorbedor, es posible evaluar la sensibilidad del sistema en términos de absorción de contaminantes y arrastre de componentes ligeros, y por tanto su emisión en la torre de regeneración.

Esta herramienta permite verificar la convergencia de las simulaciones, comparar de manera sistemática los diferentes escenarios y exportar la información obtenida para su análisis estadístico. En este sentido, el módulo *Case Study* se convierte en un recurso para establecer las relaciones funcionales entre las variables operativas independientes y los indicadores de desempeño del proceso. Los resultados generados constituyen la base para el análisis de sensibilidad y la posterior construcción de los modelos de regresión, insumos fundamentales en la formulación del modelo matemático propuesto en esta investigación.

En la Tabla 9 y 10 se presentan una parte de los resultados de emisiones de CO₂ y CH₄ en los diferentes escenarios evaluados, expresados en términos de flujo másico y fracción molar.

Tabla 9

Resultados Case Study - Emisiones de CO₂ y CH₄

VARIABLES DE CONTROL						FLUJO MASICO EMISIONES					
Tipo amina	Concentrac ion peso (%w)	Flujo de gas (MMSCFD)	Temperatu ra rehervidor (°F)	Caudal amina (gpm)	Presion (psi)	Temperatu ra (°F)	CO2 flow (lb/hr)	Amina flow (lb/hr)	H2O flow (lb/hr)	H2S flow (lb/hr)	CH4 flow (lb/hr)
DEA	25	50	230	550	900	80	8813,1	6,54E-33	331,4	2498,7	17,4
DEA	25	50	230	550	900	90	8739,0	6,45E-33	328,7	2480,6	15,6
DEA	25	50	230	550	900	100	8598,1	6,37E-33	323,9	2467,6	13,9
DEA	25	50	230	550	1000	80	8814,3	6,54E-33	331,5	2506,7	17,4
DEA	25	50	230	550	1000	90	8736,4	6,44E-33	328,9	2486,9	15,6
DEA	25	50	230	550	1000	100	8613,7	6,38E-33	324,5	2468,5	13,9
DEA	25	50	230	550	1100	80	8803,0	6,53E-33	331,4	2505,5	17,4
DEA	25	50	230	550	1100	90	8732,5	6,49E-33	328,7	2483,4	15,6
DEA	25	50	230	550	1100	100	8621,7	6,38E-33	324,5	2466,6	13,9
DEA	25	50	230	600	900	80	8871,3	6,87E-33	333,6	2500,6	20,3
DEA	25	50	230	600	900	90	8798,9	6,79E-33	330,9	2490,3	18,5
DEA	25	50	230	600	900	100	8727,5	6,68E-33	327,9	2477,9	16,7
DEA	25	50	230	600	1000	80	8854,4	6,85E-33	333,4	2518,8	20,3
DEA	25	50	230	600	1000	90	8797,3	6,79E-33	331,2	2498,8	18,5
DEA	25	50	230	600	1000	100	8725,3	6,69E-33	328,3	2477,8	16,7
DEA	25	50	230	600	1100	80	8853,1	6,87E-33	333,2	2517,7	20,4
DEA	25	50	230	600	1100	90	8795,2	6,78E-33	331,1	2497,6	18,5
DEA	25	50	230	600	1100	100	8724,8	6,69E-33	328,2	2476,7	16,7

Tabla 10

Resultados Case Study - Emisiones de CO₂ y CH₄ y especificación de gas dulce.

VARIABLES DE CONTROL						FRACCION MASICA EMISIONES						ESP GAS DULCE	
Tipo amina	Concentrac ion peso (%w)	Flujo de gas (MMSCFD)	Temperatu ra rehervidor (°F)	Caudal amina (gpm)	Presion (psi)	Temperatu ra (°F)	CO2 fracc mas	Amina fracc mas	H2O fracc mas	H2S fracc mas	CH4 fracc mas	CO2 (%molar)	H2S (ppm)
DEA	30	100	255	1050	900	80	0,8	5,60E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	2,8
DEA	30	100	255	1050	900	90	0,8	5,61E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	3,5
DEA	30	100	255	1050	900	100	0,8	5,62E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	4,4
DEA	30	100	255	1050	1000	80	0,8	5,62E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	2,6
DEA	30	100	255	1050	1000	90	0,8	5,61E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	3,3
DEA	30	100	255	1050	1000	100	0,8	5,63E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	4,2
DEA	30	100	255	1050	1100	80	0,8	5,62E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	2,5
DEA	30	100	255	1050	1100	90	0,8	5,63E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	3,2
DEA	30	100	255	1050	1100	100	0,8	5,64E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	4,0
DEA	30	100	255	1100	900	80	0,8	6,69E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	2,8
DEA	30	100	255	1100	900	90	0,8	6,94E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	3,5
DEA	30	100	255	1100	900	100	0,8	6,97E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	4,4
DEA	30	100	255	1100	1000	80	0,8	6,97E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	2,6
DEA	30	100	255	1100	1000	90	0,8	6,93E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	3,3
DEA	30	100	255	1100	1000	100	0,8	6,99E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	4,2
DEA	30	100	255	1100	1100	80	0,8	6,98E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	2,5
DEA	30	100	255	1100	1100	90	0,8	6,94E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	3,2
DEA	30	100	255	1100	1100	100	0,8	7,03E-36	0,0	0,2	0,0	0,1	4,0

Al comparar los resultados de la Figura 9 y la Figura 10, se observa un comportamiento similar en la influencia de las variables operativas sobre la remoción de gases ácidos. En ambos

casos, el aumento de la temperatura del gas de alimentación reduce la eficiencia de captura, lo cual se refleja en un incremento de la concentración residual de CO₂ y H₂S en el gas dulce. Sin embargo, la magnitud del efecto es más notoria en el H₂S, que presenta variaciones de hasta 2 ppm entre 80 °F y 100 °F, mientras que en el CO₂ el incremento es más moderado (≈0,005 % molar en el mismo rango).

En cuanto a la presión de absorción, tanto para el CO₂ como para el H₂S se confirma que presiones más altas favorecen la remoción, siendo la condición de 1100 psia la que presenta los mejores resultados en todos los escenarios. No obstante, el H₂S muestra mayor sensibilidad a la presión que el CO₂, lo cual es consistente con su mayor reactividad frente a las aminas.

Figura 9

Porcentaje de CO₂ en el gas dulce vs Temperatura

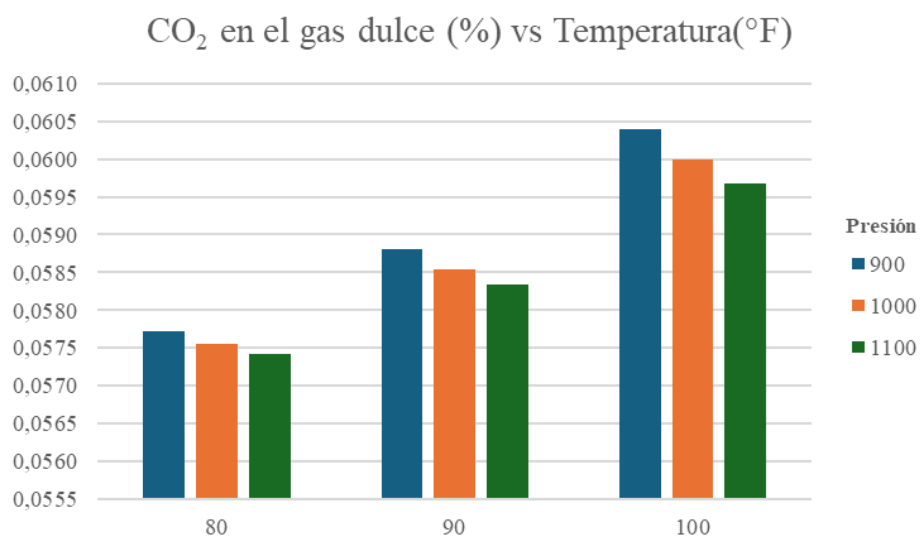
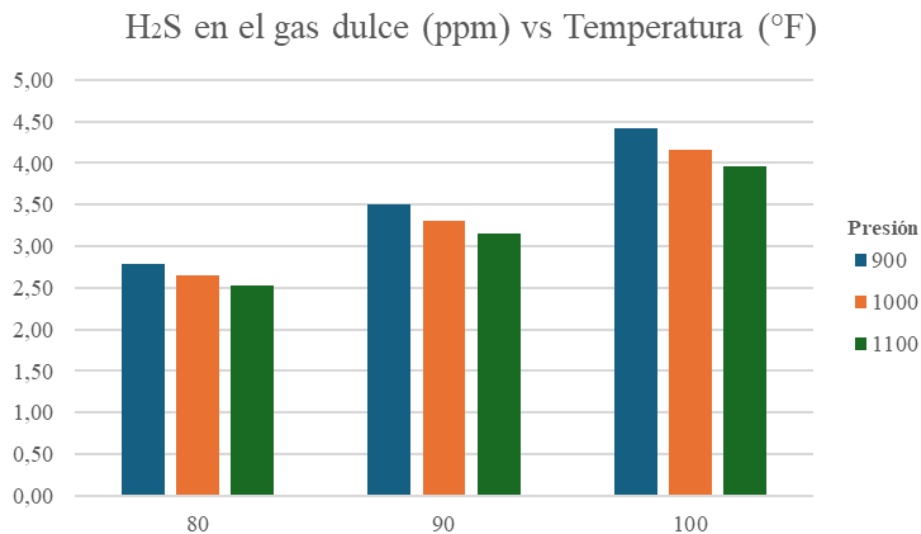


Figura 10

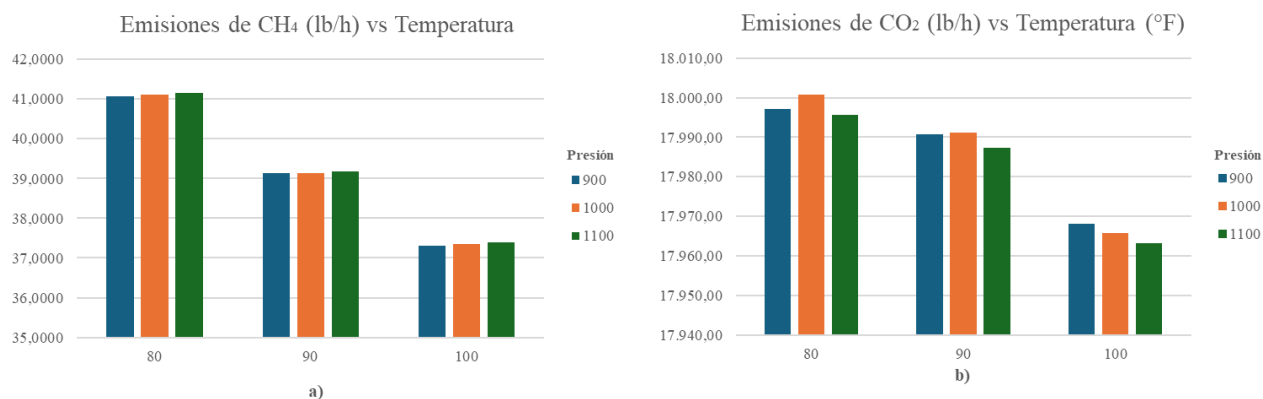
Concentración de H₂S en el gas dulce vs Temperatura



Por otro lado, la Figura 11 representa el comportamiento de las emisiones de GEI en el tope de la unidad de regeneración, es decir, aquellas asociadas al venteo de CO₂ y CH₄ durante la desorción del solvente. En este caso, se observa que, a medida que aumenta la temperatura de operación, las emisiones de CO₂ disminuyen levemente, mientras que las de CH₄ muestran una reducción más marcada. La presión de absorción, en contraste, presenta un efecto marginal sobre estos compuestos.

Figura 11

Comportamiento de las emisiones de GEI



De esta forma, se establece una distinción fundamental: mientras que las primeras gráficas están relacionadas con la calidad del producto comercial, la última refleja el impacto ambiental directo del proceso, aspecto central en la cuantificación de la huella de carbono y la validación del modelo matemático propuesto.

Los resultados obtenidos muestran que:

1. **El flujo de DEA** tiene un efecto directo en la eficiencia de remoción de CO₂ y H₂S; a mayor caudal de solvente, la composición de CO₂ en el gas dulce disminuyen, aunque con un incremento en los requerimientos energéticos de regeneración.
2. **La temperatura del rehervidor** presenta una relación crítica con la desorción de CO₂ y CH₄; temperaturas más altas favorecen la regeneración del solvente, pero incrementan el arrastre de metano al gas de salida de la unidad de regeneración.
3. **La presión de absorción** se correlaciona positivamente con la captura de CO₂, reduciendo su concentración en el gas tratado. No obstante, valores excesivos de presión pueden generar pérdidas energéticas significativas.
4. **La temperatura de alimentación del gas** influye en la solubilidad de los componentes en la DEA; temperaturas más bajas favorecen la absorción de CO₂, mientras que temperaturas más altas reducen la eficiencia del proceso.

En general, los resultados confirman que las condiciones operativas tienen un efecto significativo en las emisiones de CO₂ y CH₄, lo que valida la pertinencia del enfoque experimental adoptado y constituye la base para el análisis estadístico desarrollado en las siguientes secciones.

6.2 Análisis estadístico de resultados

La gran cantidad de data generada en las 324 simulaciones requirió un tratamiento estadístico riguroso que permitió identificar patrones, evaluar la influencia de las variables

operativas y formular relaciones matemáticas que explican el comportamiento del proceso de endulzamiento. Si bien los resultados de Aspen HYSYS ofrecen una representación detallada del sistema en cada escenario, su valor científico aumenta al ser procesados mediante técnicas estadísticas que permitan transformarlos en modelos predictivos y generalizables.

En este sentido, se aplicaron herramientas de análisis estadístico y procesamiento de datos con el apoyo del software Statgraphics Centurion 19 (versión de prueba con licencia temporal), lo que facilitó la evaluación del efecto individual y combinado de las variables independientes sobre las variables de respuesta. El procedimiento estadístico combinó distintas técnicas con propósitos complementarios: en primer lugar, el análisis de varianza (ANOVA) permitió sustentar científicamente la significancia de los factores y sus interacciones; posteriormente, el diagrama de Pareto de efectos estandarizados facilitó la visualización y jerarquización de las variables más influyentes en el proceso; finalmente, se realizaron ajustes de modelos de regresión lineal y cuadrática, orientados a representar cuantitativamente el comportamiento observado en las simulaciones. En conjunto, este enfoque establece las bases para la formulación del modelo matemático predictivo de las emisiones de CO₂ y CH₄ en plantas de endulzamiento con DEA, asegurando tanto el rigor estadístico como la aplicabilidad práctica de los resultados.

6.2.1 Modelo de regresión lineal múltiple

Con el fin de identificar las variables operacionales con mayor influencia sobre las emisiones de gases de efecto invernadero, se aplicó un análisis estadístico basado en ANOVA y en los diagramas de Pareto de efectos estandarizados. Ambas herramientas permiten cuantificar y jerarquizar los factores de control, diferenciando aquellos que tienen un impacto estadísticamente significativo de los que no presentan relevancia en el rango de operación analizado.

En el caso del CO₂ (Tabla 11), los factores con mayor peso estadístico fueron el flujo de gas, la temperatura del rehervidor y la temperatura de gas, todos con p-valores inferiores a 0,05. La concentración de amina mostró un efecto menor pero significativo, mientras que el flujo de amina y la presión de absorción no resultaron relevantes. Esta tendencia se refleja en el diagrama de Pareto para CO₂ (Figura 12. izquierda), donde el flujo de gas se destaca como la variable dominante en el comportamiento del sistema.

En el caso del CH₄ (Tabla 11), las variables críticas fueron la temperatura del rehervidor, la temperatura de gas y el flujo de amina, seguidas en menor medida por el flujo de gas. En contraste, la concentración de amina y la presión de gas no mostraron significancia estadística ($p > 0,05$). El diagrama de Pareto para CH₄ (Figura 12. derecha) confirma estas tendencias, ubicando los efectos térmicos y de caudal como los principales controladores del proceso.

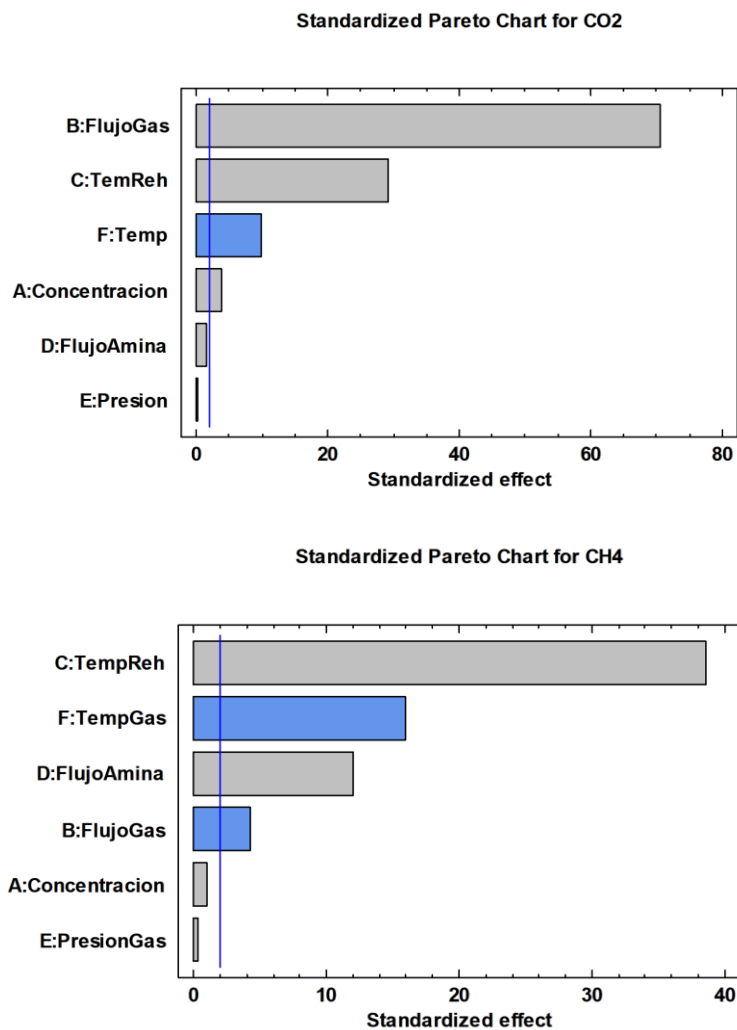
Tabla 11

Resultados del análisis de varianza (ANOVA) para el CO₂ y CH₄ para regresión lineal en las simulaciones del proceso de endulzamiento con DEA

Factor	CO ₂		CH ₄	
	F-Ratio	P-Value	F-Ratio	P-Value
A:Concentracion	14,79	0,0001	1,04	0,3094
B:FlujoGas	4988,48	0,0000	18,41	0,0000
C:TemReh	852,30	0,0000	1488,38	0,0000
D:FlujoAmina	2,08	0,1502	144,22	0,0000
E:Presion	0,01	0,9313	0,10	0,7576
F:Temp	96,57	0,0000	253,96	0,0000

Figura 12

Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para CO₂ (arriba) y CH₄ (abajo) para la regresión lineal.



El análisis comparativo entre ambos gases evidencia que, mientras el CO₂ responde principalmente a la carga de gas procesado y a las condiciones térmicas de regeneración, el CH₄ es más sensible al flujo de amina y a la temperatura, lo cual refleja la diferencia en sus mecanismos de interacción con el solvente: química en el caso del CO₂ y predominantemente física en el caso del CH₄. Estos resultados constituyen la base para la construcción de modelos de regresión,

orientando la selección de variables hacia aquellas que presentan una influencia estadísticamente significativa.

Como primer paso en el análisis estadístico se ajustó un modelo de regresión lineal múltiple, con el fin de establecer una relación directa entre las variables independientes (factores de control) y las variables de respuesta asociadas al proceso de endulzamiento de gas natural con DEA. El modelo lineal incluyó los efectos principales de las seis variables estudiadas: concentración en peso de amina ($W_{[\%]}$), flujo de gas en MMSCFD (Q_{gas}), temperatura del rehervidor en °F (T_{reh}), flujo de amina en gpm (Q_{amina}), presión de gas en psia (P_{gas}) y temperatura de gas de alimentación en °F (T_{gas}). El modelo se expresa de manera general como:

$$Y = A * W_{[\%]} + B * Q_{gas} + C * T_{reh} + D * Q_{amina} + E * P_{gas} + F * T_{gas} + G$$

Donde: Y representa la variable de respuesta (emisiones de CO₂, emisiones de CH₄), A, B, C, D, E, F y G son los coeficientes de regresión estimados para cada gas. Los coeficientes obtenidos se presentan en la siguiente tabla:

Tabla 12

Los valores de los coeficientes para la regresión lineal de CO₂ y CH₄

Coeficientes	CO₂	CH₄
A	11,1816	0,0535399
B	174,069	-0,191296
C	16,4309	0,392765
D	0,337726	0,0508632
E	-0,00743519	0,00048148
F	-8,46736	-0,24838
G	-3544,35	-74,9334

El coeficiente de determinación (R^2) obtenido evidenció que el modelo lineal logra capturar adecuadamente la tendencia general de los datos, aunque presenta limitaciones al no considerar las interacciones entre variables ni los efectos no lineales propios de los procesos de absorción química. En consecuencia, este modelo constituye una primera aproximación útil para describir el comportamiento del sistema, pero se requiere avanzar hacia un modelo de regresión cuadrática que incorpore términos de interacción y efectos de segundo orden, con el fin de mejorar la capacidad predictiva y ajustar con mayor precisión los resultados de simulación.

6.2.2 *Modelo de regresión cuadrática completa*

Con el fin de superar las limitaciones del modelo lineal, se ajustó un modelo de regresión cuadrática completa, el cual incorpora tanto los efectos principales como las interacciones de segundo orden y los términos cuadráticos de las variables de control. Esto permite capturar de forma más precisa las no linealidades propias del proceso de absorción química y las sinergias entre factores operativos.

El análisis de varianza (ANOVA) aplicado al modelo cuadrático completo para las emisiones de CO_2 y CH_4 se presenta en la Tabla 13. Los resultados muestran que la mayoría de los factores principales y varios términos cuadráticos e interacciones son estadísticamente significativos ($P\text{-Value} < 0,05$), lo cual confirma la necesidad de un modelo no lineal para describir adecuadamente el proceso.

Tabla 13

Resultados del análisis de varianza (ANOVA) para el CO_2 y CH_4 para la regresión cuadrática en las simulaciones del proceso de endulzamiento con DEA

Factor	CO ₂		CH ₄	
	F-Ratio	P-Value	F-Ratio	P-Value
A:Concentracion	170,24	0,0000	92,93	0,0000

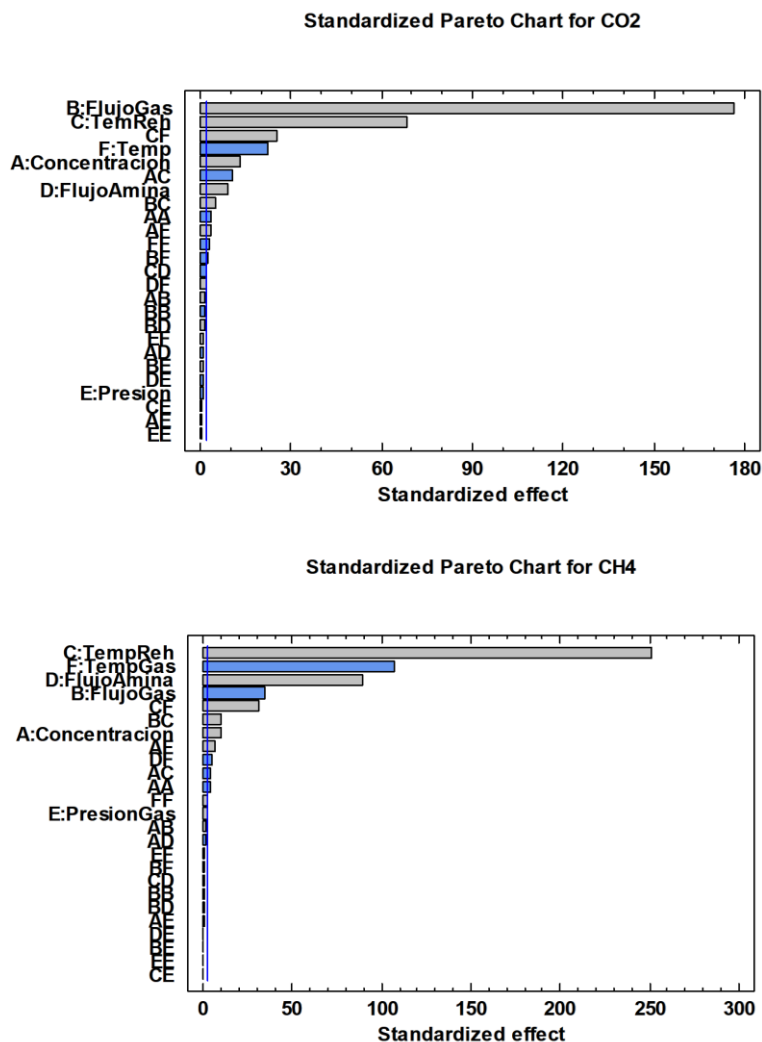
B:FlujoGas	31179,66	0,0000	1211,05	0,0000
C:TemReh	4644,02	0,0000	63202,47	0,0000
D:FlujoAmina	79,94	0,0000	7989,49	0,0000
E:Presion	0,42	0,5154	4,69	0,0312
F:Temp	498,04	0,0000	11470,14	0,0000
AA	12,27	0,0005	16,98	0,0000
AB	2,59	0,1088	3,05	0,0820
AC	105,92	0,0000	19,40	0,0000
AD	0,58	0,4451	1,18	0,2776
AE	0,18	0,6760	0,12	0,7260
AF	11,83	0,0007	40,74	0,0000
BB	1,80	0,1809	0,18	0,6705
BC	23,67	0,0000	103,72	0,0000
BD	1,75	0,1867	0,18	0,6760
BE	0,49	0,4826	0,03	0,8686
BF	6,75	0,0099	0,82	0,3670
CD	4,40	0,0368	0,59	0,4411
CE	0,18	0,6683	0,00	0,9598
CF	643,25	0,0000	948,99	0,0000
DE	0,49	0,4863	0,05	0,8175
DF	2,82	0,0942	22,71	0,0000
EE	0,11	0,7394	0,00	0,9536
EF	1,23	0,2683	0,92	0,3389
FF	9,84	0,0019	5,50	0,0197

En la Tabla 13 se presentan los resultados del análisis de varianza (ANOVA) para las emisiones de CO₂ y CH₄ respectivamente. En ambos casos, se observa que, además de los efectos principales como el flujo de gas (B), la temperatura del rehervidor (C) y la temperatura del gas de alimentación (F), aparecen significativos varios términos de interacción, tales como BC, CF y CD en el caso del CO₂, y AB, AC y AF en el caso del CH₄. Asimismo, algunos términos cuadráticos

(AA, CF, FF) muestran significancia estadística, lo que confirma la presencia de relaciones no lineales en el comportamiento del sistema.

Figura 13

Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para CO₂ (arriba) y CH₄ (abajo) para la regresión cuadrática completa.



La interpretación de estos resultados se complementa con los diagramas de Pareto estandarizados (Figura 13), los cuales permiten visualizar de manera gráfica la magnitud y la dirección de los efectos de las variables. En el caso del CO₂ (arriba), los factores más relevantes son el flujo de gas, la temperatura del rehervidor y la temperatura del gas de alimentación, mientras

que la concentración de amina y el flujo de amina tienen efectos secundarios de menor intensidad. En el caso del CH₄ (abajo), los factores dominantes son la temperatura del rehervidor, la temperatura del gas y el flujo de amina, confirmando la importancia de las condiciones térmicas en la absorción y liberación de este gas.

El modelo cuadrático desarrollado para representar las emisiones de CO₂ y CH₄ en el proceso de endulzamiento con DEA incorpora tanto los efectos principales como los términos cuadráticos e interacciones de segundo orden de las variables operacionales. Su formulación general puede expresarse como:

$$\begin{aligned}
 Y = & A W_{[\%]} + B Q_{gas} + C T_{reh} + D Q_{amina} + E P_{gas} + F T_{gas} + G + AA W_{[\%]}^2 + AB W_{[\%]} Q_{gas} \\
 & + AC W_{[\%]} T_{reh} + AD W_{[\%]} Q_{amina} + AE W_{[\%]} P_{gas} + AF W_{[\%]} T_{gas} + BB Q_{gas}^2 \\
 & + BC Q_{gas} T_{reh} + BD Q_{gas} Q_{amina} + BE Q_{gas} P_{gas} + BF Q_{gas} T_{gas} \\
 & + CD T_{reh} Q_{amina} + CE T_{reh} P_{gas} + CF T_{reh} T_{gas} + DE Q_{amina} P_{gas} \\
 & + DF Q_{amina} T_{gas} + EE P_{gas}^2 + EF P_{gas} T_{gas} + FF T_{gas}^2
 \end{aligned}$$

Donde Y representa la variable de respuesta (emisiones de CO₂ o emisiones de CH₄), mientras que A, B, C, D, E, F y G corresponden a los coeficientes de los términos lineales, los cuales describen el impacto individual de cada variable en la respuesta y permiten identificar, de manera aislada, cómo un incremento en una variable afecta directamente el nivel de emisiones. Los coeficientes AA, BB, EE, FF, representan los términos cuadráticos que capturan los efectos no lineales del sistema; es decir, modelan comportamientos curvilíneos donde la magnitud de la respuesta no aumenta de manera proporcional a la variación de la variable. Finalmente, los coeficientes de interacción (por ejemplo, AB, AC, CF) reflejan la manera en que la combinación de dos variables modifica la respuesta, mostrando cómo la influencia de una variable depende del

nivel en el que se encuentra otra. Esto resulta fundamental para capturar la naturaleza interdependiente de las condiciones operativas en un proceso real de absorción química.

Los valores de los coeficientes estimados a partir de los datos de simulación se presentan en la tabla 14.

Tabla 14

Los valores de los coeficientes para la regresión cuadrática completa de CO₂ y CH₄

Coeficientes	CO₂	CH₄
A	213,925	0,513
B	102,421	-1,366
C	-29,485	-0,344
D	3,331	0,090
E	-0,105	0,001
F	-125,210	-1,348
AA	6200,780	94,108
AB	-0,976	-7,57E-03
AC	0,343	2,45E-03
AD	-0,773	-2,18E-03
AE	-0,015	-1,44E-04
AF	-0,005	2,66E-05
BB	0,396	4,84E-03
BC	-0,028	-5,96E-05
BD	0,310	4,28E-03
BE	0,003	5,56E-06
BF	0,007	-1,06E-05
CD	-0,253	5,81E-04
CE	-0,013	-3,08E-05
CF	0,001	7,41E-07
DE	0,565	4,52E-03

DF	-0,001	1,41E-06
EE	0,016	-2,91E-04
EF	0,000	-1,85E-07
FF	0,004	-2,15E-05

En síntesis, el modelo cuadrático completo permite capturar la complejidad del proceso de absorción química con DEA, identificando tanto los efectos principales como las interacciones que determinan las emisiones de GEI. Este enfoque constituye un avance respecto al modelo lineal, al mejorar la capacidad predictiva y el ajuste a los datos de simulación.

6.2.3 Modelo de regresión cuadrático parcial

Aunque el modelo cuadrático completo ofrece una descripción exhaustiva del sistema, la inclusión de todos los términos lineales, cuadráticos e interacciones puede llevar a sobreajuste y dificultar la interpretación práctica. Para refinar el análisis, se construyó un modelo cuadrático parcial, reteniendo únicamente los factores estadísticamente significativos de acuerdo con los resultados del ANOVA y los diagramas de Pareto estandarizados.

El procedimiento consistió en aplicar un criterio de significancia estadística ($p < 0,05$) para seleccionar los efectos principales y las interacciones relevantes. Así, se eliminaron aquellas variables cuyo aporte fue mínimo o no significativo. Sin embargo, se consideró como excepción la presión del gas en el caso del CO₂, a pesar de no cumplir estrictamente con el nivel de significancia estadística, esta tiene un papel reconocido en la literatura y en la práctica operativa ya que influye en el equilibrio de absorción del CO₂ en la fase líquida y su exclusión podría limitar la validez del modelo en escenarios de operación distintos a los simulados.

La Tabla 15 resume los resultados del ANOVA para las variables retenidas en el modelo cuadrático parcial. Se observa que para el CO₂ los factores dominantes corresponden al flujo de gas, la temperatura del rehervidor, la temperatura del gas de alimentación y la concentración de

amina, junto con interacciones como BC (flujo de gas – temperatura del rehedidor) y CF (temperatura del rehedidor – temperatura del gas). En el caso del CH₄, las variables más influyentes fueron la temperatura del rehedidor, la temperatura del gas, el flujo de amina y el flujo de gas, acompañadas de interacciones como BC y DF, además de algunos términos cuadráticos relevantes (AA y FF).

Tabla 15

Resultados del análisis de varianza (ANOVA) para el CO₂ y CH₄ para la regresión cuadrática parcial en las simulaciones del proceso de endulzamiento con DEA

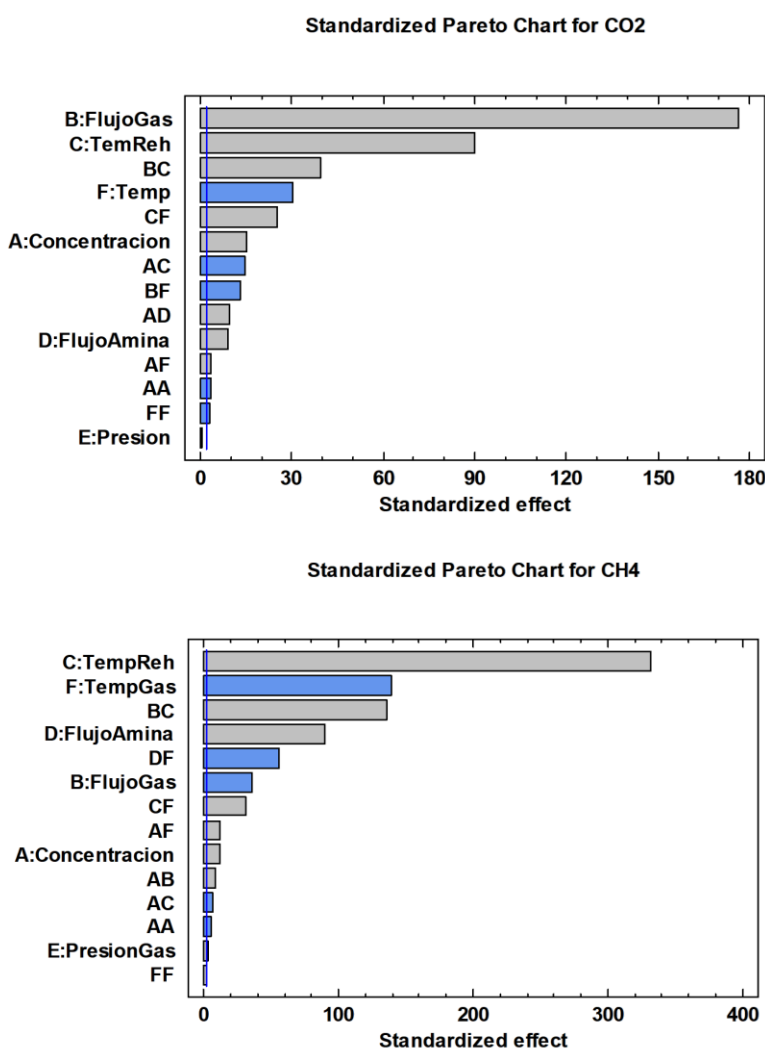
Factor	CO ₂		Factor	CH ₄	
	F-Ratio	P-Value		F-Ratio	P-Value
A:Concentracion	222,67	0,0000	A:Concentracion	134,24	0,0000
B:FlujoGas	31236,30	0,0000	B:FlujoGas	1240,08	0,0000
C:TemReh	8110,26	0,0000	C:TempReh	109615,41	0,0000
D:FlujoAmina	78,35	0,0000	D:FlujoAmina	8155,95	0,0000
E:Presion	0,07	0,7903	E:PresionGas	7,03	0,0084
F:Temp	918,96	0,0000	F:TempGas	19536,56	0,0000
AA	12,17	0,0006	AA	23,73	0,0000
AC	209,04	0,0000	AB	67,57	0,0000
AD	86,42	0,0000	AC	41,59	0,0000
AF	12,31	0,0005	AF	145,49	0,0000
BC	1560,70	0,0000	BC	18508,90	0,0000
BF	172,77	0,0000	CF	968,76	0,0000
CF	638,43	0,0000	DF	3117,58	0,0000
FF	9,77	0,0019	FF	5,61	0,0184

Los resultados del ANOVA se complementaron con los diagramas de Pareto estandarizados (Figura 14), que ilustran visualmente la magnitud relativa de cada efecto y permiten confirmar la selección de variables. En ambos GEI se observa que los factores térmicos

(temperatura del rehervidor y temperatura del gas) son los de mayor peso en la respuesta, seguidos del flujo de gas y, en el caso del CH_4 , del flujo de amina. Estas gráficas facilitan la interpretación de los resultados al mostrar de manera clara cuáles son los factores dominantes en la generación de emisiones de gases de efecto invernadero.

Figura 14

Diagrama de Pareto de efectos estandarizados para CO_2 (arriba) y CH_4 (abajo) para la regresión cuadrática parcial.



De esta manera, la integración de los resultados del ANOVA depurado con los diagramas de Pareto permitió establecer un modelo cuadrático parcial optimizado, capaz de representar de

forma precisa las dinámicas más relevantes del proceso. Al excluir variables sin efecto significativo, se logra reducir la complejidad y fortalecer la claridad en la interpretación, manteniendo al mismo tiempo una alta capacidad predictiva. Esta estrategia asegura que el modelo preserve su coherencia conceptual y pertinencia operativa, favoreciendo su aplicación práctica en condiciones reales de operación de plantas de endulzamiento de gas natural.

Con base en esta depuración, a continuación, se presentan las ecuaciones finales del modelo cuadrático parcial para las emisiones de CO₂ y CH₄, las cuales integran únicamente los factores y términos de interacción estadísticamente significativos, garantizando un equilibrio entre simplicidad, precisión y aplicabilidad. Las ecuaciones finales obtenidas para el modelo cuadrático parcial de emisiones de CO₂ y CH₄ en el proceso de endulzamiento con DEA se expresan de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} CO_2 = & A W_{[\%]} + B Q_{gas} + C T_{reh} + D Q_{amina} + E P_{gas} + F T_{gas} + G + AA W_{[\%]}^2 \\ & + AC W_{[\%]} T_{reh} + AD W_{[\%]} Q_{amina} + AF W_{[\%]} T_{gas} + BC Q_{gas} T_{reh} \\ & + BF Q_{gas} T_{gas} + CF T_{reh} T_{gas} + FF T_{gas}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} CH_4 = & A W_{[\%]} + B Q_{gas} + C T_{reh} + D Q_{amina} + E P_{gas} + F T_{gas} + G + AA W_{[\%]}^2 \\ & + AB W_{[\%]} Q_{gas} + AC W_{[\%]} T_{reh} + AF W_{[\%]} T_{gas} + BC Q_{gas} T_{reh} + CF T_{reh} T_{gas} \\ & + DF Q_{amina} T_{gas} + FF T_{gas}^2 \end{aligned}$$

Donde: $W_{[\%]}$ es la concentración peso amina en porcentaje, Q_{gas} corresponde al flujo de gas en la entrada del proceso expresado en millones de pies cúbicos estándar por día (MMSCFD), T_{reh} es la temperatura del rehervidor en grados Fahrenheit (°F), Q_{amina} es el caudal de la solución de amina medido en galones por minuto (gpm), P_{gas} es la presión del gas en la entrada del proceso en libras por pulgada cuadrada absoluta (psia) y T_{gas} es la temperatura del gas de alimentación en °F.

Cada uno de los coeficientes (A, B, C, D, E, F, G, AA, AB, AC, AF, BC, BF, CF, DF, FF) corresponde a los parámetros de regresión estimados a partir de los datos de simulación. Estos valores permiten cuantificar tanto la magnitud como la dirección del efecto de cada variable independiente sobre la respuesta, así como los impactos asociados a las interacciones entre variables y a los términos no lineales que reflejan el comportamiento curvilíneo del sistema. En la Tabla 16 se presentan los coeficientes estimados, organizados en efectos lineales, cuadráticos e interacciones, con el fin de facilitar su interpretación y análisis.

Tabla 16

Los valores de los coeficientes para la regresión cuadrática parcial de CO₂ y CH₄

Coeficientes	CO₂	Coeficientes	CH₄
A	175,9940	A	3,30E-01
B	134,4480	B	-1,2048
C	-32,6542	C	-3,53E-01
D	0,3712	D	7,48E-02
E	-0,0074	E	4,81E-04
F	-116,3760	F	-1,3872
G	6700,3100	G	100,0520
AA	-0,6773	AA	-6,13E-03
AC	-0,6462	AB	8,79E-04
AD	0,0145	AC	-1,87E-03
AF	0,2400	AF	5,39E-03
BC	0,1766	BC	3,95E-03
BF	-0,0899	CF	4,52E-03
CF	0,5646	DF	-2,36E-04
FF	-0,1512	FF	7,45E-04

Los valores de los coeficientes de regresión presentados en la Tabla 16 permiten cuantificar de manera detallada la influencia de cada variable independiente y de sus interacciones sobre las emisiones de CO₂ y CH₄. En el caso del CO₂, variables como la temperatura del rehervidor y el flujo de gas presentan coeficientes positivos, lo que indica que incrementos en estos parámetros tienden a aumentar las emisiones de dióxido de carbono. Este comportamiento es consistente con la intensificación del proceso de regeneración y con el mayor arrastre de compuestos a medida que se incrementa el caudal de tratamiento.

Por su parte, en el caso del CH₄, los coeficientes asociados a la temperatura del gas de alimentación y al flujo de gas muestran una relación negativa, lo que implica que un aumento en estos parámetros contribuye a la reducción de las emisiones fugitivas de metano. Este resultado evidencia que un adecuado ajuste de las condiciones operativas puede ser una estrategia efectiva para mitigar las emisiones, reforzando la utilidad del modelo como herramienta para optimización y control ambiental en plantas de endulzamiento de gas natural.

Estos resultados constituyen la base del modelo matemático predictivo propuesto, el cual posibilita la estimación de emisiones de CO₂ y CH₄ en función de las condiciones operativas de la planta. En conjunto, las expresiones resultantes representan un modelo ajustado y validado estadísticamente, que no solo describe el comportamiento de las emisiones de gases de efecto invernadero, sino que además se convierte en una herramienta de apoyo para la toma de decisiones operativas y la optimización del proceso de endulzamiento de gas natural bajo un enfoque de sostenibilidad y eficiencia energética.

En síntesis, el modelo cuadrático parcial obtenido permite describir con precisión el comportamiento de las emisiones de CO₂ y CH₄ frente a las condiciones operativas más relevantes del proceso. No obstante, para garantizar su confiabilidad y aplicabilidad práctica, resulta

indispensable someter el modelo a un proceso de validación estadística y técnica, en el cual se evalúe su capacidad predictiva frente a los datos de simulación y se verifique su consistencia con el comportamiento esperado del sistema. Esta etapa es fundamental para consolidar al modelo como una herramienta de apoyo en la gestión y optimización de las plantas de endulzamiento de gas natural.

6.3 Validación del modelo matemático

Una vez obtenidas las ecuaciones del modelo cuadrático parcial para CO₂ y CH₄, fue necesario realizar un proceso de validación estadística y técnica, con el fin de comprobar la capacidad predictiva y la consistencia del modelo frente a los datos de simulación generados en Aspen HYSYS.

La validación del modelo matemático se llevó a cabo considerando cuatro criterios estadísticos y técnicos, cuya verificación se describe a continuación:

6.3.1 Coeficiente de determinación (R^2).

El coeficiente de determinación (R^2) es uno de los indicadores más utilizados para evaluar el ajuste de un modelo de regresión, ya que mide la proporción de la variabilidad total de los datos que es explicada por el modelo. En el presente estudio, los valores obtenidos para ambos modelos de emisiones de CO₂ y CH₄ fueron cercanos al 100%, lo que demuestra la capacidad predictiva y la robustez del modelo desarrollado.

En el caso del CO₂, se obtuvo un R^2 de 99,9969%, lo que significa que prácticamente toda la variabilidad de las emisiones simuladas se explica por las variables incluidas en el modelo. Además, el R^2 ajustado (99,9968%) y el R^2 predicho (99,9966%) confirman que el ajuste no se debe a un sobreparametrizado del modelo, sino a la relevancia estadística de los factores seleccionados.

Para el CH₄, los resultados fueron igualmente consistentes, con un R² de 99,9711%, un R² ajustado de 99,9698% y un R² predicho de 99,9676%. Estos valores reflejan que el modelo captura adecuadamente las dinámicas del proceso y mantiene un excelente poder predictivo incluso al considerar la penalización por grados de libertad y la capacidad de generalización.

En conjunto, estos resultados evidencian que el modelo cuadrático parcial explica con gran precisión la variabilidad de las emisiones de gases de efecto invernadero bajo las condiciones operativas analizadas, lo que respalda su idoneidad para aplicaciones de predicción y optimización.

6.3.2 Error estándar de estimación (SEE).

El error estándar de estimación (SEE) representa la desviación promedio de los residuos con respecto a la línea de regresión ajustada y constituye un indicador clave de la precisión de las predicciones del modelo. Valores bajos de SEE implican que las diferencias entre los valores estimados y los observados son mínimas, lo que refuerza la confiabilidad del modelo en aplicaciones prácticas.

En el caso del CO₂, el SEE fue de 41,05, acompañado de un error absoluto medio (MAE) de 30,39. Estos valores resultan bajos en relación con el rango de emisiones analizadas, lo que significa que las predicciones del modelo presentan un error relativo muy reducido.

Para el CH₄, el desempeño fue aún más notable, con un SEE de 0,267 y un MAE de 0,196, lo que confirma la capacidad del modelo para estimar las emisiones de metano con un alto grado de precisión y con desviaciones prácticamente despreciables frente a los valores de referencia simulados en Aspen HYSYS.

En conjunto, los resultados del SEE y del MAE validan que el modelo desarrollado no solo ajusta adecuadamente los datos, sino que además minimiza los errores de predicción, garantizando

que las estimaciones generadas sean confiables para su aplicación en el análisis y optimización de procesos de endulzamiento de gas natural.

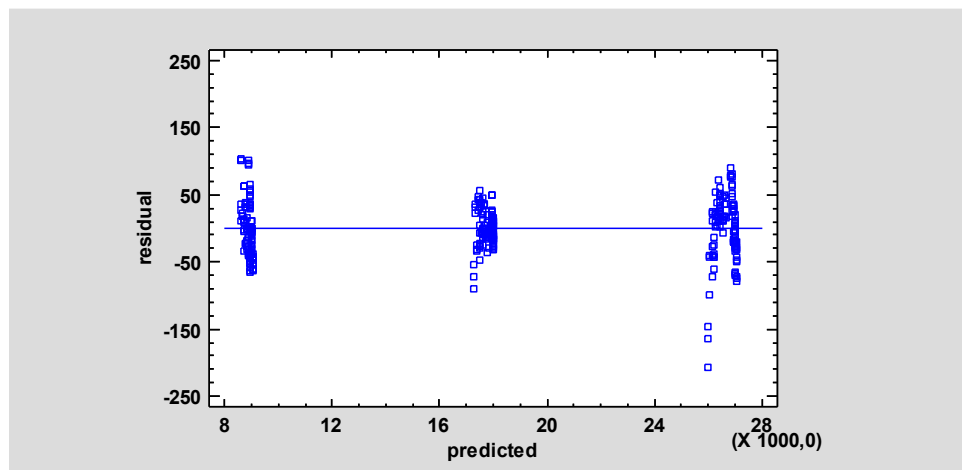
6.3.3 *Análisis de residuales.*

El análisis de residuales constituye un paso esencial en la validación de modelos de regresión, ya que permite verificar el cumplimiento de los supuestos estadísticos que garantizan la confiabilidad del ajuste: independencia, homocedasticidad y normalidad de los errores.

En el caso del CO₂ (Figura 15), los residuos se distribuyen alrededor de la línea de referencia cero, sin una tendencia clara que sugiera heterocedasticidad. No obstante, se observa cierta concentración de valores en torno a niveles específicos de emisiones predichas, lo cual puede asociarse a la naturaleza discreta de los escenarios simulados en Aspen HYSYS. Aunque algunos residuos extremos alcanzan valores relativamente altos, la mayoría permanece dentro de un rango estrecho, confirmando la capacidad del modelo para representar adecuadamente la variabilidad del proceso.

Figura 15

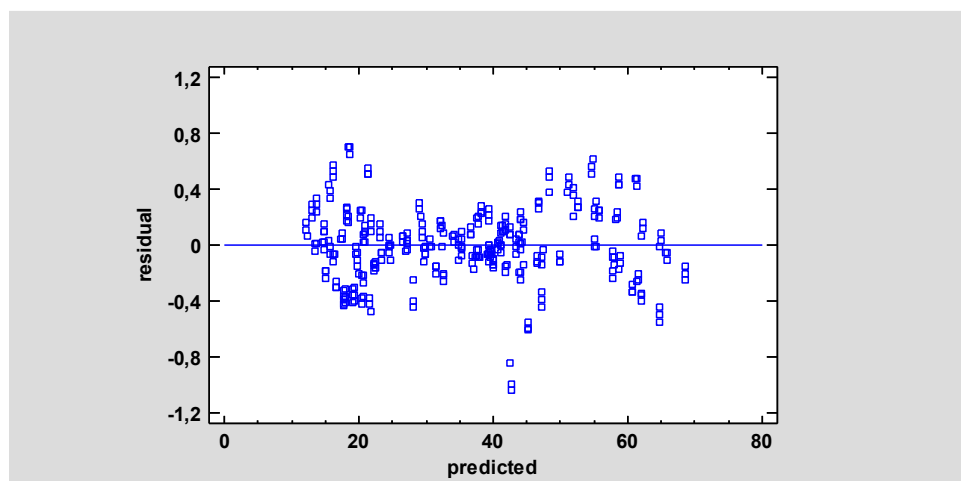
Gráfico de residuos para el modelo de emisiones de CO₂ en función de los valores predichos.



Por su parte, la figura 16 presenta el gráfico de residuos del CH_4 el cual muestra una dispersión más uniforme y centrada en torno a cero, con ausencia de patrones sistemáticos o tendencias no lineales. La distribución aleatoria de los errores respalda el supuesto de homocedasticidad y confirma que el modelo captura con precisión las dinámicas de las emisiones de metano.

Figura 16

Gráfico de residuos para el modelo de emisiones de CH_4 en función de los valores predichos.



En conjunto, ambas gráficas refuerzan la conclusión de que los modelos ajustados son estadísticamente válidos y técnicamente confiables para la predicción de emisiones de CO_2 y CH_4 , siendo el modelo de CH_4 el que presenta un comportamiento residual más estable y robusto.

6.3.4 Comparación con datos de simulación.

La validación final del modelo se efectuó a través de la comparación directa entre las predicciones del modelo matemático propuesto y los resultados obtenidos en las simulaciones en Aspen HYSYS. Este análisis permitió evaluar la capacidad del modelo para reproducir los valores de referencia bajo las condiciones operativas establecidas.

Los resultados mostraron que los errores absolutos oscilaron entre 0,0% y 1,2% en el caso de la ecuación para CO₂, y entre 0,0% y 3,7% para la ecuación de CH₄. Estos valores confirman que las discrepancias entre los datos simulados y los valores estimados por el modelo son mínimas y se encuentran dentro de márgenes aceptables para estudios de ingeniería de procesos.

En síntesis, la validación del modelo matemático confirmó su robustez estadística y confiabilidad técnica para estimar las emisiones de CO₂ y CH₄ en plantas de endulzamiento de gas natural con DEA. Los altos valores de R² ajustado y predicho, junto con los bajos indicadores de error (SEE y MAE), demostraron un ajuste sobresaliente del modelo a los datos simulados. Asimismo, el análisis de residuales respaldó la validez de los supuestos de regresión, con independencia y distribución aleatoria de los errores, particularmente sólida en el caso del CH₄. Finalmente, la comparación con los resultados de Aspen HYSYS evidenció discrepancias mínimas, dentro de márgenes aceptables de error, lo que refuerza la aplicabilidad práctica del modelo.

En conjunto, estos resultados permiten concluir que el modelo constituye una herramienta confiable para la predicción, control y optimización de las emisiones de gases de efecto invernadero en procesos de endulzamiento de gas natural, aportando una base sólida para su aplicación en la gestión ambiental y en la mejora de la eficiencia operativa del sector energético.

6.4 Discusión de resultados

La validación del modelo se realizó mediante un análisis exhaustivo que evidenció su robustez y aplicabilidad para predecir las emisiones de CO₂ y CH₄ en plantas de endulzamiento de gas natural con DEA. Al contrastar los resultados del modelo matemático propuesto con los valores obtenidos en las simulaciones en Aspen HYSYS, se observó que los errores absolutos oscilaron entre 0,0% y 1,2% para la Ecuación 1 (CO₂), y entre 0,0% y 3,7% para la Ecuación 2 (CH₄). Estos

hallazgos indican que el modelo exhibe un ajuste significativo y preciso a los datos simulados, lo que refuerza su idoneidad para la predicción de emisiones de gases de efecto invernadero en procesos de endulzamiento con DEA.

Asimismo, el análisis de residuos mostró una distribución aleatoria de los errores, sin patrones sistemáticos, confirmando la validez estadística del ajuste. El coeficiente de determinación (R^2), cercano a 1 en ambos casos, respalda la capacidad explicativa del modelo, que logra representar con alta fidelidad la variabilidad presente en los datos. En conjunto, los resultados demuestran que el modelo matemático no solo constituye una herramienta predictiva confiable, sino que además presenta un potencial significativo para contribuir a la optimización del desempeño ambiental y económico de las plantas de endulzamiento de gas natural.

6.5 Limitaciones

Si bien el modelo desarrollado demuestra una elevada capacidad predictiva y un ajuste estadístico satisfactorio, es importante reconocer las limitaciones que condicionan su alcance y aplicabilidad. En primer lugar, el modelo fue construido y validado exclusivamente a partir de simulaciones en Aspen HYSYS, lo que implica que su precisión depende directamente de los supuestos termodinámicos y de los paquetes de propiedades empleados en el software. La ausencia de validación con datos experimentales en planta piloto o industrial constituye una restricción relevante que debe abordarse en investigaciones futuras.

En segundo lugar, el modelo se fundamenta en un diseño factorial bajo condiciones estacionarias, por lo que no contempla dinámicas transitorias ni perturbaciones operativas que suelen presentarse en la práctica industrial. Esto limita su capacidad de predicción en escenarios alejados del equilibrio de estado estable.

Otra limitación corresponde a la simplificación del comportamiento químico de la DEA: no se consideró explícitamente la degradación del solvente ni la formación de subproductos, los cuales pueden afectar la eficiencia de absorción y las emisiones reales de CO₂ y CH₄. Además, el modelo se ajusta únicamente dentro de los rangos operativos considerados; su extrapolación a condiciones extremas podría generar resultados poco representativos.

Finalmente, se identificó que en configuraciones específicas, particularmente con temperaturas elevadas en el rehervidor, el gas dulce puede superar los límites regulatorios de H₂S. Este hallazgo refleja la existencia de un compromiso entre la reducción de emisiones de GEI y el aseguramiento de la calidad del producto, lo que sugiere la necesidad de integrar restricciones adicionales en el modelo.

En conjunto, estas limitaciones no desmeritan la utilidad del modelo, sino que subrayan la importancia de futuras validaciones experimentales, la incorporación de dinámicas transitorias y la ampliación del marco químico para consolidar su aplicabilidad en condiciones reales de operación.

En conclusión, el Capítulo 5 permitió integrar los resultados obtenidos en las simulaciones de Aspen HYSYS con un análisis estadístico riguroso, logrando formular, ajustar y validar modelos matemáticos de distinta complejidad. El modelo lineal, el cuadrático completo y el cuadrático parcial ofrecieron perspectivas complementarias sobre la influencia de las variables operativas, siendo este último el que mostró un mejor equilibrio entre precisión estadística y simplicidad interpretativa.

La validación del modelo evidenció su capacidad predictiva y confiabilidad técnica mediante altos coeficientes de determinación, bajos errores de estimación y una adecuada distribución de los residuos. Asimismo, la comparación con los datos de simulación demostró la

solidez del ajuste, mientras que la discusión de resultados permitió interpretar la influencia de los parámetros operativos sobre las emisiones de CO₂ y CH₄. Finalmente, el reconocimiento de las limitaciones del estudio contribuyó a delimitar su alcance y a sentar las bases para futuras líneas de investigación.

Con estos elementos, se establece un marco robusto que no solo responde a los objetivos planteados, sino que también ofrece criterios técnicos para la toma de decisiones operativas en plantas de endulzamiento de gas natural.

7 Conclusiones

La investigación confirmó la utilidad de un modelo matemático cuadrático para cuantificar con alta precisión las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) en plantas de endulzamiento de gas natural con dietanolamina (DEA). La validación estadística, con coeficientes de determinación (R^2) cercanos a la unidad y errores absolutos muy bajos, respalda la idoneidad del modelo para predecir de manera confiable el flujo másico de CO₂ y CH₄ bajo diferentes condiciones operacionales.

El análisis de regresión permitió identificar que variables como la temperatura del rehervidor y el flujo de gas de alimentación ejercen una influencia directa en las emisiones, mientras que sus interacciones resultan determinantes para la eficiencia global del proceso. Estos hallazgos evidencian la necesidad de adoptar enfoques multivariantes en el diseño y control operacional, priorizando la sinergia entre parámetros antes que los ajustes univariados.

Asimismo, se reconoció que el manejo de la temperatura del rehervidor representa un compromiso entre la reducción de emisiones y el cumplimiento de la especificación del gas dulce, dado que valores extremos pueden afectar la remoción de H₂S. Este resultado enfatiza la importancia de avanzar hacia estudios dinámicos y la incorporación de estrategias de control

avanzado que permitan equilibrar simultáneamente los objetivos ambientales, técnicos y económicos.

En conjunto, los resultados posicionan al modelo como una herramienta valiosa para la optimización del proceso de endulzamiento, contribuyendo a la reducción de la huella de carbono del sector gasífero y ofreciendo una base sólida para el diseño de políticas y prácticas orientadas hacia la sostenibilidad energética.

Finalmente, se confirma el cumplimiento integral de todos los objetivos específicos planteados en la investigación. En primer lugar, se caracterizaron las emisiones de GEI en el sector de hidrocarburos, estableciendo el marco conceptual y técnico necesario. En segundo lugar, se describió detalladamente el proceso de endulzamiento con DEA, identificando las variables operativas críticas. Posteriormente, la implementación de un diseño factorial completo en Aspen HYSYS —con 324 simulaciones— generó la base de datos para el análisis estadístico. La aplicación de técnicas de regresión lineal y cuadrática permitió comparar y seleccionar la estructura de modelo más adecuada, cuya validación exhaustiva —mediante el coeficiente de determinación, el error estándar de estimación y el análisis de residuales— confirmó su precisión y robustez. Asimismo, se evaluaron las limitaciones y alcances del estudio, formulando recomendaciones para investigaciones futuras.

Como producto final de este desarrollo, se codificó un software de aplicación práctica que integra el modelo matemático, permitiendo la cuantificación de emisiones de CO₂ y CH₄ a partir de las variables operativas de la planta. Esta herramienta, detallada en el Anexo A, constituye un aporte concreto para la gestión ambiental y la optimización operacional en la industria.

Este cumplimiento metodológico secuencial valida la coherencia de la investigación y consolida al modelo matemático desarrollado como una herramienta predictiva confiable para el control y la reducción de emisiones en plantas de endulzamiento de gas natural.

8 Recomendaciones

Incluir en investigaciones futuras la validación del modelo matemático propuesto utilizando datos operacionales provenientes de plantas de endulzamiento de gas natural con aminas, particularmente con dietanolamina (DEA). Aunque el modelo mostró una alta concordancia con los resultados obtenidos mediante simulaciones en Aspen HYSYS, su contraste con información de operación real permitiría evaluar su desempeño bajo condiciones más complejas, caracterizadas por variaciones en la composición del gas, fluctuaciones en la carga del proceso y posibles desviaciones respecto a los supuestos considerados en la simulación. Asimismo, la incorporación de datos operacionales facilitaría la calibración del modelo y la inclusión de factores de corrección que mejoren su precisión y fortalezcan su aplicabilidad para la estimación de emisiones y la gestión ambiental en plantas de tratamiento de gas natural. De igual manera, se recomienda desarrollar análisis de sensibilidad y de incertidumbre de las variables operacionales consideradas en el modelo, con el fin de cuantificar el impacto de las variaciones en las condiciones de proceso sobre las emisiones estimadas.

Complementar el análisis técnico desarrollado en este estudio con evaluaciones económicas que integren los costos operacionales del proceso de endulzamiento de gas natural con los beneficios asociados a la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero. Este tipo de análisis permitiría evaluar la viabilidad de las condiciones operacionales identificadas como óptimas desde una perspectiva económica y ambiental, facilitando la toma de decisiones en procesos de optimización operativa. La incorporación de indicadores económicos contribuiría a

fortalecer la aplicabilidad del modelo como herramienta de apoyo para la planificación y gestión de procesos en la industria del gas natural.

Se recomienda extender la metodología desarrollada a otros solventes comúnmente utilizados en procesos de endulzamiento de gas natural, tales como monoetanolamina (MEA) y metildietanolamina (MDEA), así como a mezclas híbridas de solventes. Esta ampliación permitiría comparar el desempeño de diferentes sistemas de absorción y analizar su influencia sobre las emisiones de gases de efecto invernadero asociadas al proceso. De esta manera, sería posible ampliar el alcance del modelo y generar una base comparativa que contribuya a la selección de alternativas operacionales con mayor eficiencia y menor impacto ambiental.

Se recomienda incluir en investigaciones futuras el análisis del efecto de la degradación química del solvente amínico y la formación de subproductos durante la operación del sistema de endulzamiento. Estos fenómenos pueden influir en la eficiencia de absorción de gases ácidos, modificar las condiciones de operación del proceso y afectar el desempeño global del sistema. La incorporación de estos aspectos permitiría mejorar la representación del proceso en el modelo matemático y evaluar de manera más integral la sostenibilidad operativa del sistema de endulzamiento en condiciones industriales de largo plazo

Referencias bibliográficas

- Abbas, T., Ghauri, M., Rashid, M., & Shahid, M. (2011). Dynamic simulation of sweetening process of natural gas. *Can J Chem Eng Technol*, 2(9), 156e61.
- Abdel-aal, H.K., Aggour, M., & Fahim, M.A. (2003). *Petroleum and Gas Field Processing*. (1st ed.). CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9780429258497>
- Al-Lagtah NMA, Al-Hasbi S, Onaizi SA. Optimization and performance improvement of Lekhwair natural gas sweetening plant using Aspen HYSYS. *Journal of Natural Gas Science and Engineering* 2015, 26, 367-381. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jngse.2015.06.030>
- Alvarez, R. A., Zavala-Araiza, D., Lyon, D. R., Allen, D. T., Barkley, Z. R., Brandt, A. R., Davis, K. J., Herndon, S. C., Jacob, D. J., Karion, A., Kort, E. A., Lamb, B. K., Lauvaux, T., Maasackers, J. D., Marchese, A. J., Omara, M., Pacala, S. W., Peischl, J., Robinson, A. L., ... Hamburg, S. P. (2018). Assessment of methane emissions from the U.S. oil and gas supply chain. *Science*, 361(6398), 186–188. <https://doi.org/10.1126/science.aar7204>
- American Petroleum Institute, API. (2009). *Compendium of Greenhouse Gas Emissions Methodologies for the Oil and Gas Industry*. Washington, DC, USA.
- Antony, J. (2023). A systematic methodology for design of experiments. En J. Antony (Ed.), *Design of experiments for engineers and scientists* (3.^a ed., pp. 33–50). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-15173-6.00002-0>
- Aspen HYSYS - ASPEN TECH. (2003). *Acid Gas Sweetening with DEA*. ASPEN TECHNOLOGY. EA.1031.05
- Aspen Technology Inc, 2012. *Aspen HYSYS Thermodynamics COM Interface*. Version Number: V8.3. MA USA, Cambridge.
- Australian Energy Market Operator (AEMO). (2017). *Gas quality guidelines*.

- Benavides, H. & León, G. (2007). Información técnica sobre gases de efecto invernadero y el cambio climático. Instituto de Hidrología, Meteorología y Estudios Ambientales-IDEAM. Subdirección de Meteorología (Bogotá, Colombia). 96p.
- Blanchet, T., Fournier, J. and Piketty, T. (2022), Generalized Pareto Curves: Theory and Applications. *Review of Income and Wealth*, 68: 263-288. <https://doi.org/10.1111/roiw.12510>
- Bradbury, J., Clement, Z., & Down, A. (2015). Greenhouse gas emissions and fuel use within the Natural gas supply chain-Sankey Diagram Methodology. US Department of Energy: Washington, DC, USA.
- British Petroleum, BP. (2011). Guidebook to Gas Interchangeability and Gas Quality.
- Chávez, L. F., De-La-Rosa, S. E., Manjarres, J. C., Valbuena, S. G., & Becerra-Torres, M. (2024). Diagrama de Pareto. Perspectiva de la Asignatura de Control de la Calidad. *Boletín de Innovación, Logística y Operaciones*, 6(1), 51-56.
- Comisión de Regulación de Energía y Gas – CREG. (1999). Resolución CREG 071 de 1999. Por la cual se establece el Reglamento Único de Transporte de Gas Natural (RUT).
- Delgado R, Laura N. (2018). Alternativas de reducción de quema y venteo de gas asociado en la industria petrolera. Tesis de posgrado. Fundación Universidad de América.
- Dhakal, S., Minx, J.C., Toth, F.L., Abdel-Aziz, A., Meza, M.J.F., Hubacek, K., Jonckheere, I.G.C. et al. (2022). Chapter 2: Emissions trends and drivers. In *Climate Change 2022: Mitigation of Climate Change*. Working Group III Contribution to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Intergovernmental Panel on Climate Change. Geneva.

https://www.ipcc.ch/report/ar6/wg3/downloads/report/IPCC_AR6_WGIII_Chapter_02.pdf.

Domínguez, J., & Castaño, E. (2016). DISEÑO DE EXPERIMENTOS - Estrategias y análisis en ciencias e ingeniería (1.ª ed.). Alfaomega. Alfaomega.

Gutiérrez, J.P., Ruiz, E.L., & Erdmann, E. (2017). Energy requirements, GHG emissions and investment costs in natural gas sweetening processes. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 38, 187-194.

Intergovernmental Panel on Climate Change, IPCC. (2006). Capítulo 4: Emisiones fugitivas. En *IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories: Volume 2*. Japan.

Intergovernmental Panel on Climate Change, IPCC. (2019). *2019 refinement to the 2006 IPCC guidelines for national greenhouse gas inventories* (E. Calvo Buendia, K. Tanabe, A. Kranjc, J. Baasansuren, M. Fukuda, S. Ngarize, A. Osako, Y. Pyrozhenko, P. Sherman, & S. Federici, Eds.). IPCC. <https://www.ipcc-nggip.iges.or.jp/public/2019rf/index.html>

Intergovernmental Panel on Climate Change, IPCC. (2021). El cambio climático es generalizado, rápido y se está intensificando. Comunicado de prensa. Suiza.

Intergovernmental Panel on Climate Change, IPCC. (2023). Cambio climático 2023: Informe de síntesis. Contribución de los Grupos de Trabajo I, II y III al Sexto Informe de Evaluación del Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático [Equipo de Redacción, H. Lee y J. Romero (eds.)]. IPCC, Ginebra, Suiza.

IPIECA, API & OGP. (2011). *Petroleum industry guidelines for reporting greenhouse gas emissions*. 2nd edition. <https://www.ipieca.org/resources/petroleum-industry-guidelines-for-reporting-greenhouse-gas-emissions-2nd-edition>.

- Kidnay, A. J., Parrish, W. R., & McCartney, D. G. (2019). *Fundamentals of natural gas processing*. CRC press. <https://doi.org/10.1201/9780429464942>
- Kweku, D. W., Bismark, O., Maxwell, A., Desmond, K. A., Danso, K. B., Oti-Mensah, E. A., ... & Adormaa, B. B. (2018). Greenhouse effect: greenhouse gases and their impact on global warming. *Journal of Scientific research and reports*, 17(6), 1-9.
- Martínez, M. (2000). *Ingeniería de gas, principios y aplicaciones. Endulzamiento del Gas Natural*. Ingenieros Consultores SRL. Maracaibo, Venezuela, 8-281.
- Montgomery, D. C. (2017). *Design and analysis of experiments* (9th ed.). John Wiley & Sons.
- Myers, D. B., & Harrison, M. R. (1996). *Methane Emissions from the Natural Gas Industry*. Volume 15. Gas-Assisted Glycol Pumps.
- Núñez, E., Steyerberg, E. W., & Núñez, J. (2011). Estrategias para la elaboración de modelos estadísticos de regresión. *Revista Española de Cardiología*, 64(6), 501–507. <https://doi.org/10.1016/j.recesp.2011.01.019>
- Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente, PNUMA. (2020). *Informe sobre la brecha en las emisiones del 2020. Resumen*. Nairobi.
- Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente, PNUMA. (2022). *Emissions Gap Report 2022: The Closing Window — Climate crisis calls for rapid transformation of societies*. Nairobi. <https://www.unep.org/emissions-gap-report-2022>
- Samiun, I. N., Yanuardi, D., & Nugroho, A. (2025, July). Feasibility Study, Simulation, and Economic Evaluation of Gas Sweetening Process Using MEA/DEA-Methanol Solvent on Refinery Plant of PT Kilang Pertamina Internasional. In *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science* (Vol. 1521, No. 1, p. 012014). IOP Publishing.

Stewart, M., & Arnold, K. (2011). Gas sweetening and processing field manual. Gulf Professional Publishing.

U.S. Environmental Protection Agency, US EPA. (2010). Greenhouse Gas Emissions Reporting from the Petroleum and Natural Gas Industry, Background Technical Support Document. Climate Change Division. Washington DC

U.S. Environmental Protection Agency, US EPA. (2022). Descripción general de los gases de efecto invernadero. <https://espanol.epa.gov/la-energia-y-el-medioambiente/descripcion-general-de-los-gases-de-efecto-invernadero>

United Nations Environment Programme. (2024). Emissions Gap Report 2024: No more hot air ... please! With a massive gap between rhetoric and reality, countries draft new climate commitments. Nairobi. <https://doi.org/10.59117/20.500.11822/46404>.