Evaluación de la influencia ambiental, técnica y económica del uso de biogás como materia prima en los

procesos de reformado de metano con vapor y en seco para la producción de hidrógeno

Paula Yulieth Rodríguez Cortés

Estudiante de Maestría en Ingeniería Química

Director:

Víctor Gabriel Baldovino Medrano

Profesor, Escuela de Ingeniería Química

Codirector:

PhD. Ariel Uribe

Instituto Colombiano de Petróleo

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2024

#### Dedicatoria

A Cristian David Rodríguez, mi maestro, confidente y hermano, allá donde te encuentres, espero que sientas un profundo orgullo por los logros que juntos hemos alcanzado.

A mi mamá, Julia Cortés, cuyo amor incondicional se ha manifestado incansablemente a través de palabras alentadoras y paciencia, te agradezco profundamente.

A mi papá, Raúl Rodríguez, quien siempre ha creído en mis capacidades y me ha motivado a alcanzar grandes metas.

A mi hermanita, Luciana Rodríguez, cuya simple existencia llena de colores mis días grises.

A mis hermanos Kevin y Sergio, quienes han sido creyentes constantes en lo que hago.

A mi compañero de viaje, Juan Diego, cuyo aliento diario ha sido crucial para continuar en este camino lleno de desafíos, pero también repleto de experiencias gratificantes.

A mi tía Amparo y prima Yamile, quienes siempre han creído en mi identidad y han sido como segundas madres. A todos ellos, mi más profundo agradecimiento por su apoyo y creencia constante en mí.

## Agradecimientos

Expreso mi profundo agradecimiento al profesor Víctor Baldovino por sus invaluables consejos y apoyo constante durante la elaboración de esta tesis. También reconozco la dedicación del PhD Ariel Uribe, cuya contribución fue fundamental para la culminación exitosa de este trabajo.

Quiero destacar la generosidad y respaldo de Ecopetrol, del Instituto Colombiano de Petróleo (ICP) y la Universidad Industrial de Santander, quienes proporcionaron apoyo económico, recursos materiales e instalaciones esenciales para llevar a cabo esta investigación. Su colaboración fue esencial para el logro de los objetivos académicos y la conclusión exitosa de este proyecto.

# Tabla de contenido

1. Introducción
2. Marco conceptual y estado del arte15
2.1. Reformado de metano con vapor de agua (SMR)16
2.2. Reformado de metano en seco (DMR)18
2.3. Cinética de las reacciones de Reformado de Metano con Vapor de Agua y en Seco
2.3.1. Cinética Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW)20
2.4. Captura de CO <sub>2</sub> 25
2.4.1. Captura Postcombustión25
2.4.2. Captura Precombustión
2.4.3. Captura de oxycombustión26
2.5. Simulación en Aspen Plus
2.6. Integración energética
3. Objetivos
3.1. Objetivo general
3.2. Objetivos específicos
4. Metodología general
5. Estudio técnico
5.1. Metodología del desarrollo del estudio técnico
5.1.1. Simulación

# ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS

5.1.2. Determinación de emisiones de CO <sub>2</sub>	43
5.2. Resultados y discusión del estudio técnico	44
5.2.1. Intensidad energética y de consumo	44
5.3. Conclusiones	46
6. Estudio económico	47
6.1. Metodología del desarrollo del estudio económico	47
6.1.1. Costos de capital (CapEx)	47
6.1.2. Costos de operación (OpEx)	48
6.1.3. Costo nivelado de hidrógeno (LCOH)	49
6.2. Resultados y discusiones del estudio económico	50
6.2.1. Costos capitales	50
6.2.2. Costos operativos	54
6.2.3. Costo nivelado de hidrógeno (LCOH)	55
6.3. Conclusiones	56
7. Integración energética (IE)	56
7.1. Metodología de la Integración Energética	57
7.2. Resultados y discusión del desarrollo de la Integración Energética	59
7.2.1. Intensidad energética	60
7.2.2. Costos capitales, de operación y costo nivelado de hidrógeno con integración energé	etica61
7.3. Conclusiones	62

# ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS

8. Ca	aptura de CO <sub>2</sub> 62
8.1. Me	etodología63
8.1.1	L. Estudio técnico-económico de la tecnología de Reformado de Metano con Vapor de Agua con
(	Captura de Carbono63
8.1.2	2. Costo de captura de CO <sub>2</sub> (LCOC)64
8.2. Res	sultados y discusión de la etapa de Captura de CO <sub>2</sub> 65
8.2.1	L. Costos capitales, operativos y costo nivelado de hidrógeno de la etapa de Captura de CO <sub>2</sub> 65
8.2.2	2. Costo nivelado de Captura de Carbono (LCOC)68
8.3. Cor	nclusiones
9. C	onclusiones generales
10. Bi	ibliografía70
11. A	péndices

# LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Características cinéticas de las reacciones de reformado de metano con vapor de agua y en seco         22
Tabla 2. Ventajas y desventajas de los reformados de metano con vapor de agua y en seco
Tabla 4. Descripción de los modelos de reactores encontrados en Aspen Plus       28
Tabla 5. Modelos de los equipos más importantes encontrados en Aspen Plus
Tabla 6. Consideraciones principales para la selección de propiedades en Aspen Plus         37
Tabla 7. Modelos y condiciones de operación de los equipos38
Tabla 8. Parámetros cinéticos y de adsorción de las velocidades de las reacciones smr y wgs         39
Tabla 9. Especificaciones y parámetros del reactor cinético multi-tubular smr         41
Tabla 10. Factores pre-exponenciales de la reacción dmr y rwgs       42
Tabla 11. Energías de activación de las constantes cinéticas de las reacciones dmr y rwgs         42
Tabla 12. Especificaciones y parámetros del reactor cinético dmr y del catalizador         43
Tabla 13. Valores base del costo de servicios públicos
Tabla 14. Costos típicos de materia prima49
Tabla 15. Vida útil de la planta, precio de venta de $h_2$ y horas de operación50
Tabla 16. Costos de equipamiento calculados (USD)
Tabla 17. Comparación entre costos de plantas de producción de h <sub>2</sub> a partir de smr encontradas en la literatura y las
tecnologías de este estudio, con una producción de 8000 kg/h53
Tabla 18. Costos operativos de las tecnologías estudiadas       54
Tabla 19. Costos totales y operativos de los diseños generados por aea       59
Tabla 20. Comparación de la intensidad energética del smr con gas natural con y sin integración energética61
Tabla 21. Costos capitales y operacionales con y sin integración energética         61
Tabla 22. Costos operativos de la planta de captura de co2    66
Tabla 23. Comparación entre el lcoh sin y con captura de co2       67

# LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Diagrama de bloques de las etapas de los procesos DMR y SMR	19
Figura 2. Análisis Pinch: ilustración de las curvas compuestas	33
Figura 3. Etapas metodológicas del desarrollo del trabajo	35
Figura 4. índices técnicos de las tecnologías SMR con gas natural y biogás y DMR con gas natural y biogás	44
Figura 5. Porcentajes de los costos de equipamiento de las tecnologías estudiadas	51
Figura 6. Porcentajes de los costos operativos de todas las tecnologías estudiadas	55
Figura 7. Comparación de los LCOH obtenidos para cada tecnología	56
Figura 8. Etapas metodológicas para la aplicación de integración energética en un proceso	57
Figura 9. Análisis Pinch del proceso de SMR con gas natural	58
Figura 10. Resumen de la red de intercambio óptima del proceso SMR con gas natural	60
Figura 11. Costos porcentuales de capital (Etapa de captura de CO <sub>2</sub> )	65
Figura 12. Porcentaje de costos de servicios industriales (Etapa de captura de CO <sub>2</sub> )	67

# LISTA DE APÉNDICES

Apéndice	1.Huella de carbono del proceso SMR con gas natural78
Apéndice	2. Primera etapa del proceso de SMR en Aspen Plus79
Apéndice	3. Segunda etapa del proceso de SMR en Aspen Plus79
Apéndice	4. Tercera etapa del proceso SMR en Aspen Plus80
Apéndice	5. Metodología del cálculo de los CapEx80
Apéndice	6. Diagrama de grilla de la integración energética del proceso de SMR83
Apéndice	7. Diagrama de pfd de la etapa de captura de carbono con mea del SMR
Apéndice	8. Condiciones de operación, flujos másicos, flujos molares, composiciones de todas las corrientes
involu	ucradas en el proceso SMR85

#### Resumen

**Título:** Evaluación de la influencia ambiental, técnica y económica del uso de biogás como materia prima en los procesos de reformado de metano con vapor y en seco para la producción de hidrógeno.

Autor: Paula Yulieth Rodríguez Cortés

**Palabras clave:** Reformado de metano, Hidrógeno, Tecnologías de producción, Integración energética, Captura de carbono.

**Descripción:** En esta investigación, se lleva a cabo un estudio comparativo entre cuatro tecnologías ampliamente empleadas en la producción de hidrógeno mediante el reformado de metano: 1) Reformado de metano con vapor de agua a partir de gas natural (SMR con gas natural) a escala industrial, 2) Reformado de metano con vapor de agua a partir de biogás (SMR con biogás) a escala piloto, 3) Reformado de metano en seco a partir de gas natural (DMR con gas natural) a escala industrial y 4) Reformado de metano en seco a partir de biogás (DMR con biogás) a escala piloto. La comparación se llevó a cabo mediante estudios técnico, económico y ambiental utilizando simulaciones en Aspen Plus y Aspen Energy Analyzer. Los resultados indican que la tecnología SMR con gas natural exhibe una mayor viabilidad técnica, económica y ambiental en comparación con las otras opciones. Además, se implementó una integración energética en esta tecnología, resultando en un diseño óptimo de red de intercambio, y se incorporó una etapa de Captura de Carbono con monoetanolamina (MEA).

#### Abstract

**Title:** Evaluation of the Environmental, Technical, and Economic Impact of Biogas Utilization as Feedstock in Steam and Dry Methane Reforming Processes for Hydrogen Production.

Author: Paula Yulieth Rodríguez Cortés

**Keywords:** Methane Reforming, Hydrogen, Production Technologies, Energy Integration, Carbon Capture.

**Description**: This research conducts a comparative study of four widely used technologies in hydrogen production through methane reforming: 1) Steam Methane Reforming from natural gas (SMR with natural gas) on an industrial scale, 2) Steam Methane Reforming from biogas (SMR with biogas) on a pilot scale, 3) Dry Methane Reforming from natural gas (DMR with natural gas) on an industrial scale, and 4) Dry Methane Reforming from biogas (DMR with biogas) on a pilot scale. The comparison was performed through technical, economic, and environmental analyses using simulations in Aspen Plus and Aspen Energy Analyzer. The results indicate that the SMR technology with natural gas demonstrates superior technical, economic, and environmental viability compared to the other options. Additionally, an energy integration was implemented in this technology, resulting in an optimal design of the exchange network, and a Carbon Capture stage with monoethanolamine (MEA) was incorporated.

#### 1. Introducción

Colombia es un país altamente vulnerable a las consecuencias y efectos del cambio climático y considera como un riesgo directo el aumento constante de las emisiones de gases de efecto invernadero para sus posibilidades de desarrollo sostenible (Cancillería, 2022). Por esta razón, ha manifestado el propósito de transitar hacia un desarrollo adaptado al cambio climático, compatible con el objetivo de neutralidad del carbono hacia 2050, a través de compromisos en el marco del Acuerdo de París y sus políticas nacionales. Durante la actualización de su Contribución Determinada a Nivel Nacional (NDC, por sus siglas en inglés), el país incrementó la meta de reducción de emisiones al 51% comparado con el 20% establecido en la NDC del año 2015 (Mesa et al., 2020). Para esto, a inicios del año 2021, se adoptó la estrategia "Colombia, Carbono Neutral", programa cuyo objetivo es promover los compromisos adoptados por el país en los diferentes sectores con la meta establecida para el 2050 (LEDS, 2021)

Alineado con el propósito de la NDC, es necesario cumplir el compromiso de lograr una transición de la economía hacia una baja cantidad o cero emisiones de CO<sub>2</sub>. Es por ello por lo que el sector minero ha adoptado la misión de transformación energética, buscando un desarrollo sectorial consciente de los retos que el cambio climático representa. Dicha misión se articula con el Plan Energético Nacional (PEN 2020-2050), haciendo evidente el protagonismo e importancia de las energías renovables y el gas natural como fuentes de energía de transición.

Con el contexto anterior, el gobierno de Colombia a través del Ministerio de minas y Energía, la Unidad de Planeación Minero-Energética, el Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible, la Estrategia Colombiana de Desarrollo Bajo en Carbono, Adaptada y Resiliente, entre otras instituciones, han venido uniendo esfuerzos para promover el aprovechamiento y uso del biogás que se produce a partir de biomasa residual a través de procesos bioquímicos como la digestión anaeróbica. El biogás contiene cantidades significativas de metano y de dióxido de carbono, lo que lo hace atractivo como combustible y materia prima para la producción de sustancias de gran uso industrial como el hidrógeno. Además, el biogás también contiene pequeñas cantidades de sustancias azufradas y nitrogenadas (M. D. Mesa et al., 2020).

El hidrógeno es de alto interés industrial ya que es considerado como un portador de energía limpia, además de destacarse entre todos los combustibles químicos por tener el poder calorífico por unidad de masa más alto (142,5 MJ/kg) y no generar dióxido de carbono durante su combustión (Martins et al., 2017). También, es utilizado ampliamente como intermediario en procesos de refinado de crudo y para la producción de fertilizantes. Debido a su versatilidad, a su amplia aplicación y al constante aumento de su demanda, la producción limpia de hidrógeno es uno de los temas principales tópicos de investigación relacionada en el campo de la energía que actualmente se discute (Yoo et al., 2015).

Industrialmente, la producción de hidrógeno se realiza a partir de reacciones de reformado de metano, proveniente en la mayoría de los casos de gas natural, entre estas encontramos: (a) reformado con vapor (SMR: *Steam Methane Reforming*) que, debido a los altos rendimientos reportados, es la más utilizada, (produciendo entre el 80 y 85% del hidrógeno total a nivel mundial), pero que, al ser un procedimiento altamente endotérmico ( $\Delta H = 251 MJ/kmol$ ) demanda de grandes suministros de energía. (b) Reformado en seco (DMR: *Dry Reforming Methane*) donde se utiliza el dióxido de carbono como reactivo, permitiendo su valorización. Sin embargo, la principal limitación de la tecnología DMR es la poca disponibilidad de catalizadores resistentes a los depósitos de coque en superficie generados durante la reacción, la baja relación estequiométrica hidrógeno/monóxido de carbono que se puede alcanzar y su alto carácter endotérmico ( $\Delta H = 247,3 MJ/kmol$ ).

Frente a la necesidad de producir hidrógeno de manera limpia y teniendo en cuenta los diversos desafíos a los que se enfrentan cada una de las técnicas expuestas, este proyecto tuvo como propósito realizar un análisis comparativo de los procesos de reformado anteriormente descritos para producir hidrógeno a partir de gas natural y biogás. El análisis se realizó Aspen Plus. Se tuvo en cuenta el pretratamiento del biogás para su posterior utilización y la captura del dióxido de carbono generado en

#### ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS

cada una de las reacciones para garantizar que el hidrógeno obtenido pueda ser catalogado como de baja intensidad de carbono. De manera tal que, en esta investigación se espera responder a las siguientes preguntas: ¿cuáles son los costos y huella ambiental de la producción de hidrógeno de baja intensidad de carbono a partir de reformado de metano con vapor de agua y en seco cuando se usa biogás como materia prima?, ¿cuál de los procesos considerados es más factible técnica, económica y ambientalmente?

Para responder las preguntas anteriores se siguió una metodología que consistió en: (1) Diseñar casos base para los procesos SMR y DMR, a partir de la recopilación de información de literatura relacionada con configuraciones de proceso y condiciones de operación (flujos, composiciones de las corrientes, temperaturas y presiones de operación), eficiencias de conversión de carbono e indicadores claves del proceso. (2) Realizar un análisis económico determinando costos de inversión y operativos de cada unidad de proceso, calculando índices de costos y el costo nivelado de hidrógeno (LCOH) de las tecnologías. (3) Realizar una integración energética para la tecnología con mayor factibilidad técnica, económica y ambiental, recalculando costos y LCOH y finalmente (4) Diseñar un caso base de captura de carbono acoplado a la tecnología SMR con gas natural, con el fin de calcular las emisiones de CO<sub>2</sub> evitadas a partir de la tecnología MEA, además de calcular los nuevos costos operativos y capitales, así como el nuevo LCOH.

Este trabajo se distribuye en 4 capítulos siguiendo la secuencia metodológica general propuesta. El primero corresponde al estudio técnico de todas las tecnologías, el segundo al estudio económico de todas las tecnologías, el tercero a la integración energética del proceso SMR con gas natural y finalmente, la captura de carbono acoplada al modelo de SMR con gas natural. Cada capítulo cuenta con la metodología utilizada para el desarrollo de este, con los resultados y conclusiones.

#### 2. Marco conceptual y estado del arte

La constante modernización y desarrollo industrial en el mundo demandan de un gran gasto energético (580.000.000 TJ/año) que en su mayoría es suministrado a partir de combustibles fósiles, los cuales son recursos no renovables. Esta situación ha generado discusiones acerca del futuro escenario energético a nivel mundial y la manera en la que se podrá suplir la demanda de energía para continuar con el ritmo de vida actual (Sazali, 2020).

El excesivo uso de combustibles fósiles, que ha alcanzado proporciones alarmantes con emisiones de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) de 36.300 millones de toneladas por año, ha desencadenado una crisis ambiental global. Este fenómeno, ampliamente reconocido por la opinión pública, se manifiesta claramente en el continuo aumento de la temperatura del planeta en 1,5 °C. Esta elevación térmica constituye un factor determinante para el cambio climático, representando una seria amenaza para la subsistencia misma de la vida en nuestro planeta. Es crucial destacar que este problema no se limita exclusivamente al ámbito de los combustibles fósiles, ya que diversas industrias contribuyen de manera significativa a la emisión de contaminantes atmosféricos, agravando aún más la urgencia de abordar y mitigar esta creciente crisis ambiental. Los problemas económicos, ambientales y sociales expuestos ponen sobre la mesa la urgencia de adoptar energías más limpias y que además garanticen un cubrimiento de la demanda energética a nivel mundial. Por esto, la producción de H<sub>2</sub> con bajas o nulas emisiones de CO<sub>2</sub> ha tomado gran relevancia y es uno de los temas principales en investigación relacionada con el campo de la energía (Nahar et al., 2017).

El hidrógeno presenta un rendimiento energético de cerca de 122 kJ/g, valor que supera 2,75 veces a los rendimientos alcanzados por hidrocarburos (Apostolou & Xydis, 2019). Su uso como combustible está libre de la formación de gases tóxicos y de emisiones de CO<sub>2</sub> y el único subproducto de la combustión es vapor de agua. Actualmente, la mayoría del hidrógeno producido es utilizado para la refinación de hidrocarburos y para la producción de metanol y amoniaco. Aunque su utilización como combustible no emite gases de efecto invernadero, sí lo hacen algunas de las maneras más utilizadas para producirlo, motivo por el cual es necesaria una producción limpia que sea eficiente y económica (1-5 USD/kg) (Roldán, 2023). Los reformados de metano producen una corriente de gas compuesta primordialmente por hidrógeno (H<sub>2</sub>), monóxido de carbono (CO) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) (Holladay et al., 2009). Algunos procesos de reformado de metano ampliamente utilizados son:

## 2.1. Reformado de metano con vapor de agua (SMR)

El reformado de metano con vapor de agua se lleva a cabo a través de varias etapas. En la etapa inicial, el metano y el vapor de agua se hacen reaccionar en un reformador catalítico que opera entre 630-930 °C y bajo presiones entre 5-25 bar. La reacción de reformado de metano con vapor se muestra en la Ecuación 1.

$$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$$

#### Ecuación 1

Dado que la reacción es endotérmica, es necesario suministrar calor al reformador siendo este uno de los gastos más importantes del proceso (Simpson & Lutz, 2007).

La composición del producto (gas de síntesis) está determinada por la cinética de la reacción. Según la relación vapor de agua/carbono (1-5), la temperatura (500-900°C) y la presión de operación del reformador (25-36.5 bar), se podrán encontrar cantidades significativas de CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O y CO<sub>2</sub> en el gas de síntesis (Yan et al., 2020a). El gas de síntesis que sale del reformador pasa a través de dos reactores de desplazamiento agua-gas (WGS: *Water Gas Shift*:) ubicados en serie, el primero maneja temperaturas de 400-350 °C y se conoce como HTS: *High Temperature Shift* y el segundo LTS: *Low Temperature Shift*, que opera a temperaturas 250-200 °C, los cuales convierten el CO presente en CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub> usando el H<sub>2</sub>O disponible en el gas de síntesis, o en su defecto, esta última debe ser adicionada al sistema.

$$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + 3H_2$$

#### Ecuación 2

La fase final del proceso es la separación del H<sub>2</sub> del CO que se logra a través de diferentes técnicas, una de las más conocidas es la PSA o adsorción por cambio de presión. La PSA es un proceso de separación de gases en el que el adsorbente es regenerado por la reducción rápida de la presión parcial del componente adsorbido, ya sea reduciendo la presión total o utilizando un gas de purga (Ruthven & Farooq, 1999). Los gases involucrados en el proceso PSA son: H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>O. Si el metano empleado en el reformado contiene N<sub>2</sub>, este gas también estará presente en la separación. La PSA normalmente consiste en una columna configurada con adsorbentes (zeolitas, tamices moleculares o carbones activados): en la capa inicial son removidos agua, dióxido de carbono y metano, mientras que, en la segunda capa, compuesta de zeolita, son removidos otros componentes hasta llegar a menos de 10 ppm de CO (Grande et al., 2008). Las propiedades físicas de los adsorbentes son cruciales para la captura de  $CO_2$  y la purificación del  $H_2$  (Liu et al., 2020). En este sentido Xiao et al., 2016, estudiaron la selectividad y los parámetros cinéticos de una zeolita 5A obteniendo como resultado una gran selectividad del adsorbente sobre el CH<sub>4</sub> y el CO, mientras que Shi et al., 2018, determinaron la capacidad de adsorción de varios adsorbentes sobre gel de sílice y concluyeron que hubo alta selectividad de CO<sub>2</sub>. La PSA es una tecnología madura que proporciona varios grados de pureza para el H<sub>2</sub> (>99%) (Sazali, 2020).

Por otro lado, la separación de hidrógeno a través de membranas es una tecnología que se encuentra actualmente en desarrollo y que promete mucho, ya que, la técnica sería capaz de producir H<sub>2</sub> de alta pureza (>99%); operando entre 300 y 600°C y con una diferencia de presión de 1 y 40 bar (Simpson & Lutz, 2007). El SMR presenta graves preocupaciones sobre las emisiones de CO<sub>2</sub> pues por cada kg de H<sub>2</sub> producido, también se producen 12 kg de CO<sub>2</sub> como subproducto (Cetinkaya et al., 2012).

#### 2.2. Reformado de metano en seco (DMR)

El proceso de DMR es altamente endotérmico, tal como se describe en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**. Las características termodinámicas y cinéticas del proceso son similares a las del proceso de reformado con vapor de agua, pero, en este caso la reacción de CH<sub>4</sub> con CO<sub>2</sub> produce gas de síntesis con una relación H<sub>2</sub>/CO cercana a uno (Mondal et al., 2016).

 $CO_2 + CH_4 \rightarrow 2CO + 2H_2$ 

# Ecuación 3

El equilibrio de la reacción es influenciado por la reacción simultánea RGWS que se describe por la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** 

$$CO_2 + H_2 \rightarrow CO + H_2O$$
  $\Delta H_R = +41 \frac{MJ}{kmol_{CH_A}}$ 

## Ecuación 4

El reformado seco de metano compite con reacciones paralelas como la RWGS lo que afecta negativamente las relaciones molares H<sub>2</sub>/CO. Entre estas están la deshidrogenación de CH<sub>4</sub> (**jError! No se encuentra el origen de la referencia.**) y la llamada reacción de Boudouard (**jError! No se encuentra el origen de la referencia.**). Termodinámicamente, el reformado en seco es promovido por el aumento de la temperatura y prevalece sobre sus reacciones competidoras por encima de 650 °C (Sandoval-Bohórquez et al., 2021).

$$CH_4 \leftrightarrows C + H_2 \qquad \Delta H_R = +74.9 \frac{MJ}{kmol}$$

Ecuación 5

 $2C0 \simeq C + CO_2 \qquad \Delta H_R = -172.5 \frac{MJ}{kmol}$ 

Ecuación 6

El gas natural es alimentado al proceso acompañado de CO<sub>2</sub>. Como primera medida, los reactivos se calientan a través de un intercambiador de calor utilizando el efluente del reactor. Después, la mezcla se debe calentar en un horno a una temperatura de 850 °C. Luego, la corriente se alimenta al reformador de lecho fijo. La corriente del reformador debe ser enfriada hasta temperatura ambiente y enviada a la sección de recuperación del gas de síntesis. Para recuperar el hidrógeno, es necesario separarlo del gas de síntesis con alguna de las técnicas mencionadas para reformado de metano con vapor de agua (Hernández & Martín, 2016).

La **Figura 1** describe a manera de resumen las etapas de los procesos de reformado de metano con vapor de agua y en seco mencionadas anteriormente.



Figura 1. Diagrama de bloques de las etapas de los procesos DMR y SMR

Nótese que los reformados de metano con vapor de agua y en seco comparten las mismas etapas de proceso. Sin embargo, su diferencia radica en el tipo de reactor de reformado, en el **jError! No se encuentra el origen de la referencia.** se muestra el diagrama PFD por etapas de la tecnología SMR con gas natural.

### 2.3. Cinética de las reacciones de Reformado de Metano con Vapor de Agua y en Seco

#### 2.3.1. Cinética Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW)

La ecuación de *LHHW* se utiliza con frecuencia para describir la cinética de reacciones catalizadas por catalizadores heterogéneos, donde tanto los fenómenos cinéticos como los de adsorción son importantes (Wiederkehr et al., 2021).El mecanismo se ha utilizado para correlacionar e interpretar datos de velocidad en muchas reacciones que tienen lugar en superficies sólidas. El paso central en el mecanismo es la reorganización de enlaces en moléculas fuertemente adsorbidas, ya sea de manera disociativa o no disociativa, o en sus fragmentos. Este paso puede tener lugar en un solo sitio o en sitios adyacentes. El paso precursor necesario para el paso mencionado anteriormente es la adsorción (Yang & Wong, 1981).

La suposición principal en la que se basa la ecuación LHHW es que el proceso de reacción química superficial puede dividirse en (Villarreal & Cuevas-García, 2020):

- a) Adsorción de los reactivos, donde se presenta la formación del complejo superficial.
- b) Reacción química superficial.
- c) Desorción de los reactivos, que genera al sitio activo.

La efectividad del enfoque *LHHW* se encuentra en su capacidad para establecer un método sistemático que facilita la derivación de las ecuaciones. En términos generales, este método se explica de la siguiente manera (Villarreal & Cuevas-García, 2020):

- 1. Se opta por el tipo de mecanismo que se considere más apropiado.
- 2. Se identifica cuál es la etapa que controla la velocidad de la reacción.
- 3. Se formula la ecuación cinética de ese paso, teniendo en cuenta que se trata de un paso elemental.
- Se reemplazan todas las variables que no pueden ser medidas, aprovechando el hecho de que las demás reacciones elementales se encuentran en equilibrio.

### ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS

 Por lo general, la ecuación incluye una expresión para los sitios activos, la cual se deriva de un balance de sitios.

Si se considera una reacción  $A + B \leftrightarrow C$ , las ecuaciones resultantes son del estilo:

$$-r_{A} = \frac{kC_{A}C_{B}}{(1 + K_{A}C_{A} + K_{B}C_{B} + K'C_{C})^{2}}$$

Ecuación 7

Donde:

k': Factor cinético de la reacción

C<sub>A</sub>: Concentración del reactivo A

- $C_B$ : Concentración del reactivo B
- C<sub>C</sub>: Concentración del producto C
- K<sub>A</sub>: Constante de adsorción del reactivo A
- K<sub>B</sub>: Constante de adsorción del reactivo B
- $K'_{C}$ : Constante de desorción del producto C

Cuando la suposición en el mecanismo es que participan dos sitios adyacentes en la reacción y

que la etapa controlante es la reacción superficial, o si se considerara otro paso como el controlante:

$$-r_{A} = \frac{kC_{A}C_{B}}{(1 + K_{A}C_{A} + K_{B}C_{B} + K'C_{A}C_{B})^{2}}$$

## Ecuación 8

Donde ahora la suposición es que la etapa controlante es la desorción del producto C.

Teniendo en cuenta que diversos aspectos esenciales para el diseño de los reactores como la determinación de la selectividad de los productos del proceso, el consumo de energía dentro de los reactores y la evaluación de costos se ven influenciados por las reacciones que ocurren dentro de estos,

se presentan las velocidades de reacción de los reformados de metano con vapor y en seco en la Tabla 1,

las cuales pueden ser descritas con la cinética LHHW.

Reacción	r	Referencia
Reformado de metano	$k_{SMR} \frac{P_{CH_4} P_{H_2O} - (\frac{P_{H_2}^3 P_{CO}}{K_{eq,SMR}})}{K_{eq,SMR}}$	(Tacchino et al., 2022)
Reformado de metano	$P_{H_2}^{2,5} \qquad DEN^2$ $k_{1\sqrt{P_{CH_4}}\sqrt{P_{CO_2}}}$	(Luyben, 2014)
en seco	$\frac{\sqrt{1+\sqrt{k_2 P_{CH_4}}}}{(1+\sqrt{k_3 P_{CO_4}})}$	

**Tabla 1.** Características cinéticas de las reacciones de reformado de metano con vapor de agua y en seco

Dentro del campo de la producción de H<sub>2</sub>, las tecnologías de reformado de metano sujetas a estudio presentan diversas ventajas y desventajas que influyen en su atractivo. Estas características se detallan en la Tabla 2, proporcionando una visión comparativa de los distintos aspectos que afectan la eficiencia y viabilidad de dichas tecnologías.

Tabla 2.	Ventajas	v desventa	jas de los	reformados d	de metano con	vapor de aqua	v en seco
		/					,

Tecnología	Ventajas	Desventajas
	Gran experiencia industrial	
Reformado de metano	No requiere de oxígeno	Altas amisionas da CO-
con vapor de agua	La mejor relación H <sub>2</sub> /CO	Altas emisiones de CO <sub>2</sub>
	para producción H <sub>2</sub>	
		Baja relación de H <sub>2</sub> /CO
Reformado de metano	Disminución del requisito de	Altas temperaturas de
en seco	desulfuración	proceso
		Formación de coque

Nota: Adaptado de Holladay et al., 2009 y Usman et al., 2015

Debido a los altos costos y a la naturaleza no renovable del gas natural, se ha estudiado la producción de H<sub>2</sub> a partir de reformado de metano con vapor de agua y en seco usando biogás como materia prima. El biogás es el producto de la digestión anaeróbica de biomasa, cuyo carbono proviene de la atmósfera a través de la fotosíntesis. Por lo tanto, los procesos que utilizan biogás como materia prima pueden ser considerados neutros en carbono. La Tabla 3 compara las composiciones del biogás y gas natural, observándose que las cantidades de metano encontradas en el biogás son considerablemente altas, lo que lo hace atractivo en la industria, en este caso para la obtención de hidrógeno a partir de metano.

Componente	Biogás DA	Gas natural
CH4	53-70%	81-89
CO <sub>2</sub>	30-50%	0,67-1
N <sub>2</sub>	2-6%	0,28-14
O <sub>2</sub>	0-5%	0
H <sub>2</sub>	NA	NA
Hidrocarburos ligeros	NA	3,5-9,4
H <sub>2</sub> S	0-2000 ppm	0-2,9
$NH_3$	<100 ppm	NA

**Tabla 3.** Composiciones típicas del biogás y del gas natural

Nota: Adaptado de Nahar et al., 2017

En la actualidad, se emplean dos enfoques distintos para llevar a cabo la conversión de biogás a hidrógeno (H<sub>2</sub>). Los procesos conocidos como de primer tipo se centran inicialmente en mejorar la calidad del biogás, equiparándola a la del gas natural mediante la eliminación de impurezas como el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) y el sulfuro de hidrógeno (H<sub>2</sub>S) antes de llegar al reformador. Posteriormente, este biogás mejorado se utiliza en la producción de H<sub>2</sub> a través de una unidad de reformado, ya sea utilizando vapor o en un proceso en seco. Este procedimiento incluye etapas adicionales, como unidades de conversión de agua-gas y unidades diseñadas para recuperar el CO<sub>2</sub> generado, utilizando técnicas como la adsorción por oscilación de presión, según lo señalado por Kong et al., 2020.

Las mejoras en el biogás se llevan a cabo mediante diversas tecnologías, entre las cuales se incluyen la separación criogénica, la absorción física mediante sistemas de depuración con agua o solventes orgánicos, la absorción química utilizando soluciones de aminas, la adsorción por oscilación de presión, y otras técnicas, como detallan Angelidaki et al., 2018. Sin embargo, estas tecnologías no han sido probadas a escalas industriales.

Los procesos de segundo tipo buscan aprovechar el  $CO_2$  presente en el biogás mediante la inyección de biogás directamente en el reformador para permitir que el  $CO_2$  y el  $CH_4$  reaccionen formando  $H_2$  y CO (Hashemi et al., 2019).

Dentro del desarrollo de las tecnologías de reformado de metano y biogás se ha evidenciado la existencia de una gran cantidad de estudios técnicos y económicos. Por ejemplo, Phan et al., 2022, optimizaron un proceso de reformado de metano con vapor, en seco y tri-reformado de metano por medio de Aspen Plus, con y sin reciclaje de gas de cola, concluyendo que la producción de H<sub>2</sub> a través de reformado de metano en seco, con y sin reciclo no es competitiva con el proceso industrial que utiliza reformado de metano con vapor. Sin embargo, los autores no reportaron resultados relacionados con la producción de gases de efecto invernadero ni con la huella de carbono de las técnicas estudiadas. Hernández & Martín, 2016 desarrollaron y optimizaron un nuevo proceso a partir de biogás para producir metanol con base al reformado en seco utilizando el CO<sub>2</sub> que forma parte de la mezcla, utilizando dos funciones objetivo, una económica y otra ambiental. La optimización ambiental muestra que es posible minimizar el CO<sub>2</sub> emitido ajustando la composición del biogás, obteniendo valores de alrededor del 50% para el CH<sub>4</sub> y 47% de CO<sub>2</sub>. Es importante tener en cuenta que el tiempo de

preparación tecnológica (*Technology Readiness Level: TRL*) de las tecnologías de reformado de metano con gas natural y biogás es de 9 y 5, respectivamente (Khojasteh Salkuyeh et al., 2017; Phan et al., 2022).

A pesar del interés industrial y ambiental del uso de biogás, es importante cuantificar los impactos económicos y ambientales que tendría la utilización de biogás como materia prima en los procesos de reformado con vapor de agua (SMR) y en seco (DMR), ya que este análisis permitirá evaluar el impacto de esta fuente renovable en términos de costos, escala de producción y huella de carbono.

#### 2.4. Captura de CO<sub>2</sub>

Los procesos de captura, también conocidos como "*Carbon Capture and Storage*" (CCS), son utilizados para reducir la cantidad de CO<sub>2</sub> liberada a la atmósfera como resultado de actividades humanas como la quema de combustibles fósiles en centrales eléctricas y la industria. El objetivo principal de las CCS es mitigar el cambio climático y reducir las emisiones de gases de efecto invernadero (IPCC, 2022).

Las CCS se dividen en tres categorías principales: captura postcombustión, captura precombustión y captura en la industria.

#### 2.4.1. Captura Postcombustión

Este enfoque es utilizado para capturar el CO<sub>2</sub> después de que los combustibles fósiles se han quemado en procesos de combustión. Por lo general, se aplica en centrales eléctricas y en industrias que emiten CO<sub>2</sub> como resultado de su actividad. El proceso más común implica el uso de solventes, absorbentes químicos que reaccionan con el CO<sub>2</sub> para separarlo de otros gases. Una vez capturado, el CO<sub>2</sub> se separa del absorbente y es almacenado (Sreedhar et al., 2017).

Los procesos postcombustión son los que actualmente cuentan con un mayor desarrollo, maduración y de la misma manera, presentan mayores eficiencias. Las tecnologías de captura postcombustión más conocidas son: absorción química o física, adsorción, separación criogénica y separación por membrana.

#### 2.4.2. Captura Precombustión

El CO<sub>2</sub> es capturado antes de que los combustibles fósiles sean quemados. Es aplicado en procesos de gasificación y en plantas de energía con captura de carbono integrada. El combustible es convertido en gas de síntesis, el cual es más fácil de separar y, por ende, de capturar el CO<sub>2</sub> presente antes de la combustión (Martín et al., 2012).

## 2.4.3. Captura de oxycombustión

Es un proceso utilizado en la industria para reducir las emisiones de CO<sub>2</sub> derivadas de la quema de combustibles fósiles, como el carbón o el gas natural. La oxycombustión implica la combustión de combustibles en oxígeno puro en lugar de aire, lo que resulta en una corriente de gas de combustión compuesta principalmente de vapor de agua y CO<sub>2</sub> (Martín et al., 2012).

#### 2.5. Simulación en Aspen Plus

ASPEN (Advanced System for Process ENgineering) se basa en una simulación de hoja de proceso. Una simulación de hoja de proceso es un software que se utiliza para modelar cuantitativamente una planta de procesamiento químico, que además de la unidad central de reactor, también incluye pasos de pretratamiento y post-tratamiento. Así, la simulación de un proceso químico completo, desde la materia prima hasta el producto final, se representa simbólicamente mediante diferentes íconos, donde cada ícono representa una operación unitaria, un proceso químico, un flujo de material de entrada/salida, un flujo de energía de entrada/salida o una señal eléctrica/neumática de entrada/salida (Al-Malah, 2017).

En términos de la notación de hoja de proceso de Aspen Plus, habrá un ícono de bloque y un ícono de flujo. El simulador de hoja de proceso icónico, como Aspen Plus, permite predecir el comportamiento de un proceso utilizando relaciones de ingeniería básicas. Como se enseña en cursos de modelado y simulación de proceso, se describe un proceso físico mediante un conjunto de ecuaciones algebraicas/diferenciales linealmente independientes, de modo que el número de ecuaciones escritas sea igual al número de variables, y se dice que el proceso físico como tal está especificado o descrito por una representación equivalente (Al-Malah, 2017).

En general, la redacción de dichas ecuaciones se deriva de:

- Ecuaciones de balance de propiedades termodinámicas extensivas, como masa, moles y energía.
- Relaciones termodinámicas para medios reactivos y no reactivos, como equilibrio de fases y químico.
- Correlaciones de velocidad para transferencia de momento, calor y masa.
- Estequiometría de reacciones y datos cinéticos.
- Restricciones físicas impuestas al proceso.

Con datos termodinámicos precisos, condiciones de operación cuidadosamente seleccionadas y modelos de equipos detallados, Aspen Plus tiene la capacidad de simular el comportamiento real de una planta. Su capacidad de simulación de hojas de proceso permite la realización de diversas tareas, como pruebas de escenarios hipotéticos, verificación de especificaciones de diseño, estudios de desbloqueo de partes restrictivas de procesos, análisis de sensibilidad y exploración de optimización. Este simulador de procesos facilita el diseño eficiente de nuevas plantas y la mejora de la rentabilidad en instalaciones existentes. Además, la simulación de hoja de proceso de Aspen Plus resulta beneficiosa en todas las etapas del ciclo de vida de un proceso, desde conceptos iniciales de investigación y desarrollo hasta operaciones de planta y modificaciones refinadas (Al-Malah, 2017).

En términos generales, un proceso químico implica el tratamiento físico o químico de componentes químicos para agregar valor o convertir materias primas en productos finales. Los pasos físicos incluyen mezcla, separación y cambios de temperatura, mientras que los pasos químicos involucran reacciones que alteran la identidad de las especies. En el simulador de hoja de proceso, estos pasos se representan visualmente mediante componentes transportados entre unidades a través de corrientes de proceso (Al-Malah, 2017). Para traducir un proceso a un modelo de simulación en Aspen Plus, se deben seguir pasos clave. Primero, se especifican los componentes químicos y los modelos termodinámicos asociados. Luego, se define la hoja de proceso, incluyendo operaciones unitarias, corrientes de proceso y modelos seleccionados de la Biblioteca de Modelos de Aspen Plus. Las tasas de flujo y las condiciones termodinámicas se especifican, junto con las condiciones de operación para los modelos de operación unitaria. Este enfoque permite una representación detallada del proceso, desde la investigación inicial hasta las operaciones y modificaciones de planta refinadas (Al-Malah, 2017).

Las operaciones unitarias y reactores son descritos por modelos pre-determinados en Aspen Plus, encontrados en la tabla "Model Palette". Los modelos de reactores se describen en la Tabla 4.

Tab	la 4	I. L	Descr	ipcić	on de	e los	5 тоа	elos	de	react	tores	encon	traa	los	en A	Aspen	ΡI	us
-----	------	------	-------	-------	-------	-------	-------	------	----	-------	-------	-------	------	-----	------	-------	----	----

Modelo	Descripción	Uso
		La cinética de reacción es desconocida o no es
RStoic	Reactor estequiométrico	relevante, pero su estequiometría y extensión
		están dadas
		La estequiometría y la cinética de reacción son
RYield	Reactor de rendimiento	desconocidas o no son relevantes, pero se
		conoce la distribución de rendimientos
		Equilibrio químico de una y dos fases y equilibrio de
		fases simultáneo. El usuario debe especificar la
		estequiometría de la reacción y las condiciones
REquil	Reactor de equilibrio	del reactor. Si no se proporcionan
		especificaciones adicionales, el modelo "Requil"
		asumirá que las reacciones alcanzarán el
		equilibrio

# ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS

		Equilibrio químico y/o equilibrio simultáneo de fases
RGibbs	Reactor de equilibrio	y químico. Puede incluirse el equilibrio de fases
		sólidas. Este modelo no requiere estequiometría
		de reacción; sin embargo, el usuario debe
		especificar la temperatura y presión del reactor,
		o la presión y entalpía.
RCSTR	Reactor continuo de tanque agitado	Reactor de tanque agitado de una, dos o tres fases,
		con reacción que tiene lugar en la fase de vapor
		o líquida.
RPlug	Reactor de flujo pistón	Reactor de flujo pistón de una, dos o tres fases, con
		reacción que tiene lugar en la fase de vapor o
		líquida.
RBatch	Reactor por lotes	Reactor por lotes (batch) y semibatch con cinética
		de reacción conocida.

*Nota:* Adaptado de (Al-Malah, 2017)

Por otro lado, en la Tabla 5, se presenta la descripción de los equipos comúnmente utilizados en

procesos simulados en Aspen Plus.

Tabla 5. Mc	odelos de lo	s equipos	más importar	ntes encontrados	en Aspen Plus
-------------	--------------	-----------	--------------	------------------	---------------

Modelo	Descripción	Uso
Pump	Bomba	Aumenta la presión en fluidos incompresibles.
Compr	Compresor	Aumenta la presión en fluidos compresibles.

		Representa calentadores y enfriadores. También se
Heater	Intercambiador de calor simple	puede utilizar para establecer la condición
		termodinámica de una corriente.
HeatX	Intercambiador de calor riguroso	Calcula el balance de energía, caída de presión, área
		del intercambiador, las velocidades, entre otros.
		Se puede urilizar para absorción, extracción,
RadFrac	Método riguroso de destilación	destilación extractiva, destilación azeotrópica y
		destilación normal.
Sep	Separador (múltiples salidas)	Separación de componentes
Sep2	Separador (dos salidas)	Separación de componentes
		Trabaja en estado estacionario con una o varias
Flash2	Separador de fases	corrientes de materia de alimentación bajo
		determinadas condiciones de presión y
		temperatura, generando dos corrientes, una de
		vapor y otra líquida.

*Nota*: Adaptado de (Al-Malah, 2017)

# 2.6. Integración energética

En la mayoría de los procesos industriales, es esencial proporcionar calentamiento o enfriamiento a las corrientes principales. Históricamente, esta tarea se ha llevado a cabo mediante el uso de servicios industriales, como agua de refrigeración o vapor sobrecalentado, que se incorporan al proceso exclusivamente con el propósito de ajustar la temperatura de las corrientes y garantizar el cumplimiento de los objetivos de producción (Phan et al., 2022).

Hoy en día, la mayoría de los procesos industriales están diseñados para minimizar los costos de servicios industriales, aprovechando la integración energética de las corrientes dentro del proceso. La

#### ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS

integración energética implica aprovechar las corrientes de calor que requieren enfriamiento para calentar las corrientes más frías, y viceversa. Esta estrategia tiene el potencial de disminuir de manera considerable la dependencia de servicios industriales, lo que conlleva a una notable reducción de los costos operativos. Sin embargo, es importante destacar que este enfoque puede generar un aumento en los costos de inversión, lo cual presenta un desafío para el desarrollo óptimo de una Red de Intercambio de Calor (HEN: *Heat Exchenger Net*) en diversos procesos industriales. A pesar de que la mayoría de los procesos implementan la integración energética, es común que no se diseñe de la manera más eficiente posible. En este contexto, programas como *Aspen Energy Analyzer* desempeñan un papel crucial. No solo ofrecen diversas configuraciones de redes de intercambio de calor, sino que también cuentan con métodos para optimizarlas en función de criterios como el área de intercambio o los costos de los intercambiadores. Estas herramientas son fundamentales para mejorar continuamente la eficiencia y rentabilidad de los procesos industriales (AspenTech, 2008)

La implementación de una red de integración energética eficaz tiene el potencial de generar ahorros económicos significativos para las empresas. Por lo tanto, a pesar de que la integración energética tuvo sus inicios en la década de 1970, es una práctica común en la mayoría de los procesos en la actualidad (Kemp, 2006).

Otro aspecto relevante que destaca la importancia de la integración energética está relacionado con las preocupaciones medioambientales derivadas del uso de servicios industriales. Aunque se señala a menudo el uso de hornos como la principal fuente de impacto ambiental, no es la única. Una actividad frecuentemente pasada por alto que afecta al medio ambiente es el empleo de agua previamente calentada o enfriada. Al ser vertida nuevamente al entorno natural, esta agua suele tener una temperatura diferente, lo que puede tener consecuencias negativas en los organismos que habitan el agua. El análisis Pinch proporciona una metodología sistemática para el ahorro de energía en los procesos industriales, siendo una de las metodologías más utilizadas para integrar energéticamente los procesos. Se basa en principios termodinámicos. Particularmente, este análisis busca relacionar la entalpía acumulativa de las corrientes frías y calientes en función de la temperatura obteniendo las llamadas curvas del proceso como se ilustra en la **Figura 2**. Por lo tanto, el análisis Pinch permite determinar el calor máximo recuperable de un proceso, que es la superposición entre sus corrientes frías y calientes a una cierta  $\Delta T_{min}$  (Nemet et al., 2015). Esta última es la diferencia mínima de temperatura entre las corrientes frías y calientes (Kemp, 2006). El valor de  $\Delta T_{min}$  debe determinarse para cada proceso. De acuerdo conPethe et al., 2022, el  $\Delta T_{min}$  para procesos de producción de hidrógeno a partir de reformado es de 20 °C, de esta manera, para el presente estudio se estableció en dicho valor (Phan et al., 2022a).

De esta manera, el análisis Pinch también permite calcular las cargas restantes de calor y frío, que deben ser manejadas por servicios industriales (Kemp, 2006). El servicio industrial de calor ( $Q_H$ , kW) representa la energía térmica externa requerida, mientras que el servicio de enfriamiento ( $Q_C$ , kW) representa la energía térmica interna generada por el proceso, pero que no puede ser reutilizada.

Aunque existe un considerable interés tanto en el ámbito industrial como ambiental sobre el uso del biogás, es fundamental profundizar en los impactos técnicos, económicos y ambientales relacionados con la incorporación del biogás como materia prima en procesos de reformado con vapor de agua y en seco. Este enfoque busca determinar si la adopción de una fuente renovable en estos procesos puede efectivamente resultar en una reducción sustancial de costos y de la huella de carbono. Además, destaca la necesidad de reconocer la importancia de la integración energética en los procesos mencionados, especialmente en el reformado de metano con vapor de agua.

A pesar de la existencia de estudios relacionados con los costos de producción de hidrógeno y el conocimiento generalizado sobre la implementación de redes de intercambio para la integración

energética en la mayoría de los procesos, la falta de documentación específica sobre las configuraciones utilizadas plantea una brecha de conocimiento. Por ende, es crucial llevar a cabo un análisis que permita identificar y establecer una red de intercambio óptima. Esta tarea tiene como objetivo minimizar los costos asociados con servicios industriales de calentamiento y enfriamiento, aportando así una contribución valiosa a la eficiencia y sostenibilidad de estos procesos.

Figura 2. Análisis Pinch: Ilustración de las curvas compuestas.



Entalpía, kW

Nota: Adaptado de Phan et al., 2022

# 3. Objetivos

## 3.1. Objetivo general

Analizar el uso de biogás como materia prima en procesos de reformado de metano con vapor de agua y en seco para cuantificar el impacto ambiental y la variación de los costos con respecto al uso de gas natural para la producción de hidrógeno

## 3.2. Objetivos específicos

- Evaluar comparativamente los procesos de producción de hidrógeno por reformado convencionales cuando se usa biogás.
- Determinar la variación de los costos de producción de hidrógeno a partir de las técnicas de reformado de metano utilizando biogás como materia prima respecto al uso de gas natural.
- Cuantificar el impacto ambiental del uso de biogás como materia prima en reformado de metano respecto al uso de gas natural para la producción de hidrógeno.

## 4. Metodología general

Para evaluar el uso de biogás en los procesos de reformado de metano con vapor de agua y en seco para la producción de hidrógeno, se distribuyó la metodología en 3 etapas como se muestra en la **Figura 3**. La primera corresponde a la construcción de los casos base de los reformado de metano de biogás y gas natural para posteriormente analizarlos de manera comparativa, a partir del cálculo de índices de consumo de calor, de materia prima e intensidad de carbono. Para la segunda etapa se realizó un estudio económico que permitió determinar costos nivelados de producción de hidrógeno, así como el estimado de inversiones y costos operativos. En la tercera etapa se realizó una integración energética a partir de un análisis Pinch, que permitió encontrar la Red de Intercambio de Calor (HEN: *Heat Exchenger Net*) óptima del proceso de SMR a partir de gas natural. Y finalmente, se adicionó al caso base, una etapa de captura de carbono con monoetanolamina (MEA), permitiendo cuantificar las emisiones de CO<sub>2</sub> evitadas y los costos adicionales por la implementación de esta etapa.





#### 5. Estudio técnico

En este capítulo, se presenta un análisis detallado que explora la relación entre el consumo de energía, materia prima y servicios industriales respecto a la cantidad producida de H<sub>2</sub> (índices de consumo e intensidad de carbono). Este enfoque proporciona una perspectiva integral sobre la eficacia de las tecnologías examinadas. La metodología empleada para la realización de este estudio técnico se expone en detalle en las secciones subsecuentes, delineando los pasos cruciales y los parámetros considerados. Esta introducción establece los cimientos para una comprensión más profunda de la evaluación técnica que se desarrolló en los segmentos siguientes de este trabajo.

## 5.1. Metodología del desarrollo del estudio técnico

## 5.1.1. Simulación

Para el cálculo de los índices que determinan la eficiencia de los diferentes procesos, se simularon las tecnologías SMR y DMR con biogás y gas natural, en el software Aspen Plus V 12.1.

#### 5.1.1.1. Reformado de Metano con Vapor de Agua y Reformado de Metano en Seco

Como modelo termodinámico de la tecnología de SMR que usa biogás como materia prima, se escogió la ecuación estado de Peng Robinson-MHV2 (PRMHV2), la cual es una versión modificada de la ecuación de estado Peng Robinson (PR), ya que permite describir el comportamiento de componentes polares y no polares, como es el caso de la mezcla del biogás.

Para la tecnología de SMR alimentada con gas natural, la ecuación de estado utilizada fue Peng Robinson con modificaciones Boston Mathias (PRBM) (Khojasteh Salkuyeh et al., 2017). La escala manejada para la simulación de las dos tecnologías a que usan gas natural fue industrial con una producción de 8.000  $kg H_2/h$ .

Los procesos de DMR con gas natural y biogás fueron simulados con la ecuación de estado PR, ya que permite el manejo de mezclas como el gas de síntesis y además es capaz de predecir fases líquidas y gaseosas presentes en el proceso. La escala de operación para estas dos tecnologías de reformado de
metano a partir de biogás fue piloto, con una producción de 6,5  $kg H_2/h$ , y para las tecnologías de reformado de metano a partir de gas natural fe industrial, con una producción de 8.000  $kg H_2/h$ .

En la **Tabla 6** se muestra la información necesaria para la sección de propiedades consideradas en el desarrollo del caso base.

Tecnología	Materia prima	Sustancias	Escala	Ecuación de estado
	Biogás	CH <sub>4</sub> , H <sub>2</sub> O,	Piloto	PR
DMR	Cospotural	CO <sub>2</sub> ,	Industrial	DD
	Gas natural	CO, H <sub>2</sub>	industriai	FΛ
	Biogás	CH4, H2O,	Piloto	PRMVH2
SMR Gas natura		CO <sub>2</sub> ,	Industrial	PR-BM
	Gas natural	CO, H <sub>2</sub>		

 Tabla 6. Consideraciones principales para la selección de propiedades en Aspen Plus

Los reactores de la etapa de reformado fueron simulados como modelos cinéticos PFR, excepto para el proceso de SMR con biogás, el cual fue simulado como RGibbs, mientras que los reactores de la etapa de WGS fueron simulados como reactores de equilibrio REquil (Khojasteh Salkuyeh et al., 2017; Su et al., 2022). Las bombas y compresores utilizados en los procesos fueron simulados con los modelos Pump y Compr, respectivamente, mientras que los intercambiadores de calor y calentadores fueron simulados a partir del modelo Heater. La etapa de recuperación del H<sub>2</sub> producido se simuló como un modelo Flash2, con una recuperación del 85% del total del H<sub>2</sub> que entra a la unidad (Al-Malah, 2017; Khojasteh Salkuyeh et al., 2017).

En la **Tabla 7** se muestran las condiciones de operación y los modelos seleccionados para los equipos más importantes en las tecnologías de reformado de metano.

		SMR		DI	٧R	
		Biogás	Gas natural	Biogás	Gas natural	
Reactor	T [ °C]	909	850	750	700	
reformado	P [bar]	16	25	5	5	
	Modelo	RGibbs	PFR Cinético	PFR Cinético	PFR Cinético	
	T [ °C]	457	455	340	340	
HTS_WGS	P [bar]	16	25	5	5	
	Modelo	REquil	REquil	REquil	REquil	
	T [ °C]	238	266	216	216	
LTS_WGS	P [bar]	16	25	5	5	
	Modelo	REquil	REquil	REquil	REquil	
	T [ °C]	38	38	38	38	
PSA	P [bar]	16	25	5	5	
	Modelo	Flash2	Flash2	Flash2	Flash2	

Tabla 7. Modelos y condiciones de operación de los equipos

#### 5.1.1.1.1. Cinética de reactores de reformado de metano con vapor de agua y en seco

Los reactores de reformado para las tecnologías estudiadas fueron simulados a partir del modelo PFR disponible en Aspen Plus, regido por la formulación cinética *LHHW*. La expresión genérica usada en Aspen Plus para simular el reactor PFR se muestra en la Ecuación 9:

 $r = \frac{[Factor\ cinético] * [Término\ de\ fuerza\ impulsora]}{[Término\ de\ adsorción]}$ 

Ecuación 9

Para este trabajo, la expresión cinética LHHW del reactor de reformado del SMR fue obtenida del

trabajo realizado por Xu & Froment, 1989 y la del DMR fue obtenida de Foo et al., 2011.

## a. Cinética de la reacción de reformado de metano con vapor de agua

Las expresiones de velocidades de reacción para el SMR se muestran en las Ecuaciones 10 y 11:

$$r_{SMR} = \frac{k_{SMR}}{P_{H_2}^{2.5}} \frac{P_{CH_4} P_{H_2O} - (\frac{P_{H_2}^3 P_{CO}}{K_{eq,SMR}})}{DEN^2}$$

Ecuación 10

$$r_{WGS} = \frac{k_{WGS}}{P_{H_2}} \frac{P_{CO} P_{H_2O} - (\frac{P_{H_2}P_{CO}}{K_{eq,WGS}})}{DEN^2}$$

## Ecuación 11

Los parámetros cinéticos y de adsorción para las tasas cinética de las reacciones de SMR y WGS

sobre el catalizador seleccionado Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> se muestran en la **Tabla 8** (Tacchino et al., 2022).

Tabla 8.	Parámetros	cinéticos v d	de adsorción	de las	velocidades	de las	reacciones SMR	v WGS
	i ai ai iic ti oo	chiecticos y c		ac ius	Verocradues	ac ras	reacciones simil	,

Parámetros de reacción	Unidades	Valor
k <sub>SMR</sub>	$\frac{mol \ Pa^{0.5}}{kg \ s}$	5,79*10 <sup>6</sup>
k <sub>WGS</sub>	mol kg s Pa	9,33*10 <sup>7</sup>
K <sub>CO</sub>	<i>Pa</i> <sup>-1</sup>	8,25
<i>K</i> <sub><i>H</i><sub>2</sub></sub>	$Pa^{-1}$	6,15*10 <sup>-4</sup>
K <sub>CH4</sub>	<i>Pa</i> <sup>-1</sup>	66,6
<i>K</i> <sub><i>H</i><sub>2</sub><i>O</i></sub>	$Pa^{-1}$	1.77

#### ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS

$E_{SMR}$	<i>kJ/mol</i> 217.01	
E <sub>WGS</sub>	kJ/mol 68.20	

Donde:

 $k_i$ : Factor cinético de equilibrio de la reacción j.

*K<sub>i</sub>*: Constante de adsorción o desorción del componente i.

 $E_i$ : Energía de activación de la reacción j.

Y se encuentran definidos en las ecuaciones 12 y 13.

La

Ecuación 12 muestra el término de adsorción de las velocidades de reacción denominado como

DEN.

$$DEN = 1 + K_{CO}P_{CO} + K_{H_2}P_{H_2} + K_{CH_4}P_{CH_4} + \frac{K_{H_2O}P_{H_2O}}{P_{H_2}}$$

Ecuación 12

Tendiendo para cada constante de reacción y de adsorción las siguientes expresiones:

$$k_j = k_{0j} * e^{\frac{-E_j}{RgT}}, \qquad j = SMR, WGS$$

Ecuación 13

$$K_i = K_{0i} * e^{\frac{-\Delta H_i}{RgT}}, \qquad i = CO, H_2, CH_4, H_2O$$

Ecuación 14

El reactor cinético para esta tecnología se modeló a partir del estudio de Tacchino et al., 2022. En

la Tabla 9 se muestran las especificaciones necesarias para el modelo cinético multi-tubular.

Especificaciones del reactor	Gas natural
Número de tubos	14.500
Longitud de los tubos	12,5 m
Diámetro de cada tubo	11,4 cm
Vacío del lecho	0,607
Densidad del catalizador	1.100 kg/m <sup>3</sup>

Tabla 9. Especificaciones y parámetros del reactor cinético multi-tubular SMR

#### b. Cinética del reactor de reformado de metano en seco

La ecuación de la velocidad cinética para esta reacción se muestra en la Ecuación 15 y fue obtenida de Foo et al., 2011, quienes investigaron el rendimiento de catalizadores 5Co-15Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> promovidos con Ce y dopados para el reformado en seco de CH<sub>4</sub> en un reactor de lecho fijo.

$$r_{DMR} = \frac{k_1 \sqrt{P_{CH_4}} \sqrt{P_{CO_2}}}{(1 + \sqrt{k_2 P_{CH_4}})(1 + \sqrt{k_3 P_{CO_4}})}$$

Ecuación 15

La reacción RWGS también fue incluida en el modelo, asumiendo primer orden de reacción para cada reactante (*Ecuación 16*), la expresión de velocidad de reacción fue obtenida de Wang et al., 2018.

$$r_{RWGS} = \frac{k_4 (P_{CO} \frac{P_{H_2O}^{0.5}}{P_{H_2}^{0.5}}) (\frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{k_5 P_{CO} P_{H_2O}} - 1)}{\left(1 + k_6 P_{CO} + k_7 P_{H_2}^{0.5} + k_8 \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2}}\right)^2}$$

#### Ecuación 16

Este catalizador fue estudiado por Foo et al., 2011 debido a la alta resistencia a la formación de coque que proporciona durante la reacción (Balaji et al., 2020). Las constantes cinéticas de reacción siguen el mismo formato de la ecuación de Arrhenius mostrada en

*Ecuación 13* y los valores de los parámetros usados se listan en la Tabla 10 y 11.

Factor pre exponencial	Unidades	Valor
k_10	$mol/(g_{cat} \ s \ kPa)$	12,32*10 <sup>-3</sup>
k <sub>20</sub>	$kPa^{-1}$	1,07*10 <sup>-12</sup>
K <sub>30</sub>	$kPa^{-1}$	1,38*10 <sup>-5</sup>
K <sub>40</sub>	kmol <sub>/kg<sub>cat</sub> s kPa</sub>	6,028*10 <sup>-4</sup>
$k_{50}$	_	1,767*10 <sup>-2</sup>
k <sub>60</sub>	kPa <sup>-1</sup>	5,127*10 <sup>-13</sup>
k <sub>70</sub>	$kPa^{-0.5}$	5,68*10 <sup>-10</sup>
k <sub>80</sub>	_	9,251

 Tabla 10. Factores pre-exponenciales de la reacción DMR y RWGS

 Tabla 11. Energías de activación de las constantes cinéticas de las reacciones DMR y RWGS

Energía de activación	Unidades	Valor
E <sub>1</sub>	kJ/mol	56,4
$E_2$	kJ/mol	98,31
E <sub>3</sub>	kJ/mol	61,92
$E_4$	kJ/mol	15,4
$E_5$	kJ/mol	36,6
E <sub>6</sub>	kJ/mol	-140
$E_7$	kJ/mol	-93,4

E<sub>8</sub> *kJ/mol* 15,9

Los reactores cinéticos para DMR con biogás y gas natural se modelaron con base en el estudio de Balaji et al., 2020. En la **Tabla 12** se muestran las especificaciones del reactor y del catalizador utilizado, siendo un reactor de lecho fijo.

Especificaciones del reactor	Biogás	Gas natural
Longitud del reactor	1 m	6,39 m
Diámetro del reactor	0,3 m	0,639 m
Vacío del lecho	0,4	0,4
Densidad del catalizador	3.030 kg	3 30 ka/m <sup>3</sup>
	/m <sup>3</sup>	5.50 Kg/M

Tabla 12. Especificaciones y parámetros del reactor cinético DMR y del catalizador

## 5.1.2. Determinación de emisiones de CO<sub>2</sub>

Para el cálculo de las emisiones de CO<sub>2</sub> se tuvo en cuenta el aporte de las actividades relacionadas con calentamiento (intercambiadores de calor), cambio de presiones (bombas y compresores) y reacciones endotérmicas (reactores SMR-DMR, HTS y LTS) a partir de los factores de emisiones encontrados en Rodríguez et al., 2020 y el aporte que tiene la producción de CO<sub>2</sub> como producto no deseado dentro de las tecnologías de SMR y DMR. Para el primer caso se utilizó la

Ecuación 17.

Emisión<sub>fuente GEI</sub> = factor de emisión \* Actividad

Ecuación 17

El factor de emisión toma valores distintos según la actividad que se esté analizando, según el Ministerio de Minas y Energía, este valor es de  $0,2 kg CO_2/kWh$  para uso de gas natural y de  $0,16 kg CO_2/kWh$  para uso de energía eléctrica en Colombia (Rodríguez et al., 2020). La actividad hace referencia al gasto de electricidad o de gas natural en kWh para cada uno de los equipos utilizados en el proceso.

## 5.2. Resultados y discusión del estudio técnico

## 5.2.1. Intensidad energética y de consumo

Diferentes índices fueron calculados a partir de los resultados obtenidos de las simulaciones de las tecnologías, entre estos encontramos: índices de consumo de CH<sub>4</sub>, consumo de H<sub>2</sub>O, intensidad de  $CO_2$  (relación entre la huella de carbono y la producción de H<sub>2</sub>) y consumo de calor, por cada kg de H<sub>2</sub> producido, presentados en la **Figura 4**.







*Nota:* El color naranja hacer referencia a las tecnologías DMR con gas natural y biogás, mientras que el color morado se refiere a las tecnologías SMR con gas natural y biogás. 1. Índice de consumo de materia prima, 2. Índice de consumo de H<sub>2</sub>O, 3. Intensidad de CO<sub>2</sub> producido, 4. Índice de consumo de calor, por cada kg de H<sub>2</sub> producido.

Cómo se observa en la **Figura 4**-1, el índice de consumo de materia prima fue mayor en la tecnología DMR con biogás, respecto a las demás tecnologías. Esto debido a que la reacción de reformado en seco tiene una relación estequiométrica CH<sub>4</sub>:H<sub>2</sub> de 1:1, mientras que para la reacción de reformado de metano con vapor esta relación es de 1:3 CH<sub>4</sub>:H<sub>2</sub>. Por otra parte, el consumo de agua es mayor para la tecnología de DMR con gas natural, ya que en la segunda etapa de todas las tecnologías se utiliza agua para que ocurra la reacción WGS (Ecuación 2), sin embargo, para las tecnologías SMR, el agua no reaccionante de la primera etapa es utilizada en esta etapa, provocando que el agua alimentada para promover las reacciones sea menor en comparación con las tecnologías DMR. Aunque las tecnologías de

DMR utilizan CO<sub>2</sub> como reactivo para la primera etapa del proceso, son las que más CO<sub>2</sub> producen por cada kg de H<sub>2</sub> producido, ya que los requerimientos de servicios industriales de electricidad aumentan al intentar alcanzar una producción de 8.000 kg/h, puesto que se debe alimentar una gran cantidad de H<sub>2</sub>O como materia prima para la segunda etapa y según Rodríguez et al., 2020 en Colombia cada *kWh* obtenido de la red acarrea una huella de carbono de 0,164 kg.Por otra parte, el consumo de H<sub>2</sub>O se refiere al consumo como reactivo en las diferentes etapas de los procesos de reformado. Aunque las tecnologías de DMR no utilizan agua como materia prima en la primera etapa, esta, debe ser alimentada a la segunda (WGS), ya que la reacción utiliza agua como reactivo. Este suministro debe ser de 9 kg H<sub>2</sub>O/kg H<sub>2</sub> para DMR con gas natural, debido a la necesidad de aumentar la producción de H<sub>2</sub>.

#### 5.3. Conclusiones

La tecnología de SMR con gas natural presenta altos requerimientos de energía en forma de calor, debido a los constantes cambios de temperatura que deben ser efectuados durante todo el proceso. El consumo de materia prima es el segundo menor, después del DMR con gas natural, con un valor de 3,4 kg por cada kg de H<sub>2</sub> producido. Sin embargo, resulta ser la más viable ambientalmente, pues registra los valores más bajos de producción de CO<sub>2</sub> y de consumo de H<sub>2</sub>O como reactivo por cada kg de H<sub>2</sub> producido, siendo de 7,02 kg/kg y 6,7 kg/kg, respectivamente. De esta manera, aunque el índice de intensidad de CO<sub>2</sub> sea el menor de todas las tecnologías estudiadas, es necesario realizar una captura que disminuya las emisiones, ya que estas representan un 76% de la huella de carbono del proceso (ver **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**), garantizando que el H<sub>2</sub> producido sea considerado de bajas emisiones o azul.

Además, el estudio técnico indica que las tecnologías de reformado de metano que utilizan  $CO_2$ como materia prima no son las más adecuadas para la producción limpia de  $H_2$ . El DMR con biogás demostró bajos rendimientos comparado con el SMR con biogás , algo contrario a lo esperable, ya que el biogás al contener  $CH_4$  y  $CO_2$  fue considerado como un candidato prometedor en la producción de  $H_2$  a partir de esta tecnología, sin embargo, estos resultados pueden ser explicados a partir de la estequiometría de la reacción de reformado en seco, pues relaciones molares muy bajas (CH<sub>4</sub>:H<sub>2</sub> de 1:1), adicionalmente, para promover el aumento de concentración de H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> en el gas de síntesis fue necesario un alimento de H<sub>2</sub>O a la segunda etapa, aumentando su consumo con respecto a las tecnologías de SMR.

## 6. Estudio económico

Para el estudio económico se utilizó la metodología Lang y Guthrié (Turton et al., 2001) determinando los costos de capital o equipamiento (CapEx). Para los costos de operación (OpEx) se tuvieron en cuenta las horas de operación de las plantas, los costos de materia prima (CRM: *Cost Raw Material*) y de servicios industriales (CUT: *Cost Utilities*) con el fin de obtener el costo nivelado de H<sub>2</sub> (LCOH) de cada una de las tecnologías.

#### 6.1. Metodología del desarrollo del estudio económico

#### 6.1.1. Costos de capital (CapEx)

A partir de la metodología Lang y Guthrié de Turton et al., 2001, se calcularon los costos de todos los equipos a excepción del costo de la unidad PSA, que fue calculada a partir de la regla de los seis décimos (Yan et al., 2020).

Todos los datos sobre los costos de compra de los equipos encontrados en Turton et al., 2001 se obtuvieron de la recolección de datos de fabricantes de dichos equipos durante el periodo comprendido entre mayo y septiembre de 2001, por lo que se toma un valor promedio de CEPCI de 397 que debió ser utilizado para contabilizar la inflación.

Este costo se denomina costo de modulo desnudo y está representado como  $C_{BM}$  y se calcula a partir de una serie de pasos, como se muestra en **Apéndice 5**.

 $C_{BM} = C^{\circ}{}_{p}F_{BM}$ 

## Ecuación 18

## 6.1.2. Costos de operación (OpEx)

Los costos de operación están compuestos por los costos de servicios industriales y de materia prima.

#### 6.1.2.1. Costos de servicios industriales

El cálculo de los costos de servicios públicos desempeña un papel importante en la determinación de la evaluación total de las plantas de reformado. El cálculo de la carga de calefacción y enfriamiento en Aspen Plus para cada una de las unidades proporcionó la base para el cálculo del costo de servicios industriales. En este caso, los servicios públicos son agua para la refrigeración, gas para la calefacción y electricidad. La **Tabla 13** muestra los costos de servicios industriales utilizados para los cálculos.

Los valores típicos de servicios públicos (electricidad, gas natural y agua) mostrados en la **Tabla** *13* y la información de consumo de energía eléctrica, servicios de enfriamiento y calentamiento obtenidos a partir de la simulación fueron utilizados para el cálculo de los servicios industriales **Tabla 13.** *Valores base del costo de servicios públicos.* 

Tipo de utilidad	Costo	Referencia
Gas natural	0,009 USD/MJ	(Saldarriaga-C. & Salazar, 2016)
Agua	0,02 <i>USD/m</i> <sup>3</sup>	(Albiac-Murillo et al., n.d.)
Electricidad	0,052	(Gómez-Navarro & Ribó-Pérez, 2018)

#### 6.1.2.2. Costos de materia prima

Los costos de materia prima fueron calculados a partir de información encontrada en la recopilación bibliográfica, los cuales se adjuntan en la **Tabla 14**.

Materia Prima	Costo	Referencia
Gas natural	0,25 USD/kg	(Saldarriaga-C. & Salazar, 2016)
CO <sub>2</sub>	50 USD/ton	(H. ran Wang et al., 2023)
Biogás	0 USD/kg	-
Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	25 USD/kg	(Khojasteh Salkuyeh et al., 2017)
5Co-15Ni/80 Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	50 USD/kg	(Mondal et al., 2016)
$Cu/Fe_3O_4$ - $Cr_2O_3$	25 USD/kg	(Khojasteh Salkuyeh et al., 2017)

Tabla 14. Costos típicos de materia prima

Los OpEx se calcularon teniendo en cuenta un tiempo anual de operación de la planta de 8.322 horas, una producción diaria de 196.650  $kg H_2/d$  y 152,4  $kg H_2/d$ , para las escalas industrial y piloto, respectivamente.

#### 6.1.3. Costo nivelado de hidrógeno (LCOH)

El concepto de costo nivelado (LCO) es desarrollado inicialmente para determinar el precio de venta de la electricidad que permite solventar los costos asociados a un proyecto de generación de energía (Massachusetts Institute of Technology., 2007). Para determinar el LCO se consideran los costos de capital, operativos variables y fijos que ocurren durante la vida del proyecto (Reichelstein & Yorston, 2013). El concepto para determinar el LCO de la energía eléctrica puede ser aplicado a la generación de otros productos como el hidrógeno.

El LCOH fue calculado, a partir de los aportes que los CapEx y OpEx (en un valor presente neto VPN) tienen sobre este (*Ecuación 19*)(Kadhum, 2022). Para encontrar este valor, se utilizó la información presentada en la **Tabla 15**.

 $LCOH = \frac{VPN \ del \ costo \ total \ (CapEx + OpEx) \ en \ el \ tiempo \ de \ vida \ \acute{u}til \ del \ proyecto}{VPN \ de \ la \ producción \ total \ de \ H_2 \ en \ el \ tiempo \ de \ vida \ \acute{u}til$ 

## Ecuación 19

TIR	11%
Vida útil de la planta	20 años
Precio H <sub>2</sub>	4 USD/kg
Horas trabajadas al año	8,322
Producción Escala industrial	196.650 kg/día
Producción Escala Piloto	152,4 kg/día

Tabla 15. Vida útil de la planta, precio de venta de H<sub>2</sub> y horas de operación

## 6.2. Resultados y discusiones del estudio económico

A continuación, se presentan y analizan los resultados obtenidos en este capítulo.

## 6.2.1. Costos capitales

Los valores de los CapEx calculados se encuentran registrados en la Tabla 16 para todas las

tecnologías estudiadas.

Tabla 16. Costa	os de equip	amiento cal	culados (USD)
-----------------	-------------	-------------	---------------

	:	SMR con gas		DMR con gas					
Equipos		natural		natural		SIVIR CON DIOGAS		DIVIR CON DIOGAS	
Intercambiadores	\$	9.605.198	\$	14.878.308	\$	2.367.511	\$	3.054.431	
Compresores	\$	13.963.853	\$	6.144.001	\$	77.796	\$	7.181	
Bomba	\$	787.683	\$	167.447	\$	39.315	\$	52.628	
Reactores	\$	32.095.387	\$	55.977.467	\$	278.667	\$	299.700	
Unidad PSA	\$	18.482.552	\$	18.643.913	\$	55.579	\$	55.579	
TOTAL	\$	74.934.673	\$	89.499.687	\$	2.818.867	\$	3.409.711	

Se evidencia que los costos de las tecnologías a escala piloto se encuentran cerca de los 3.000.000 *USD*, mientras que los costos de las tecnologías a escala industrial se encuentran entre los 70.000.000 – 80.000.000 *USD*. Los porcentajes de los costos capitales obtenidos se muestran en la Figura 5.

En las tecnologías a escala piloto, los costos capitales se vieron altamente influenciados por los costos de intercambiadores, mientras que, para las tecnologías a escala industrial, la principal influencia fue de parte de los costos de reactores. Sin embargo, los costos de intercambiadores para las escalas industriales ocupan el tercer lugar después de la unidad PSA. Esta alta influencia de los intercambiadores dentro del cálculo de los CapEx se debe principalmente a la necesidad de equipos que garanticen los cambios de temperatura de las corrientes principales y cambios de fase en agua alimentada para las reacciones de SMR y WGS. Cabe aclarar que dentro de estos costos de intercambiadores también se encuentran los costos de calderas, evaporadores, calentadores y equipos que requieren alimentación de calor para su operación.

La diferencia entre los costos de las tecnologías a escala piloto e industrial se encuentran esencialmente en el gran porcentaje que representan los intercambiadores en las dos primeras, esto, debido a que, como se evidenció en la metodología de cálculo de los equipos, los parámetros más importantes para el cálculo de costos de intercambiadores y calentadores es su área de transferencia y calor requerido, respectivamente. Dichos parámetros para estos equipos en específico no tienen una variación lineal con el cambio de escala, ya que la relación escala/área resulta ser mucho mayor para escalas pequeñas que para escalas industriales, tal como se evidenció en la **Figura 5**.

Figura 5. Porcentajes de los costos de equipamiento de las tecnologías estudiadas

#### ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS



Como ya se había indicado en la metodología del presente capítulo, para plantas de reformado de metano de diferentes tamaños, la inversión de capital fijo también puede ser estimada utilizando el índice de Costos de Equipos de Ingeniería Química (CEPCI) cuyo método de cálculo se describe mediante la siguiente ecuación(Fan et al., 2022):

$$I_2 = I_1 * \left(\frac{Q_2}{Q_1}\right)^{\theta}$$

Ecuación 20

Donde,  $I_1$  y  $Q_1$  son la inversión de capital fijo y la capacidad de producción de un proyecto conocido, respectivamente.  $I_2$  y  $Q_2$  son la inversión de capital fijo y la capacidad de producción del proyecto planificado (el presente), respectivamente,  $\theta$  es el índice de escala, 0.6 es el valor común utilizado para procesos químicos (Claremont et al., 1993).

Utilizando la  $I_2=\!\!I1\!*(\frac{Q_2}{Q_1})^{\theta}$ 

Ecuación 20 y los valores CEPCI de los años en los que fueron realizados los estudios, se estimó el costo de algunas plantas con características similares a la estudiada en este trabajo, para una producción de 8.000  $kg H_2/h$ .

**Tabla 17.** Comparación entre costos de plantas de producción de H₂ a partir de SMR encontradas en la literatura y las tecnologías de este estudio, con una producción de 8000 kg/h

Ca	apEx [USD]	Tipo de tecnología	Referencia	
\$	78.913.964	SMR con gas natural	(Mio et al., 2023)	
\$	86.291.861	SMR con gas natural	(Khojasteh Salkuyeh et al., 2017)	
\$	73.615.446	SMR con gas natural	Este estudio	
\$	80.272.735	DMR con gas natural	(Rezaei & Dzuryk, 2019)	
\$	89.499.687	DMR con gas natural	Este estudio	

Existe una variación de los costos del 6,7% entre los CapEx obtenidos para la tecnología SMR con gas natural de este estudio y el estudio de Mio et al., 2023, mientras que la comparación aplicada con el estudio Khojasteh Salkuyeh et al., 2017, tuvo una diferencia de cerca de 15%. Esta diferencia, puede verse influenciada por los constantes cambios a través del tiempo en los valores CEPCI, que resultan realmente importantes a la hora de determinar el costo actual de una planta como la descrita y estudiada por Khojasteh Salkuyeh et al., 2017.

Por otro lado, la comparación entre las tecnologías de DMR con gas natural del estudio actual y el estudio realizado por Rezaei & Dzuryk, 2019 dio como resultado una diferencia del 11,5% entre los costos obtenidos. Es importante tener en cuenta que existe un número reducido de estudios de producción de H<sub>2</sub> a partir de DMR, ya que usualmente, es una tecnología desarrollada y estudiada para producción de gas de síntesis con características propias para la síntesis de Fischer-Tropsch

(Gangadharan et al., 2012).

### 6.2.2. Costos operativos

Los costos operativos obtenidos se encuentran en la **Tabla 18**, donde *CUT* se refiere a los costos de servicios industriales y *CRM* hace referencia a los costos de materia prima.

Concepto	SMR	con gas natural	DMR	con gas natural	SMR	t con biogás	DM	IR con biogás
CUT	\$	111,028,795	\$	124,283,282	\$	22,373	\$	22,145
CRM	\$	51,111,090	\$	65,475,466	\$	9,153	\$	13,586
TOTAL	\$	162,139,885	\$	189,758,748	\$	31,527	\$	35,731

**Tabla 18.** Costos operativos de las tecnologías estudiadas

Los porcentajes de los costos operativos se muestran en la **Figura** *6*, donde se evidencia que, para todas las tecnologías, la mayor incidencia sobre los OpEx fue por parte de los costos de servicios industriales, superando en todas el 65% del total de estos.



Figura 6. Porcentajes de los costos operativos de todas las tecnologías estudiadas

Los porcentajes de los costos de materia prima para las tecnologías de DMR fueron ligeramente mayores que los obtenidos para SMR, debido a que dentro de los *CRM* también se encuentran los costos de los catalizadores utilizados, donde el precio encontrado para el catalizador 5Co-15Ni/80 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> es casi dos veces mayor que el encontrado para el catalizador Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

#### 6.2.3. Costo nivelado de hidrógeno (LCOH)

El LCOH calculado para cada una de las tecnologías se muestra en la **Figura 7**. Según los resultados, la relación de los costos sobre la cantidad de hidrógeno producido es mucho mayor para las tecnologías a escala piloto, obteniendo 18 y 11 USD/kg para DMR con biogás y SMR con biogás respectivamente, esto, claramente significa que no existe una relación linealmente proporcional entre la escala del proceso y el costo de su implementación. Los valores de LCOH obtenidos para el SMR con gas

natural y DMR con gas natural fueron de 3,3 y 2,5 USD/kg, respectivamente, indicando que la tecnología con mayor viabilidad económica es el SMR con gas natural, ya que permitiría una ganancia de 1,5 USD por cada kg de H<sub>2</sub> vendido.



Figura 7. Comparación de los LCOH obtenidos para cada tecnología

#### 6.3. Conclusiones

Las tecnologías de DMR no son competitivas económicamente para la producción de H<sub>2</sub> comparadas con las de SMR. La tecnología con mayor viabilidad económica es la SMR con gas natural, sin embargo, teniendo en cuenta los análisis técnicos y económicos, es necesario disminuir los costos relacionados con servicios industriales: enfriamiento y calentamiento de corrientes principales. Esta disminución es posible realizarla a partir de una integración energética que permita el aprovechamiento de la energía de la corriente principal.

#### 7. Integración energética (IE)

Se realizó una integración energética sobre la tecnología de SMR con gas natural con el fin de conocer la red óptima de intercambio de calor entre los equipos que necesitan enfriamiento y calentamiento y de esta manera disminuir huella de carbono y costos de servicios industriales.

## 7.1. Metodología de la Integración Energética

Para generar redes de intercambio que permitan la integración de corrientes de un proceso es necesario que las curvas generadas a través del análisis Pinch no se intersequen, y que el  $\Delta T_{min}$  no sea menor al que por defecto, el proceso de reformado de metano tiene (20°*C*).

Para conocer la posibilidad de aplicar la integración energética al proceso de SMR, se siguió el proceso metodológico mostrado en la **Figura** *8*.

Primero se realizó un análisis Pinch que involucró todas las corrientes del proceso que necesitaron de servicios industriales. A partir de los  $\Delta T$  de cada segmento de las corrientes y la entalpía media en esos procesos, se generó la gráfica mostrada en la **Figura 9**.

Figura 8. Etapas metodológicas para la aplicación de integración energética en un proceso



Como se puede ver en la gráfica, el  $\Delta T$  para este proceso fue de 850 °C aproximadamente, valor muy superior al mínimo requerido (20°C) lo que permite integrarla térmicamente. También se observa que al realizar la integración se lograría suplir la mayoría de los servicios de calentamiento, y que es necesario retirar 166,000 kW (Qc) de las corrientes calientes.

#### ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS



Figura 9. Análisis Pinch del proceso de SMR con gas natural

A partir de *Aspen Energy Analyzer* V 12.1 (AEA), extensión de Aspen plus, se generaron diferentes redes de intercambio de calor a través de la metodología *Cheapest Utility Principle* (CUP), utilizada para decidir qué utilidades implementar en una red de intercambiadores de calor de manera rentable. Tiene en cuenta la inversión de capital y el costo energético al calcular los objetivos para la carga de utilidad. Su importancia sobre el diseño de las redes de intercambio es doble: I) la red generada con base a estos objetivos es casi óptima, II) la red puede ser generada utilizando el método convencional de diseño Pinch. A través de esta metodología, se garantiza que las redes diseñadas están cercanas al óptimo.

#### 7.2. Resultados y discusión del desarrollo de la Integración Energética

AEA generó 6 diseños de redes de intercambio que permiten la integración de las corrientes principales del proceso SMR de gas natural, la reducción de costos operativos fue la misma para todos los diseños respecto al caso base, siendo del 79%.

	Costos totales	Costos operativos					
	[USD/kg H <sub>2</sub> ]						
Caso base	1,70	1,67					
Diseño 6	0,380	0,349					
Diseño 1	0,369	0,349					
Diseño 4	0,368	0,349					
Diseño 2	0,368	0,349					
Diseño 3	0,363	0,349					
Diseño 5	0,363	0,349					
Diseño 5-op	0,362	0,349					

Tabla 19. Costos totales y operativos de los diseños generados por AEA

El diseño 5 presentó una mayor disminución sobre los costos totales con respecto al caso base, dicha disminución fue de cerca del 78%. Teniendo en cuenta que este diseño fue el que mejores resultados presentó, se optimizó en el mismo programa, disminuyendo los costos de 0,363 a  $0,362 USD/kg H_2$  sin embargo, la disminución no fue muy alta, debido a que el método de cálculo para los diseños genera HEN's muy cercanos al óptimo.

El diseño de la red de intercambio seleccionado se resume en la **Figura 10**, dónde se presentan las corrientes que deben intercambiar calor entre sí a partir de la nueva configuración de intercambiadores. Las corrientes rojas corresponden a las corrientes calientes que deben ser enfriadas y las azules representan las corrientes frías que deben ser calentadas, los círculos unidos por una línea vertical representan a los intercambiadores y unen las corrientes que deben intercambiar calor entre sí.

El diagrama de grilla con mayor detalle se muestra en **Apéndice 6**, allí se muestran las temperaturas de entrada y salida de cada uno de los intercambiadores, con sus áreas de transferencia y el calor manejado en cada uno de estos.





El número de intercambiadores del caso base sin Integración Energética fue de 17. La Integración Energética contempla 13 intercambiadores de calor, disminuyendo el número de estos en un 24% y por ende el área de transferencia, lo que se debe ver reflejado en los costos de capital.

#### 7.2.1. Intensidad energética

La intensidad energética del proceso de SMR gas natural sin y con integración energética se muestra en la **Tabla 20**. Se presentan valores de gasto energético anual en función de los servicios de calentamiento y enfriamiento.

	Calentamiento GWh/año	Enfriamiento GWh/año
Sin Integración	1.556,5	2.259
Energética		
Con Integración	6,55	818,3
Energética		

Tabla 20.	Comparación	de la Intensidad	Energética	del SMR (	con gas n	natural con	y sin integración
energ	jética						

Con la Integración Energética el proceso logró disminuir en un 99,6% el calor necesario para mantener las condiciones de operación. Por otro lado, la energía para enfriamiento disminuyó en un 63,8%, indicando que el consumo de agua como servicio industrial también disminuyó en el mismo porcentaje. La disminución de servicios de enfriamiento fue menor respecto a la de calentamiento debido al comportamiento del proceso mostrado en el análisis Pinch (**Figura 9**), donde se evidencia que el calor que necesitan recibir las corrientes frías para su calentamiento es menor al que es necesario retirar de las corrientes calientes, el cuál es de 160,000 *kW*.

#### 7.2.2. Costos capitales, de operación y costo nivelado de hidrógeno con integración energética.

Los costos capitales y operacionales sin y con integración energética se muestran en la **Tabla 21**. Costos capitales y operaciones con y sin integración energética

Tabla 21. Costos capitales y operacionales con y sin integración energética

	Sin Inte	gración Energética	Con Inte	gración Energética	Unidades
OpEx	\$	111.148.632	\$	26.027.472	[USD/año]
CapEx	\$	73.615.446	\$	71.125.315	[USD]

Se observa una reducción del 75,6% sobre los OpEx al implementar la red de intercambio óptima encontrada en AEA. Debido a que la función objetivo para la optimización fueron los costos totales anualizados, no se evidenció una gran disminución sobre los CapEx, siendo de solo 3.8%.

Debido a la disminución de los CapEx y OpEx con la IE, el costo nivelado de hidrógeno también disminuyó considerablemente, de 2,5 a 1,4 USD/kg de H<sub>2</sub>, representando una reducción del 46%.

 $1,4 USD/kg H_2$  es un valor cercano a los reportados en el estudio de International Energy Agency, 2023, quienes consideran que, para procesos de reformado sin captura, se espera que los LCOH oscilen entre  $1 - 2 USD/kg H_2$  producido. Este estudio realiza una revisión bibliográfica de investigaciones de metodologías de producción de H<sub>2</sub>. La revisión se centra en comparar costos nivelados de hidrógeno para cada una de las tecnologías tenidas en cuenta dentro de la revisión.

#### 7.3. Conclusiones

La integración energética del proceso permitió una disminución del 46% del LCOH calculado para la tecnología de SMR con gas natural y una disminución sobre la huella ambiental del 3%. Esta pequeña disminución se presentó debido a que la mayor cantidad de CO<sub>2</sub> producido por la tecnología no proviene de sus servicios industriales si no del producido por las reacciones SMR y WGS, indicando que aún con integración energética, el proceso necesita de una etapa de captura que permita disminuir las emisiones de CO<sub>2</sub> y, por ende, la huella de carbono.

## 8. Captura de CO<sub>2</sub>

Teniendo en cuenta la alta producción de  $CO_2$  durante el proceso de SMR a partir de gas natural, es necesario utilizar un método de captura que disminuya la cantidad de  $CO_2$  de la corriente de salida del proceso y a su vez mitigue las emisiones de este gas a la atmósfera.

Para esto, se seleccionó la tecnología de absorción química mediante el uso de aminas (MEA). El diagrama del proceso en Aspen Plus se encuentra dentro de los **Apéndice 7**.

## 8.1. Metodología

# 8.1.1. Estudio técnico-económico de la tecnología de Reformado de Metano con Vapor de Agua con Captura de Carbono.

Para el estudio técnico de la tecnología de captura con MEA se realizó la simulación del proceso a partir del descrito por Freguia et al., 2002, el cuál cumple con datos de una planta piloto de la central eléctrica comercial de Bellingham Massachussets, entre estos: condiciones de operación, reacciones involucradas y perfiles de temperatura.

El método más utilizado para este sistema es el Electrolyte-NRTL, desarrollado por Chen et al., 1979. Este modelo predice el exceso de energía libre de Gibbs para una mezcla y es capaz de reproducir con éxito datos experimentales en una amplia gama de temperaturas y cargas (Freguia et al., 2002).

El sistema MEA-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O es modelado a partir de cinco reacciones en equilibrio (*Ecuación 21* a la 24) que ocurren en fase líquida, cuando el CO<sub>2</sub> es absorbido dentro de una solución de MEA.

 $MEACOO^- + H_2O \leftrightarrow MEA + HCO_3^-$ 

Ecuación 21

 $CO_2 + 2H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HCO_3^-$ 

Ecuación 22

 $HCO_3^- + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HCO_3^-$ 

Ecuación 23

 $MEAH^+ + H_2O \leftrightarrow MEA + H_3O^+$ 

Ecuación 24

$$2H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + OH^-$$

Ecuación 25

Los compuestos considerados para la simulación de esta etapa son monoetanolamina (MEA), agua (H<sub>2</sub>O), dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>, OH<sup>-</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>-</sup>2, MEAH+, MEACOO-, nitrógeno (N<sub>2</sub>) y oxígeno (O<sub>2</sub>).

Por otra parte, el estudio económico se realizó siguiendo la misma metodología descrita en el capítulo 2, en la que se tuvieron en cuenta las dimensiones de las columnas de absorción y desorción para el cálculo de los costos capitales, e información relacionada con la potencia (kW) y área de transferencia ( $m^2$ ) de bombas e intercambiadores de calor, respectivamente.

Los costos operativos, también fueron calculados siguiendo la metodología expuesta en el capítulo 2.

Para calcular los costos de la MEA se utilizó la

Ecuación 26 encontrada en F. Mesa & Rodríguez, 2023

 $Costo\ diario\ MEA = \frac{factor\ de\ make\ up\ de\ MEA*Costo\ MEA*FM\ de\ CO_2\ evitado}{t_{op}}$ 

#### Ecuación 26

Donde el factor de *make up* (2,1) hace referencia a la relación de MEA por tonelada de  $CO_2$ capturado, el costo de la MEA USD/kg es 1,5, FM corresponde al flujo de  $CO_2$  evitado con la captura y  $t_{op}$  hace referencia al tiempo de operación, que para este caso es de 1 día.

El cálculo de las emisiones se realizó siguiendo la misma metodología descrita en el capítulo 1.

#### 8.1.2. Costo de captura de CO<sub>2</sub> (LCOC)

El LCOC se calculó a partir de los CapEx y OpEX determinados para la etapa de captura de carbono, utilizando la información consignada en la **Tabla 15** y siguiendo la misma metodología que se siguió para el cálculo del LCOH (

Ecuación 19).

## 8.2. Resultados y discusión de la etapa de Captura de CO2

Esta etapa fue adicionada al proceso global de SMR con gas natural, con el fin de conocer requerimientos de servicios industriales adicionales, costos de equipamiento, y costo de captura de CO<sub>2</sub>. El CO<sub>2</sub> producido en el proceso de SMR con gas natural fue de 1.840 t/d y el evitado fue de 1.542 t/d, logrando evitar un 84% del CO<sub>2</sub> producto no deseado. Sin embargo, 298  $tCO_2/d$  siguen siendo emitidas. La intensidad de carbono para el proceso con captura es de 1.5 kg CO<sub>2</sub>/kg H<sub>2</sub>, presentando una disminución del 79% de las emisiones de CO<sub>2</sub>.

## 8.2.1. Costos capitales, operativos y costo nivelado de hidrógeno de la etapa de Captura de CO<sub>2</sub>.

Los CapEx de la etapa de captura fueron de 79.706.612 USD, donde más del 80% corresponde al costo del rehervidor. En la **Figura 11** se muestra un diagrama de torta con los porcentajes de los CapEx para cada uno de los equipos involucrados en esta etapa.





El segundo equipo con mayor costo fue la columna de absorción, representando un 6% de los CapEx, sin embargo, comparado con el costo del rehervidor es más de 15 veces menor, esto, debido a que los costos para las columnas, según Turton et al., 2001 son calculados a partir de su volumen y para equipos como el rehervidor se realizan a partir del calor necesario para su operación. En este caso, el volumen de la columna fue de 741  $m^3$ , con una longitud de 16 m y un diámetro de cerca de 8 m, y el calor suministrado al rehervidor fue de 70.000 kW, calor necesario para aumentar la temperatura del agua líquida que sale de la columna y, además, cambiar su fase a estado vapor. Las columnas, por lo general, son menos costosas de fabricar, su sistema no debe ser resistente a altas temperaturas, ya que operan isotérmicamente y en este caso a una temperatura de 38°C, además también operan a presiones constantes. Por otra parte, el rehervidor debe soportar altas temperaturas, en este caso, el vapor que genera este equipo debe encontrarse por encima de 120°*C* y a una presión de 1,7 *atm*.

Los OpEx de la etapa de captura se encuentran resumidos en la **¡Error! No se encuentra el** origen de la referencia.

Tabla 22. Costos operativos de la planta de Captura de CO<sub>2</sub>

OpEx [USD/año]							
Servicios industriales	\$	709.308					
MEA	\$	1.683.832					
Total	\$	2.393.140					

Como lo muestra la Figura 12, los costos de servicios industriales hacen parte del 30% de los

OpEx totales para la captura, mientras que el costo de MEA representa el 70% de estos.



Figura 12. Porcentaje de costos de servicios industriales (etapa de captura de CO<sub>2</sub>

El mayor consumo de servicios industriales en esta etapa es por parte del rehervidor, que necesita de 69.993 kW. Sin embargo, como se evidenció en el capítulo anterior, a partir de la Integración Energética, aún existen 160.000 kW disponibles para suministrarse en este equipo y en el calentador.

La Tabla 23 muestra los valores de LCOH sin captura y con captura. El LCOH presentó un aumento del 15% respecto al costo hallado en el capítulo anterior, es decir que el precio mínimo en el que debería ser vendido el kg de H<sub>2</sub> para evitar pérdidas económicas después de su producción es de 1,65 *USD*, garantizando que el hidrógeno ofrecido pueda ser catalogado como hidrógeno azul o de bajas emisiones.

 Tabla 23. Comparación entre el LCOH sin y con captura de CO2

LCOH [USD/kg]

Sin captura 1,4

#### ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS

Con captura 1,65

## 8.2.2. Costo nivelado de Captura de Carbono (LCOC)

De la misma forma en la que fue hallado el LCOH, se determinó el valor de LCOC, que permitió conocer el costo de captura de  $CO_2$  a partir de MEA sin que se generen pérdidas económicas en la operación de la planta.

Este valor hallado fue de 32,3  $USD/tCO_2$  capturada. Esta cifra es consecuente con las reportadas por Moch et al., 2022, donde los valores más aceptables de LCOC oscilan entre 20 – 132  $USD/tCO_2$ .

#### 8.3. Conclusiones

El LCOH es un indicador integral que permite analizar los costos operativos y capitales en conjunto de una planta de producción de H<sub>2</sub>. En este caso, teniendo en cuenta que su aumento fue de tan solo el 15%, se estima que para un precio de venta del H<sub>2</sub> de 4 USD/kg (SG H2 Energy, 2023), el proceso sigue siendo rentable económicamente y además viable ambientalmente, pues logró reducir 84% de las emisiones de CO<sub>2</sub> producidas.

El calor "sobrante" de la Integración Energética de la tecnología antes de la implementación de la etapa de captura puede ser utilizado para suplir los servicios de calentamiento necesarios para la operación de la planta de captura de CO<sub>2</sub>. Sin embargo, el diseño de la red de intercambio dejaría de ser el óptimo, ya que no se estarían teniendo en cuenta los equipos de intercambio de calor y suministro de calor para su construcción. En futuros estudios se podría tener en cuenta esta etapa para la construcción de nuevos diseños que se acerquen al óptimo de todo el proceso, con todas las etapas involucradas para producir hidrógeno de bajas emisiones.

#### 9. Conclusiones generales

La tecnología de SMR con gas natural presenta altos requerimientos de energía y es ambientalmente viable, con bajos valores de producción de CO<sub>2</sub> y consumo de H<sub>2</sub>O por cada kg de H<sub>2</sub> producido. Sin embargo, a pesar de tener el menor índice de intensidad de CO<sub>2</sub>, se destaca la necesidad de realizar una captura para reducir las emisiones y garantizar la sostenibilidad del hidrógeno producido.

Por otra parte, Las tecnologías de DMR no son económicamente competitivas en comparación con SMR. La viabilidad económica de la SMR con gas natural es alta, pero se identifica la necesidad de reducir costos relacionados con servicios industriales, especialmente en enfriamiento y calentamiento de corrientes principales. Se propone una integración energética para aprovechar la energía de la corriente principal y disminuir los costos asociados.

La integración energética logra una significativa reducción del LCOH para la tecnología de SMR con gas natural y una disminución en la huella ambiental. Sin embargo, se destaca que la captura de CO<sub>2</sub> es esencial para reducir las emisiones.

Se acopló una etapa de captura de carbono con MEA al proceso de SMR con gas natural e integración energética. A pesar del aumento del 15% en el LCOH, el proceso se mantiene rentable económica y ambientalmente viable, logrando una reducción del 84% en las emisiones de CO<sub>2</sub>. Se sugiere el uso del calor excedente de la integración energética para la planta de captura de CO<sub>2</sub>, aunque se reconoce que el nuevo diseño de la red de intercambio podría no ser óptimo y debe ser considerado en futuros estudios.

#### 10. Bibliografía

- International Energy Agency, I. (2023). Global Hydrogen Review 2023. www.iea.org

Albiac-Murillo, J., Rathinasamy, S. F., & Saleth, M. (n.d.). *Global Issues in Water Policy Editor-in-chief Ariel Dinar Series editors*. http://www.springer.com/series/8877

Al-Malah, K. (2017). ASPEN PLUS <sup>®</sup> Chemical Engineering Applications.

- Angelidaki, I., Treu, L., Tsapekos, P., Luo, G., Campanaro, S., Wenzel, H., & Kougias, P. G. (2018). Biogas upgrading and utilization: Current status and perspectives. In *Biotechnology Advances* (Vol. 36, Issue 2, pp. 452–466). Elsevier Inc. https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2018.01.011
- Apostolou, D., & Xydis, G. (2019). A literature review on hydrogen refuelling stations and infrastructure. Current status and future prospects. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 113). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109292

AspenTech, Inc. (2008). Aspen Energy Analyzer Reference Guide. http://www.aspentech.com

- Balaji, R. K., Rajan, K. P., & Ragula, U. B. R. (2020). Modeling & optimization of renewable hydrogen production from biomass via anaerobic digestion & dry reformation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(36), 18226–18240. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.08.209
- Balkey, K., Consultor, I., Canonico, D. A., Ángel, A., Guzmán, L., Webster, M., & Weinman, S. (n.d.). ESTIMADO ESTUDIANTE DE INGENIERÍA. http://www.asme.org/about-asme

Cancillería. (2022, April 5). Cambio Climático. https://www.cancilleria.gov.co/cambio-climatico-0

Cetinkaya, E., Dincer, I., & Naterer, G. F. (2012). Life cycle assessment of various hydrogen production methods. *International Journal of Hydrogen Energy*, *37*(3), 2071–2080. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.10.064

- Chen, C. C., Britt, H. I., Boston, J. F., & Evans, L. B. (1979). Extension and Application of the Pitzer Equation for Vapor-Liquid Equilibrium for Aqueous Electrolyte Systems with Molecular Solutes. *AICHE*, *25*(5), 820.
- Claremont, S. @, Remer, D. S., Chai, L. H., Remer, D. S., & Chai, L. H. ". (1993). *Process Plants, Costs of Scaled-up Units* (Vol. 44). Marcel Dekker, Inc.
- Fan, J. L., Yu, P., Li, K., Xu, M., & Zhang, X. (2022). A levelized cost of hydrogen (LCOH) comparison of coal-to-hydrogen with CCS and water electrolysis powered by renewable energy in China. *Energy*, 242. https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.123003
- Foo, S. Y., Cheng, C. K., Nguyen, T. H., & Adesina, A. A. (2011). Kinetic study of methane CO2 reforming on Co-Ni/Al 2O3 and Ce-Co-Ni/Al2O3 catalysts. *Catalysis Today*, 164(1), 221–226. https://doi.org/10.1016/j.cattod.2010.10.092
- Freguia, S., S G. T. R., & Iv, T. F. E. (2002). Modeling of CO 2 Removal from Flue Gases with Monoethanolamine Modeling of CO 2 Removal from Flue Gases with Monoethanolamine APPROVED BY SUPERVISING COMMITTEE.
- Gangadharan, P., Kanchi, K. C., & Lou, H. H. (2012). Evaluation of the economic and environmental impact of combining dry reforming with steam reforming of methane. *Chemical Engineering Research and Design*, *90*(11), 1956–1968. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2012.04.008
- Gómez-Navarro, T., & Ribó-Pérez, D. (2018). Assessing the obstacles to the participation of renewable energy sources in the electricity market of Colombia. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 90, pp. 131–141). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.03.015
- Hashemi, S. E., Sarker, S., Lien, K. M., Schnell, S. K., & Austbø, B. (2019). Cryogenic vs. absorption biogas
  upgrading in liquefied biomethane production An energy efficiency analysis. *Fuel*, 245, 294–
  304. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.01.172

- Hernández, B., & Martín, M. (2016). Optimal Process Operation for Biogas Reforming to Methanol: Effects of Dry Reforming and Biogas Composition. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 55(23), 6677–6685. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.6b01044
- Holladay, J. D., Hu, J., King, D. L., & Wang, Y. (2009). An overview of hydrogen production technologies. In *Catalysis Today* (Vol. 139, Issue 4, pp. 244–260). https://doi.org/10.1016/j.cattod.2008.08.039

IPCC. (2022). The Intergovernmental Panel on Climate Change. https://www.ipcc.ch/

Kadhum, A. S. (2022). Levelelized cost of blue hydrogen. https://www.topsoe.com/bluehydrogen/levelized-

cost#:~:text=The%20LCoH%20can%20be%20calculated,hydrogen%20production%20over%20it s%20lifetime.

- Kemp, I. (2006). Pinch Analysis and process integration: A user guide on process integration for the efficient use of energy (pp. 15–40).
- Khojasteh Salkuyeh, Y., Saville, B. A., & MacLean, H. L. (2017). Techno-economic analysis and life cycle assessment of hydrogen production from natural gas using current and emerging technologies.
   *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(30), 18894–18909.
   https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.05.219
- Kong, F., Swift, J., Zhang, Q., Fan, L. S., & Tong, A. (2020). Biogas to H2 conversion with CO2 capture using chemical looping technology: Process simulation and comparison to conventional reforming processes. *Fuel*, *279*. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118479
- LEDS, L. & L. G. P. (2021). Proyecto de la práctica a la política: análisis de las barreras a la inversión en biogás en Colombia y las medidas para abordarlas, a partir de la experiencia de los desarrolladores y otros actores relevantes. https://ledslac.org/wpcontent/uploads/2021/08/Informe-final-biogas-Colombia-v.06082021-final.pdf
- Luyben, W. L. (2014). Design and control of the dry methane reforming process. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *53*(37), 14423–14439. https://doi.org/10.1021/ie5023942
- Martín, C. F., García, S., Beneroso, D., Pis, J. J., Rubiera, F., & Pevida, C. (2012). Precombustion CO 2 capture by means of phenol-formaldehyde resin-derived carbons: From equilibrium to dynamic conditions. *Separation and Purification Technology*, 98, 531–538. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2012.03.017
- Martins, A. R., Carvalho, L. S., Reyes, P., Grau, J. M., & Rangel, M. do C. (2017). Hydrogen production on alumina-supported platinum catalysts. *Molecular Catalysis*, 429, 1–9. https://doi.org/10.1016/j.molcata.2016.11.040
- Massachusetts Institute of Technology. (2007). *The future of coal : options for a carbon-constrained world*. Massachusetts Institue of Technology.
- Mesa, F., & Rodríguez, M. (2023). Estudio técnico, económico y de impacto ambiental del proceso de absorción química de CO2 mediante el uso de aminas.
   https://outlook.office365.com/mail/inbox/id/AAQkADY4NDVIODVhLTM1ZGUtNDhhOC1hZGRjL
   WFiY2QyZTNhMTFIMAAQANf1%2F5Dtf5IMnsYi1k8fIIU%3D
- Mesa, M. D., Viceministro, P., Lotero, M., Rafael, C., Subdirectora De Demanda, J., Escobar, L.,
  Subdirectora De Hidrocarburos, R., Cruz, C., Subdirector, C., Eléctrica, E., Martínez, J., De Minería,
  S., Viana, R., Leonardo, G., Julieth, C., García, S., Francisco, J., William, M., Martínez, A., ... Morillo,
  J. L. (2020). *REPÚBLICA DE COLOMBIA Ministerio de Minas y Energía*.
- Mio, A., Barbera, E., Massi Pavan, A., Bertucco, A., & Fermeglia, M. (2023). Sustainability analysis of hydrogen production processes. *International Journal of Hydrogen Energy*. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.06.122
- Moch, J., Xue, W., & Holdren, J. (2022). Carbon Capture, Utilization, and Storage: Technologies and Cost in the U.S. Context. *Environment and Natural Resources Program*, 1–14.

- Mondal, K., Sasmal, S., Badgandi, S., Chowdhury, D. R., & Nair, V. (2016). Dry reforming of methane to syngas: a potential alternative process for value added chemicals—a techno-economic perspective. *Environmental Science and Pollution Research*, *23*(22), 22267–22273. https://doi.org/10.1007/s11356-016-6310-4
- Nahar, G., Mote, D., & Dupont, V. (2017). Hydrogen production from reforming of biogas: Review of technological advances and an Indian perspective. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 76, pp. 1032–1052). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.02.031
- Nemet, A., Klemeš, J. J., Varbanov, P. S., & Mantelli, V. (2015). Heat Integration retrofit analysis—an oil refinery case study by Retrofit Tracing Grid Diagram. *Frontiers of Chemical Science and Engineering*, *9*(2), 163–182. https://doi.org/10.1007/s11705-015-1520-8
- Pethe, K. R., Dabhade, P. M., Kolekar, V. J., & Sardare, M. D. (2022). Heat Integration and Heat Exchanger Network Design with Aspen Energy Analyze. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, *1259*(1), 012006. https://doi.org/10.1088/1757-899x/1259/1/012006
- Phan, T. S., Pham Minh, D., Espitalier, F., Nzihou, A., & Grouset, D. (2022a). Hydrogen production from biogas: Process optimization using ASPEN Plus<sup>®</sup>. *International Journal of Hydrogen Energy*. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.01.100
- Phan, T. S., Pham Minh, D., Espitalier, F., Nzihou, A., & Grouset, D. (2022b). Hydrogen production from biogas: Process optimization using ASPEN Plus<sup>®</sup>. *International Journal of Hydrogen Energy*. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.01.100
- Reichelstein, S., & Yorston, M. (2013). The prospects for cost competitive solar PV power. *Energy Policy*, 55, 117–127. https://doi.org/10.1016/j.enpol.2012.11.003
- Rezaei, E., & Dzuryk, S. (2019). Techno-economic comparison of reverse water gas shift reaction to steam and dry methane reforming reactions for syngas production. *Chemical Engineering Research and Design*, 144, 354–369. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.02.005

- RODRIGUEZ, J. P., RUIZ-OCHOA, M. A., & MENESES, A. (2020). Revisión de los factores de emisión en las metodologías de huella de carbono en Colombia. *Espacios*, *41*(47), 74–84. https://doi.org/10.48082/espacios-a20v41n47p06
- Roldán, J. A. (2023). *El precio del futuro: cuánto cuesta un litro o un kilogramo de Hidrógeno*. https://www.linkedin.com/pulse/el-precio-del-futuro-cu%C3%A1nto-cuesta-un-litro-o-derold%C3%A1n-garc%C3%ADa/?originalSubdomain=es

Ruthven, D. M., & Farooq, S. (1999). Air separation by pressure swing adsorption\*.

- Saldarriaga-C., C. A., & Salazar, H. (2016). Security of the Colombian energy supply: The need for liquefied natural gas regasification terminals for power and natural gas sectors. *Energy*, 100, 349– 362. https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.01.064
- Sandoval-Bohórquez, V. S., Morales-Valencia, E. M., Castillo-Araiza, C. O., Ballesteros-Rueda, L. M., & Baldovino-Medrano, V. G. (2021). Kinetic Assessment of the Dry Reforming of Methane over a Ni-La2O3 Catalyst. ACS Catalysis, 11(18), 11478–11493. https://doi.org/10.1021/acscatal.1c02631
- Sazali, N. (2020). Emerging technologies by hydrogen: A review. In *International Journal of Hydrogen Energy* (Vol. 45, Issue 38, pp. 18753–18771). Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.05.021
- SGH2Energy.(2023).Costcomparison.https://www.sgh2energy.com/economics#:~:text=Blue%20hydrogen%20%E2%80%94produced%20from%20natural,per%20kg%20%2C%20depending%20on%20availability.
- Simpson, A. P., & Lutz, A. E. (2007). Exergy analysis of hydrogen production via steam methane reforming. International Journal of Hydrogen Energy, 32(18), 4811–4820. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.08.025

- Sreedhar, I., Nahar, T., Venugopal, A., & Srivinas, B. (2017). Carbon Capture by absorption Path covered and ahead. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *76*, 1080–1107.
- Su, B., Wang, Y., Xu, Z., Han, W., Jin, H., & Wang, H. (2022). Novel ways for hydrogen production based on methane steam and dry reforming integrated with carbon capture. *Energy Conversion and Management*, *270*. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.116199
- Tacchino, V., Costamagna, P., Rosellini, S., Mantelli, V., & Servida, A. (2022). Multi-scale model of a topfired steam methane reforming reactor and validation with industrial experimental data. *Chemical Engineering Journal, 428*. https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.131492
- Turton, R., Shaeiwitz, J., & Bhattacharyya, D. (2001). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes, Fifth Edition* (Wallace B. Whiting, Ed.; Fifth).
- Usman, M., Daud, W. M. A. W., & Abbas, H. F. (2015). Dry reforming of methane : In fl uence of process parameters A review. 45, 710–744. https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.02.026
- Villarreal, A., & Cuevas-García, R. (2020). Obtención y análisis de expresiones de cinética química. Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria En Nanociencias y Nanotecnología, 14(26), 1e–23e. https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2021.26.69638
- Wang, H. ran, Feng, T. tian, & Zhong, C. (2023). Effectiveness of CO2 cost pass-through to electricity prices under "electricity-carbon" market coupling in China. *Energy*, *266*. https://doi.org/10.1016/j.energy.2022.126387
- Wang, S., Wang, Y., & Hu, C. (2018). The effect of NH3·H2O addition in Ni/SBA-15 catalyst preparation on its performance for carbon dioxide reforming of methane to produce H2. *International Journal of Hydrogen Energy*, *43*(30), 13921–13930. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.01.173
- Wiederkehr, B., Mitchell, D. A., de Lima Luz, L. F., & Krieger, N. (2021). Use of the Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson equation to describe the ethyl esterification of fatty acids

catalyzed by a fermented solid with lipase activity. *Biochemical Engineering Journal, 168*. https://doi.org/10.1016/j.bej.2021.107936

- Xu, J., & Froment, G. F. (1989). Methane steam reformin: II. Diffusional limitations and reactor simulation. *AiChE Journal*, *35*(1), 97–103.
- Yan, Y., Manovic, V., Anthony, E. J., & Clough, P. T. (2020a). Techno-economic analysis of low-carbon hydrogen production by sorption enhanced steam methane reforming (SE-SMR) processes. *Energy Conversion and Management*, 226. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113530
- Yan, Y., Manovic, V., Anthony, E. J., & Clough, P. T. (2020b). Techno-economic analysis of low-carbon hydrogen production by sorption enhanced steam methane reforming (SE-SMR) processes. *Energy Conversion and Management*, 226. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113530

Yang, R. T., & Wong, C. (1981). The role of surface diffusion in the langmuir-hinshelwood mechanism.
 *Chemical Engineering Communications*, 11(4–5), 317–325.
 https://doi.org/10.1080/00986448108911001

Yoo, J., Bang, Y., Han, S. J., Park, S., Song, J. H., & Song, I. K. (2015). Hydrogen production by trireforming of methane over nickel-alumina aerogel catalyst. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, *410*, 74–80. https://doi.org/10.1016/j.molcata.2015.09.008

# 11. Apéndices



CO <sub>2</sub> producido por la tecnología [MMton/año]	0,37
CO <sub>2</sub> factores de emisión [MMton/año]	0,13
Huella de carbono [MMton/año]	0,50



Apéndice 2. Primera etapa del proceso de SMR en Aspen Plus



Apéndice 3. Segunda etapa del proceso de SMR en Aspen Plus



#### ESTUDIO DE REFORMADOS DE METANO CON GAS NATURAL Y BIOGÁS





#### Apéndice 5. Metodología del cálculo de los CapEx

A partir de la metodología Lang y Guthrié de Turton et al., 2001, se calcularon los costos de todos los equipos a excepción del costo de la unidad PSA, que fue calculada a partir de la regla de los seis décimos (Yan et al., 2020).

Todos los datos sobre los costos de compra de los equipos encontrados en Turton et al., 2001 se obtuvieron de la recolección de datos de fabricantes de dichos equipos durante el periodo comprendido entre mayo y septiembre de 2001, tomando un valor promedio de CEPCI de 397.

Este costo se denomina costo de modulo desnudo y está representado como  $C_{BM}$  ( $C_{BM} = C^{\circ}_{p}F_{BM}$ 

Ecuación 18) y se calcula a partir de una serie de pasos, como se muestra en la siguiente sección.

# 1. Costos de compra a presión constante

Los costos de compra de los equipos  $(C_p^{\circ})$ , a condiciones de presión ambiente se ajustan a la *Ecuación 27*.

$$log_{10}C^{\circ}_{p} = K_{1} + K_{2}log_{10}(A) + K_{3}[log_{10}(A)]^{2}$$

#### Ecuación 27

Donde *A* corresponde a la capacidad o parámetro para dimensionamiento del equipamiento que en todos los equipos es diferente: para intercambiadores corresponde al área de transferencia ( $m^2$ ), para el reformador, rehervidores y calentadores corresponde al calor a suministrar (kW), para bombas y compresores corresponde a la potencia alimentada (kW), entre otros. Los valores para  $K_1$ ,  $K_2$ , y  $K_3$ , junto con los valores máximos y mínimos que puede tomar *A* en la correlación, se encuentran en la tabla A.1. del apéndice A del Turton et al., 2001.

## 1.1. Factores de presión ( $F_p$ )

Según Turton et al., 2001 los costos de equipamiento aumentan con el incremento de la presión de operación. De esta manera, se debe recalcular los costos de los equipos con las correcciones de presión que requiere cada tecnología a partir de los factores de presión  $F_p$ .

#### 1.1.1. Factores de presión para procesos en recipientes (Vessel)

El factor de presión para procesos en recipientes o contenedores horizontales y verticales de diámetro D metros y operación a presión P en barg está basado en el código ASME (Balkey et al., n.d.) para el diseño de vessels:

$$F_{p,vessel} = \frac{\frac{PD}{2SE - 1.2P} + CA}{t_{min}} \text{ para } t_{min} > 0.0063 \text{ m}$$

#### Ecuación 28

Donde S corresponde a la tensión máxima permitida del metal de construcción del equipo vessel, *E* corresponde a la eficiencia de soldadura,  $t_{min}$  al espesor mínimo permitido del recipiente y el margen de corrosión CA, que para el acero al carbón estos valores son de 944 *bar*, 0.9, 0.0063 *m* y 0.00315 *m*, respectivamente.

#### 1.1.1.1. Factores de presión para otros equipos de proceso

Los factores de presión,  $F_p$  para el resto de los equipos de procesos están dados por la siguiente forma general:

$$log_{10}F_p = C_1 + C_2 log_{10}(P) + C_3 [log_{10}(P)]^2$$

#### Ecuación 29

Donde *P* corresponde a la presión en bar gauge o barg (1 bar = 0 barg). Los factores de presión

siempre son mayores que la unidad. Los valores de las constantes C1, C2 y C3 de la

Ecuación 29 para diferentes equipos se muestran en la tabla A.2 del apéndice A de Turton et al.,

2001, donde también se muestran los rangos de las presiones sobre los cuales las correlaciones son válidas.

# 1.1.1.2. Factores de material y factor de módulo desnudo ( $F_M$ y $F_{BM}$ )

Como se evidencia en el capítulo 7 de Turton et al., 2001, los costos de equipamiento varían dependiendo del material de construcción. Para este estudio se seleccionó como material de construcción de todos los equipos acero al carbono.

# 1.1.1.2.1. Factores de material y factores de módulo desnudo para intercambiadores de calor, procesos vessels y bombas

Los factores de material  $F_M$ , para intercambiadores de calor, procesos vessels y bombas se muestran en la figura A.18 del apéndice del Turton et al., 2001, a partir del número de identificación por equipos y material de construcción (acero al carbono) listados en la Tabla A.3 del mismo. Los factores de módulo desnudo para estos equipos están dados por la *Ecuación 30*.

$$F_{BM} = B_1 + B_2 F_M F_P$$

# Ecuación 30

Los valores de  $B_1$  y  $B_2$  se encuentran en la Tabla A.4 de la misma sección de (Turton et al., 2001). Para el resto de los equipos los valores de  $F_{BM}$  se encuentran directamente en la gráfica A.19 y

tabla A.6.









10         BOT-MK         CH4         CO2         FLUEGAS         FLO         DEM         CHA         CO2         PURGAS         FELUX         REFUX         REFUX <th refux<="" th=""> <th refux<="" th=""> <th refux<="" th=""></th></th></th>	<th refux<="" th=""> <th refux<="" th=""></th></th>	<th refux<="" th=""></th>	
BOT-MIK         Cut         CL         FLUE         HELO         EANIN         LEANID         MEANIN         FLUANIN         REL			
CH4         CO2         FLUGAS         H20         LEANUN         EANUN         EANUN         EANUN         EANUN         EANUN         EANUN         EANUN         FLANA         RIFLUX         RICH         RICH         RICH         RICH         RICH         RICHUN           787P         B23         FUAS         B85         HH-2         ABS         B19         LIGUA         STRP         AS         B6         HE-1         ABS         STRP         ABS         B4         H2         ABS         FLASH2         ABS         HAN         LIGUA         STRP         AP         FLASH2         ABS         HAN         LIGUA         STRP         ABS         HAN         ABS         ABS         HAN         STRP         ABS         HAN         ABS         AB			
CO2         FLUEGAS         H20         LEANIN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         REAUN			
FLUEGAS         H20         LEAN         LEANUL         EANUUT         M-MEA         OUT         PCO2         PUFEGAS         RFLUX         RCH         RCHOIT         RCHOIT           B23         B8         H-5         ABS         STRP         MX         FLASH1         FLASH2         ABS         BF         HE-1         ABS           ABS         B8         H-5         ABS         Liquid Phase			
H2O         LEAN         LEANUN         LEANUN         HEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         REAUX         RECH         RCH         RCHON         REAUX           BBB         HE-2         ABS         U1         MIX         FLASH1         FLASH2         ABS         B6         HE-1         ABS         MIX           LiquidPhase			
LEAN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         LEANUN         REAUN         RCH         RCH         RCH         RCHOUT           FIF2         ABS         V1         MMX         FLASH1         FLASH2         ABS         B6         HE-1         ABS           LIquid Phase			
LEANIN         LEANOUT         M-MEA         OUT         PCO2         PNREGAS         RFLUX         RCH         RCHOUT         RCHOUT           ABS         V1         MIX         FLASH1         FLASH1         FLASH1         STRP         MIX         MIX           Jquid Phase         Jquid Phase         MIX         FLASH1         FLASH1         STRP         MIX         MIX           Jquid Phase         Lquid Phase         Jquid Phase         Vapor Phase         Vapor Phase         Lquid Phase         MIX         Jquid Phase			
LEANOUT         M-MEA         OUT         PCO2         PURGAS         RFLUX         RCH         RCHOUT           V1         M         V1         FLANU         PCO2         PURGAS         RFLUX         RCH         RCHOUT           V1         M         M         FLASH1         FLASH2         ABS         B6         HE-1         ABS           Lquid Phase         Uquid Phase         Vap Phase         Vap Phase         Up Phase         Up MAX         Lquid Phase         MAS           J0         172400         17240         IG1400         IG2120         101225         IG2120         12747         I11255           J137900         172403         IG1         1         0         0         11255           J0         0         1         1         1         0         0         11265           J137900         172404         IG1401         IG1255         IG12120         II1265         II1265           J0         0         1         1         1         0         0         11265           J137401         11325         IG12104         IG14104         IG14104         IG14104         IG14104           J13080416         J0			
M-MEA         OUT         PCO2         DHEGAS         RFLUX         RCH         RCOUT           MIX         FLASH1         FLASH2         ABS         B6         HE-1         ABS           MIX         Vartual         STRP         PM         MIX         Mudul           MIX         FLASH1         FLASH1         FLASH1         ABS         B6         HE-1         ABS           MIX         Vartual         STRP         STRP         MIX         MudulPhase         MudulPhase           Liguid         Name         Vartual         STRP         STRP         MudulPhase           J7347         Usin         Vartual         STRP         MudulPhase         MudulPhase           J7347         161120         103255         162120         103356         67           J7347         10         0         101         1         1         1           J         0         0         0         0         0         0         0           J10         0         0         1         1         1         1         1         1         1           J         0         0         0         0         0			
OUT         PCO2         PUREGAS         RFLUX         RCH         RCHOUT           FLASH1         FLASH2         ABS         B6         HE-1         ABS           Vapor Phase         Vapor Phase         FLASH1         STRP         MB           Vapor Phase         Vapor Phase         ELASH1         STRP         MB           Vapor Phase         Vapor Phase         Liquid Phase         Liquid Phase           Vapor Phase         S0         109         67           101400         162120         103325         163120         11325           101400         162120         103325         163120         11325           101         1         0         10         0         0           0         0         0         1038         67         11325           111         1         0         1120         11205         11325           111         1         0         0         0         0         0           111         1         0         1         1         1         1         1           1111         1         0         0         0         0         0         0 <t< td=""></t<>			
PCO2         PUREGAS         RFLUX         RCH         RCHOUT           FLASH2         ABS         B6         HE-1         ABS           Vapor Phase         Last         STRP         Mm         Mm           Vapor Phase         Last         STRP         Mm         Mm           Vapor Phase         Lquid Phase         Lquid Phase         Lquid Phase           50         Vapor Phase         Lquid Phase         Lquid Phase           51         122120         103325         163120         17325           1         1         0         103         67           1         1         0         11325         11325           1         1         0         12247         11325           1         1         0         0         0         0           0         0         0         0         0         0         0           1         1         1         1         1         1         1         1           0         0         0         0         0         0         0         0         0           1         1         1         1         1         1			
PUREGAS         REFLUX         RICH         RICHOUT           ABS         B6         HE-1         ABS           FLASH1         STRP         STRP         MM           Varb         Iquid Phase         MM         MS           Varb         Iquid Phase         STRP         Iquid Phase           Varb         Iquid Phase         Iquid Phase         Iquid Phase           Varb         Iduid Phase         Iduid Phase         Iquid Phase           Varb         Iduid Phase         Iduid Phase         Iquid Phase           Varb         Iduid Phase         Iduid Phase         Iduid Phase           I         0         0         0         0         0           I         1         1         1         1         1           I         1         1         0         0         0         0           I         1         1         1         0         1         1         1			
RFLUX         RICH         RICHOUT           B6         HE-1         ABS           STRP         STRP         MMX           Liquid Phase         STRP         MX           Liquid Phase         B6         HE-1         ABS           Liguid Phase         STRP         Liquid Phase           Liguid Phase         Liquid Phase         Liquid Phase           Listic         172747         Liquid Phase           Listic         172747         Liquid Phase           0         0         0         0           1         0         0         0         0           1         0         0         0         0           1         0         0         0         0           1         0         0         0         0           1         1         1         1         1           1         0         0         0         0         0           1         1         1         1         1         1           1         0         0         0         0         0         0           1         1         1         1         1<			
RICH         RICHOUT           HE-1         RIC           STRP         Liquid Phase           109         67           172747         11325           109         67           172747         111325           10         0           1         0           1         1           0         0           1         0           1         0           1         0           1         1           1         0           1         1           1         0           1         1           1         1           1         0           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1           1         1     <			
RICHOUT ABS MIX LIquid hase 67 67 111325 111325 0 1 11325 -200559 -7842			

Apéndice 8. Condiciones de operación, flujos másicos,	, flujos molares, composiciones de todas las
corrientes involucradas en el proceso SMR	

Bit         Bit <th>Units S1 S2 S3</th> <th>S1 S2 S3</th> <th>S</th> <th>22</th> <th>s</th> <th>ŋ</th> <th>8</th> <th>8</th> <th>Sg</th> <th>S10</th> <th>S11</th> <th>S12</th> <th>S13</th> <th>S15</th> <th>S16</th> <th>S17</th> <th>S19</th> <th>S20</th> <th>S23</th> <th>S25</th> <th>S26</th> <th>TO-ABS</th> <th>WMAKEUP</th> <th>XSH20</th>	Units S1 S2 S3	S1 S2 S3	S	22	s	ŋ	8	8	Sg	S10	S11	S12	S13	S15	S16	S17	S19	S20	S23	S25	S26	TO-ABS	WMAKEUP	XSH20
	PUMP1 FLASH2 COOLER B5 B7 B8 B9	UMP1 FLASH2 COOLER B5 B7 B8 B9	H2 COOLER B5 B7 B8 B9	NER 85 87 88 89	5 87 88 89	87 88 89	88	B9		B10	811	B12	813	HTS	815	LTS	817	818		821	822	HE-2		ľ
Geno         Yayar         Value         Yayar         Value	HE-1 B6 V1 B7 B11 B9 B10	HE-1 B6 V1 B7 B11 B9 B10	1 V1 B7 B11 B9 B10	1 B7 B11 B9 B10	7 B11 B9 B10	311 B9 B10	B9 B10	B10		B11	B12	B13	HTS	B15	LTS	817	B18		B20	B22	B23	COOLER	FLASH1	
000         7300         6930         7450         7450         7450         7450         7500	Liquid Phase Liquid Phase Liquid Phase Vapor Phase Vapor Phase Liquid Phase Vapor Ph	id Phase Liquid Phase Liquid Phase Vapor Phase Vapor Phase Liquid Phase Vapor Ph	<sup>3</sup> hase Liquid Phase Vapor Phase Vapor Phase Liquid Phase Vapor Ph	Phase Vapor Phase Vapor Phase Liquid Phase Vapor Ph	Phase Vapor Phase Liquid Phase Vapor Ph	r Phase Liquid Phase Vapor Ph	id Phase Vapor Ph	or Ph	lase Vapo	or Phase Val	or Phase Va	apor Phase N	/apor Phase /	/apor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase V	apor Phase Va	por Phase Va	por Phase V.	por Phase Vi	spor Phase	Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase
300000         200000         245000         251000         2510000         250000         250000         250000         10000	C 66 50 40 25 800 25 400	66 50 40 25 800 25 400	1 40 25 800 25 400	V0 25 800 25 400	5 800 25 400	300 25 400	25 400	400		800	799	850	350	455	215	266	88	38	38	250	1652	62	88	50
	N/sqm 162120 162120 172120 3000000 3000000 3000000 300000	52120 162120 172120 3000000 3000000 3000000 300000	20 172120 300000 300000 300000 300000 30000	3120 300000 300000 300000 30000	3000 300000 300000 30000	30000 3000000 30000	00000 30000	0000	00 30	00000	000000	2465200	2465200	2610000	2610000	2510000	2500000	2500000	100000	100000	100 000	172120	172400	162120
0         0         0         0         0         0         0         0         1	0 0 1 1 1 0 1	0 0 1 1 0 1	0 1 1 0	0 1 1 0 1	1 1 0 1	1 0 1	0	٣		1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
0         0	1 1 0 0 1	1 1 0 0 1 0	1 0 1 0	1 0 0 1	0 1 0	0 1 0	1 0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	-1
	0 0 0 0 0	0 0 0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0	0 0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	0 0 1 1 0 1	0 0 1 1 0 1	0 1 1 0 1	0 1 1 0	1 1 0 1	1 0 1	0	1		1	1	1	-	1	1	-	-	1	1	1	1	0	0	0
0         0	1 1 1 0 0 1 0	1 1 1 0 0 1 0	1 0 1 0	1 0 0 1 0	0 1 0	0 1 0	1 0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
112:00103         31406971         667275         6423076         5506771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         5206771         520677         520677         520677         520677         5206771         5206771         520677         5206771         520677         520671         520671         520671         520671         520671         520671         520671         510671         520671         510671         520671         510713	0 0 0 0 0	0 0 0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1128/0416         632802         7104233         7708486         637046         618006         63206         163106         168004         1681074         1681074         1681074         16810241         16810740         16810241         157100         157100         157100         157100         157100         157100         157100         157100         1571011         157101         157111	J/kmol -307649512 -284397441 -295608698 -74842359 -30418424 -287481513 -229507545	7649512 -284397441 -295608698 -74842359 -30418424 -287481513 -229507549	7441 -295608698 -74842359 -30418424 -287481513 -229507549	08698 -74842359 -30418424 -287481513 -229507545	'2359 -30418424 -287481513 -229507549	18424 -287481513 -229507549	7481513 -229507545	9507545	-210	3110233 -14	+ 1773 + 1	86072755	-84323408	-83261788	-91566108	-91356113	99068153	371539	373219 -	1740035 -	47130445	-293844229	-284867171	-284397441
36027         30036         3954         3044         10784         5492         27904         5501         25914         6751         192241         190089         15707           4445         1807         84         277         911         101         2262         12661         1301         190089         190089         190089         190089         15707         1800         948         9583         19008         14001         2601         1911         1001         1101         1101         111         11         1	J/kg -12219366 -15710046 -12370880 -4678159 -1901359 -15957649 -12739605	219366 -15710046 -12370880 -4678159 -1901359 -15957649 -12739605	9046 -12370880 -4678159 -1901359 -15957649 -12739605	70880 -4678159 -1901359 -15957649 -12739605	8159 -1901359 -15957649 -12739605	01359 -15957649 -12739605	957649 -12739605	739605	-11	829416 -6		5582832	-7124925	-7035223	-7736898	-7719154	-8370785	184306	12936	1895074	1687779	-12297040	-15812531	-15710046
····································	/kmol-K -198194 -157479 -198691 -109691 -41532 -167560 -45080	98194 -157479 -198691 -109691 -41532 -167560 -45080	479 -198691 -109691 -41532 -167560 -45080	3691 -109691 -41532 -167560 -45080	691 -41532 -167560 -45080	1532 -167560 -45080	67560 -45080	45080	-7	26027	260.08	22368	995	3041	-10784	-9482	-27949	-25502	5611	22394	67551	-193241	-160069	-157479
0         0         0         0         0         0         43         55         55           0         0         0         0         0         0         0         43         55         55           0         0         0         0         0         0         0         0         93         93         93           .0436013         .1079379         .14166402         .10853264         .16872364         .16872365         .15161219         47779         97150         .16773266         .1697371         .127011         .120111         .127011         .	J/kg-K -7872 -9699 -8315 -6856 -2596 -9301 -2502	7872 -8699 -8315 -6856 -2596 -9301 -2502	99 -8315 -6856 -2596 -9301 -2502	315 -6856 -2596 -9301 -2502	156 -2596 -9301 -2502	596 -9301 -2502	9301 -2502	2502		1445	-1502	1890	8	257	-911	-801	-2362	-12651	194	820	2419	-8087	-8885	- 8699
6         6         5         5         8         8         7         12         2         1         0         0         003         933	mol/cum 43 55 44 1 0 47 1	43 55 44 1 0 47 1	5 44 1 0 47 1	47 1 1	1 0 47 1	0 47 1	47 1	1		0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	43	55	55
201386013 212979579 31664078 196037860 19557248 19577368 19527205 212451219 47719 979150 1577328 19656813 402527278 1507571 12001 1 11 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	kg/cum 1093 989 1054 21 5 849 10	1093 989 1054 21 5 849 10	9 1054 21 5 849 10	154 21 5 849 10	1 5 849 10	5 849 10	849 10	10		9	9	e	9	2	8	7	12	2	1	1	0	10.39	983	686
18         17         12         12         12         12         12         12         12         23         24         18         18         11           1         1         2         2         2         2         1         1         3         4         4         18         18         18         14         14         15         2         2         2         1         3         4         4         14         0	Watt -4226391907 -232324693 -4049499120 -37909462 -15407666 -275712711 -220112062	6391907 -232324693 -4049499120 -37909462 -15407666 -275712711 -220112062	V693 -4049499120 -37909462 -15407666 -275712711 -220112062	199120 -37909462 -15407666 -275712711 -220112062	9462 -15407666 -275712711 -220112062	07666 -275712711 -220112062	5712711 -220112062	0112062	-20	1396013 -21	9793679 -1	41699402	-180839690	178562944	-196372358	-195922005 -	212461219	427719	979150 -:	37139289 -1	.00668813	4025328278	-15075171	-1230019
1         1         2         2         2         2         2         2         2         1         3         4         4         14         0         0         0           1460         2193 <th>25 18 24 16 16 18 18 18</th> <td>25 18 24 16 16 18 18</td> <td>3 24 16 16 18 18</td> <td>24 16 16 18 18 18</td> <td>6 16 18 18</td> <td>16 18 18</td> <td>18 18</td> <td>18</td> <td></td> <td>18</td> <td>17</td> <td>12</td> <td>12</td> <td>12</td> <td>12</td> <td>12</td> <td>12</td> <td>2</td> <td>82</td> <td>27</td> <td>28</td> <td>24</td> <td>18</td> <td>18</td>	25 18 24 16 16 18 18 18	25 18 24 16 16 18 18	3 24 16 16 18 18	24 16 16 18 18 18	6 16 18 18	16 18 18	18 18	18		18	17	12	12	12	12	12	12	2	82	27	28	24	18	18
1430         2193         2103 <th< td=""><th>moVsec 14 1 14 1 1 1 1 1 1</th><td>14 1 14 1 1 1 1 1</td><td>14 1 1 1 1</td><td>4 1 1 1</td><td>1 1 1</td><td>1 1 1</td><td>1</td><td>1</td><td></td><td>1</td><td>1</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>1</td><td>e</td><td>4</td><td>4</td><td>14</td><td>0</td><td>0</td></th<>	moVsec 14 1 14 1 1 1 1 1 1	14 1 14 1 1 1 1 1	14 1 1 1 1	4 1 1 1	1 1 1	1 1 1	1	1		1	1	2	2	2	2	2	2	1	e	4	4	14	0	0
1430         2193         2193         2130         2130         2130         2133 <th< td=""><th></th><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></th<>																								
3 4 8 5 5 3 4 2 1 68 157 568 0 0	nne/day 29884 1278 28282 700 700 1493 1493	39884 1278 28282 700 700 1493 1493	<sup>78</sup> 28282 700 700 1493 1493	282 700 700 1493 1493	00 700 1493 1493	700 1493 1493	1493 1493	1493		1493	2193	2193	2193	2193	2193	2193	2193	201	6540	8532	8532	28282	82	7
	:um/sec 0 0 0 0 2 0 2	0 0 0 2 0 2	0 2 0 2	0 2 0 2	0 2 2	2 0 2	0	2		ო	4	8	ŝ	ŝ	ო	4	2	-	89	157	566	0	0	0