

Análisis de sensibilidad del proceso de metanación para tecnología *Power To Gas* mediante
simulación en *Aspen Plus*

Daniel Felipe Gomez Grimaldos y Luisa Fernanda Correa Vergara

Trabajo de Grado para optar el título de Ingeniero Químico

Modalidad Trabajo de investigación

Director

Giovanni Morales Medina

Doctor en ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2026

Tabla de contenido

	Pg.
Introducción	8
1. Objetivos	9
1.1. Objetivo General	9
1.2. Objetivos Específicos	9
2. Marco Teórico	9
2.1. Tecnología <i>Power to Gas (PtG)</i>	9
2.2. Metanación	10
2.3. Reactor de metanación	11
3. Estado del arte	15
4. Metodología	16
4.1. Fase 1. Simulación base para el reactor en estado estacionario	17
4.2. Fase 2. Validación de la simulación.	18
4.3. Fase 3. Análisis de sensibilidad con la simulación en <i>Aspen Plus</i>	18
5. Resultados	19
5.1. Simulación configuraciones para los reactores de metanación	20
5.1.1. Simulación configuración adiabática	20
5.1.2. Simulación base configuración con enfriamiento	23
5.2. Comparación de resultados	25
5.2.1. Configuración reactores adiabáticos	26
5.2.2. Configuración reactores con enfriamiento	28
5.3. Análisis de sensibilidad	30
5.3.1. Configuración reactores adiabáticos	30
5.3.2. Configuración reactores con enfriamiento	36
6. Conclusiones	42
7. Recomendaciones	43
8. Referencias bibliográficas	44
9. Apéndices	50

Lista de tablas

	Pg.
Tabla 1 Variaciones del flujo de alimentación de hidrógeno (kmol/h) al proceso.	18
Tabla 2 Variaciones de la temperatura del flujo de alimentación (°C) al proceso.	19
Tabla 3 Variaciones de la presión de alimentación (bar) al proceso.	19

Lista de figuras

	Pg.
Figura 1 Diagrama de Flujo del proceso de metanación para la configuración adiabática de este trabajo en Aspen Plus V14.	14
Figura 2 Diagrama de Flujo del proceso de metanación para la configuración con sistema de enfriamiento en Aspen Plus V14.	14
Figura 3 Enfoque metodológico aplicado para el desarrollo de la investigación.	16
Figura 4 Composiciones molares en configuración adiabática de este trabajo.	20
Figura 5 Conversión global, perfiles de presión y temperatura para la configuración adiabática de este trabajo.	21
Figura 6 Composiciones molares en la configuración con enfriamiento en este trabajo.	24
Figura 7 Conversión global, perfiles de temperatura y presión para la configuración con enfriamiento de este trabajo.	24
Figura 8 Perfiles de temperatura de cada reactor para la configuración adiabática de Colelli et al. (2024), Jimenez et al. (2025) y este trabajo.	26
Figura 9 Perfiles de temperatura de cada reactor para la configuración con enfriamiento de este trabajo, Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).	29

Lista de apéndices

	Pg.
Apéndice 1 Características de los reactores de metanación en la configuración adiabática de este trabajo	50
Apéndice 2 Características de los reactores de metanación en la configuración con enfriamiento de este trabajo.	50
Apéndice 3 Esquema simplificado de la configuración adiabática.	50
Apéndice 4 Esquema simplificado de la configuración con enfriamiento.	51
Apéndice 5 Flujos molares de alimentación (kmol/h) para la configuración adiabática obtenidos en este trabajo.	52
Apéndice 6 Flujos molares de alimentación (kmol/h) en la configuración con enfriamiento de este trabajo.	52
Apéndice 7 Perfiles de temperatura, presión y conversión de la configuración adiabática de este trabajo con un aumento del 20% en la longitud de los tres primeros reactores.	52
Apéndice 8 Perfiles de temperatura, presión y conversión de la configuración con enfriamiento de este trabajo con un aumento del 20% en la longitud de los 2 reactores.	53
Apéndice 9 Conversión vs Temperatura para la configuración adiabática de este trabajo, Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).	54
Apéndice 10 Conversiones globales de la configuración adiabática de este trabajo, Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).	54
Apéndice 11 Flujos molares de salida de cada reactor en la configuración adiabática reportados en este trabajo, Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).	55
Apéndice 12 Flujos molares de salida de cada reactor (kmol/h) en la configuración con enfriamiento reportados por Colelli et al. (2024), Jimenez (2025) y este trabajo.	55
Apéndice 13 Conversión vs Temperatura para la configuración con enfriamiento de este trabajo, Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).	56
Apéndice 14 Flujo de vapor de agua en kmol/h alimentado para cada variación de flujo de hidrogeno alimentado, temperatura de alimentación y presión de alimentación en la configuración adiabática.	56
Apéndice 15 Gráficas de conversión vs temperatura de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración adiabática de este trabajo.	57
Apéndice 16 Perfiles de temperatura de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración adiabática de este trabajo.	58
Apéndice 17 Perfiles de presión de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración adiabática de este trabajo.	59
Apéndice 18 Perfiles de conversión de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración adiabática de este trabajo.	60
Apéndice 19 Conversiones globales de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración adiabática de este trabajo.	61
Apéndice 20 Tiempos de residencia para las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración adiabática de este trabajo.	62
Apéndice 21 Perfiles de temperatura para las variaciones de temperatura de entrada para la configuración adiabática.	63
Apéndice 22 Perfiles de presión para las variaciones de temperatura para la configuración adiabática de este trabajo.	64
Apéndice 23 Perfiles de conversión para las variaciones de temperatura para la configuración adiabática	

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DEL PROCESO DE METANACIÓN

	5
de este trabajo.....	65
Apéndice 24 Conversiones globales para las variaciones de temperatura para la configuración adiabática de este trabajo.....	66
Apéndice 25 Tiempo de residencia para las variaciones de temperatura para la configuración adiabática de este trabajo.....	68
Apéndice 26 Perfiles de temperatura para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.	68
Apéndice 27 Perfiles de presión para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.	69
Apéndice 28 Perfiles de conversión para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.	70
Apéndice 29 Conversiones globales para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.	71
Apéndice 30 Tiempo de residencia para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.	72
Apéndice 31 Perfiles de temperatura de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración con enfriamiento de este trabajo.	73
Apéndice 32 Perfiles de presión de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración con enfriamiento de este trabajo.....	74
Apéndice 33 Perfiles de conversión de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración con enfriamiento de este trabajo.	74
Apéndice 34 Gráficas de conversión vs temperatura de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración	75
Apéndice 35 Conversiones globales de las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración con enfriamiento	75
Apéndice 36 Tiempos de residencia para las variaciones de flujo de H ₂ para la configuración con	77
Apéndice 37 Perfiles de temperatura de las variaciones de la temperatura de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.	77
Apéndice 38 Perfiles de presión de las variaciones de la temperatura de alimentación para la configuración de reactores con enfriamiento de este trabajo.	78
Apéndice 39 Perfiles de conversión de las variaciones de la temperatura de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.	78
Apéndice 40 Conversiones globales de las variaciones de la temperatura para la configuración con.....	79
Apéndice 41 Tiempos de residencia para las variaciones de temperatura para la configuración con.....	80
Apéndice 42 Perfiles de temperatura de las variaciones de la presión de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.	80
Apéndice 43 Perfiles de presión de las variaciones de la presión de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.....	81
Apéndice 44 Perfiles de conversión de las variaciones de la presión de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.....	81
Apéndice 45 Conversiones globales de las variaciones de la presión para la configuración con.....	82
Apéndice 46 Tiempos de residencia para las variaciones de presión para la configuración con.....	83
Apéndice 47 Representación cinética en Aspen Plus	84
Apéndice 48 Representación cinética de la configuración con enfriamiento en Aspen Plus	86

Resumen

Título: Análisis de sensibilidad del proceso de metanación para tecnología *Power To Gas* mediante simulación en *Aspen Plus**

Autores: Daniel Felipe Gomez Grimaldos, Luisa Fernanda Correa Vergara**

Palabras Clave: Simulación, metanación, reactor de lecho fijo, *Power to Gas*, *Aspen Plus*.

Descripción: La metanación es un proceso fundamental en la transición hacia fuentes de energía limpia, ya que permite transformar CO₂ e hidrógeno en gas natural sintético (GNS), un recurso clave en la reducción de emisiones de carbono. Este proceso forma parte de la tecnología *Power to Gas* (PtG), que convierte la energía eléctrica en gases como hidrógeno o metano, brindando una solución de almacenamiento y uso para energías renovables cuando la demanda lo requiere. La eficiencia de la metanación depende de variables críticas como la presión, la temperatura y la composición del gas de entrada. Estos factores influyen directamente en la conversión y selectividad hacia el metano, lo cual hace necesario un análisis de sensibilidad para optimizar el proceso. Una de las maneras más eficientes de realizar este análisis es mediante simulaciones computacionales, evitando así los costos y el tiempo que suponen los ensayos experimentales. Para este proyecto, se utilizará el software *Aspen PLUS*, que permite evaluar de manera detallada cómo afectan estas variables operativas en el desempeño del reactor de metanación. En este proceso, el dióxido de carbono (CO₂) proviene de gases de chimenea previamente tratados para eliminar impurezas que podrían afectar la catálisis, mientras que el hidrógeno (H₂) utilizado es de alta pureza y ha sido obtenido mediante un proceso externo de electrólisis del agua impulsado por fuentes de energía renovable. La reacción de metanación suele operar entre 200 y 550 °C y a presiones de 1 a 100 bar, en condiciones libres de impurezas como azufre y oxígeno, que pueden inhibir los catalizadores. Este proyecto analiza de manera conjunta la influencia de presión, temperatura y composición, con el objetivo de aportar datos valiosos en el contexto de captura y reutilización de CO₂, una tecnología esencial para mitigar el cambio climático. A través de este estudio, se busca optimizar las condiciones de operación para maximizar la eficiencia y la selectividad en la producción de gas natural sintético.

*Trabajo de grado

**Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Escuela de ingeniería química. Director Giovanni Morales Medina. Doctor en Ingeniería química.

Abstract

Title: Sensitivity Analysis of the Methanation Process for *Power to Gas* Technology Using *Aspen Plus* Simulation*

Authors: Daniel Felipe Gomez Grimaldos, Luisa Fernanda Correa Vergara**

Key Words: Simulation, methanation, fixed-bed reactor, *Power to Gas*, *Aspen Plus*.

Description. Methanation is a fundamental process in the transition toward clean energy sources, as it enables the conversion of CO₂ and hydrogen into synthetic natural gas (SNG), a key resource for reducing carbon emissions. This process is part of *Power to Gas (PtG)* technology, which converts electrical energy into gases such as hydrogen or methane, providing a storage and utilization solution for renewable energy when demand requires it. The efficiency of methanation depends on critical variables such as pressure, temperature, and feed gas composition. These factors directly influence methane conversion and selectivity, making a sensitivity analysis necessary to optimize the process. One of the most efficient ways to perform this analysis is through computational simulations, thus avoiding the costs and time associated with experimental testing. For this project, *Aspen Plus* software will be used to evaluate in detail how these operating variables affect the performance of the methanation reactor. In this process, carbon dioxide (CO₂) is obtained from flue gases that have been previously treated to remove impurities that could affect catalysis, while the hydrogen (H₂) used is of high purity and has been produced through an external water electrolysis process powered by renewable energy sources. The methanation reaction typically operates between 200 and 550 °C and at pressures ranging from 1 to 100 bar, under conditions free of impurities such as sulfur and oxygen, which can inhibit catalysts. This project jointly analyzes the influence of pressure, temperature, and composition, with the aim of providing valuable data in the context of CO₂ capture and utilization, an essential technology for mitigating climate change. Through this study, the objective is to optimize operating conditions in order to maximize efficiency and selectivity in the production of synthetic natural gas.

*Degree Work

**Faculty of Physicochemical Engineering. School of Chemical Engineering. Director Giovanni Morales Medina. Ph.D. in Chemical Engineering.

Introducción

La transición hacia fuentes de energía más sostenibles y la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero son desafíos clave en la actualidad, como señalan Schaaf et al. (2014) y Rusmanis et al. (2019). En este contexto, la metanación emerge como una solución prometedora para almacenar energía renovable en forma de gas (*Power-to-Gas*), produciendo metano a partir de CO₂ proveniente de gases de chimenea tratados e H₂ obtenido por electrólisis impulsada por energía renovable, con aplicaciones en la descarbonización de sectores industriales y de transporte (Vidal et al., 2018; Tripodi et al., 2020; Ingersoll et al., 2024).

La eficiencia del proceso depende de variables como la temperatura, la presión y la composición del gas de entrada, cuya interacción y efecto sobre el rendimiento del reactor no han sido completamente estudiados, limitando la operación del proceso en condiciones específicas (Pérez-Gil, 2020; Vega et al., 2021; Hernández-Cuberos et al., 2025). La simulación computacional permite analizar y predecir el impacto de estas variables, reduciendo la necesidad de ensayos experimentales (Pérez-Gil, 2020; Hernández-Cuberos et al., 2025).

Este proyecto tiene como objetivo realizar un análisis de sensibilidad del proceso de metanación mediante simulaciones en el *software Aspen Plus*, evaluando cómo la presión, la temperatura y la composición del gas influyen en la producción de gas natural sintético. Con ello, se busca responder a la pregunta: ¿Cómo afectan los cambios en la presión, temperatura y composición del gas de entrada al rendimiento de un reactor de metanación para la producción de gas natural sintético?

1. Objetivos

1.1. Objetivo General

Desarrollar un análisis de sensibilidad para un reactor de metanación utilizado en la tecnología *Power to Gas* mediante simulación en *Aspen Plus*.

1.2. Objetivos Específicos

1. Establecer una simulación base para la operación de metanación en estado estacionario utilizando el programa *Aspen Plus* para la tecnología *Power to Gas*, a partir de información derivada de reportes de literatura.

2. Validar la simulación por medio de la comparación de los perfiles de temperatura, presión, composición y conversión con otros estudios de simulación reportados en la literatura.

3. Implementar un análisis de sensibilidad en la simulación base, definiendo la influencia de la temperatura, presión y el flujo de alimentación de hidrógeno en la conversión del proceso.

2. Marco Teórico

2.1. Tecnología *Power to Gas (PtG)*

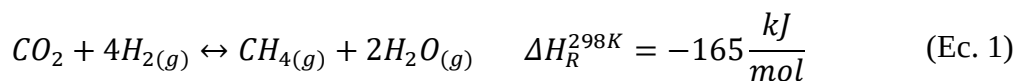
La tecnología (PtG) es una estrategia de conversión energética que permite transformar excedentes de energía eléctrica, especialmente provenientes de fuentes renovables intermitentes

como la solar y la eólica, en combustibles gaseosos mediante procesos electroquímicos y termoquímicos. El esquema PtG integra un sistema de electrólisis para la producción de hidrógeno a partir de agua y una etapa posterior de metanación, en la cual el hidrógeno generado reacciona con dióxido de carbono para producir metano sintético.

En el contexto de la transición energética, la tecnología PtG aborda el desbalance temporal entre generación y demanda característico de los sistemas renovables (Chen et al., 2022). Al convertir electricidad en metano, permite el almacenamiento de energía a gran escala y largo plazo aprovechando la infraestructura existente de transporte y almacenamiento de gas natural, reduciendo la necesidad de inversiones en nuevas redes energéticas (Ikäheimo et al., 2022). Adicionalmente el uso de CO₂ como materia prima en la etapa de metanación contribuye a la mitigación de emisiones de gases de efecto invernadero al cerrar parcialmente el ciclo del carbono. En este sentido, la metanación integrada en esquemas PtG actúa simultáneamente como vector de almacenamiento energético y herramienta de descarbonización en sectores difíciles de electrificar.

2.2. Metanación

La metanación es un proceso catalítico en el que el CO₂ reacciona con H₂ para producir CH₄ y agua, conocido como reacción de Sabatier (Su et al., 2016). Su carácter fuertemente exotérmico representa importantes retos de diseño y operación (Kiewidt & Thöming, 2015). La reacción global se expresa como:



La elevada liberación de calor favorece altas conversiones a bajas temperaturas desde el punto de vista termodinámico, pero impone restricciones cinéticas y de transferencia de calor en reactores industriales (Kiewidt & Thöming, 2015), por lo que el proceso se implementa comúnmente en reactores de lecho fijo en serie con enfriamiento intermedio.

2.3. Reactor de metanación

El modelo cinético de Xu y Froment (1989), ampliamente utilizado en estudios académicos e industriales de metanación de CO₂, se fundamenta en un mecanismo Langmuir–Hinshelwood–Hougen–Watson (LHHW) ajustado experimentalmente para catalizadores comerciales de níquel soportado (Champon et al., 2019), y se expresa como:

$$r_{CH_4} = \frac{\frac{k}{p_{H_2}^{3.5}} \left(p_{CH_4} p_{H_2O}^2 - \frac{p_{H_2}^4 p_{CO_2}}{K_{eq}} \right)}{(DEN)^2} \quad (\text{Ec. 2})$$

Donde $p_{CH_4}, p_{H_2}, p_{H_2O}, p_{CO_2}$ son las presiones parciales de cada compuesto, k es la constante cinética y K_{eq} es la constante de equilibrio de la reacción.

El término DEN representa el denominador de adsorción superficial, definido como:

$$DEN = 1 + K_{H_2} p_{H_2} + K_{CH_4} p_{CH_4} + \frac{K_{H_2O} p_{H_2O}}{p_{H_2}} \quad (\text{Ec. 3})$$

Donde $K_{H_2}, K_{CH_4}, K_{H_2O}$ son las constantes de adsorción de cada uno de los compuestos.

La constante cinética sigue una expresión tipo Arrhenius:

$$k = 2.290 \cdot 10^{16} \exp\left(-\frac{29336}{T}\right) \quad (\text{Ec. 4})$$

Mientras que la constante de equilibrio de la reacción de metanación se expresa como:

$$K_{eq} = 10266.76 \cdot \exp\left(-\frac{22430}{T} + 26.047\right) \quad (\text{Ec. 5})$$

Asimismo, las constantes de adsorción para las diferentes especies se expresan como:

$$K_{H_2} = 6.12 \times 10^{-11} \cdot \exp\left(\frac{9971.13}{T}\right) \quad (\text{Ec. 6})$$

$$K_{CH_4} = 6.65 \times 10^{-6} \exp\left(\frac{4604.28}{T}\right) \quad (\text{Ec. 7})$$

$$K_{H_2O} = 1.77 \times 10^3 \exp\left(\frac{-10666.35}{T}\right) \quad (\text{Ec. 8})$$

Xu y Froment desarrollaron su modelo con catalizadores industriales Ni/Al₂O₃, representativos de los empleados en procesos de metanación y reformado (Xu & Froment, 1989). Este catalizador presenta alta actividad para la hidrogenación de CO₂, buena estabilidad térmica y costo relativamente bajo frente a catalizadores de metales nobles, con formulaciones comerciales en el rango de 20–50 USD/kg dependiendo de la carga metálica y la escala de adquisición (Tommasi et al., 2024; Yu et al., 2022).

Para el proceso de metanación, distintas configuraciones de reactores de lecho fijo han sido implementadas para gestionar la liberación de calor y maximizar la conversión global. Colelli et al. (2024) evaluaron un sistema adiabático de cinco reactores en serie con enfriamiento intermedio

y separación parcial de agua (Figura 1), y una configuración de dos reactores con enfriamiento más intensivo (Figura 2), donde la primera distribuye la carga térmica a lo largo del sistema y la segunda simplifica el proceso a costa de mayores exigencias de enfriamiento. Las características de ambas configuraciones se presentan en los Apéndices 1 y 2.

Según el PFD de la Figura 1, los flujos de CO_2 y H_2 ingresan a un intercambiador de calor junto con una inyección de vapor, la corriente resultante ingresa al primer reactor. El efluente se enfría y se retira parcialmente el agua mediante un separador flash, recorrido que se repite en los cuatro reactores siguientes hasta obtener la corriente de producto final. En el PFD de la Figura 2, la alimentación de CO_2 es comprimida por los compresores K1 y K2 en paralelo y mezclada en MIX1, precalentándose en EX1 y EX3 antes de ingresar a los reactores PFR1 y PFR2, refrigerados internamente con agua presurizada. Los efluentes se enfrían en EX4 y EX5 para detener la reacción y son conducidos a los separadores FLASH y FLASH2, donde se obtienen una fase líquida (H_2O) y una fase gaseosa correspondiente al producto.

Figura 1

Diagrama de Flujo del proceso de metanación para la configuración adiabática de este trabajo en Aspen Plus V14.

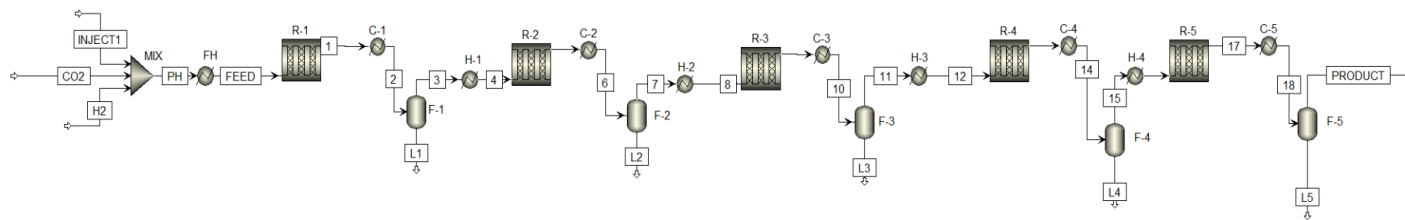
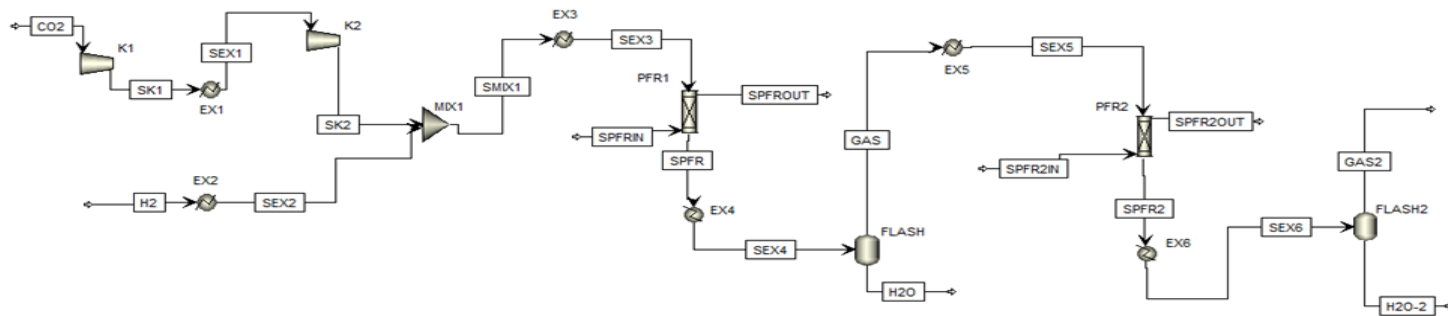
**Figura 2**

Diagrama de Flujo del proceso de metanación para la configuración con sistema de enfriamiento en Aspen Plus V14.



3. Estado del arte

Colelli et al. (2024) desarrollaron un estudio integral de *Power-to-Gas* basado en metanación catalítica, combinando diseño en estado estacionario y simulación dinámica en *Aspen Plus/Dynamics* para representar la operación intermitente típica de sistemas renovables. El trabajo compara una configuración adiabática multietapa con separación intermedia de agua frente a una configuración con enfriamiento, esta última con mayor conversión, menos reactores y mejor respuesta ante perturbaciones. El aporte central es la evaluación de estrategias de control bajo variaciones de carga de H_2 , verificando el cumplimiento de especificaciones de inyección a red y mostrando cómo la gestión del calor determina la estabilidad del proceso y la calidad del SNG.

Jiménez (2024) presenta la implementación de una estrategia de control *feedback* para un proceso de metanación simulado en *Aspen HYSYS*, desarrollada en tres fases: modelado en estado estacionario con cuatro reactores PFR en serie, evaluación dinámica en lazo abierto ante perturbaciones de flujo, temperatura y relación de reactivos, e integración de un lazo de control *feedback*. Aunque el sistema en lazo abierto alcanza conversiones acumulativas de hasta 96%, presenta fluctuaciones que requieren control activo. Al implementar la estrategia con dos reactores refrigerados en lugar de cuatro adiabáticos, se mejoró la estabilidad y eficiencia, manteniendo una conversión global del 96% con tiempos de estabilización significativamente reducidos ante perturbaciones.

Chein et al. (2016) simulaban numéricamente la reacción de metanación de CO_2 en reactores de lecho fijo para la producción de gas natural sintético, caracterizando el rendimiento

del proceso mediante la conversión de CO_2 bajo diversas condiciones de operación, con énfasis en la temperatura de entrada como parámetro principal. Sus resultados aportaron información relevante para optimizar las condiciones de operación y mejorar la eficiencia del proceso.

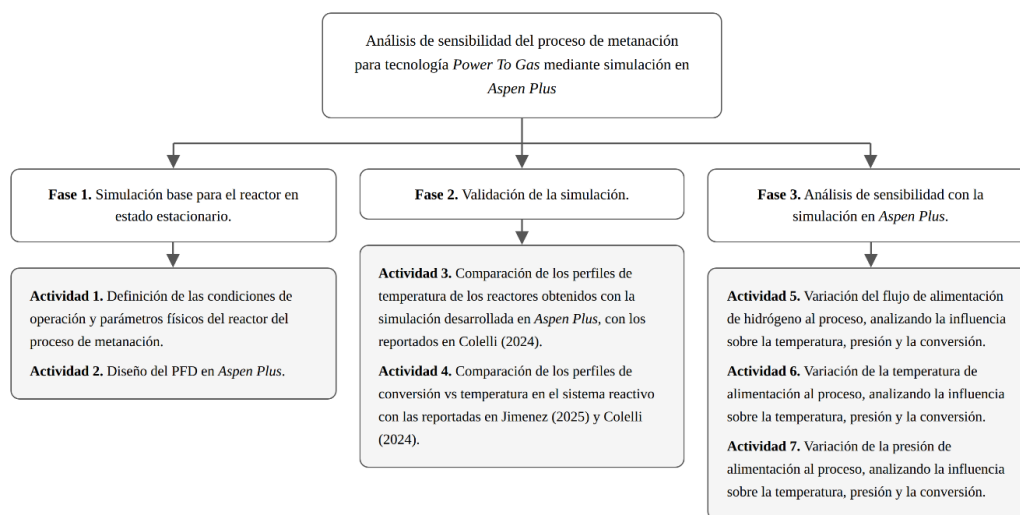
Tripodi et al. (2020) desarrollaron un diseño integral de una planta de metanación de CO_2 , combinando pruebas experimentales y formulaciones matemáticas para la metanación de CO y CO_2 . Vincularon dos cinéticas de reacción detalladas a una simulación en Aspen Plus a escala de planta, calculando composiciones de corrientes y perfiles térmicos internos del reactor, estableciendo una base sólida para las secciones de separación. Por su parte, Fache et al. (2018) optimizaron reactores de metanación de lecho fijo para aplicaciones de conversión Power-to-Gas, centrándose en la operación segura y eficiente tanto en condiciones transitorias como en estado estacionario.

Los trabajos anteriores soportan el uso de Aspen Plus para la simulación del proceso de metanación e incluyen el efecto de la temperatura y la presión, sin embargo, omiten la variación en la composición de los reactivos y su impacto en la eficiencia del proceso, aspecto crucial para comprender el rendimiento del sistema bajo diferentes condiciones operativas y optimizar su aplicación práctica.

4. Metodología

Figura 3

Enfoque metodológico aplicado para el desarrollo de la investigación.



4.1. Fase 1. Simulación base para el reactor en estado estacionario.

Actividad 1. Definición de las condiciones de operación y parámetros físicos del reactor del proceso de metanación. Las condiciones de operación y parámetros físicos del sistema se definieron con base en Jiménez et al. (2025), adoptando la cinética de Xu et al. (1989) por su amplio uso en procesos de metanación comercial. Se empleó la ecuación de estado Soave-Redlich-Kwong (SRK) y un modelo cinético de tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW), con níquel soportado sobre espinela de magnesio ($\text{Ni/MgAl}_2\text{O}_4$) como catalizador. La densidad de partícula es 2704 kg/m^3 (Jiménez et al., 2025), el diámetro de partícula 3.175 mm , el factor de forma 0.874 y la porosidad del lecho 0.5 (Xu et al., 1989). La presión de entrada es de 15 bar y la caída de presión se calculó mediante la correlación de Ergun.

Actividad 2. Diseño del PFD en *Aspen Plus*. El PFD para las configuraciones adiabática y con enfriamiento fueron codificados en *Aspen Plus V14*, de acuerdo con las especificaciones dadas

en Colelli et al. (2024). El PFD de la configuración adiabática consta de un mezclador de gases, 5 reactores *Rplug*, 5 enfriadores, 5 Calentadores y 5 separadores *Flash*. La temperatura del proceso se regula con enfriamiento intermedio retirando agua del proceso. (Figura 1). La configuración con enfriamiento consta de 2 compresores, 1 mezclador de gases, 3 enfriadores, 3 calentadores, 2 reactores *Rplug* y 2 separadores *Flash*. (Figura 2). La temperatura del proceso se regula en corriente paralela con agua presurizada en cada reactor.

4.2. Fase 2. Validación de la simulación.

Actividad 3. Los perfiles de temperatura obtenidos de las simulaciones fueron comparados con los reportados por Colelli et al. (2024) y Jiménez (2025).

Actividad 4. Los perfiles de conversión obtenidos de las simulaciones fueron comparados con los reportados por Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).

4.3. Fase 3. Análisis de sensibilidad con la simulación en *Aspen Plus*.

Actividad 5. Flujo de alimentación de hidrógeno. El flujo de hidrógeno en las simulaciones fue modificado en porcentajes $\pm 5\%$, $\pm 10\%$, $\pm 20\%$ y $\pm 30\%$ (Tabla 1), analizando la influencia sobre la temperatura, presión y la conversión en cada configuración.

Tabla 1

Variaciones del flujo de alimentación de hidrógeno (kmol/h) al proceso.

-30%	-20%	-10%	-5%	base	5%	10%	20%	30%
21.86	24.98	28.11	29.67	31.23	32.79	34.35	37.48	40.6

Actividad 6. Temperatura del flujo de alimentación al proceso. La temperatura de entrada fue modificada en cada simulación, según $\pm 5\%$, $\pm 10\%$, $\pm 20\%$ y $\pm 30\%$ (Tabla 2), analizando la influencia sobre la temperatura, presión y la conversión en cada configuración.

Tabla 2

Variaciones de la temperatura del flujo de alimentación ($^{\circ}\text{C}$) al proceso.

-30%	-20%	-10%	-5%	base	5%	10%	20%	30%
189	216	243	256.5	270	283.5	297	324	351

Actividad 7. Presión de alimentación al proceso. La presión de entrada fue modificada en cada simulación, según $\pm 5\%$, $\pm 10\%$, $\pm 20\%$ y $\pm 30\%$ (Tabla 3), analizando la influencia sobre la temperatura, presión y la conversión.

Tabla 3

Variaciones de la presión de alimentación (bar) al proceso.

-30%	-20%	-10%	-5%	base	5%	10%	20%	30%
10.5	12	13.5	14.25	15	15.75	16.5	18	19.5

5. Resultados

5.1. Simulación configuraciones para los reactores de metanación

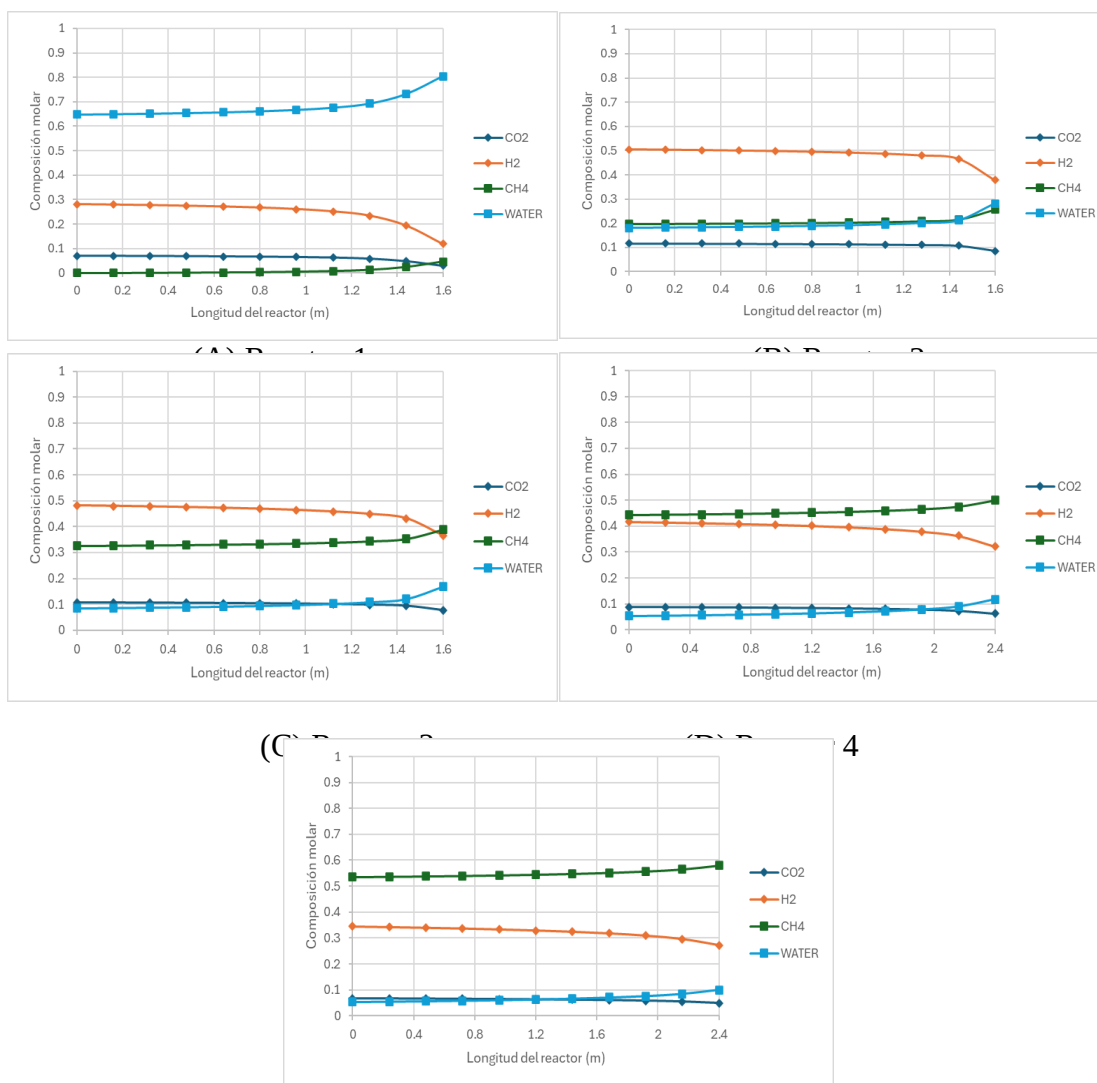
5.1.1. Simulación configuración adiabática

La Figura 1 presenta la configuración adiabática codificada en *Aspen Plus*, y el Apéndice 3 el PFD correspondiente con los flujos molares de CO_2 , H_2 y CH_4 , las conversiones globales, las temperaturas de entrada y salida y los *heat duty* de los intercambiadores. Del flujo de salida del Reactor 1 se retiran 4.3 MMBTU/h, correspondiente a la mitad del valor máximo recomendado por Douglas (1988), mientras que en los reactores siguientes este valor disminuye a 0.5, 0.3, 0.2 y 0.2 MMBTU/h respectivamente, en concordancia con la reducción progresiva de la conversión a lo largo del tren. Al Reactor 1 se define una inyección de vapor de 72.1 kmol/h que, junto con el agua producida, es retirada por los separadores flash (77.4 kmol/h), limitando así el incremento de temperatura en la configuración adiabática. Los flujos de alimentación de cada reactor se presentan en el Apéndice 5, y los flujos de vapor alimentados en cada variación en el Apéndice 14.

La Figura 4 presenta las composiciones molares de los cinco reactores. En el Reactor 1 se observa la alta presencia de agua como fluido de enfriamiento y el inicio de la reacción, mientras que en el Reactor 2 la cantidad de agua se reduce drásticamente tras la separación en el flash, y la fracción molar de metano duplica la del CO_2 . A partir del Reactor 3 el metano se consolida como componente mayoritario con la consecuente disminución de los reactivos, tendencia que se mantiene en los Reactores 4 y 5, donde el proceso alcanza una conversión global final de 92.62%.

Figura 4

Composiciones molares en configuración adiabática de este trabajo.

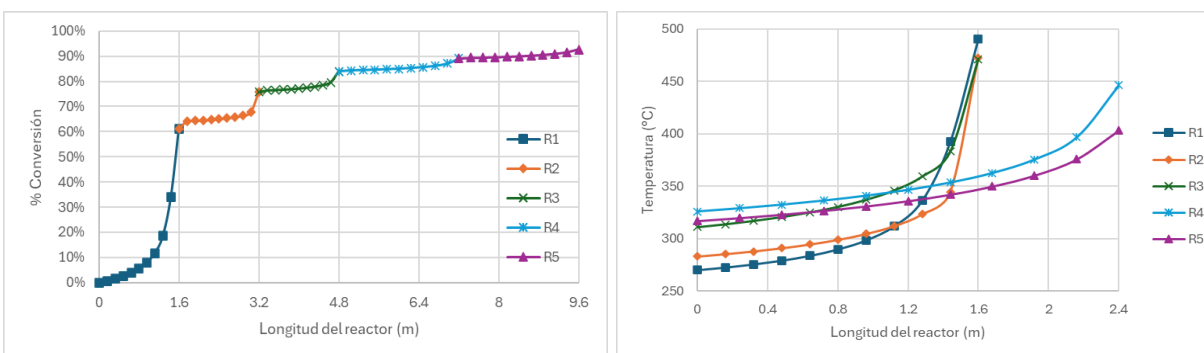


(E) Reactor 5

La Figura 5A presenta la conversión global de cada reactor. La mayor parte de la reacción ocurre en el Reactor 1, con una conversión del 61.37%, mientras que los Reactores 2, 3, 4 y 5 aportan 14.6%, 8.2%, 5.3% y 3.4% respectivamente. Los tres primeros reactores acumulan una conversión del 84.08%, y los dos últimos aportan el 8.64% restante, comportamiento esperado dado que la concentración de reactivos disminuye progresivamente a lo largo del tren.

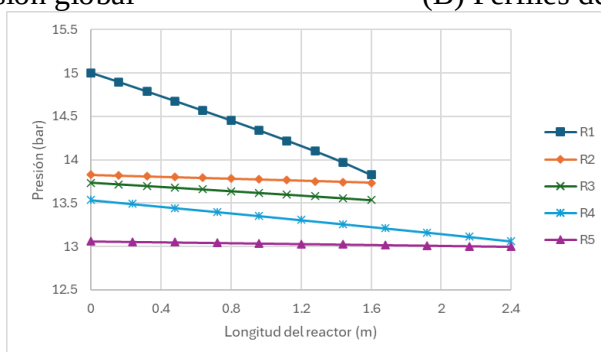
Figura 5

Conversión global, perfiles de presión y temperatura para la configuración adiabática de este trabajo.



(A) Conversión global

(B) Perfiles de temperatura



(C) Perfiles de presión

La Figura 5B presenta los perfiles de temperatura de la configuración. Los tres primeros reactores presentan aumentos de temperatura de 220 °C, 190 °C y 160 °C respectivamente, asociados a la mayor concentración de reactivos y conversión en estas etapas, mientras que los Reactores 4 y 5 muestran incrementos menores de 120 °C y 20 °C. Las temperaturas de salida disminuyen progresivamente a lo largo del tren, con valores de 490 °C, 472 °C, 471 °C, 446 °C y 321 °C respectivamente. La temperatura de los tres primeros reactores se mantiene por debajo de 500 °C mediante inyección de vapor en la alimentación y una longitud de reactor menor a la de los Reactores 4 y 5.

La Figura 5C presenta los perfiles de presión de los cinco reactores. La mayor caída de presión ocurre en el Reactor 1 con 1.17 bar, asociada al mayor consumo neto de moles en esta etapa, mientras que en los reactores siguientes la caída es considerablemente menor, en concordancia con las menores conversiones alcanzadas. Por otro lado, al aumentar un 20% la longitud de los tres primeros reactores, los Reactores 1 y 5 superan los 500 °C alcanzando 600 °C y 528 °C respectivamente, confirmando que mantener longitudes menores en los reactores más activos es necesario para controlar la temperatura. Los *heat duty* reportados para los cinco reactores son de -4.29, -0.65, -0.16, -0.17 y -0.32 MMBTU/h respectivamente.

5.1.2. Simulación base configuración con enfriamiento

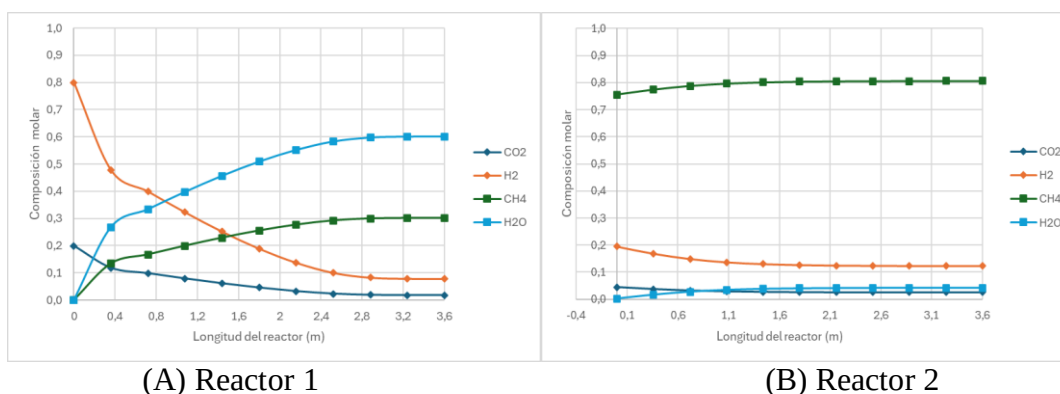
La Figura 2 presenta la configuración con enfriamiento codificada en *Aspen Plus*, y el Apéndice 4 el PFD correspondiente con los flujos molares, conversiones, temperaturas y *heat duty* de los intercambiadores. La conversión global alcanzada es de 97.08%. A la salida del Reactor 1 se remueven 0.93 MMBTU/h, reduciendo la temperatura de 380 °C a 270 °C antes del ingreso al Reactor 2, donde el calor a remover es considerablemente menor (0.14 MMBTU/h), ajustando la temperatura de 334 °C a 342 °C.

El Apéndice 6 presenta los flujos de alimentación de cada reactor en la configuración con enfriamiento. Los perfiles de composición molar (Figura 6) muestran una rápida disminución del CO₂ en los primeros 0.5 m, asociada a la alta actividad catalítica en la entrada. La reducción en la velocidad de reacción alrededor de 0.75 m se atribuye al aumento de temperatura, que favorece la reacción inversa. El H₂ disminuye gradualmente de 0.2 a 0.08 con menor pendiente al encontrarse

en exceso, favoreciendo la selectividad hacia la metanación, mientras que el CH_4 aumenta de 0.75 a 0.85 en concordancia con la estequiometría. La formación moderada de H_2O refleja la conversión alcanzada y resalta la importancia del control térmico para evitar el *runaway*.

Figura 6

Composiciones molares en la configuración con enfriamiento en este trabajo.

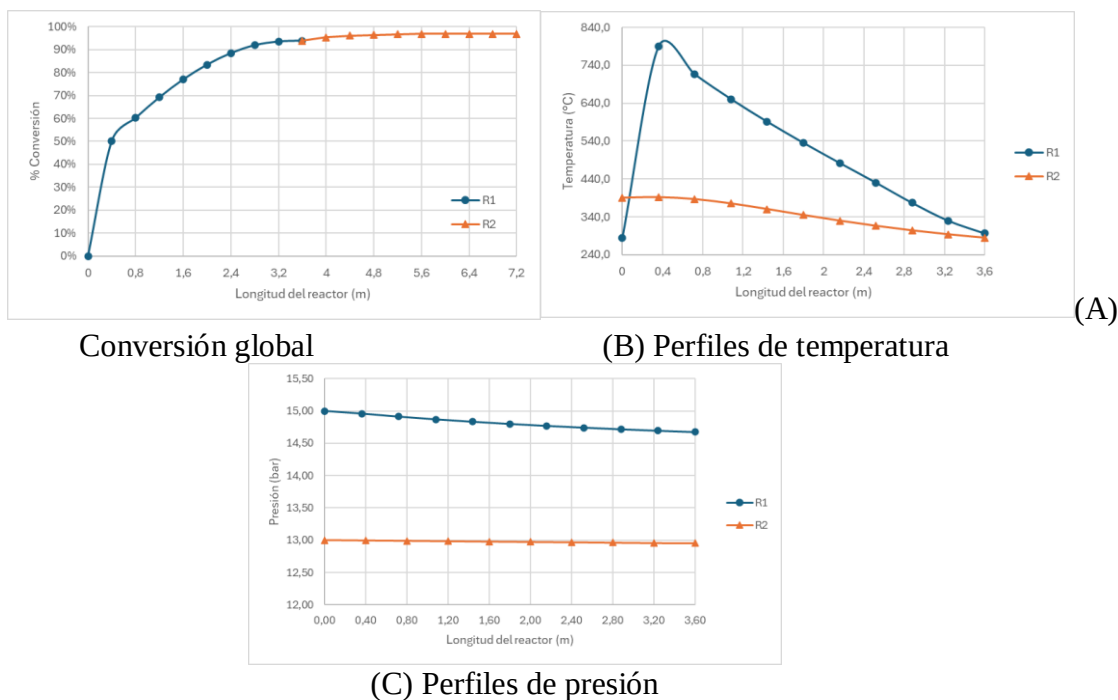


La Figura 7A presenta el perfil de conversión de la configuración con enfriamiento. En el Reactor 1, los primeros 0.4 m corresponden a la zona de control cinético, donde las altas concentraciones de reactivos favorecen la reacción directa, mientras que a partir de este punto la acumulación de productos y la exotermicidad reducen la fuerza impulsora y desplazan el equilibrio en contra de la formación de metano. En el Reactor 2 la conversión aumenta hasta ~80% en los primeros 1.2 m bajo régimen cinético, estabilizándose posteriormente al aproximarse al equilibrio termodinámico. El Reactor 1 alcanza una conversión global de 94.12% y el Reactor 2 la incrementa hasta 97.08%, gracias a que el enfriamiento intermedio permite operar a temperaturas más favorables para el equilibrio y promover la conversión del CO_2 residual.

Figura 7

Conversión global, perfiles de temperatura y presión para la configuración con enfriamiento de

este trabajo.



La Figura 7B presenta los perfiles de temperatura de la configuración con enfriamiento. El Reactor 1 alcanza un máximo de 810 °C, condición que supera ampliamente el rango óptimo de operación, favoreciendo reacciones secundarias, desactivación del catalizador por sinterización y coque, y riesgo de sobrecalentamiento. El Reactor 2 alcanza 422 °C, aproximándose al rango óptimo para la metanación con alta selectividad hacia CH₄. La Figura 7C muestra los perfiles de presión, con una caída de 15 bar a ~14.65 bar en el Reactor 1 y un perfil prácticamente plano en el Reactor 2 (~12 bar), con una caída total de ~2 bar. El aumento del 20% en la longitud de los reactores, presentado en el Apéndice 8, redistribuye mejor la carga de reacción, aunque exige una gestión más precisa del enfriamiento interetapa para mantener la estabilidad del catalizador.

5.2. Comparación de resultados

5.2.1. Configuración reactores adiabáticos

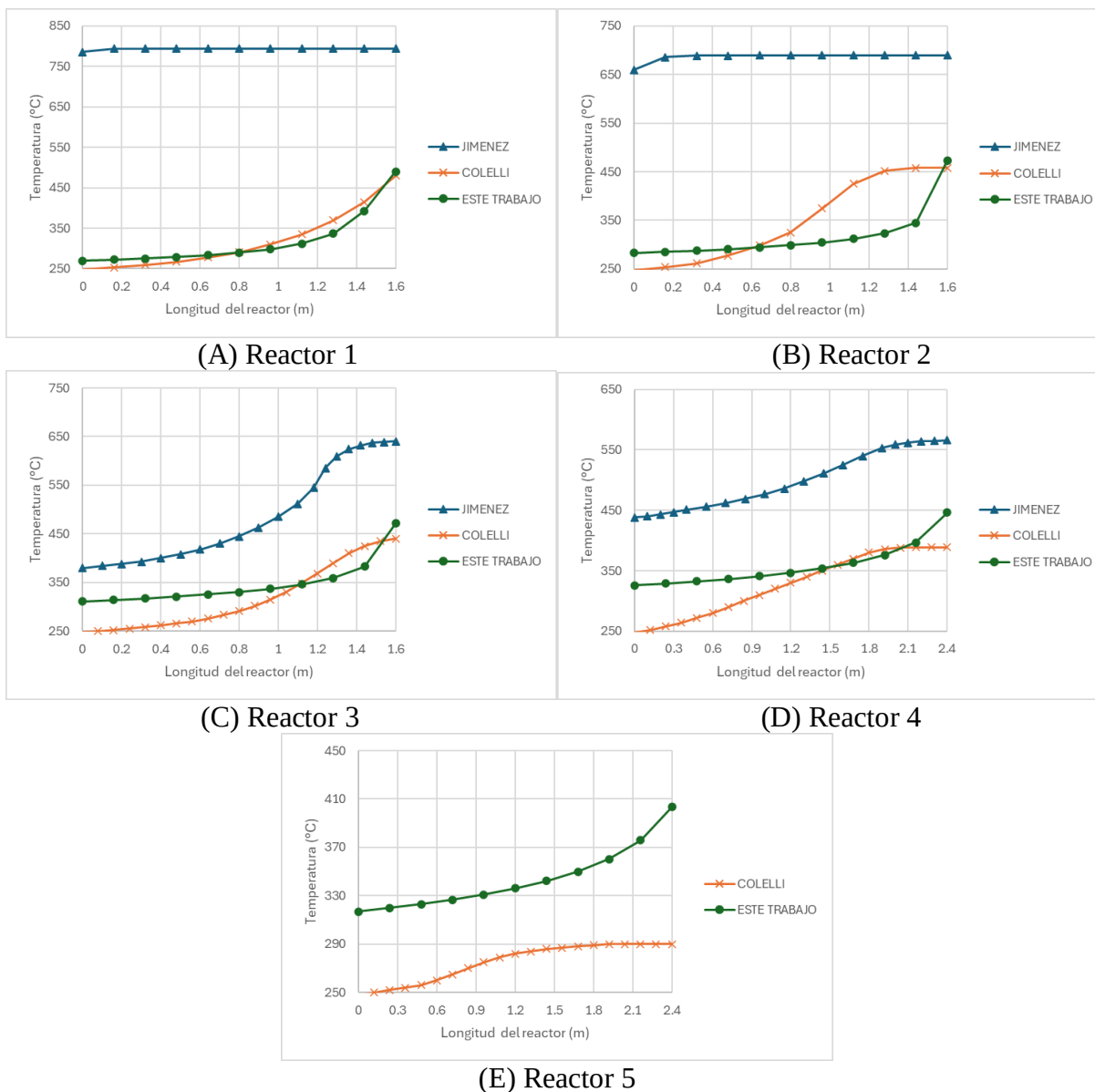
El apéndice 11 presenta los flujos molares de salida de CO_2 , H_2 y CH_4 de cada reactor reportados en Colelli et al. (2024), Jimenez (2025) y este trabajo, con una alimentación común de 7.8 kmol/h de CO_2 y 31.2 kmol/h de H_2 . Los flujos de salida de CH_4 del último reactor son de 7.78, 7.47 y 6.91 kmol/h respectivamente, diferencias atribuibles al uso de inyección de vapor en la alimentación en este trabajo, a las mayores temperaturas alcanzadas en Jimenez (2025) por la ausencia de dicha inyección, y al uso de una cinética de reacción y catalizador distintos en Colelli et al. (2024). En los tres casos se observa el mayor consumo de reactivos en el Reactor 1, debido a la mayor disponibilidad de estos al inicio del proceso.

La Figura 8 compara los perfiles de temperatura de cada reactor de la configuración adiabática de este trabajo con los reportados en Colelli et al. (2024) y Jimenez et al. (2025). Los perfiles de este trabajo y Colelli et al. son similares en los primeros reactores, dado que ambos emplean inyección de vapor en la alimentación, mientras que Jimenez et al. presenta temperaturas significativamente más altas en los Reactores 1 y 2 por la ausencia de dicha inyección. En los Reactores 3 y 4, los perfiles de este trabajo y Jimenez convergen al compartir la cinética de Xu & Froment (1989), y en el Reactor 5 los tres casos presentan temperaturas bajas debido a la escasa disponibilidad de reactivos en esta etapa.

Figura 8

Perfiles de temperatura de cada reactor para la configuración adiabática de Colelli et al.

(2024), Jimenez et al. (2025) y este trabajo.



El Apéndice 9 compara las curvas de temperatura vs. conversión de la configuración adiabática de este trabajo con Colelli et al. (2024) y Jimenez et al. (2025), observándose similitud en los tres casos dado que las conversiones globales son cercanas. Las diferencias en la conversión final respecto a Jimenez se atribuyen a la ausencia de enfriamiento intermedio en dicho trabajo, lo

que permite mayor conversión pero a temperaturas más elevadas, mientras que las diferencias con Colelli et al. se explican por el uso de una cinética y catalizador distintos, base rutenio en Colelli frente a base níquel en este trabajo. Operar en el rango de 400–500 °C es relevante para catalizadores de níquel, ya que temperaturas superiores favorecen rutas no deseadas como la reacción inversa de gas de agua (*RWGS*), la deposición de coque y la desactivación del catalizador.

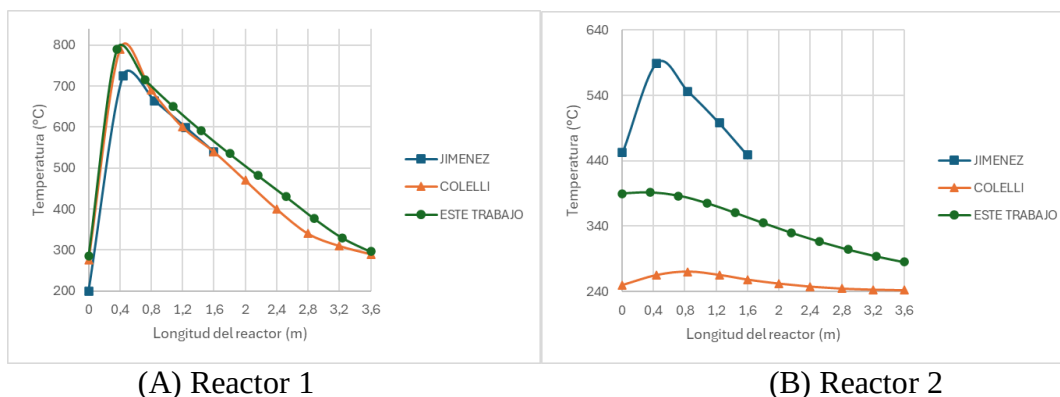
5.2.2. Configuración reactores con enfriamiento

El Apéndice 12 compara los flujos molares de salida de la configuración con enfriamiento según Colelli et al. (2024), Jimenez (2025) y este trabajo, con una alimentación común de 7.8 kmol/h de CO₂ y 31.2 kmol/h de H₂. Colelli et al. muestra alta conversión en el Reactor 1 que se completa prácticamente en el Reactor 2, con producción de CH₄ de 7.641 a 7.778 kmol/h. Jimenez reporta menor conversión inicial con CH₄ aumentando de 6.52 a 7.50 kmol/h. Este trabajo alcanza 7.54 kmol/h de CH₄ a la salida del Reactor 2, con conversiones y producciones comparables a las referencias.

La Figura 9A compara los perfiles de temperatura del Reactor 1 entre Colelli et al. (2024), Jimenez (2025) y este trabajo. Los tres casos presentan un aumento abrupto en los primeros 0.4 m, alcanzando máximos de ~789 °C, ~790 °C y ~730 °C respectivamente, seguido de un descenso continuo por consumo de reactivos y efecto del equilibrio. A partir de 0.8 m, Colelli et al. y este trabajo muestran tendencias muy similares, mientras que Jimenez presenta una caída más pronunciada, con el perfil de este trabajo ligeramente superior, sugiriendo una liberación de calor más sostenida.

Figura 9

Perfiles de temperatura de cada reactor para la configuración con enfriamiento de este trabajo, Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).



La Figura 9B muestra diferencias más marcadas en el Reactor 2. Jimenez (2025) presenta un pico elevado de 580–600 °C en la zona inicial seguido de una rápida disminución, indicando reacción concentrada en la entrada. Colelli et al. (2024) muestra un perfil bajo y casi plano (240–270 °C), característico de una reacción limitada. Este trabajo exhibe un comportamiento intermedio, iniciando en ~380 °C y descendiendo gradualmente hasta ~300 °C, reflejando una liberación de calor más distribuida. Estas diferencias se asocian a variaciones en la conversión residual, la actividad catalítica y la eficiencia del enfriamiento en cada modelo.

El Apéndice 13 compara las curvas de temperatura vs. conversión de la configuración con enfriamiento de este trabajo con Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025), mostrando perfiles generales similares. Jimenez logra una conversión ligeramente superior a costa de temperaturas más altas, mientras que las diferencias respecto a Colelli et al. se atribuyen a la cinética de reacción y al catalizador empleado. Dado que el rango óptimo de operación para catalizadores de níquel se sitúa entre 400 y 500 °C, operar por encima de este límite favorece rutas paralelas que reducen la

selectividad y pueden provocar desactivación prematura del catalizador.

5.3. Análisis de sensibilidad

5.3.1. Configuración reactores adiabáticos

El Apéndice 16 presenta los perfiles de temperatura ante variaciones del flujo de H_2 en los cinco reactores de la configuración adiabática. En todos los casos se observa un perfil ascendente propio de una reacción exotérmica, con entrada uniforme a 270 °C en el Reactor 1 y temperaturas de salida similares entre variaciones (~ 487 – 493 °C), siendo este reactor el más sensible en cuanto a la forma del perfil. Los Reactores 2 y 3 muestran salidas entre ~ 473 – 477 °C y ~ 469 – 474 °C respectivamente, con excepción del caso +30% en R3 que cae a ~ 426 °C por conversión incompleta. El Reactor 4 presenta la mayor dispersión, con salidas entre ~ 385 °C (–20% y –30%) y ~ 468 °C (+30%), mientras que el Reactor 5 registra la mayor variación relativa (~ 325 – 410 °C), confirmando que el efecto acumulado de las variaciones se manifiesta con mayor intensidad en los reactores finales.

El Apéndice 17 presenta los perfiles de presión ante variaciones del flujo de H_2 en los cinco reactores de la configuración adiabática. En todos los casos se observa una caída de presión progresiva a lo largo del reactor, donde un mayor flujo genera una mayor pérdida de carga. El Reactor 1 parte de 15 bar en todos los casos, con salidas entre ~ 13.8 bar (BASE y +5%) y ~ 14.2 bar (–30%). Los Reactores 2 y 3 muestran caídas más moderadas, con presiones de entrada entre ~ 13.7 – 14.2 bar y salidas entre ~ 13.5 – 13.9 bar. El Reactor 4 acentúa la dispersión, con salidas entre ~ 12.7 bar (+30%) y ~ 13.6 bar (–30%), mientras que el Reactor 5 confirma que reducir el flujo de

H₂ disminuye las pérdidas de carga acumuladas, con el caso -30% operando a ~13.6 bar y el +30% a ~12.6 bar a la salida.

El Apéndice 18 presenta los perfiles de conversión ante variaciones del flujo de H₂ en los cinco reactores de la configuración adiabática. Reducir el flujo de H₂ disminuye la conversión y aumentarlo la eleva. El Reactor 1 muestra la mayor sensibilidad, con conversiones de salida entre ~45% (-30%) y ~61% (casos base y positivos), mientras que el Reactor 2 presenta curvas más agrupadas con salidas entre ~63% y ~75%. Los Reactores 3 y 4 muestran perfiles progresivamente más convergentes con salidas entre ~69% y ~85%, y el Reactor 5 confirma que un déficit severo de H₂ limita significativamente la conversión global, con valores entre ~73% (-30%) y ~94% (+30%).

El Apéndice 15 presenta las curvas de conversión vs. temperatura de las variaciones del flujo de H₂ agrupadas por magnitud. En la variación ±5% las curvas alcanzan temperaturas ligeramente más altas que el caso base con conversiones globales similares. A partir de la variación ±10% ambas variaciones superan los 500 °C, y la variación +10% alcanza conversiones superiores al caso base. En las variaciones ±20% y ±30% se mantiene esta tendencia, con temperaturas superiores a 500 °C y conversiones más altas en los casos positivos, evidenciando que un mayor flujo de H₂ favorece la conversión pero incrementa la necesidad de control térmico para evitar la formación de subproductos no deseados.

El Apéndice 19 presenta las conversiones globales y de equilibrio para cada variación del flujo de H₂. En todos los casos la conversión aumenta progresivamente de reactor en reactor. Para

las variaciones negativas (-30% a -5%), la conversión global en R5 oscila entre $\sim 73\%$ y $\sim 91\%$, con conversiones de equilibrio entre $\sim 73\%$ y $\sim 97\%$, indicando que el sistema no siempre alcanza el equilibrio termodinámico. Para el caso base y las variaciones positivas ($+5\%$ a $+30\%$), la conversión global en R5 se sitúa entre $\sim 93\%$ y $\sim 95\%$, y la conversión de equilibrio alcanza el 100% a partir de R3, indicando que la restricción limitante en estas etapas es cinética y no termodinámica.

El Apéndice 20 presenta los tiempos de residencia para las variaciones del flujo de H_2 . El Reactor 1 presenta los tiempos más cortos y estables ($\sim 0.32\text{--}0.40$ s), mientras que el Reactor 2 alcanza su máximo en el caso base (~ 1.05 s) y disminuye hacia los extremos (~ 0.81 s para -30% y $+30\%$), reflejando la redistribución de la carga de reacción. Los Reactores 3 y 4 muestran una tendencia decreciente con el incremento del flujo, con tiempos entre ~ 0.99 s y ~ 1.42 s (-30%) y ~ 0.47 s y ~ 0.46 s ($+30\%$). El Reactor 5 registra los tiempos más elevados del tren ($\sim 1.36\text{--}3.96$ s), confirmando su papel crítico para completar la conversión, especialmente bajo condiciones de déficit de H_2 .

El Apéndice 21 presenta los perfiles de temperatura ante variaciones de la temperatura de alimentación en los cinco reactores. En el Reactor 1, los casos -20% y -30% presentan temperaturas de entrada de 216°C y 189°C respectivamente, insuficientes para iniciar la reacción, por lo que la temperatura de salida prácticamente no supera la de entrada. A partir de -10% la reacción se desarrolla, y el caso base e incrementos positivos alcanzan salidas de $\sim 490^\circ\text{C}$ con entradas entre 256.5°C y 351°C . En el Reactor 2 las salidas se agrupan entre $\sim 473^\circ\text{C}$ y $\sim 528^\circ\text{C}$, siendo el caso -5% el más elevado por su mayor temperatura acumulada. Los Reactores 3, 4 y 5

muestran convergencia progresiva con salidas entre $\sim 440\text{--}474\text{ }^{\circ}\text{C}$, $\sim 438\text{--}443\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $\sim 401\text{--}409\text{ }^{\circ}\text{C}$ respectivamente, indicando estabilización térmica del sistema a lo largo del tren.

El Apéndice 22 presenta los perfiles de presión ante variaciones de la temperatura de alimentación en los cinco reactores. El Reactor 1 parte de 15 bar en todos los casos, con salidas entre $\sim 12.3\text{ bar}$ (+30%) y $\sim 14.7\text{ bar}$ (−5%), donde mayores temperaturas generan mayores caídas de presión. A partir del Reactor 2 los casos de reducción severa (−30%, −20%, −10%) presentan caídas atípicas de aproximadamente 3 bar en un solo reactor, frente a $\sim 0.09\text{ bar}$ del caso base. Esta tendencia se acentúa en los Reactores 3 y 4, donde las presiones de entrada ya reducidas ($\sim 9.1\text{--}11.0\text{ bar}$) caen adicionalmente hasta $\sim 5.3\text{--}6.2\text{ bar}$ a la salida de R4. El Reactor 5 refleja el efecto acumulado, con los casos −20% y −30% operando entre $\sim 4.7\text{--}5.6\text{ bar}$ frente a $\sim 13.0\text{ bar}$ del caso base, una diferencia de casi 8 bar entre los casos extremos.

El Apéndice 23 presenta los perfiles de conversión ante variaciones de la temperatura de alimentación en los cinco reactores. El Reactor 1 es el más sensible: los casos −20% y −30% no desarrollan conversión (0.05% y 0.00%), el caso −10% alcanza apenas $\sim 0.81\%$, el caso −5% logra $\sim 34.33\%$, y el caso base e incrementos positivos alcanzan entre $\sim 51\%$ y $\sim 61\%$. En el Reactor 2, los casos que no reaccionaron en R1 alcanzan $\sim 59\%$ de conversión a la salida, mientras que el resto converge hacia $\sim 71\text{--}76\%$. Los Reactores 3, 4 y 5 muestran agrupamiento progresivo de las curvas, con conversiones de salida entre $\sim 76\text{--}84\%$, $\sim 85\text{--}89\%$ y $\sim 91\text{--}93\%$ respectivamente, indicando que el sistema tiende a alcanzar niveles de conversión similares hacia el final del tren independientemente de la temperatura de alimentación.

El Apéndice 24 presenta las conversiones globales y de equilibrio para las variaciones de temperatura de alimentación. Los casos -30% , -20% y -10% presentan conversiones globales de 0% , 0.05% y 0.81% en R1 con conversión de equilibrio de 0% , confirmando que la temperatura de entrada es insuficiente para activar la reacción. A partir del Reactor 2 estos casos recuperan conversiones entre $\sim 59\%$ y $\sim 71\%$. El caso -5% alcanza $\sim 34\%$ en R1 y converge hacia $\sim 92\%$ en R5. El caso base y las variaciones positivas muestran conversiones en R1 entre $\sim 51\%$ y $\sim 62\%$ con conversiones de equilibrio entre $\sim 95\%$ y $\sim 96\%$, y a partir de R2 el equilibrio termodinámico alcanza el 100% , indicando que la restricción limitante en las etapas finales es cinética y no termodinámica, con conversiones globales en R5 entre $\sim 92\%$ y $\sim 93\%$.

El Apéndice 25 presenta los tiempos de residencia para las variaciones de temperatura de alimentación. Los casos -30% , -20% y -10% presentan tiempos muy cortos en R2, R3 y R4 ($\sim 0.19\text{--}0.26$ s), dado que la reacción no se desarrolló en R1 y el gas avanza sin mayor transformación por las etapas intermedias. El caso -5% muestra tiempos más altos en R2 (~ 0.43 s) y R5 (~ 2.03 s), reflejando una redistribución de la carga de reacción. El caso base y los incrementos positivos muestran tiempos decrecientes con el aumento de temperatura, pasando en R5 de ~ 2.27 s (base) a ~ 1.69 s ($+30\%$), indicando que una mayor temperatura de alimentación reduce el tiempo de contacto necesario en los reactores finales.

El Apéndice 26 presenta los perfiles de temperatura ante variaciones de la presión de entrada en los cinco reactores. El Reactor 1 muestra temperaturas de salida muy similares entre variaciones ($\sim 486\text{--}492$ °C), indicando que la presión no afecta significativamente el perfil térmico en esta etapa. A partir del Reactor 2 los casos $+20\%$ y $+30\%$ presentan salidas notablemente bajas

(~351 °C y ~330 °C), sugiriendo reacción incompleta, efecto que se invierte críticamente en el Reactor 3 donde estos mismos casos alcanzan ~636 °C y ~645 °C por la liberación concentrada del calor acumulado. En los Reactores 4 y 5 el sistema se estabiliza, con salidas entre ~442–445 °C y ~399–405 °C para el caso base y variaciones moderadas, mientras que los casos +20% y +30% siguen mostrando salidas más bajas (~349–352 °C y ~366–376 °C), evidenciando una redistribución de la carga de reacción bajo presiones elevadas.

El Apéndice 27 presenta los perfiles de presión ante variaciones de la presión de entrada, mostrando el comportamiento más directo de los tres análisis de sensibilidad. En el Reactor 1 las presiones de entrada van desde 10.5 bar (–30%) hasta 19.5 bar (+30%), con caídas de ~1.0–1.4 bar a lo largo del reactor. Esta separación entre curvas se mantiene constante a lo largo del tren, con entradas en R5 entre ~7.2 y ~18.1 bar, confirmando que a diferencia de las variables anteriores, las curvas no convergen entre sí y la presión de operación en cada etapa está directamente determinada por la presión de alimentación.

El Apéndice 28 presenta los perfiles de conversión ante variaciones de la presión de entrada en los cinco reactores. En el Reactor 1 las conversiones de salida oscilan entre ~54% (–30%) y ~64% (+30%), evidenciando que una mayor presión favorece moderadamente la conversión. En el Reactor 2 las diferencias entre casos son pequeñas, con salidas entre ~72% y ~73%. El Reactor 3 muestra un comportamiento particular donde los casos +20% y +30% alcanzan conversiones de ~89%, notablemente superiores al resto (~83–84%), coherente con las elevadas temperaturas registradas en el análisis térmico. En los Reactores 4 y 5 el sistema converge, con salidas en R5 de ~92% para la mayoría de casos, confirmando que el efecto de la presión sobre la conversión se

atenúa significativamente hacia el final del tren.

El Apéndice 29 presenta las conversiones globales y de equilibrio para las variaciones de presión de entrada. En el Reactor 1 la conversión global aumenta con la presión de $\sim 54\%$ (-30%) a $\sim 64\%$ ($+30\%$), y la conversión de equilibrio de $\sim 81\%$ a $\sim 97\%$. A partir del Reactor 2 la conversión de equilibrio alcanza 100% en la mayoría de los casos, mientras que la conversión global converge entre $\sim 72\%$ y $\sim 76\%$, siendo la restricción cinética la limitante. En R5 las conversiones globales oscilan entre $\sim 92\%$ y $\sim 93\%$, confirmando que la presión de entrada es la variable de menor influencia sobre la conversión de las tres analizadas.

El Apéndice 30 presenta los tiempos de residencia para las variaciones de presión de entrada. En todos los reactores mayor presión implica mayor tiempo de residencia, con tiempos en R1 entre ~ 0.24 s (-30%) y ~ 0.42 s ($+30\%$), y en R5 entre ~ 1.07 s (-30%) y ~ 3.15 s ($+30\%$). A diferencia de las variaciones de flujo y temperatura, las curvas mantienen un orden consistente sin redistribución de la carga de reacción entre reactores, confirmando que la presión actúa directamente y de forma proporcional sobre el tiempo de contacto disponible en cada etapa.

5.3.2. Configuración reactores con enfriamiento

El Apéndice 31 presenta los perfiles de temperatura ante variaciones del flujo de H_2 en la configuración con enfriamiento. En el Reactor 1, la reducción de H_2 disminuye la temperatura máxima por menor exotermicidad (Froment & Bischoff, 2011), mientras que incrementos moderados ($+5\%$ y $+10\%$) la elevan ligeramente y un exceso ($+30\%$) provoca una caída inicial por efecto diluyente (Dry, 2002), desplazando posteriormente la región de reacción hacia zonas más

avanzadas con temperaturas superiores al caso base (Jess & Wasserscheid, 2013). En el Reactor 2, una leve reducción (-5%) incrementa la temperatura máxima inicial, pero reducciones mayores la disminuyen (Froment & Bischoff, 2011), mientras que el exceso de H_2 reduce gradualmente la temperatura favoreciendo el control térmico (Luyben, 2011). En ambos reactores las diferencias se atenúan hacia la salida, con temperaturas convergentes entre variaciones (Butt, 1980).

El Apéndice 32 presenta los perfiles de presión ante variaciones del flujo de H_2 en la configuración con enfriamiento. En el Reactor 1 la caída de presión base es de 0.21 bar; al reducir el flujo (-5% a -30%) disminuye ligeramente hasta 0.22 bar, mientras que al aumentarlo ($+5\%$ a $+30\%$) sube progresivamente hasta 0.48 bar por el mayor caudal volumétrico y pérdidas por fricción (Dry, 2002; Elishav et al., 2019). En el Reactor 2 la presión es menos sensible, con una caída base de 0.04 bar que permanece casi constante con déficit de H_2 y aumenta hasta 0.07 bar con $+30\%$, evidenciando mayor pérdida de carga asociada al incremento del caudal en la segunda etapa (Iliuta et al., 2023).

El Apéndice 33 presenta el impacto del flujo de H_2 sobre la conversión de CO_2 en la configuración con enfriamiento. En el Reactor 1 la conversión base es 98.17%, disminuyendo hasta 63.88% con -30% de H_2 y aumentando hasta 99.81% con $+30\%$, debido al consumo casi completo del CO_2 (Luyben, 2011; Othman et al., 2023). En el Reactor 2 la conversión base es 41.6%, cayendo drásticamente a 1.4% con -30% de H_2 por la elevada carga de CO_2 proveniente del Reactor 1, y mejorando hasta 50.0% con $+30\%$. A nivel global, la conversión total varía de 64.4% (-30%) a más de 99.8% ($+20\%$ y $+30\%$), evidenciando la fuerte dependencia del proceso frente al flujo de hidrógeno (Centi & Perathoner, 2025; Elishav et al., 2019).

El Apéndice 34 presenta las curvas de conversión vs. temperatura para variaciones del flujo de H_2 . Para $\pm 5\%$, los cambios generan temperaturas máximas ligeramente mayores sin afectar significativamente la conversión global (Jess & Wasserscheid, 2013; Luyben, 2011). Para $\pm 10\%$, el caso $+10\%$ alcanza mayor conversión superando los $400\text{ }^\circ\text{C}$, evidenciando el efecto favorable del exceso de reactivo. Para variaciones de $\pm 20\%$ y $\pm 30\%$, el aumento de H_2 sigue mejorando la conversión pero produce perfiles térmicos que pueden exceder los rangos óptimos del catalizador (Elishav et al., 2019; Iliuta et al., 2023), por lo que el exceso de hidrógeno requiere un control térmico estricto para evitar reacciones laterales e inestabilidad del sistema (Othman et al., 2023; Froment et al., 2011).

El Apéndice 35 muestra que aumentar el flujo de H_2 incrementa la conversión en ambos reactores, desde valores mínimos de 63.88% en R1 y 70.08% en R2 con -30% , hasta máximos de 96.61% y 99.89% con $+30\%$ (Luyben, 2011; Butt, 1980). R2 supera el 99% de conversión desde $+5\%$, evidenciando el efecto acumulativo de la configuración en serie y el beneficio del enfriamiento intermedio (Elishav et al., 2019; Iliuta et al., 2023). El Apéndice 36 muestra que al aumentar el flujo de H_2 el tiempo de residencia disminuye en ambos reactores por el mayor caudal volumétrico (Centi & Perathoner, 2025; Elishav et al., 2019). En R1 se reduce de 5.72 s (-30%) a 2.81 s ($+30\%$), y en R2 de 7.22 s a 3.24 s , evidenciando la sensibilidad del sistema al flujo de alimentación y su efecto sobre la distribución del avance de reacción (Othman et al., 2023; Froment et al., 2011).

El Apéndice 37 presenta los perfiles de temperatura ante variaciones de la temperatura de alimentación. En el Reactor 1, una reducción severa (-30%) retrasa la ignición y reduce el máximo

térmico a 284,1 °C (Froment & Bischoff, 2011; Dry, 2002), mientras que la condición base (285 °C) genera ignición temprana con un máximo de 789 °C; aumentos de temperatura concentran la reacción en un tramo más corto produciendo un perfil más agudo, alcanzando 778 °C con un aumento del 30% (Elishav et al., 2019; Iliuta et al., 2023). En el Reactor 2, reducciones moderadas generan máximos térmicos elevados por liberación concentrada de calor, mientras que una reducción severa reduce la temperatura máxima a 323,2 °C, evidenciando la existencia de un umbral crítico de activación; aumentos de temperatura incrementan progresivamente el máximo térmico (Othman et al., 2023; Froment et al., 2011; Centi & Perathoner, 2025).

El Apéndice 38 presenta los perfiles de presión ante variaciones de la temperatura de alimentación. En el Reactor 1 la caída de presión base es de 0.33 bar y varía levemente, disminuyendo ligeramente con menores temperaturas a -30% y aumentando con mayores a +30%, manteniéndose en un intervalo reducido (Centi & Perathoner, 2025; Froment & Bischoff, 2011). El Reactor 2 es más sensible: reducciones de -10% y -20% incrementan notablemente la caída de presión por el retraso en la ignición y el desplazamiento del frente de reacción, mientras que temperaturas más altas mantienen valores cercanos a la base, evidenciando un comportamiento no lineal frente a esta variable (Elishav et al., 2019; Iliuta et al., 2023).

El Apéndice 39 presenta el efecto de la temperatura de alimentación sobre la conversión de CO₂. En el Reactor 1, una reducción severa disminuye drásticamente la conversión por limitaciones cinéticas, mientras que la condición base (285 °C) alcanza 93.95%; aumentos de temperatura no mejoran significativamente la conversión, indicando operación cercana al equilibrio termodinámico. En el Reactor 2, reducciones moderadas incrementan la carga de CO₂

entrante, elevando su conversión local a 98.90% respectivamente, mientras que reducciones severas limitan el desempeño global a 98.78%. Temperaturas altas en R1 mantienen baja la concentración de CO₂ hacia R2 (93.97% de conversión en R1), permitiendo conversiones elevadas en ambas etapas (Butt, 1980; Centi & Perathoner, 2025).

El Apéndice 40 presenta las conversiones globales ante variaciones de la temperatura de entrada. En R1 la conversión disminuye de 93.95% a 90.90% con -30%, mientras que valores superiores a la base la mantienen estable en 93.98% (Froment & Bischoff, 2011; Dry, 2002). En R2 la conversión se mantiene superior a 98.78% en todo el rango, confirmando su menor sensibilidad gracias al avance reaccional acumulado. El Apéndice 41 muestra que los tiempos de residencia varían ligeramente con la temperatura, manteniéndose el tiempo total relativamente estable con el Reactor 2 aportando la mayor fracción del contacto gas-catalizador (Butt, 1980; Centi & Perathoner, 2025).

El Apéndice 42 presenta los perfiles de temperatura ante variaciones de la presión de alimentación. En el Reactor 1 el perfil se mantiene prácticamente constante, con variaciones moderadas en el pico de temperatura sin cambios en su posición. En el Reactor 2 el efecto es más pronunciado e inverso: reducciones de presión incrementan la temperatura máxima hasta 404 °C, mientras que aumentos la disminuyen hasta 386 °C, sugiriendo que presiones bajas favorecen la liberación de calor en esta etapa. En todos los casos el sistema se mantiene térmicamente estable (Froment & Bischoff, 2011; Dry, 2002).

El Apéndice 43 muestra que la presión de alimentación afecta directamente las presiones

absolutas en ambos reactores de forma proporcional, mientras que la caída de presión en el lecho catalítico se mantiene prácticamente constante. En el Reactor 1 las pérdidas son ~ 0.33 bar y en el Reactor 2 ~ 0.04 bar en todas las condiciones, indicando que los cambios en la presión de alimentación afectan principalmente la termodinámica y la cinética sin alterar significativamente la hidrodinámica del sistema (Luyben, 2011; Butt, 1980).

El Apéndice 44 muestra el efecto de la presión de alimentación sobre la conversión de CO_2 . En el Reactor 1 las variaciones son mínimas, con conversiones entre 97.99% (-30%) y 98.20% ($+30\%$), al operar cerca del equilibrio. En el Reactor 2 el comportamiento es más marcado e inverso: presiones menores incrementan la conversión hasta 72.5%, mientras que presiones mayores la reducen hasta 30.3%, indicando predominio de efectos cinéticos y de la carga de CO_2 proveniente del Reactor 1. En conjunto, presiones más bajas favorecen la conversión del CO_2 residual en la segunda etapa, aumentando la conversión global del proceso (Othman et al., 2023; Jess & Wasserscheid, 2013).

El Apéndice 45 muestra que en R1 la conversión aumenta de 93.10% a 94.46% con el incremento de presión, confirmando el efecto favorable en reacciones con reducción de moles, mientras que en R2 la tendencia es inversa, sugiriendo efectos cinéticos adversos a presiones elevadas, aunque ambos reactores operan cerca del equilibrio en todos los casos (Othman et al., 2023; Froment & Bischoff, 2011). El Apéndice 46 muestra que el tiempo de residencia crece con la presión en ambos reactores por el incremento en la densidad del gas, concentrándose principalmente en R2, evidenciando la influencia de la presión sobre la hidrodinámica sin modificar el caudal másico procesado (Jess & Wasserscheid, 2013; Luyben, 2011).

6. Conclusiones

Dos simulaciones base en estado estacionario fueron desarrolladas en Aspen Plus para las configuraciones adiabática y con enfriamiento, logrando convergencia y evidenciando la utilidad del modelo para el estudio del proceso. Ambas presentan errores inferiores al 10% respecto a Colelli et al. y Jiménez, con picos térmicos entre 490 y 810 °C y caídas de presión entre 1.8 y 2.0 bar, atribuibles al modelo cinético de Xu y Froment (1989), la ausencia de inyección de vapor en Jiménez (2025) y el uso de separadores de agua intermedios.

Las simulaciones fueron validadas mediante la comparación de perfiles de temperatura, presión, composición y conversión, obteniendo resultados semicuantitativos cercanos a la literatura y verificando comportamientos característicos de la metanación, con errores generalmente inferiores al 15% respecto a Colelli et al. y diferencias más consistentes con Jiménez, atribuibles a la mayor actividad del catalizador de Ru en Colelli et al. y la ausencia de separación de agua en Jiménez.

Según el análisis de sensibilidad, la temperatura de alimentación es la variable de mayor influencia sobre la conversión, donde reducciones severas impiden el inicio de la reacción e incrementos la favorecen aunque demandan mayor enfriamiento. Asimismo, el flujo de H_2 influye significativamente sobre la conversión, los perfiles térmicos y las caídas de presión. Por último, la presión de alimentación es la variable de menor influencia relativa, siendo su efecto más relevante sobre los tiempos de residencia, que aumentan proporcionalmente en todos los reactores.

7. Recomendaciones

Con base en los resultados obtenidos, se recomienda que trabajos posteriores incorporen una estrategia explícita de control dinámico del proceso de metanación, dado que la sensibilidad térmica observada puede conducir a máximos locales de temperatura y a una redistribución del frente de reacción entre etapas.

8. Referencias bibliográficas

- Beierlein, D., Häussermann, D., Traa, Y., & Klemm, E. (2022). Rapid Aging as a Key to Understand Deactivation of Ni/Al₂O₃ Catalysts Applied for the CO₂ Methanation. *Catalysis Letters*, 152(10), 2908–2919. <https://doi.org/10.1007/s10562-021-03884-2>
- Butt, J. B. (1984). Catalyst deactivation. En J. R. Anderson & M. Boudart (Eds.), *Catalysis: Science and technology* (Vol. 1, pp. 159–265). Springer.
- Centi, G., & Perathoner, S. (2025). CO₂ methanation in cooled fixed-bed reactors. *Chemical Engineering Transactions*, 117, 11-16.
- Champon, I., Bengaouer, A., Chaise, A., Thomas, S., & Roger, A. C. (2019). Carbon dioxide methanation kinetic model on a commercial Ni/Al₂O₃ catalyst. *Journal of CO₂ Utilization*, 34, 256–265. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2019.05.030>
- Chen, Q., Kuang, Z., Liu, X., & Zhang, T. (2022). Transforming a solar-rich county to an electricity producer: Solutions to the mismatch between demand and generation. *Journal of Cleaner Production*, 336, 130418. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.130418>
- Ciccone, B., Murena, F., Ruoppolo, G., Urciuolo, M., & Brachi, P. (2024). Methanation of syngas from biomass gasification: Small-scale plant design in Aspen Plus. *Applied Thermal Engineering*, 246. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.122901>
- Colelli, L., Bassano, C., Verdone, N., Segneri, V., & Vilardi, G. (2024). Power-to-Gas: Process

- analysis and control strategies for dynamic catalytic methanation system. *Energy Conversion and Management*, 305. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2024.118257>
- Dry, M. E. (2002). The Fischer–Tropsch process: 1950–2000. *Catalysis Today*, 71(3–4), 227–241. [https://doi.org/10.1016/S0920-5861\(01\)00453-9](https://doi.org/10.1016/S0920-5861(01)00453-9)
- Elishav, O., et al. (2019). Cooled fixed-bed reactor for CO₂ methanation. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*.
- Elnashaie, S. S. E. H. ., & Elshishini, S. S. . (2022). *Modelling, simulation, and optimization of industrial fixed bed catalytic reactors*. Routledge.
- Er-rbib, H., & Bouallou, C. (2013). Modelling and simulation of methanation catalytic reactor for renewable electricity storage. *Chemical Engineering Transactions*, 35, 541–546. <https://doi.org/10.3303/CET1335090>
- Er-rbib, H., & Bouallou, C. (2014). Modeling and simulation of CO methanation process for renewable electricity storage. *Energy*, 75, 81–88. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2014.05.115>
- Froment, G. F., Bischoff, K. B., & De Wilde, J. (2010). *Chemical reactor analysis and design* (3rd ed.). Wiley.
- Froment, G. F., et al. (2011). *Modelación cinética en reactores catalíticos*. Repositorio UDEC.

Hernández Cuberos, J. E. & Jara Rodríguez, C. (2025). *Simulación en Aspen Hysys del proceso de metanación a partir de CO₂ capturado en la producción de los hidrocarburos, como una solución para un combustible sostenible*. [Trabajo de grado, Fundación Universidad de América] Repositorio Institucional Lumieres. <https://hdl.handle.net/20.500.11839/9802>

Holstein, & Johan. (2015). *Power-to-Gas project in Rozenburg, The Netherlands*. www.dnvgl.com

Ikäheimo, J., Weiss, R., Kiviluoma, J., Pursiheimo, E., & Lindroos, T. J. (2022). Impact of power-to-gas on the cost and design of the future low-carbon urban energy system. *Applied Energy*, 305, 117713. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2021.117713>

Iliuta, I., et al. (2023). Effect of H₂/CO₂ ratios in Fischer-Tropsch synthesis. *Chemical Engineering Transactions*, 105.

Ingersoll, J. G. (2024). The Case of Renewable Methane by and with Green Hydrogen as the Storage and Transport Medium for Intermittent Wind and Solar PV Energy. *Hydrogen*, 5(2), 209-229. <https://doi.org/10.3390/hydrogen5020013>

Jess, A., & Wasserscheid, P. (2013). *Chemical technology: An integrated textbook*. Wiley-VCH.

Jianguo Xu, & Gilbert F. Froment. (1989). *Methane Steam Reforming, Methanation and Water-Gas Shift: 1. Intrinsic Kinetics*.

Kiewidt, L., & Thöming, J. (2015). Predicting optimal temperature profiles in single-stage fixed-bed reactors for CO₂-methanation. *Chemical Engineering Science*, 132, 59–71.

<https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.03.068>

Luyben, W. L. (2011). Principles and case studies of simultaneous design. Wiley.

Neubert, M., Widzgowski, J., Rönsch, S., Treiber, P., Dillig, M., & Karl, J. (2017). Simulation-Based Evaluation of a Two-Stage Small-Scale Methanation Unit for Decentralized Applications. *Energy and Fuels*, 31(2), 2076–2086.
<https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.6b02793>

Onrubia-Calvo, J. A., Quindimil, A., Davó-Quiñonero, A., Bermejo-López, A., Bailón-García, E., Pereda-Ayo, B., Lozano-Castelló, D., González-Marcos, J. A., Bueno-López, A., & González-Velasco, J. R. (2022). Kinetics, Model Discrimination, and Parameters Estimation of CO₂ Methanation on Highly Active Ni/CeO₂ Catalyst. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 61(29), 10419–10435.
<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c00164>

Othman, M. R., et al. (2023). Experimental study of pressure drop in catalytic reactors. *Malaysian Journal of Catalysis*, 8(2).

Pérez Gil, S. (2020). Modelización de un reactor de metanación para la generación de metano sintético. Tecnia. https://scienceportal.tecnalia.com/ws/portalfiles/portal/68411972/Tesis_modelizaci_n_reactor_Susana_P_rez.pdf

Rusmanis, D., O'Shea, R., Wall, D. M., & Murphy, J. D. (2019). Biological hydrogen methanation

- systems – an overview of design and efficiency. *Bioengineered*, 10(1), 604–634.
<https://doi.org/10.1080/21655979.2019.1684607>
- Schaaf, T., Grünig, J., Schuster, M. R., Rothenfluh, T., & Orth, A. (2014). Methanation of CO₂ - storage of renewable energy in a gas distribution system. *Energy Sustainability And Society*, 4(1). <https://doi.org/10.1186/s13705-014-0029-1>
- Schmider, D., Maier, L., & Deutschmann, O. (2021). Reaction Kinetics of CO and CO₂ Methanation over Nickel. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 60(16), 5792–5805. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c00389>
- Su, X., Xu, J., Liang, B., Duan, H., Hou, B., & Huang, Y. (2016). Catalytic carbon dioxide hydrogenation to methane: A review of recent studies. *Journal of Energy Chemistry*, 25(4), 553–565. <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2016.03.009>
- Tripodi, A., Conte, F., & Rossetti, I. (2020). Carbon Dioxide Methanation: Design of a Fully Integrated Plant. *Energy & Fuels*, 34(6), 7242–7256.
<https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c00580>
- Uçar, N. Ö., & Murena, F. (n.d.). Synthesis Gas Methanation and Its Modelling by Aspen Plus Software. Retrieved <https://www.researchgate.net/publication/344745923>
- Vega, J., et al. (2021). Análisis del efecto de operar un reactor de metanación en cargas diferentes a las de diseño. *Ingeniería*, 26(2), 45–58.

<https://revistas.uss.edu.pe/index.php/ING/article/download/2171/2720>

9. Apéndices

Apéndice 1

Características de los reactores de metanación en la configuración adiabática de este trabajo

Reactor	Tubos	Caudal (m ³ /s)	L (m)	V tubo (m ³)	T entrada (°C)	T salida (°C)
1	60	0.091	1.6	0.0008	270	490
2	60	0.022	1.6	0.0008	283	473
3	30	0.017	1.6	0.0008	311	471
4	20	0.014	2.4	0.0012	326	446
5	50	0.013	2.4	0.0012	317	403

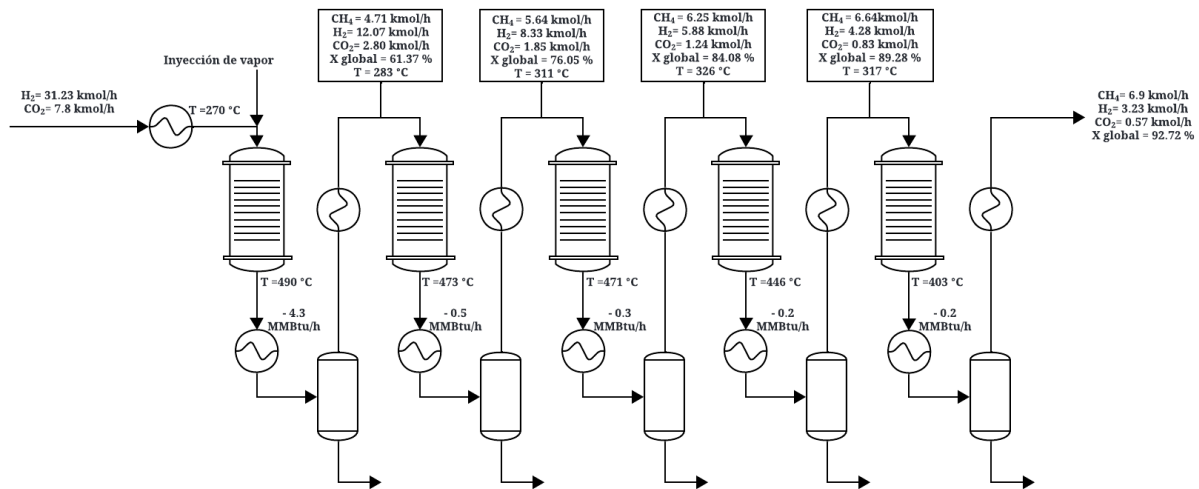
Apéndice 2

Características de los reactores de metanación en la configuración con enfriamiento de este trabajo.

Reactor	Tubos	Caudal (m ³ /s)	L (m)	V tubo (m ³)	T entrada (°C)	T salida (°C)
1	60	0.032	3.6	0.002	285	296.1
2	60	0.008	3.6	0.002	390	285

Apéndice 3

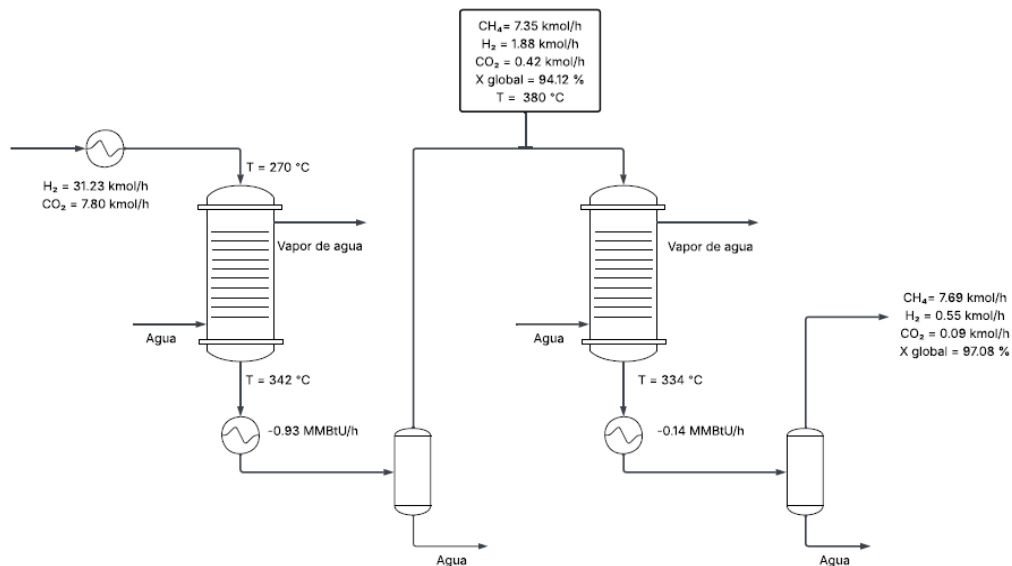
Esquema simplificado de la configuración adiabática



Nota. Elaborado en LucidChart con base en Colelli et al, 2025.

Apéndice 4

Esquema simplificado de la configuración con enfriamiento.



Nota. Elaborado en LucidChart con base en Colelli et al, 2025.

Apéndice 5

Flujos molares de alimentación (kmol/h) para la configuración adiabática obtenidos en este trabajo.

Compuesto	R1	R2	R3	R4	R5	Producto
CO ₂	7.8	2.81	1.85	1.24	0.83	0.57
H ₂	31.2	12.08	8.33	5.88	4.28	3.23
CH ₄	0	4.71	5.64	6.25	6.64	6.90
H ₂ O	72.1	4.32	1.47	0.76	0.66	0.02

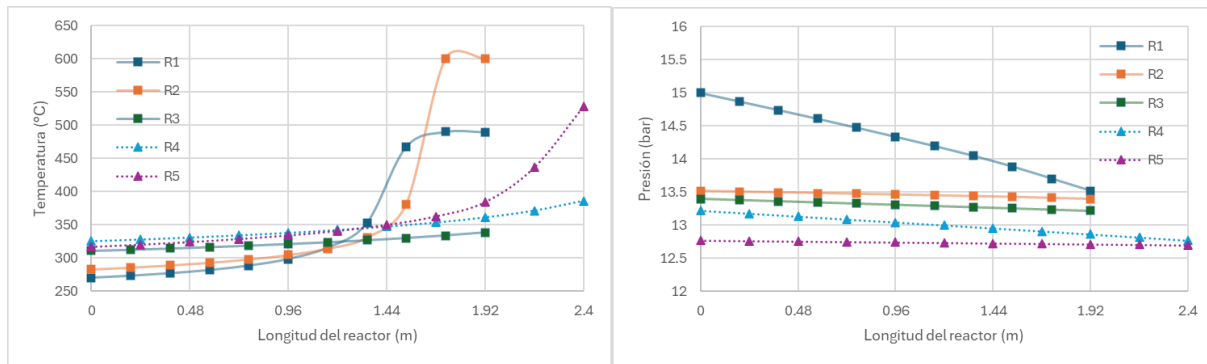
Apéndice 6

Flujos molares de alimentación (kmol/h) en la configuración con enfriamiento de este trabajo.

Compuesto	R1	R2	Producto
CO ₂	7.8	0.43	0.24
H ₂	31.2	1.90	1.15
CH ₄	0	7.35	7.54
H ₂ O	50	32	0.02

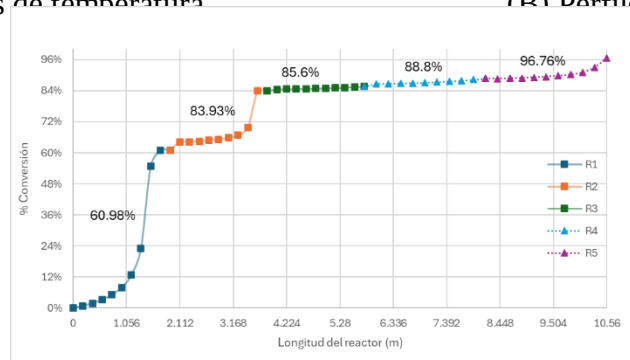
Apéndice 7

Perfiles de temperatura, presión y conversión de la configuración adiabática de este trabajo con un aumento del 20% en la longitud de los tres primeros reactores.



(A) Perfiles de temperatura

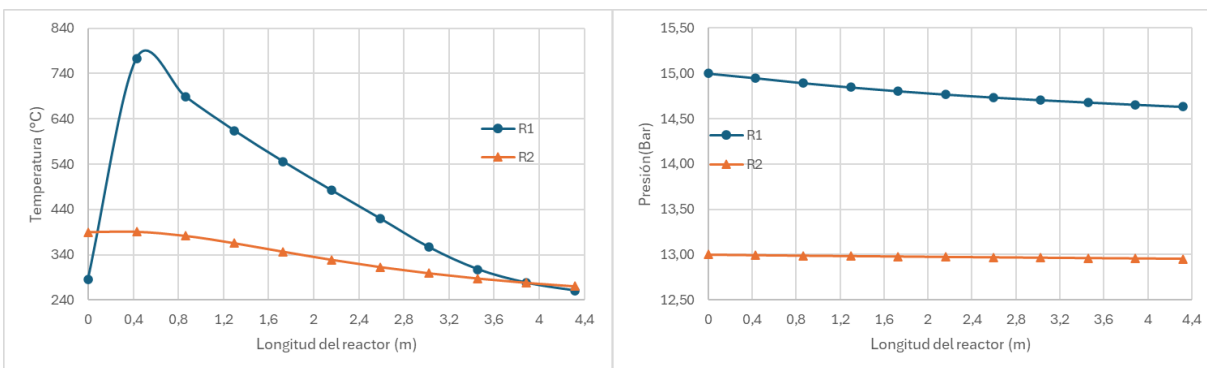
(B) Perfiles de presión



(C) Conversiones globales de cada reactor

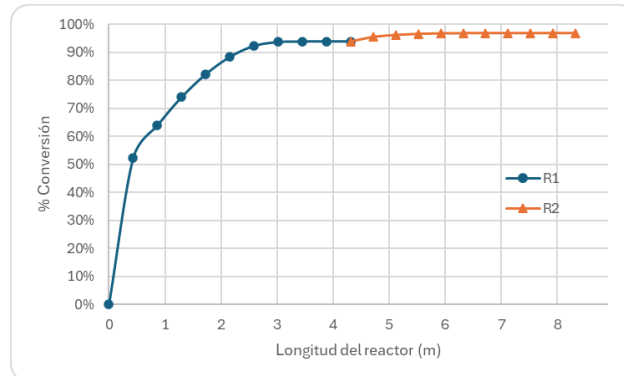
Apéndice 8

Perfiles de temperatura, presión y conversión de la configuración con enfriamiento de este trabajo con un aumento del 20% en la longitud de los 2 reactores.



(A) Perfiles de temperatura

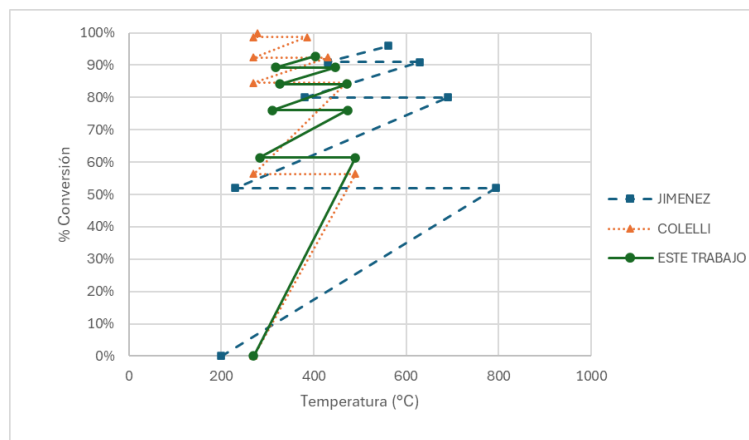
(B) Perfiles de presión



(C) Conversiones globales de cada reactor

Apéndice 9

Conversión vs Temperatura para la configuración adiabática de este trabajo, Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).



Apéndice 10

Conversiones globales de la configuración adiabática de este trabajo, Colelli et al. (2024) y

Jimenez (2025).

Caso	Reactor 1	Reactor 2	Reactor 3	Reactor 4	Reactor 5
Colelli (2024)	56.4%	84.5%	92.3%	98.7%	99.8%
Jimenez (2025)	52%	80%	91%	96%	-
Este Trabajo	61.4%	76%	84.1%	89.3%	92.7%

Apéndice 11

Flujos molares de salida de cada reactor en la configuración adiabática reportados en este trabajo, Colelli et al. (2024) y Jimenez (2025).

Compuesto	Reactor 1 (kmol/h)	Reactor 2 (kmol/h)	Reactor 3 (kmol/h)	Reactor 4 (kmol/h)	Reactor 5 (kmol/h)
CO ₂	2.81 (3.40) [3.71]	1.85 (1.20) [1.58]	1.24 (0.60) [0.71]	0.83 (0.10) [0.31]	0.57 (0.017) [-]
H ₂	12.08 (13.60) [14.87]	8.33 (5.10) [6.45]	5.88 (1.80) [2.95]	4.28 (0.40) [1.35]	3.23 (0.072) [-]
CH ₄	4.71 (4.40) [4.09]	5.64 (6.50) [6.19]	6.25 (7.30) [7.06]	6.64 (7.70) [7.46]	6.91 (7.78) [-]

Nota. Los flujos reportados por Colelli se muestran entre paréntesis y los reportados por Jimenez se muestran entre corchetes

Apéndice 12

Flujos molares de salida de cada reactor (kmol/h) en la configuración con enfriamiento

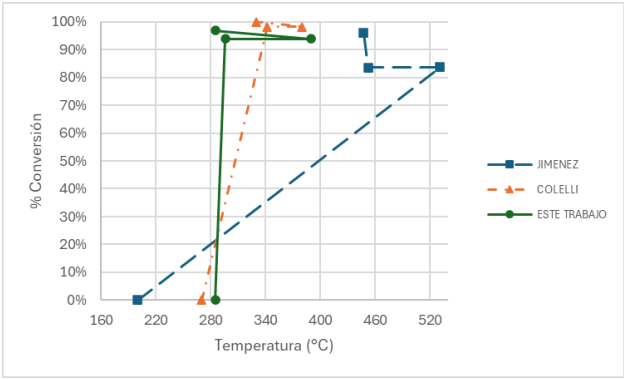
reportados por Colelli et al. (2024), Jimenez (2025) y este trabajo.

Compuesto	Reactor 1 (kmol/h)			Reactor 2 (kmol/h)		
	[1]	[2]	[3]	[1]	[2]	[3]
CO ₂	0.137	1.28	0.43	0.00001	0.29	0.24
H ₂	0.730	5.14	1.90	0.183	1.24	1.15
CH ₄	7.641	6.52	7.35	7.778	7.50	7.54

Nota. [1] Colelli et al., 2024. [2] Jimenez (2025). [3] Este trabajo.

Apéndice 13

Conversión vs Temperatura para la configuración con enfriamiento de este trabajo, Colelli et al.(2024) y Jimenez (2025).



Apéndice 14

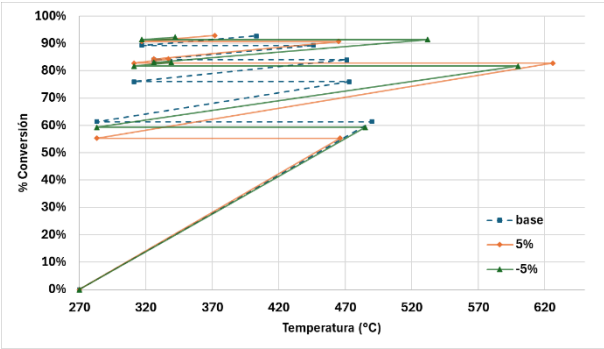
Flujo de vapor de agua en kmol/h alimentado para cada variación de flujo de hidrogeno alimentado, temperatura de alimentación y presión de alimentación en la configuración

adiabática.

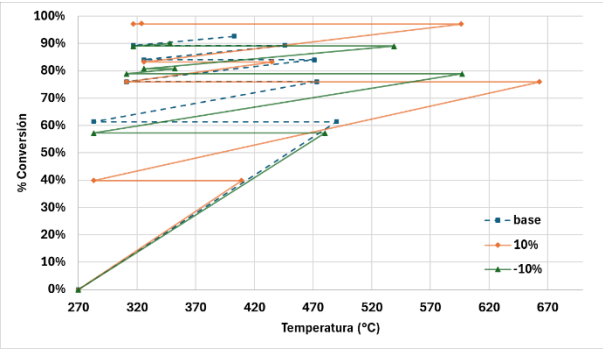
Variación	Flujo H ₂	Temperatura	Presión
-30%	53	80	62
-20%	60	80	66
-10%	66	80	69
-5%	69	24.45	71
base	72.1	72.1	72.1
5%	71	76	73
10%	68.8	81	74
20%	64	91	75
30%	58.6	104	77

Apéndice 15

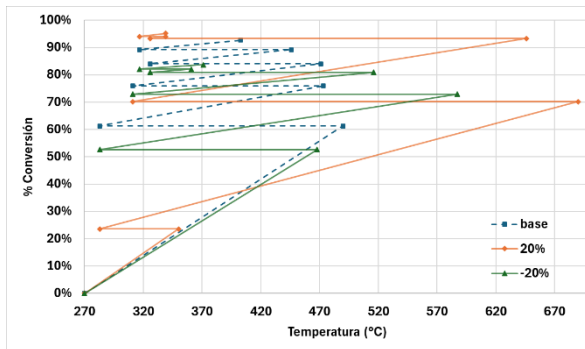
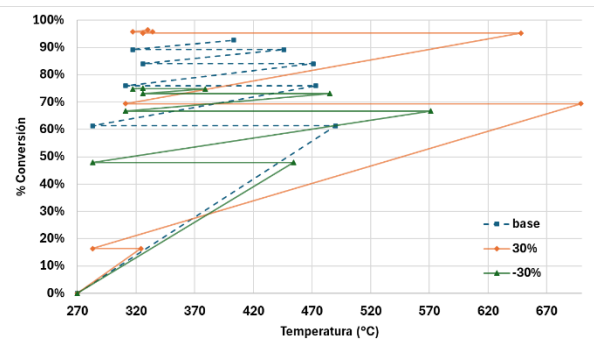
Gráficas de conversión vs temperatura de las variaciones de flujo de H₂ para la configuración adiabática de este trabajo.



(A) Variación ± 5%

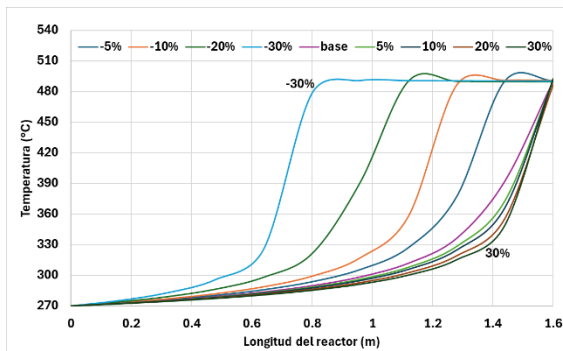


(B) Variación ± 10%

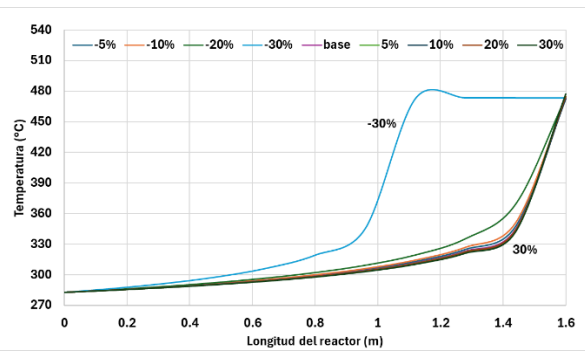
(C) Variación $\pm 20\%$ (D) Variación $\pm 30\%$

Apéndice 16

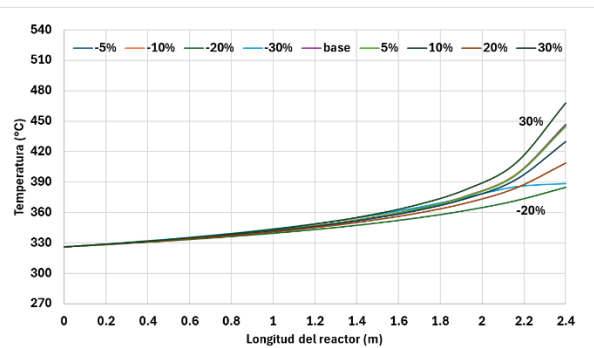
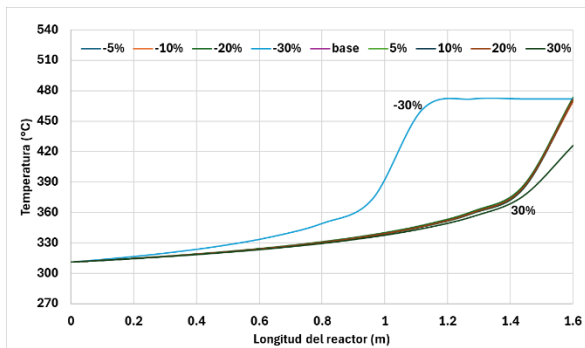
Perfiles de temperatura de las variaciones de flujo de H_2 para la configuración adiabática de este trabajo.



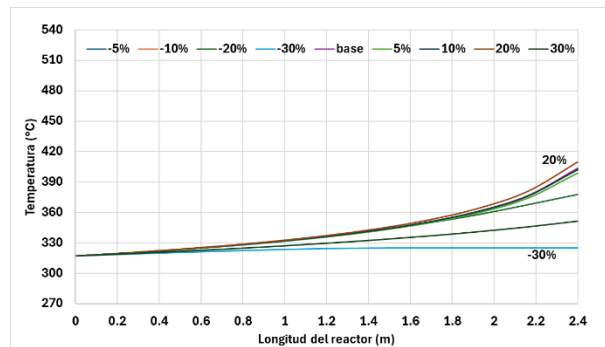
(A) Reactor 1



(B) Reactor 2



(C) Reactor 3

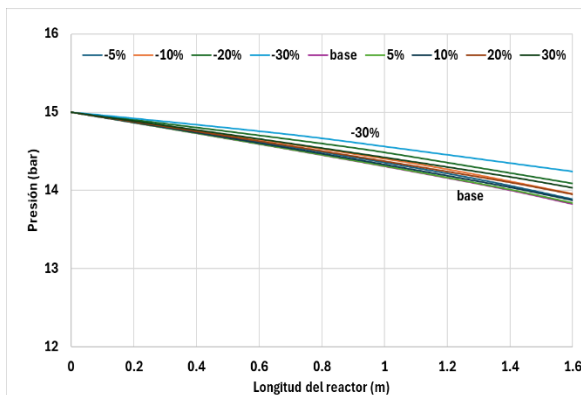


(D) Reactor 4

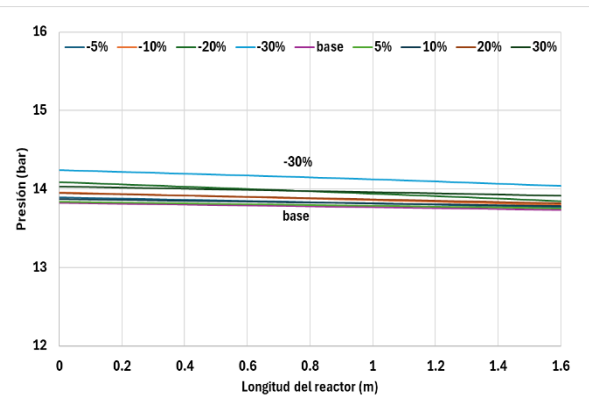
(E) Reactor 5

Apéndice 17

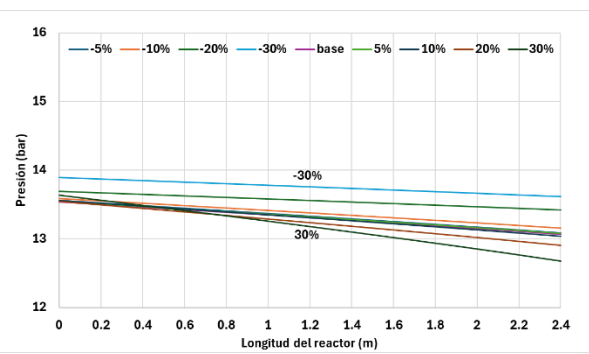
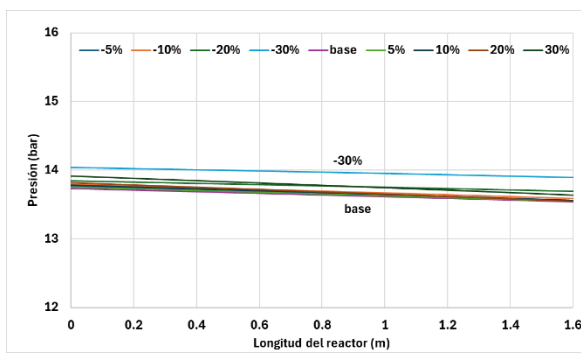
Perfiles de presión de las variaciones de flujo de H₂ para la configuración adiabática de este trabajo.



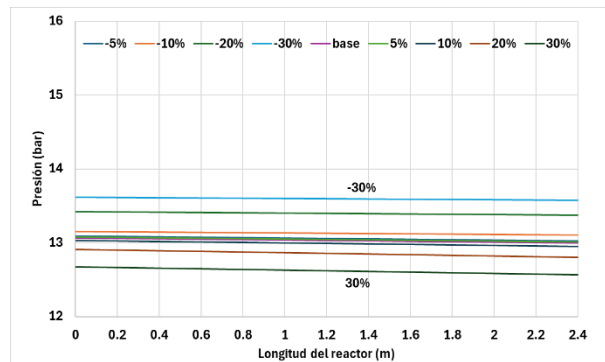
(A) Reactor 1



(B) Reactor 2



(C) Reactor 3

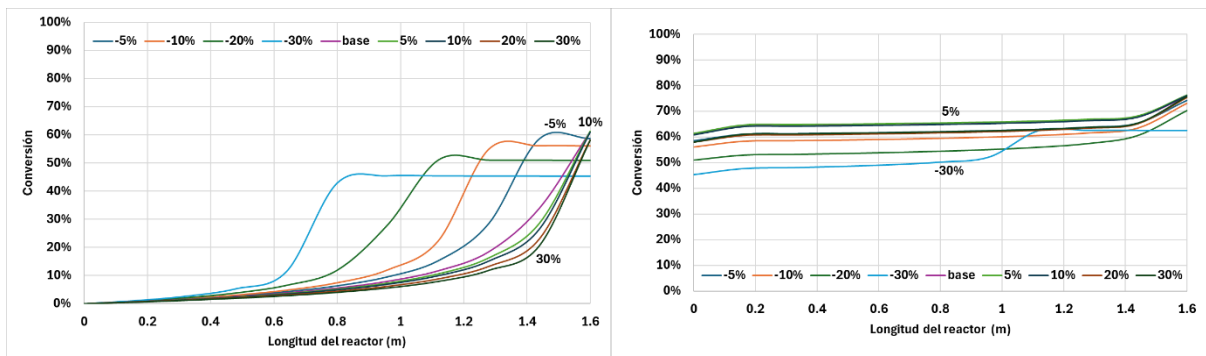


(D) Reactor 4

(E) Reactor 5

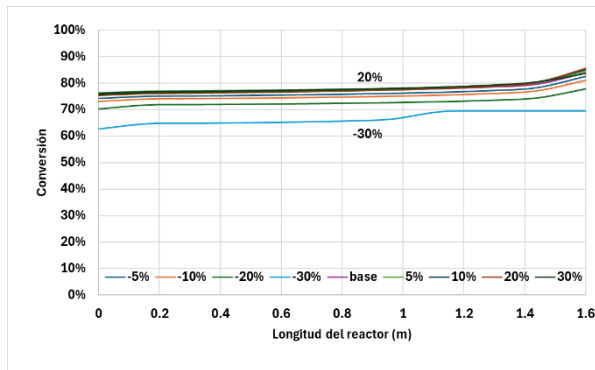
Apéndice 18

Perfiles de conversión de las variaciones de flujo de H₂ para la configuración adiabática de este trabajo.

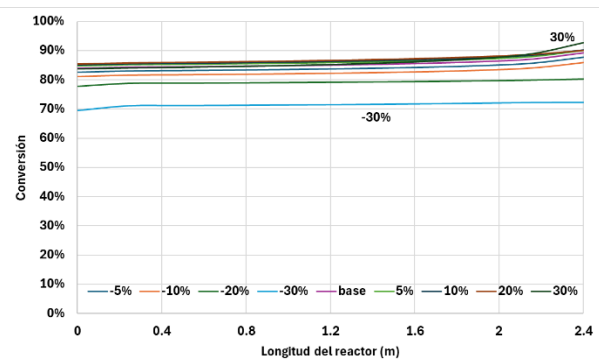


(A) Reactor 1

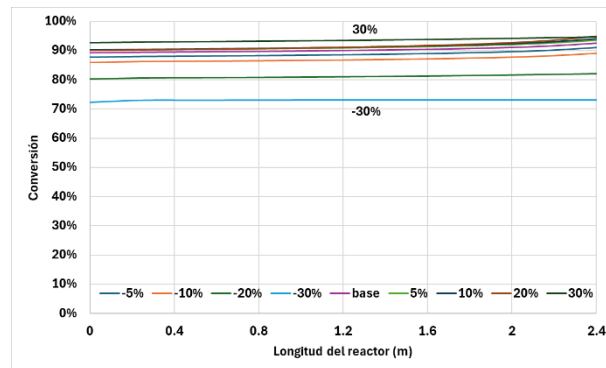
(B) Reactor 2



(C) Reactor 3



(D) Reactor 4



(E) Reactor 5

Apéndice 19

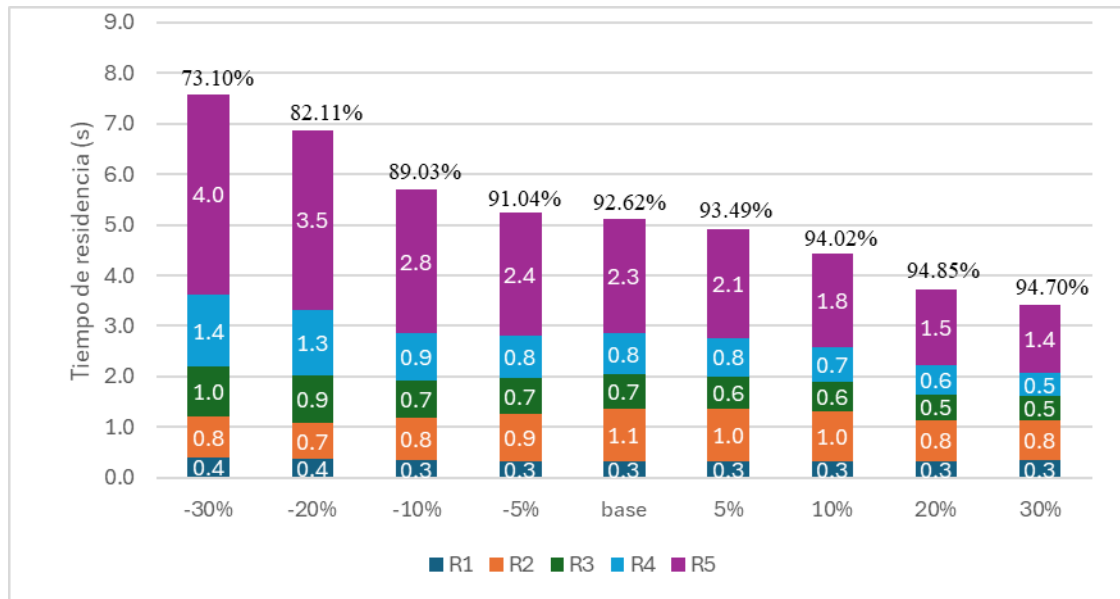
Conversiones globales de las variaciones de flujo de H_2 para la configuración adiabática de este trabajo.

Variación	R1	R2	R3	R4	R5
-30%	45.40% (68.46%)	62.62% (72.11%)	69.43% (72.78%)	72.33% (72.97%)	73.10% (73.36%)
-20%	50.92% (78.01%)	70.35% (82.13%)	77.73% (81.99%)	80.25% (82.94%)	82.11% (82.50%)
-10%	56.14% (87.44%)	73.04% (99.99%)	81.05% (92.54%)	85.97% (91.93%)	89.03% (91.97%)
-5%	58.65% (91.95%)	74.29% (96.20%)	82.53% (96.89%)	87.72% (97%)	91.04% (96.86%)
base	61.06% (96.09%)	75.67% (99.98%)	83.88% (100%)	89.19% (100%)	92.62% (100%)
5%	61.29% (99.17%)	76.22% (100%)	84.72% (100%)	90.13% (100%)	93.49% (100%)
10%	60.85% (99.91%)	76.14% (100%)	85.12% (100%)	90.16% (100%)	94.02% (100%)
20%	58.08% (99.99%)	75.38% (100%)	85.49% (100%)	90.03% (100%)	94.85% (100%)
30%	57.91% (100%)	75.74% (100%)	83.66% (100%)	92.75% (100%)	94.70% (100%)

Nota. La conversión de equilibrio se presenta entre paréntesis.

Apéndice 20

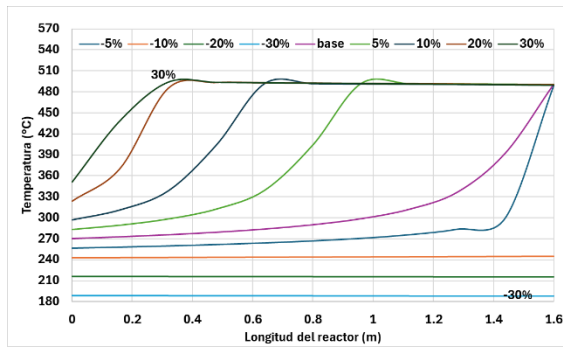
Tiempos de residencia para las variaciones de flujo de H_2 para la configuración adiabática de este trabajo.



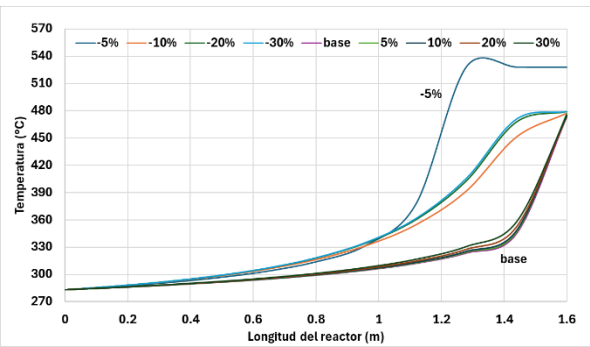
Nota. La conversión global de cada variación se presenta sobre cada barra.

Apéndice 21

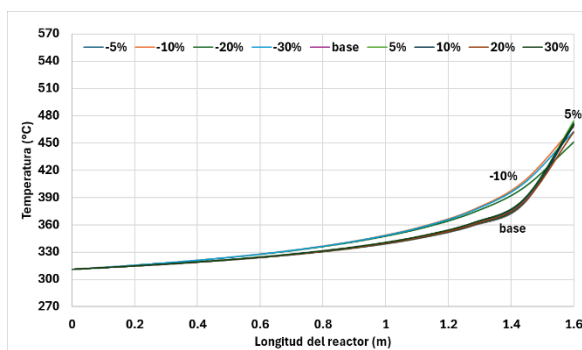
Perfiles de temperatura para las variaciones de temperatura de entrada para la configuración adiabática.



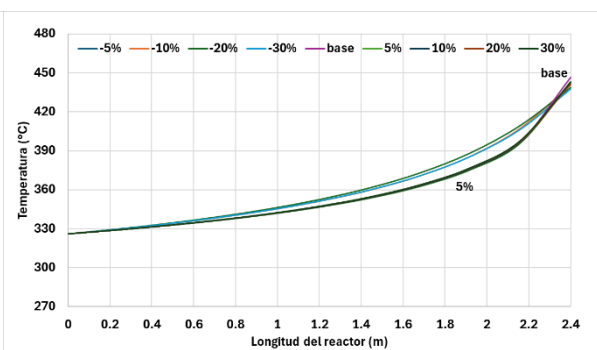
(A) Reactor 1



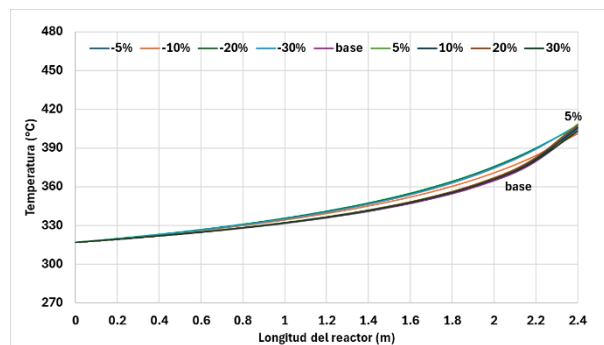
(B) Reactor 2



(C) Reactor 3



(D) Reactor 4

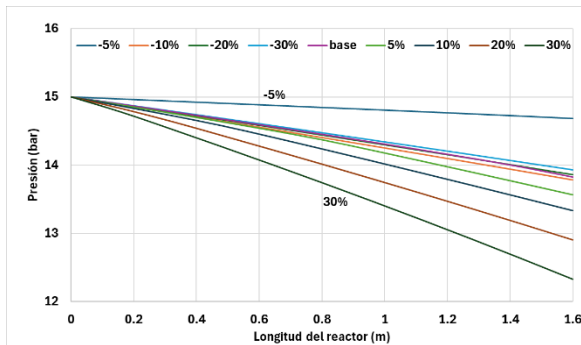


(E) Reactor 5

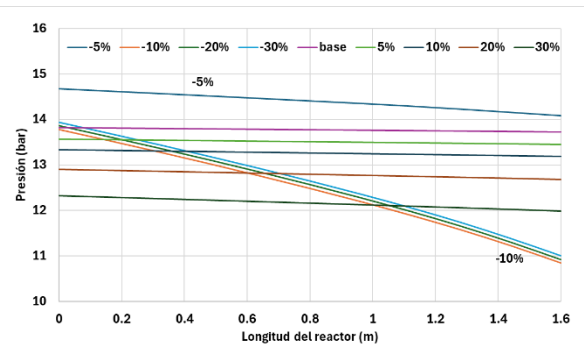
Apéndice 22

Perfiles de presión para las variaciones de temperatura para la configuración adiabática de este

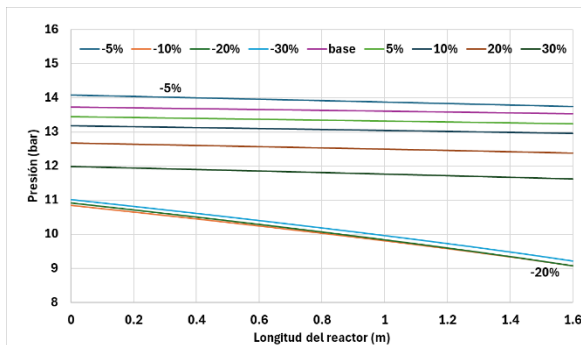
trabajo.



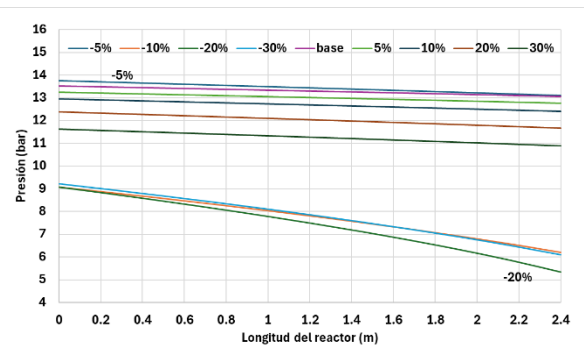
(A) Reactor 1



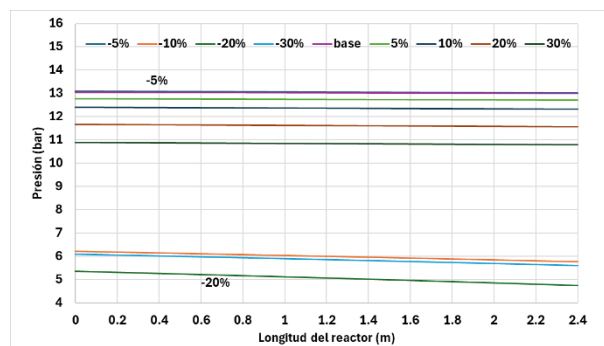
(B) Reactor 2



(C) Reactor 3



(D) Reactor 4

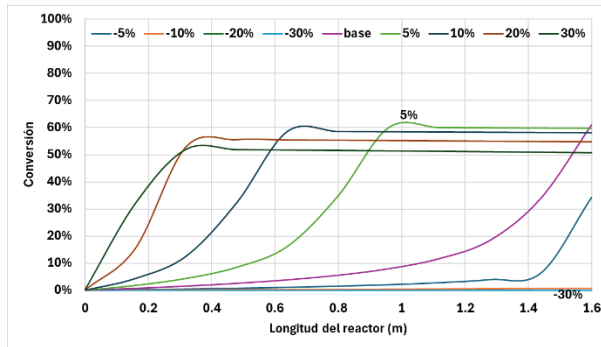


(E) Reactor 5

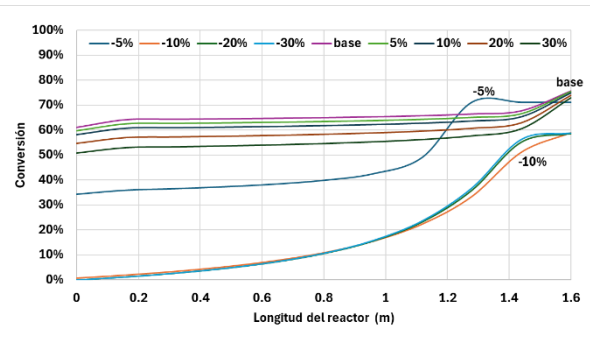
Apéndice 23

Perfiles de conversión para las variaciones de temperatura para la configuración adiabática de

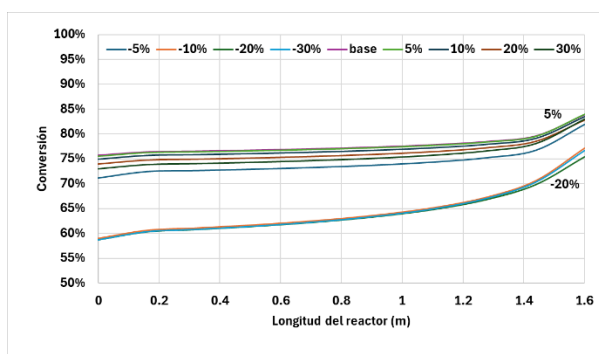
este trabajo.



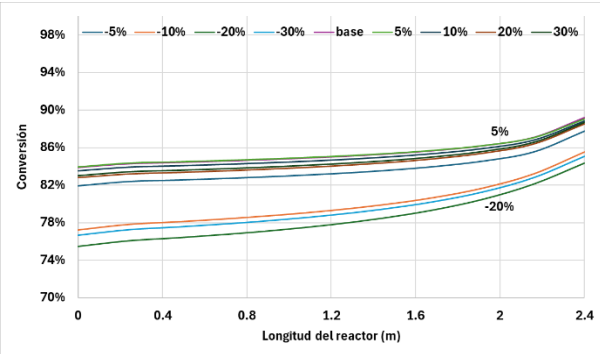
(A) Reactor 1



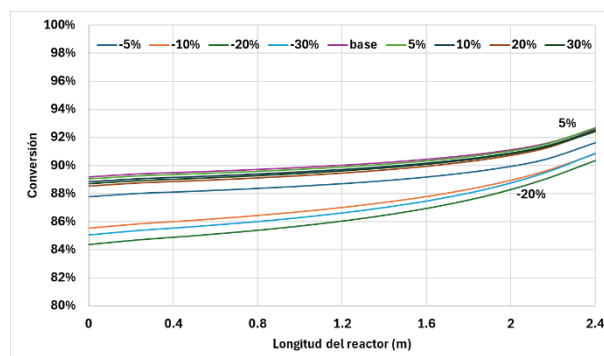
(B) Reactor 2



(C) Reactor 3



(D) Reactor 4



(E) Reactor 5

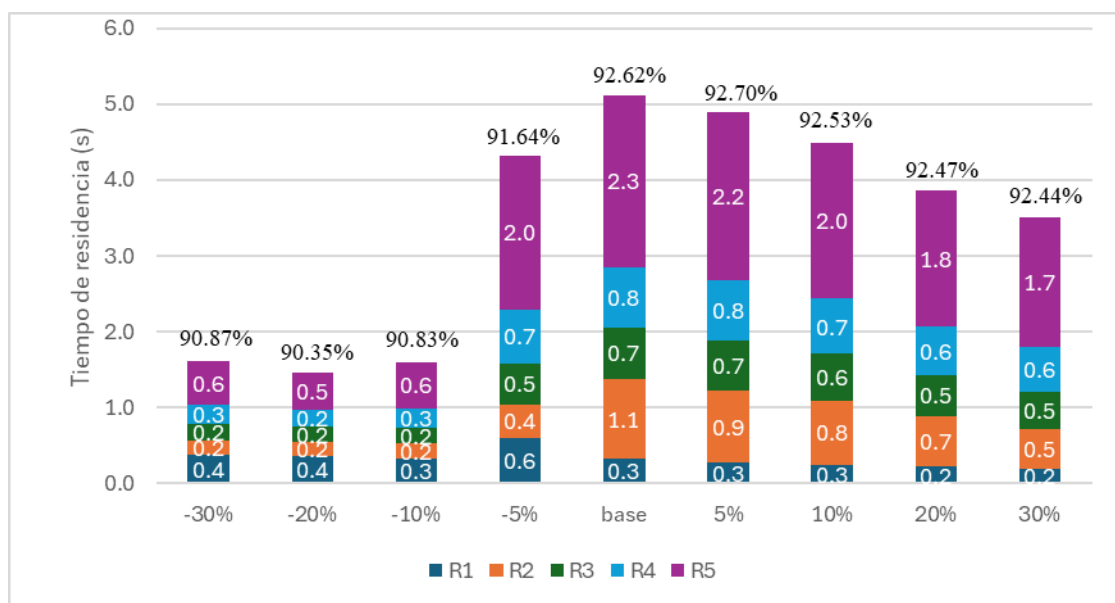
Conversiones globales para las variaciones de temperatura para la configuración adiabática de este trabajo.

Variación	R1	R2	R3	R4	R5
-30%	0% (0%)	58.74% (100%)	76.64% (100%)	85.06% (100%)	90.87% (99.99%)
-20%	0.05% (0%)	58.70% (100%)	75.45% (100%)	84.36% (100%)	90.35% (99.99%)
-10%	0.81% (0%)	58.98% (100%)	77.21% (100%)	85.55% (99.99%)	90.83% (99.99%)
-5%	34.33% (0%)	71.12% (100%)	81.95% (100%)	87.77% (100%)	91.64% (100%)
base	62.06% (96.09%)	75.67% (99.98%)	83.88% (100%)	89.19% (100%)	92.62% (100%)
5%	59.73% (96.26%)	75.48% (100%)	83.94% (100%)	89.06% (99.99%)	92.70% (100%)
10%	58.19% (94.92%)	74.96% (100%)	83.52% (100%)	88.85% (100%)	92.53% (99.95%)
20%	54.79% (94.99%)	73.96% (100%)	82.80% (100%)	88.52% (100%)	92.47% (100%)
30%	50.73% (95%)	73.01% (100%)	83.01% (99.85%)	88.70% (100%)	92.44% (100%)

Nota. La conversión de equilibrio se presenta entre paréntesis.

Apéndice 25

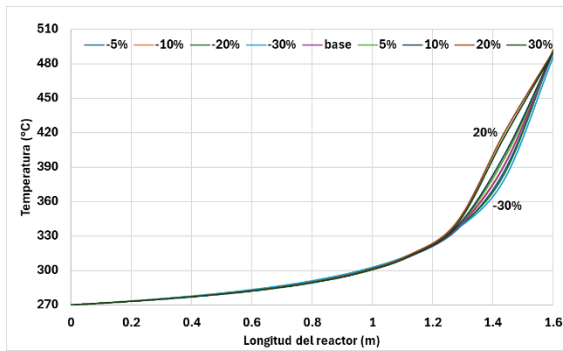
Tiempo de residencia para las variaciones de temperatura para la configuración adiabática de este trabajo.



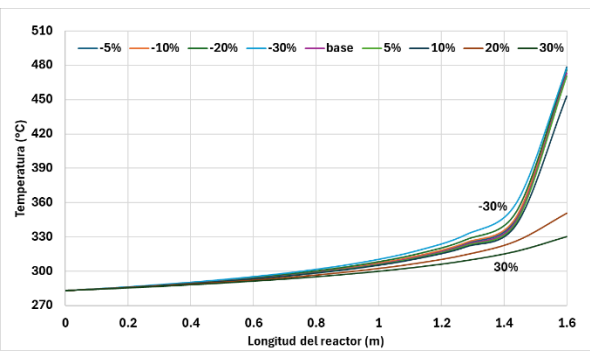
Nota. La conversión global de cada variación se presenta sobre cada barra.

Apéndice 26

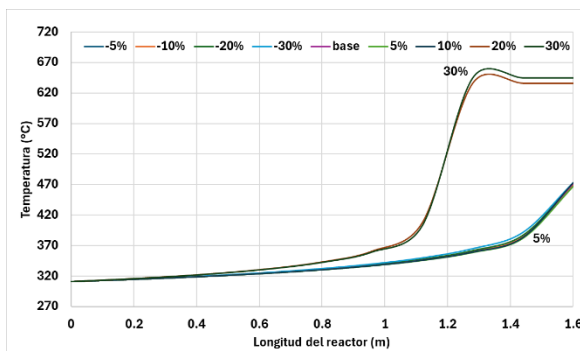
Perfiles de temperatura para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.



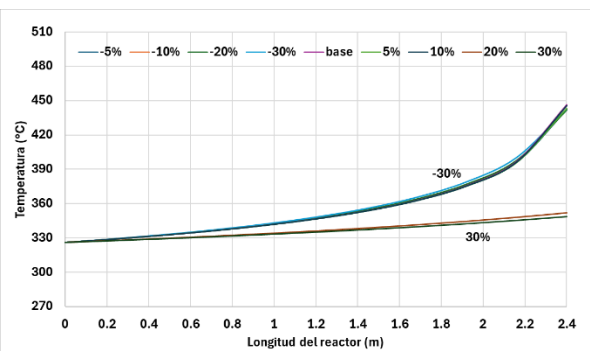
(A) Reactor 1



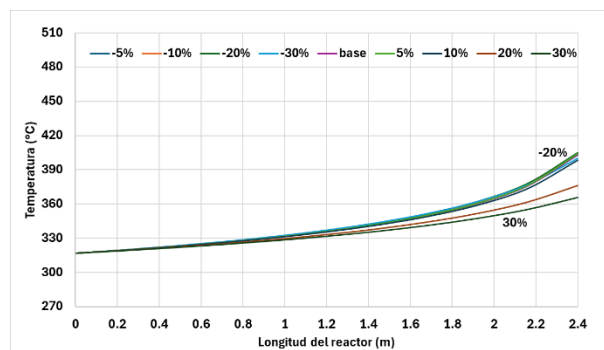
(B) Reactor 2



(C) Reactor 3



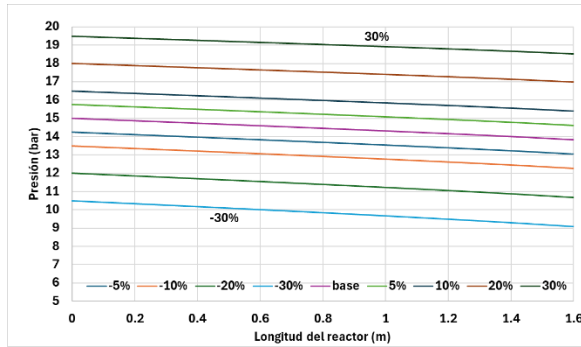
(D) Reactor 4



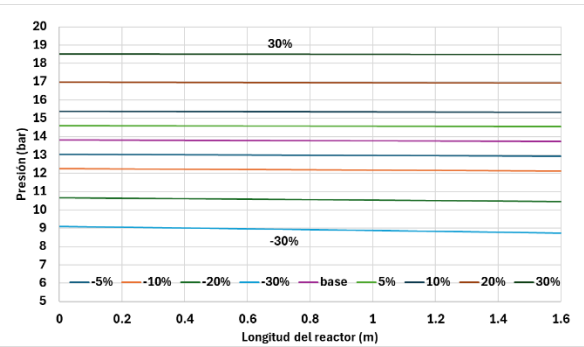
(E) Reactor 5

Apéndice 27

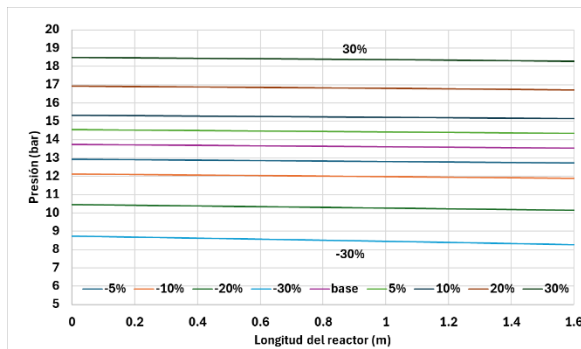
Perfiles de presión para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.



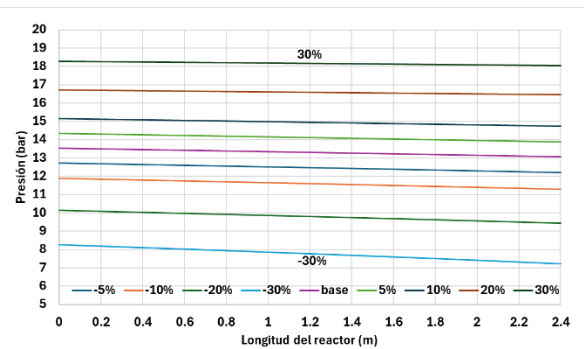
(A) Reactor 1



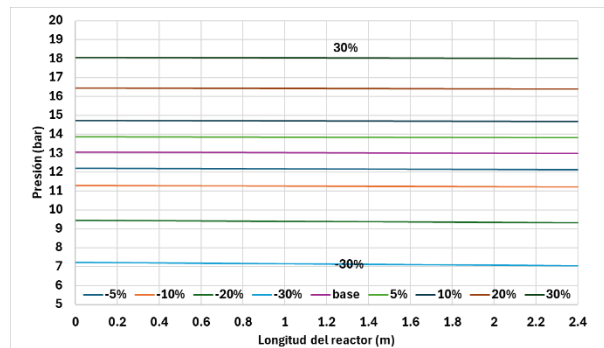
(B) Reactor 2



(C) Reactor 3



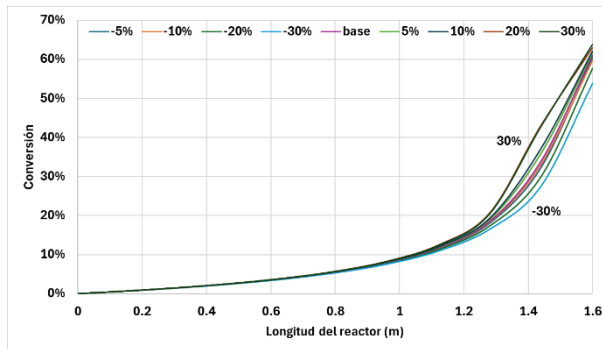
(D) Reactor 4



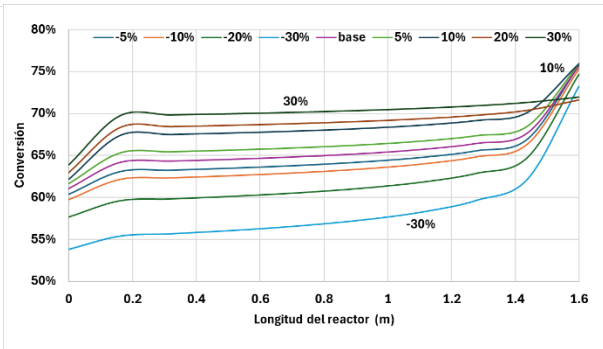
(E) Reactor 5

Apéndice 28

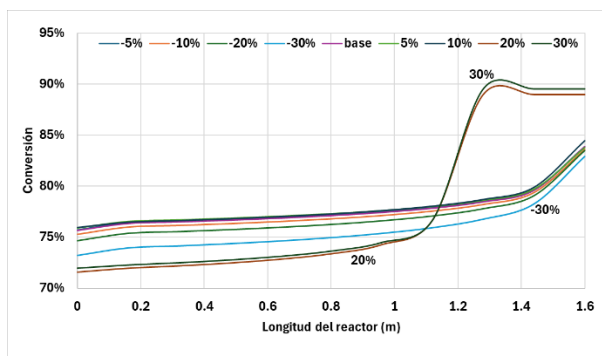
Perfiles de conversión para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.



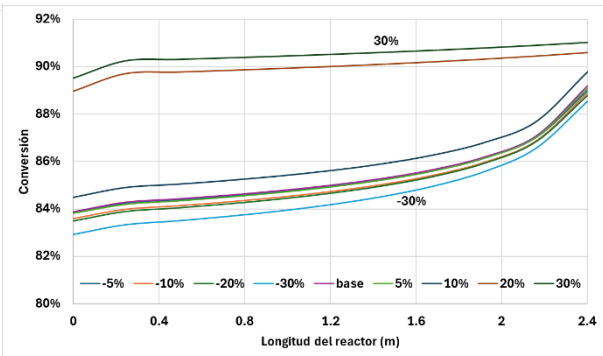
(A) Reactor 1



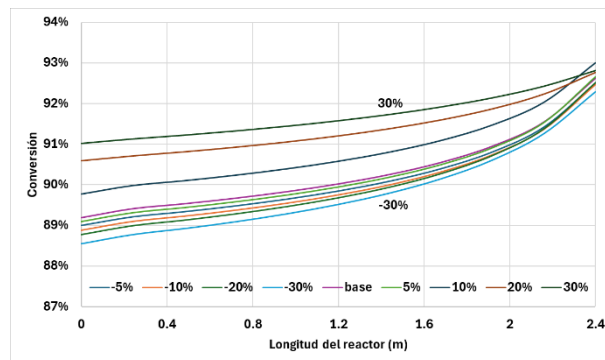
(B) Reactor 2



(C) Reactor 3



(D) Reactor 4



(E) Reactor 5

Apéndice 29

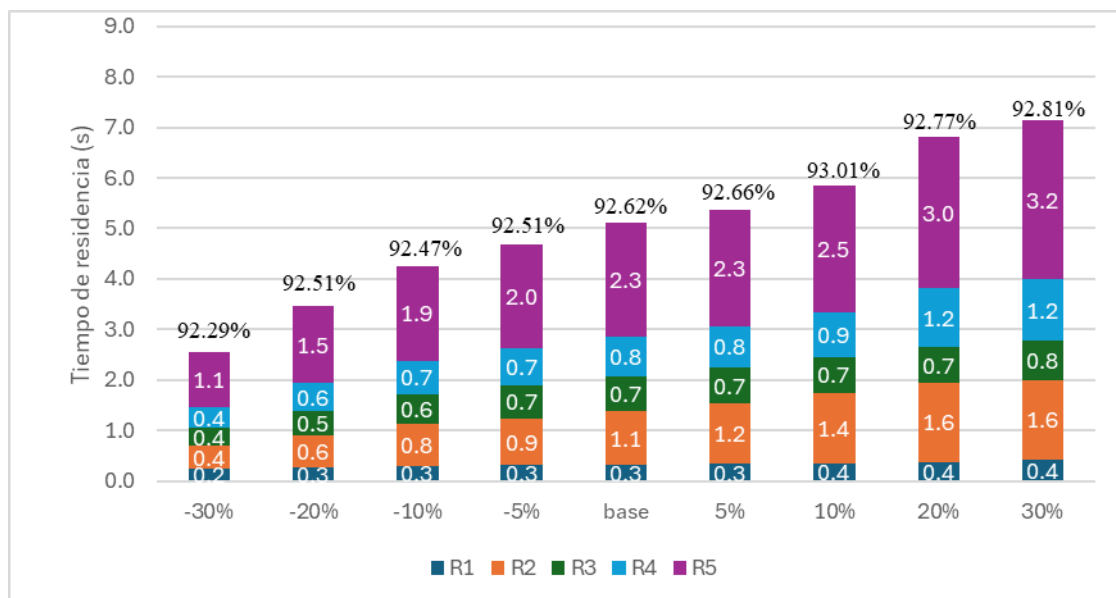
Conversiones globales para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.

Variación	R1	R2	R3	R4	R5
-30%	53.81% (81.28%)	73.24% (99.96%)	82.93% (100%)	88.55% (100%)	92.29% (99.68%)
-20%	57.71% (88.24%)	74.67% (100%)	83.49% (100%)	88.78% (99.99%)	92.51% (99.96%)
-10%	59.73% (93.96%)	75.31% (100%)	83.59% (99.94%)	88.88% (100%)	92.47% (99.87%)
-5%	60.37% (95.70%)	75.73% (100%)	83.87% (100%)	89% (100%)	92.51% (99.99%)
base	61.06% (96.09%)	75.67% (99.98%)	83.88% (100%)	89.19% (100%)	92.62% (100%)
5%	61.63% (96.22%)	75.90% (100%)	83.82% (100%)	89.10% (100%)	92.66% (99.99%)
10%	62.15% (96.34%)	75.96% (99.49%)	84.49% (100%)	89.78% (99.97%)	93.01% (100%)
20%	62.99% (96.55%)	71.61% (100%)	88.97% (100%)	90.59% (99.98%)	92.77% (100%)
30%	63.89% (96.72%)	71.95% (100%)	89.53% (100%)	91.02% (100%)	92.81% (100%)

Nota. La conversión de equilibrio se presenta entre paréntesis.

Apéndice 30

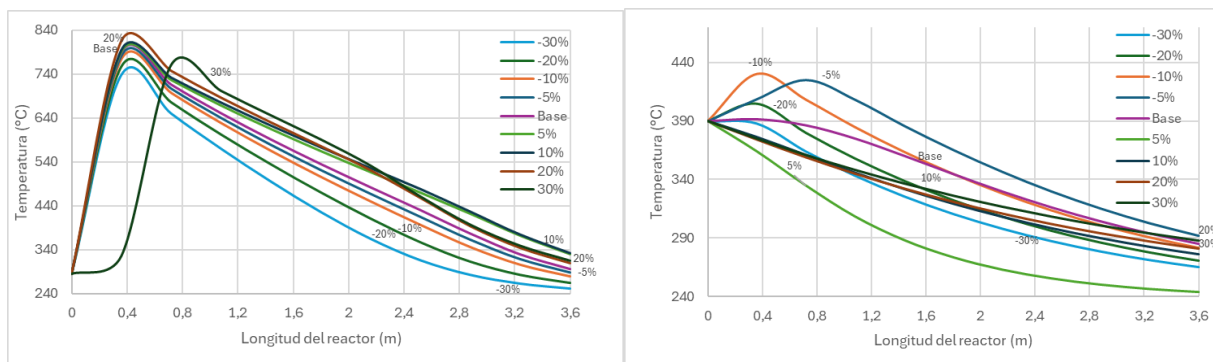
Tiempo de residencia para las variaciones de presión para la configuración adiabática de este trabajo.



Nota. La conversión global de cada variación se presenta sobre cada barra.

Apéndice 31

Perfiles de temperatura de las variaciones de flujo de H_2 para la configuración con enfriamiento de este trabajo.

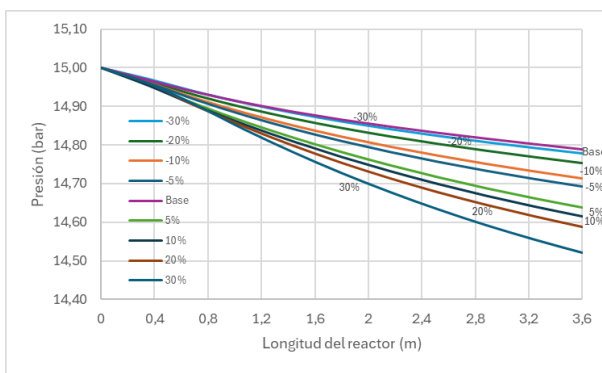


(A) Reactor 1

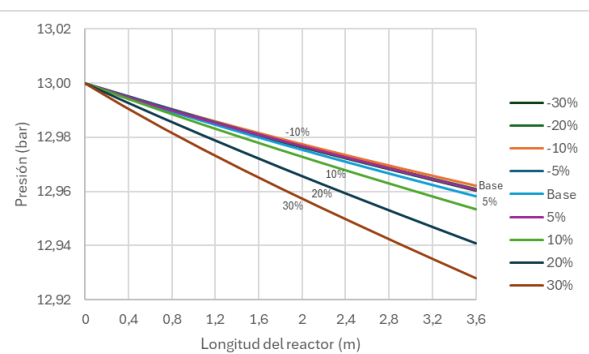
(B) Reactor 2

Apéndice 32

Perfiles de presión de las variaciones de flujo de H_2 para la configuración con enfriamiento de este trabajo.



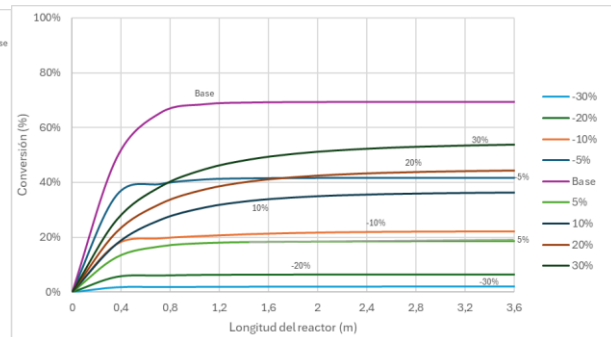
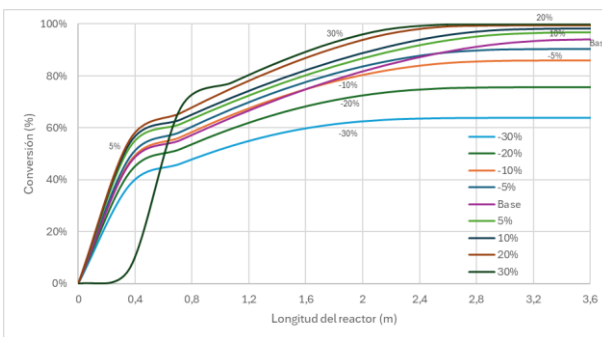
(A) Reactor 1



(B) Reactor 2

Apéndice 33

Perfiles de conversión de las variaciones de flujo de H_2 para la configuración con enfriamiento de este trabajo.

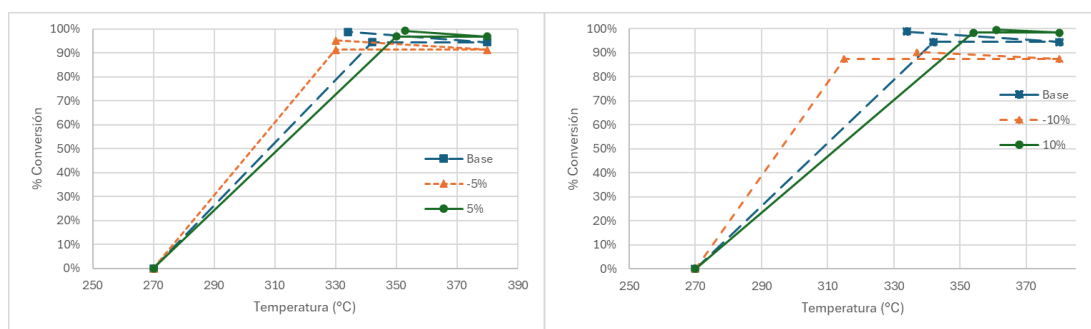
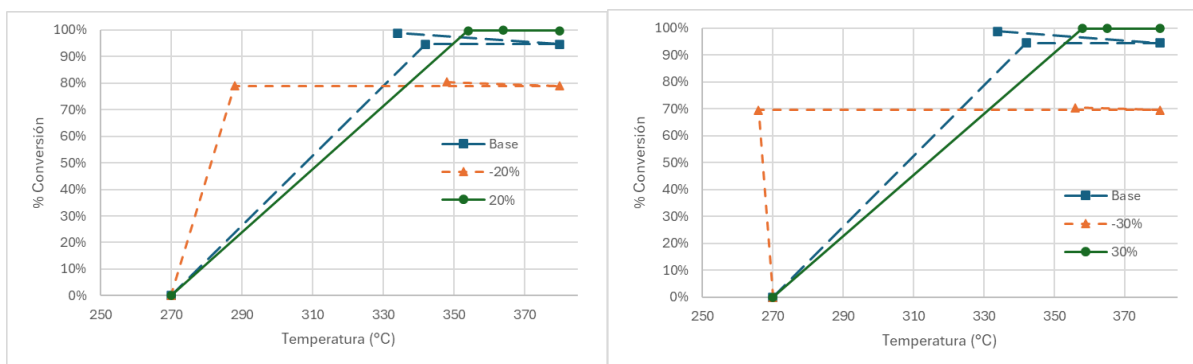


(A) Reactor 1

(B) Reactor 2

Apéndice 34

Gráficas de conversión vs temperatura de las variaciones de flujo de H₂ para la configuración con enfriamiento de este trabajo.

(A) Variación $\pm 5\%$ (B) Variación $\pm 10\%$ (C) Variación $\pm 20\%$ (D) Variación $\pm 30\%$ **Apéndice 35**

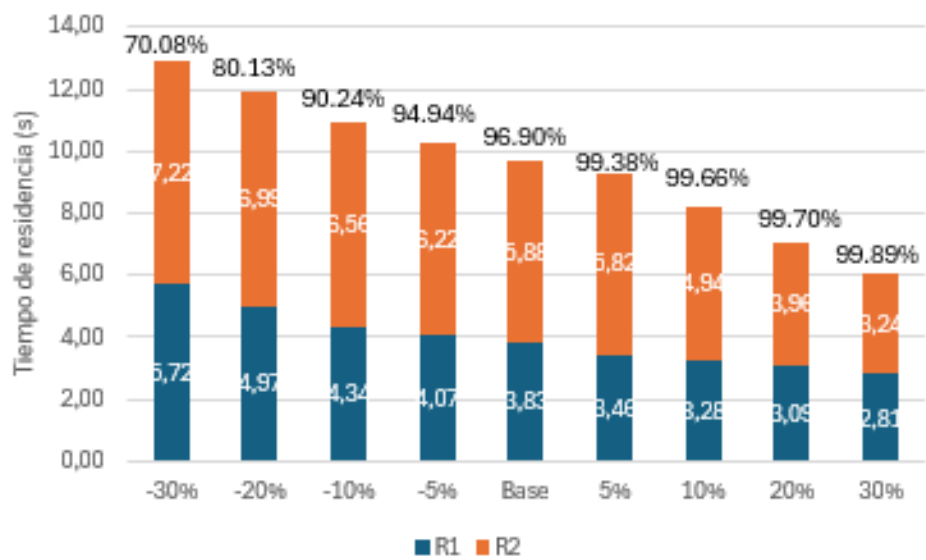
Conversiones globales de las variaciones de flujo de H₂ para la configuración con enfriamiento de este trabajo.

Variación	R1	R2
-30%	63.88% (65.64%)	70.08% (74.81%)
-20%	75.61% (76.76%)	80.13% (80.19%)
-10%	85.95% (86.06%)	90.24% (100%)
-5%	90.33% (90.72%)	94.94% (100%)
Base	93.95% (94.74%)	96.90% (100%)
5%	96.64% (96.75%)	99.38% (100%)
10%	98.32% (98.44%)	99.66% (99.11%)
20%	98.81% (99.69%)	99.70% (99.93%)
30%	96.61% (100%)	99.89% (99.98%)

Nota. La conversión de equilibrio se presenta entre paréntesis.

Apéndice 36

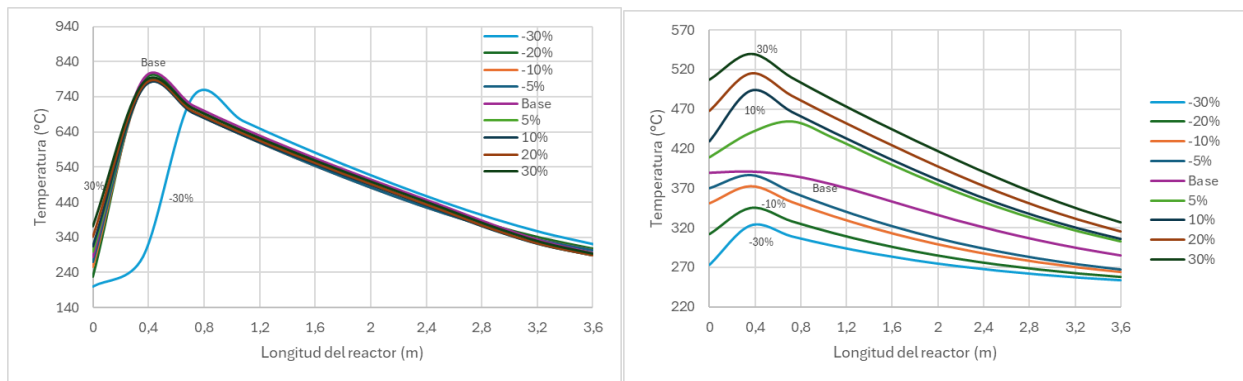
Tiempos de residencia para las variaciones de flujo de H_2 para la configuración con enfriamiento de este trabajo.



Nota. La conversión global de cada variación se presenta sobre cada barra.

Apéndice 37

Perfiles de temperatura de las variaciones de la temperatura de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.

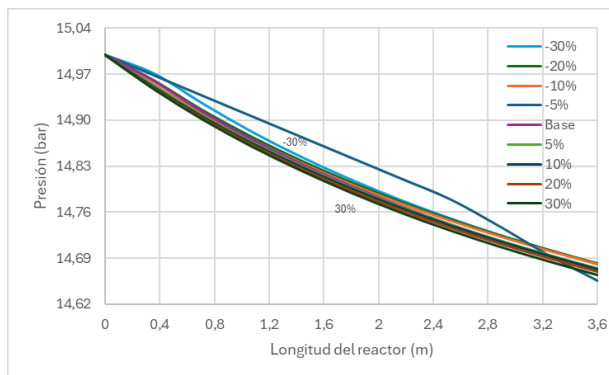


(A) Reactor 1

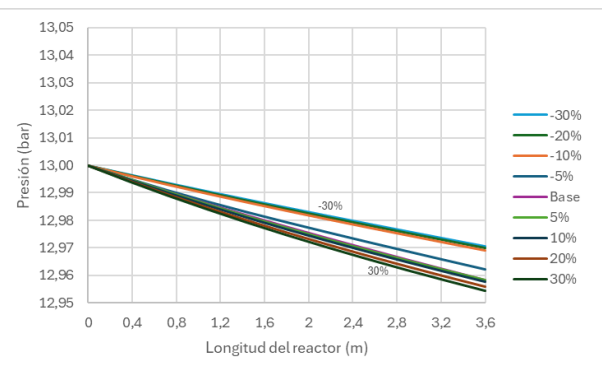
(B) Reactor 2

Apéndice 38

Perfiles de presión de las variaciones de la temperatura de alimentación para la configuración de reactores con enfriamiento de este trabajo.



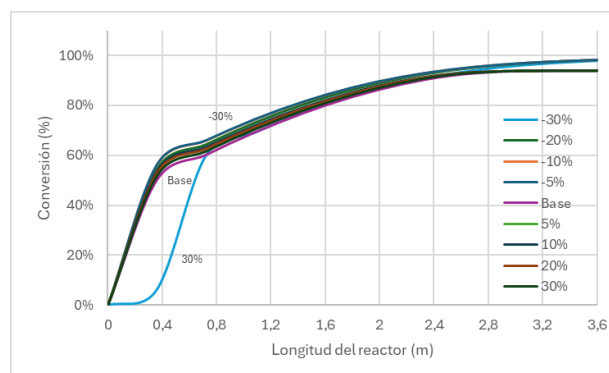
(A) Reactor 1



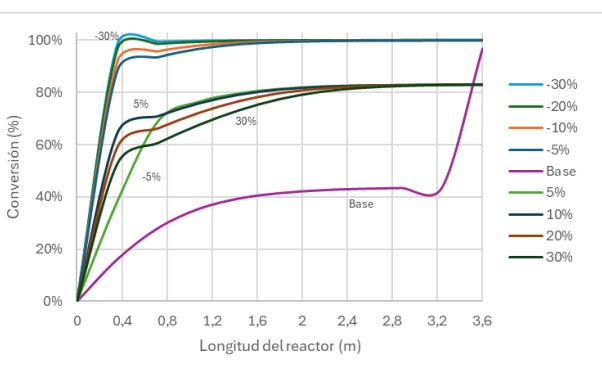
(B) Reactor 2

Apéndice 39

Perfiles de conversión de las variaciones de la temperatura de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.



(A) Reactor 1



(B) Reactor 2

Apéndice 40

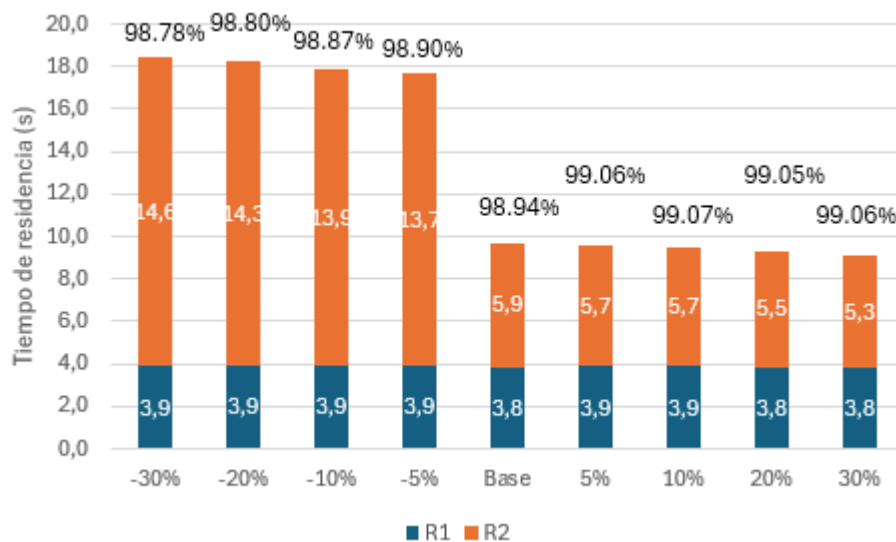
Conversiones globales de las variaciones de la temperatura para la configuración con enfriamiento de este trabajo.

Variación	R1	R2
-30%	90.90% (100%)	98.78% (99.99%)
-20%	91.96% (100%)	98.80% (99.99%)
-10%	93.25% (99.27%)	98.87% (99.98%)
-5%	93.76% (96,72%)	98.90% (100%)
Base	93.95% (94.73%)	98.94% (100%)
5%	93.98% (94.57%)	99.06% (100%)
10%	93.96% (94.98%)	99.07% (99.97%)
20%	93.95% (94.29%)	99.05% (100%)
30%	94.94% (94.97%)	99.06% (100%)

Nota. La conversión de equilibrio se presenta entre paréntesis.

Apéndice 41

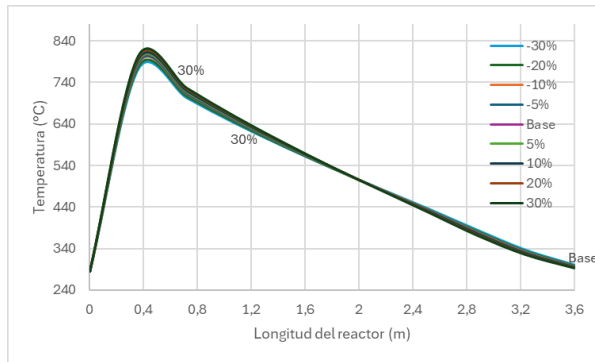
Tiempos de residencia para las variaciones de temperatura para la configuración con enfriamiento de este trabajo.



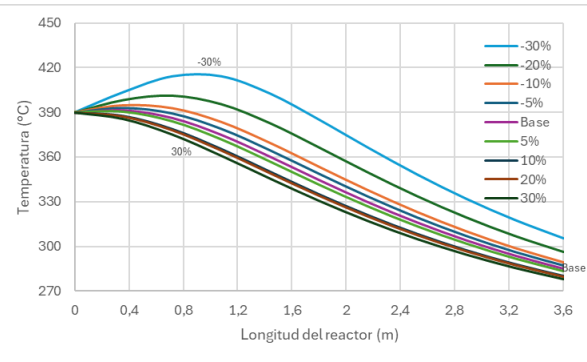
Nota. La conversión global de cada variación se presenta sobre cada barra.

Apéndice 42

Perfiles de temperatura de las variaciones de la presión de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.



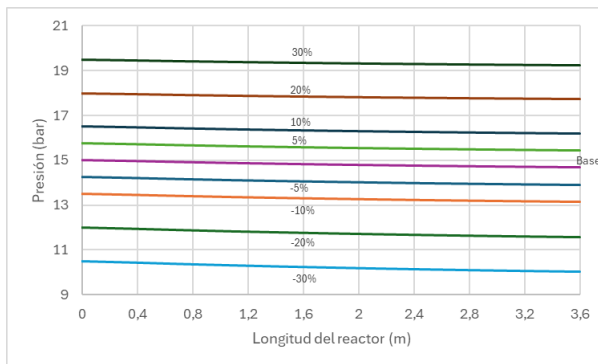
(A) Reactor 1



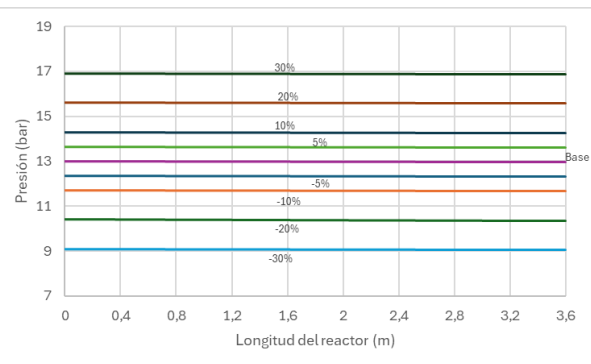
(B) Reactor 2

Apéndice 43

Perfiles de presión de las variaciones de la presión de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.



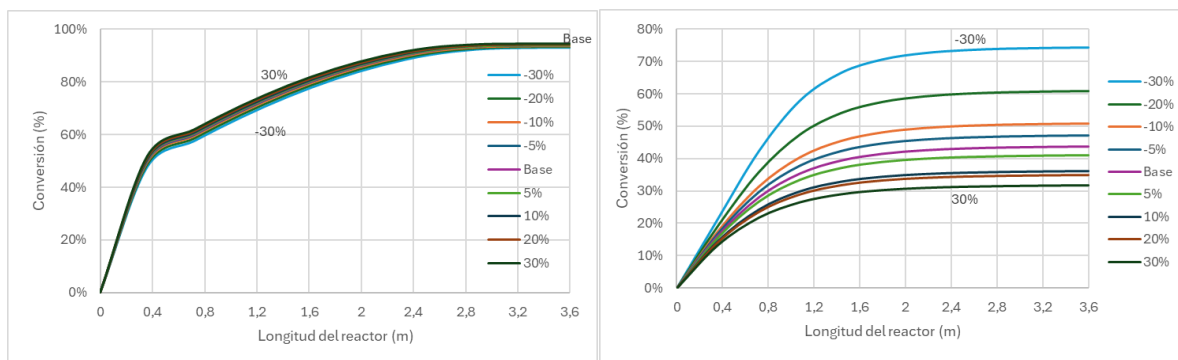
(A) Reactor 1



(B) Reactor 2

Apéndice 44

Perfiles de conversión de las variaciones de la presión de alimentación para la configuración con enfriamiento de este trabajo.



(A) Reactor 1

(B) Reactor 2

Apéndice 45

Conversiones globales de las variaciones de la presión para la configuración con enfriamiento de este trabajo.

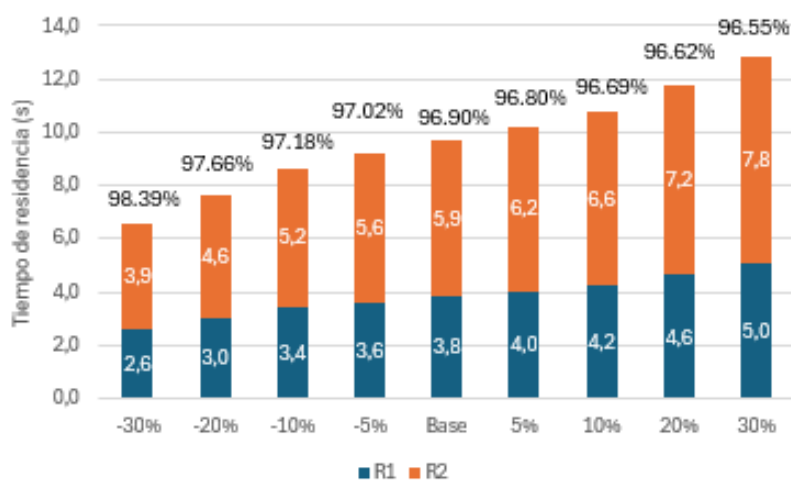
Variación	R1	R2
-30%	93.10% (94.59%)	98.39% (99.98%)
-20%	93.44% (94.62%)	97.66% (99.96%)
-10%	93.72% (94.65%)	97.18% (99.95%)
-5%	93.84% (94.67%)	97.02% (99.93%)
Base	93.95% (94.74%)	96.90% (100%)

5%	94.05% (94.76%)	96.80% (100%)
10%	94.33% (94.78%)	96.69% (100%)
20%	94.31% (94.84%)	96.62% (100%)
30%	94.46% (94.96%)	96.55% (100%)

Nota. La conversión de equilibrio se presenta entre paréntesis.

Apéndice 46

Tiempos de residencia para las variaciones de presión para la configuración con enfriamiento de este trabajo.



Nota. La conversión global de cada variación se presenta sobre cada barra.

Apéndice 47

Representación cinética en Aspen Plus

Configuration Kinetic Equilibrium Custom Activity GLHHW Adsorption Kinetics Summary Comr

Reaction class **GLHHW** Rate Expression $r = \frac{[\text{Kinetic factor}][\text{Driving force}]}{[\text{GLHHW Adsorption}]}$

Kinetic factor

If To is specified Kinetic factor $= k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$
 If To is not specified Kinetic factor $= kT^n e^{-E/RT}$

k **10.9**
 n **0**
 E **57.4165** **kJ/mol**
 To **C**
 Custom Term
 Reaction rate units **kmol/kg-hr**

Driving Force

Reacting phase **Vapor**
 [Ci] basis **Partial pressure**
 [Ci] units **KPa**
 Rate basis **Cat (wt)**

Solids Adsorption

Driving force expression

Reverse rate calculation option

☐ Compute reverse rate using microscopic reversibility
☒ Specify rate const. and conc. exponents for forward and reverse reactions

Concentration exponents

Specify parameters for **Forward** reaction rate

Reactants	Exponent	Products	Exponent
CO2	1	CH4	0
H2	0.5	WATER	0

Coefficients for driving force constant

A **0** B **0** C **0** D **0**

Concentration exponents

Specify parameters for **Reverse** reaction rate

	Reactants	Exponent		Products	Exponent
▶	CO2	0	▶	CH4	1
▶	H2	-3.5	▶	WATER	2

Coefficients for driving force constant

A **35.2837** B **-22430** C **0** D **0**

GLHHW adsorption parameters

GLHHW No **1** Adsorption exponent **2**

Concentration exponents

	Component	Term no. 1	Term no. 2	Term no. 3	Term no. 4	Term no. 5
▶	CH4	0	0	1	0	
▶	H2	0	1	0	-1	
▶	WATER	0	0	0	1	
▶						

Ads.= $\{K1 + K2*[H2] + K3*[CH4] + K4*[H2]^{-1}*[WATER]\}^2$

Adsorption constants

Term No **1**

A: **0** B: **0** C: **0** D: **0**

K1=1

Adsorption constants

Term No **2**

A: **-23.5169** B: **9971.13** C: **0** D: **0**

K2=6.12E-11*exp(9971.13/T)

Adsorption constants

Term No ☒ 3

A: B: C: D:

$K3 = 6.65E-06 * \exp(4604.28/T)$

Adsorption constants

Term No ☒ 4

A: B: C: D:

$K4 = 1.77E+03 * \exp(-10666.35/T)$

Apéndice 48

Representación cinética de la configuración con enfriamiento en Aspen Plus

☒ Configuration
 ☒ Kinetic
 ☐ Equilibrium
 ☐ Custom
 ☐ Activity
 ☐ GLHHW Adsorption
 ☐ Kinetics Summary
 ☐ Comments

No.	Name	Reaction class	Active	Reversible	Stoichiometry
1	CO2-CH4	GLHHW	☒	☒	CO2 + 4 H2 --> CH4(MIXED) + 2 H2O(MIXED)

1) CO₂ + 4 H₂ --> CH₄(MIXED) + 2 H₂O(MIXED) ☒ Reaction is reversible

Reaction class **GLHHW** Rate Expression $r = \frac{[\text{Kinetic factor}][\text{Driving force}]}{[\text{GLHHW Adsorption}]}$

Kinetic factor

If To is specified Kinetic factor = $k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$

If To is not specified Kinetic factor = $kT^n e^{-E/RT}$

k **2.29e+16**

n **0**

E **244** **kJ/mol**

To **C**

Custom Term

Reaction rate units **kmol/kg-hr**

Driving Force

Reacting phase **Vapor**

[Ci] basis **Partial pressure**

[Ci] units **KPa**

Rate basis **Cat (wt)**

Solids **Adsorption**

Driving force expression

Reverse rate calculation option

☐ Compute reverse rate using microscopic reversibility

☒ Specify rate const. and conc. exponents for forward and reverse reactions

Concentration exponents

Specify parameters for **Forward** reaction rate

	Reactants	Exponent		Products	Exponent
▶	CO ₂	1	▶	CH ₄	
▶	H ₂	0.5	▶	H ₂ O	

Coefficients for driving force constant

A **-35,2837** B **22430** C **0** D **0**

Concentration exponents

Specify parameters for **Reverse** reaction rate

	Reactants	Exponent		Products	Exponent
▶	CO ₂		▶	CH ₄	1
▶	H ₂	-3.5	▶	H ₂ O	2

Coefficients for driving force constant

A **0** B **0** C **0** D **0**

GLHHW adsorption parameters

GLHHW No ☒ 1 Adsorption exponent

Concentration exponents

	Component	Term no. 1	Term no. 2	Term no. 3	Term no. 4	Term no. 5
▶	CH4	0	0	1	0	
▶	H2	0	1	0	-1	
▶	H2O	0	0	0	1	
▶						

$Ads.=\{K1 + K2*[H2] + K3*[CH4] + K4*[H2]^{-1}*[H2O]\}^2$

Adsorption constants

Term No ☒ 1

A: B: C: D:

K1=1

Adsorption constants

Term No ☒ 2

A: B: C: D:

$K2=6,12E-11*\exp(9971,13/T)$

Adsorption constants

Term No ☒ 3

A: B: C: D:

$K3=6,65E-06*\exp(4604,28/T)$

Adsorption constants

Term No ☒ 4

A: B: C: D:

$K4=1,77E+03*\exp(-10666,35/T)$