

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL

Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas

Diseño conceptual del proceso de reformado de gas natural con vapor para la producción de hidrógeno azul, incorporando un análisis económico y ambiental

PROYECTO INTEGRADOR

Previo a la obtención del título de:

Ingeniero Químico

Presentado por:

Katherine Elizabeth Córdova Molina

Joseph Leonardo Moreira Viejo

GUAYAQUIL - ECUADOR

Año: 2022

DEDICATORIA

El presente proyecto lo dedicamos con muchísimo cariño a nuestros queridos padres, quienes han sido y serán nuestra motivación más grande. De manera muy especial, también va dedicado a nuestros amigos/as más cercanos por su apoyo y aporte muy valioso durante todos estos años.

En fin, como recordatorio hacia nosotros mismos:

“Eres el proyecto más importante en el que vas a trabajar en toda tu vida...claro que puedes, siempre has podido.”

AGRADECIMIENTOS

En primera instancia, damos gracias a Dios por otorgarnos la fortaleza y sabiduría durante cada paso y meta en nuestras vidas. Agradecemos también a nuestros seres queridos por su apoyo incondicional. Este nuevo logro es tan nuestro, como de ustedes.

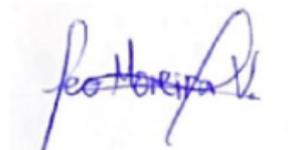
Nuestro más sincero agradecimiento a nuestros tutores: Yris González y Christopher Varela por su valioso aporte, paciencia y constante guía durante todo este proceso de investigación. De igual manera, agradecemos a los colaboradores: Nadia Flores, Daniela Galatro y Alexander Espinoza.

DECLARACIÓN EXPRESA

"Los derechos de titularidad y explotación, nos corresponde conforme al reglamento de propiedad intelectual de la institución; *Katherine Elizabeth Córdova Molina* y *Joseph Leonardo Moreira Viejo* damos nuestro consentimiento para que la ESPOL realice la comunicación pública de la obra por cualquier medio con el fin de promover la consulta, difusión y uso público de la producción intelectual"

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "Katherine Córdova".

Katherine Córdova

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "Leonardo Moreira".

Leonardo Moreira

EVALUADORES

PhD. Yris González

PROFESOR TUTOR

M.Sc. Christopher Varela

PROFESOR CO-TUTOR

Ing. Nadia Flores

PROFESOR DE LA MATERIA

RESUMEN

Se ha despertado un gran interés en el desarrollo de procesos eficientes para generar hidrógeno. Actualmente, el reformado de metano con vapor es la ruta más aplicada para producir hidrógeno a partir del gas natural. El presente proyecto, busca desarrollar un diseño conceptual de una planta de reformado de gas natural con vapor para la producción de hidrógeno azul, con el fin de incrementar la rentabilidad de la empresa de estudio. El objetivo consiste en simular el proceso para demostrar la viabilidad y rentabilidad del diseño propuesto mediante su respectivo análisis económico y ambiental. La simulación y los cálculos de balances de materia y energía para cada una de las etapas básicas se desarrollaron en el software Aspen Plus. El software de diseño, junto con las condiciones de operación y flujos resultantes, permitieron calcular el dimensionamiento de los equipos y el análisis económico del proyecto. El análisis de impacto ambiental fue medido a partir de la huella de carbono con ayuda del software OpenLCA. La tasa de rentabilidad, tiempo de retorno, costos de operación y capital, entre otros; permiten concluir que la inversión para este diseño es altamente rentable para la empresa. Los resultados también indican un valor reducido de huella de carbono, lo cual implica bajas emisiones de gases de efecto invernadero y que el potencial de contaminación del proceso no es de alto riesgo para el medio ambiente.

Palabras Clave: diseño conceptual, hidrógeno azul, reformado, análisis económico y ambiental

ABSTRACT

There has been great interest in the development of efficient processes to generate hydrogen. Currently, steam methane reforming is the most widely applied route to produce hydrogen from natural gas. The present project seeks to develop a conceptual design of a natural gas steam reforming plant for the production of blue hydrogen, in order to increase the profitability of the company under study. The objective is to simulate the process to demonstrate the feasibility and profitability of the proposed design through its respective economic and environmental analysis. The simulation and the calculations of material and energy balances for each of the basic stages were developed in Aspen Plus software. The design software, together with the resulting operating conditions and flows, allowed the calculation of equipment sizing and the economic analysis of the project. The environmental impact analysis was measured from the carbon footprint using OpenLCA software. The rate of return, payback time, operating and capital costs, among others, allow us to conclude that the investment for this design is highly profitable for the company. The results also indicate a reduced carbon footprint value, which implies low greenhouse gas emissions and that the pollution potential of the process is not of high risk to the environment.

Keywords: *conceptual design, blue hydrogen, reforming, economic and environmental analysis*

ÍNDICE GENERAL

RESUMEN	I
ABSTRACT.....	II
ÍNDICE GENERAL.....	III
ABREVIATURAS.....	IV
SIMBOLOGÍA.....	V
ÍNDICE DE FIGURAS	VI
ÍNDICE DE TABLAS	VII
CAPÍTULO 1	i
1. Introducción	1
1.1 Descripción del problema.....	1
1.2 Justificación del problema	3
1.3 Objetivos	4
1.3.1 Objetivo General.....	4
1.3.2 Objetivos Específicos	4
1.4 Marco teórico	4
CAPÍTULO 2	10
2. Metodología.....	10
CAPÍTULO 3	25
3. Resultados y análisis.....	25
CAPÍTULO 4	36
4. Conclusiones y recomendaciones.....	36
4.1 Conclusiones.....	36
4.2 Recomendaciones	39
BIBLIOGRAFÍA	40

ABREVIATURAS

SMR	Reformado de gas natural con vapor
IPCC	Panel Intergubernamental sobre el cambio climático
GEI	Gases de efecto invernadero
HC	Huella de Carbono
PR	Peng Robinson
PSA	Adsorción con presión oscilante
ACV	Análisis de Ciclo de Vida
MDEA	Unidad de absorción con aminas
APEA	Aspen Process Economic Analyzer
VAN	Valor Actual Neto
TIR	Tasa Interna de Rentabilidad

SIMBOLOGÍA

kg	Kilogramo
ton	Tonelada
h	Hora
F	Fahrenheit
mol	Moles
lbmol	Libra mol
psia	Libras por pulgada cuadrada absolutas
ft	Pies
cuft	Pies cúbicos
Mt	Mega toneladas
kWh	Kilovatio-hora
%	Porcentaje
\$	dólares
CO ₂	Dióxido de carbono
CO ₂ eq	Equivalentes de Dióxido de carbono
CO	Monóxido de carbono
H ₂ O	Agua
H ₂	Hidrógeno
CH ₄	Metano
N ₂	Nitrógeno
O ₂	Oxígeno
H ₂ S	Ácido sulfhídrico
C ₃ H ₈	Propano
C ₂ H ₆	Etano
CH ₃ OH	Metanol
C ₄ H ₁₀	Butano
C ₅ H ₁₂	Pentano
C ₆ H ₁₄	Hexano
C ₈ H ₁₈ S	Mercaptano

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Proceso de reformado de gas natural con vapor	7
Figura 2.1. Diagrama de bloques del reformado de gas natural con vapor.....	10
Figura 2.2. Diagrama de flujo de la simulación para etapa de Pretratamiento	12
Figura 2.3. Diagrama de flujo de la simulación para etapa de Reformado.....	14
Figura 2.4. Diagrama de flujo de la simulación para etapa de conversión	16
Figura 2.5. Diagrama de flujo de la simulación para etapa de separación	18
Figura 2.6. Diagrama de flujo de la simulación del proceso de reformado de gas ...	19
Figura 3.1 Flujo de caja.....	33

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1. Composición del gas natural	11
Tabla 2.2. Condiciones de operación para unidad de pretratamiento	13
Tabla 2.3. Condiciones de operación para etapa de reformado.....	15
Tabla 2.4. Condiciones de operación para unidad de conversión.....	17
Tabla 2.5. Condiciones de operación para unidades de separación.....	19
Tabla 3.1.1. Balance de materia de todas las corrientes.....	25
Tabla 3.1.3. Balance de materia de todas las corrientes.....	26
Tabla 3.1.3. Balance de materia de todas las corrientes.....	26
Tabla 3.1.4 Balance de materia de todas las corrientes.....	27
Tabla 3.2. Dimensionamiento de equipos	29
Tabla 3.3. Dimensionamiento de intercambiadores de calor.....	30
Tabla 3.4 Costos resultantes.....	31
Tabla 3.5. Costos por equipos	32
Tabla 3.6. Costos de materia prima, producto y utilitarios.....	33
Tabla 3.7. Inventario de materiales	34

CAPÍTULO 1

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Descripción del problema

La empresa de estudio se dedica a la producción y venta de compuestos gaseosos, entre los cuales destacan el oxígeno y nitrógeno; además intervienen en la compra y venta de dióxido de carbono. Durante la pandemia por COVID-19, el oxígeno se volvió su producto con más demanda y esto ocasionó un significativo incremento en sus ventas. Sin embargo, la estabilización de los casos de COVID-19 en Ecuador ha resultado en una regularización en las ventas de dicho producto. Debido a la variabilidad en la demanda de sus productos gaseosos, la empresa de estudio está en el proceso de introducir uno que sea más rentable y atractivo en el mercado, como lo es el hidrógeno.

En Ecuador, la producción de hidrógeno es casi inexistente puesto que gran parte de las industrias no utilizan este gas como materia prima para sus procesos. Lo que se debe a la falta de políticas en el país encargadas de incentivar tanto la matriz productiva como energética, considerando que dicho gas puede utilizarse como un combustible con bajas emisiones de carbono. No obstante, a nivel nacional existe una mínima demanda del hidrógeno para procesos puntuales como la refinación de combustibles.

En los últimos años, la empresa en cuestión ha logrado establecer nuevas relaciones directas con clientes dedicados a la industria de la refinación de hidrocarburos. En este caso, la refinería de Talara en Perú; la cual representa su principal cliente y una posibilidad de crecimiento. Para cumplir con las expectativas de la refinería de Talara, la empresa de estudio requiere del diseño de una planta de reformado de gas natural con vapor de agua.

El diseño conceptual de interés se centra en la producción de hidrógeno azul. Este tipo de producto implica que las emisiones de dióxido de carbono en su mayoría sean capturadas a través de un sistema de separación y almacenamiento de carbono. La variabilidad de la materia prima es uno de los principales aspectos que condicionan el diseño propuesto, puesto que la caracterización de la misma dependerá del proveedor.

Desde el punto de vista de abastecimiento y acceso a la materia prima, la empresa tiene estrechas relaciones comerciales con EP Petroecuador. Idealmente se espera obtener gas natural dulce o sin contaminantes. Dicho proveedor cuenta con pozos de extracción para este compuesto, lo que facilitaría el acceso y negociación. No obstante, el volumen de hidrógeno que la empresa de estudio espera comercializar no podría abastecerse con este proveedor local. Por lo tanto, la compañía no descarta la idea de también importar gas natural por medio de buques metaneros. Pero, este modo de abastecimiento no garantiza un gas natural pre-tratado, y por lo tanto se podría recibir gas natural ácido como materia prima. Implicando que, el diseño conceptual de la planta de reformado de gas natural incluya una etapa de pretratamiento.

Un último aspecto que restringe el diseño propuesto está relacionado con el factor económico de la empresa en cuestión. Si bien es cierto, la compañía dispone de los recursos financieros para lograr invertir en nuevas tecnologías; y para este caso particular una nueva línea de producción. Dado que, los accionistas brindan un monto máximo para destinar fondos en nuevos procesos o proyectos, estarán dispuestos a invertir si el análisis económico del diseño en efecto es rentable y no representa un alto riesgo para la situación financiera de la empresa.

1.2 Justificación del problema

El presente proyecto, de carácter pionero en Ecuador, busca desarrollar un diseño conceptual de una planta de reformado de gas natural con vapor para la producción de hidrógeno azul, con el fin de incrementar la rentabilidad de la empresa de estudio al comercializar el mismo. La importancia del proyecto reside en la capacidad de obtener un producto que también puede ser utilizado como materia prima para otros procesos sostenibles, debido a su alta capacidad comburente y reducidas emisiones de gases contaminantes. Si bien es cierto, se espera que la producción de hidrógeno azul, caracterizado por sus bajas emisiones de carbono, desempeñe un papel fundamental en las futuras transiciones energéticas mundiales.

El nivel de trascendencia del proyecto también radica en convertir a la compañía en precursores a nivel nacional en tecnologías de producción de hidrógeno azul; logrando así destacar a la organización. La intención del diseño propuesto estaría enlazado a los objetivos estratégicos del país en cuanto a la reducción de emisiones de dióxido de carbono.

Por otra parte, la empresa de estudio ha logrado establecer acuerdos comerciales con nuevos potenciales clientes, como lo es la refinería de Talara en Perú. Existiendo así oportunidades de crecimiento para la empresa en cuanto a la comercialización de hidrógeno a nivel nacional e internacional, cuyo producto será destinado a procesos de desulfuración e hidrotratamiento de combustibles.

Además, el proyecto es relevante porque permite la internacionalización de la empresa al exportar este gas, ocasionando un incremento en su participación en nuevos mercados y expandirse. Para alcanzar dicho objetivo es necesario una planta con la tecnología o equipos adecuados para cubrir la demanda futura de hidrógeno.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Elaborar un diseño conceptual del proceso de reformado de gas natural con vapor para la producción de hidrógeno azul, demostrando la viabilidad y rentabilidad del proyecto mediante su respectivo análisis económico y ambiental.

1.3.2 Objetivos Específicos

1. Simular el proceso de reformado de gas natural con vapor utilizando un software de diseño comercial.
2. Establecer el análisis económico del proceso de reformado de gas natural con vapor a partir de la simulación del mismo y del dimensionamiento de los equipos principales.
3. Determinar el análisis ambiental del proceso mediante la estimación de la huella de carbono que se genera a partir del mismo.

1.4 Marco teórico

1.4.1 Importancia del hidrógeno azul

En la actualidad, la producción mundial de hidrógeno es de aproximadamente unas 70Mt, de las cuales el 99% es gris, (Irena, 2019). Recientemente, se ha popularizado el uso de colores para referirse al origen de producción del mismo. Este compuesto se denomina “gris” si la producción se efectúa a partir de combustibles fósiles con emisiones de dióxido de carbono. Por otra parte, el término “azul” se utiliza comúnmente para la producción a partir de combustibles fósiles, gestionando las emisiones de dióxido de carbono mediante el uso de tecnologías de captura u otra vía de compensación. A la industria de producción de hidrógeno se le atribuye cerca de 830Mt de emisiones de dióxido de carbono a la atmósfera por año, que corresponden al 2% de las emisiones anuales globales (Yan et al., 2020).

Debido a la rápida tasa de crecimiento en la demanda de hidrógeno, es posible predecir que las emisiones que se generan al producir dicho compuesto aumentarán significativamente; en especial, si la materia prima es gas natural o algún otro combustible fósil y sin introducir ninguna unidad de captura o almacenamiento de carbono al proceso (Yan et al., 2020). Para que sea posible alcanzar los objetivos mundiales de descarbonización es fundamental que se proceda con la transición del hidrógeno gris al azul. No obstante, la introducción de tecnologías de producción de hidrógeno baja en emisiones de carbono en el panorama energético mundial es aún incipiente. (Morante et al., 2020)

1.4.2 Tecnologías asociadas a la producción de hidrógeno y sus aplicaciones

La principal fuente para la obtención de hidrógeno es el gas natural, constituido mayoritariamente por metano. Existen dos principales tecnologías de extracción de hidrógeno a partir del metano: reformado y pirólisis. El proceso de reformado está basado en la descomposición de la molécula de metano para generar hidrógeno y óxidos de carbono. Alternativamente, en la pirólisis del gas ocurre la descomposición del metano sin la utilización de un agente oxidante. (Morante et al., 2020)

El hidrógeno se ha convertido en uno de los productos químicos con más importancia global; debido a que posee las características necesarias para ser utilizado como un combustible renovable y es capaz de proporcionar energía segura y libre de emisiones de carbono. (Morante et al., 2020) Además, este compuesto se aprovecha ampliamente en el refinado de petróleo y en la petroquímica. Así mismo, causa una gran atención por su potencial para abordar los retos críticos relacionados con la descarbonización en los sectores del transporte y residencial, así como en la industria y el sector energético. (Khojasteh Salkuyeh et al., 2017).

En relación al almacenamiento de energía, el hidrógeno puede servir de depósito para energías renovables como la energía solar fotovoltaica y la energía eólica. (Yan et al., 2020)

1.4.3 Realidad actual y estrategias de desarrollo

En Ecuador, las energías renovables aportan actualmente con el 62,89% de la oferta de energía total del país. Entre los objetivos estratégicos institucionales del Ministerio de Energía y Recursos Naturales No Renovables, se ha establecido el incremento de la eficiencia y productividad en el aprovechamiento de los recursos energéticos y mineros. Así mismo, se contempla la reducción de emisiones de dióxido de carbono. (Ministerio De Energía, 2019)

En este nuevo escenario, se exige y plantea una de las tantas tecnologías como el reformado de gas natural, para la transición energética en el sector industrial y petroquímico del país. El hidrógeno se puede producir mediante distintos procesos, el método térmico más común y económico, es el reformado de vapor; en el cual, el gas natural se hace reaccionar con vapor de agua. En particular, se estima que cerca del 50% de la demanda global de hidrógeno se produce por reformado de gas natural con vapor (Basile et al., 2015). En este proceso, la materia prima contiene carbono lo cual genera emisiones de dióxido de carbono que pueden ser capturadas y utilizadas.

1.4.4 Reformación con vapor del gas natural

El proceso de reformado de gas natural con vapor consta de dos reacciones principales. La primera es la descomposición parcial del metano en monóxido de carbono y agua. La segunda consiste en el desplazamiento del agua y metano, cuyo propósito es incrementar la cantidad de hidrógeno que se genera (Bakey, 2015). En el reactor de reformado, el metano y vapor de agua reaccionan endotérmicamente bajo específicas condiciones de operación.

Los rangos de temperatura y presión oscilan entre 1472-1832 F y 203-290 psi, en presencia de un catalizador en base níquel. (Basile et al., 2015)

La corriente de salida del reformador posee un alto contenido en monóxido de carbono, para lo cual es necesario la adición de dos reactores en serie en donde toma lugar las reacciones de desplazamiento. En el primer reactor de desplazamiento de alta temperatura, la reacción ocurre en presencia de un catalizador a base de óxido de hierro con cromo y opera en un rango de temperatura entre 662-752 F. Mientras que, en el segundo reactor de desplazamiento de baja temperatura la reacción ocurre en presencia de un catalizador a base de óxido de zinc promovido por cobre a una temperatura aproximada de 392 F. (Basile et al., 2015)

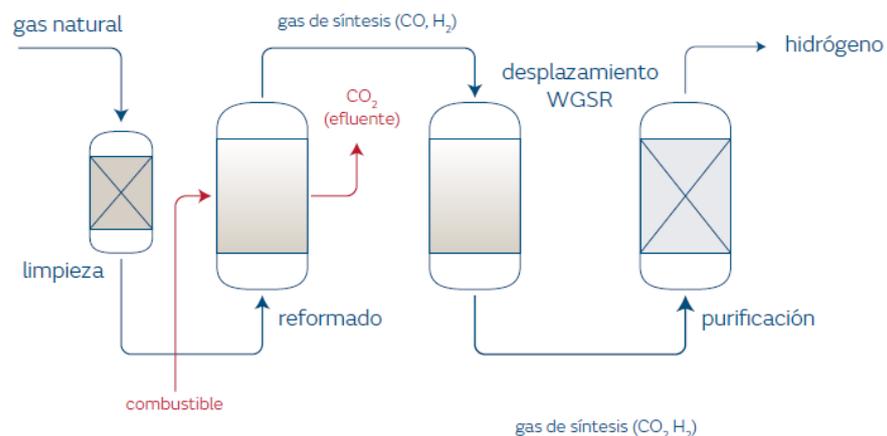


Figura 1.1 Proceso de reformado de gas natural con vapor [Morante et al., 2020]

El producto que se obtiene a partir del reformado es una mezcla de dióxido de carbono, hidrógeno, metano y monóxido de carbono. Para lograr producir hidrógeno de cierta pureza y dióxido de carbono como subproducto, es necesario adicionar una etapa de separación. Una de las vías en las que el hidrógeno se separa del resto de compuestos es con una unidad de adsorción con presión oscilante (PSA) y para el caso de la captura de dióxido de carbono se implementa una unidad de absorción con aminas. (Morante et al., 2020)

La reacción del proceso de reformado de gas natural con vapor puede ser afectada por restricciones de equilibrio termodinámico, la formación de coque y limitaciones en la transferencia de masa y calor. Por ser fuertemente endotérmica la reacción, para lograr proporcionar una tasa de transferencia de calor adecuada desde la zona exterior el catalizador debe empaquetarse en tubos largos y estrechos compuestos de superaleaciones que son altamente caros.

Por lo que se refiere a la formación de coque, esto recae sobre el desempeño del catalizador y produce acumulación de depósitos de carbono. Además, la degradación de los catalizadores puede provocar el bloqueo parcial o total de los tubos del reformador y dar lugar a la aparición de puntos calientes que terminan ocasionando el cierre de la planta. (Basile et al., 2015)

En los casos en el que el gas natural de alimentación al proceso se encuentre contaminado con trazas de componentes azufrados, es necesario la adición de una unidad de pretratamiento. Dicha materia prima, comúnmente posee contaminantes como sulfuros, cloruros, entre otros compuestos y se lo denomina gas natural ácido. Los compuestos azufrados inciden negativamente en los catalizadores utilizados durante el proceso de reformado y por lo tanto deben ser eliminados de la corriente de gas natural.

Para cargas de azufre altas o variables, se utilizan sistemas más complicados que emplean reactores separados para la conversión y la adsorción, o se utilizan dos recipientes de conversión y adsorción en serie. Además, para descomponer hidrocarburos superiores en metano se puede incluir un reactor de pre-reformado previo al proceso. (Jaag & Marrelli, 2004)

1.4.5 La Huella de Carbono

Es relevante cuantificar las emisiones propias del proceso de producción de hidrógeno a partir de gas natural y la medición de la Huella de Carbono (HC) permite esta cuantificación; en realidad es una versión simplificada de un Análisis de Ciclo de Vida. La HC mide en su totalidad los gases de efecto invernadero (GEI) que son emitidos por efecto directo o indirecto de un producto, organización o individuo. Las emisiones atribuibles a cada uno de los GEI se convierten en emisiones equivalentes de dióxido de carbono (CO₂eq).

En lugar de considerar múltiples categorías de impacto ambiental, al momento de estimar la HC se examina únicamente la categoría relativa al calentamiento global (Ihobe S.A, 2009). En el marco actual, la problemática ambiental está cobrando cada vez más importancia; lo que ha llevado a múltiples organizaciones a desarrollar estrategias y normativas legales que garanticen la reducción de los GEI. Para lograr cumplir con dichas legislaciones, se aplican metodologías específicas para el cálculo de la HC; como la del Panel Intergubernamental sobre el cambio climático (IPCC).

CAPÍTULO 2

2. METODOLOGÍA

2.1 Descripción general del proceso

El proceso de reformado de gas natural con vapor (SMR), para la producción de hidrógeno azul, se ilustra en la Figura 2.1. Las etapas básicas del diseño conceptual propuesto, que van desde la alimentación del gas natural hasta la obtención de hidrógeno de alta pureza, son: pretratamiento de la materia prima, pre-reformado, reformado, conversión a gas rico en hidrógeno, unidad de captura de dióxido de carbono y separación de hidrógeno del gas de síntesis.

Este proceso básico de SMR se apoya en un horno, que proporciona calor para la reacción endotérmica de reformado. Este equipo también suministra calor para aumentar la temperatura del vapor, que se utiliza como reactivo tanto en el reformado como en la conversión del gas. Así mismo, la naturaleza exotérmica de la etapa de conversión aporta energía al vapor. El horno consume gas natural como combustible y gas de síntesis, que es residual de la unidad de separación de hidrógeno.

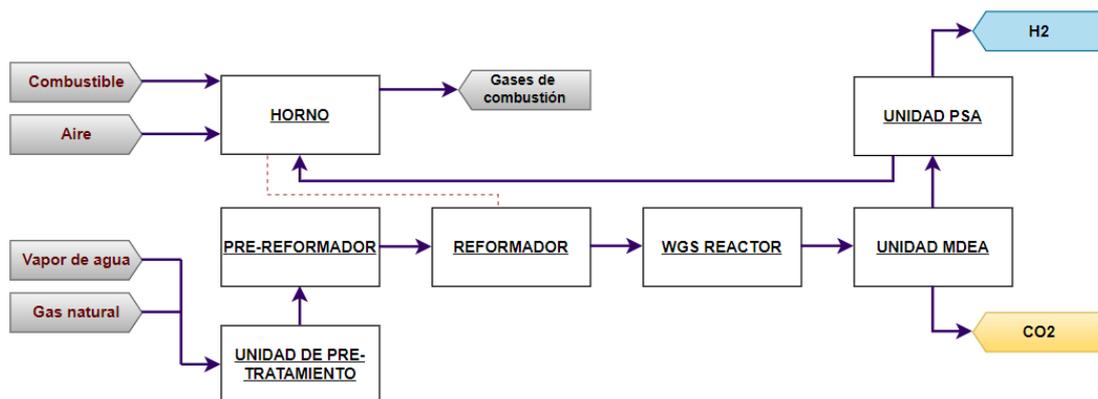


Figura 2.1 Diagrama de bloques del reformado de gas natural con vapor
[Elaboración propia]

Aunque proporciona una representación muy simplificada del proceso, la Figura 2.1 sigue ilustrando el alto nivel de integración de calor y materiales utilizado en una planta SMR.

2.2 Caracterización de la materia prima

Para interés del presente proyecto, se asumió como materia prima al gas natural. Este compuesto no es de composición uniforme, y la caracterización precisa puede tener importantes implicaciones en el diseño óptimo del proceso SMR. Es especialmente importante la presencia de compuestos de azufre, hidrocarburos no metánicos e hidrocarburos líquidos. La simple suposición de que el gas natural está representado equitativamente como metano puro no conduciría a un diseño adecuado de la planta. La Tabla 2.1 muestra una composición representativa del gas natural ácido que se ha elegido para este análisis. (Jaag & Marrelli, 2004)

Tabla 2.1 Composición del gas natural [Elaboración propia]

Composición del gas natural (%molar)	
Metano	94.9
Etano	2.0
Propano	0.2
iso-Butano	0.3
Butano	0.3
Pentano	0.01
Hexano	0.01
N ₂	1.5
O ₂	0.02
CO ₂	0.7
Mercaptano	0.06

Además, una de las suposiciones del sistema en estudio es que el gas natural de alimentación al proceso posee la misma composición del combustible que se alimenta en el horno.

2.3 Simulación del proceso y condiciones de operación para cada etapa

La simulación y los cálculos de balances de materia y energía para cada una de las etapas básicas del proceso SMR, para la producción de hidrógeno azul, se desarrollaron en el software Aspen Plus V11. La ecuación de estado de Peng Robinson (PR) se utilizó para la simulación de todas las unidades, sin excepción. El proceso de producción de hidrógeno se escaló para producir 14300 lb/h de hidrógeno, lo que es equivalente a lo que demanda la empresa con interés de inversión en el proyecto. A continuación, se describen los detalles de las etapas del proceso y su modelización.

2.3.1 Pretratamiento

Los elementos del sistema de pretratamiento se muestran en la Figura 2.2. La corriente de alimentación, FEED, se introduce primero en un tambor de flash, F-101, donde se eliminan los componentes en fase líquida. En las condiciones de funcionamiento previstas, no existe fase líquida en la corriente de alimentación. Sin embargo, el equipo flash se incluye para permitir otras especificaciones de alimentación.

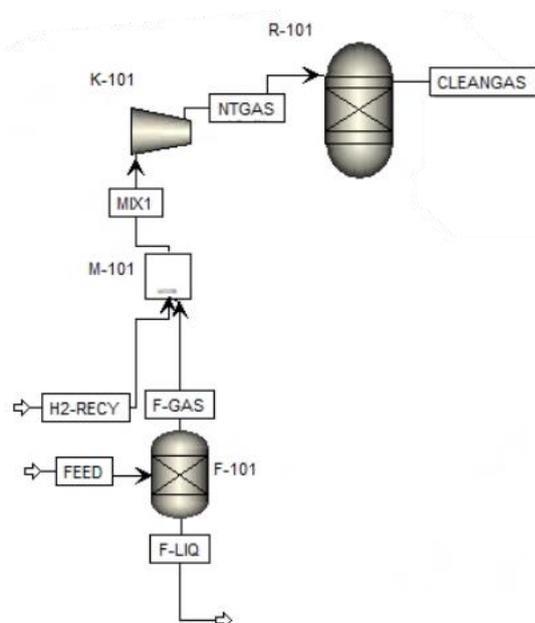


Figura 2.2 Diagrama de flujo de la simulación para etapa de Pretratamiento
[Elaboración propia]

La corriente de hidrógeno H₂-RECY, que se recicla a partir de una corriente de proceso rica del mismo, se introduce en la alimentación gaseosa para su uso en procesos de hidrogenación posteriores. En el reactor R-101, los compuestos orgánicos de azufre se hidrogenan, liberando su azufre como H₂S. Aunque no se muestra en la Figura 2.2, el H₂S se adsorbe en un lecho de óxido de zinc y reacciona para formar sulfuro de zinc, que se elimina como residuo sólido.

Obteniéndose, a la salida de la etapa de Pretratamiento una corriente de gas natural dulce o libre de compuestos sulfurados. La Tabla 2.2 enlista los parámetros de operación de las corrientes y equipos que corresponden a la unidad de pretratamiento.

Tabla 2.2 Condiciones de operación para unidad de pretratamiento [Elaboración propia]

Parámetros de operación para la unidad de Pretratamiento		
Elemento	Parámetro	Valor
FEED	Temperatura (F)	70
	Presión (psia)	290
	Flujo molar (lbmol/h)	1690
H ₂ -RECY	Temperatura (F)	100
	Presión (psia)	290
	Flujo molar (lbmol/h)	781
F-101	Temperatura (F)	70
	Presión (psia)	290
K-101	Presión de salida (psia)	410
	Eficiencia isoentrópica	0.72
R-101	Temperatura (F)	737
	Presión (psia)	405
M-101	Presión (psia)	290

2.3.2 Reformado

El proceso de reformado se representa en la sección del diagrama de flujo de la Figura 2.3. La reacción de reformado de vapor de agua y metano es una reacción altamente endotérmica que se apoya en el calor del horno de reformado. Este apoyo es directo, a través del calentamiento de los tubos llenos de catalizador que forman el reactor. En el horno, FURNACE, reaccionan una corriente de aire y combustible para generar el calor suficiente al reactor de reformado.

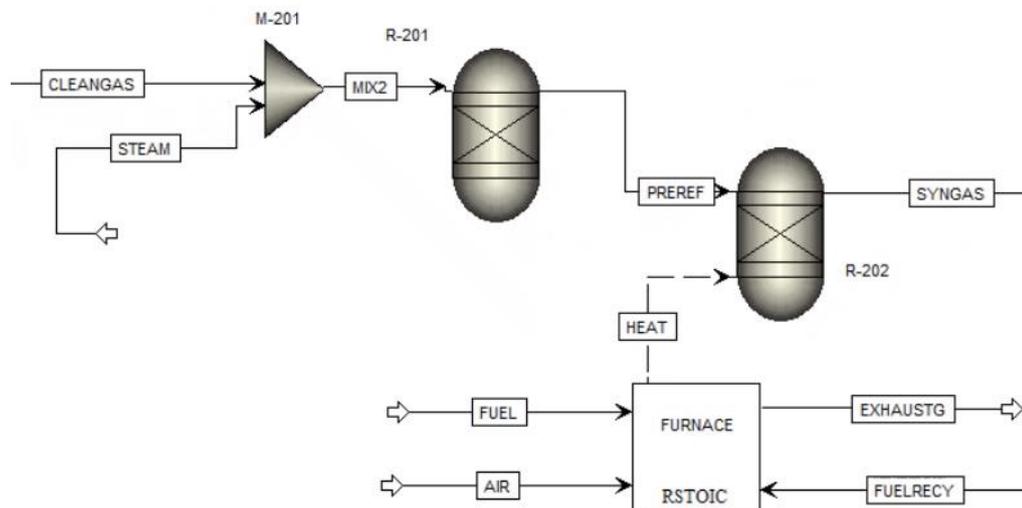
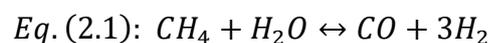


Figura 2.3 Diagrama de flujo de la simulación para etapa de Reformado
[Elaboración propia]

El gas natural limpio que se libera del reactor de desulfuración se mezcla con vapor a una temperatura y presión adecuadas en el mezclador M-201. El reactor de Pre-reformado, R-201, se utiliza para descomponer los hidrocarburos de cadenas superiores en metano. El segundo reactor es el reformador primario, R-202, que realiza la mayor parte del reformado de metano, aunque también se producirá algo de reformado de metano en el Pre-reformador. El calor del horno se transfiere al reformador primario. La reacción de reformado de metano con vapor se observa en la ecuación (2.1).



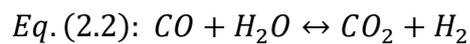
Al horno se alimenta una corriente de recirculación, FUELRECY, que corresponde al metano y otros subproductos que se obtienen a la salida del proceso de separación final. La reacción de reformado tiene lugar a altas temperaturas. Si bien es cierto, la conversión de metano se ve favorecida a medida que estas temperaturas son mayores. La Tabla 2.3 enlista los parámetros de operación de las corrientes y equipos que corresponden a la etapa de reformado .

Tabla 2.3 Condiciones de operación para etapa de reformado [Elaboración propia]

Parámetros de operación para etapa de reformado		
Elemento	Parámetro	Valor
STEAM	Temperatura (F)	950
	Presión (psia)	436
	Flujo molar (lbmol/h)	4875
FUEL	Temperatura (F)	350
	Presión (psia)	14.5
	Flujo molar (lbmol/h)	420
AIR	Temperatura (F)	570
	Presión (psia)	14.5
	Flujo molar (lbmol/h)	14500
FUELRECY	Temperatura (F)	100
	Presión (psia)	15
	Flujo molar (lbmol/h)	265
R-201	Temperatura (F)	814
	Presión (psia)	375
R-202	Presión (psia)	350
FURNACE	Temperatura (F)	1480
	Presión (psia)	15
M-201	Presión (psia)	375

2.3.3 Conversión del gas de síntesis

Los elementos de la etapa de conversión se muestran en la Figura 2.4. El gas de síntesis, SYNGAS, que procede del reformador es rico en hidrógeno y en CO₂. La reacción de desplazamiento puede utilizarse para aumentar el contenido de hidrógeno. La reacción de desplazamiento del monóxido de carbono se muestra en la ecuación (2.2).



El equilibrio de esta reacción favorece a los productos a bajas temperaturas de reacción, pero se requiere una alta temperatura para lograr una velocidad de reacción que sea práctica. El dilema anterior, se resuelve normalmente mediante el uso de un sistema de cambio de dos etapas. La Tabla 2.4 enlista los parámetros de operación de las corrientes y equipos que corresponden a la etapa de reformado.

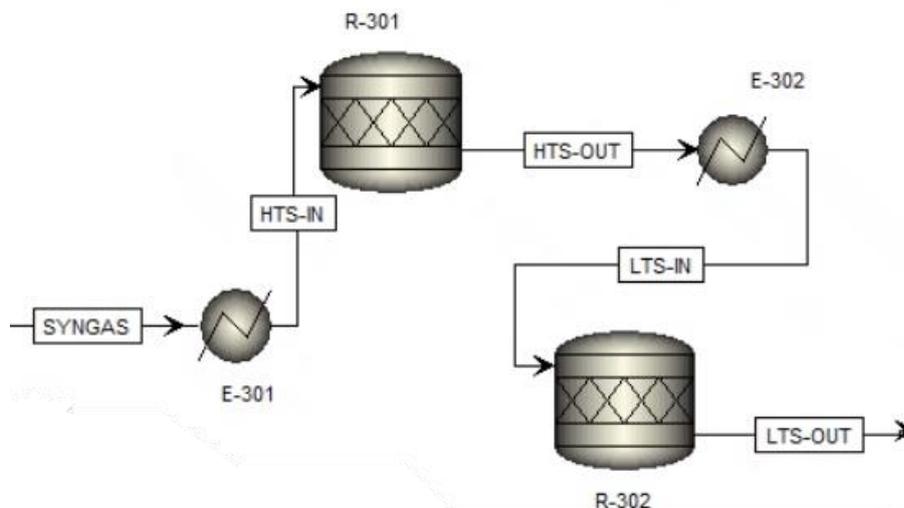


Figura 2.4 Diagrama de flujo de la simulación para etapa de conversión
[Elaboración propia]

En el reactor R-301 se efectúa la primera etapa, la cual requiere normalmente una temperatura de entrada de 662 F. Este valor aumentará en el reactor debido a la naturaleza exotérmica de la reacción. A esta temperatura, la reacción es promovida por un catalizador a base de hierro que reduce la concentración de CO.

La segunda etapa, se da lugar en el reactor R-302, el cual utiliza temperaturas más bajas para aumentar la concentración de equilibrio del hidrógeno. Esta requiere un catalizador más caro, a base de cobre, para alcanzar el equilibrio a una velocidad razonable.

Tabla 2.4 Condiciones de operación para unidad de conversión [Elaboración propia]

Parámetros de operación para etapa de conversión		
Elemento	Parámetro	Valor
E-301	Temperatura (F)	662
	Presión (psia)	275
E-302	Temperatura (F)	400
	Presión (psia)	261
R-301	Temperatura (F)	791
	Presión (psia)	325
R-302	Temperatura (F)	413
	Presión (psia)	300

2.3.4 Etapa de separación de hidrógeno y captura de CO₂

El gas de síntesis desplazado tiene una alta concentración de hidrógeno, pero también incluye una alta concentración de CO₂ y H₂O, así como metano residual y pequeñas cantidades de monóxido de carbono y nitrógeno. Para obtener como producto hidrógeno azul, el gas de síntesis ingresa a la unidad de absorción con aminas, MDEA, que procede con la captura del CO₂ en el proceso.

Además, la separación del CO₂ es obligatoria debido a los requisitos de procesamiento posterior. La eliminación de la humedad y de otros contaminantes se realiza en la unidad PSA.

Ambos procesos de separación requieren de un modelo complejo propio para su representación adecuada y completa, que no se encuentra dentro de los límites del presente trabajo de investigación.

Dado que el proyecto se centra en la composición del gas y en el funcionamiento interno de los pasos del proceso SMR, estos pasos de separación se han representado como procesos de separación simples, establecidos para alcanzar los objetivos de rendimiento del diseño. El modelo simplificado se representa en la Figura 2.5. Así mismo, los parámetros de funcionamiento se enumeran en la Tabla 2.5.

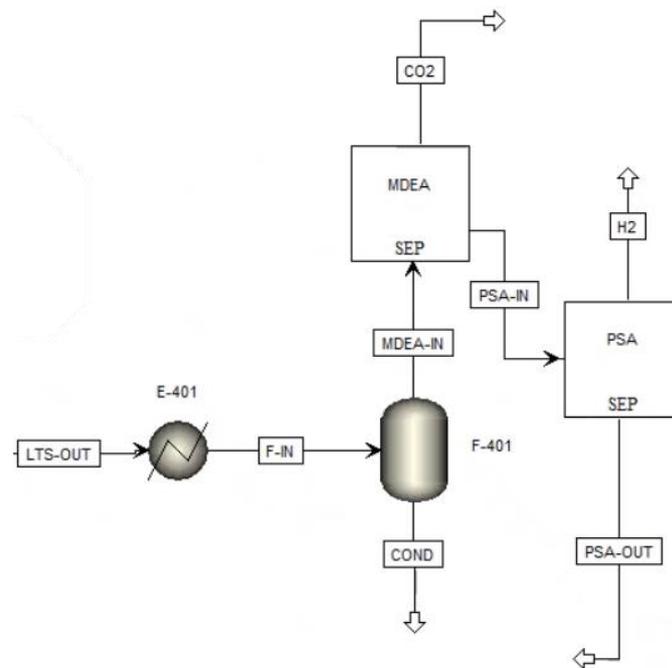


Figura 2.5 Diagrama de flujo de la simulación para etapa de separación
[Elaboración propia]

Tabla 2.5 Condiciones de operación para unidades de separación [Elaboración propia]

Parámetros de operación para etapa de separación		
Elemento	Parámetro	Valor
E-401	Temperatura (F)	200
	Presión (psia)	239
MDEA	Temperatura (F)	100
	Presión (psia)	203
	Recuperación CO ₂ (%)	95
PSA	Temperatura (F)	415
	Presión (psia)	246
	Recuperación H ₂ (%)	99.5
F-401	Temperatura (F)	100
	Presión (psia)	234

Finalmente, la Figura 2.6 muestra el diagrama de flujo completo del proceso de reformado de gas natural con vapor, desarrollado en Aspen Plus para el presente trabajo.

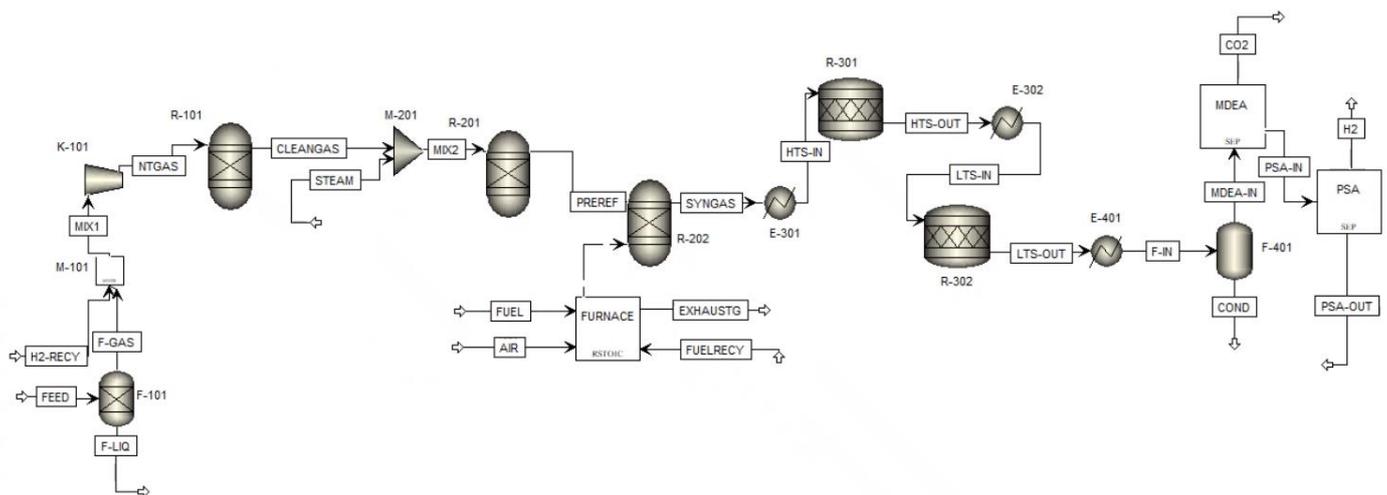


Figura 2.6 Diagrama de flujo de la simulación del proceso de reformado de gas natural con vapor [Elaboración propia]

2.4 Dimensionamiento de equipos

Para dimensionar los equipos principales pertenecientes al proceso SMR se utilizó el balance de materia proporcionado por el simulador; puesto que, cada etapa del proceso maneja condiciones de operación distintas. Por lo tanto, se necesita conocer dicha información con el fin de obtener las variables de diseño de cada unidad. La Tabla 2.6 muestra la lista de equipos principales a dimensionar.

Tabla 2.6 Lista de Equipos [Elaboración propia]

Tipo de equipo	Etiqueta	Descripción
Reactor de desulfuración	R-101	Remueve azufre de la alimentación.
Condensador I	F-101	Separación de líquidos de la alimentación.
Compresor	K-101	Compresión del gas natural.
Reactor de pre-reformado	R-201	Desdoblamiento de cadenas largas hidrocarburos.
Reactor de reformado	R-202	Conversión de gas natural y agua a gas de síntesis.
Intercambiador de calor I	E-301	Enfriamiento de la alimentación a reactor HTS.
Reactor de conversión de alta	R-301	Conversión de monóxido de carbono a alta temperatura.
Intercambiador de calor II	E-302	Enfriamiento de la alimentación a reactor LTS.
Reactor de conversión de baja	R-302	Conversión de monóxido de carbono a baja temperatura.
Intercambiador de calor III	E-401	Enfriamiento de la alimentación al condensador II.
Condensador II	F-401	Separación de agua sin reaccionar.
Absorción de CO ₂	C-401	Separación de Dióxido de carbono.
Unidad PSA	C-402	Purificación de Hidrógeno

Las variables de diseño de equipos auxiliares como; bombas, compresores, separadores e intercambiadores de calor, se las obtuvo con el mismo software de diseño. El programa es capaz de dimensionar las unidades en mención, haciendo uso de las condiciones de operación y flujos dados por la simulación del proceso.

En las etapas de reformado y conversión de monóxido de carbono, el reformador y los reactores de conversión son los principales equipos de transformación química; cuyo objetivo de diseño es alcanzar las temperaturas de operación para lograr la mayor conversión posible, utilizando la menor cantidad de combustible y vapor de agua para cada etapa. Por lo tanto, se utilizaron heurísticas de diseño para todos los reactores del proceso basadas en el libro de (Fogler, 2019).

No obstante, toda la información brindada por dichos autores se la corroboró con datos reales de diseño de una planta de reformado con vapor de agua existente, licenciada por Haldor Topsoe. La cual posee las condiciones de operación y flujos similares al diseño conceptual propuesto en este trabajo. (Salazar & Chanchanya, 2020)

2.5 Análisis económico

En el presente trabajo los costos directos totales de; capital, operación, materia prima, utilitarios, equipos, entre otros, del proceso de reformado de metano con vapor fueron calculados utilizando Aspen Process Economic Analyzer (APEA), la cual es una herramienta integrada en el simulador de procesos Aspen Plus. El costo directo total en dólares fue obtenido mediante la suma de los costos de materiales y mano de obra asociados a los componentes o unidades que conforman del proyecto, incluyendo costos de instalación.

Los costos de utilitarios, para este caso agua y electricidad, desempeñan un papel importante en la determinación del costo total del proyecto. Los gastos de enfriamiento y calentamiento calculados en Aspen Plus para cada unidad del proceso proporcionan una base de cálculo para el costo de los servicios utilitarios.

El costo de operación fue calculado en base a la cantidad de gas natural usado como materia prima y combustible para los quemadores del proceso, el cual posee un costo de adquisición que depende del precio internacional de dicho compuesto. Para el actual proyecto, el costo de gas natural fue de 0.0569 \$/cuft, valor tomado de (Kosulj, 2004).

Considerando los costos de equipos, el software usado calcula el precio en base a las condiciones de operación y diseño arrojadas por la simulación, excepto para los reactores. Dado que, para dichas unidades se ingresaron variables de dimensionamiento como diámetro y altura con el fin de que el software calcule los costos. Se consideraron todos los equipos en su forma más simple usando acero al carbono como material de construcción.

Tanto la unidad PSA como la de absorción de dióxido de carbono con monoetanolamina o MDEA en la simulación se las consideró como un bloque de separación.

Sin embargo, para aproximar los costos reales de los equipos correspondientes a dichas sub-etapas del proceso se basó en el trabajo publicado por (Gangadharan et al., 2012). En el cual mencionan el costo de una unidad PSA para la obtención de hidrógeno vía reformado con vapor, la cual, posee una capacidad a procesar similar a la descrita en la actual propuesta de diseño.

En cambio, para el proceso de absorción del dióxido de carbono se tomó como referencia el costo de una planta de captura de CO₂ generado por una termoeléctrica que utiliza aminas como absorbentes (Gómez, 2018). En el estudio en mención se utilizó un factor de Lang de 5.7, correspondiente a procesos gaseosos. Todo esto, con el fin de estimar la inversión total de dicha sub-etapa para el diseño conceptual propuesto en este trabajo.

Para realizar el estudio de la viabilidad económica del diseño conceptual propuesto, fue necesario el cálculo del costo total de inversión, y los ingresos resultantes de la venta de producto, además, de los costos de instalación, operación y equipos. Sin embargo, con ayuda del software de diseño se calcularon tres factores importantes para determinar la viabilidad económica, los cuales son; Valor Actual Neto (VAN), Tasa Interna de Rentabilidad (TIR) y el Tiempo de Retorno de Inversión.

En el VAN el software asume un valor de tasa de actualización del dinero del 5%, el VAN debe ser positivo para que el diseño propuesto supere la rentabilidad deseada y si fuera igual a cero, no habría ganancia ni pérdida. La TIR se la obtiene a partir del VAN, y dicho valor expresa la rentabilidad máxima que se exige para que el diseño conceptual sea económicamente rentable. El Tiempo de Retorno es el plazo en el que se recupera toda la inversión inicial hecha en el proyecto propuesto, y el mismo será válido si dicho valor no es excesivo. Para obtenerlo se encuentra el momento en el que el flujo de caja acumulado resulta en un valor igual a cero, es decir, cuando se recupera la inversión totalmente.

2.6 Análisis de impacto ambiental

El impacto ambiental del proceso SMR propuesto fue evaluado mediante el uso de una herramienta de Análisis de Ciclo de Vida (ACV), para la medición de un indicador de afectación al ambiente conocido como Huella de Carbono (HC). El ACV permite correlacionar un amplio conjunto de datos relativos al ciclo de vida de un proceso con el fin de identificar las fases que son críticas desde el punto de vista medioambiental.

Las corrientes de entrada y salida del proceso fueron cuantificadas a través de los balances de masa y energía que se obtuvieron por medio de Aspen Plus, para cada una de las etapas. Así mismo, se procedió a cuantificar el uso de recursos y materiales, el consumo de electricidad y de combustibles de la planta. Todas las emisiones de GEI resultantes a la atmósfera, al agua y al suelo fueron reportadas por cada kg de hidrógeno azul producido.

Los resultados numéricos obtenidos al sintetizar los balances de masa y energía se recogen en un inventario de entradas y salidas que presenta el software OpenLCA al momento de definir un proceso. La elaboración del inventario involucra la adición de cada uno de los compuestos presentes en las corrientes de entrada y salida, los cuales se extraen de la base de datos ecoinvent 3.3 que es perteneciente al software. Este programa es gratuito y de código abierto para la modelización de sistemas de ciclo de vida y es capaz de calcular y proporcionar indicadores ambientales, sociales y económicos de cualquier sistema.

El método IPCC 2013, definido en el software OpenLCA, se utilizó para la evaluación del impacto ambiental a fin de obtener un valor para la HC. Este resultado se presenta como Climate Change - GWP 100a y se reporta en unidades de kg de CO₂eq. Este método establece marcos globales estandarizados para medir y gestionar las emisiones de gases de efecto invernadero.

CAPÍTULO 3

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1 Diseño conceptual del proceso

Los resultados del balance de materia de la simulación se presentan en las Tablas 3.1.1., 3.1.2, 3.1.3 y 3.1.4 El análisis de los resultados del diseño conceptual toma en consideración las corrientes principales.

Tabla 3.1.1 Balance de materia de todas las corrientes [Elaboración Propia]

	FEED	F-GAS	F-LIQ	H2-RECY	MIX1	NTGAS
Temperatura (F)	70.00	70.00	70.00	100.00	74.37	139.22
Presión (psia)	290.00	290.00	290.00	290.00	290.00	410.00
Flujo másico (lb/h)	28901.01	28752.66	148.35	1574.40	30327.06	30327.06
CH ₄	25729.54	25729.54	0.00	0.00	25729.54	25729.54
C ₃ H ₈	149.05	149.05	0.00	0.00	149.05	149.05
C ₂ H ₆	1016.35	1016.35	0.00	0.00	1016.35	1016.35
H ₂ O	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H ₂	0.00	0.00	0.00	1574.40	1574.40	1574.40
O ₂	10.82	10.82	0.00	0.00	10.82	10.82
N ₂	710.14	710.14	0.00	0.00	710.14	710.14
CO	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO ₂	520.64	520.64	0.00	0.00	520.64	520.64
CH ₃ OH	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₄ H ₁₀	294.69	294.69	0.00	0.00	294.69	294.69
C ₄ H ₁₀	294.69	294.69	0.00	0.00	294.69	294.69
C ₅ H ₁₂	12.19	12.19	0.00	0.00	12.19	12.19
C ₆ H ₁₄	14.56	14.56	0.00	0.00	14.56	14.56
C ₈ H ₁₈ S	148.35	0.00	148.35	0.00	0.00	0.00

Se logra observar que la corriente “FEED”, correspondiente a la materia prima del proceso, ingresa virtualmente libre de hidrógeno. El contenido del mismo aumenta luego de salir del reactor de desulfurado “R-101”, reflejando la adición del 4.5% (1330 lb/h) de la recirculación de hidrógeno en comparación al flujo másico de la alimentación (28901 lb/h), acorde a la especificación de diseño. Con el fin de hidrogenar todos los compuestos azufrados que ingresarán al reactor “R-101”, para luego ser removidos en lecho de óxido de zinc que contiene el reactor.

Tabla 3.1.2 Balance de materia de todas las corrientes [Elaboración Propia]

	CLEANGAS	STEAM	PREREF	SYNGAS	FUEL	FUELRECY
Temperatura (F)	737.00	950.00	814.00	1741.54	350.00	100.00
Presión (psia)	405.00	436.00	375.00	350.00	14.50	15.00
Flujo másico (lb/h)	30327.06	90076.40	120403.46	120403.46	7152.69	7013.19
CH ₄	27846.66	0.00	27364.53	1842.18	6394.32	1835.43
C ₃ H ₈	0.00	0.00	0.00	0.00	37.04	0.00
C ₂ H ₆	0.56	0.00	0.32	0.06	252.58	0.06
H ₂ O	438.42	90076.40	89442.39	53779.86	0.00	589.26
H ₂	1331.52	0.00	1572.64	11977.42	0.00	0.00
O ₂	0.00	0.00	0.00	0.00	2.69	0.00
N ₂	710.14	0.00	710.14	710.14	183.54	710.14
CO	0.00	0.00	15.25	33691.76	0.00	337.09
CO ₂	0.00	0.00	1297.95	18402.01	129.39	3541.20
CH ₃ OH	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01
C ₄ H ₁₀	0.00	0.00	0.00	0.00	73.24	0.00
C ₄ H ₁₀	0.00	0.00	0.00	0.00	73.24	0.00
C ₅ H ₁₂	0.00	0.00	0.00	0.00	3.03	0.00
C ₆ H ₁₄	0.00	0.00	0.00	0.00	3.62	0.00
C ₈ H ₁₈ S	0.00	0.00	0.00	0.00	7152.69	7013.19

Tabla 3.1.3 Balance de materia de todas las corrientes [Elaboración Propia]

	HTS-IN	HTS-OUT	LTS-IN	LTS-OUT	F-IN	COND
Temperatura (F)	662.00	791.00	400.00	413.00	200.00	100.00
Presión (psia)	275.57	325.00	261.07	300.00	239.31	234.00
Flujo másico (lb/h)	120403.46	120403.46	120403.46	120403.46	120403.46	31741.34
CH ₄	1842.18	1842.18	1842.18	1842.18	1842.18	0.01
C ₃ H ₈	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₆	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.00
H ₂ O	53779.86	34277.47	34277.47	32327.23	32327.23	31738.08
H ₂	11977.42	14159.71	14159.71	14377.93	14377.93	0.01
O ₂	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
N ₂	710.14	710.14	710.14	710.14	710.14	0.00
CO	33691.76	3369.18	3369.18	336.92	336.92	0.00
CO ₂	18402.01	66044.70	66044.70	70808.97	70808.97	3.22
CH ₃ OH	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01
C ₄ H ₁₀	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₄ H ₁₀	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₅ H ₁₂	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₆ H ₁₄	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₈ H ₁₈ S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Tabla 3.1.4 Balance de materia de todas las corrientes [Elaboración Propia]

	MDEA-IN	CO2	PSA-IN	PSA-OUT	H2	EXHAUSTG
Temperatura (F)	100.00	100.00	100.00	100.00	415.00	80.00
Presión (psia)	234.00	203.00	203.00	15.00	246.56	15.00
Flujo másico (lb/h)	88662.13	67265.46	21396.66	7090.63	14306.03	431270.56
CH₄	1842.17	0.00	1842.17	1842.17	0.00	0.00
C₃H₈	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	37.04
C₂H₆	0.06	0.00	0.06	0.06	0.00	252.65
H₂O	589.15	0.00	589.15	589.15	0.00	19072.52
H₂	14377.92	0.00	14377.92	71.89	14306.03	0.00
O₂	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	54764.64
N₂	710.14	0.00	710.14	710.14	0.00	330406.39
CO	336.92	0.00	336.92	336.92	0.00	337.09
CO₂	70805.75	67265.46	3540.29	3540.29	0.00	26247.11
CH₃OH	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
C₄H₁₀	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	73.24
C₄H₁₀	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	73.24
C₅H₁₂	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.03
C₆H₁₄	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.62
C₈H₁₈S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	431270.56

El reactor “R-101” también convierte los hidrocarburos de cadena larga a metano, como se puede observar en la corriente “CLEANGAS” en la tabla 3.2. Aunque, dicha conversión se la esperaba en el reactor de pre-reformado “R-201” pero ocurre en ambos reactores puesto que los dos están simulados para alcanzar el equilibrio químico.

La corriente “PREREF” mostró una reducción adicional de los hidrocarburos de larga cadena aun presentes en el medio, así como, un poco de reformado del metano. Se observa un incremento en el flujo de agua en estado gaseoso debido al ingreso al reactor “R-201” de dicho compuesto a una temperatura elevada de 800 F. Tales corrientes entran al reactor de reformado “R-202”, donde ocurre la reacción principal del proceso, como se observa en la composición de la corriente “SYNGAS” se logró un reformado del metano a una temperatura de 1741 F, la mayor temperatura existente en reactor primario de reformado.

Dadas las condiciones de operación utilizadas, se ha logrado convertir aproximadamente el 90% del metano. Sin embargo, en la actualidad las plantas más modernas de reformado han logrado un rendimiento entre el 80% al 85% para este tipo de reacciones, por lo cual el diseño conceptual propuesto brinda un escenario ideal. Como consecuencia del alto rendimiento de reacción mostrado, es evidente la formación de una cantidad significativa de monóxido de carbono.

La reducción del monóxido de carbono en el reactor de conversión a alta temperatura "R-301" es del 90%, como se observa al comparar los flujos másicos de dicho compuesto en las corrientes "SYNGAS" y "HTS-OUT". Lo que coincide con la especificación en el reactor tipo "RSTOIC" utilizado para representar la conversión del monóxido de carbono. El aumento en los flujos másicos del hidrógeno y el dióxido de carbono observados en la corriente "HTS-OUT" corresponden con la reducción del monóxido de carbono.

Para el reactor "R-302" se alcanzó una reducción adicional del monóxido de carbono residual proveniente del reactor "R-301", aumentando un poco más los flujos másicos del hidrógeno y el dióxido de carbono. La corriente "LTS-OUT" es ingresada a un condensador, donde se extrae la mayor cantidad de vapor de agua usada en el proceso. Tal corriente ingresa a la unidad "MDEA", la cual se simuló como un bloque de separación, en el cual se extrae un 95% del dióxido de carbono generado en las etapas anteriores, como se aprecia en la corriente "CO2". Dicha sección correspondería a la captura del dióxido de carbono mediante una columna de absorción con aminas.

El 99% del hidrógeno que ingresa a la unidad "PSA", la cual fue simulada como un bloque de separación, se recupera como producto. El porcentaje de separación se reduce a medida que se recupera hidrógeno de elevada pureza, la alta presión de la corriente "H2" y la baja presión de la corriente "PSA-OUT" refleja la naturaleza de la operación de una unidad "PSA".

La corriente “PSA-OUT” contiene residuos de metano, monóxido de carbono, dióxido de carbono y otros gases que no reaccionaron. Tal corriente se recircula hacia los quemadores del reformador primario “R-202”, con el objetivo de usarse como combustible en la generación del calor necesario para la reacción principal. Analizando las temperaturas de operación del proceso, a mayor temperatura se favorece a la reacción de reformado, dado que tal reacción es altamente endotérmica, se necesita una gran cantidad de energía para activarla junto con el catalizador apropiado. La reacción logra el equilibrio químico entre los 1472-1832 F (Basile et al., 2015). En el diseño conceptual propuesto se trabajó cerca del límite superior de tal rango con 1741 F, lo que permitió obtener una capacidad de producción deseada de 14300 lb/h de hidrógeno gaseoso.

3.2 Dimensionamiento de equipos y análisis económico

En cuanto al dimensionamiento de equipos, el software de diseño junto con las condiciones de operación y flujos resultantes calculó las variables dimensionamiento necesarias para los equipos auxiliares como; separadores, intercambiadores de calor, entre otros con el fin de ajustarlos a los requerimientos del proceso. Sin embargo, los valores de dimensionamiento de los reactores se determinaron a partir de heurísticas (Fogler, 2019) y se verificaron con ayuda de (Salazar & Chanchanya, 2020).

Tabla 3.2 Dimensionamiento de equipos [Elaboración Propia]

Equipo	Diámetro (ft)	Altura (ft)
F-101	3	12
R-101	4.76	19.7
R-201	6.52	8.10
R-202	27.5	58.1
R-301	8.53	14.1
R-302	8.53	14.1
F-401	4.5	12

En el estudio mencionado, todos los equipos que proponen son de una planta de reformado con una capacidad de producción de 14700 lb/h, la cual es similar a la capacidad propuesta en el actual trabajo. Las Tablas 3.2 y 3.3 muestran las variables de dimensionamiento a considerar. Los valores de diámetro y altura del reactor de reformado “R-201” son elevados en comparación a los demás reactores. Debido a que, en el mismo se considera al horno como quemadores que proveerán todo el calor necesario para producir vapor de agua y alcanzar las altas temperaturas del proceso.

Para los convertidores de monóxido de carbono, se corroboraron los datos de dimensionamiento con heurísticas de diseño que corresponden a la variable espacio-tiempo típica en las industrias dado por (Fogler, 2019). Con la cual, se calculó el volumen, diámetro y altura de los reactores dando como resultado un valor similar al indicado en la Tabla 3.2.

Tabla 3.3 Dimensionamiento de intercambiadores de calor [Elaboración Propia]

Equipo	Área de transferencia (sqft)	Temperatura de diseño (F)
E-301	492.48	1700
E-301	894.06	841
E-301	940.07	461

La madurez de la tecnología de este tipo de plantas se encuentra en nivel 9. Lo que significa que tal vía de producción de hidrógeno se viene desarrollando, mejorando e innovando desde décadas atrás, y los equipos que integran el proceso se encuentran disponibles para la sociedad. De manera que, existen gran variedad de proveedores licenciantes de tal tecnología. Por tal motivo, la lista de equipos que se utilizó como referencia de diseño pertenece a un licenciante con larga trayectoria de experiencia en el proceso. Además, de que la misma se encuentra testeada y está puesta en marcha.

Por ciertas limitaciones software de diseño la unidad PSA y MDEA se las simuló como un bloque de separación. Sin embargo, para el análisis económico que se muestra en las siguientes tablas, el costo total de los equipos pertenecientes a estas sub-etapas del proceso fueron aproximados. En base a otros estudios realizados de reformado con captura de dióxido de carbono a base de aminas, en la cual se tiene cierta similitud en la capacidad de producción de hidrógeno, con el fin de resultar en un valor de inversión total más cercano a la realidad.

Tabla 3.4 Costos resultantes [Elaboración Propia]

Tipo de costo	Valor
Costos de capital (USD)	\$ 48,278,300.00
Costos de operación (USD/año)	\$ 22,373,200.00
Costos de materia prima (USD/año)	\$ 16,520,700.00
Ingresos totales (USD/año)	\$ 57,441,600.00
Costo de utilitarios (USD/año)	\$ 1,656,950.00
Tasa de rendimiento deseada (%/año)	20.00
Tiempo de retorno (año)	4.12
Costo de equipos (USD)	\$ 9,874,300.00
Costo de instalación (USD)	\$ 20,623,100.00
Tasa Interna de rentabilidad (%)	34.87
Valor Actual Neto (USD)	\$ 83,590,900.00

Como se puede observar en la tabla 3.4 y 3.5 se detallan los costos totales directos, en los que se considera gastos de operación, materia prima, equipos, utilitarios e instalación, así como los ingresos totales, tiempo de retorno de la inversión y tasa interna de rentabilidad en un tiempo de vida de 20 años con una tasa de rendimiento deseada del 20% por año. Los costos de equipos resultantes se los obtuvieron acorde a las variables de dimensionamiento especificadas en el software junto con las condiciones de operación, utilizando acero al carbono como material base.

Tabla 3.5 Costos por equipos [Elaboración Propia]

Equipo	Costos	Costos de instalación
F-101	\$ 19,500.00	\$ 96,900.00
K-101	\$ 981,600.00	\$ 1,143,000.00
R-101	\$ 162,000.00	\$ 332,100.00
R-201	\$ 127,800.00	\$ 296,800.00
R-202	\$ 1,142,800.00	\$ 1,778,400.00
R-301	\$ 239,900.00	\$ 440,600.00
R-302	\$ 239,900.00	\$ 440,600.00
E-301	\$ 72,800.00	\$ 290,200.00
E-302	\$ 37,100.00	\$ 194,700.00
F-401	\$ 28,900.00	\$ 132,500.00
MDEA	\$ 5,964,000.00	\$ 13,660,200.00
PSA	\$ 827,800.00	\$ 1,700,300.00
E-401	\$ 30,200.00	\$ 116,800.00

Normalmente, los costos de capital de una planta de reformado con una capacidad de producción de 23700 lb/h resultan en un valor de 19 millones de dólares, según se detalla en (Gangadharan & Kanchi, 2012). Sin embargo, en tal estudio no se considera el precio de una unidad de captura de dióxido de carbono.

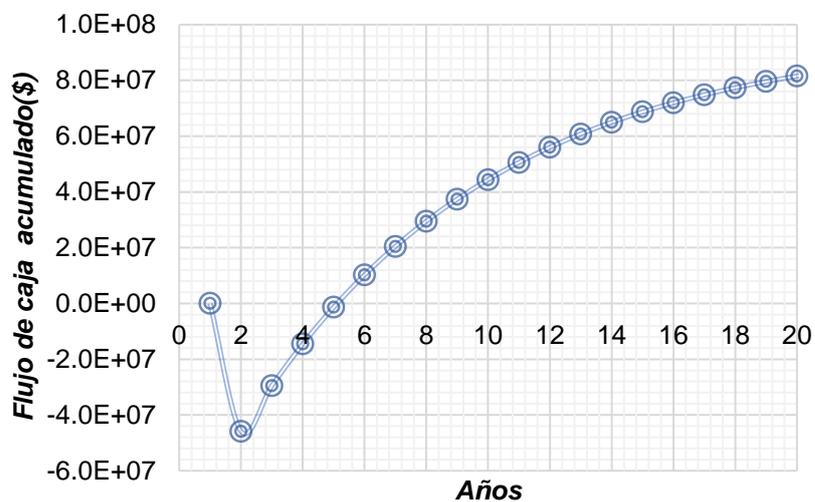
Por tal motivo, en el presente diseño el costo de capital aumenta, puesto que se requiere una unidad de amina adicional para separar el dióxido de carbono. En general, tal unidad es la que más contribuye al coste total del proyecto, a pesar de la aproximación hecha del costo de una unidad PSA no considerada como un simple separador.

Se obtuvo una elevada cantidad de 57 millones de dólares en ingresos por año, y esto es debido a la comparación de los costos presentados en la tabla 3.6, donde el gas natural como materia prima posee un valor de 0.0598 \$/cuft y el precio del hidrogeno es de 1.01 \$/kg, siendo tal cantidad el valor más bajo registrado dado que en promedio esta entre 1.50 a 1.60 \$/kg para hidrógeno proveniente del gas natural.

Tabla 3.6 Costos de materia prima, producto y utilitarios [Elaboración Propia]

Material	Costos
Gas Natural	0.0598 \$/cuft
Agua	0.020 \$/cuft
Electricidad	0.105 \$/kWh
Hidrógeno	1.01 \$/kg

Figura 3.1 Flujo de caja [Elaboración Propia]



El Valor Actual Neto presenta un valor positivo de 84 millones de dólares al finalizar los 20 años de vida de la planta con una tasa interna de rentabilidad del 34.8 %, valor superior al deseado, lo que indica que es rentable.

Finalmente, el flujo de caja resultante en la Figura 3.1, nos permite observar que el tiempo de retorno de la inversión es a partir del cuarto año de puesta en marcha de la planta y lo que resta del tiempo de vida es ganancia neta, por lo tanto, es económicamente viable.

3.3 Análisis de impacto ambiental

En el presente proyecto, los resultados de los balances de materia y energía que se obtienen en la simulación de Aspen Plus fueron importados al inventario del software OpenLCA para determinar el potencial de calentamiento global como indicador del impacto ambiental del proceso SMR.

Tabla 3.7 Inventario de materiales [Elaboración Propia]

Inventario	Unidades	Valor
Entradas		
CH ₄	lb/h	25729.54
C ₃ H ₈	lb/h	149.05
C ₂ H ₆	lb/h	1016.35
H ₂	lb/h	1574.40
O ₂	lb/h	10.82
N ₂	lb/h	710.14
CO ₂	lb/h	520.64
C ₄ H ₁₀	lb/h	294.69
C ₄ H ₁₀	lb/h	294.69
C ₅ H ₁₂	lb/h	12.19
C ₆ H ₁₄	lb/h	14.56
C ₈ H ₁₈ S	lb/h	148.35
Aire	lb/h	431487.59
Combustible	lb/h	7152.69
Vapor de agua	lb/h	90076.40
Calor	MJ/h	17313.56
Salidas		
H ₂	lb/h	14306.03
CH ₄	lb/h	1842.17
C ₂ H ₆	lb/h	0.06
N ₂	lb/h	710.14
CO	lb/h	336.92
CO ₂	lb/h	3540.29

El consumo de combustible, el calor global y el inventario de materiales para el proceso de producción de hidrógeno se resumen en la Tabla 3.7, resultados que se ingresaron en el software para el cálculo de la HC. Es importante mencionar que, la elaboración del inventario se considera para las fronteras del diagrama de flujo diseñado para este trabajo. Además, la cantidad de CO₂ registrada en el inventario no incluye a la corriente de salida de la unidad MDEA porque el producto de dicha corriente se captura para posterior tratamiento.

Una vez definido el inventario, se procede con la aplicación del método IPCC 2013 para la evaluación del impacto ambiental. El valor de HC, para el proceso SMR, es de 2.48 kg de CO₂eq y se identifica como Climate Change - GWP 100a en el software. Como era de esperar, debido a la eficiencia relativamente alta del proceso SMR, tiene un bajo valor de potencial de calentamiento global, especialmente debido al sistema de captura de carbono añadido. A medida que el resultado del indicador de HC es menor, de igual manera será bajo el impacto ambiental asociado al sistema en estudio. La HC medida, garantiza que el diseño minimiza en gran cantidad las emisiones de gases contaminantes y que el tipo de hidrógeno producido es azul.

El potencial de calentamiento global (GWP) obtenido representa una medida relativa de la cantidad de calor que los GEI atrapan en la atmósfera. El software determina el GWP comparando la cantidad de radiación infrarroja que una unidad de masa de una sustancia química puede absorber en 100 años con la que una unidad de dióxido de carbono puede absorber en el mismo periodo de tiempo. El resultado de HC se encuentra limitado porque en el programa sólo se ha tabulado los factores de equivalencia para unos pocos gases simples y una cantidad reducida de hidrocarburos halogenados. Finalmente, es importante mencionar que otro de los factores analizados fue que a medida que la conversión del metano era superior menor sería el valor de la HC. Motivo por el cual, es necesario recircular el metano a la salida de la unidad PSA hacia el horno. De manera que este sea aprovechado y las emisiones como tal del compuesto en mención sean mínimas.

CAPÍTULO 4

4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1 Conclusiones

Al culminar el presente trabajo se logró efectivamente un diseño conceptual del proceso de reformado de gas natural con vapor de agua capaz de producir 14300 lb/h de hidrógeno azul. Realizar diseños preliminares de plantas, con las respectivas condiciones de operación nos sirve como primer paso para el dimensionamiento de equipos, aproximación de la inversión total y para continuar con un diseño más profundo y detallado a futuro.

Para propósitos del actual caso de estudio, se simuló el proceso de reformado de metano con vapor utilizando ASPEN como software de diseño. En dicha etapa del diseño, los reactores están configurados de tal manera que lleguen idealmente al equilibrio químico dando un resultado un poco alejado de la realidad. Sin embargo, el caso mostrado en el diagrama del proceso es un caso convergente, pero algunos de los parámetros de funcionamiento no son consistentes con la práctica operativa conocida.

El proceso propuesto no incluye la red total de integración de calor, dado que se especificó directamente la temperatura de trabajo para los equipos y corrientes que necesitan de un calor constante. Una vez obtenida la simulación completa del proceso y junto con; los valores de dimensionamiento de los equipos principales, los costos de materia prima y producto se consiguió realizar un análisis económico, con el fin de determinar la viabilidad económica del diseño conceptual propuesto.

Se realizaron evaluaciones tecno-económicas del proceso de producción de hidrógeno a escala industrial en un tiempo de vida de 20 años, basado en tecnología ya probada, desarrollada y mejorada que corresponde al reformado de gas natural con vapor de agua. También se investigó el costo e impacto de la incorporación de las unidades PSA y la de captura de dióxido de carbono.

Como resultado del análisis económico, se obtuvo un valor actual neto de 84 millones de dólares, un tiempo de retorno de inversión de 4 años y una tasa de retorno de inversión de 34.8%, lo que indica que el proceso es económicamente viable. Tales valores resultan a partir de un costo de capital de 48 millones de dólares, valor cercano a este tipo de plantas con la capacidad propuesta, según la literatura investigada.

El costo escogido de la materia prima (0.0598 \$/cuft), gas natural para el caso de estudio corresponde a uno de los más altos de América del Sur, en cambio el costo de venta elegido del producto es uno de los más bajos registrados (1.01 \$/kg), ambos factores influyen en la viabilidad económica del diseño propuesto. Aunque los cálculos económicos muestran que el diseño propuesto es viable, en la realidad hay muchas variables que no se consideraron e influyen significativamente en los resultados obtenidos. Algunos de estos son; la integración térmica de estos complejos reactores de lecho fluido y lecho móvil, así como la durabilidad y la resistencia a la abrasión del catalizador de óxido metálico.

Son algunas de las incertidumbres técnicas que podrían afectar a la eficiencia energética y a la competitividad de costes de una planta a gran escala. Además, siguen existiendo problemas operativos relacionados con el cambio de lecho y la aglomeración de sólidos, que pueden reducir la reactividad de los catalizadores y, por tanto, provocar una conversión imperfecta del gas. Por lo tanto, todavía se necesitan más investigaciones y pruebas piloto para validar el rendimiento de este sistema para su funcionamiento industrial.

La captura de dióxido de carbono para la producción de hidrogeno azul es técnicamente factible y se practica comercialmente utilizando la absorción con aminas y la unidad PSA. Los sistemas PSA requieren poco capital, pero necesitan más energía cuando se requiere recircular el gas de cola hacia los quemadores. La viabilidad de la captura de carbono puede ser muy buena solución cuando dicho compuesto se lo licua para ser comercializado.

Además, el modelo completo serviría como base de un análisis de costos para la optimización económica de la planta. Esto es importante para los estudios que impliquen impuestos sobre emisiones de dióxido de carbono, variaciones en los costos de materia prima, producto y otros análisis en los que se vería afectado los costes de capital y operación.

En último lugar, fue posible determinar el análisis ambiental del proceso mediante la estimación de la huella de carbono que se genera a partir del mismo. El cálculo para el indicador de impacto ambiental se realizó con ayuda del software libre OpenLCA. Para la obtención del valor de HC fue necesario el registro de las entradas y salidas principales del proceso en un inventario de materiales. Las emisiones en kg de CO₂eq de GEI del diseño conceptual propuesto resultaron en un mínimo valor, indicando que el potencial de calentamiento global del proyecto es así mismo reducido. Lo que permite concluir que, el proceso SMR es viable en ambos aspectos: económico y ambiental.

A pesar de que el hidrógeno es generalmente considerado un producto limpio, no deja de ser importante reconocer que su producción si puede presentar consecuencias medioambientales. No obstante, el propósito de la inclusión de un sistema de captura de carbono es minimizar en su gran mayoría las emisiones de gases contaminantes y en efecto producir hidrógeno azul.

4.2 Recomendaciones

Una vez finalizado el proyecto, se lograron identificar ciertos aspectos de mejora que pueden dar lugar a futuras investigaciones y a su vez complementar el presente trabajo de diseño preliminar. Se sugiere la realización de un análisis de sensibilidad referente a la variación en los costos de las materias primas y productos, así mismo en la variabilidad de las condiciones de operación de los reactores principales. De tal forma que, sea posible proceder con la optimización del proceso para la obtención de resultados aún más favorables.

Adicional a esto, se recomienda la elaboración de un ACV completo del proceso. Lo cual resultaría en la cuantificación de las emisiones al aire, agua y suelo, y el uso de recursos y materias primas relacionadas al transporte, almacenaje y distribución de los productos de la planta SMR. El alcance de un ACV permite comprender a mayor detalle el impacto ambiental de un proceso.

Además, para futuros trabajos se recomienda la evaluación económica y de ciclo de vida de una planta SMR para producción de hidrógeno azul basada en biomasa en lugar de gas natural como combustible para el horno. La incorporación de materias primas renovables, como biomasa, podría ser útil para reducir aún más el consumo de recursos en el análisis de ciclo de vida y las emisiones de GEI de las plantas de producción de hidrógeno.

BIBLIOGRAFÍA

- Bakey, K. (2015). *The Production of Hydrogen Gas: Steam Methane Reforming*. <http://sites.psu.edu/kevinbakey/wp-content/uploads/sites/26382/2015/04/Process-Description.pdf>
- Basile, A., Liguori, S., & Iulianelli, A. (2015). Membrane reactors for methane steam reforming (MSR). In *Membrane Reactors for Energy Applications and Basic Chemical Production* (Issue 2). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/B978-1-78242-223-5.00002-9>
- Fogler, H. S. (2019). Elements of Chemical Reaction Engineering. In *Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences*.
- Gangadharan, P., Kanchi, K. C., & Lou, H. H. (2012). Evaluation of the economic and environmental impact of combining dry reforming with steam reforming of methane. *Chemical Engineering Research and Design*, 90(11), 1956–1968. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2012.04.008>
- Gómez, L. (2018). *Tópicos selectos de ciencias químicas*.
- Ihobe S.A. (2009). Análisis de ciclo de vida y huella de carbono. *Gobierno Vasco*, 1–53. http://www.comunidadism.es/wp-content/uploads/downloads/2012/10/PUB-2009-033-f-C-001_analisis-ACV-y-huella-de-carbonoV2CAST.pdf
- IRENA. (2019). Hydrogen: a Renewable Energy Perspective. In *Irena* (Issue September). <https://irena.org/publications/2019/Sep/Hydrogen-A-renewable-energy-perspective>
- Jaag, J., & Marrelli, L. (2004). SMRS1 hydrogen from steam methane reforming Related papers. *Hydrogen from Steam-Methane Reforming with CO2 Capture*.
- Khojasteh Salkuyeh, Y., Saville, B. A., & MacLean, H. L. (2017). Techno-economic analysis and life cycle assessment of hydrogen production from natural gas using current and emerging technologies. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(30), 18894–18909. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.05.219>

- Kosulj, R. (2004). La industria del gas natural en América del Sur: situación y posibilidades de la integración de mercados. In *Serie: Recursos naturales*. <http://repositorio.cepal.org/bitstream/handle/11362/6447/S2004084.pdf?sequence=1>
- Ministerio De Energía. (2019). Ministerio de Energía y Recursos Naturales no Renovables – Ecuador. *Ministerio de Energía y Recursos Naturales No Renovables – Ecuador*, 63. <https://www.rekursyenergia.gob.ec/%0Ahttps://www.rekursyenergia.gob.ec/proyecto-hidroelectrico-minas-san-francisco/%0Ahttp://www.rondaspetrolerasescuador.gob.ec/%0Ahttps://www.rekursyenergia.gob.ec/>
- Morante, J. R., Andreu, T., García, G., Guilera, J., Tarancón, A., & Torrell, M. (2020). *Hidrógeno, Vector energético de una economía descarbonizada*.
- Salazar, T., & Chanchanya, F. (2020). *Proyecto de modernización refinería Talara unidades auxiliares trabajos complementarios*. 1–2.
- Yan, Y., Thanganadar, D., Clough, P. T., Mukherjee, S., Patchigolla, K., Manovic, V., & Anthony, E. J. (2020). Process simulations of blue hydrogen production by upgraded sorption enhanced steam methane reforming (SE-SMR) processes. *Energy Conversion and Management*, 222(June), 113144. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113144>