

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
UNIDAD DE POSGRADO DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA



TESIS:
**“SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE
HIDRÓGENO POR REFORMADO CON VAPOR A
PARTIR DEL GAS NATURAL”**

**TESIS PARA OPTAR EL GRADO DE MAESTRO EN
INGENIERÍA QUÍMICA**

AUTORES:
BACH. JORGE MATAMOROS DE LA CRUZ
BACH. ALIPIO PACHECO LÓPEZ

CALLAO, 2019
PERÚ

DEDICATORIA

Dedicamos nuestro éxito a Dios por la vida, por darnos fuerzas para seguir adelante y no desmayar a pesar de los problemas a seguir luchando por nuestras metas.

A nuestros padres que siempre su espíritu nos acompaña a pesar sus partidas, que siempre nos han inculcado sabias enseñanzas en base de sacrificio para salir adelante, a ser perseverantes y ser personas de bien.

A nuestras madres, por darnos la vida y siempre están apoyándonos nuestros pensamientos vuelan hacia ella.

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Nacional del Callao y a la Facultad de Ingeniería Química por brindarnos, formarnos como profesionales y como personas.

A los Profesores de la Facultad de Ingeniería Química, por compartir sus conocimientos y consejos.

Al Personal Administrativo de la Facultad de Ingeniería Química.

ÍNDICE

CARATULA	
HOJA RESPETO	
HOJA DE REFERENCIA DEL JURADO Y APROBACIÓN	
DEDICATORIA	
AGRADECIMIENTO	
INICE DE CONTENIDO	1
ÍNDICE DE TABLAS	4
ÍNDICE DE FIGURAS.....	7
RESUMEN	9
ABSTRACT	10
INTRODUCCIÓN	11
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	15
1.1 Descripción de la realidad problemática.....	15
1.2 Formulación del problema (problema general y específicos)	16
1.2.1 Problema General.....	16
1.2.2 Problemas específicos.....	16
1.3 Objetivos (generales y específicos).....	16
1.4 Limitantes de la investigación (teórico, temporal, espacial).....	17
II. MARCO TEÓRICO	18
2.1 Antecedentes (internacional y nacional).....	18
2.2 Bases teóricas.....	22
2.3 Conceptual	35
2.4 Descripción del proceso de producción de hidrógeno	35
2.5 Definición de términos básicos	57

III. HIPÓTESIS Y VARIABLES	60
3.1 Hipótesis (general y específica, de ser el caso)	60
3.2 Definición conceptual de las variables.....	60
3.3 Operacionalización de variables (Dimensiones, indicadores, índices, método y técnica).....	61
IV. METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN.....	62
4.1 Tipo y diseño de la investigación.....	62
4.2 Método de investigación.....	62
4.3 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información	62
4.4 Análisis y procesamiento de datos	63
V. RESULTADOS	64
5.1 Resultados descriptivos.....	64
5.2 Resultados inferenciales	73
VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS	82
6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados	82
6.1.1 Contrastación de la primera hipótesis secundaria.....	82
6.1.2 Contrastación de la segunda hipótesis secundaria	85
6.2 Contrastación de los resultados con otros estudios similares	88
6.3 Responsabilidad ética de acuerdo a los reglamentos vigentes (el autor de la investigación se responsabiliza por la información emitida en la tesis)	89
CONCLUSIONES.....	90
RECOMENDACIONES.....	91
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	92

ANEXOS	96
ANEXO 1: MATRÍZ DE CONSISTENCIA	97
ANEXO 2: VIABILIDAD DEL PROYECTO	98
ANEXO 3: TABLA DE PROPIEDADES FISICOQUÍMICA DE LOS GASES	100
ANEXO 4: AGUA Y SUS PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS	108
ANEXO 5: HIDRÓGENO Y SUS PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS	110
ANEXO 6: PROPIEDADES DEL CATALIZADOR	112
ANEXO 7: DISEÑO Y COSTOS DE EQUIPOS	113

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Composición del gas natural	23
Tabla 2: Materiales y métodos	36
Tabla 3: Reacciones químicas	42
Tabla 4: Operacionalización de variables	61
Tabla 5: Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (1 al 4).....	64
Tabla 6: Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (5 al 8)	64
Tabla 7: Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (9 al 12).....	64
Tabla 8: Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (13 al 16)	65
Tabla 9: Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (17 al 20)	65
Tabla 10: Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (21 al 24)	65
Tabla 11: Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (25 al 28)	66
Tabla 12: Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (29 al 31)	66
Tabla 13: Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (1 al 4)	67
Tabla 14: Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (5 al 8)	67
Tabla 15: Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (9 al 12)	67
Tabla 16: Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (13 al 16)	68
Tabla 17: Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (17 al 20)	68
Tabla 18: Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (21 al 24)	68
Tabla 19: Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (25 al 28)	69
Tabla 20: Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (29 al 31)	69
Tabla 21: Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (1 al 4)	70
Tabla 22: Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (5 al 8)	70
Tabla 23: Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (9 al 12)	70

Tabla 24: Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (13 al 16)	71
Tabla 25: Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (17 al 20)	71
Tabla 26: Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (21 al 24)	71
Tabla 27: Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (25 al 28)	72
Tabla 28: Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (29 al 31)	72
Tabla 29: Entrada:	74
Tabla 30: Salida:	74
Tabla 31: Composición de corriente de salida en la alimentación del gas (equipo1)	76
Tabla 32: Composición de corriente de salida en la alimentación agua (corriente 8)	76
Tabla 33: Composición de corriente de salida de la bomba (corriente 10)	76
Tabla 34: Composición de corriente de salida en el separador (corriente 32)	76
Tabla 35: Composición de corriente de salida en el equipo de separador H ₂ S (corriente 6)	77
Tabla 36: Composición de corriente de salida en el equipo del mezclado (corriente 14)	77
Tabla 37: Composición de corriente de salida en el reactor reformador (corriente 15)	77
Tabla 38: Composición de corriente de salida en el reactor shift (corriente 17)	78
Tabla 39: Composición de corriente de salida en el separador (corriente 19)	78
Tabla 40: Composición de corriente de salida en el separador (corriente 37)	78

Tabla 41: Composición de corriente de salida en la torre separador 02 (corriente 22)	78
Tabla 42: Composición de corriente de salida en la torre separador 02 (corriente 13)	79
Tabla 43: Resultados de la producción de hidrogeno	89
Tabla 44: Datos finales de separación (adsortor)	90
Tabla 45: Metano	100
Tabla 46: Etano	101
Tabla 47: Propano	102
Tabla 48: Sulfuro de hidrogeno	103
Tabla 49: Monóxido de carbono	105
Tabla 50: Propiedades físico-químicas del dióxido de carbono	107
Tabla 51: Agua	109
Tabla 52: Hidrogeno	111
Tabla 53: Costo de intercambiador de calor, fuente: software chemcad.	116

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Tecnologías Tradicionales	30
Figura 2: Consumo de hidrógeno, Laborde y cols. (2006).	33
Figura 3 Diagrama planta de producción de hidrogeno a partir de metano, Taifouris,M (2015)	38
Figura 4: Diagrama de flujo obtenido durante la simulación del proceso en el simulador chemcad, Fuente: Elaboración propia.	43
Figura 5 Especificaciones generales en el reactor de equilibrio (EREA)	44
Figura 6 Datos de equilibrio (EREA) para la primera reacción.	45
Figura 7 Datos de equilibrio (EREA) para la segunda reacción.	46
Figura 8 Datos de equilibrio (EREA) para la tercera reacción.	47
Figura 9 Variables generales en el reactor de equilibrio (EREA)	48
Figura 10 Datos de equilibrio (EREA) para la cuarta reacción.	49
Figura 11: Diagrama de flujo obtenido durante la simulación del proceso en el simulador chemcad (Reactor de Gibbs)	50
Figura 12 Condiciones de operación en el reactor de energía libre de GIBBS	51
Figura 13 Componentes de operación en el reactor de energía libre de GIBBS	52
Figura 14 Especificaciones de operación en reactor de energía libre de GIBBS.	53
Figura 15 Componentes de operación en el reactor de energía libre de GIBBS	54
Figura 16: Diagrama de flujo obtenido durante la simulación del proceso en el simulador CHEMCAD (Reactor Estequiometrico)	55
Figura 17 Especificaciones generales en el reactor estequiométrico (REAC).	56
Figura 18 Especificaciones generales en el segundo reactor (REAC)	57

Figura 19	Análisis y procesamiento de datos: fuente elaboración propia.	63
Figura 20	Diagrama de modelo	73
Figura 21	Entrada y salida de proceso de producción de hidrógeno.	74
Figura 22	Diagrama de bloque del proceso de producción de hidrogeno, fuente: software chemcad	75
Figura 23:	En este caso cuando la presión disminuye la temperatura también disminuye por lo tanto la temperatura optima es de 272.75 K	79
Figura 24:	En la compresora se observa cuando la presión aumenta la temperatura aumenta. Fuente: software chemcad	80
Figura 25:	Temperatura: definitivamente a temperaturas mayores favorece el equilibrio de la reacción de izquierda a derecha y también la velocidad de reacción como se puede ver en la gráfica para el reactor de reformador.	80
Figura 26:	Presión vs flujos se observa disminución que a mayor presión disminuye el flujo	81
Figura 27:	Diagrama de costos de equipo de compresora, fuente: software chemcad.	113
Figura 28:	Diagrama de costos de equipo de bomba, fuente: software chemcad.	114
Figura 29:	Diagrama de intercambiador de calor, fuente: software chemcad.	115
Figura 30:	Diagrama de costo de intercambiador de calor, fuente: software chemcad.	115
Figura 31:	Costo de intercambiador de calor, fuente: software chemcad.	116

RESUMEN

El objetivo de este estudio es utilizar simuladores con software de ingeniería en el proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural y comparar con los resultados obtenidos. El diseño es no experimental longitudinal usando un simulador llamado CHEMCAD. La investigación utilizó la técnica de documentales para el desarrollo. Se pretende conocer la composición en masa de las diferentes corrientes involucradas en el proceso de producción de hidrógeno para el efecto se utilizaron los parámetros de diseño ya establecidos en cada proceso existente, se calcularon el caudal de los diferentes servicios auxiliares consumidos, vapor y agua de refrigeración, y evaluar gráficamente los procesos de transferencia de calor en los intercambiadores de calor. Se realizaron dos estudios de sensibilidad para saber qué valores deben aplicarse a las variables operativas clave de los equipos de dos procesos (reformador y reactor SHIFT). Esta evaluación de variables tuvo como objetivo maximizar la cantidad de producto final (hidrógeno). Los resultados obtenidos en la simulación permitieron caracterizar el proceso de producción desde el punto de vista técnico; y se puede utilizar asimismo para tomar las medidas necesarias y aumentar la rentabilidad, el rendimiento y la productividad del proceso; así como establecer los fundamentos requeridos para futuros estudios de optimización.

Los resultados con el uso de simuladores CHEMCAD con software de ingeniería en el proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural son similares a los obtenidos usando el proceso existente.

Palabras clave: simulación, análisis de sensibilidad, CHEMCAD, hidrógeno, rendimiento.

ABSTRACT

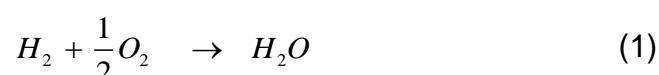
The objective of this study is to use simulators with engineering software in the process of hydrogen production by reforming with steam from natural gas and compare with the results obtained. The design is longitudinal non-experimental using a simulator called CHEMCAD. The research used the technique of documentaries for development. It is intended to know the mass composition of the different streams involved in the hydrogen production process. For this purpose, the design parameters already established in each existing process were used, the flow of the different auxiliary services consumed, steam and water were calculated. Refrigeration, and graphically evaluate the heat transfer processes in the heat exchangers. Two sensitivity studies were carried out to determine which values should be applied to the key operational variables of the two process equipment (reformer and reactor Shift). This evaluation of variables aimed to maximize the amount of final product (hydrogen). The results obtained in the simulation allowed us to characterize the production process from the technical point of view; and it can also be used to take the necessary measures and increase the profitability, yield and productivity of the process; as well as establishing the fundamentals required for future optimization studies.

The results with the use of CHEMCAD simulators with engineering software in the process of production of hydrogen by steam reforming from natural gas are similar to those obtained using the existing process.

Keywords: simulation, sensitivity analysis, CHEMCAD, hydrogen, yield.

INTRODUCCIÓN

El reformado de gas natural (NGR) es un sector clave en la industria química y petroquímica. Es la vía principal para la fabricación de hidrógeno y gas de síntesis. Estos productos tienen una amplia gama de aplicaciones: el hidrógeno se utiliza ampliamente en la refinería para operaciones de hidrotratamiento e hidrocraqueo que ayudan a producir combustibles más limpios; el gas de síntesis se utiliza en la producción de amoníaco, la producción de metanol y la producción de combustible en las plantas de gas a líquidos (GTL). La conciencia ambiental está causando un aumento tanto en la oferta como en la demanda del mercado de NGR. Por el lado del suministro, la quema de gas se está convirtiendo en una práctica obsoleta y el gas apretado se están convirtiendo en fuentes aceptables de gas natural ^[1] El hidrógeno no es una fuente primaria de energía ya que no se encuentra libre en la naturaleza y no es directamente aprovechable. Es un vector de energía verde, es decir, un portador de energía, el combustible del futuro por el hidrógeno está ganando interés y se está llevando a cabo una extensa investigación para buscar nuevas y competitivas técnicas para su producción. El hidrógeno puede verse como un portador de energía sostenible por, al menos, dos razones. El primero corresponde al modo de producción porque, entre muchos otros, puede obtenerse a partir de materias primas renovables como el agua, la biomasa o el biogás. El segundo se refiere a la naturaleza del combustible verde, porque cuando se quema u oxida, genera agua como el único subproducto; no se producen partículas, ni productos no quemados, ni emisiones de CO o CO₂. Su reacción de combustión se describe a continuación:

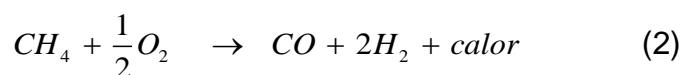


El hidrógeno no existe en estado libre en la naturaleza debido a su carácter altamente reactivo, por lo que debe producirse u obtenerse de otras fuentes de energía primarias. Sin embargo, a pesar de estar siempre combinado con otros elementos, es el elemento más abundante disponible en fuentes naturales

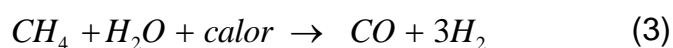
1 International Energy Agency, Gas Medium-Term Market Report, 2012.

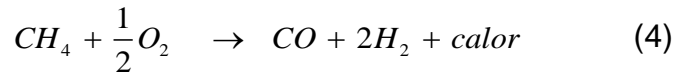
como hidrocarburos (no renovables), agua y biomasa. Que son las principales materias primas para la producción de hidrógeno, por lo tanto la producción de hidrogeno puede basarse en fuentes de energía primaria renovables o no renovables. Hoy en día aproximadamente el 96 % de hidrógeno se obtiene a partir de combustibles fósiles. El hidrógeno tiene una densidad energética en masa 3 veces superior a la de la gasolina; se utilizan diferentes métodos de producción según el proceso por reformado, algunos procesos industriales principales se enumeran aquí:

- a) La producción de hidrógeno reformado con vapor
 - b) La producción de hidrógeno reformado oxidación parcial
 - c) La producción de hidrógeno reformado autotérmico
 - d) La producción de hidrógeno reformado con plasma
- a. La producción de hidrógeno por reformado con vapor de gas natural es el método más económico y simple. debido a la baja inversión de capital, el 90% del hidrógeno mundial se produce mediante este método. la eficiencia de este proceso es de aproximadamente 65% a 75% y es un proceso ecológico porque el CO₂ producido en este proceso no se libera en el aire; se usa más en la planta de producción de urea.
- b. El proceso de oxidación parcial también requiere más inversión de capital que la reforma con vapor debido a que se necesita una planta separadora de aire, una mayor conversión de cambio, eliminación de CO₂ y limpieza de gas. requiere 95% a 99% de oxígeno puro, lo que aumenta la inversión de capital y el costo operativo.



- c. La producción de hidrógeno reformado autotérmico es una mezcla con reformado con vapor y la oxidación parcial. combina los procesos de reformado de vapor con la oxidación parcial. las reacciones son:





con el reformado auto térmico, se pretenden conseguir las ventajas de los dos procesos; es decir conseguir un proceso que no necesite fuente de energía externa, rapidez en el arranque y conseguir una buena conversión y mejorar el contenido del hidrogeno en el “singas”

- d. La producción de hidrógeno reformado con plasma, el plasma termal se caracteriza por alcanzar temperaturas de 3000-10000°C, y se puede utilizar para acelerar la cinética de las reacciones de reformado incluso sin utilizar un catalizador, el plasma es creado por un arco voltaico, la mezcla de los reactivos, por ejemplo, metano más vapor o combustible diésel más el aire y agua se introducen en el reactor y se forma el H₂ además de otros hidrocarburos en forma de sorbent, reforma mediante membranas de transporte de ion (ITM).

En Perú, el gas natural está disponible abundantemente a un precio más bajo, por lo que el proceso seleccionado para la producción de hidrógeno es la reforma del vapor de gas natural. El hidrógeno es una materia prima importante para las industrias química y petrolera. Participa en reacciones ya sea por adición (hidrogenación) o por medio de su potencial de reducción. El mayor uso de hidrógeno se encuentra en la producción de amoníaco. El hidrógeno también se usa en procesos de refinación de petróleo como procesos de hidrodeshulfuración y craqueo hidráulico. La producción de metanol requiere una gran cantidad de hidrógeno. Se usa una gran cantidad de hidrógeno en la hidrogenación catalítica de aceites vegetales.

CHEMCAD es capaz de modelar procesos continuos, por lotes y semicontinuos, y puede simular sistemas tanto estacionarios como dinámicos. Este programa se utiliza ampliamente en todo el mundo para el diseño, la operación y el mantenimiento de procesos químicos que mejora las capacidades de un ingeniero químico y aumenta la productividad del proceso en una amplia variedad de industrias, incluidas la exploración, producción y

refinación de petróleo y gas; procesamiento de gas; dentro de todas estas industrias, los ingenieros químicos trabajan todos los días con CHEMCAD para abordar una variedad de desafíos. es así que se aplica el CHEMCAD a la simulación del proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural en este trabajo de investigación.

I PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 Descripción de la realidad problemática

Impulsado por la escases y el agotamiento de los combustibles fósiles (no renovables), las emisiones de gases contaminantes procedentes de los motores de combustión, el aumento de la demanda mundial de energía.

Actualmente se hacen esfuerzos para utilizar fuentes de energías sostenibles y renovables, y desarrollar nuevas tecnologías para la producción de energía.

Entre ellas podemos mencionar la energía proveniente del hidrógeno y las pilas de combustible, se dan énfasis para la gestión de la energía.

El hidrógeno es analizado como combustible alternativo, creándose la economía del hidrógeno; como el hidrógeno no está en forma libre y ocupa un volumen muy grande comparado con otros combustibles, por tanto es un punto crítico; el objetivo de la presente investigación es simular la producción de hidrógeno a partir del gas natural, usando el Método de Reformado de Vapor para el uso de celdas de combustible y fertilizantes. Se propone un combustible del sistema térmico por gas natural con 95.80% de metano y 2.14% de etano, y otros 2.06%. Con el fin de reducir la energía destruida, se incluyen los procesos de recuperación de calor y se discuten sus beneficios. Se han realizado balances de masa y energía en el proceso de reformado con vapor, haciendo uso de un programa de simulación desarrollado para este propósito. Se presenta el diagrama de flujo másico, así como un diagrama de energía, que define los flujos de energía en el reformador en diferentes condiciones de operación.

1.2 Formulación del problema (problema general y específicos)

1.2.1 Problema general

¿Cómo debe ser la simulación del proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural?

1.2.2 Problemas específicos

- a) ¿Cuál es el resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural usando simulador con software de ingeniería y comparado respecto al método tradicional?
- b) ¿Cuál es el resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural respecto al método tradicional?

1.3 Objetivos (generales y específicos)

1.3.1 Objetivo General

Establecer un modelo para solucionar problemas que se presentan en proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural empleando software CHEMCAD.

1.3.2 Objetivos Específicos

- a) Conocer el resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural usando simuladores con software de ingeniería y comparando respecto al método tradicional.
- b) Conocer el resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural respecto al método tradicional.

1.4 Limitantes de la investigación (teórico, temporal, espacial)

- a. Disponer del software CHEMCAD original.
- b. Durante el uso del reactor de GIBBS, se supone que el catalizador actúa perfectamente porque ajusta la conversión por sí mismo de acuerdo con las concentraciones de los compuestos en el equilibrio.
- c. Corroborar experimentalmente en la planta.
- d. Muy endotérmico: aporte de energía.
- e. Relativamente muy lenta.

II MARCO TEÓRICO

A continuación, se cita investigaciones relacionadas con el presente trabajo, toda vez que se precisa de referentes para el desarrollo de la investigación del presente proyecto, como sigue:

2.1 Antecedentes (internacional y nacional)

2.1.2. Antecedentes Internacionales:

Motar R., Henley E. (2017) **CHEMSTATION Durante más de 20 años Chemstations y su software de simulación de procesos CHEMCAD**, afirma que en 1968 tuvo el origen del CHEMCAD, el cual fue creado, por el Dr. Rudy Motard y el Dr. Ernest Henley en la Universidad de Houston, con una subvención de la Marina de los EE.UU. Durante más de 20 años Chemstations y su software de simulación de procesos CHEMCAD han ido evolucionando con la industria. Creemos en el valor que aportan los Ingenieros Químicos en el mundo moderno y estamos a proveer herramientas que ayudan a avanzar en el campo de la ingeniería de procesos. Es un simulador de procesos químicos potente y flexible, construido en torno a tres valores fundamentales de la innovación, la integración y la arquitectura abierta. Estos valores crean ventajas importantes para los usuarios CHEMCAD: Las últimas técnicas de ingeniería química al alcance. Combina un estado de arte gráfica usando la interfaz del usuario (GUI), una amplia base de datos de componentes químicos, una gran biblioteca de datos termodinámicos, y una biblioteca de las operaciones unitarias más comunes para dar a los usuarios la capacidad de proporcionar rendimientos importantes y mensurables de su inversión. Adicionalmente, el programa permite anexar componentes químicos personalizados, modelos termodinámicos, operaciones unitarias, cálculos e información adicional. Es capaz de modelado continuo, por

lotes (Batch), y los procesos de Semi-batch, y se puede simular tanto los sistemas dinámicos de estado estacionario. Este programa se utiliza ampliamente en todo el mundo para el diseño, operación y mantenimiento de los procesos químicos en una amplia variedad de industrias, incluyendo la exploración de petróleo y gas, producción y refinación; procesamiento de gas; productos químicos básicos y de especialidad; productos farmacéuticos; biocombustibles; y la fabricación de equipos de proceso. Seleccionar un método termodinámico apropiado, introducir los datos de flujos de las corrientes de entrada, introducir los parámetros de diseño o evaluación de las operaciones unitarias o métodos de cálculo requeridos, hacer ajustes adicionales (usando controladores u otros artificios de simulación) y la parte más importante de la simulación: interpretar los resultados.

Hongfang M., Mingchuan Z., Weiyong Y., Dingye F. (2016) **Two-Dimensional Modeling of a Plant-scale Fixed-bed Reactor For Hydrogen Production From Metanol Steam Reforming**. De acuerdo con ellos, el metanol como portador de hidrógeno se puede reformar con vapor sobre catalizadores de CuO / ZnO / Al₂O₃. Se han llevado a cabo estudios de simulación numérica y simulación numérica pseudo homogénea para reactores de reformado con vapor de metanol que se integran con la cinética global de descomposición del metanol y reformado con vapor de metanol. La producción de hidrógeno y el comportamiento térmico se investigaron con respecto a parámetros como el caudal másico y la fracción de masa de entrada del metanol, la temperatura de entrada del aceite térmico externo y el diámetro del tubo. Se logró un buen acuerdo entre los datos de la planta y los datos simulados. Los resultados muestran que la distribución de la temperatura cambió más dramáticamente que la distribución de la concentración a lo largo de la axial. La producción de hidrógeno tuvo una relación positiva con el caudal másico de metanol y la temperatura de entrada del aceite

térmico. El comportamiento térmico a lo largo del radial puede verse muy afectado por todas las condiciones de operación discutidas.

Calderón Y., Hernández M. y otros (2014) **Simulación de la etapa de Reformación de Metano para la Producción de H₂ utilizando el Software HYSYS**, nos señalan en sus conclusiones, que mediante el SMS Hysys 3.2 se pueden alcanzar la descripción detallada del proceso operacional objeto de estudio con alto grado de eficiencia. A través del análisis de la producción de hidrógeno mediante la reformación catalítica auto térmica de metano contenido en un gas de síntesis se puede apreciar que mediante la combinación de un reactor Gibbs seguido de un reactor de flujo en pistón (RFP) es la alternativa de producción más eficiente en cuanto a la mayor producción existen una dependencia lineal entre la temperatura del vapor alimentado y la generación de hidrógeno; tanto así como que las variaciones en la presión del sistema no tendrán influencia significativa sobre la producción de hidrógeno, corroborando los conocimientos de la termodinámica del proceso.

Ullah I. (2011) **CHEMCAD como una herramienta en la enseñanza de Ingeniería Química**, enfatiza que el objetivo de este proyecto fue diseñar diferentes procesos químicos utilizando el software Chemcad. Se diseñaron y discutieron la producción de hidrógeno mediante el reformado con vapor de gas natural, la torre de absorción, Gibbs, los intercambiadores de calor, los condensadores, los separadores, las bombas, los compresores y los mezcladores están diseñados en un diagrama de hoja de flujo utilizando el software Chemcad. Los balances de masa y los balances de energía de los modelos de Chemcad se compararon con el trabajo de tesis de licenciatura y sus diferencias y similitudes se discutieron en detalle. En todos los procesos se obtuvieron resultados razonables. Principalmente en todos los casos los resultados son los mismos que en la tesis de licenciatura. Se observó que los reactores de equilibrio dan mejores resultados en comparación con los

reactores de Gibbs porque cuando no se conocía el factor de conversión de la reacción química, se usó el reactor de Gibbs y ajustó la conversión por sí misma de acuerdo con las concentraciones de equilibrio de los compuestos. El sistema de unidades SI se usó en los modelos Chemcad.

Sosa M., Silveria J., Alberto Fushimi A. (2004) **Reformado a Vapor de Gas Natural para la Obtención de Hidrógeno-Análisis Termo económico.**

Nos refieren en sus conclusiones de este trabajo de investigaciones anteriores del proceso de reforma a vapor de gas natural para la obtención de hidrógeno para alimentar a una celda de combustible, donde se ha realizado el análisis termodinámico y propuesto el sistema térmico para el reformador. Se realiza el análisis termodinámico del mismo, del cual pueden enunciarse las siguientes conclusiones: El análisis termo económico resulta adecuado para analizar la factibilidad del reformador propuesto. La implementación del reformador para alimentar a una celda del tipo PAFC de 200 kW es factible económicamente, si se seleccionan adecuadamente las condiciones operativas del reformador. El sistema para la generación de hidrógeno in situ para demandantes de hidrógeno para alimentar a una celda de combustible es una alternativa eficiente. A medida que aumenta el rendimiento del generador de vapor aumenta el ahorro de energía primaria y disminuye significativamente el precio de la generación de vapor. El uso de gas licuado de petróleo triplica el costo de generación respecto del gas natural con su incidencia no tan marcada en el precio de generación de hidrógeno. El costo de producción de hidrógeno por reforma a vapor es significativamente menor que el de generación vía electrolisis.

2.1.1. Antecedentes Nacionales:

Iparraguirre (2007). En su tesis titulada **“El hidrógeno a partir del gas natural uso en la industria alimenticia”** afirma que el hidrógeno está siendo llamado el combustible del futuro, por su disponibilidad y sus características de contaminación cero, haciéndolo un portador eficiente de

energía. Esto está unido a que el gas natural, al igual que el petróleo y el carbón, son fuentes de energía no renovables, por lo que el futuro está en la utilización de fuentes de energía renovables unido a combustibles no contaminantes, para que el avance de la civilización sea sostenible.

El hidrógeno, que actualmente se obtiene mayormente de la reacción química de los hidrocarburos, se integra a la cadena alimenticia humana a través de la hidrogenación de los aceites vegetales y animales. Las características de la utilización del hidrogeno en el proceso de hidrogenación, y sus propiedades inflamables y explosivas, hacen que el estudio enfocado al control de proceso, así como la identificación y control de riesgos, sea aplicable a otros procesos o sistemas. Los procesos petroquímicos empleados para su producción, y las aplicaciones en la industria siderúrgica, refinación de petróleo, petroquímica y alimenticia. Se enfocan también los principales equipos de una planta de hidrogenación por lotes, presentándose lazos de control para la automatización del proceso. Siendo de primordial importancia la protección del ser humano y del medio ambiente, se presenta el análisis de riesgo y su control para este tipo de proceso, el cual se puede aplicar a todo tipo de proceso.

2.2 Bases teóricas

2.2.1 Gas natural

Según Cáceres, L. (2000), se denomina gas natural al gas formado por los miembros más volátiles de la serie parafínica de hidrocarburos. El principal componente del gas natural es el metano, que usualmente constituye aproximadamente el 95% del mismo. Sus otros componentes son el etano, el propano, el butano y otras fracciones más pesadas como el pentano, el hexano y el heptano.

a. Clasificación del Gas Natural

De acuerdo con Osinergmin. (2017), el gas natural se clasifica así:

Gas Dulce: Es aquel que no contiene sulfuro de hidrógeno.

Gas Agrio: Contiene cantidades apreciables de sulfuro de hidrógeno y por lo tanto es muy corrosivo.

Gas Rico: (Húmedo) Es aquel del que puede obtenerse cantidades apreciables de hidrocarburos líquidos. No tiene nada que ver con el contenido de vapor de agua.

Gas Pobre: (Seco) Está formado prácticamente por metano.

b. Composición del gas natural

De acuerdo con Osinergmin. (2017), el gas natural se compone del siguiente modo: El gas natural se puede encontrar en forma "asociado", cuando en el yacimiento aparece acompañado de petróleo, o gas natural "no asociado" cuando está acompañado únicamente por pequeñas cantidades de otros hidrocarburos o gases. La composición del gas natural incluye variedad de hidrocarburos gaseosos, con predominio del metano, por sobre el 90%, y en proporciones menores etano, propano, butano, pentano y pequeñas proporciones de gases inertes como dióxido de carbono y nitrógeno.

La composición del gas varía según el yacimiento. Impurezas como son, el helio, oxígeno, vapor de agua

Tabla 1

Composición del gas natural

Componente	Nomenclatura	Composición (%)	Estado Natural
Metano	CH ₄	95,08	Gas
Etano	C ₂ H ₄	2,14	Gas
Propano	C ₃ H ₈	0,29	Gas licuable (GLP)
Butano	C ₄ H ₁₀	0,11	Gas licuable (GLP)
Pentano	C ₅ H ₁₂	0,04	líquido
Hexano	C ₆ H ₁₄	0,01	líquido
Nitrógeno	N ₂	1,94	Gas
Gas Carbónico	CO ₂	0,39	Gas

Fuente: Osinergmin. (2017)

Las propiedades del gas natural según la composición del cuadro anterior son:

- Densidad Relativa: 0,65
- Poder Calorífico: 9.032 kcal/m³
- Cp,m (presión Cte.): 8.57 cal/mol.°C
- Cv,m (volumen Cte.): 6.56 cal/mol.°C

c. Las características son las siguientes:

- El gas natural es más liviano que el aire. En el improbable caso de un escape, se disipa rápidamente.
- El gas natural no es tóxico. Pero en caso de inhalación permanente puede causar asfixia.
- El gas natural no tiene olor. En la distribución se le añade un olor artificial para que pueda detectarse rápidamente con el olfato.
- El gas natural es mejor para el ambiente, su uso reduce las emisiones de CO₂ (reduce el efecto invernadero).

d. Beneficios del gas natural

El gas natural es el combustible de menor precio y permite obtener un ahorro sustancial en relación con otros combustibles. Con el gas natural usted pagará su consumo después de utilizarlo; no tendrá la necesidad de pagar por adelantado. El Estado Peruano, por intermedio del Ministerio de Energía y Minas y OSINERG, garantiza la calidad del servicio que recibe el usuario a un bajo costo.

e. Económico

El gas natural proporciona la seguridad que usted busca para su familia o establecimiento comercial. No es tóxico ni corrosivo, y se disipa rápidamente a la atmósfera cuando hay alguna fuga, de esta forma se minimizan los riesgos en su uso. El gas natural no tiene color ni olor por lo que, como medida de seguridad, se le adiciona un odorizante con la finalidad de detectarlo fácilmente mediante un olor característico.

f. Seguro

Como el gas natural llega por tubería, se dispone del servicio las 24 horas y los 365 días del año. De esta forma se evita tener que almacenarlo en tanques o cilindros, disfrutando de un suministro continuo, similar al servicio de agua, electricidad y teléfono de cualquier ciudad moderna.

g. Brinda comodidad

h. Combustible ecológico, limpio y menos contaminante

i. Ventajas que ofrece el gas natural

La toma de conciencia de la degradación del medio ambiente causada por las emisiones de gases de escape de origen vehicular, ha inducido a la búsqueda de combustibles más "limpios". El gas natural es el combustible que menos contamina el ambiente, debido a que en su combustión no se generan gases tóxicos, cenizas ni residuos. Su transporte y distribución se realiza mediante tuberías subterráneas por lo que no daña el paisaje ni atenta contra la vida animal o vegetal. Fuente: Osinergmin. (2017)

2.2.2 Simulación

De acuerdo con Motar R, Henley E. (2007):

La simulación: Una visión general de la simulación y modelado. Los términos "modelado" y "simulación" a veces se usan indistintamente. En realidad, son términos distintos, aunque relacionados.

Modelar: es la representación de un objeto o fenómeno, que se utiliza por simulación. Los modelos pueden ser representaciones matemáticas, físicas o lógicas de un sistema, entidad, fenómeno o proceso. Los modelos son, a su vez, utilizados por la simulación para predecir un estado futuro.

Simulaciones en vivo: las personas reales operan en el mundo real.

Simulaciones virtuales: La gente real opera en mundos sintéticos.

Simulaciones constructivas: las entidades simuladas operan en mundos sintéticos.

Simulaciones indefinidas: las entidades simuladas están sujetas a entornos del mundo real.

Aplicaciones de simulación: experimentación, planificación operativa, capacitación, ensayo de misiones, apoyo a la realización de operaciones, gestión del ciclo de vida.

2.2.3 Reformado con vapor

Como señala Nazir, F (2003), en los últimos años, el hidrógeno (H_2), ha ganado mucho énfasis en la investigación como portador de energía debido a su respeto por el medio ambiente y su amplia gama de aplicaciones energéticas. Aproximadamente el 95% del hidrógeno en los Estados Unidos se genera a través del reformado con metano por vapor, y se utiliza principalmente para refinar petróleo y para la producción de productos industriales como el amoníaco. Además de la madurez de la tecnología, la reforma del gas natural es también la más económica entre todas las vías de producción de hidrógeno.

2.2.4 El hidrógeno como vector energético

La demanda energética mundial se ve cubierta en más de un 80 % por combustibles fósiles como el carbón, el petróleo y el gas natural. Esta dependencia tiene importantes repercusiones tanto económicas como medioambientales. Desde un punto de vista económico, su producción, centralizada en determinadas zonas del mundo, está gobernada por factores esencialmente políticos, lo que deriva en precios volátiles y elevados. Desde un punto de vista medioambiental, su combustión constituye la principal causa de la emisión de gases de efecto invernadero. Esto hace que la situación actual no resulte sostenible a medio plazo y desde las administraciones públicas se apunte de forma insistente la necesidad de preparar una transición controlada hacia una nueva forma de producción y consumo energético que sea limpia, segura y fiable (Balta y cols., 2009).

Todo ello ha atraído la atención de los investigadores hacia la búsqueda de combustibles alternativos. Así, en los últimos años, el interés en el hidrógeno como vector energético ha aumentado significativamente para combustible de vehículos y producción de energía estacionaria a partir de pilas de combustible. Esta política energética del hidrógeno presenta como beneficios la reducción del efecto invernadero debido a la centralización de las fuentes de emisión, y la mejora de los beneficios medioambientales en caso de que se produzca a partir de fuentes renovables. El hidrógeno, con un contenido en carbono nulo presenta grandes ventajas medioambientales, ya que su aprovechamiento en pilas de combustible para la producción de energía, no sólo implicaría la reducción de emisiones de CO₂, sino que también podría presentar un impacto positivo en la economía. De este modo, el hidrógeno se postula como un nuevo vector energético complementario de la electricidad y sustitutivo de los combustibles fósiles en el transporte, si bien la evolución tecnológica y la inversión en infraestructuras en la próxima década determinarán el panorama energético futuro.

Actualmente el hidrógeno se usa sobre todo en la industria química, lo que implica que ya están implementados métodos de producción maduros. Sin embargo, para que el hidrógeno constituya la base de un nuevo sistema energético sería deseable que pudiera producirse a partir de energías renovables. No obstante, a corto y medio plazo, la producción de hidrógeno a partir de combustibles fósiles mediante secuestro de CO₂, es el método más factible para cubrir la demanda y producir hidrógeno a precios competitivos (Cheekatamarla y cols., 2005).

2.2.5 Producción de hidrógeno

Como señala Hydrogen Data Book, (2011), la producción de hidrógeno a nivel mundial en el año 2010 fue de 31,33 millones de toneladas de m³ siendo Estados Unidos el mayor productor con alrededor de 20,12 millones de toneladas de m³. En los últimos años se ha observado una

producción creciente de hidrógeno a nivel mundial desde los 23,16 millones de toneladas de m^3 producidos en 2005 hasta los 31,33 del 2010.

El hidrógeno no se encuentra libre en la naturaleza; sino que se presenta en compuestos unido a otros átomos, en particular al carbono en los hidrocarburos y al oxígeno en el agua. Por consiguiente se debe consumir energía para separarlo. Actualmente, el 96% de la producción anual de hidrógeno proviene de combustibles fósiles, y en particular del gas natural que es la principal fuente de hidrógeno en el mundo. De hecho, cerca del 60% del hidrógeno producido proviene del reformado de gas natural y la mayor parte del resto de la refinería del petróleo o del reformado de naftas. Si un hidrocarburo es la materia prima utilizada para obtener hidrógeno entonces simultáneamente se producen óxidos de carbono: el monóxido de carbono (CO) que es tóxico y el dióxido de carbono (CO_2) que es, junto al metano (CH_4), uno de los principales gases responsables del efecto invernadero. La mezcla CO/H_2 , con ciertas proporciones de CO_2 , se la conoce como gas de síntesis, considerado por muchos como la base de la química orgánica. Por lo tanto en el proceso de producción de hidrógeno a partir de hidrocarburos, lo que se obtiene en primera instancia es el gas de síntesis, necesitándose etapas posteriores de purificación para separar el hidrógeno de los óxidos de carbono.

El carácter limpio y no contaminante del H_2 como combustible dependerá de la materia prima que se utilice para obtenerlo, así como del proceso y del origen de la energía requerida. Sin embargo, los combustibles alternativos al petróleo no están disponibles en cualquier parte del planeta. Así en una zona concreta puede haber una mayor posibilidad para obtenerse biodiesel, gasolina, metano o etanol. Por su parte, el hidrógeno se puede producir a partir de todas estas

alimentaciones y de muchas otras, convirtiéndolo en un combustible universal.

2.2.6 Tecnologías tradicionales de producción de hidrógeno

De acuerdo a (Laborde y cols., 2006). En el esquema de la Figura 1 se resumen las tecnologías actuales de producción de H₂ a partir de hidrocarburos fósiles, así como las materias primas utilizadas (Laborde y cols., 2006). Las tecnologías son básicamente dos: reformado con vapor y oxidación parcial que, dependiendo de la materia prima utilizada, se la conoce también como gasificación. Si la materia prima es relativamente ligera (de bajo peso molecular), como por ejemplo metano, etano, LPG y naftas, se utiliza el reformado con vapor. Si la materia prima es más pesada y/o de composición más incierta, se utiliza la oxidación parcial. Es el caso de las naftas, fuel-oil, residuos de las refinerías, asfaltos, carbón y biomasa.

La materia prima más empleada en el mundo es el gas natural, mezcla de hidrocarburos ligeros con preponderancia del metano (90% como mínimo dependiendo del yacimiento); y la tecnología dominante es el reformado con vapor.

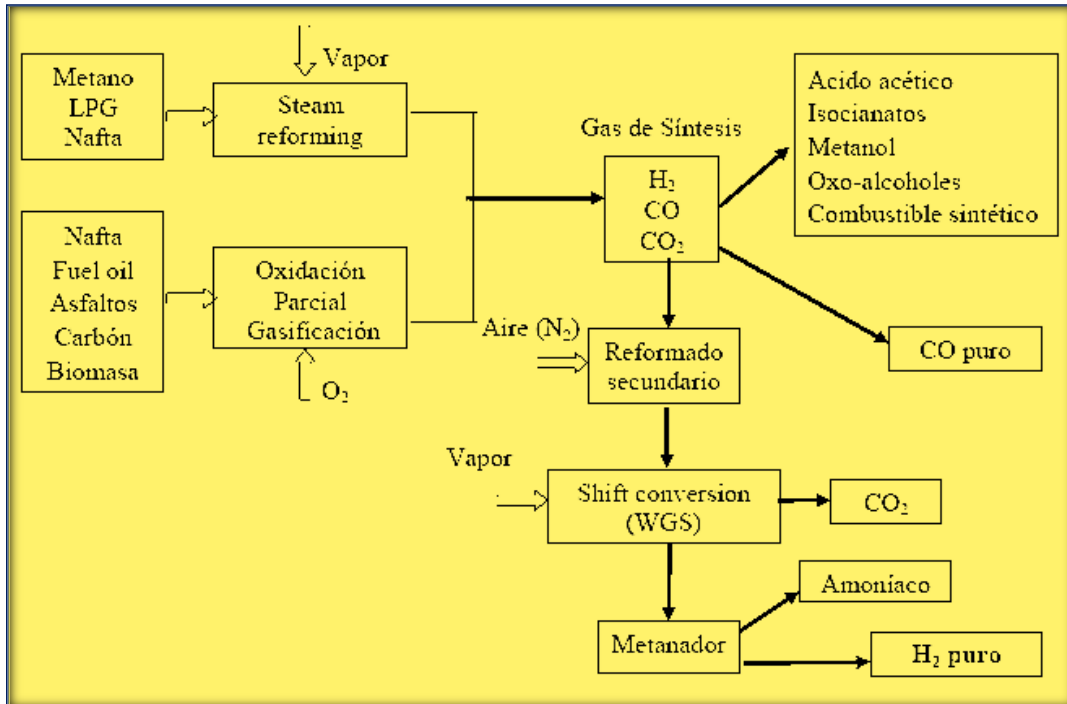


Figura 1: *Tecnologías Tradicionales*

Existen un gran número de tecnologías para la producción de hidrógeno tanto a partir de combustibles fósiles (reformado de hidrocarburos con vapor, oxidación parcial, reformado autotérmico), como fuentes de energía renovables tales como biomasa (p.ej. gasificación) o agua (electrolisis) (Holladay, 2009). Así, las tecnologías para producción de hidrógeno, pueden ser englobadas principalmente en dos grupos:

- a) **Tratamiento de combustibles:** estas tecnologías convierten un material que contiene hidrógeno (gasolina, amoníaco o metanol) en una corriente rica en hidrógeno. El tratamiento de metano es el método de producción de hidrógeno industrialmente más común en la actualidad. La mayoría de los hidrocarburos combustibles contienen al menos alguna cantidad de azufre que envenena el catalizador del proceso, lo que presenta el mayor reto del proceso de reformado. Existen tres técnicas fundamentalmente para producir hidrógeno a partir de hidrocarburos: reformado con vapor (SR), oxidación parcial (POX) y reformado autotérmico (ATR).

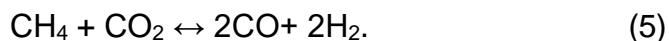
- b) **A partir de biomasa:** gasificación de biomasa, hidrógeno biológico (por ejemplo: fotólisis directa).
- c) **A partir de agua:** electrolisis, termólisis, foto electrólisis

2.2.7 Nuevas tecnologías de producción de hidrógeno

Aunque actualmente la mayor parte del hidrógeno producido procede del reformado de gas natural, se han planteado escenarios a largo plazo en los que toman relevancia los métodos de producción de hidrógeno a partir de energías renovables: energía solar, disociación fotobiológica de agua, digestiones anaeróbicas y foto fermentaciones de residuos con altos contenidos en celulosa, gasificación y pirólisis de biomasa entre otros. Además, recientemente se ha prestado atención en el desarrollo de nuevas tecnologías de hidrógeno para incrementar la seguridad energética y económica. (Balat y Balat, 2009).

Las nuevas tecnologías de producción de hidrógeno se pueden dividir en dos grandes grupos en cuanto a la materia prima para su obtención: las que siguen empleando los recursos fósiles como materia prima, intentando reducir el impacto de la producción de CO₂ y/o el consumo energético; y las que apuestan por materias primas renovables. Las tecnologías que siguen utilizando hidrocarburos analizan variantes al reformado con vapor y a la oxidación parcial, como las siguientes:

- 1) **Proceso auto térmico:** El objetivo es reducir el consumo energético ya que es una combinación del reformado con vapor, endotérmico, y la oxidación parcial, exotérmica. Las condiciones operativas son: presión entre 20 y 30 atm, temperaturas entre 800 y 1000 °C y se emplea un catalizador de níquel.
- 2) **Reformado con CO₂:** También es conocido como reformado seco. Este proceso reemplaza el vapor de agua, parcial o totalmente, por CO₂. De esa manera se consumen los dos gases principales del efecto invernadero en una sola reacción:



La relación CO/H₂ aumenta en comparación con la relación que se obtiene en el reformado con vapor. La dificultad de esta alternativa es la disponibilidad del CO₂ en grandes cantidades y con calidad constante.

3) **Pirólisis:** es la descomposición del hidrocarburo en H₂ y carbono a altas temperaturas y en presencia de un catalizador.

4) **Pequeños reformadores**

5) **Tecnologías basadas en la biomasa**

2.2.8 El hidrógeno: consumo y aplicaciones

Si bien en los últimos años el hidrógeno ha cobrado una notable relevancia como combustible del futuro, ya sea en su empleo directo como tal o como alimentación a las pilas de combustible, su aplicación en diversos procesos es bien conocida desde hace tiempo. Es ampliamente utilizado en las refinerías de petróleo (en la industria petroquímica se emplea en la síntesis de amoníaco y en la fabricación de peróxido de hidrógeno), la industria de alimentos lo utiliza para los procesos de hidrogenación y en menor medida tiene aplicaciones en las industrias farmacéuticas y electrónica. El consumo total de hidrógeno en el mundo se estima en unos 45 millones de toneladas anuales siendo Estados Unidos el mayor consumidor (79%), seguido por Europa (14%) y Asia (7%). En función del tipo de aplicación, la distribución del consumo corresponde casi en tres cuartas partes a la industria química (72%). De este porcentaje, la mayor aplicación reside en la industria de la refinería, seguida por la síntesis de amoníaco y la síntesis de metanol, tal y como se muestra en la Figura 2.

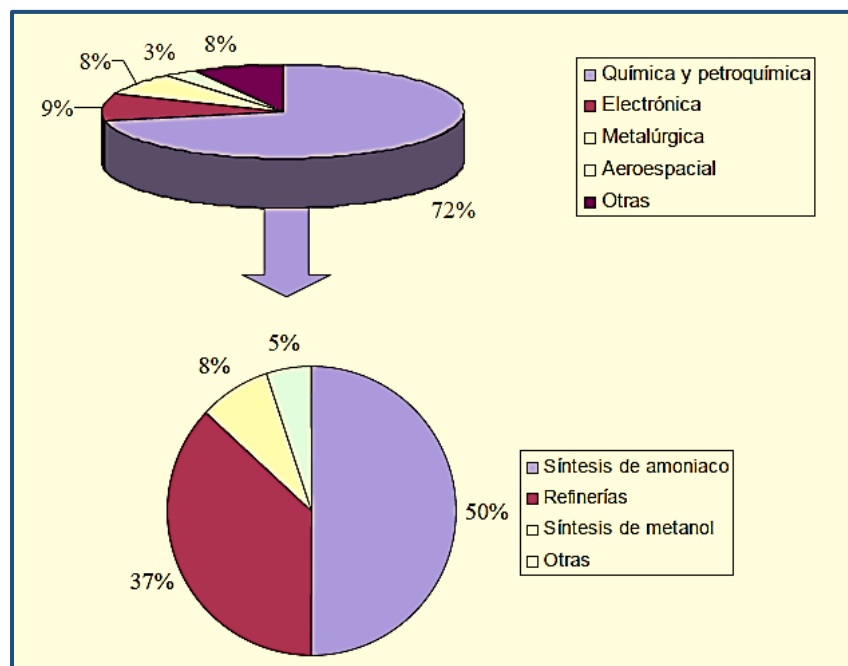


Figura 2: Consumo de hidrógeno, Laborde y cols. (2006).

Como ya se ha mencionado, en el proceso de producción de hidrógeno a partir de hidrocarburos se obtiene en primera instancia el gas de síntesis. Este gas de síntesis, que posee un elevado poder reductor, tiene a su vez aplicaciones en la industria química, petroquímica y siderúrgica, empleándose actualmente en la síntesis de metanol y en la fabricación de oxoalcoholes, isocianatos, ácido acético y acetatos, entre otros productos. También se utiliza, aprovechando su propiedad reductora en la fabricación de hierro esponja y en la industria del vidrio. Aunque actualmente el hidrógeno se usa fundamentalmente en la industria química se prevé que en el futuro cercano llegará a ser un combustible importante. Esto se puede entender teniendo en cuenta que la flota de vehículos ligeros en los Estados Unidos consume alrededor de 8 millones de barriles de petróleo al día y que a pesar de ser el tercer mayor productor de petróleo del mundo, la cantidad de petróleo importado se espera que aumente en este país hasta el 60 % en el año 2025 (Holladay y cols., 2009).

Por otro lado la incertidumbre del mundo actual ha incrementado la demanda de petróleo de los países desarrollados causando un aumento

en el coste de éste. Pero además del coste existen también razones medioambientales para disminuir el uso del petróleo. Por todo ello se está haciendo un esfuerzo para diversificar el suministro de energía especialmente para el sector transporte y para encontrar combustibles más limpios.

2.2.9 Almacenamiento de hidrógeno

Para conseguir que se generalice el uso del hidrógeno como vector energético, se debe lograr su transporte y almacenamiento de forma económica. Debido a la baja densidad energética de este gas, esto supone un considerable cambio respecto al transporte y almacenamiento actual de los combustibles fósiles convencionales (Dunn, 2002). En este sentido, el almacenamiento de hidrógeno constituye actualmente una de las áreas más importantes de investigación, ya que sin sistemas de almacenamiento efectivos será difícil de lograr una economía del hidrógeno (Ball y Wietschel, 2009). En la actualidad existen distintas formas de almacenar hidrógeno, tanto para aplicaciones estacionarias como para el sector del transporte (en forma gaseosa, líquida, combinado químicamente o adsorbido en sólidos porosos), dependiendo su elección de diferentes factores como el proceso final en el que se vaya a emplear, la densidad energética requerida, la cantidad a almacenar y la duración del almacenamiento, la existencia de otras posibles formas de energía disponibles, los costes y necesidades de mantenimiento de la instalación, y los costes de operación (Dunn, 2002). Según esto, los objetivos de eficiencia para el almacenamiento de hidrógeno varían en función de su uso final, bien sea para dispositivos fijos o para transporte terrestre. Por ejemplo, en el caso de su utilización como combustible para el transporte, uno de los principales problemas a resolver es la falta de los medios adecuados para su almacenamiento en el propio vehículo, cumpliendo los requisitos de seguridad, costes y las características de suministro requeridas. El Departamento de Energía de Estados Unidos (DOE) estableció en el año 2004 como objetivo a

conseguir, en el almacenamiento de hidrógeno, al menos una eficiencia en peso del 9% para el año 2015, medida como relación entre el hidrógeno almacenado y el peso del sistema de retención (DOE Hydrogen Programm, 2004). Se estima que un vehículo con una pila de combustible de hidrógeno necesitaría más de 3 kg de hidrógeno para disponer de una autonomía de unos 500 km (Ball y Wietschel, 2009). De forma que para alcanzar esas densidades de almacenamiento, es preciso desarrollar nuevos métodos. Las técnicas más prometedoras están en el desarrollo de materiales sólidos que permitan el almacenamiento de hidrógeno, como es el caso de los hidruros y óxidos metálicos entre otros materiales (Lorente y cols., 2009).

2.3 Conceptual

En este estudio de investigación, el diseño conceptual y la simulación de proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural se realiza mediante los simuladores de procesos CHEMCAD versión 6.5.6 (CHEMSTATION, 2016) y CHEMCAD versión 7.1.2 (CHEMSTATION, 2018). Esta investigación pretende conocer la composición de los flujos másico de las diferentes corrientes involucradas en el proceso de producción de hidrógeno, por lo que es posible determinar los principales parámetros de diseño del equipo de proceso de producción; para calcular el flujo de los diferentes servicios auxiliares consumidos (vapor de agua, agua de refrigeración, separación de fases etc.) y evaluar gráficamente los procesos de transferencia de calor realizados en los intercambiadores de calor. Para desarrollar esta investigación, se realizaron cuatro estudios de sensibilidad para saber que valores deben aplicarse a las variables operativas clave de los equipos de tres procesos (válvula N° 1, compresora, horno de reformador EREA N° 18 e intercambiador de calor N° 4). Esta evaluación de variable tuvo como objetivo maximizar la cantidad de producto final (hidrógeno). Los resultados obtenidos en este estudio de investigación la simulación ayuda

a caracterizar el proceso de producción desde el punto de vista técnico; y se puede utilizar para tomar las medidas necesarias para aumentar la rentabilidad, el rendimiento y la productividad del proceso; así como establecer los fundamentos requeridos para futuros estudios de optimización.

2.4 Descripción del proceso de producción de hidrogeno.

El proceso de simulación del proceso de producción de hidrogeno por reformado con vapor a partir del gas natural se seleccionó para la simulación, ya que constituye el proceso de producción más empleado aplicado a escala industrial para obtener hidrogeno.

Está compuesto por cinco etapas:

- 1) Unidad de tratamiento del agua.
- 2) Unidad de desulfuración.
- 3) Unidad de Reformador.
- 4) Unidad de Reactor.
- 5) Unidad de Separación.

2.4.1 Materiales y métodos:

Lista de los equipos utilizado para el proceso como se muestra en la

Tabla 2:

Materiales y métodos

SIMBOLO	EQUIPO	SIMBOLO	EQUIPO
VALV 01	VÁLVULA	HTXR 05	INTERCAMBIADOR DE CALOR
VALV 02	VÁLVULA	HTXR 06	INTERCAMBIADOR DE CALOR
VALV 03	VÁLVULA	HTXR 07	INTERCAMBIADOR DE CALOR
PUMP 15	BOMBA	HTXR 08	INTERCAMBIADOR DE CALOR
COMP 14	COMPRESOR	HTXR 09	INTERCAMBIADOR DE CALOR
COMP 20	COMPRESOR	HTXR 12	INTERCAMBIADOR DE CALOR
COMP 23	COMPRESOR	PSA 10	TORRE PSA(DESULFURADOR)
MIXE 16	MEZCLADOR	PSA 13	TORRE PSA(DE HIDROGENO)
MIXE 17	MEZCLADOR	CSEP 11	SEPARADOR DE FASE
HTXR 04	INTERCAMBIADOR DE CALOR	EREA 19	REACTOR SHIFT (EQUILIBRIO)
TANK 20	TANQUE	EREA 18	HORNO REFORMADOR(EQUILBRIO)

Fuente: Elaboración propia

La figura 3, muestra el diagrama de flujo del proceso de producción de hidrógeno, y la descripción del proceso de producción de hidrogeno muestran el diagrama de flujo obtenido durante la simulación de proceso en el simulador chemcad son respectivamente las figuras 4, 11 y 16; las láminas de flujo están diseñadas a partir del diagrama flujo del proceso de producción a partir de metano, y las tres láminas de flujo están diseñadas usando un reactor de equilibrio, reactor de Gibbs, y reactor estequiométrico. Las materias primas para la producción de hidrógeno son el gas natural y vapor de agua.

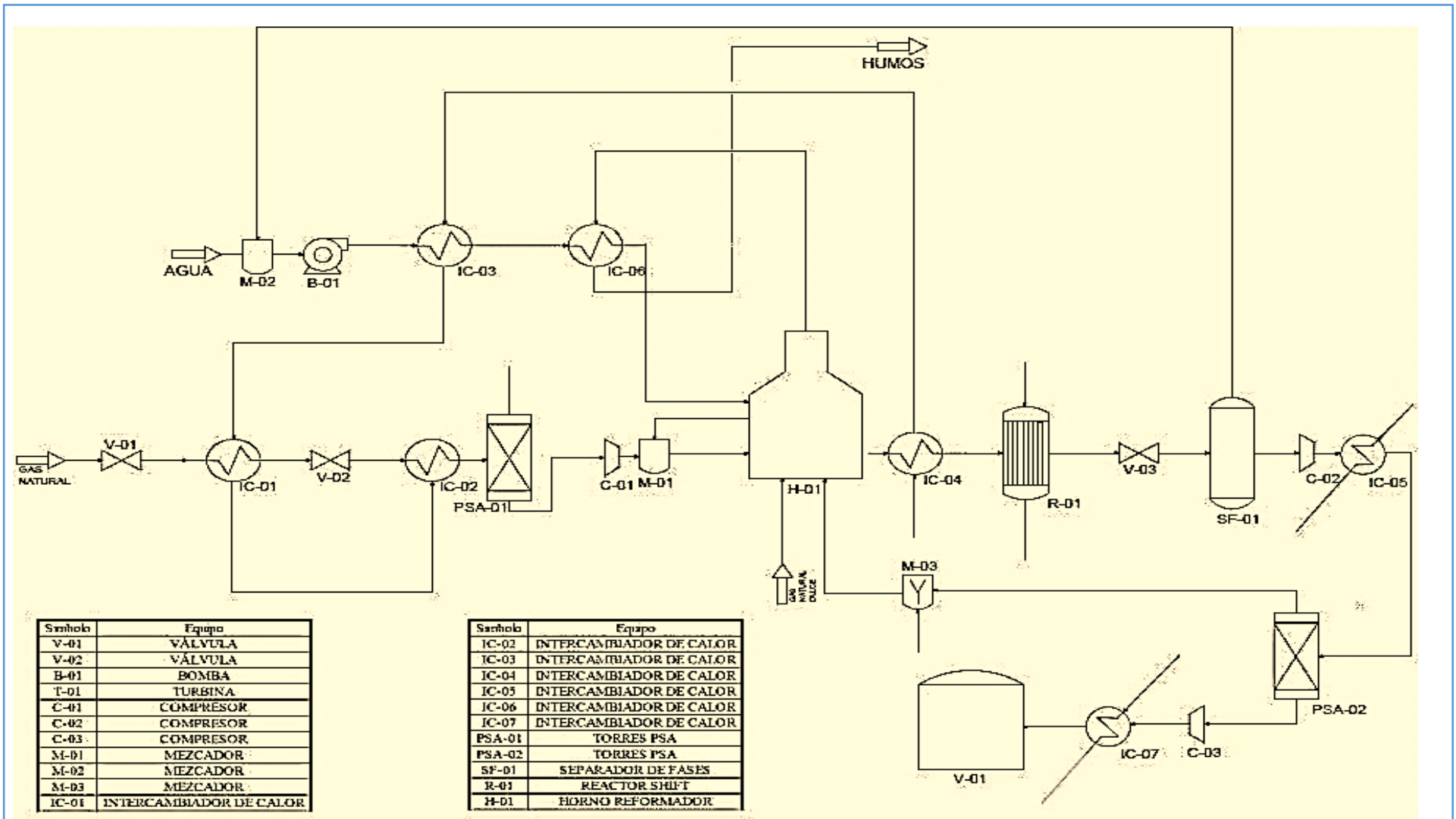


Figura 3 Diagrama planta de producción de hidrogeno a partir de metano, Taifouris,M (2015)

2.4.2 Unidad de tratamiento del agua

El Agua que ingresa con flujo de 5692.62 kg/h a 1bar y 298 K se mezcla con agua de reciclo (separador de fase) cuyo flujo es 928.70 kg/h, ésta mezcla es comprimida desde 1 bar a 20 bar de presión utilizando una bomba. Después se precalienta en dos intercambiadores de calor secuencialmente hasta una temperatura adecuada de 486 K (HTXR-9, HTXR-11).

2.4.3 Unidad de desulfuración

El proceso de producción comienza con un flujo másico de 2835.42 Kg/h de gas natural que ingresa a 72 bares y 298 K que está dada por las condiciones del suministro a planta del gas natural. Se despresuriza la presión en dos etapas la primera hasta 22.5 bares y en la segunda hasta los 4.5 bares. Esto se hace para evitar un enfriamiento muy grande, mediante la válvula de expansión (Valvula-01) y (Valvula-02). Tras cada una de las descompresiones, el gas natural se calienta con el vapor de agua que alimenta al HTXR-01 y al HTXR-02 y que proviene de la vaporización que se produce al usar agua de refrigeración para enfriar la corriente que sale del horno reformador. A la salida del HTXR -02, el gas natural se encuentra a 298 K y 4.5 bares, que son las condiciones óptimas a las que debe trabajar la torre PSA-01(separador). La torre PSA-01 va a eliminar el H₂S presente en el gas natural mediante un proceso de adsorción sobre un lecho de gel de sílice ayudado de una capa de N-metil-2-pirrolidona (NMP). El H₂S es muy nocivo para el catalizador, ya que lo envenena, y por eso es necesario eliminarlo antes de la entrada de la corriente al horno reformador (EREA-01). Una vez eliminado el H₂S, el gas natural dulce es comprimido hasta los 20 bares y mezclado con el vapor agua sobre calentado del que sale del intercambiador hacia el mezclador.

2.4.4 Unidad de Reformador

Ambas corrientes mezcladas, entran al horno reformador donde se calientan hasta la temperatura óptima de 1123 K, 20 bares en la zona convectiva, una vez alcanzada las condiciones de operación donde se lleva a cabo en la zona radiante del horno reformador las reacciones más importantes ocurre en el primer reformado de metano, segundo reformado de etano, y tercer reformado de propano, y las formaciones de monóxido de carbono e hidrógeno.

2.4.5 Unidad de Reactor

Luego, La mezcla gaseosa caliente proveniente del Reactor reformador, que presenta una temperatura cercana a los 1123 K y una presión de 17 bares, se enfría a 573 K y 17 bares usando intercambiador de calor. Donde se lleva a cabo la última reacción más importante. Formación de dióxido de carbono e hidrógeno (equilibrio del gas de agua).

2.4.6 Unidad de Separación.

La mezcla de gases que salen del reactor SHIFT (equipo 19) de conversión debe separarse y purificarse del resto de los productos químicos que contiene no es hidrógeno puro, y debe refinarse aún más para cumplir con las especificaciones del cliente. En esta torre separa el hidrogeno del resto de los componentes (CO_2 , CO , H_2O , y CH_4). No se puede a segura completamente la separación y que el hidrógeno no se vaya adsorber en el lecho, se considera: Metano 0,005%, 0.005% de CO_2 y 5% de hidrogeno, también se adsorbe junto al 99.995 del dióxido de carbono y metano.

2.4.7 Selección de modelos termodinámicos.

El modelo termodinámico asociado a la fase de vapor SRK (Soave-Redlich-Kwong) permiten determinar los valores de la constante de equilibrio K y otros parámetros termodinámicos importantes, además, se

tiene en cuenta algunas recomendaciones útiles proporcionadas por el propio simulador (chemstations, 2018).

2.4.8 Estudio de sensibilidad.

Una vez que se lleva el enfoque de simulación, se lleva a cabo estudios de sensibilidad utilizando las herramientas (estudio de sensibilidad) que se encuentra en el mismo simulador chemcad, consiste evaluar la temperatura de operación, la presión y la cantidad de flujo molar a algunos equipos del proceso.

2.4.9 Descripción de las reacciones químicas involucradas.

Las ecuaciones (2.6) (2.7) y (2.8) representan las principales reacciones que tienen lugar dentro del Reactor de Reformado, que son la formación de monóxido de carbono e hidrogeno (ecuación 2.6); formación de monóxido de carbono e hidrogeno (ecuación. 2.7); formación de monóxido de carbono e hidrogeno (ecuación. 2.8). La aplicación de altas temperaturas durante la etapa de reacción permite que la oxidación sea la reacción predominante, con una selectividad de aproximadamente de $S_{H_2/CH_4} = 2.83$ y conversión de 0.86 mientras que el resto de las reacciones involucradas en la formación de dióxido de carbono e hidrogeno (ec.2.9) con una conversión de 0.978

La primera, segundo, y tercer equilibrio es el reformado de metano, etano y propano; con vapor de agua, mientras que la cuarta reacción es la reacción de gas de agua.

Tabla 3

Reacciones químicas

Formación de monóxido de carbono e hidrogeno (reformado de metano)	
$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + 3\text{H}_2$ $K_p = 1.198 \cdot 10^{17} \exp^{(-26830/T(K))}$	(6.)
Formación de monóxido de carbono e hidrogeno (reformado de etano)	
$\text{C}_2\text{H}_6 + 2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons 2\text{CO} + 5\text{H}_2$	(7)
Formación de monóxido de carbono e hidrogeno (reformado de propano)	
$\text{C}_3\text{H}_8 + 3\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons 3\text{CO} + 7\text{H}_2$	(8)
Formación de dióxido de carbono e hidrogeno (equilibrio del gas de agua)	
$\text{H}_2\text{O} + \text{CO} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$ $K_p = 1.767 \cdot 10^{-2} \exp^{(-4400/T(K))}$	(9)

2.4.10 Simulación de procesos

Las figuras 4, 11, y 16; muestran los diagramas de flujo obtenidos durante la simulación del proceso en el simulador Chemcad.

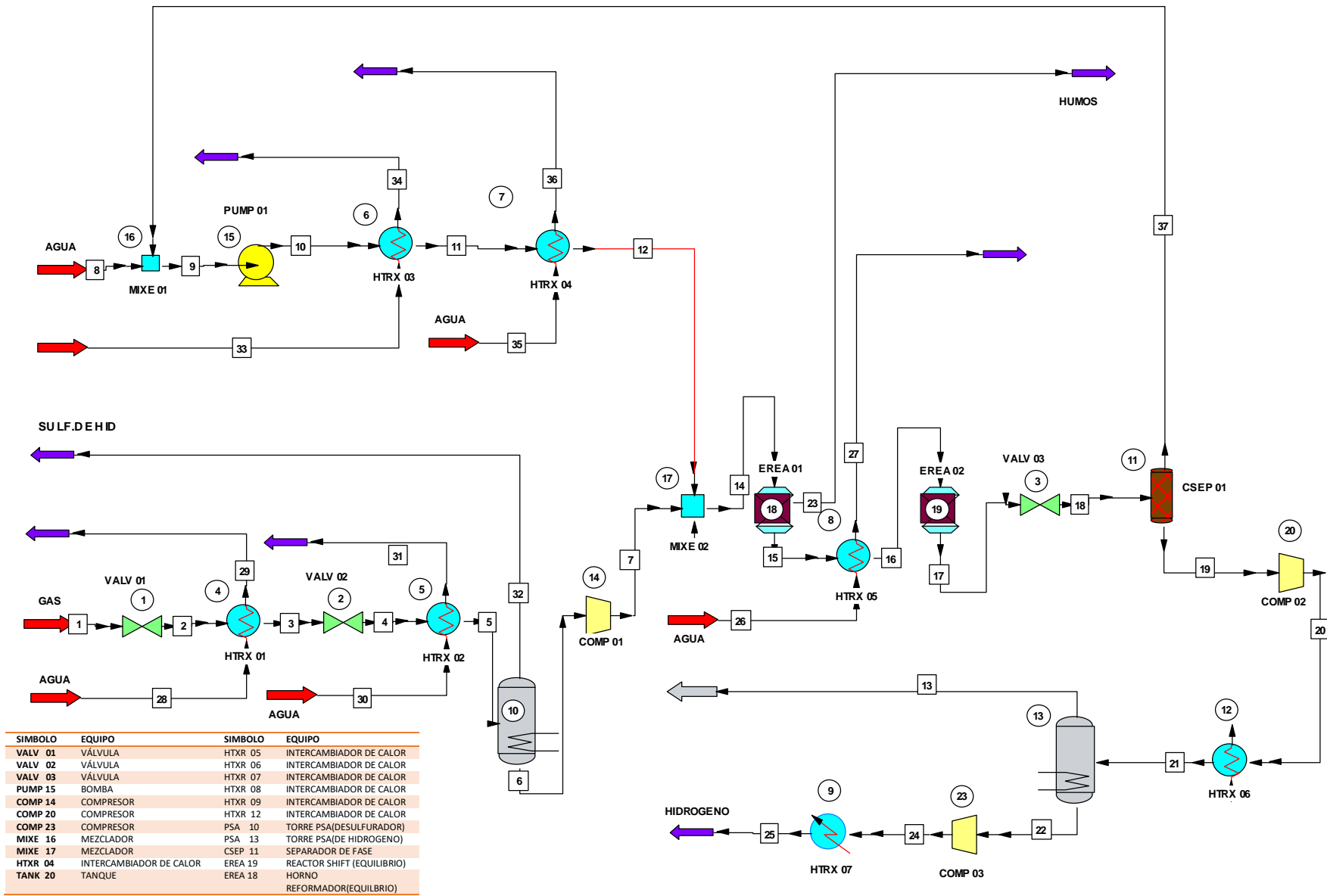
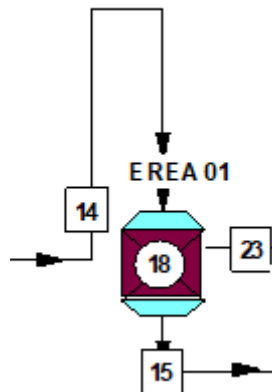


Figura 4: Diagrama de flujo obtenido durante la simulación del proceso en el simulador chemcad, Fuente: Elaboración propia.

Sección de horno reformador (reactor de equilibrio)



Definición de parámetros de las operaciones unitarias

The screenshot shows the configuration window for an Equilibrium Reactor (EREA). The window has two tabs: 'General Specifications' and 'More Specifications'. The 'General Specifications' tab is active. The 'Number of reactions' is set to 3, and the 'Pressure drop' is set to 3 bar. The 'Reactor Model' section shows 'General equilibrium reactor' selected in the dropdown. The 'Specify reactor type' section has 'Vapor only' selected. The 'Thermal Mode' section has 'Isothermal (specify temp)' selected, with a temperature of 1123 K and a heat duty of 1.21725e+007 kcal/h. The 'Specify calculation mode' section has 'Reaction conversion' selected, with '1 Serial reactions' chosen in the dropdown. The 'Liquid Keq model' is set to 'Keq = Kx'. The window includes 'Help', 'Cancel', and 'OK' buttons.

Figura 5 Especificaciones generales en el reactor de equilibrio (EREA)

Fuente: Chemcad vs 6.5.6

- Equilibrium Data -

Reaction Number: 1

Keq=exp(A+B/T+C*Ln(T)+D*T+E*T*T)

Base component: 1 Methane

A Factor: -29.3014

B Factor: 26248.4

C Factor:

D Factor:

E Factor:

Heat of reaction:

Approach delta T: K

Frac. approach:

Frac. conversion: 0.884

Specified heat of rxn is: Ideal gas state

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor
1 Methane	-1	
6 Water	-1	
8 Carbon Monoxide	1	
7 Hydrogen	3	
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		

Edit next reaction
 Edit specified rxn
 Exit reactions

Help Rxn # Cancel OK

Figura 6 Datos de equilibrio (EREA) para la primera reacción.

Fuente: Chemcad vs 6.5.6

Equilibrium Data -

Reaction Number: 2 **$K_{eq} = \exp(A + B/T + C \cdot \ln(T) + D \cdot T + E \cdot T^2)$**

Base component: 2 Ethane

A Factor:

B Factor:

C Factor:

D Factor:

E Factor:

Heat of reaction: K

Approach delta T: K

Frac. approach:

Frac. conversion: 1

Specified heat of rxn is: Ideal gas state

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor
2 Ethane	-1	<input type="text"/>
6 Water	-2	<input type="text"/>
8 Carbon Monoxide	2	<input type="text"/>
7 Hydrogen	5	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Edit next reaction
 Edit specified rxn
 Exit reactions

Rxn #

Figura 7 Datos de equilibrio (EREA) para la segunda reacción.

Fuente: Chemcad vs 6.5.6

Equilibrium Data -

Reaction Number: 3 **$K_{eq} = \exp(A + B/T + C \cdot \ln(T) + D \cdot T + E \cdot T^2)$**

Base component: 3 Propane

A Factor:

B Factor:

C Factor:

D Factor:

E Factor:

Heat of reaction: K

Approach delta T: K

Frac. approach:

Frac. conversion: 1

Specified heat of rxn is: Ideal gas state

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor
3 Propane	-1	<input type="text"/>
6 Water	-3	<input type="text"/>
8 Carbon Monoxide	3	<input type="text"/>
7 Hydrogen	7	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<None>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

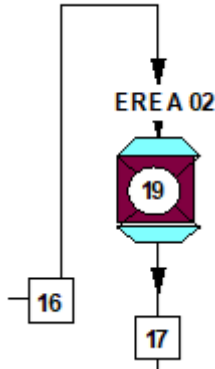
Edit next reaction
 Edit specified rxn
 Exit reactions

Help Rxn # Cancel OK

Figura 8 Datos de equilibrio (EREA) para la tercera reacción.

Fuente: Chemcad vs 6.5.6

Para el segundo reformador (reactor shift)



The screenshot shows the configuration window for an Equilibrium Reactor (ERA). The window has two tabs: 'General Specifications' and 'More Specifications'. The 'General Specifications' tab is active. The window contains the following fields and options:

- Number of reactions:** A text box containing the value '1'.
- Pressure drop:** A text box, currently empty, followed by the unit 'bar'.
- ID:** A text box containing the value '15'.
- Reactor Model:**
 - Specify reactor type:** A dropdown menu showing 'General equilibrium reactor'.
 - Reactor Model options:** Radio buttons for 'Liquid only', 'Vapor only' (selected), 'Liquid reaction, Mixed phase', and 'Vapor reaction, Mixed phase'.
- Thermal Mode:**
 - Adiabatic (no heat exchange):** Radio button, not selected.
 - Isothermal (specify temp):** Radio button, selected. A text box contains '573' and the unit 'K'.
 - Specify heat duty:** Radio button, not selected. A text box contains '-2.58153e+006' and the unit 'kcal/h'.
- Specify calculation mode:**
 - Reaction conversion:** Radio button, selected. A dropdown menu shows '0 Parallel reactions'.
 - Approach delta T:** Radio button, not selected. A text box is empty, followed by the unit 'K'.
 - Approach Fraction:** Radio button, not selected. Text below: 'Enter the fractional conversion on the reaction screens (to follow)'.
- Liquid Keq model:** A dropdown menu showing 'Keq = Kx'.

At the bottom of the window are three buttons: 'Help', 'Cancel', and 'OK'.

Figura 9 Variables generales en el reactor de equilibrio (ERA)

Fuente: Chemcad vs 6.5.6

Equilibrium Data -

Reaction Number: 1

Keq=exp(A+B/T+C*Ln(T)+D*T+E*T*T)

Base component: 8 Carbon Monoxide

A Factor: -4.35369

B Factor: 4593.17

C Factor:

D Factor:

E Factor:

Heat of reaction:

Approach delta T:

Frac. approach:

Frac. conversion: 0.987

Specified heat of rxn is: Ideal gas state

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor
6 Water	-1	
8 Carbon Monoxide	-1	
4 Carbon Dioxide	1	
7 Hydrogen	1	
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		

Edit next reaction
 Edit specified rxn
 Exit reactions

Help Rxn # Cancel OK

Figura 10 Datos de equilibrio (EREA) para la cuarta reacción.

Fuente: Chemcad vs 6.5.6

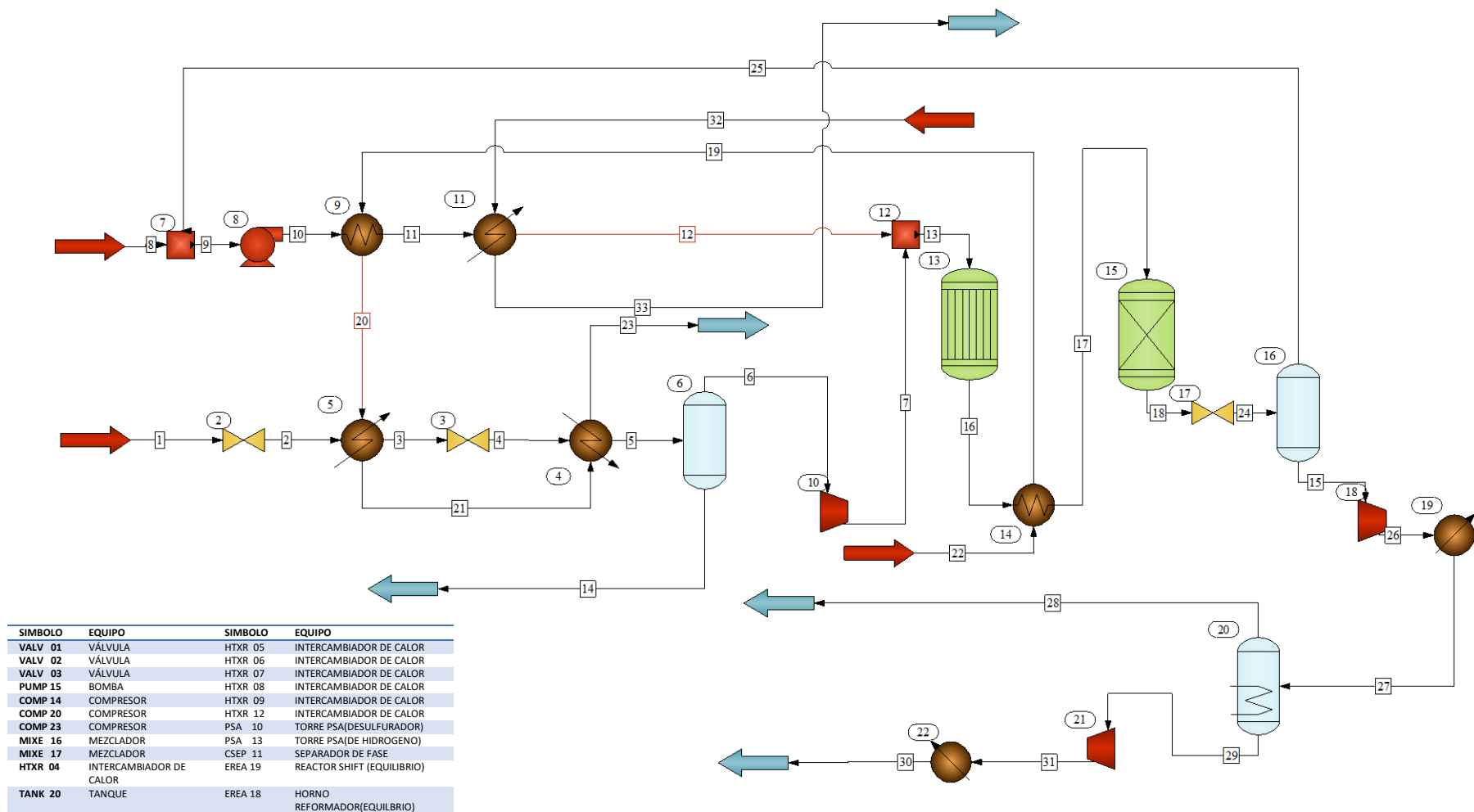
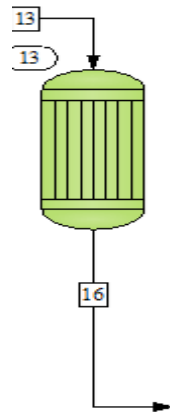


Figura 11: Diagrama de flujo obtenido durante la simulación del proceso en el simulador chemcad (Reactor de Gibbs)

Fuente: *Elaboración propia.*

Sección de horno reformador (reactor de Gibbs)



Definición de parámetros de las operaciones unitarias

Gibbs Free Energy Reactor (GIBS)

General | Solids | Inerts

ID: 13

Specify Thermal Mode:

1. Adiabatic

2. Isothermal 1123 K

3. Heat Duty 1.11803e+007 kcal/h

Reaction Phase: 1 Vapor or mixed pha

Optional specifications

Pressure: [] bar

Pressure Drop: 3 bar

Approach DT: [] K

Air/O₂ Calculation

Air stream ID: []

Fuel stream ID: []

Lambda factor: []

Overall heat of reaction: 6.55241e+006 kcal/h

Lambda calculated: []

Convergence Parameters:

Maximum Iterations: [] For liquid only: Ideal

Tolerance: []

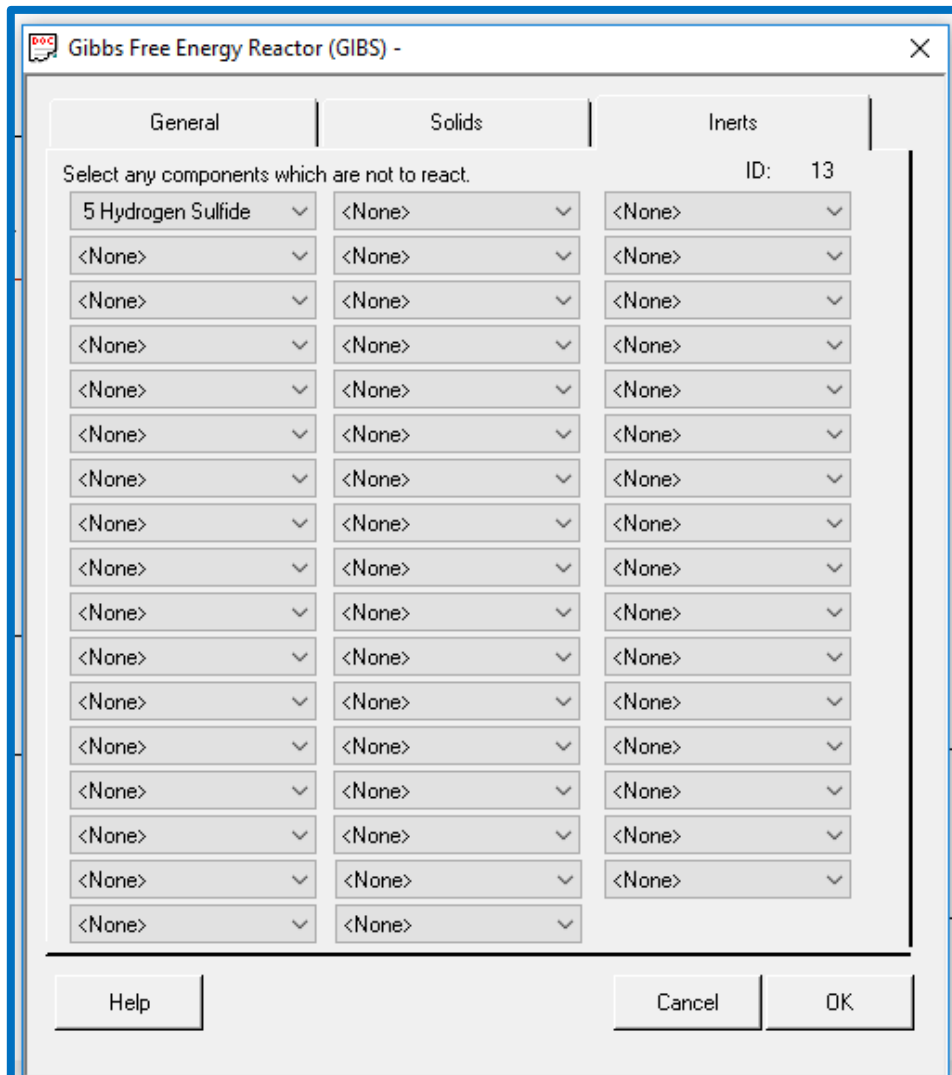
Min Allowable Temp: [] K

Max Allowable Temp: [] K

Buttons: Help, Cancel, OK

Figura 12 Condiciones de operación en el reactor de energía libre de GIBBS

Fuente: Chemcad vs 7.1.2.



Component Element Matrix

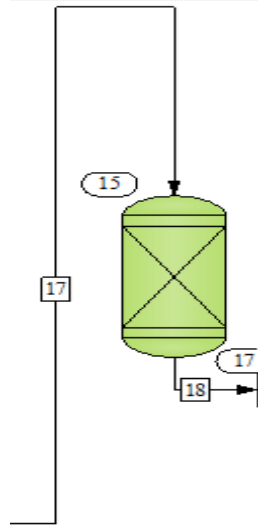
Cancel OK

	H	C	O	S	E1
Methane	4	1	0	0	0
Ethane	6	2	0	0	0
Propane	8	3	0	0	0
Carbon Dioxide	0	1	2	0	0
Hydrogen Sulfide	2	0	0	1	0
Water	2	0	1	0	0
Hydrogen	2	0	0	0	0
Carbon Monoxide	0	1	1	0	0

Figura 13 Componentes de operación en el reactor de energía libre de GIBBS

Fuente: Chemcad vs 7.1.2

PARA EL SEGUNDO REACTOR DE GIBBS



- Gibbs Free Energy Reactor (GIBS) -

General | Solids | Inerts

ID: 15

Specify Thermal Mode:

1. Adiabatic

2. Isothermal K

3. Heat Duty kcal/h

Reaction Phase:

Optional specifications

Pressure bar

Pressure Drop bar

Approach DT K

Air/O2 Calculation

Air stream ID:

Fuel stream ID:

Lambda factor

Overall heat of reaction kcal/h

Lambda calculated

Convergence Parameters:

Maximum Iterations

Tolerance

Min Allowable Temp K

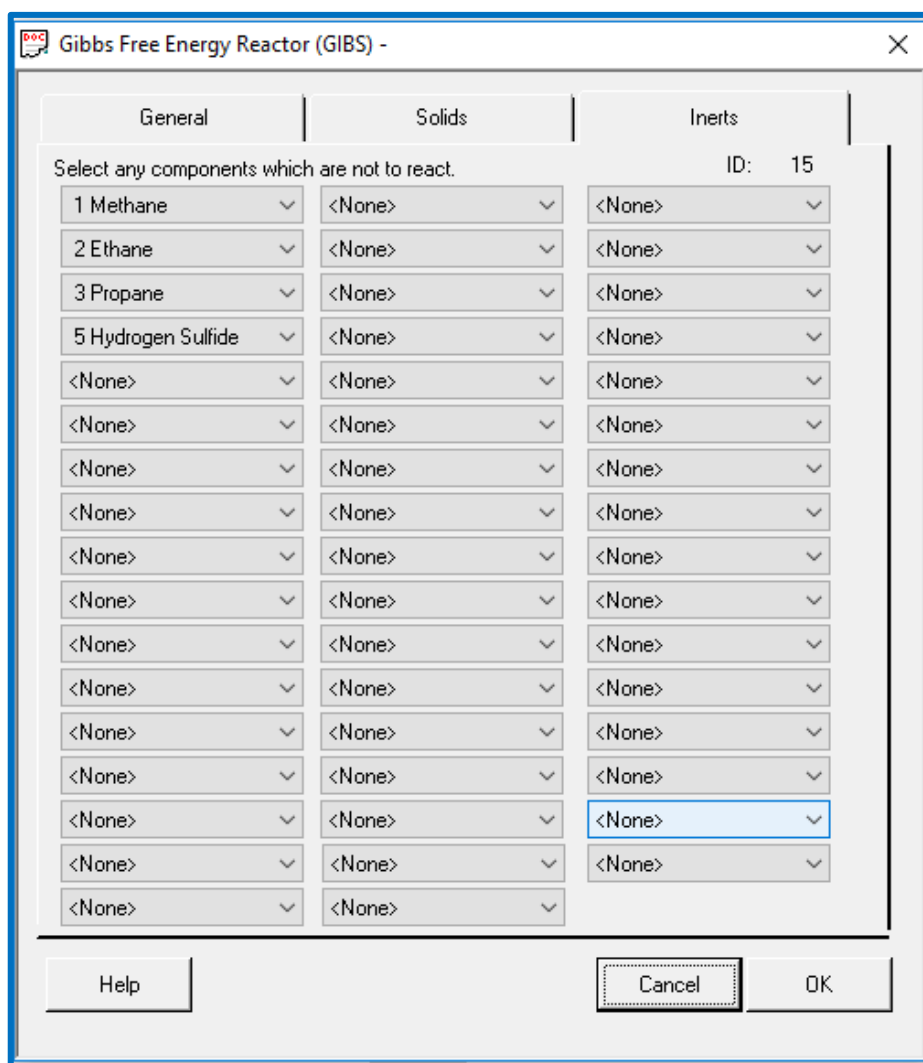
Max Allowable Temp K

For liquid only

Help Cancel OK

Figura 14 Especificaciones de operación en reactor de energía libre de GIBBS.

Fuente: Chemcad vs 7.1.2



	H	C	O	S	E1
Methane	4	1	0	0	0
Ethane	6	2	0	0	0
Propane	8	3	0	0	0
Carbon Dioxide	0	1	2	0	0
Hydrogen Sulfide	2	0	0	1	0
Water	2	0	1	0	0
Hydrogen	2	0	0	0	0
Carbon Monoxide	0	1	1	0	0

Figura 15 Componentes de operación en el reactor de energía libre de GIBBS

Fuente: Chemcad vs 7.1.2

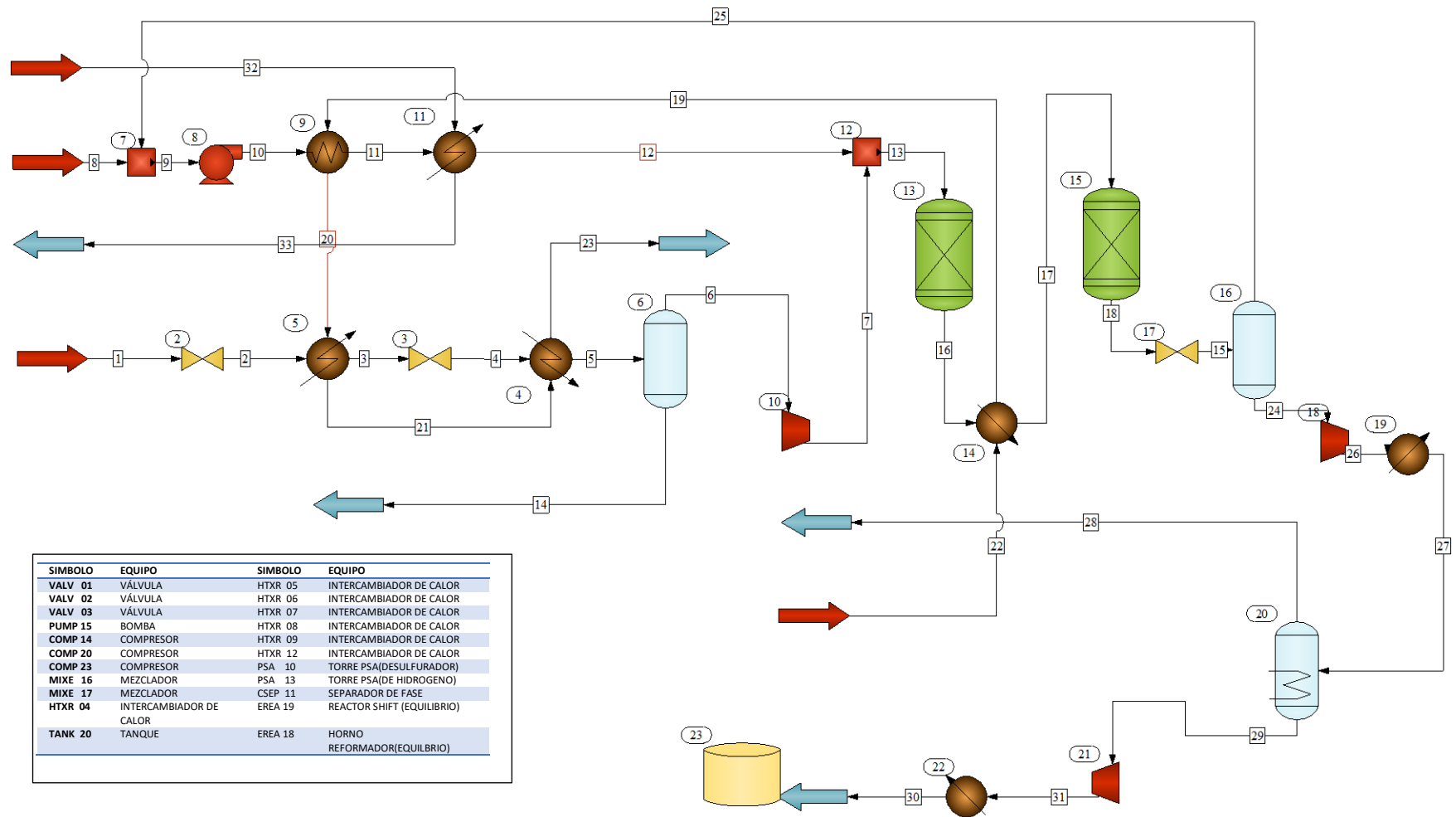
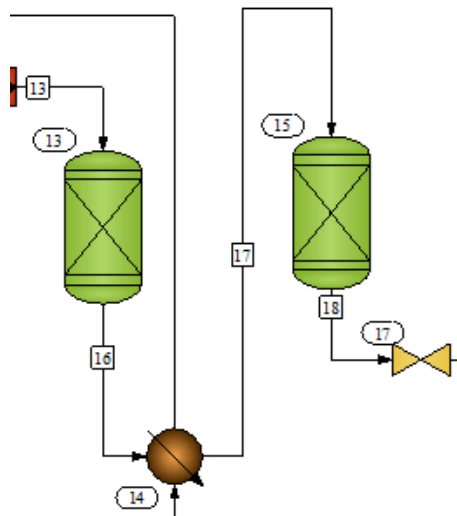


Figura 16: Diagrama de flujo obtenido durante la simulación del proceso en el simulador CHEMCAD (Reactor Estequiometrico)

Fuente: Elaboración propia.

Para el reactor estequiométrico



- Stoichiometric Reactor (REAC) -

General Specifications | More Components

ID: 13

Specify Thermal Mode:

1. Adiabatic

2. Isothermal K

3. Heat Duty kcal/h

Key Component

Frac. Conversion

Heat of Reaction Btu/lbmol

Reactor Pressure bar

Calc H of Reac. Btu/lbmol

Stoichiometric Coefficients:

Methane	<input type="text" value="-1"/>	Carbon Dioxide	<input type="text"/>	Hydrogen	<input type="text" value="3"/>
Ethane	<input type="text"/>	Hydrogen	<input type="text"/>	Carbon	<input type="text" value="1"/>
Propane	<input type="text"/>	Water	<input type="text" value="-1"/>		

Help | Cancel | OK

Figura 17 Especificaciones generales en el reactor estequiométrico (REAC).

Fuente: Chemcad vs 7.1.2

PARA EL SEGUNDO REACTOR ESTEQUIOMÉTRICO

Stoichiometric Reactor (REAC) -

General Specifications | More Components

ID: 15

Specify Thermal Mode:

1. Adiabatic

2. Isothermal 573 K

3. Heat Duty -4.62111e+006 kcal/h

Key Component 8 Carbon Monoxide

Frac. Conversion 0.978

Heat of Reaction Btu/lbmol Ideal gas state

Reactor Pressure bar

Calc H of Reac. -17699.8 Btu/lbmol

Stoichiometric Coefficients: 0. Mole base

Methane		Carbon Dioxide	1	Hydrogen	1
Ethane		Hydrogen		Carbon	-1
Propane		Water	-1		

Help Cancel OK

Figura 18 Especificaciones generales en el segundo reactor (REAC)

Fuente: Chemcad vs 7.1.2

2.5 Definición de términos básicos

Chemcad: Es un paquete integrado de software de simulación de procesos químicos, intuitivo que se adapta al flujo de trabajo de la ingeniería química, y sobrealimenta la eficiencia de un ingeniero. Quizás lo más significativo es que continúa evolucionando para satisfacer las necesidades en constante expansión de los ingenieros químicos.

El reactor de equilibrio: Se puede simular múltiples reacciones en este módulo; el usuario especifica la extensión de cada reacción o el coeficiente de equilibrio de reacción asociado con cada reacción. El módulo de simulación luego realiza los balances de energía de la materia

para el reactor. El usuario debe especificar los coeficientes de conversión o equilibrio en todos los casos, excepto el cambio de gas de agua

($\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$) y la metanización.

Reacciones ($\text{CO} + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$); ChemCAD proporciona datos termodinámicos para esas reacciones.

El reactor de Gibbs

Calcula la composición de la mezcla de equilibrio según la composición de alimentación del reactor y las condiciones operativas del reactor (por ejemplo, T y P). Todas las especies químicas contenidas en la lista de componentes pueden participar en la reacción, a menos que se especifique como inerte. El equilibrio se determina minimizando la energía total de Gibbs de la mezcla; Los datos termodinámicos se proporcionan en ChemCAD.

El reactor estequiométrico

Simula una reacción química, dado un conjunto de coeficientes estequiométricos, componentes clave y la fracción de conversión. El reactor puede ser adiabático, isotérmico o tener una entrada o salida específica de calor.

VÁLVULA

Este módulo especifica una caída de presión en una corriente. Se puede especificar la presión de salida, la caída de presión, el punto de rocío o el punto de burbuja de la corriente de salida. Sirve también como separador de fases si se especifica más de una corriente de salida.

El intercambiador de calor: se puede emplear para simular un intercambiador con una o dos entradas. Si sólo se define una entrada, el intercambiador actúa como calentador o enfriador. Cuando se definen dos entradas se puede emplear otros modos operacionales más complejos. (Cruz, F.2010)

El reformado con vapor: ⁽¹⁾ La reforma del gas natural es un proceso de producción avanzado y maduro que se basa en la infraestructura existente de suministro de gasoducto de gas natural. Hoy en día, el 95% del hidrógeno producido en los Estados Unidos se produce mediante el reformado de gas natural en grandes plantas centrales. Esta es una vía tecnológica importante para la producción de hidrógeno a corto plazo.

Usos del intercambiador de calor

Los intercambiadores de calor se emplean para los siguientes usos:

- Elevar la temperatura de un fluido gracias a otro más caliente.
- Refrescar un fluido empleando otro con menor temperatura.
- Llevar al punto de ebullición a un fluido por la acción de un segundo con mayor temperatura.
- Condensar gases utilizando fluidos fríos.
- Llevar a ebullición un determinado fluido mientras se condensa otro gaseoso más caliente

Gas natural: Es una mezcla compleja de hidrocarburos incoloros (sin color), inodoro (sin olor) e insípido (sin sabor), constituido principalmente por el gas metano que en los yacimientos se encuentra en estado gaseoso o asociado con el petróleo.

El hidrógeno: De símbolo químico H, es el elemento más simple en la tierra. Un átomo de hidrógeno tiene solamente un protón y un electrón. El hidrógeno gas es una molécula diatómica - cada molécula tiene dos átomos del hidrógeno (es por eso que el hidrógeno puro se expresa comúnmente como "H₂"). Aunque es abundante en la tierra como elemento, el hidrógeno se combina fácilmente con otros elementos, principalmente carbono y/u oxígeno, y se encuentra casi siempre como parte de alguna otra sustancia, tal como el agua, los hidrocarburos, o los alcoholes

¹ <https://www.energy.gov/.../fuelcells/hydrogen-production-natural>

III HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1 Hipótesis (general y específica, de ser el caso)

3.1.1 Hipótesis general

Es posible la simulación del proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural.

3.1.2 Hipótesis específico

- a) El resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural es igual que el método tradicional.
- b) El resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural es igual que el método tradicional.

3.2 Definición conceptual de las variables

Las variables dependientes e independientes son cuantitativas

Variable dependiente

Y-Simulación del proceso de producción de hidrógeno (reactor equilibrio y reactor estequiométrico)

Variables independientes:

X1-Resultados del proceso de producción de Hidrógeno

X2 Resultado del balance de materia y de energía

.

3.3 Operacionalización de variables (Dimensiones, indicadores, índices, método y técnica)

El diseño para el presente estudio es el siguiente:

La relación funcional es: $Y = f(X_1, X_2,)$

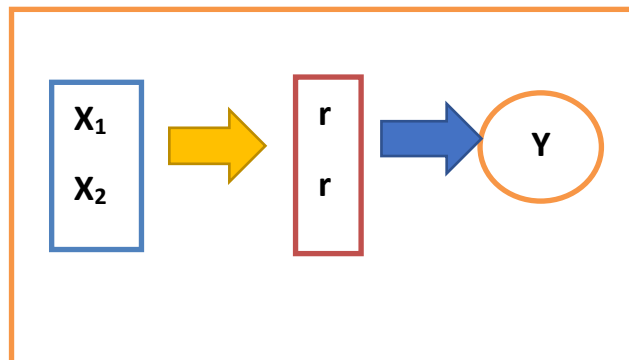
Y-Simulación del proceso de producción de hidrogeno (reactor estequiométrico y reactor de equilibrio) = f (Resultados del proceso de producción de Hidrogeno.

X1-Resultados del proceso de producción de Hidrogeno

X2 Resultado del, balance de materia y de energía

Tabla 4

Operacionalización de variables



Fuente: Elaboración propia

IV METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

4.1 Tipo y diseño de la investigación

Tipo: Por su naturaleza la investigación es tipo aplicada para la producción de hidrogeno.

Diseño: Diseño del diagrama de proceso y selección de equipos para la producción de hidrogeno mediante un simulador

4.2 Método de investigación

El método de la investigación es no experimental longitudinal.

No experimental porque los datos se tomaron tal como ocurrió y luego se analizó de acuerdo con el objetivo de la investigación.

Longitudinal porque se reunió datos sobre la realidad, a lo largo de un conjunto de años.

4.3 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información

4.3.1 Técnicas

La investigación utilizará la técnica de documental, puesto que los datos se obtuvieron del desarrollo de la obtención de hidrogeno con reformado a vapor a partir del gas natural usando el Software Chemcad.

4.3.2 Instrumentos

El principal instrumento fue el simulador Chemcad. Metodología para simular procesos en un simulador secuencial –modular.

- a. Selección de unidades de ingeniería
- b. seleccionar los componentes
- c. hacer un diagrama de procesos
- d. seleccionar modelos termodinámicos
- e. introducir flujos y condiciones a corrientes de entrada

- f. introducir parámetros de diseño o de evaluación
- g. hacer ajustes adicionales(controladores)
- h. interpretar los datos

4.4 Análisis y procesamiento de datos

Si uno tiene los datos disponibles del proceso existente, con el software los resultados son desarrollados por el simulador.

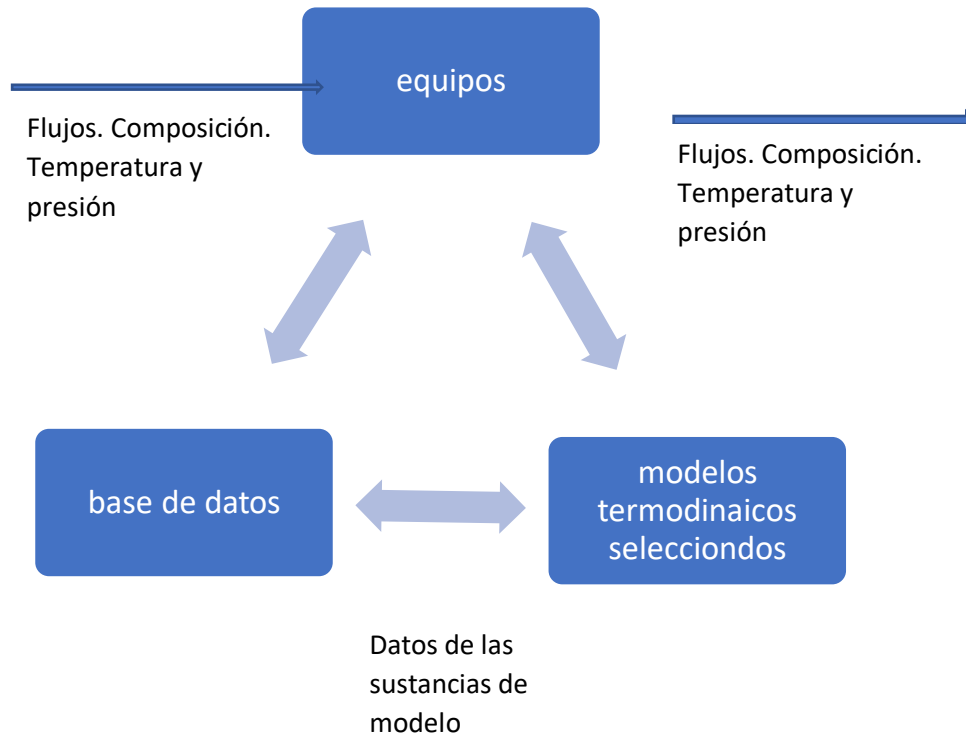


Figura 19 Análisis y procesamiento de datos: fuente elaboración propia.

V RESULTADOS

5.1 Resultados descriptivos

Corrientes de entrada y salida

a). Las siguientes tablas del (5 al 12) muestran los valores de caudal másico de las corrientes de entrada y salida para cada equipo de proceso, obtenidos con el simulador CHEMCAD.

Tabla 5

Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (1 al 4)

Stream No.	1	2	3	4
Molar flow kmol/h	161.1975	161.1975	161.1975	161.1975
Mass flow kg/h	2835.4099	2835.4099	2835.4099	2835.4099
Temp K	298.0000	272.7473	341.1179	334.2460
Pres bar	72.0000	22.5000	22.5000	4.5000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	2354.2400	2354.2400	2354.2400
Ethane	333.9000	333.9000	333.9000	333.9000
Propane	55.2200	55.2200	55.2200	55.2200
Carbon Dioxide	91.4500	91.4500	91.4500	91.4500
Hydrogen Sulfide	0.6000	0.6000	0.6000	0.6000
Water	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 6

Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (5 al 8)

Stream No.	5	6	7	8
Molar flow kmol/h	161.1975	161.1799	161.1799	315.9934
Mass flow kg/h	2835.4099	2834.8101	2834.8101	5692.6201
Temp K	338.9291	338.9291	481.1272	298.0000
Pres bar	4.5000	4.5000	20.0000	1.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	2354.2400	2354.2400	0.0000
Ethane	333.9000	333.9000	333.9000	0.0000
Propane	55.2200	55.2200	55.2200	0.0000
Carbon Dioxide	91.4500	91.4500	91.4500	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.6000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	0.0000	0.0000	0.0000	5692.6201
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 7

Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (9 al 12)

Stream No.	9	10	11	12
Molar flow kmol/h	367.5396	367.5396	367.5396	367.5396
Mass flow kg/h	6621.2246	6621.2246	6621.2246	6621.2246
Temp K	298.0032	298.1909	299.4864	485.5356
Pres bar	1.0000	20.0000	20.0000	20.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	6621.2246	6621.2246	6621.2246	6621.2246
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 8*Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (13 al 16)*

Stream No.	13	14	15	16
Molar flow kmol/h	528.7403	0.0176	840.1166	840.1166
Mass flow kg/h	9456.4102	0.6000	9456.4443	9456.3223
Temp K	474.2074	338.9291	573.0411	1123.0000
Pres bar	20.0000	4.5000	2.0000	17.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	0.0000	273.0918	273.0918
Ethane	333.9000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	55.2200	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	91.4500	0.0000	6854.2104	91.4500
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.6000	0.0000	0.0000
Water	6621.6001	0.0000	1048.6190	3816.8792
Hydrogen	0.0000	0.0000	1223.8324	914.0761
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	56.6907	4360.8247

Tabla 9*Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (17 al 20)*

Stream No.	17	18	19	20
Molar flow kmol/h	840.1166	840.1166	282.7744	282.7744
Mass flow kg/h	9456.3223	9456.4443	5094.1797	5094.1797
Temp K	751.6953	573.0000	372.7559	372.7559
Pres bar	17.0000	17.0000	1.0000	1.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	273.0918	273.0918	0.0000	0.0000
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	91.4500	6854.2104	0.0000	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	3816.8792	1048.6190	5094.1797	5094.1797
Hydrogen	914.0761	1223.8324	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	4360.8247	56.6907	0.0000	0.0000

Tabla 10*Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (21 al 24)*

Stream No.	21	22	23	24
Molar flow kmol/h	282.7744	282.7744	282.7744	788.5704
Mass flow kg/h	5094.1797	5094.1797	5094.1797	8527.8408
Temp K	372.7559	298.0000	372.7559	298.0000
Pres bar	1.0000	1.0000	1.0000	2.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	273.0918
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	0.0000	0.0000	6854.2104
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	5094.1797	5094.1797	5094.1797	120.0144
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	1223.8324
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	56.6907

Tabla 11*Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (25 al 28)*

Stream No.	25	26	27	28
Molar flow kmol/h	51.5462	788.5704	788.5704	214.7347
Mass flow kg/h	928.6046	8527.8408	8527.8408	7369.2065
Temp K	298.0000	407.0583	298.0000	298.0000
Pres bar	2.0000	5.0000	5.0000	1.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	273.0918	273.0918	271.7263
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	6854.2104	6854.2104	6853.8677
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	928.6046	120.0144	120.0144	120.0084
Hydrogen	0.0000	1223.8324	1223.8324	67.3108
Carbon Monoxide	0.0000	56.6907	56.6907	56.2939

Tabla 12*Simulación: equilibrio-Propiedades de la Corrientes (29 al 31)*

Stream No.	29	30	31
Molar flow kmol/h	573.8358	573.8358	573.8358
Mass flow kg/h	1158.6328	1158.6328	1158.6328
Temp K	298.0000	298.0000	832.0771
Pres bar	1.0000	20.0000	20.0000
Flow rates in kg/h			
Methane	1.3655	1.3655	1.3655
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.3430	0.3430	0.3430
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000
Water	0.0060	0.0060	0.0060
Hydrogen	1156.5216	1156.5216	1156.5216
Carbon Monoxide	0.3968	0.3968	0.3968

b). Las siguientes tablas del (13 al 20) muestran los valores de caudal másico de las corrientes de entrada y salida para cada equipo de proceso, obtenidos con el simulador CHEMCAD.

Tabla 13

Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (1 al 4)

Stream No.	1	2	3	4
Molar flow kmol/h	161.1975	161.1975	161.1975	161.1975
Mass flow kg/h	2835.4099	2835.4099	2835.4099	2835.4099
Temp K	298.0000	272.7473	341.1179	334.2460
Pres bar	72.0000	22.5000	22.5000	4.5000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	2354.2400	2354.2400	2354.2400
Ethane	333.9000	333.9000	333.9000	333.9000
Propane	55.2200	55.2200	55.2200	55.2200
Carbon Dioxide	91.4500	91.4500	91.4500	91.4500
Hydrogen Sulfide	0.6000	0.6000	0.6000	0.6000
Water	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 14

Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (5 al 8)

Stream No.	5	6	7	8
Molar flow kmol/h	161.1975	161.1799	161.1799	315.9934
Mass flow kg/h	2835.4099	2834.8101	2834.8101	5692.6201
Temp K	338.9291	338.9291	481.1272	298.0000
Pres bar	4.5000	4.5000	20.0000	1.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	2354.2400	2354.2400	0.0000
Ethane	333.9000	333.9000	333.9000	0.0000
Propane	55.2200	55.2200	55.2200	0.0000
Carbon Dioxide	91.4500	91.4500	91.4500	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.6000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	0.0000	0.0000	0.0000	5692.6201
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 15

Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (9 al 12)

Stream No.	9	10	11	12
Molar flow kmol/h	367.5576	367.5576	367.5576	367.5576
Mass flow kg/h	6621.5498	6621.5498	6621.5498	6621.5498
Temp K	296.1778	296.3178	334.5895	485.5356
Pres bar	1.0000	20.0000	20.0000	20.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	6621.5498	6621.5498	6621.5498	6621.5498
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 16*Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (13 al 16)*

Stream No.	13	14	15	16
Molar flow kmol/h	528.7698	0.0176	751.9210	803.4852
Mass flow kg/h	9456.9414	0.6000	8528.0322	9456.8633
Temp K	474.2076	338.9291	298.0000	1123.0000
Pres bar	20.0000	4.5000	2.0000	17.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	0.0000	567.1237	567.1237
Ethane	333.9000	0.0000	0.0405	0.0405
Propane	55.2200	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	91.4500	0.0000	5479.3682	91.4500
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.6000	0.0000	0.0000
Water	6622.1313	0.0000	1013.2191	4147.6328
Hydrogen	0.0000	0.0000	1050.0114	803.2273
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	418.2685	3847.3892

Tabla 17*Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (17 al 20)*

Stream No.	17	18	19	20
Molar flow kmol/h	803.4852	803.4852	282.7744	282.7744
Mass flow kg/h	9456.8633	9456.9619	5094.1797	5094.1797
Temp K	748.6851	573.0000	372.7559	372.7559
Pres bar	17.0000	17.0000	1.0000	1.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	567.1237	567.1237	0.0000	0.0000
Ethane	0.0405	0.0405	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	91.4500	5479.3682	0.0000	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	4147.6328	1942.1489	5094.1797	5094.1797
Hydrogen	803.2273	1050.0114	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	3847.3892	418.2685	0.0000	0.0000

Tabla 18*Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (21 al 24)*

Stream No.	21	22	23	24
Molar flow kmol/h	282.7744	282.7744	282.7744	803.4852
Mass flow kg/h	5094.1797	5094.1797	5094.1797	9456.9619
Temp K	372.7559	298.0000	372.7559	572.7733
Pres bar	1.0000	1.0000	1.0000	2.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	567.1237
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0405
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	0.0000	0.0000	5479.3682
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	5094.1797	5094.1797	5094.1797	1942.1489
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	1050.0114
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	418.2685

Tabla 19*Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (25 al 28)*

Stream No.	25	26	27	28
Molar flow kmol/h	51.5642	751.9210	751.9210	256.3572
Mass flow kg/h	928.9299	8528.0322	8528.0322	7500.6982
Temp K	285.0000	298.0000	298.0000	298.0000
Pres bar	2.0000	2.0000	2.0000	1.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	567.1237	567.1237	566.8401
Ethane	0.0000	0.0405	0.0405	0.0405
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	5479.3682	5479.3682	5451.9712
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	928.9299	1013.2192	1013.2192	1013.1685
Hydrogen	0.0000	1050.0114	1050.0114	52.5006
Carbon Monoxide	0.0000	418.2685	418.2685	416.1772

Tabla 20*Simulación: GIBBS –propiedades de las corrientes (29 al 31)*

Stream No.	29	30	31
Stream No.	29	30	31
Molar flow kmol/h	495.5638	495.5638	495.5638
Mass flow kg/h	1027.3333	1027.3333	1027.3333
Temp K	298.0000	298.0000	831.6277
Pres bar	1.0000	20.0000	20.0000
Flow rates in kg/h			
Methane	0.2836	0.2836	0.2836
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	27.3968	27.3968	27.3968
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000
Water	0.0507	0.0507	0.0507
Hydrogen	997.5109	997.5109	997.5109
Carbon Monoxide	2.0913	2.0913	2.0913

c). Las siguientes tablas del (21 al 28) muestran los valores de caudal másico de las corrientes de entrada y salida para cada equipo de proceso, obtenidos con el simulador CHEMCAD.

Tabla 21

Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (1 al 4)

Stream No.	1	2	3	4
Molar flow kmol/h	161.1975	161.1975	161.1975	161.1975
Mass flow kg/h	2835.4099	2835.4099	2835.4099	2835.4099
Temp K	298.0000	272.7470	310.8013	302.2370
Pres bar	72.0000	22.5000	22.5000	4.5000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	2354.2400	2354.2400	2354.2400
Ethane	333.9000	333.9000	333.9000	333.9000
Propane	55.2200	55.2200	55.2200	55.2200
Carbon Dioxide	91.4500	91.4500	91.4500	91.4500
Hydrogen Sulfide	0.6000	0.6000	0.6000	0.6000
Water	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 22

Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (5 al 8)

Stream No.	5	6	7	8
Molar flow kmol/h	161.1975	161.1799	161.1799	315.9934
Mass flow kg/h	2835.4099	2834.8101	2834.8101	5692.6201
Temp K	317.8157	317.8157	456.3601	298.0000
Pres bar	4.5000	4.5000	20.0000	1.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	2354.2400	2354.2400	0.0000
Ethane	333.9000	333.9000	333.9000	0.0000
Propane	55.2200	55.2200	55.2200	0.0000
Carbon Dioxide	91.4500	91.4500	91.4500	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.6000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	0.0000	0.0000	0.0000	5692.6201
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 23

Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (9 al 12)

Stream No.	9	10	11	12
Molar flow kmol/h	367.5601	367.5601	367.5601	367.5601
Mass flow kg/h	6621.5947	6621.5947	6621.5947	6621.5947
Temp K	296.1774	296.3175	312.4981	482.9570
Pres bar	1.0000	20.0000	20.0000	19.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	6621.5947	6621.5947	6621.5947	6621.5947
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Tabla 24*Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (13 al 16)*

Stream No.	13	14	15	16
Molar flow kmol/h	528.7400	0.0176	788.1863	788.1863
Mass flow kg/h	9456.4053	0.6000	9456.4277	9456.3271
Temp K	467.8391	317.8157	572.7068	1123.0000
Pres bar	20.0000	4.5000	5.0000	20.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	2354.2400	0.0000	273.0918	273.0918
Ethane	333.9000	0.0000	333.9000	333.9000
Propane	55.2200	0.0000	55.2200	55.2200
Carbon Dioxide	91.4500	0.0000	5674.9644	91.4500
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.6000	0.0000	0.0000
Water	6621.5947	0.0000	1999.0833	4284.6323
Hydrogen	0.0000	0.0000	1040.2306	784.4877
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	79.9382	3633.5452

Tabla 25*Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (17 al 20)*

Stream No.	17	18	19	20
Molar flow kmol/h	788.1863	788.1863	23.7186	23.7186
Mass flow kg/h	9456.3271	9456.4277	427.2900	427.2900
Temp K	1092.8513	573.0000	372.7559	372.7559
Pres bar	20.0000	20.0000	1.0000	1.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	273.0918	273.0918	0.0000	0.0000
Ethane	333.9000	333.9000	0.0000	0.0000
Propane	55.2200	55.2200	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	91.4500	5674.9644	0.0000	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	4284.6323	1999.0833	427.2900	427.2900
Hydrogen	784.4877	1040.2306	0.0000	0.0000
Carbon Monoxide	3633.5452	79.9382	0.0000	0.0000

Tabla 26*Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (21 al 24)*

Stream No.	21	22	23	24
Molar flow kmol/h	23.7186	23.7186	23.7186	736.6195
Mass flow kg/h	427.2900	427.2900	427.2900	8527.4541
Temp K	372.7559	298.0000	355.9771	298.0000
Pres bar	1.0000	1.0000	1.0000	2.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	0.0000	0.0000	273.0918
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000	333.9000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000	55.2200
Carbon Dioxide	0.0000	0.0000	0.0000	5674.9644
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	427.2900	427.2900	427.2900	1070.1093
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	1040.2306
Carbon Monoxide	0.0000	0.0000	0.0000	79.9382

Tabla 27*Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (25 al 28)*

Stream No.	25	26	27	28
Molar flow kmol/h	51.5667	736.6196	736.6196	223.1384
Mass flow kg/h	928.9740	8527.4541	8527.4541	7491.8887
Temp K	285.0000	298.0000	298.0000	298.0000
Pres bar	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000
Flow rates in kg/h				
Methane	0.0000	273.0918	273.0918	272.9552
Ethane	0.0000	333.9000	333.9000	333.9000
Propane	0.0000	55.2200	55.2200	55.2200
Carbon Dioxide	0.0000	5674.9644	5674.9644	5674.9644
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Water	928.9740	1070.1095	1070.1095	1070.1095
Hydrogen	0.0000	1040.2306	1040.2306	5.2012
Carbon Monoxide	0.0000	79.9382	79.9382	79.5385

Tabla 28*Simulación: estequiométrico –propiedades de las corrientes (29 al 31)*

Stream No.	29	30	31
Molar flow kmol/h	513.4815	513.4813	513.4813
Mass flow kg/h	1035.5662	1035.5657	1035.5657
Temp K	298.0000	298.0000	666.6339
Pres bar	2.0000	20.0000	20.0000
Flow rates in kg/h			
Methane	0.1365	0.1365	0.1365
Ethane	0.0000	0.0000	0.0000
Propane	0.0000	0.0000	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	0.0000	0.0000
Hydrogen Sulfide	0.0000	0.0000	0.0000
Water	0.0000	0.0000	0.0000
Hydrogen	1035.0300	1035.0294	1035.0294
Carbon Monoxide	0.3997	0.3997	0.3997

5.2 Resultados inferenciales

a). Modelo para solucionar problemas:



Figura:20 Diagrama de modelo

b). En cualquier proceso de producción de hidrógeno hay entradas (materias primas y energía) y salidas (hidrógeno, subproductos y pérdidas de energía). Tal como se ve en la siguiente figura 21.

Esquema de proceso:

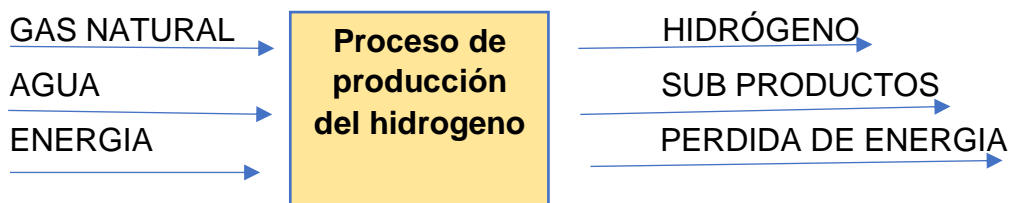


Figura 21 entrada y salida de proceso de producción de hidrógeno.

Tabla 29

Entrada:

COMPUESTOS	FLUJO(Kg/h)
Gas natural	2835.42
Agua	5692.62

Fuente: software chemcad

Tabla 30

Salida:

COMPUESTOS	FLUJO(Kg/h)
Metano	1.36
Agua	0.00
Hidrógeno	1153.23
CO	0.38

Fuente: software chemcad

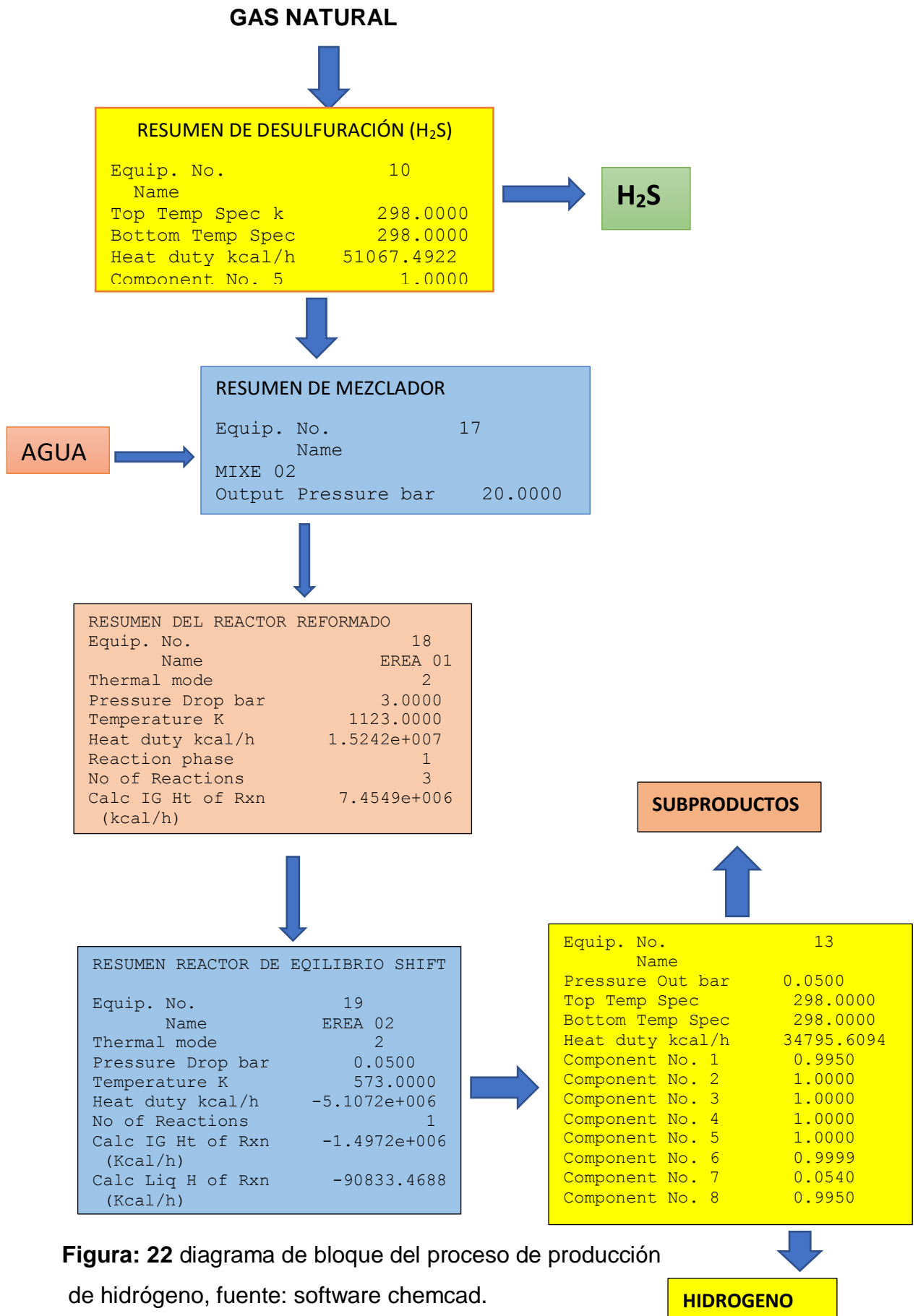


Figura: 22 diagrama de bloque del proceso de producción de hidrógeno, fuente: software chemcad.

c). Comparación de la composición de corriente de salida en las diferentes unidades de operación (equipos del proceso). Que se muestran a partir de tabla 31 hasta a la tabla 42.

Tabla 31

Composición de corriente de salida en la alimentación del gas (equipo1)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	2354.24	147.14	2354.24	147.14	2354.24	147.14	2354.24	147.14
Etano	333.90	11.13	333.90	11.13	333.90	11.13	333.90	11.13
Propano	55.22	1.25	55.22	1.25	55.22	1.25	55.22	1.25
CO₂	91.45	2.08	91.45	2.08	91.45	2.08	91.45	2.08
H₂S	0.06	0.02	0.06	0.02	0.06	0.02	0.06	0.02
Hidrogeno	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Agua	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Total	2835.42	161.62	2835.42	161.62	2835.42	161.62	2835.42	161.62

Tabla 32

Composición de corriente de salida en la alimentación agua (corriente 8)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Agua	5692.62	316.26	5692.62	316.26	5692.62	316.26	5692.62	316.26
Total	5692.62	316.26	5692.62	316.26	5692.62	316.26	5692.62	316.26

Tabla 33

Composición de corriente de salida de la bomba (corriente 10)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Agua	6621.31	367.85	6621.31	367.85	6621.31	367.85	6621.31	367.85
Total	6621.31	367.85	6621.31	367.85	6621.31	367.85	6621.31	367.85

Tabla 34

Composición de corriente de salida en el separador (corriente 32)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
H₂S	0.6	0.02	0.6	0.02	0.6	0.02	0.6	0.02
Total	0.6	0.02	0.6	0.02	0.6	0.02	0.6	0.02

Tabla 35Composición de corriente de salida en el equipo de separador H₂S (corriente 6)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	2354.24	147.14	2354.24	147.14	2354.24	147.14	2354.24	147.14
Etano	333.90	11.13	333.90	11.13	333.90	11.13	333.90	11.13
Propano	55.22	1.25	55.22	1.25	55.22	1.25	55.22	1.25
CO₂	91.45	2.08	91.45	2.08	91.45	2.08	91.45	2.08
H₂S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Hidrogeno	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Agua	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Total	2834.81	161.60	2834.81	161.60	2834.81	161.60	2834.81	161.60

Tabla 36

Composición de corriente de salida en el equipo del mezclado (corriente 14)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	2354.24	147.14	2354.24	147.14	2354.24	147.14	2354.24	147.14
Etano	333.90	11.13	333.90	11.13	333.90	11.13	333.90	11.13
Propano	55.22	1.25	55.22	1.25	55.22	1.25	55.22	1.25
CO ₂	91.45	2.08	91.45	2.08	91.45	2.08	91.45	2.08
H ₂ S	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Hidrogeno	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Agua	6621.31	367.85	6621.60	367.60	6621.60	367.60	6621.60	367.60
CO	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Total	9456.13	529.15	9456.41	528.74	9456.13	528.76	9456.41	528.74

Tabla 37

Composición de corriente de salida en el reactor reformador (corriente 15)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	272.38	17.02	273.09		597.35		273.09	
Etano	0.00	0.00	0.00		0.04		333.90	
Propano	0.00	0.00	0.00		3.14		55.22	
CO₂	1549.69	35.22	91.45		1748.32		91.45	
Hidrogeno	973.34	486.67	914.08		867.72		784.49	
Agua	3214.21	178.57	3816.88		3543.47		4284.63	
CO	3043.34	123.00	4360.82		2740.11		3633.54	
Total	9453.58	840.48	9456.32	840.12	9501.01	803.48	9456.33	788.19

Tabla 38*Composición de corriente de salida en el reactor shift (corriente 17)*

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	272.38	17.02	273.09		597.35		273.09	
Etano	0.00	0.00	0.00		0.04		333.9	
Propano	0.00	0.00	0.00		0.00		55.22	
CO₂	6842.56	155.51	6854.21		5439.87		5674.96	
Agua	1048.95	58.27	1048.62		2036.38		1999.08	
Hidrogeno	1213.93	606.96	1223.83		1036.81		1040.23	
CO	75.77	2.71	56.69		390.64		79.93	
Total	9453.58	840.48	9456.44	840.12	9501.08	803.49	9456.43	788.19

Tabla 39*Composición de corriente de salida en el separador (corriente 19)*

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	272.38	17.02	273.10		567.12		273.09	
Etano	0.00	0.00	0.00		0.04		333.90	
Propano	0.00	0.00	0.00		0.00		55.22	
CO₂	6842.56	155.51	6792.54		5479.37		5674.00	
Agua	120.25	6.68	144.12		1013.22		1994.08	
Hidrogeno	1213.93	606.96	1221.01		1050.01		1040.23	
CO	75.77	2.71	95.94		418.27		79.94	
Total	8524.88	788.89	8526.70	788.51	8528.03	751.92	9456.43	788.19

Tabla 40*Composición de corriente de salida en el separador (corriente 37)*

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Agua	928.70	51.59	6621.31	367.85	6621.31	367.85	6621.31	367.85
Total	928.70	51.59	6621.31	367.85	6621.31	367.85	6621.31	367.85

Tabla 41*Composición de corriente de salida en la torre separador 02 (corriente 22)*

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	1.36	0.085	1.3655		0.30		0.14	
Etano	0.00	0.00	0.00		0.00		0.00	
Propano	0.00	0.00	0.00		0.00		0.00	
CO₂	0.00	0.00	0.00		27.20		0.00	
Agua	0.00	0.00	0.00		0.05		0.00	
Hidrogeno	1153.23	576.62	1155.07		984.51		1035.03	
CO	0.38	0.014	0.48		1.95		0.40	
Total	1154.97	788.89	1156.93		1014.47	495.56	1035.57	513.48

Tabla 42

Composición de corriente de salida en la torre separador 02 (corriente 13)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	271.02	16.94	271.73		566.84		272.96	
Etano	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Propano	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO₂	6842.56	155.51	6742.54		5451.97		5674.96	
Agua	120.25	6.68	144.11		1013.17		1070.11	
Hidrogeno	60.70	30.35	65.95		52.50		5.20	
CO	75.39	2.11	95.46		416.18		79.54	
Total	7369.91	212.00	7369.77	215.39	7500.70	256.36	7491.89	223.14

d). RESULTADOS DEL ANÁLISIS DE SIMULACIÓN Y SENSIBILIDAD

Diagrama de las variables de procesos de obtención del hidrógeno se realizaron los modelados: para la válvula, compresora y horno de reformado con el software CHEMCAD, comparando los resultados obtenidos con los datos experimentales.

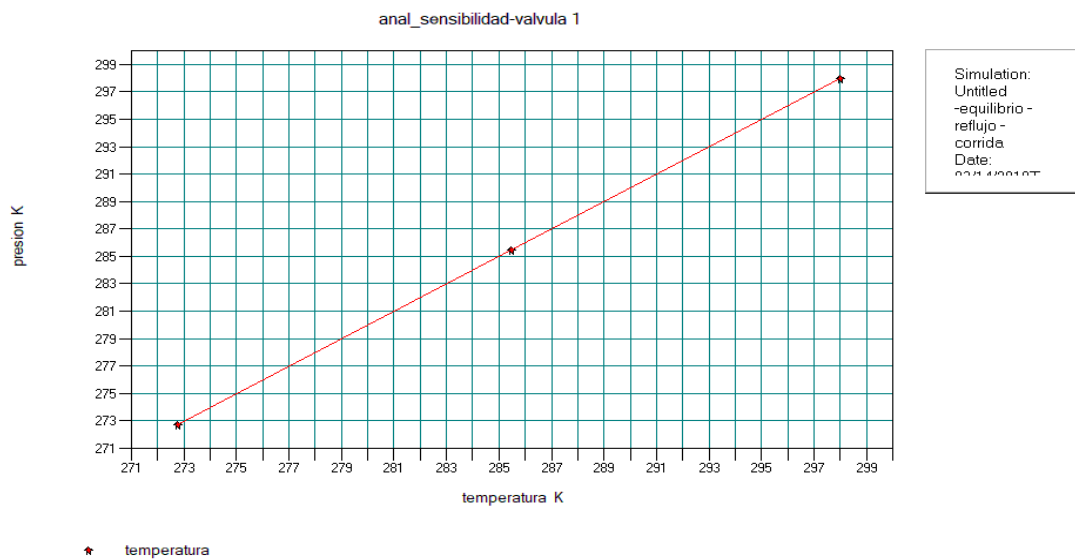


Figura 23: En este caso cuando la presión disminuye la temperatura también disminuye por lo tanto la temperatura optima es de 272.75 K

Fuente: software chemcad

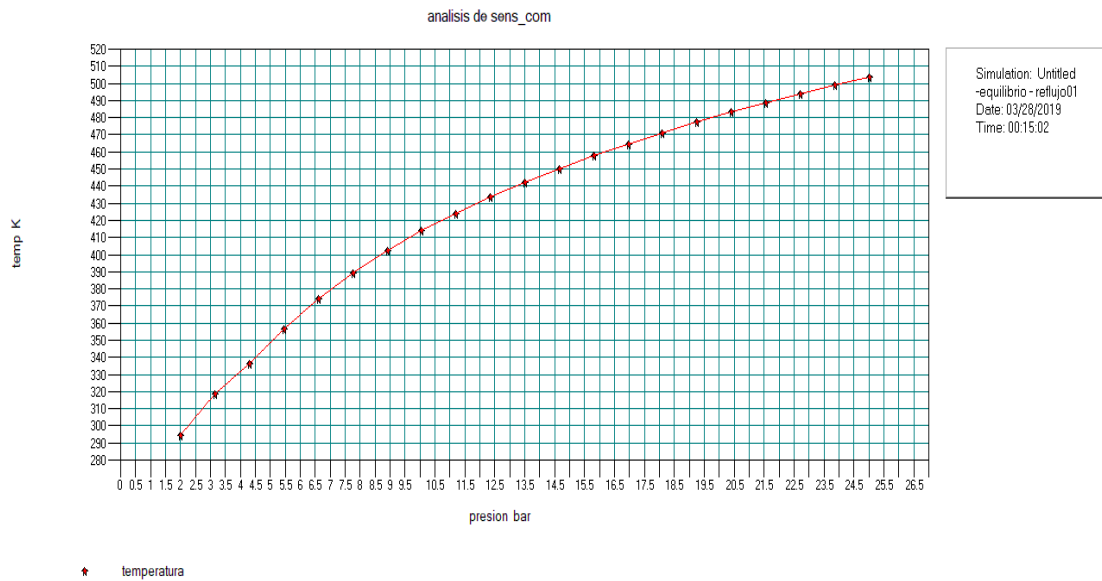


Figura 24: En la compresora se observa cuando la presión aumenta la temperatura aumenta. Fuente: software chemcad

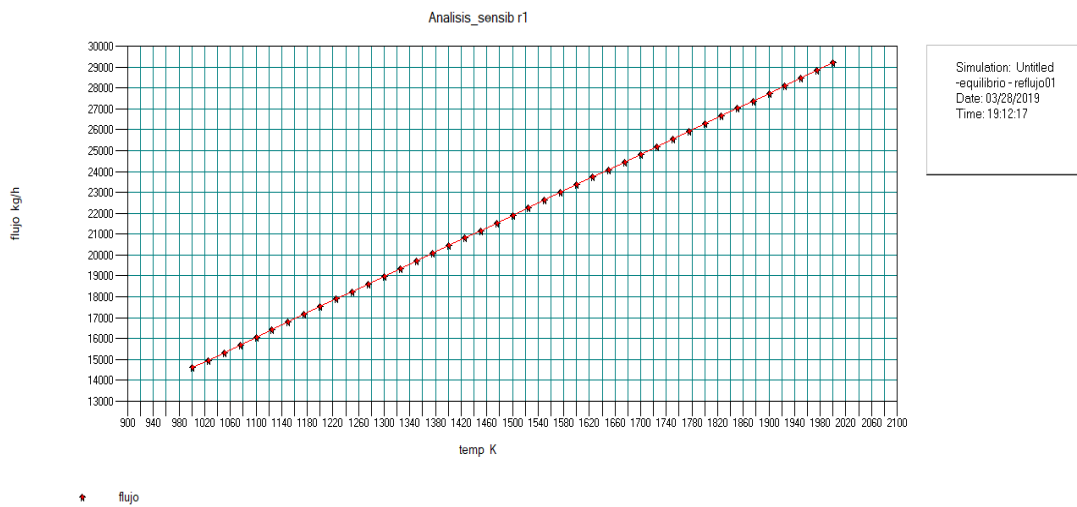


Figura 25: Temperatura: definitivamente a temperaturas mayores favorece el equilibrio de la reacción de izquierda a derecha y también la velocidad de reacción como se puede ver en la gráfica para el reactor de reformador.

Fuente: software chemcad

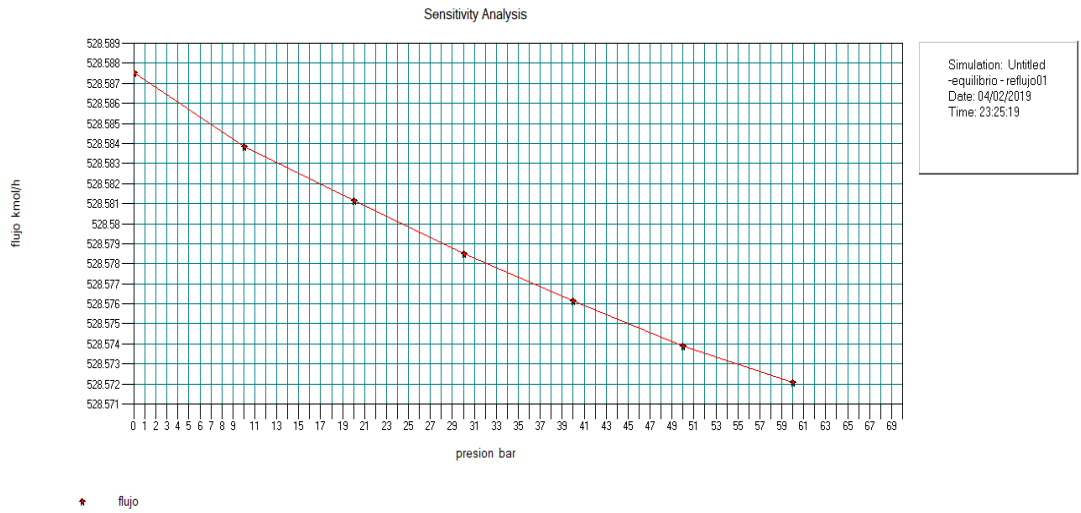


Figura 26: Presión vs flujos se observa disminución que a mayor presión disminuye el flujo

Fuente: software chemcad

VI DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1 Contratación y demostración de la hipótesis con los resultados

6.1.1 Contratación de la primera hipótesis secundaria

a) Formulación de las hipótesis

H₀: El resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural es igual que el método tradicional.

$$u_1 - u_2 = 0$$

H₁: El resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural no es igual que el método tradicional.

$$u_1 - u_2 \neq 0$$

El propósito de la prueba de hipótesis es determinar si existe diferencia significativa entre las medias de los grupos experimental y de control con base en evidencias muestrales. Teniendo en cuenta que H₁ se anticipa a la dirección de la prueba, deberá realizarse una prueba bilateral.

b) Nivel de significación

Asumimos el nivel de significación del 5%. Dado que la desviación estándar de la diferencia de medias de la población se calcula en base a la desviación estándar de la diferencia de medias de la muestra.

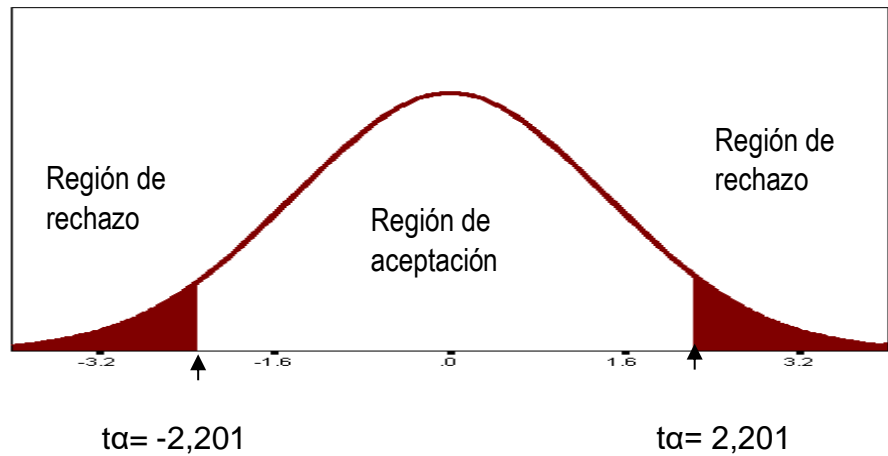
c) Estadística de prueba

La estadística adecuada al problema en la prueba de hipótesis es la Distribución t de student porque el tamaño de las muestras es menor que 30. La fórmula corresponde a la diferencia de medias.

d) Valor crítico de la estadística de prueba

En la tabla de Distribución t de Student para la prueba de dos colas con un nivel de significación de $\alpha = 5\%$, con 11 grados de libertad el estadístico $t_{\alpha} = 2.201$

GRAFICO N° 1 Curva normal con el valor crítico



e) Valor de la estadística de prueba

$$t_{\text{calculado}} = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{s_1^2(n_1 - 1) + s_2^2(n_2 - 1)}{n_1 + n_2 - 2} \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)}}$$

$$t_{\text{calculado}} = \frac{1154,97 - 1096,25}{\sqrt{\frac{65,89^2(11) + 60,68^2(11)}{22} \left(\frac{1}{11} + \frac{1}{11}\right)}} = 2,17$$

f) Toma de decisiones

Como el valor de la estadística de prueba $t_{\text{calculado}} = 2,17$ se ubica en la región de aceptación, se acepta H_0 y se rechaza H_1 .

De esta manera la Hipótesis:

“El resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural es igual que el método tradicional.

6.1.2 Contrastación de la segunda hipótesis secundaria

a) Formulación de las hipótesis

H_0 : El resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural es igual que el método tradicional.

$$u_1 - u_2 = 0$$

H_1 : El resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural no es igual que el método tradicional.

$$u_1 - u_2 \neq 0$$

El propósito de la prueba de hipótesis es determinar si existe diferencia significativa entre las medias de los grupos experimental y de control con base en evidencias muestrales. Teniendo en cuenta que H_1 se anticipa a la dirección de la prueba, deberá realizarse una prueba bilateral.

b) Nivel de significación

Asumimos el nivel de significación del 5%. Dado que la desviación estándar de la diferencia de medias de la población se calcula en base a la desviación estándar de la diferencia de medias de la muestra.

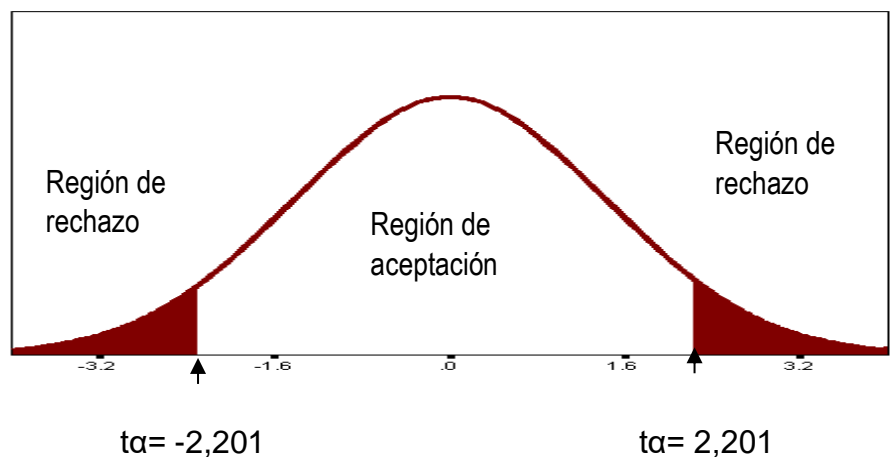
c) Estadística de prueba

La estadística adecuada al problema en la prueba de hipótesis es la Distribución t de student porque el tamaño de las muestras es menor que 30. La fórmula corresponde a la diferencia de medias.

d) Valor crítico de la estadística de prueba

En la tabla de Distribución t de Student para la prueba de dos colas con un nivel de significación de $\alpha = 5\%$, con 11 grados de libertad el estadístico $t_{\alpha} = 2.201$

GRAFICO N° 2 Curva normal con el valor crítico



e) Valor de la estadística de prueba

$$t_{\text{calculado}} = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{s_1^2(n_1 - 1) + s_2^2(n_2 - 1)}{n_1 + n_2 - 2} \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)}}$$

$$t_{\text{calculado}} = \frac{5360,54 - 5863,76}{\sqrt{\frac{3474,22^2(11) + 3257,82^2(11)}{22} \left(\frac{1}{11} + \frac{1}{11}\right)}} = -0,3504$$

f) Toma de decisiones

Como el valor de la estadística de prueba $t_{\text{calculado}} = -0,3504$ se ubica en la región de aceptación, se acepta H_0 y se rechaza H_1 .

De esta manera la Hipótesis:

“El resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural es igual que el método tradicional”

Como las dos hipótesis secundarias han sido verificadas, la hipótesis general:

“El uso de simuladores con software de ingeniería en el proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural permite obtener los mismos resultados que método tradicional”.

Queda verificada.

6.2 Contratación de los resultados con otros estudios similares

1. La composición de productos, balances de materia y balances de energía se comparan con TALFOURIS SILVA (Tesis) y mientras IMRAM ULLAH KHAN la composición de productos, balances de materia y balances de energía se compara con NAZIR (tesis)
2. Los procesos de producción de hidrógeno está diseñado en CHEMCAD de tres maneras diferentes. Los reactores de equilibrio se usan en el primer proceso figura 4, los reactores de GIBBS se usan en el segundo proceso figura 11, y el reactor estequiométrico se usa en el tercer proceso figura 16; todos los procesos se comparan con TALFOURIS SILVA (Tesis). IMRAM ULLAH KHAN (tesis) el proceso de producción de hidrógeno está diseñado en CHEMCAD en dos maneras diferentes, los reactores de equilibrio y GIBBS.
3. El trabajo de tesis teórico se compara con los resultados de la tabla 43.
4. Los valores de la temperatura son casi las mismas en los tres procesos cuando se comparan los cálculos con CHEMCAD con TALFOURIS SILVA (Tesis). Como para IMRAM ULLAH KHAN (tesis).
5. En la producción de hidrógeno. Los cálculos realizados con simulador CHEMCAD, los reactores de equilibrio tienen datos similares con los cálculos de TALFOURIS SILVA (Tesis) como se muestra en la tabla 43. IMRAM ULLAH KHAN Los cálculos realizados con simulador CHEMCAD, los reactores de equilibrio tienen datos similares con los cálculos de Nazir (Tesis).

Tabla 43*Resultados de la producción de hidrógeno*

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS) Kg/h	REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD) Kg/h	REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD) Kg/h	REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD) Kg/h
Metano	1.36	1.3655	0.30	0.14
Etano	0.00	0.00	0.00	0.00
Propano	0.00	0.00	0.00	0.00
CO₂	0.00	0.00	27.20	0.00
Agua	0.00	0.00	0.05	0.00
Hidrogeno	1153.23	1155.07	984.51	1035.03
CO	0.38	0.48	1.95	0.40
Total	1154.97	1156.93	1014.47	1035.57

6. La producción de hidrógeno después de reactor Shift (equipo 19) es casi la misma en con la TALFOURIS SILVA (Tesis).

Las composiciones de los productos, balances de materiales y balances de energía se comparan con Nazir son similares.

6.3 Responsabilidad ética de acuerdo a los reglamentos vigentes (el autor de la investigación se responsabiliza por la información emitida en la tesis)

Nosotros los investigadores somos responsables de los resultados obtenidos y la información obtenida de otros autores mencionados en la literatura afín.

CONCLUSIONES

1. Se ha usado el simulador CHEMCAD con software de ingeniería en el proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural corroborado los cálculos de diseño de los procesos realizados por el Método Tradicional manual.
2. Los resultados del Simulador Chemcad indican que el hidrogeno se obtiene en la corriente inferior de la columna de separación (adsortor) equipo N° 13 con una pureza de alrededor del 99.5%, el metano y monóxido de carbón son las principales impurezas sobre ella (~ 0.05%). como se muestra en la tabla 44.

Tabla 44 Datos finales de separación (adsortor)

Componente	TALFOURIS SILVA (TESIS)		REACTOR DE EQUILIBRIO (CHEMCAD)		REACTOR DE GIBBS (CHEMCAD)		REACTOR ESTEQUIOMETRICO (CHEMCAD)	
	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h	Kg/h	Kmol/h
Metano	1.36	0.085	1.3655		0.30		0.14	
Etano	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Propano	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO ₂	0.00	0.00	0.00	0.00	27.20	0.00	0.00	0.00
Agua	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
Hidrogeno	1153.23	576.62	1155.07	0.00	984.51	0.00	1035.03	0.00
CO	0.38	0.014	0.48	0.00	1.95	0.00	0.40	0.00
Total	1154.97	788.89	1156.93		1014.47	495.56	1035.57	513.48

3. Los resultados del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural son facilitados y resueltos en un tiempo mínimo usando el Simulador con software de ingeniería en el proceso de producción de hidrógeno.

RECOMENDACIONES:

1. Se recomienda el uso del simulador CHEMCAD para simular con éxito el proceso de producción de hidrógeno a través de la simulación de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural, dado que nos permite ahorrar tiempo y dinero.
Se recomienda el uso de dos reactores en tres diagramas de flujo diferentes, se observa que los reactores de equilibrio dan muy buenos resultados de la producción de hidrógeno en comparación con los reactores de Gibbs y reactor estequiométrico.
2. Se recomienda en caso de que se conozcan factores de conversión y se involucran más de una reacción química se usa un reactor de equilibrio y en el caso de que no se conoce el factor de conversión de la reacción química, se usa el reactor de Gibbs porque ajusta la conversión por sí mismo según las concentraciones de equilibrio de los compuestos
3. Se recomienda en el caso del intercambiador de calor que requiere la mayor cantidad de vapor es HTRS 02 con 9055 kg / h. El intercambiador de calor que solicita la mayor cantidad de agua de refrigeración es HTRX 03, con 6621.2 kg / h.
4. Se recomienda en los procesos de reformado de metano con vapor (SMR), se utilicen catalizadores que mejoren sus actividades usando metales activos diferentes al níquel, como modificaciones en las estructuras de soporte mostrando favorecimiento en el desarrollo de catalizadores novedosos para la industria.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Balat, M., Balat, N. (2009). Political, economic and environmental impacts of biomass-based hydrogen. Int. J. Hydrogen energy.

Ball, M. Wietschel, M. (2009). The future of hydrogen-opportunities and challenges. int. J. Hydrogen Energy, 615-627.

Bryant, W. (1993). Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data. Industrial and Engineerign Chemistry, 820-823.

Cáceres, L. (2000) El Gas Natural. 2ª ed., Lima (Perú), Ministerio de Energía y Minas.

Calderón Y. Hernández M. y otros (2014). Simulación de la etapa de reformación del metano para la producción de hidrógeno utilizando el sotware HYSYS.

Cheekatamarla, P. E. (2005). Selective low temperature removal of carbon monoxide from hudrogen rich fuels over Cu-Ce-al catalusts. J. Power sourcfes.

Cruz, C. F. (2010). Diseño de Proceso 2 Verano .

Dunn, S. (2002) Hydrogen futures: toward a sustainable energy system. Int. J. Hydrogen Energy, 235-264.

Duran, M. (1992). Gestion de calidad. Madrid, España: Ediciones Diaz de Santos.

Gas Natural, D. (21 de agosto de 2002). Características del Gas natural, en: Hl storia del gas. Recuperado el 11 de febrero de 26, de

[http://www.gasnaturaldistribucion.com/es/conocenos/quienes+somos/historia+d
el+gas/1297104955871/caracteristicas+del+gas+natura.ml](http://www.gasnaturaldistribucion.com/es/conocenos/quienes+somos/historia+d
el+gas/1297104955871/caracteristicas+del+gas+natura.ml)

Hongfang M, Mingchuan Z., Weiyong Y., Dingye F. (2016). Two-Dimensional Modeling Of a Plant-scale Fixed-bed Reactor For Hydrogen Production From Metanol Steam Reforming.

Holladay, D., Hu, J. King, L, Wang, Y. (2009) An overviwe of hydrogen production techologies. Catal. Today.

Hydrogen Data Book, (2011) Hydrogen Analysis Research ÇCenter of the USA Department of energy (datos del documento: "Worldwide and US total Hydrogen Production")

Iparraguirre. (2007). El hidrógeno a partir del gas natural uso en la industria alimenticia.

Imran Ullah Khan (2011)chemcad as a tool when teaching chemical engineering.

Jones, D. P. (2006). Handbook of Petroleum Processing. 1ª edición. Dordrecht: Springer.

Laborde, A., Cols A. y otros (2006) Producción y purificación de hidrógeno a partri de bioetanol y su aplicación en pilas de combustible. 1ª Ed. Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo (CYTED), Argentina. ISBN 9789870517955.

Laborde, M.A., (2010). Producción y purificación de hidrógeno a partir de bioetanol y su aplicación en pilas de combustible. 1ª ed. Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo (CYTED),. Buenos Aires: Argentina.

Lennetech. (13 de abril de 2012). Hidrógeno. Recuperado el 27 de febrero de 2015, de

<http://www.lennetech.es/periodica/elementos/h.htm#Nombre#ixzz3SJhmBbMx>

Lorente E. Peña, J.A., Herguido, J. (2009) Separation and storage of hydrogen by steam-iron process: effect of added metals upon hydrogen release and solid stability. J. Power Sources, 224-229.

Ministerio de agricultura, a. y. (12 de abril de 2012). Recuperado el 27 de febrero de 2015, de <http://www.prtres.es/CO2-Dioxido-de-carbono,15590,11,2007.html>

Motar R., Henley E. (2017). CHEMSTATION: Durante más de 20 años Chemstatiostn y su software de simulación de procesos CHEMCAD.

Nazir, F. (2003). Production of hydrogen by steam reforming.

Perry RH, G. D. (2014). Perry's Chemical Engineers 'Handbook. Denver, EEUU: Mac Graw Hill.

Sosa M., Silveria J., Fushimi A. (2004). Reformado a Vapor de Gas Natural para la Obtención de Hidrógeno-Análisis Termoeconomico. .

Taifouris, M. (September 2015) Planta de producción de hidrógeno a partir de Metano

Tamayo, P., Moreno, M., Ochoa, M., De Leon, I., & Arteta, Y. (24 de octubre de 2011). Los enfoques mundiales de la gestión de la calidad. Una mirada desde los modelos y premios de excelencia. Revista Ingeniare, 11(6), 99-113.

Ullah, I. (2011). *CHEMCAD como una herramienta en la enseñanza de Ingeniería Química.*

Fuentes de Internet

The USGS Water Science School, the World's Water. (25 de setiembre de 2005). Recuperado el 27 de febrero de 2015, de <http://water.usgs.gov/edu/earthwherewater.html>

Gas Natural fenosa, ¿que es? (11 de marzo de 2009). Recuperado el 26 de marzo de 2018, de <http://www.gasnaturalfenosa.com.co/co/hogar/el+gas+natural/1297102453941+que+es.html>

Recuperado el 12 de marzo de 2018
[https://www.persistencemarketresearch.com/market-research/hydr.](https://www.persistencemarketresearch.com/market-research/hydr)

Recuperado el 27 de junio de 2018
<https://www.energy.gov/.../fuelcells/hydrogen-production-natural>

Recuperado el 18 de enero de 2019 [https://www International Energy Agency](https://www.International Energy Agency),
Gas Medium-Term Market Report, 2012.

Recuperado el 22 de febrero de 2019
www.osinergmin.gob.pe/seccion/institucional/...osinergmin/memoria-institucional

Recuperado el 02 de febrero de 2019 www.osinergmin.gob.pe/

ANEXOS

ANEXO N° 01.
MATRIZ DE CONSISTENCIA
“SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO POR REFORMADO CON VAPOR A PARTIR DEL GAS NATURAL”.-LIMA-PERÚ 2018-2019”

PROBLEMA	OBJETIVO	HIPÓTESIS	VARIABLE	METODOLOGÍA
<p>Principal:</p> <p>¿Cómo debe ser la simulación del proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural?</p>	<p>Principal:</p> <p>Establecer un modelo para solucionar problemas que se presentan en proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural empleando software CHEMCAD.</p>	<p>Principal:</p> <p>Es posible la simulación del proceso de producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural.</p>	<p>Dependiente: Y-Simulación del proceso de producción de hidrógeno (reactor estequiométrico y reactor de equilibrio)</p>	<p>Tipo: Por su naturaleza la investigación es tipo aplicada para la producción de hidrógeno. Diseño: Diseño del diagrama de proceso y selección de equipos para la producción de hidrógeno mediante un simulador</p>
<p>Secundarios:</p> <p>a) ¿Cuál es el resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural usando simulador con software de ingeniería y comparado respecto al método tradicional?</p> <p>b) ¿Cuál es el resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural respecto al método tradicional?</p>	<p>Secundarios:</p> <p>a) Conocer el resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural usando simuladores con software de ingeniería y comparando respecto al método tradicional.</p> <p>b) conocer el resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural respecto al método tradicional.</p>	<p>Secundarios:</p> <p>a) El resultado del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural no es igual que el método tradicional</p> <p>b) El resultado del balance de materia y energía del proceso de la producción de hidrógeno por reformado con vapor a partir del gas natural es igual que el método tradicional.</p>	<p>Independiente: X1-Resultados del proceso de producción de Hidrógeno X2 Resultado del, balance de materia y de energía</p>	

ANEXO 2

1. VIABILIDAD DEL PROYECTO

1.1 Viabilidad Técnica

El proyecto no generará problemas de viabilidad, ya que la obtención del hidrógeno a escala industrial por el proceso de reformado de gas natural con vapor.

Las diversas operaciones en este proceso: calentamiento de las materias primas (gas natural y agua), la desulfuración, la compresión, el mezclado, reformación, la conversión del gas de agua y la purificación y separación (dióxido de carburo e hidrógeno) en la torre de absorción existe gran cantidad de información para todo el proceso, no se generan problemas de viabilidad técnica.

En las condiciones de operación en las que se realizan los diferentes parámetros, tales como temperatura, presiones altas y moderadas, los flujos másicos de las materias primas, y los flujos másicos del producto final, no hay problema en la parte técnica.

Solamente hay que realizar una buena selección de materiales de construcción para evitar la corrosión y erosión de los equipos. Las condiciones de operación serán simuladas por el CHEMCAD.

2.2 Viabilidad Legal

Cumpliendo las normativas vigentes respecto al proceso, la seguridad, higiene y respetando el medio ambiente; se obtendrán los permisos y licencias en la construcción, la puesta en marcha y la operación respectiva. Considerando los factores expuestos, la planta es viable desde la perspectiva legal.

1.3 Viabilidad económica

Estudio de Mercado ⁽²⁾

El tamaño del mercado de generación de hidrógeno se valoró en USD 108,1 mil millones en 2016, las tendencias cambiantes, el enfoque en energía más limpia están fomentando la expansión del mercado.

La introducción de vehículos de celdas de combustible a base de gas, aumentará la demanda de hidrógeno.

Hay una proyección que la demanda de combustible limpio habrá un aumento exponencial cada año.

Según la agencia de Protección Ambiental (EPA) la producción anual de hidrógeno se fijó en más de 50 millones de toneladas.

²

<https://www.persistencemarketresearch.com/market-research/hydr>.

ANEXO 3: TABLA DE PROPIEDADES FISICOQUIMICA DE LOS GASES

Las propiedades físico-químicas de cada uno de los elementos químicos considerados se indican detalladamente:

Tabla 45:

Metano

Items	Datos		
Formula empírica	CH4		
Peso molecular(g/mol)	16.04		
Temperatura de Fusión(K)	90.4		
Temperatura de Ebullición(K)	111.6		
Temperatura crítica(K)	190.564		
Temperatura de autoignición(K)	801		
Límite superior de explosividad(% volumen en aire)	15		
Límite inferior de explosividad(% volumen en aire)	3		
Presión de vapor; $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$ B=443.028 C=-0.49	P (bar)	T (K)	A=3.9895
Calor de vaporización (j/kmol) = $C1 \times (1 - Tr)^{C2 + C3 \times Tr + C4 \times Tr^2}$; Donde $Tr = T/TC$			
C1=1.0194e07 C2=0.26087 C3=-0.14694 C4=0.22154			
Capacidad Calorífica (cal/C°·mol) = $4.750 + 1.20 \cdot 10^{-2}T + 0.3030 \cdot 10^{-5}T^2 - 2.630 \cdot 10^{-9}T^3$			
a=11.80 b=3.326e-02 c=-1.390e-05 d=1.740e-09			
Calor de formación a 25°C (kcal/mol)	-20.236		
Conductividad	Usando la gráfica de la Imagen 2.6		
Viscosidad	Usando la gráfica de las Imágenes 2.4 y 2.5		

Fuente: Perry, R.H., Green, D.W., Perry's chemical engineers' handbook, EEUU, McGraw Hill, 1999, 2582 p.

Bryant, W.M.D, *Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data*, en: industrial And Engineering chemisty, 1933, V.25, No 7, pp 820-823.

Tabla 46:*Etano*

Items	Datos
Formula empírica	C ₂ H ₆
Peso molecular(g/mol)	30. 07
Temperatura de Fusión(K)	101
Temperatura de Ebullición(K)	184. 4
Temperatura crítica(K)	305. 32
Temperatura de autoignición(K)	745
Límite superior de explosividad(%volumen en aire)	12.5
Límite inferior de explosividad(%volumen en aire)	3
Presión de vapor; $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$	
P (bar) T (K) A=4. 53678 B=1149. 36 C=24. 906	
Calor de vaporización (j/kmol) =C₁x (1-Tr)^{C₂+C₃xTr+C₄xTrxTr} ; Donde Tr=T/TC	
C ₁ =2. 1091E07 C ₂ =0. 60646 C ₃ =-0. 55492 C ₄ =0. 32799	
Capacidad Calorífica a presión constante (cal/C°·mol)=a+b· T+c· T²+d· T³ ;	
T(C)	
a=11. 80 b=3. 326e-02 c=-1. 390e-05 d=1. 740e-09	
Calor de formación a 25°C (kcal/mol)	-20. 236
Conductividad	Usando la gráfica de la Imagen 2. 6
Viscosidad	Usando la gráfica de las Imágenes 2. 4 y 2. 5

Fuente: Perry, R. H., Green, D. W., Perry's chemical engineers' handbook, EEUU, McGraw Hill, 1999, 2582 p.

Bryant, W. M. D, *Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data*, en: industrial And Engineering chemisty, 1933, V. 25, No 7, pp 820-823.

Tabla 47:

Propano

Items	Datos
Formula empírica	C3H8
Peso molecular(g/mol)	44.1
Temperatura de Fusión(K)	85
Temperatura de Ebullición(K)	231
Temperatura crítica(K)	369.83
Temperatura de autoignición(K)	723
Límite superior de explosividad(%volumen en aire)	9.5
Límite inferior de explosividad(%volumen en aire)	2.1
Presión de vapor; $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$	
P (bar) T (K) A=4.53678 B=1149.36 C=24.906	
Calor de vaporización (j/kmol) = $C1x(1-Tr)C2+C3xTr+C4xTrxTr$;	
Donde $Tr=T/TC$	
C1=2.1091e07 C2=0.60646 C3=-0.55492 C4=0.32799	
Capacidad Calorífica a presión constante	
(cal/C⁰.mol)=$a+b \cdot T+c \cdot T^2+d \cdot T^3$; T(C)	
a=16.260 b=5.398e-02 c=-3.134e-05 d=7.580e-09	
Calor de formación a 25°C	-24.820
(kcal/mol)	
Conductividad	Usando la gráfica de la Imagen 2.6
Viscosidad	Usando la gráfica de las Imágenes 2.4 y 2.5

Fuente: Perry, R.H., Green, D.W., Perry's chemical engineers' handbook, EEUU, McGraw Hill, 1999, 2582 p.

Bryant, W.M.D, *Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data*, en: industrial And Engineering chemisty, 1933, V.25, No 7, pp 820-823.

Tabla 48:*Sulfuro de hidrogeno*

Items	Datos
Formula empírica	H2S
Peso molecular(g/mol)	34.08
Temperatura de Fusión(K)	190.1
Temperatura de Ebullición(K)	213.4
Temperatura crítica(K)	373.53
Temperatura de autoignición (K)	533
Límite superior de explosividad(%volumen en aire)	46
Límite inferior de explosividad(%volumen en aire)	4.3
Presión de vapor; $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$	
P (bar) T (K) A= 4.52887 B= 958.587 C= -0.539	
Calor de vaporización (j/kmol) = $C1x(1-Tr)^{C2+C3xTr+C4xTrxTr}$; Donde $Tr=T/TC$	
C1=2.5676E07 C2=0.37358 C3=0 C4=0	
Capacidad Calorífica a presión constante (cal/Cº.mol)=$a+b\cdot T+c\cdot T^2+d\cdot T^3$; T(C)	
a=7.20 b=3.6e-03 c=0 d=0	
Calor de formación a 25°C (kcal/mol)	-4.77
Conductividad	Usando la gráfica de la Imagen 2.6
Viscosidad	Usando la gráfica de las Imágenes 2.4 y 2.5

Fuente: Perry, R.H., Green, D.W., Perry's chemical engineers' handbook, EEUU, McGraw Hill, 1999, 2582 p.

Bryant, W.M.D, *Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data*, en: industrial And Engineering chemisty, 1933, V. 25, No 7, pp 820-823.

Monóxido de Carbono

El monóxido de carbono (CO) es un gas incoloro, inodoro, no irritante pero sumamente tóxico. Se produce naturalmente por una serie de procesos, sobre todo en la oxidación parcial del metano (combustión incompleta) que se forma en la descomposición de la materia orgánica por fermentación.

La contribución de este gas a la atmósfera por parte del ser humano se produce mayoritariamente de forma industrial por todos aquellos procesos en los que las combustiones se realicen con defecto de oxígeno. En un compuesto inflamable y sus propiedades físico-químicas más importantes se indican en la Tabla 49.

Por otra parte debido a que la hemoglobina de la sangre posee una afinidad mucho mayor para el monóxido que por el oxígeno, lo convierte, a partir de una concentración de 0,4 % en aire, en un potente y rápido veneno que además no es detectado fácilmente por el ser humano debido a que no posee olor.

Usos

Para la síntesis de metanol a partir de gas de síntesis (CO+H₂)

Tabla 49:*Monóxido de carbono*

Items	Datos
Formula empírica	CO
Peso molecular(g/mol)	28.01
Temperatura de Fusión(K)	66
Temperatura de Ebullición(K)	81
Temperatura crítica(K)	132.92
Temperatura de autoignición(K)	878
Límite superior de explosividad(%volumen en aire)	14.20
Límite inferior de explosividad(%volumen en aire)	12.5
Presión de vapor; $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$	
P (bar) T (K) A=3.819 B=291.743 C=267.996	
Calor de vaporización (j/kmol) = $C_1 \times (1 - Tr) C_2 + C_3 \times Tr + C_4 \times Tr \times Tr$; Donde $Tr = T/T_C$	
C1=0.8585E07 C2=0.4921 C3=-0.326 C4=0.2231	
Capacidad Calorífica a presión constante (cal/C°·mol)= $6.60 + 0.00120 \cdot T$	
Calor de formación a 25°C (kcal/mol)	-26.416
Conductividad	Usando la gráfica de la Imagen 2.6
Viscosidad	Usando la gráfica de las Imágenes 2.4 y 2.5

Fuente Perry, R. H., Green, D. W., Perry's chemical engineers' handbook, EEUU, McGraw Hill, 1999, 2582 p.

Bryant, W. M. D, *Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data*, en: industrial And Engineering chemisty, 1933, V. 25, no 7, pp 820-823.

Dióxido de carbono

Según Air Liquide, Aplicaciones del dióxido de carbono (2014)

El dióxido de carbono es un gas inodoro, incoloro, ligeramente ácido y no inflamable. Es soluble en agua cuando la presión se mantiene constante, y está formado por una molécula lineal de un átomo de carbono ligado a dos átomos de oxígeno, de la forma: $O = C = O$

A pesar de que a temperatura y condiciones ordinarias se encuentra en forma gaseosa, puede solidificarse si se somete a temperaturas inferiores de 194K, y licuarse cuando se disuelve en agua. Sus propiedades físico-químicas más importantes se indican en la Tabla 50.

En la naturaleza, una fuente de emisión importante son los procesos fotosintéticos, concretamente el proceso de respiración, en el que los componentes alimentarios de animales y plantas se oxidan para la obtención de energía, desprendiéndose en la reacción, dióxido de carbono y agua. Los incendios forestales también constituyen un foco de liberación significativa, ya que se produce la quema de combustibles fósiles (madera y biomasa fundamentalmente).

Con respecto a los complejos industriales, el sector energético es responsable de la mayor parte de las emisiones de dióxido de carbono con un 91.8 % del total. Dentro de esta, algunos ejemplos y los porcentajes de emisión de CO₂ respecto a total de la industria son los siguientes

- Sector transporte: **29.9%**
- Industria del cemento y plantas de incineración: **6.4%**
- Industria química y metalúrgica: **1.8%**

Usos.

- Para la carbonatación de bebidas: sodas o aguas minerales
- Propulsar y formar espuma en las cervezas «a presión».
- Atmosfera inerte para la soldadura o la manipulación de materias inflamables
- También se emplea para determinados extintores

Tabla 50:

Propiedades físico-químicas del dióxido de carbono

Items	Datos
Formula empírica	CO ₂
Peso molecular(g/mol)	44. 01
Temperatura de Fusión(K)	216. 4
Temperatura de Ebullición(K)	194
Temperatura crítica(K)	304. 21
Temperatura de autoignición(K)	878
Presión de vapor; $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$	
P (bar) T (K) A=6. 81228 B=1301. 679 C=-3. 494	
Calor de vaporización (j/kmol) =$C_1 \times (1 - Tr) + C_2 + C_3 \times Tr + C_4 \times Tr \times Tr$; Donde $Tr = T/TC$	
C1=2.1730E07 C2=0.382 C3=-0.4339 C4=0.42213	
Capacidad Calorífica a presión constante (cal/C°·mol)= $10. 34 + 0. 00274 \cdot T - 19550/T^2$	
Calor de formación a 25°C (kcal/mol)	-94. 052
Conductividad	Usando la gráfica de la Imagen 2. 6
Viscosidad	Usando la gráfica de las Imágenes 2. 4 y 2. 5

Fuente: Perry, R.H., Green, D.W., Perry's chemical engineers' handbook, EEUU, McGraw Hill, 1999, 2582 p.
 Bryant, W.M.D, Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data, en industrial And Engineering chemistry, 1933, V.25, no 7, pp 820-823.

ANEXO 4:

AGUA Y SUS PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS

Es un compuesto químico formado por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno (H_2O) enlazados covalentemente a un átomo de oxígeno. Se trata de una sustancia polar, lo que hace que tenga importantes propiedades, entre ellas, que sea un buen disolvente. No es una sustancia ni inflamable ni explosiva y posee una alta capacidad calorífica. Sus propiedades físico-químicas se indican detalladamente en la Tabla 51.

La molécula forma puentes de hidrogeno con otras moléculas de agua haciendo que su temperatura de fusión y ebullición sean más altas de lo que serían sin estos puentes, y posibilita la vida al encontrarse en forma líquida.

El agua cubre el 71 % de la superficie de la corteza terrestre. Se localiza principalmente en los océanos, donde se concentra el 96.5 % del agua total, los glaciares y casquetes polares poseen el 1.74 %, los depósitos subterráneos (acuíferos), los permafrost y los glaciares continentales suponen el 1.72% y el restante 0.04% se reparte en orden decreciente entre lagos, humedad del suelo, atmósfera, embalses, ríos y seres vivos.

El agua en la industria absorbe una media del 20% del consumo mundial, empleándose en tareas de refrigeración, transporte, como materia prima en procesos y como disolvente de una gran variedad de sustancias químicas.

Tabla 51:

Agua

Items	Datos
Formula empírica	H ₂ O
Peso molecular(g/mol)	18.016
Temperatura de Fusión(K)	273
Temperatura de Ebullición(K)	373
Temperatura crítica(K)	647.13
Calor latente de fusión(cal/mol)	1436
Presión de vapor; $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$	
P (bar) T (K) A=3.55959 B=643.748 C=-198.043	
Calor de vaporización a 1 bar	539.38
Calor de vaporización a 20 bar	452.7
Calor de vaporización (j/kmol) = $C_1 \times (1 - Tr) + C_2 + C_3 \times Tr + C_4 \times Tr \times Tr$; Donde $Tr = T/TC$	
C1=2.1091E07 C2=0.60646 C3=-0.55492 C4=0.32799	
Capacidad Calorífica a presión constante (cal/C°·mol) = $a + b \cdot T + c \cdot T^2 + d \cdot T^3$; T (C)	
a=2.763e02 b=-2.0901 c=8.1250e-3 d=-1.4116e-05 e=9.3701e-09	
Calor de formación a 25°C (kcal/mol)(gas)	-57.7979
Calor de formación a 25°C (kcal/mol)(liquido)	-68.3174
Conductividad	Usando la gráfica de la Imagen 2.6
Viscosidad	Usando la gráfica de las Imágenes 2.4 y 2.5

Fuente: Perry, R.H., Green, D.W., Perry's chemical engineers' handbook, EEUU, McGraw Hill, 1999, 2582 p.
 Bryant, W.M.D, *Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data*, en: industrial And Engineering chemisty, 1933, V.25, no 7, pp 820-823.

ANEXO 5

HIDRÓGENO Y SUS PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS

Se trata del primer elemento de la tabla periódica. En condiciones normales es un gas incoloro, inodoro e insípido, compuesto de moléculas diatómicas, H_2 . Es uno de los constituyentes principales del agua y de toda la materia orgánica, y está distribuido de manera amplia no sólo en la Tierra sino en todo el universo. El hidrógeno es la sustancia más inflamable de todas las que se conocen. A temperaturas ordinarias el hidrógeno es una sustancia poco reactiva a menos que haya sido activado de alguna manera; por ejemplo, por un catalizador adecuado sin embargo a temperaturas elevadas es muy reactivo.

Reacciona con todos aquellos elementos menos electronegativos que él, por lo que tiene la capacidad de formar muchos compuestos distintos. Cuando se pone en contacto con sales metálicas menos electronegativas las reduce a su estado metálico. Se trata entonces de un potente reductor.

Tiene la capacidad de atravesar ciertos metales. En el caso del acero, puede reaccionar con los átomos de carbono provocando que este se vuelva más frágil

Se trata de un prometedor combustible ya que en su combustión libera menos contaminantes que cualquier otro combustible. Además se puede utilizar para almacenar energía en forma de energía química que luego se recupera en las células de combustible.

En ella el único subproducto que se genera es agua.

Cuando las reservas de los combustibles fósiles empiecen a escasear, es muy posible que el hidrógeno sea el combustible que los sustituya.

Usos actuales y futuros

- Como materia prima para fabricación de otras sustancias químicas como el metanol y sobretodo amoniaco.
- Industria petroquímica: hidrodeshidrogenación, hidrodeshidrosulfuración, y de hidrocraqueo.
- Hidrogenación de aceites vegetales líquidos insaturados para la obtención de grasas sólidas.

- Como combustible para cohetes.
- Célula de combustible para vehículos y centrales eléctricas que usan fuentes renovables de energía (solar, eólica, etc).

Tabla 52:

Hidrogeno

Items	Datos
Formula empírica	H ₂
Peso molecular(g/mol)	2. 016
Temperatura de Fusión(K)	13. 9
Temperatura de Ebullición(K)	19. 9
Temperatura crítica(K)	33. 19
Temperatura de autoignición(K)	773. 844
Límite superior de explosividad(%volumen en aire)	76
Límite inferior de explosividad(%volumen en aire)	4
Presión de vapor; $\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$	
P (bar) T (K)	A=2.94928 B=67.508 C=275.7
Calor de vaporización (j/kmol) = $C_1 \times (1 - Tr)^{C_2 + C_3 \times Tr + C_4 \times Tr \times Tr}$; Donde $Tr = T/TC$	
C1=2. 1091E07 C2=0. 60646 C3=-0. 55492 C4=0. 32799	
Capacidad Calorífica a presión constante (cal/C°·mol)=$a + b \cdot T + c \cdot T^2 + d \cdot T^3$; T (C)	
C1=0. 1013E07 C2=0. 698 C3=-1. 817 C4=0. 1447	
Capacidad calorífica a presión constante (J/kmol)	6. 62+0. 00081· T
Conductividad	Usando la gráfica de la Imagen 2. 6
Viscosidad	Usando la gráfica de las Imágenes 2. 4 y 2. 5

Fuente: Perry, R.H., Green, D.W., Perry's chemical engineers' handbook, EEUU, McGraw Hill, 1999, 2582 p. Bryant, W.M.D, *Empirical Molecular Heat Equations from Spectroscopic Data*, en: industrial And Engineering chemistry, 1933, V.25, no 7, pp 820-823

ANEXO 6

PROPIEDADES DEL CATALIZADOR

El catalizador utilizado es Níquel soportado sobre alúmina y posee las propiedades.

Propiedades	Valor
Composición (% w)	16% Ni, 84% Al ₂ O ₃
Densidad	2702,7 kg.m ⁻³
Diámetro de partícula	2,5 mm
Superficie específica	7000 m ² .kg ⁻¹
Longitud de partícula	8 mm

ANEXO 7

DISEÑO Y COSTOS DE EQUIPOS

Compresora

Equip. No.	21
Name	
Pressure out bar	20.0000
Type of compress	1
Efficiency	0.7500
Actual power hp	808.3339
Cp/Cv	1.4247
Theoretical power	606.2504
Ideal Cp/Cv	1.4207
Calc pres. out bar	20.0000
Calc head m	143051.6094
Cost estimation fl	1
Calc. mass flow k	1159

Compressor (COMP)/ Expander (EXPN) -

Specifications | Cost Estimation

ID: 21

Run the costing report after calculating unit

For compressors only:

Compressor type: Centrifugal compressor

Motor type: Open drip-proof

Driver type: Belt drive coupling

Motor RPM: 3600 RPM

Installation factor: 1.3

Calculated cost:

Compressor cost	958054	\$	Total purchase cost	1.04072e+006	\$
Motor cost	38969.4	\$	Total installed cost	1.35293e+006	\$
Driver cost	43694.8	\$	Utility Cost		\$
			Purchase Cost Override		\$

Help | Cancel | OK

Figura 27: Diagrama de costos de equipo de compresora, fuente: software chemcad.

Bomba

Equip. No.	8
Name	
Output pressure	20.0000
Efficiency	0.7500
Calculated power	6.2727
Calculated Pout b	20.0000
Head m	194.3786
Vol. flow rate ft3/	234.5780
Mass flow rate kg	6620.8916
Cost estimation fl	1
Install factor	1.3000
Basic pump cost	4463
Basic motor cost	604
Total purchase co	5068
Total installed cos	6588
(\$)	

Pump (PUMP) -

Specifications | Cost Estimation

Run the costing report after calculating unit ID: 8

Pump type: Centrifugal pump

Centrifugal pumps: One stage, 3550 rpm, VSC

Material: Cast iron

Motor type: Open drip-proof

Motor RPM: 3600 RPM

Install factor: 1.3

Calculated cost:

Basic pump	4463.3	\$	Total purchase	5067.8	\$
Basic motor	604.494	\$	Total installed	6588.14	\$
			Utility Cost		\$
			Purchase Cost Override		\$

Help | Cancel | OK

Figura 28: Diagrama de costos de equipo de bomba, fuente: software chemcad.

Intercambiador de calor

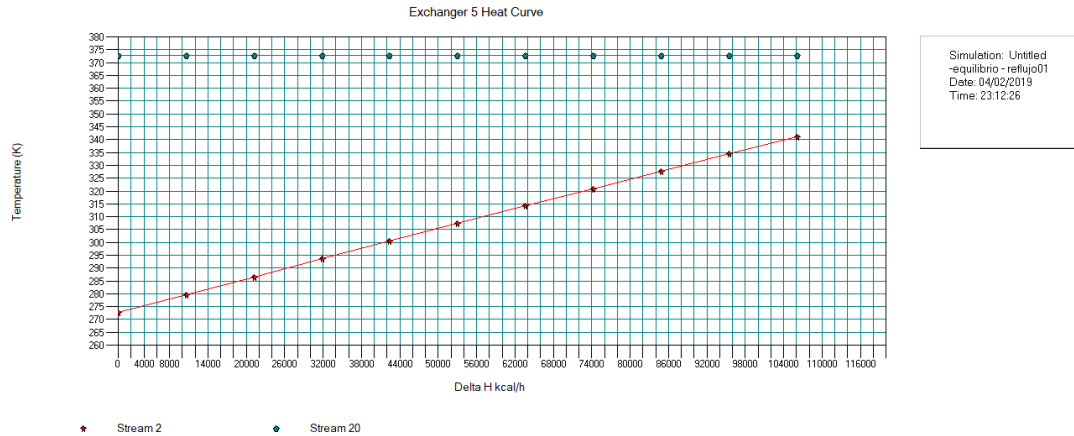


Figura 29: Diagrama de intercambiador de calor, fuente: software chemcad.

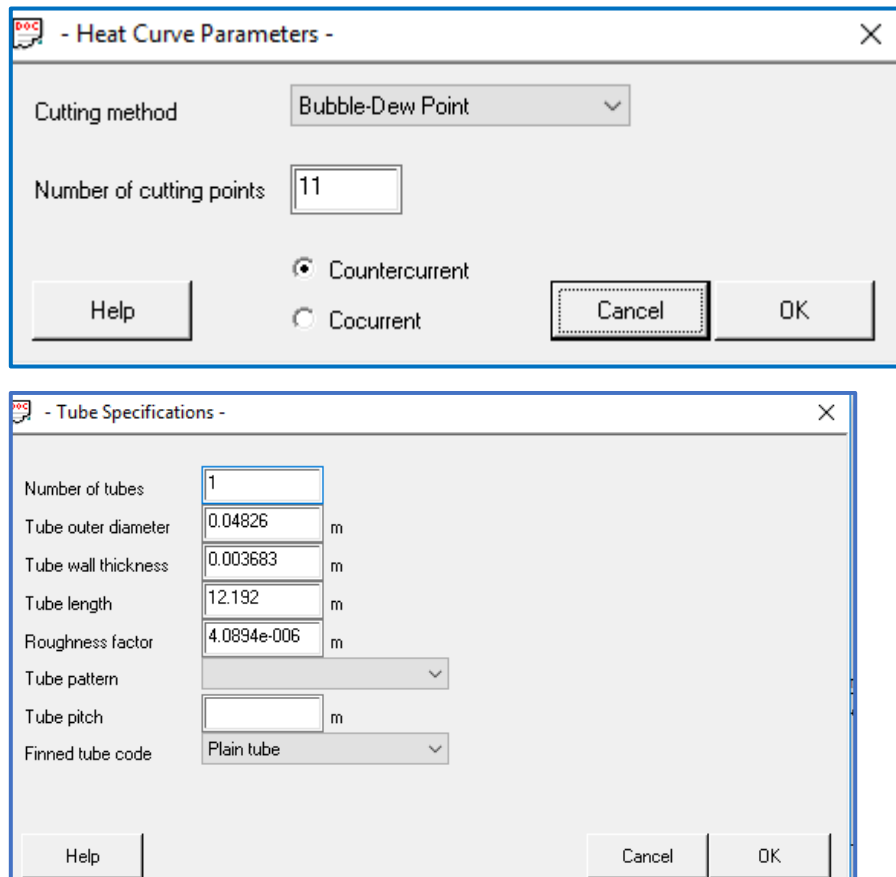


Figura 30: Diagrama de costo de intercambiador de calor, fuente: software chemcad.

- Shell Specifications -

Shell diameter m

Number of exchangers in parallel

Number of exchangers in series

Help Cancel OK

- Nozzle Specifications -

--- TUBE --- --- SHELL ---

Inlet diameter m m

Outlet diameter m m

Help Cancel OK

- Material Specifications -

Tube material

Help Cancel OK

Figura 31: Costo de intercambiador de calor, fuente: software chemcad.

Equip. No.	5
Name	
Shells in Series	1
No. of SS Passes	1
No. of TS Passes	1
Calc Ht Duty kcal/	106037.8359
LMTD (End points)	59.4064
LMTD Corr Factor	1.0000
1st Stream Pout b	22.5000
2nd Stream Pout	1.0000
Cost estimation	1
Install factor	1.5000
Design pressure	22.5000
P1 out specified b	22.5000
P2 out specified b	1.0000
Simulation Mode	5

Tabla 53: Costo de intercambiador de calor, fuente: software chemcad.