



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“SIMULACIÓN DE UN PROCESO DE OBTENCIÓN Y
PURIFICACIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DEL BIOGÁS
UTILIZANDO TECNOLOGÍA DE MEMBRANA DE PALADIO”**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Tecnológico

Presentado para optar el grado académico de:

INGENIERA QUÍMICA

AUTORA: JHAJAIRA MARLID GUERRERO HIDALGO

DIRECTOR: Dr. CELSO GUILLERMO RECALDE MORENO PhD.

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, Jhajaira Marlid Guerrero Hidalgo

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho del Autor.

Yo, Jhajaira Marlid Guerrero Hidalgo, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 13 de septiembre del 2021

Jhajaira Marlid Guerrero Hidalgo

020228714-0

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; Tipo: Proyecto Tecnológico, **SIMULACIÓN DE UN PROCESO DE OBTENCIÓN Y PURIFICACIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DEL BIOGÁS UTILIZANDO TECNOLOGÍA DE MEMBRANA DE PALADIO**, realizado por la señorita: **JHAJIRA MARLID GUERRERO HIDALGO**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Trabajo de Integración Curricular el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Raúl Leandro Dávalos Monteiro PhD. PRESIDENTE DEL TRIBUNAL	_____	2021-09-13
Dr. Celso Guillermo Recalde Moreno PhD. DIRECTOR DE TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR	_____	2021-09-13
Ing. César Arturo Puente Guijarro PhD. MIEMBRO DEL TRIBUNAL	_____	2021-09-13

DEDICATORIA

Dedico el presente trabajo a Dios por guiar cada uno de mis pasos y darme la fortaleza para seguir adelante. A mis padres, Galo (+) que a pesar de que está en el cielo siempre sentí su compañía y Marina mi apoyo incondicional, son el pilar fundamental de mi vida, por el gran amor y sacrificio que han realizado. A mis hermanos Bladimir, Hitler y Jairo por la confianza que han depositado en mí.

Marlid

AGRADECIMIENTO

Agradezco a mi familia por todo el amor y apoyo brindado. A todas aquellas personas que aprecio mucho, supieron darme palabras de ánimo.

Al Dr. Celso Recalde y al Ing. César Puente les agradezco por su guía y valiosos aportes, los cuales fueron de gran ayuda para llevar a cabo este trabajo. También a todos los docentes que aportaron con sus conocimientos a lo largo de la carrera universitaria.

A la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo especialmente al grupo de Energías Alternativas y Ambiente (GEAA) de la Facultad de Ciencias por la colaboración y permitirme realizar dicho proyecto.

A mis amigas y amigos que formaron parte de esta etapa.

Marlid

TABLA DE CONTENIDOS

ÍNDICE DE TABLAS	viii
ÍNDICE DE FIGURAS	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS	xii
ÍNDICE DE ABREVIATURAS	xiii
RESUMEN	xiv
SUMMARY	xv

CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Antecedentes	1
1.2. Planteamiento del problema	2
1.3. Justificación del proyecto	3
1.4. Objetivos.....	4
<i>1.4.1. Objetivo General.....</i>	<i>4</i>
<i>1.4.2. Objetivos Específicos.....</i>	<i>4</i>
1.5. Alcance	4

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO	5
2.1. Estado del Arte.....	5
2.2. Bases Teóricas.....	6
<i>2.2.1. Biogás</i>	<i>6</i>
<i>2.2.2. Producción de Hidrógeno</i>	<i>7</i>
<i>2.2.2.1. Reformado con vapor de gas natural o naftas ligeras</i>	<i>8</i>
<i>2.2.2.2. Reformado por oxidación parcial.....</i>	<i>9</i>
<i>2.2.2.3. Reacción de desplazamiento de gas - agua</i>	<i>9</i>
<i>2.2.3. Proceso de Permeación.....</i>	<i>9</i>
<i>2.2.4. Reactores de Membrana</i>	<i>10</i>
<i>2.2.5. Modelo CFD</i>	<i>11</i>
<i>2.2.6. Interfaces de modelado y simulación.....</i>	<i>11</i>
<i>2.2.6.1. Ecuaciones base de la interfaz de modelado</i>	<i>11</i>

2.2.6.2.	<i>Sistema de coordenadas</i>	12
2.2.6.3.	<i>Acoplamientos de modelo</i>	12
2.2.7.	Mallado	12
2.3.	Marco Legal	12
2.3.1.	<i>Nacional</i>	12

CAPÍTULO III

3.	METODOLOGÍA	14
3.1.	Definición de Parámetros	15
3.1.1.	<i>Determinación de las variables de estudio</i>	16
3.1.2.	<i>Operacionalización de variables</i>	16
3.1.3.	<i>Parámetros de la simulación en software</i>	17
3.1.3.1.	<i>Parámetros de simulación en el software para procesos químicos</i>	17
3.1.3.2.	<i>Parámetros de simulación en el software de simulación CFD</i>	20
3.2.	Validación del modelo para la simulación	23
3.3.	Recolección de información y procesamiento	25

CAPÍTULO IV

4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	26
4.1.	Cronograma	26
4.2.	Recursos y Materiales: humanos, equipos y financiamiento	26
4.2.1.	<i>Presupuesto</i>	26
4.2.2.	<i>Talento Humano</i>	27
4.2.3.	<i>Recursos Materiales</i>	27
4.3.	Resultados, Discusión y Análisis de Resultados	27
4.3.1.	<i>Resultados obtenidos de la simulación en el software para procesos químicos</i>	27
4.3.2.	<i>Resultados obtenidos de la simulación en el software CFD</i>	34
4.3.2.1.	<i>Flujo de difusión de hidrógeno a través de la membrana</i>	34
4.3.2.2.	<i>Velocidad del fluido</i>	35
4.3.2.3.	<i>Evaluación de los resultados en las dos simulaciones</i>	55

CONCLUSIONES	57
---------------------------	----

RECOMENDACIONES	58
------------------------------	----

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2: Normativa acerca de software libre	12
Tabla 1-3: Operacionalización de la variable dependiente.....	16
Tabla 2-3: Operacionalización de la variable independiente	17
Tabla 3-3: Equipos empleados en el proceso.....	18
Tabla 4-3: Variables de entrada del proceso.....	19
Tabla 5-3: Parámetros de la reacción en el proceso de obtención de H ₂	19
Tabla 6-3: Parámetros de entrada en la simulación.....	21
Tabla 7-3: Parámetros para la simulación del caso de análisis.....	25
Tabla 1-4: Cronograma del proyecto	26
Tabla 2-4: Presupuesto del proyecto.....	26
Tabla 3-4: Talento humano del proyecto	27
Tabla 4-4: Recursos materiales para el proyecto.....	27
Tabla 5-4: Resultados de la primera simulación.....	28
Tabla 6-4: Resultados de la segunda simulación.....	29
Tabla 7-4: Resultados de la tercera simulación.....	30
Tabla 8-4: Resultados de la cuarta simulación.....	31
Tabla 9-4: Resultados de la quinta simulación.....	32
Tabla 10-4: Resultados de la sexta simulación.....	33
Tabla 11-4: Concentración molar de H ₂	35
Tabla 12-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H ₂	36
Tabla 13-4: Flujo de difusión de H ₂	37
Tabla 14-4: Concentración molar de H ₂	38
Tabla 15-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H ₂	39
Tabla 16-4: Flujo de difusión de H ₂	40
Tabla 17-4: Concentración molar de H ₂	41
Tabla 18-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H ₂	42
Tabla 19-4: Flujo de difusión de H ₂	43
Tabla 20-4: Concentración molar de H ₂	44
Tabla 21-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H ₂	45
Tabla 22-4: Flujo de difusión de H ₂	46
Tabla 23-4: Concentración molar de H ₂	47
Tabla 24-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H ₂	48
Tabla 25-4: Flujo de difusión de H ₂	49
Tabla 26-4: Concentración molar de H ₂	50

Tabla 27-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H ₂	51
Tabla 28-4: Flujo de difusión de H ₂	52
Tabla 29-4: Resultados de las distintas combinaciones de parámetros para velocidad, concentración y flujo de difusión de hidrógeno.....	53

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-2: Métodos de producción de H ₂	7
Figura 2-2: Mecanismo de difusión de solución para la penetración de H ₂ a través de la red metálica de una membrana densa.....	11
Figura 1-3. Metodología del desarrollo del proyecto	14
Figura 2-3. Diagrama de flujo de procesos (PFD) para un reactor de membrana.....	15
Figura 3-3. Diagrama de flujo del proceso mediante el cual se simula la obtención de H ₂	19
Figura 4-3. Modelo simplificado del reactor de membrana de Paladio en una geometría 2D...	20
Figura 5-3. Mallado del modelo CFD 2D.....	21
Figura 6-3. Diagrama de flujo del proceso de obtención de H ₂	23
Figura 7-3. Condiciones de operación de los elementos en el reactor	24
Figura 8-3. Condiciones de operación de los elementos en el separador	24

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1-3. Análisis de convergencia del mallado en función del tiempo de solución y los resultados obtenidos	22
Gráfico 2-3. Esquema del modelo CFD en el software de elementos finitos	23
Gráfico 1-4. Influencia de la temperatura en la conversión de H ₂	34
Gráfico 2-4. Comportamiento de la concentración de flujo de H ₂	53
Gráfico 3-4. Comportamiento de la velocidad de fluido de H ₂ en el interior del conducto.....	54
Gráfico 4-4. Comportamiento del flujo de difusión de H ₂	55

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A: CONFIGURACIÓN DE LA BOMBA

ANEXO B: CONFIGURACIÓN DEL CALENTADOR 1

ANEXO C: CONFIGURACIÓN DEL COMPRESOR

ANEXO D: CONFIGURACIÓN DEL CALENTADOR 2

ANEXO E: CONFIGURACIÓN DEL MEZCLADOR

ANEXO F: CONFIGURACIÓN DEL REACTOR GIBBS

ANEXO G: CONFIGURACIÓN DEL DIVISOR DE COMPONENTES

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

- WGS** Reacción de Conversión de Gas- Agua
MRS Reformado con Vapor de Metano
MR Reactores de Membrana
PFD Diagrama de Flujo de Proceso
CFD Dinámica de Fluidos Computacional
GHSV Velocidad Espacial Horaria del Gas

RESUMEN

El objetivo del presente trabajo fue realizar la simulación de un proceso de obtención y purificación de hidrógeno a partir del biogás, utilizando tecnología de membrana de paladio. La simulación se desarrolló en un software para procesos químicos utilizando datos bibliográficos basados en el esquema del diagrama de flujo de proceso para un reactor de membrana desarrollado por Kim, Han, Kim, Lee, Lim, Lee y Ryi; del modelo planteado se obtuvieron valores de flujo molar y flujo másico, se analizó el comportamiento del sistema y la conversión de hidrógeno modificando los parámetros como presión y temperatura. Luego se realizó una modelación de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) en un software de análisis y resolución por elementos finitos, en el cual se analizó con mayor profundidad la funcionalidad de la membrana de paladio alcanzándose un comportamiento lo más cercano a la realidad en donde se ingresaron las condiciones de operación de la membrana para obtener flujos másicos, concentraciones, velocidad de operación en el sistema y otros datos relevantes para el estudio. Finalmente se realizó una comparación entre los datos obtenidos de los dos programas versus el proceso de purificación tradicional de lo cual se obtuvo que el proceso que emplea tecnología de membrana de paladio alcanza rendimientos similares al método tradicional, sin embargo, la implementación de esta tecnología disminuye el uso de mayor cantidad de equipos. Como resultado se obtuvo una mayor producción cuando se trabajó con los parámetros de 754,9 K y 1.88 x10e05 Pa con un valor de 3.26 mol/m².s de difusión de hidrógeno y una conversión de 61.23%. Se concluye que la membrana de paladio puede facilitar valores cercanos a la realidad según datos bibliográficos previos. Se recomienda realizar futuras investigaciones variando la geometría y espesor del sistema para identificar el diseño óptimo de la membrana de paladio.

Palabras clave: <SIMULACIÓN>, <TECNOLOGÍA DE MEMBRANA>, <PROCESOS QUÍMICOS>, <PURIFICACIÓN>, <HIDRÓGENO>, <ELEMENTOS FINITOS>, <MODELO CFD>, <REFORMADO DE VAPOR>.



1657-DBRA-UTP-2021

SUMMARY

The work objective dealt with simulating a hydrogen obtainment and purification process from biogas, using palladium membrane technology. The simulation was developed in a software for chemical processes using bibliographic data based on the process flow diagram scheme for a developed membrane reactor by Kim, Han, Kim, Lee, Lim, Lee and Ryi; from the proposed model, molar and mass flow values were obtained; the system behavior and the hydrogen conversion were analyzed modifying parameters such as pressure and temperature. Then a modeling of Computational Fluid Dynamics (CFD) was carried out in an analysis and resolution software by finites elements, in which the functionality of the palladium membrane was analyzed in greater depth reaching a behavior as real as possible, where the membrane operating conditions were included to obtain mass flows, concentrations, operation speed in the system and other relevant data for the study. Finally, a comparison was performed between the data obtained from the two programs versus the traditional purification process from which it was found out that the process that uses the palladium membrane technology achieves similar yields to the traditional method, however, the implementation of this technology decreases the use of more equipment. As a result, a greater production was obtained when working with the parameters of 754.9 K and 1.88×10^5 Pa with a value of 3.26 mol / m².s of hydrogen diffusion and a conversion of 61.23%. It is concluded that the palladium membrane can provide values as close as possible to reality according to the previous bibliographic data. It is recommended to carry out future investigations by varying the geometry and thickness of the system to identify the optimal palladium membrane design.

Keywords: <SIMULATION>, <MEMBRANE TECHNOLOGY>, <CHEMICAL PROCESSES>, <PURIFICATION>, <HYDROGEN>, <FINITE ELEMENTS>, <MODEL CFD>, <STEAM REFORMING>.

CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Antecedentes

Las membranas desempeñan un papel importante en la tecnología química e intervienen en varias aplicaciones. El desarrollo de métodos y sistemas de separación es de gran importancia para los investigadores. El interés por hallar nuevas tecnologías para ser aplicadas en los procesos industriales como por ejemplo industrias alimenticia, farmacéutica, ambiental, hidrocarburos, entre otras, reflejando un ahorro económico reduciendo el consumo de energía y el tiempo de proceso (Mulder, 1991, p. 9-10).

Los primeros estudios relacionados con membranas se dan en el siglo XVIII, Abbé Nolet en el año de 1748 fue el primer científico en mencionar la palabra ósmosis para describir el proceso de permeado de agua a través de un diafragma. Durante los siglos XIX Y XX no existía la aplicación de membranas a nivel industrial o comercial, pero si las usaban a nivel de laboratorio en el desarrollo de teorías químicas. Por primera vez Mitchell anunció la separación de gases mediante membranas poliméricas cuando estudió una mezcla de hidrógeno y dióxido de carbono. En 1866 Graham analizó la comprensión del proceso de permeación. Cabe mencionar algunos ejemplos; Traube y Pfeffer realizaron las mediciones de la presión osmótica de las soluciones hechas con membranas que posteriormente fueron utilizadas en 1887 por van't Hoff para desarrollar su ley la cual explica el comportamiento ideal de las soluciones diluidas, dando lugar a la conocida ecuación de van't Hoff, por ese mismo tiempo Maxwell desarrollo la teoría cinética de los gases basándose en el concepto de una membrana semipermeable y selectiva. En 1907 Bechhold desarrolló una técnica para preparar membranas de nitrocelulosa de tamaño de poro graduado. Posteriormente dicha técnica fue mejorada por los científicos Elford, Zsigmondy, Bachmann, Ferri y en 1930 estas membranas ya se comercializaban. La aplicación más característica de las membranas fue a finales de la Segunda Guerra Mundial cuando se realizó los test de agua potable (Baker, 2004, p. 1-3).

Según De Falco et al.(2011) la primera patente de purificación de hidrógeno mediante membranas de paladio aparece en 1916, J. B. Hunter patenta la primera membrana para la obtención de hidrógeno formada por paladio aleado con distintos elementos. A mediados del siglo XX cuando se comienza a aplicar a escala de laboratorio. En 1955 aparece el primer estudio científico sobre membranas a base de paladio, cuando Juenker analizó el uso de membranas de paladio para la purificación de hidrógeno. En 1960 se desarrolló el proceso de Loeb- Sourirajan para producir membranas de ósmosis inversa anisotrópicas de alto flujo y sin defectos, permitiendo el paso a nivel de laboratorio a nivel industrial. El principal avance de los años 80 fue la aparición de

la membrana industrial de procesos de separación de gases, el primer desarrollo importante fue la membrana de Monsanto Prism para la separación de hidrógeno. Después de algunos años la empresa Dow estaba produciendo sistemas para separar el nitrógeno del aire, también las empresas Cynara y Separex producían sistemas de separación de dióxido de carbono del gas natural. La mayor parte del trabajo sobre la preparación de membranas a base de Pd se realizó en la década de 1990, por ejemplo, sobre la técnica de galvanoplastia, la deposición química en fase vapor, la pulverización catódica con magnetrón y la pulverización pirólisis (Lu et al., 2007, p. 591-593).

Chang et al.(2009) realizaron la simulación del comportamiento de una membrana para sistemas de destilación utilizando el software Aspen Plus, para cada sistema se ha establecido un modelo cuadrático que describe la relación entre el rendimiento del sistema y las principales variables de diseño. Ye et al.(2009) desarrollaron la simulación de la producción de hidrógeno mediante reformado de metano con vapor en reactores de membrana de lecho fluidizado, integraron una subrutina FORTRAN en Aspen Plus para simular la permeación de hidrógeno a través de membranas en el separador según la ley de Sieverts. Otro importante trabajo es el de Rached et al.(2020) quien estudió el impacto de diferentes parámetros en el flujo de difusión de hidrógeno a través de una membrana de Pd-Ag, utilizando un modelo CFD para dicho estudio.

El trabajo de Martínez Ana de la UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID, estudió la modelización de la separación de hidrógeno mediante membranas densas de paladio para lo cual realizó el diseño de una unidad de membrana regida por la ecuación de permeación de hidrógeno incorporando una subrutina de Visual Basic con el fin de enlazar el comportamiento de la unidad de simulación en el software de procesos químicos (Martínez, 2018, p. 5-7).

1.2. Planteamiento del problema

El hidrógeno se produce a partir de combustibles fósiles, a lo largo de los años las reservas de estos combustibles han disminuido por lo cual se busca una alternativa al uso de combustibles fósiles y a su vez que sea amigable con el medio ambiente debido a que la combustión de estos provoca la emisión de CO₂ causando efectos negativos al medio ambiente. Es aquí donde el hidrógeno desempeña un rol importante involucrando un gran interés hacia la tecnología de membranas permeables al hidrógeno para su producción y purificación. A pesar de las ventajas de operación que promete la tecnología de membranas no se encuentra aplicada industrialmente por su costo de fabricación, es aquí en donde el ingeniero químico desempeña su papel, el cual es medir el desempeño a nivel industrial de las nuevas tecnologías a desarrollarse.

La tecnología sigue avanzando por lo que se ha desarrollado paquetes de simulación con ecuaciones lo que ayudará a predecir el comportamiento real de los diferentes procesos. El

desarrollo de estas simulaciones son de gran interés ya que el futuro de la industria de los combustibles apunta al hidrógeno. Además, el análisis para la implementación no ha sido desarrollada ampliamente debido a que no existe una amplia bibliografía del modelamiento y el estudio del comportamiento de las membranas del paladio. Esto último en la actualidad es importante ya que antes de implementar cualquier proceso es casi obligatorio realizar una simulación por computadora o el estudio previo de factibilidad del mismo.

1.3. Justificación del proyecto

El interés en el hidrógeno ha crecido debido a que se desea la independencia energética y la disminución de impactos ambientales. La obtención de hidrógeno mediante métodos renovables no se encuentra lo suficientemente desarrollada. Los procesos de separación y purificación de hidrógeno han tomado gran importancia en la actualidad debido a que garantizan obtener una pureza elevada del gas separado. La simulación de procesos tecnológicos en plantas industriales desempeña un papel importante ya que garantiza la eficiencia y resistencia de las instalaciones utilizando así una cantidad mínima de recursos. La simulación de los procesos de separación de gases es un área de gran interés en el ámbito científico ya que interactúa con tecnologías químicas tales como la refinación de petróleo, la petroquímica, la química fina, la obtención de combustibles gaseosos, la biología, entre otras. Además, es muy aprovechada por personal especializado, diseñadores de plantas, científicos. Al ser un software que es de fácil alcance, se puede acceder y simular una planta versátil en la que se puede variar los parámetros de acuerdo a la necesidad en un tiempo considerable y a su vez reduce el uso de recursos materiales, así como también evitar o predecir riesgos que se puedan ocasionar en el caso de que se lleve a la práctica. Para realizar la simulación de una tecnología se debe reducir a un modelo físico o lógico que indique el funcionamiento y la estructura del objeto por medio de un algoritmo matemático. Por lo tanto, con la simulación de dicho proceso se busca observar una aproximación del comportamiento y funcionamiento de la membrana a nivel industrial y cuál sería su rendimiento y desempeño.

En el presente trabajo mediante la simulación del proceso de obtención y purificación de hidrógeno se pretende analizar el comportamiento de la membrana de paladio atendiendo especialmente a las variables de operación como influye estos en el proceso. Para esto primero se realizó un análisis previo en un software para procesos químicos del cual se obtiene valores de flujo molar y flujo másico para posteriormente realizar un análisis riguroso mediante modelado CFD.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo General

Simular el proceso de obtención y purificación de hidrógeno a partir del biogás utilizando tecnología de membrana de paladio.

1.4.2. Objetivos Específicos

- Identificar parámetros de operación del proceso de obtención de hidrógeno utilizando biogás como materia prima.
- Diseñar el modelo de simulación para la purificación de hidrógeno en una membrana de paladio.
- Validar el modelo desarrollado con datos obtenidos de bibliografía.

1.5. Alcance

Se pretende evaluar y simular el proceso industrial de obtención de hidrógeno y el comportamiento de una membrana de paladio para aplicarla en operaciones industriales empleando un software de análisis de fluidos computacional que permite a bajo costo proponer configuraciones de membranas previa la experimentación. De este modo, incentivando el desarrollo controlado, el cual proteja y preserve el entorno que nos rodea, desde un punto de vista físico como social, buscando el crecimiento de la economía que este afín con el medio ambiente.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del Arte

Desde 1990 las membranas han sustituido varios procesos de separación tradicionales con mayor eficiencia, producción y con menor consumo energético. Gracias a la habilidad de crear materiales modificando las propiedades de acuerdo al uso final, la tecnología de membranas ha tenido un gran avance e impacto en la vida cotidiana, un ejemplo de los sistemas de membrana a gran escala es la tecnología de la ósmosis inversa aplicada al agua de mar para obtener agua desalinizada. J. F. Kennedy consideraba que la desalinización de agua de mar podría cambiar el mundo: *"Si alguna vez pudiéramos obtener de manera competitiva, a un precio económico, agua dulce del agua salada, eso realmente eclipsaría cualquier otro logro científico"* (Palacio et al., 2014, p.1-5).

La separación por membranas inició un papel importante en la biotecnología y la medicina, por otra parte, en la industria se utiliza el proceso de membrana de separación de gases que tuvo sus inicios hacia los años 1970 con la recuperación de hidrógeno o la necesidad de hidrógeno puro derivado de las regulaciones medioambientales. En la actualidad la separación de gases se utiliza para el tratamiento de gases de combustión, gas de síntesis y el control de las emisiones de gases y captura de dióxido de carbono. Otras aplicaciones incluyen la obtención de nitrógeno u oxígeno por separación del aire, la separación de dióxido de carbono para el control del efecto invernadero, la recuperación de compuestos orgánicos en corrientes de gases mixtos y deshidratación de gas natural. Por otro lado, las aplicaciones medioambientales se basan en la utilización de membranas, algunos ejemplos son la separación de gases, la eliminación de contaminantes microbianos o químicos. Cabe resaltar que en un futuro las membranas estarán presentes cuando los coches eléctricos con baterías se reemplacen por coches con celdas de combustible (Palacio et al., 2014, p.1-5).

Koffer, Holleck y Balovnev realizaron una primera aproximación en la identificación de los parámetros como la temperatura y la variación del gradiente de presiones para conocer como intervienen en la permeación de hidrógeno, utilizaron espesores de entre 500 y 1000 μm , así obtuvieron parámetros de energía de activación de 15.67, 12.81 y 15.46 kJ/mol; estos valores hacen referencia al conocido intervalo de las membranas de paladio (7-30 kJ/mol), este trabajo ha sido una de las primeras referencias que existe (De Falco et al., 2011, p. 21-55).

Ward y Dao (1999, p. 211-231) realizaron un modelo de velocidad detallado del proceso de permeación de hidrógeno en Pd, se revisó cuidadosamente los conceptos y la descripción del

modelo para cada uno de los procesos de velocidad involucrados en la permeación demostrando que el paso limitante en la permeación de hidrógeno en membranas de paladio es la difusión de los átomos de hidrógeno a través de la matriz metálica. Los elementos principales del modelo siguen un modelo postulado por Pick y Sonnenberg para describir la cinética de absorción de H₂ por permeación de Pd e H₂. También es necesario destacar el trabajo de Ali-Khan et al. (1978, p. 337-343) que aplicó conceptos de modelado cinético similares a los procesos de sorción de H₂ / Pd. Sin embargo, en modelos anteriores, siempre se han utilizado el equilibrio interfacial entre el metal y el gas a granel (ley de Sievert) en la interfaz y las expresiones cinéticas basadas en una baja cobertura de superficie. Debido al elevado costo del paladio Uemiya et al. (1991, p. 303-313) lograron la reducción del espesor del paladio de la membrana conservando su estabilidad mecánica, estudió sobre la caracterización de la separación de hidrógeno mediante una membrana compuesta que consiste en una fina película de paladio soportada sobre la superficie exterior de un cilindro de vidrio poroso.

Se constata que en la mayoría de publicaciones sobre membranas utilizan el software Aspen Plus ya que en efecto es el simulador de procesos químicos más utilizado, sin embargo, ninguna publicación realizaba la simulación de una membrana de paladio en dicho software. Cabe destacar el trabajo de Ana Martínez Díaz de la Universidad Politécnica de Madrid realizado en el 2018, utiliza el simulador antes mencionado para estudiar la separación de hidrógeno en una mezcla gaseosa por membranas densas de paladio, permitiendo la predicción del comportamiento de las membranas estudiadas en diferentes condiciones de operación como temperaturas y presiones elevadas sin la necesidad de experimentar.

2.2. Bases Teóricas

2.2.1. Biogás

Es un producto gaseoso resultante de la digestión anaerobia de materia orgánica bajo la acción de las bacterias metanogénicas. Por su alto contenido de metano se puede utilizar como un sustituto de los combustibles fósiles para obtener hidrógeno. Aunque es una fuente de energía renovable y neutra en carbono, su alta cantidad de CO₂ reduce la eficiencia del proceso en comparación con los sistemas basados en gas natural (Kong et al., 2020, p. 1-2).

La composición del biogás consta principalmente de metano, dióxido de carbono y otros gases inertes, por otro lado también depende del sustrato que se utilice como alimento y de la velocidad de alimentación del digester, por ejemplo, si se utiliza glucosa y almidón o celulosa, el biogás producido tendría la misma cantidad de metano y dióxido de carbono con una proporción de 50:50. Sin embargo, si el contenido de grasa es alto, la porción de metano del biogás sería más

alta que el dióxido de carbono. Otros gases que componen el biogás son el sulfuro de hidrógeno, el vapor de agua y el hidrógeno (Mel et al., 2015, p. 204-214).

2.2.2. Producción de Hidrógeno

El hidrógeno ha tomado gran interés para solucionar la creciente demanda mundial de energía por lo que se trata de encontrar soluciones energéticas sostenibles que sean amigables con el medio ambiente, debido a que los combustibles fósiles están restringidos geográficamente y su combustión produce emisiones de gases de efecto invernadero (Ishaq y Dincer, 2020, p. 2-12).

Es considerado como un combustible altamente flexible para utilizar de manera efectiva todo el potencial de los recursos renovables intermitentes y tiene una energía bruta o valor calorífico superior de 142 MJ / kg en comparación con el gas natural o el petróleo crudo que registran 52 y 45 MJ / kg respectivamente (Shakeel et al., 2021, p. 3).

Aproximadamente el 96% de la producción mundial de hidrógeno es obtenida de las materias primas fósiles, los métodos actuales para la producción de hidrógeno resultan costosos y están basados en la gasificación de combustibles fósiles a altas temperaturas y presiones. Los procesos basados en energías renovables o energía nuclear todavía no se hallan desarrollados completamente y su aplicación a escala industrial contrae costos elevados (Botas et al., 2005, p. 2-5). Existen varios procesos para la producción de H_2 , de acuerdo a las materias primas utilizadas, puede dividirse específicamente en dos tipos de tecnologías como son convencionales y renovables, visualizado en la figura 1-2.

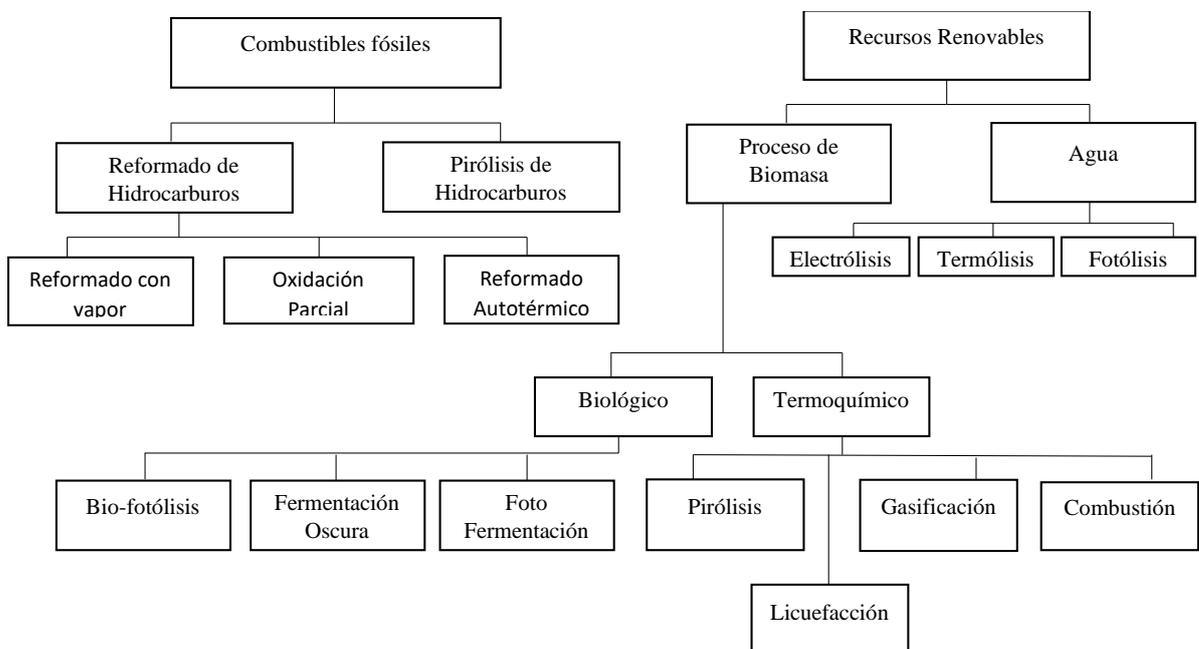


Figura 1-2: Métodos de producción de H_2

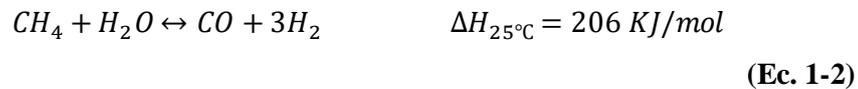
Fuente: (Nikolaidis y Poullickas, 2017).

A continuación, se describe los métodos de producción de hidrógeno usualmente utilizados a nivel industrial.

2.2.2.1. Reformado con vapor de gas natural o naftas ligeras

Durante décadas este método ha sido el más utilizado y más económico en la aplicación industrial, actualmente representa el 50% de la producción global de hidrógeno. Se desulfura el gas natural, posteriormente es mezclado con vapor de agua en presencia de un catalizador de base níquel, produciendo una mezcla de monóxido de carbono e hidrógeno conocida como gas de síntesis, mediante una reacción endotérmica a temperaturas elevadas entre 800 – 1000°C y presiones de 13 – 30 *bar* (Haryanto et al., 2005, p. 2098-2106).

Existen dos reacciones que involucran este proceso, las cuales son la conversión del hidrocarburo con el vapor de agua y la reacción de desplazamiento de agua-gas:

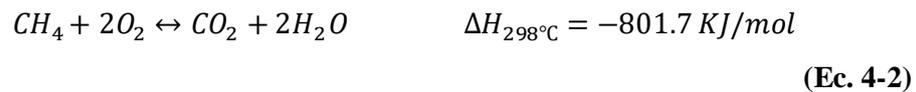
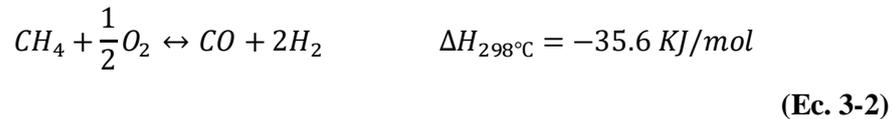


La reacción de reformado (Ec. 1-2) es altamente endotérmica a temperaturas elevadas entre 700 – 1000°C, con presiones bajas y cierto exceso de vapor de agua (Calvo, 2018, p. 17-18).

El metano (producto principal del biogás) está involucrado dentro los procesos de reformado más usuales de para la producción de hidrógeno, dentro de los cuáles se menciona el reformado con vapor, el reformado por oxidación parcial, el reformado autotérmico, el reformado en seco y el reformado por oxidación en seco. En gran parte los estudios científicos sobre reformado de biogás para producir hidrógeno, se refiere al uso de mezclas de biogás, modelo en las que solo están presentes el metano y dióxido de carbono. Se debe tener en cuenta las tres distintas composiciones del biogás: a) en natural con 55 – 70% CH_4 dentro de la mezcla, 30 – 45% CO_2 y 500 – 4000 *ppm* H_2S ; b) biogás parcialmente tratado para eliminar H_2S ; c) biogás purificado 93 – 96% CH_4 , 4 – 7% CO_2 , y menos de 20 *ppm* H_2S . Por lo general se utiliza catalizadores a base de Ni por su bajo costo, sin embargo, éste posee susceptibilidad de desactivación a la formación de coque debido a las altas temperaturas durante la reacción. A menudo para la producción de hidrógeno se ha aplicado al reformado con vapor de metano la tecnología de Reactor de Membrana (MR) basada en Pd (Iulianelli et al., 2015, p. 25-26).

2.2.2.2. Reformado por oxidación parcial

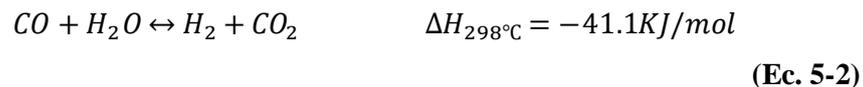
Es un método más económico debido a que la reacción es exotérmica como lo indica la Ecuación 3-2, lo que es inversamente al reformado con vapor que es endotérmico. Aquí el metano se oxida parcialmente a CO y H_2 (gas de síntesis) a temperaturas de $700 - 900^\circ C$ y presión atmosférica, una leve disminución en la selectividad del CO hace que el CH_4 reaccione con el O_2 formando CO_2 como indica la Ecuación 6-2 llegando a una combustión completa. La emisión de dióxido de carbono es la principal desventaja debido a la contaminación atmosférica provocada.



(Alves et al., 2013, p. 4).

2.2.2.3. Reacción de desplazamiento de gas - agua

Es una mezcla gaseosa formada principalmente por hidrógeno y monóxido de carbono, es una reacción exotérmica y aumenta la relación H_2 / CO .



Debido a que la Reacción de Desplazamiento de Gas-Agua (WGSR) es moderadamente exotérmica, la constante de equilibrio disminuye con la temperatura, y las bajas temperaturas favorecen las conversiones altas. La presencia de vapor en cantidades mayores que la cantidad estequiométrica mejora la conversión. Aunque el equilibrio favorece la formación de productos a temperaturas más bajas, la cinética de reacción domina a temperaturas elevadas (Idriss et al., 2015, p.10).

2.2.3. Proceso de Permeación

El hidrógeno mayormente se obtiene de combustibles fósiles; sin embargo, la producción de hidrógeno a base de biomasa se usa como una alternativa para reutilizar el gas natural y presenta mayor rendimiento en la producción de hidrógeno, se emplea el Reformado de Metano con Vapor (SMR), debido a que es un proceso más económico y eficaz (Kim et al., 2017, p. 2-6).

En el proceso de SMR incluye un reactor de reformado de vapor, reactores de cambio de agua para cambio de alta y baja temperatura, y adicional a esto un sistema de purificación del gas. La

diferencia de temperaturas implica pérdidas de energía térmica y económicas, esa es una de las razones por las que se utilizan metodologías alternativas como los reactores de membrana, mientras que, en el caso de los reactores de membrana de paladio, se eliminan las unidades de purificación de hidrógeno debido a las propiedades del paladio, en este proceso SMR con membranas de paladio se alcanzan los mismos porcentajes de conversión que en el sistema tradicional. Para alcanzar una mayor eficiencia dentro del proceso se requiere una diferencia de presiones elevada entre el flujo de conversión en donde recorren los productos y el gas de barrido. Los parámetros de presión y temperatura usados en trabajos de investigación para alcanzar un mayor rendimiento de conversión mediante un alto diferencial de temperatura transmembrana fueron de 823 °K y un rango de variación de presión de 203 a 912 (Kim et al., 2017, p. 2-6).

2.2.4. Reactores de Membrana

La tecnología de membranas es una buena opción de separación la cual provee una solución eficiente a un costo moderado, de este modo las membranas densas a base de paladio son una opción ideal en la purificación de hidrógeno ya que posee una selectividad casi completa del hidrógeno, alta estabilidad térmica y resistencia mecánica; aunque comercialización tiene ciertos límites ya que poseen baja permeabilidad y su elevado costo. Cabe mencionar que estas membranas se pueden utilizar en un reactor de membrana, brindando la posibilidad de combinar tanto la reacción química para la producción de hidrógeno como la etapa de purificación en un dispositivo único (Alique et al., 2018, p. 1-4).

Se ha desarrollado varios tipos de Reactores de Membrana (MR) dentro de los cuáles se puede mencionar: reactores de membrana inorgánica densos y porosos, reactores de membrana de zeolita, reactores de membrana polimérica, reactores de membrana enzimática, reactores biomédicos de membrana o biorreactores de membrana que utilizan células, reactores de membrana electroquímica, reactores de membrana fotocatalíticos (Iulianelli et al., 2014, p. 358-362). Los reactores de membrana basados en Pd tienen la capacidad de aumentar el rendimiento de H_2 y la conversión de gas natural a bajas temperaturas, a diferencia de las plantas convencionales de reformado con vapor para la producción de hidrógeno (Morico et al., 2019, p. 1-2).

El transporte molecular de hidrógeno en las membranas de paladio tiene lugar a través de un mecanismo de solución/difusión, desarrollado en seis pasos activados diferentes: disociación del hidrógeno molecular en la interfase gas/metál; adsorción del hidrógeno atómico en la superficie de la membrana; disolución de hidrógeno atómico en la matriz de paladio; difusión de hidrógeno atómico a través de la membrana; recombinación de hidrógeno atómico para formar moléculas de hidrógeno en la interfaz gas/metál; desorción de moléculas de hidrógeno (Iulianelli et al., 2014, p. 358-362).

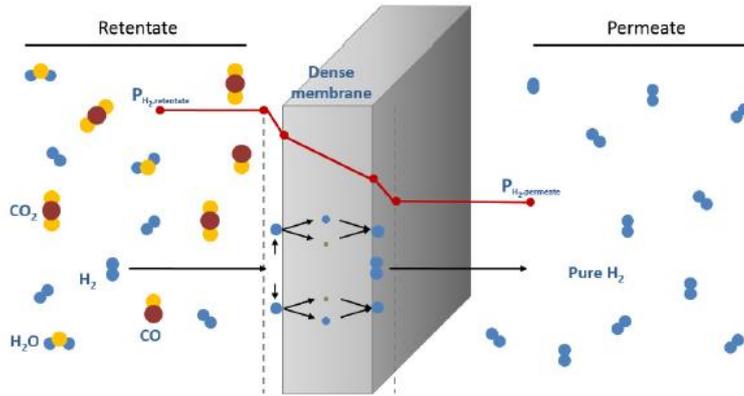


Figura 2-2: Mecanismo de difusión de solución para la penetración de H_2 a través de la red metálica de una membrana densa

Fuente: (Alique et al., 2018).

2.2.5. Modelo CFD

En la actualidad el desarrollo de métodos numéricos avanzados y sistemas informáticos permiten la aplicación de un software para obtener una solución numérica para problemas matemáticos complejos que logren acercarse a la realidad (Suarez et al., 2013, p. 1-3).

Para plantear el modelo de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) es necesario conocer los componentes químicos de los gases reactivos presentes en la obtención del biogás, como el metano (CH_4) y el agua (H_2O), los cuales alimentan al reactor de membranas de paladio a la entrada. A medida que los gases fluyen en el lecho de relleno de catalizador, empiezan los procesos de reformado de metano a vapor (MSR) y el fenómeno de reacción de desplazamiento de gas - agua (WGS) (Ji et al., 2018, p. 884-890).

El filtrado de H_2 y la sorción de CO_2 solo ocurren entre la entrada de alimentación y la salida del gas no filtrado. Para hacer más simple la formulación CFD solo se simularán los procesos en la zona entre la membrana y la carcasa del reactor, que es modelada como un cilindro hueco. En vista de la simetría axial del reactor, solamente se tomará en cuenta un porcentaje de la zona de reacción con planos de simetría en ambos lados para ahorrar tiempo de cálculo y optimizar recursos computacionales.

2.2.6. Interfaces de modelado y simulación

2.2.6.1. Ecuaciones base de la interfaz de modelado

Es un conjunto de interfaces físicas básicas para áreas de aplicación de la física común tales como el análisis estructural; flujo laminar; la acústica de presión; el transporte de especies

diluidas; electrostática; corrientes eléctricas; transferencia de calor.

2.2.6.2. Sistema de coordenadas

Se puede definir cualquier número de sistemas locales, pero también existen atajos tales como cilíndrica, esférica y un método para la creación automática de coordenadas para el sistema.

2.2.6.3. Acoplamientos de modelo

Trabaja en 3D, 2D, 1D Y 0D con lo que se puede determinar cualquier cantidad a través de dimensiones espaciales.

(Montes, 2015, p. 12-17).

2.2.7. Mallado

Disposición herramientas automáticas y semiautomáticas, incluyendo mallado tetraédrico libre y de barrido. Por defecto el algoritmo es tetraédrico automático para la definición de la física en sólidos, una combinación de mallado tetraédrico y capa límite para fluidos; también puede tomarse el control total de la secuencia de operaciones utilizadas para crear la malla mediante la definición de una secuencia (Montes, 2015, p. 12-17).

2.3. Marco Legal

2.3.1. Nacional

Tabla 1-2: Normativa acerca de software libre

Normativa	Observaciones
Decreto 1040 (abril 2008)	“Artículo 2.- “Se entiende por software libre, a los programas de computación que son utilizados y distribuidos sin restricción, permitiendo el acceso a los códigos fuentes y que sus aplicaciones puedan ser mejoradas. Poseen las siguientes libertades: a) Utilización del programa con cualquier propósito.

	<p>b) Distribución de copias sin restricción alguna;</p> <p>c) Estudio y modificación del programa;</p> <p>d) Publicación del programa mejorado”</p> <p>(Gobierno del Ecuador, 2008).</p>
<p>Plan nacional de gobierno electrónico (2015)</p>	<p>“El Plan Nacional de Gobierno Electrónico propone un modelo incluyente, cercano al ciudadano, eficaz y eficiente, alineado a la política pública del Gobierno Nacional, el mismo que busca una mayor participación e interacción entre los ciudadanos y el Estado.”</p> <p>Principio 7. Principio de adecuación tecnológica: “Recomienda el uso de estándares abiertos y de software libre en razón de seguridad, sostenibilidad a largo plazo y socialización del conocimiento”</p> <p>(Gobierno Electrónico, 2015)</p>

Fuente: Varios.

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA

En el presente trabajo se pretende realizar el análisis de resultados mediante datos numéricos del porcentaje de conversión del metano, flujos másicos, presiones y temperaturas.

La figura 1-3, representa un esquema de iteración de resistencia-flujo-presión. Si no se alcanza una convergencia en los resultados se vuelve a realizar otra iteración, hasta que los resultados se estabilicen, para lo cual será necesario variar la calidad de la malla y los parámetros que se ingresa en el software y las condiciones de frontera, con la finalidad de obtener en la simulación CFD resultados más reales en cuanto a la obtención de hidrogeno a partir del biogás por medio de una membrana de paladio.

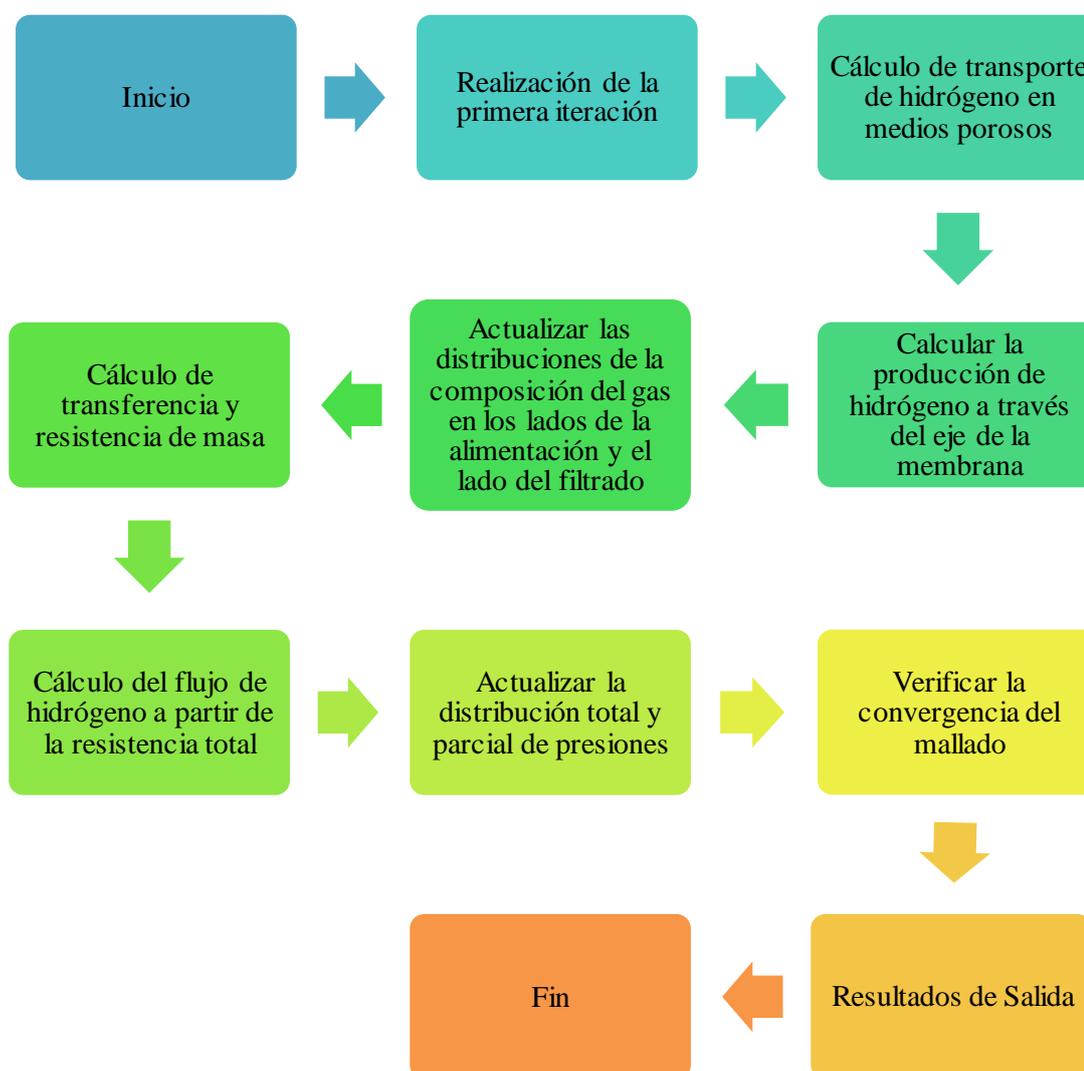


Figura 1-3. Metodología del desarrollo del proyecto

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021.

El enfoque de investigación empleada es de tipo cuantitativo ya que se basa en el análisis de resultados mediante datos numéricos del porcentaje de conversión del metano, flujos másicos, presiones y temperaturas, se busca explicar el fenómeno de permeación de hidrógeno a través de la membrana de paladio y la influencia que tiene en la eficiencia del proceso. Con esta metodología se explican los resultados obtenidos con referencia a la manipulación de las variables.

El tipo de investigación es bibliográfica debido a que netamente se analiza la información de investigaciones similares sobre el proceso de obtención de hidrógeno mediante reformado de vapor, simulaciones de la membrana con elementos finitos, utilización un software de simulación CFD y la simulación del proceso mediante un software de simulación para procesos químicos. Además, se estudia el caso específico de obtención de hidrógeno mediante el proceso de permeado mediante una membrana de paladio tomando en cuenta todas las variables del proceso como presiones y temperaturas.

3.1. Definición de Parámetros

Este trabajo se basa en la información del artículo científico “Modelado CFD de separación de hidrógeno a través de una membrana basada en Pd” escrito por Rached, Abuelyamen y Habib, del cual se obtendrán los parámetros de funcionamiento para llevar a cabo la simulación de la purificación del hidrógeno a través de una membrana de paladio en un software de análisis CFD.

En el estudio efectuado por investigadores de Corea (Kim et al., 2017) se muestra el diagrama de flujo del proceso para un reactor de membrana, empleó el software de simulación para procesos químicos para comparar los datos obtenidos de la simulación con los datos experimentales, este proceso se basó en la metodología propuesta en investigaciones anteriores de (Roberts et al., 2008) debido a que en el software no existe un modelo exacto al del reactor de membrana de Pd cuyo diagrama de flujo se muestra en la Figura 2-3.

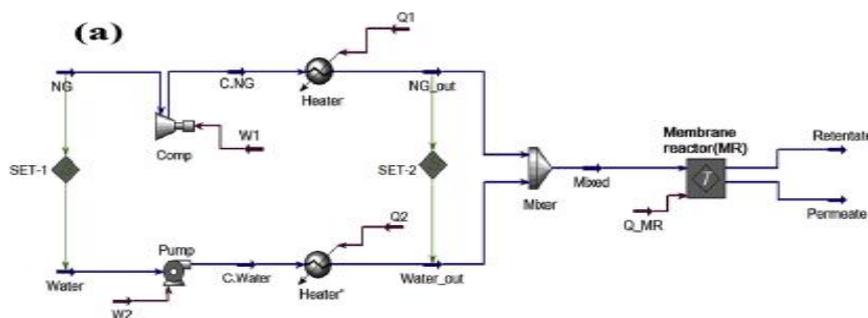


Figura 2-3. Diagrama de flujo de procesos (PFD) para un reactor de membrana

Fuente: (Kim et al., 2017).

A pesar de que los datos de entrada de la simulación que se expone en la investigación son limitados, se pudo conocer que en el proceso experimental el porcentaje de conversión alcanzado fue del 82% con una diferencia de presiones de 912 kPa; mientras que en el proceso de simulación se obtuvieron resultados favorables en la variación gradual de la presión, estos resultados tuvieron una desviación del 9 al 14% comparados con la fase experimental (Kim et al., 2017, p. 2-6).

3.1.1. *Determinación de las variables de estudio*

- Variable dependiente

Obtención y purificación de hidrógeno a partir de biogás

- Variable independiente

Proceso de tecnología de membrana de paladio

3.1.2. *Operacionalización de variables*

Tabla 1-3: Operacionalización de la variable dependiente

Variable dependiente	Categoría	Indicador	Unidades	Técnicas e instrumentos
Para la obtención de hidrógeno se emplean múltiples procesos que pueden ir desde la purificación a partir de hidrocarburos, y existen otros métodos alternativos que utilizan biogás para procesos más ecológicos y eficientes.	Cantidad de hidrógeno	Flujo másico	Resultado de cada iteración en $\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ Pa^{-1}	<ul style="list-style-type: none"> - Experimentación - Software de simulación - Fichas de registros de resultados
	Porcentaje de conversión	CH_4/H_2	Resultado de cada iteración en %	

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

Tabla 2-3: Operacionalización de la variable independiente

Variable independiente	Categoría	Indicador	Unidades	Técnicas e instrumentos
El proceso de tecnología de paladio empleado para la purificación o permeación de hidrógeno es una metodología innovadora que permite la selección de hidrógeno directa gracias a que es un material catalizador y posee buenas propiedades en cuanto la porosidad del material y rangos de operación.	Condiciones termodinámicas	Temperatura	°K	- Experimentación - Software de simulación - Fichas de registros de resultados
		Presión	Pa	
	Propiedades de la membrana	Porosidad	Porcentaje	
		Densidad	kg/m ³	
		Viscosidad	Pa.s	

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

3.1.3. *Parámetros de la simulación en software*

3.1.3.1. *Parámetros de simulación en el software para procesos químicos*

➤ Componentes

El primer parámetro a considerarse es el listado de componentes que se ingresarán como datos en la simulación; en este caso, se incluyen todos los elementos que conforman las dos reacciones principales descritas en el marco teórico. Los componentes son: CH₄, H₂O, H₂, CO, CO₂.

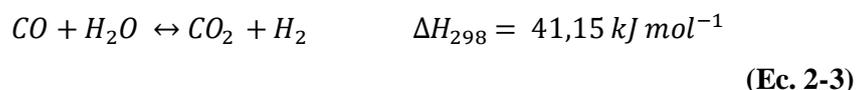
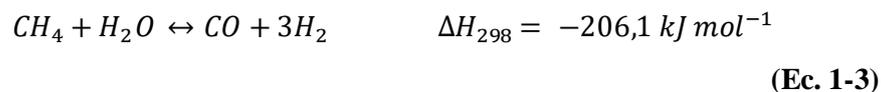
➤ Principios termodinámicos y reacciones

Para la aplicación de paquetes termodinámicos en el software de simulación se utiliza el principio de Peng Robinson puesto que permite determinar las variables de operación con derivados de hidrocarburos, gases y agua.

➤ Reacciones cinéticas

Se considera la cinética química como el tratamiento de las reacciones debido a que los fluidos presentes en ellas cambian de presión y temperatura modificando el comportamiento molecular

de manera que aumenta su movimiento. A continuación, se presentan las reacciones de análisis. Los parámetros de las reacciones cinéticas empleadas fueron obtenidos de estudios previos (Hou y Hughes, 2001, p. 8-10).



➤ Equipos

En el diagrama de flujo del proceso para la simulación se emplean librerías con los equipos esenciales para el funcionamiento de cualquier proceso. En la etapa de simulación se omite el proceso de obtención de metano a partir del biogás, es decir, que el diagrama de flujo parte con dos líneas de alimentación que corresponden a agua y metano, en la tabla 3-3 se describe la función de cada equipo; mientras que en las tablas 4-3 y 5-3 se encuentran los parámetros empleados para la validación del diagrama de flujo para la simulación.

Tabla 3-3: Equipos empleados en el proceso

Equipo	Función
Compresor	Empleado para aumentar la presión en una corriente de gas
Bomba	Aumentar la presión en el fluido para transportarlo o impulsarlo de un medio con menor presión hacia otro medio.
Calentador	Calentamiento de las corrientes de alimentación
Mezclador	Combina varias corrientes de materia para una sola línea de salida
Gibbs Reactor	Equilibrio químico multifásico. Calcula las composiciones de salida, equilibrios químicos.
Component Splitter	Empleado para la simulación de procesos de separación no estándares que no se encuentran de manera específica en la librería.

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

El siguiente punto a especificarse es los parámetros de entrada que se encuentran en la Tabla 4-3 y los parámetros de la reacción que se encuentran en la tabla 5-3, los mismos que sirven para la validación del modelo para la simulación y que corresponden a los parámetros usados tradicionalmente en el proceso de reformado de vapor; estos parámetros cambian cuando se usa membrana de paladio puesto que esta tecnología permite emplear temperaturas inferiores en el sistema de reformado y purificación que ocurren de manera simultánea. Cabe recalcar que no existe una librería que represente exactamente el funcionamiento de la membrana de Pd por lo

que mediante la bibliografía consultada se ha establecido que este modelo permite tener una visualización muy similar del proceso con el uso del component splitter o separador que permite la purificación del hidrógeno como lo haría de manera selectiva la membrana de Pd.

Tabla 4-3: Variables de entrada del proceso

Compuestos	Flujo másico (kg/h)	Temperatura (°C)	Presión (bar)
H2O	54,05	25	1,013
CH4	16,04	40	1,013

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

Tabla 5-3: Parámetros de la reacción en el proceso de obtención de H₂

Procesos	Flujo másico (kg/h)	Temperatura (°C)	Presión (KPa)
Reformado de Vapor	70,09	745,8	1
Separación H2	70,09	450	1

Fuente: (Ji et al., 2018).

➤ Diagrama de flujo del modelo para la simulación

Mediante la Figura 3-3 se presentan dos líneas de flujo que corresponden a H₂O y CH₄ en el proceso de obtención de hidrógeno mediante reformado de vapor y purificación de hidrógeno del cual se obtiene una línea de flujo de hidrógeno permeado y una línea con el flujo retenido que necesita procesarse nuevamente.

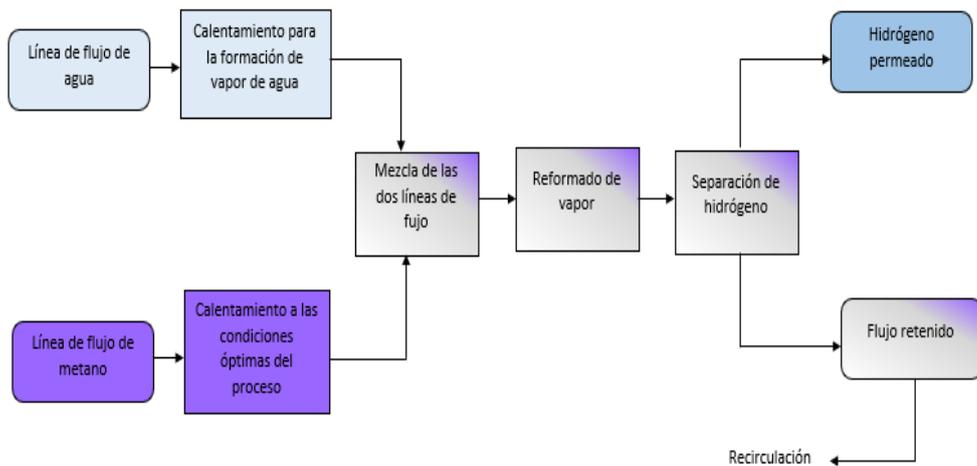


Figura 3-3. Diagrama de flujo del proceso mediante el cual se simula la obtención de H₂

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

3.1.3.2. Parámetros de simulación en el software de simulación CFD

En vista de las limitaciones existentes para el análisis del funcionamiento de la membrana de paladio mediante el uso del software para procesos químicos se planteó analizar su funcionalidad mediante el uso de un software de simulación CFD puesto que su principio de análisis por elementos finitos con el cual se puede modelar la membrana de Pd y colocar los parámetros de funcionamiento obtenidos mediante bibliografía para determinar de forma más real su comportamiento.

➤ Modelo CFD

El modelo CFD se compone de la sección del retenido, permeado y además de la membrana de paladio. Para cada especie que penetra a través de la membrana, las velocidades de difusión son iguales al flujo de penetración determinado por y para las especies no permeadas, la derivada radial de la concentración es cero.

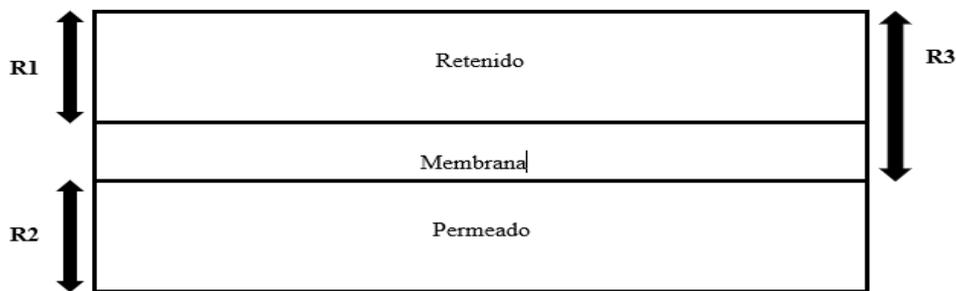


Figura 4-3. Modelo simplificado del reactor de membrana de Paladio en una geometría 2D

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021.

➤ Solución del Modelo CFD

Las ecuaciones que gobiernan el sistema fueron desarrolladas mediante un modelo CFD se resuelven utilizando un método de elementos finitos. Inicialmente se consideró un valor muy bajo de composición de hidrógeno en la entrada para reducir los errores en los resultados obtenidos por el programa.

Los resultados se evalúan en función de la siguiente expresión:

Producción Total de Hidrógeno

$$H_p = \frac{H_{permeado} - H_{retenido}}{C_3 * H_{4in}} * 100$$

(Ec. 3-3)

➤ Convergencia de mallado

Para obtener un modelo CFD exacto, primero es importante encontrar un rango de números de malla donde los resultados de la simulación no dependan del número de malla en sí.

Las simulaciones se realizaron fijando la presión en 1,5 bar, la temperatura de reacción en 513 K, la velocidad espacial horaria del gas (GHSV) en 6000 h^{-1} , la relación molar en 3/1 y el factor de barrido igual a 6, el efecto del número de elementos en el rendimiento de hidrógeno simulado por el modelo CFD durante la reacción. Al variar el número o tamaño de elementos, el rendimiento de hidrógeno cambia notablemente.

El modelo de mallado empleado se enfoca en el área de convergencia donde interactúa la membrana con el lado permeado y el lado retenido, dado que el tamaño de la membrana corresponde a 0,07 mm el tamaño de elemento en esta área es muy pequeño, para optimizar los recursos computacionales se asignan elementos más grandes en las áreas donde la geometría es de mayor tamaño mientras que en los sectores más pequeños el tamaño de elemento se optimiza automáticamente por el software.

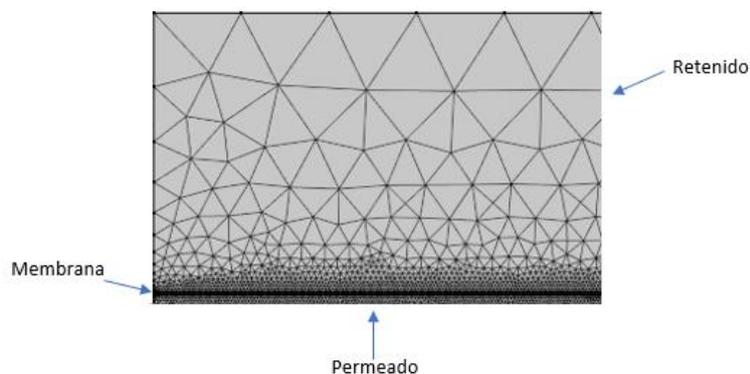


Figura 5-3. Mallado del modelo CFD 2D

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

➤ Parámetros de simulación

Tabla 6-3: Parámetros de entrada en la simulación

Parámetro	Valor	Unidad
Presión de alimentación	$1 \times 10^5 - 2.1 \times 10^5$	Pa
Temperatura	573 - 800	K
Caudal	1 - 20	L/min
Porosidad de membrana	15	%
Espesor de Membrana	0.07	mm
Energía de activación	5.5424×10^{-3}	J Mol^{-1}

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

➤ Configuración

Para realizar el análisis por elementos finitos se utilizó el módulo “transporte de especies diluidas”, este módulo a diferencia de otros en el mismo programa considera la reacción química de los materiales que son asignados, en este caso se tomó en cuenta 3 especies:

- Metano (CH₄)
- H₂O (como gas de barrido)
- Hidrógeno

Este modelo también permite simular el paso de los elementos a través de la membrana asignada y conocer cómo se realiza la producción de hidrógeno variando algunos parámetros de la simulación esencialmente la presión y la temperatura y conocer cómo influyen estos valores en la cantidad de hidrógeno que se produce.

➤ Convergencia de malla

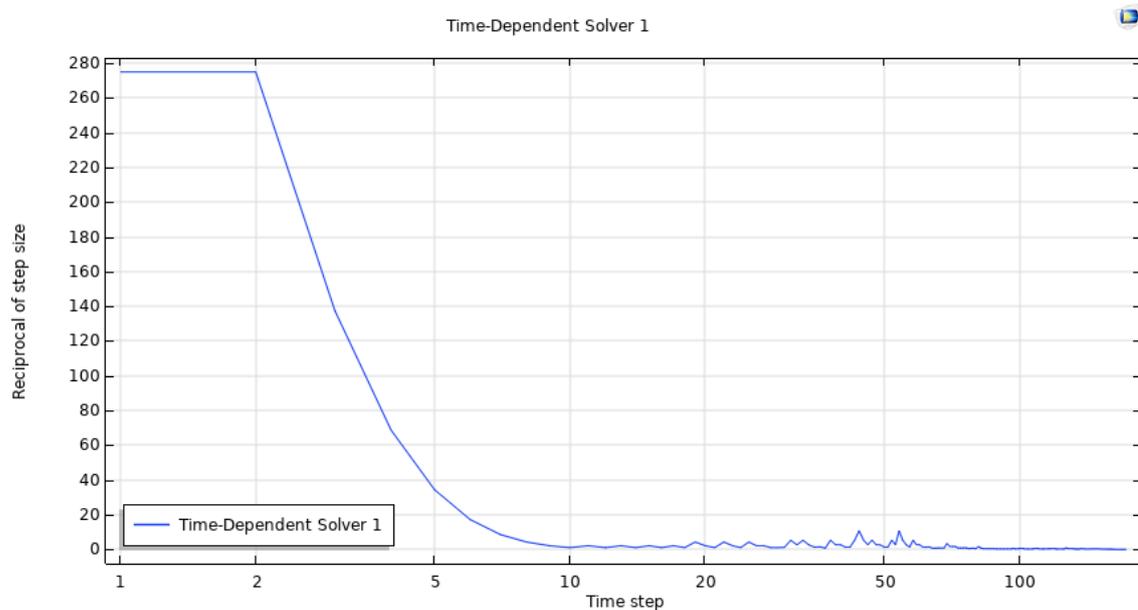


Gráfico 1-3. Análisis de convergencia del malla en función del tiempo de solución y los resultados obtenidos

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021.

En el gráfico 1-3 se puede apreciar la convergencia de los resultados obtenidos en función del tiempo de solución con un tamaño de elemento preestablecido por el software, la gráfica indica que los valores se estabilizan a partir de los 15 intervalos de solución aproximadamente, lo que quiere decir que allí se encuentran los resultados más confiables.

➤ Funcionamiento del modelo CFD

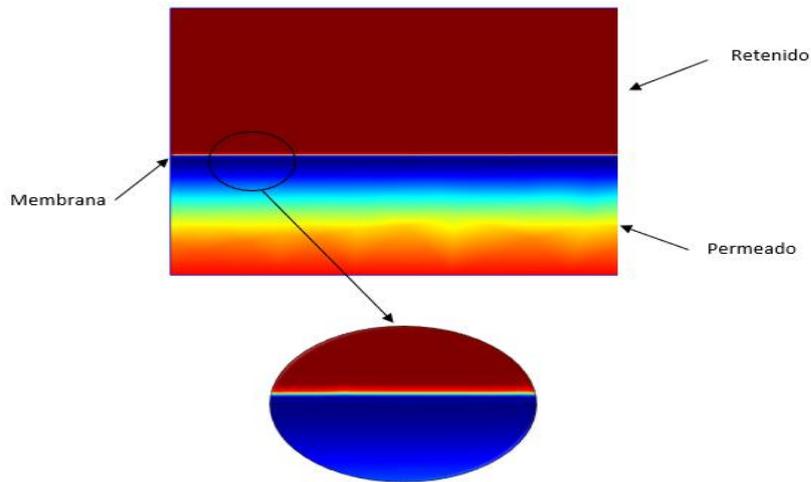


Gráfico 2-3. Esquema del modelo CFD en el software de elementos finitos

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021

El metano y el gas de barrido ingresan por el lado del retenido y la reacción química y el proceso de permeado se llevan a cabo en la membrana que tiene un espesor muy pequeño en comparación con los radios de los conductos de permeado y retenido, la producción de hidrógeno se lleva a cabo en el lado permeado, en donde se mide la concentración a través de un mapa de colores propio del análisis por elementos finitos y mediante los datos proporcionados asignados al tipo de color.

3.2. Validación del modelo para la simulación

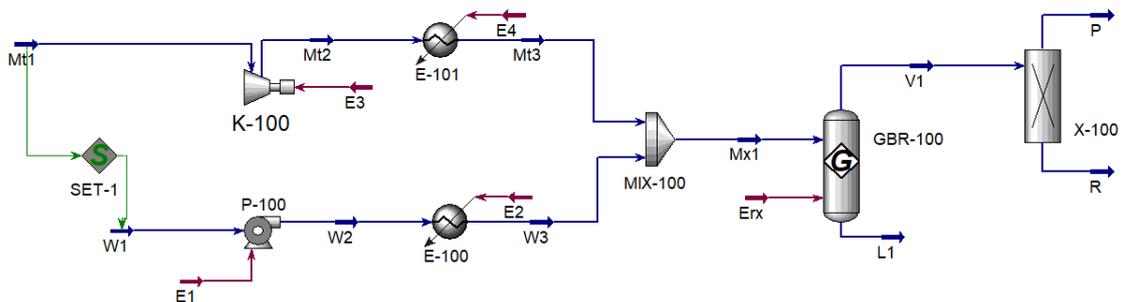


Figura 6-3. Diagrama de flujo del proceso de obtención de H_2

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021.

En la figura 6-3 el diagrama de flujo del proceso desarrollado mediante un software para procesos químicos, se colocaron los parámetros de funcionamiento para la validación del proceso mediante lo expuesto en (Ji et al., 2018) y la eficiencia de conversión.

Name	Mx1	L1	V1
Vapour	1,0000	0,0000	1,0000
Temperature [C]	745,8	450,0	450,0
Pressure [bar]	1,000e-002	1,000e-002	1,000e-002
Molar Flow [kgmole/h]	4,000	0,0000	5,953
Mass Flow [kg/h]	70,09	0,0000	70,09
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1077	0,0000	0,1776
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-4,063e+004	-2,196e+004	-2,196e+004
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	268,6	217,4	217,4
Heat Flow [kcal/h]	-1,625e+005	0,0000	-1,308e+005

	Mx1	L1	V1
Methane	0,2500	0,0039	0,0039
H2O	0,7500	0,2182	0,2182
Hydrogen	0,0000	0,6138	0,6138
CO	0,0000	0,0424	0,0424
CO2	0,0000	0,1216	0,1216

Figura 7-3. Condiciones de operación de los elementos en el reactor

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021

En la Figura 7-3 se muestra los parámetros de operación de cada línea del reactor tanto de entrada como de salida, el flujo completo se dirige al separador en fase de vapor y con las fracciones molares de cada elemento como se presenta en la parte inferior de la tabla.

Name	V1	P	R
Vapour	1,0000	1,0000	1,0000
Temperature [C]	450,0	450,0	450,0
Pressure [bar]	1,000e-002	1,000e-002	5,218e-003
Molar Flow [kgmole/h]	5,953	3,654	2,299
Mass Flow [kg/h]	70,09	7,367	62,72
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1776	0,1055	7,216e-002
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,196e+004	2943	-6,155e+004
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	217,4	187,0	256,8
Heat Flow [kcal/h]	-1,308e+005	1,076e+004	-1,415e+005

	V1	P	R
Methane	0,0039	0,0000	0,0101
H2O	0,2182	0,0000	0,5650
Hydrogen	0,6138	1,0000	0,0000
CO	0,0424	0,0000	0,1098
CO2	0,1216	0,0000	0,3150

Figura 8-3. Condiciones de operación de los elementos en el separador

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021.

En la Figura 8-3 de igual manera se muestran las condiciones de operación de cada línea de salida del separador, así como de la línea de entrada, en este caso se observa que el flujo molar de entrada al separador de 5,053 kgmol/h se divide en 3,654 kgmol/h a la línea de permeado que contiene

únicamente hidrógeno y 2,299 kgmol/h dirigido a la línea de retenido que contiene los residuos de la conversión que pueden tener otro tipo de tratamiento de separación de CO₂ o recirculación. Con estos resultados se puede determinar que el modelo cumple satisfactoriamente con las condiciones de operación en donde se obtiene una conversión del 61,4% dentro del rango propuesto por (Ji et al., 2018) y (Kim et al., 2017) en donde se expone que un sistema de reformado de vapor opera con rangos de conversión del 50 al 80% .

3.3. Recolección de información y procesamiento

En el estudio se analizará el comportamiento del sistema, y la conversión de hidrógeno obtenida a partir de varias iteraciones en donde se modificarán los valores de presión y temperatura en los parámetros de las reacciones descritos en la tabla 7-3. Para la recolección de información se elaborarán fichas de registros de datos para luego procesarlos mediante gráficas de conversión de hidrógeno vs temperatura y presión empleados.

Tabla 7-3: Parámetros para la simulación del caso de análisis

Procesos	Flujo másico (kg/h)	Temperatura (K)	Presión (KPa)
Reformado de Vapor	70,09 kg/h	573 – 800	100 – 210
Separación de H ₂			

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

CAPÍTULO IV

4. GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1. Cronograma

Tabla 1-4: Cronograma del proyecto

ACTIVIDAD	TIEMPO																							
	Mes 1				Mes 2				Mes 3				Mes 4				Mes 5				Mes 6			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Planteamiento de objetivos																								
Revisión bibliográfica del proceso																								
Elaboración del anteproyecto																								
Estudio de simulación																								
Progreso del modelado CFD																								
Validación del modelo																								
Discusión de resultados																								
Realización del documento final																								

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

4.2. Recursos y Materiales: humanos, equipos y financiamiento

4.2.1. Presupuesto

Tabla 2-4: Presupuesto del proyecto

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Curso de simulación CFD	\$250	X	

Curso de simulación para procesos químicos	\$100	X	
Resmas de papel	\$30	X	
Impresiones, copias	\$100	X	
Empastados	\$60	X	
Otros	\$20	X	
TOTAL	\$560		

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

4.2.2. *Talento Humano*

Tabla 3-4: Talento humano del proyecto

Nombre	Labor
Marlid Guerrero	Autor
Celso Recalde	Tutor
César Puentes	Miembro

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

4.2.3. *Recursos Materiales*

Tabla 4-4: Recursos materiales para el proyecto

Materiales	<ul style="list-style-type: none"> ❖ Computadora con 2GB de RAM. ❖ Papers (revisión bibliográfica).
Software	<ul style="list-style-type: none"> ❖ Simulador para procesos químicos. ❖ Simulador de modelado CFD.

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

4.3. **Resultados, Discusión y Análisis de Resultados**

4.3.1. *Resultados obtenidos de la simulación en el software para procesos químicos*

Como primera instancia se tienen los resultados obtenidos de la simulación del proceso de obtención de hidrógeno.

Tabla 5-4: Resultados de la primera simulación

N° de simulación:	01	Proceso:	Separación de hidrógeno																																																																
Criterio:	Aproximación al reactor de membrana de Pd (MSR + Separación)																																																																		
Características de la simulación:	Caudal:	Temperatura:	Presión:																																																																
	70,09 kg/h	573 °K	100 KPa																																																																
Resultados de simulación:																																																																			
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Vapour</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> </tr> <tr> <td>Temperature [C]</td> <td>299,9</td> <td>299,9</td> <td>299,9</td> </tr> <tr> <td>Pressure [bar]</td> <td>1,000e-002</td> <td>1,000</td> <td>2,722e-002</td> </tr> <tr> <td>Molar Flow [kgmole/h]</td> <td>4,834</td> <td>1,661</td> <td>3,173</td> </tr> <tr> <td>Mass Flow [kg/h]</td> <td>70,09</td> <td>3,349</td> <td>66,74</td> </tr> <tr> <td>Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]</td> <td>0,1405</td> <td>4,794e-002</td> <td>9,257e-002</td> </tr> <tr> <td>Molar Enthalpy [kcal/kgmole]</td> <td>-3,391e+004</td> <td>1890</td> <td>-5,265e+004</td> </tr> <tr> <td>Molar Entropy [kJ/kgmole-C]</td> <td>228,0</td> <td>141,9</td> <td>236,5</td> </tr> <tr> <td>Heat Flow [kcal/h]</td> <td>-1,639e+005</td> <td>3139</td> <td>-1,670e+005</td> </tr> </tbody> </table> <table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Methane</td> <td>0,1206</td> <td>0,0000</td> <td>0,1837</td> </tr> <tr> <td>H2O</td> <td>0,4495</td> <td>0,0000</td> <td>0,6848</td> </tr> <tr> <td>Hydrogen</td> <td>0,3436</td> <td>1,0000</td> <td>0,0000</td> </tr> <tr> <td>CO</td> <td>0,0015</td> <td>0,0000</td> <td>0,0023</td> </tr> <tr> <td>CO2</td> <td>0,0848</td> <td>0,0000</td> <td>0,1292</td> </tr> </tbody> </table>				Name	V1	P	R	Vapour	1,0000	1,0000	1,0000	Temperature [C]	299,9	299,9	299,9	Pressure [bar]	1,000e-002	1,000	2,722e-002	Molar Flow [kgmole/h]	4,834	1,661	3,173	Mass Flow [kg/h]	70,09	3,349	66,74	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1405	4,794e-002	9,257e-002	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-3,391e+004	1890	-5,265e+004	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	228,0	141,9	236,5	Heat Flow [kcal/h]	-1,639e+005	3139	-1,670e+005		V1	P	R	Methane	0,1206	0,0000	0,1837	H2O	0,4495	0,0000	0,6848	Hydrogen	0,3436	1,0000	0,0000	CO	0,0015	0,0000	0,0023	CO2	0,0848	0,0000	0,1292
Name	V1	P	R																																																																
Vapour	1,0000	1,0000	1,0000																																																																
Temperature [C]	299,9	299,9	299,9																																																																
Pressure [bar]	1,000e-002	1,000	2,722e-002																																																																
Molar Flow [kgmole/h]	4,834	1,661	3,173																																																																
Mass Flow [kg/h]	70,09	3,349	66,74																																																																
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1405	4,794e-002	9,257e-002																																																																
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-3,391e+004	1890	-5,265e+004																																																																
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	228,0	141,9	236,5																																																																
Heat Flow [kcal/h]	-1,639e+005	3139	-1,670e+005																																																																
	V1	P	R																																																																
Methane	0,1206	0,0000	0,1837																																																																
H2O	0,4495	0,0000	0,6848																																																																
Hydrogen	0,3436	1,0000	0,0000																																																																
CO	0,0015	0,0000	0,0023																																																																
CO2	0,0848	0,0000	0,1292																																																																

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021.

La tabla 5-4 indica que en el proceso se obtuvo un total de 1,661 kgmol/h de hidrógeno que corresponde al 34,4% de conversión como resultado. En este caso la cantidad es muy pequeña por lo que se puede deducir que las condiciones de operación no son muy óptimas debido a que no alcanzan el rango mínimo establecido del 50%.

Tabla 6-4: Resultados de la segunda simulación

N° de simulación:	02	Proceso:	Separación de hidrógeno																																								
Criterio:	Aproximación al reactor de membrana de Pd (MSR + Separación)																																										
Características de la simulación:	Caudal:	Temperatura:	Presión:																																								
	70,09 kg/h	618,4 °K	122 KPa																																								
Resultados de simulación:																																											
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Vapour</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> </tr> <tr> <td>Temperature [C]</td> <td>345,3</td> <td>345,3</td> <td>345,3</td> </tr> <tr> <td>Pressure [bar]</td> <td>1,000e-002</td> <td>1,220</td> <td>5,808e-002</td> </tr> <tr> <td>Molar Flow [kgmole/h]</td> <td>5,257</td> <td>2,479</td> <td>2,778</td> </tr> <tr> <td>Mass Flow [kg/h]</td> <td>70,09</td> <td>4,997</td> <td>65,09</td> </tr> <tr> <td>Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]</td> <td>0,1564</td> <td>7,153e-002</td> <td>8,488e-002</td> </tr> <tr> <td>Molar Enthalpy [kcal/kgmole]</td> <td>-2,905e+004</td> <td>2207</td> <td>-5,694e+004</td> </tr> <tr> <td>Molar Entropy [kJ/kgmole-C]</td> <td>222,9</td> <td>142,5</td> <td>233,5</td> </tr> <tr> <td>Heat Flow [kcal/h]</td> <td>-1,527e+005</td> <td>5470</td> <td>-1,582e+005</td> </tr> </tbody> </table>				Name	V1	P	R	Vapour	1,0000	1,0000	1,0000	Temperature [C]	345,3	345,3	345,3	Pressure [bar]	1,000e-002	1,220	5,808e-002	Molar Flow [kgmole/h]	5,257	2,479	2,778	Mass Flow [kg/h]	70,09	4,997	65,09	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1564	7,153e-002	8,488e-002	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,905e+004	2207	-5,694e+004	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	222,9	142,5	233,5	Heat Flow [kcal/h]	-1,527e+005	5470	-1,582e+005
Name	V1	P	R																																								
Vapour	1,0000	1,0000	1,0000																																								
Temperature [C]	345,3	345,3	345,3																																								
Pressure [bar]	1,000e-002	1,220	5,808e-002																																								
Molar Flow [kgmole/h]	5,257	2,479	2,778																																								
Mass Flow [kg/h]	70,09	4,997	65,09																																								
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1564	7,153e-002	8,488e-002																																								
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,905e+004	2207	-5,694e+004																																								
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	222,9	142,5	233,5																																								
Heat Flow [kcal/h]	-1,527e+005	5470	-1,582e+005																																								
<table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Methane</td> <td>0,0707</td> <td>0,0000</td> <td>0,1338</td> </tr> <tr> <td>H2O</td> <td>0,3382</td> <td>0,0000</td> <td>0,6400</td> </tr> <tr> <td>Hydrogen</td> <td>0,4716</td> <td>1,0000</td> <td>0,0000</td> </tr> <tr> <td>CO</td> <td>0,0066</td> <td>0,0000</td> <td>0,0124</td> </tr> <tr> <td>CO2</td> <td>0,1130</td> <td>0,0000</td> <td>0,2138</td> </tr> </tbody> </table>					V1	P	R	Methane	0,0707	0,0000	0,1338	H2O	0,3382	0,0000	0,6400	Hydrogen	0,4716	1,0000	0,0000	CO	0,0066	0,0000	0,0124	CO2	0,1130	0,0000	0,2138																
	V1	P	R																																								
Methane	0,0707	0,0000	0,1338																																								
H2O	0,3382	0,0000	0,6400																																								
Hydrogen	0,4716	1,0000	0,0000																																								
CO	0,0066	0,0000	0,0124																																								
CO2	0,1130	0,0000	0,2138																																								

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La tabla 6-4 indica que en el proceso se obtuvo un total de 2,479 kgmol/h de hidrógeno que corresponde al 47,16% de conversión como resultado. En este caso la cantidad es muy pequeña por lo que se puede deducir que las condiciones de operación no son muy óptimas debido a que no alcanzan el rango mínimo establecido del 50%.

Tabla 7-4: Resultados de la tercera simulación

N° de simulación:	03	Proceso:	Separación de hidrógeno																																								
Criterio:	Aproximación al reactor de membrana de Pd (MSR + Separación)																																										
Características de la simulación:	Caudal:	Temperatura:	Presión:																																								
	70,09 kg/h	663,9 °K	144 KPa																																								
Resultados de simulación:																																											
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Vapour</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> </tr> <tr> <td>Temperature [C]</td> <td>390,8</td> <td>390,8</td> <td>390,8</td> </tr> <tr> <td>Pressure [bar]</td> <td>1,000e-002</td> <td>1,440</td> <td>0,1180</td> </tr> <tr> <td>Molar Flow [kgmole/h]</td> <td>5,667</td> <td>3,222</td> <td>2,445</td> </tr> <tr> <td>Mass Flow [kg/h]</td> <td>70,09</td> <td>6,495</td> <td>63,59</td> </tr> <tr> <td>Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]</td> <td>0,1704</td> <td>9,298e-002</td> <td>7,740e-002</td> </tr> <tr> <td>Molar Enthalpy [kcal/kgmole]</td> <td>-2,489e+004</td> <td>2526</td> <td>-6,102e+004</td> </tr> <tr> <td>Molar Entropy [kJ/kgmole-C]</td> <td>218,5</td> <td>143,2</td> <td>229,6</td> </tr> <tr> <td>Heat Flow [kcal/h]</td> <td>-1,411e+005</td> <td>8138</td> <td>-1,492e+005</td> </tr> </tbody> </table>				Name	V1	P	R	Vapour	1,0000	1,0000	1,0000	Temperature [C]	390,8	390,8	390,8	Pressure [bar]	1,000e-002	1,440	0,1180	Molar Flow [kgmole/h]	5,667	3,222	2,445	Mass Flow [kg/h]	70,09	6,495	63,59	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1704	9,298e-002	7,740e-002	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,489e+004	2526	-6,102e+004	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	218,5	143,2	229,6	Heat Flow [kcal/h]	-1,411e+005	8138	-1,492e+005
Name	V1	P	R																																								
Vapour	1,0000	1,0000	1,0000																																								
Temperature [C]	390,8	390,8	390,8																																								
Pressure [bar]	1,000e-002	1,440	0,1180																																								
Molar Flow [kgmole/h]	5,667	3,222	2,445																																								
Mass Flow [kg/h]	70,09	6,495	63,59																																								
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1704	9,298e-002	7,740e-002																																								
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,489e+004	2526	-6,102e+004																																								
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	218,5	143,2	229,6																																								
Heat Flow [kcal/h]	-1,411e+005	8138	-1,492e+005																																								
<table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Methane</td> <td>0,0294</td> <td>0,0000</td> <td>0,0680</td> </tr> <tr> <td>H2O</td> <td>0,2550</td> <td>0,0000</td> <td>0,5911</td> </tr> <tr> <td>Hydrogen</td> <td>0,5685</td> <td>1,0000</td> <td>0,0000</td> </tr> <tr> <td>CO</td> <td>0,0199</td> <td>0,0000</td> <td>0,0460</td> </tr> <tr> <td>CO2</td> <td>0,1272</td> <td>0,0000</td> <td>0,2949</td> </tr> </tbody> </table>					V1	P	R	Methane	0,0294	0,0000	0,0680	H2O	0,2550	0,0000	0,5911	Hydrogen	0,5685	1,0000	0,0000	CO	0,0199	0,0000	0,0460	CO2	0,1272	0,0000	0,2949																
	V1	P	R																																								
Methane	0,0294	0,0000	0,0680																																								
H2O	0,2550	0,0000	0,5911																																								
Hydrogen	0,5685	1,0000	0,0000																																								
CO	0,0199	0,0000	0,0460																																								
CO2	0,1272	0,0000	0,2949																																								

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La tabla 7-4 indica que en el proceso se obtuvo un total de 3,222 kgmol/h de hidrógeno que corresponde al 56,85% de conversión como resultado. En este caso la cantidad llega al punto mínimo de conversión que tradicionalmente se obtiene con los sistemas de MSR y WGS.

Tabla 8-4: Resultados de la cuarta simulación

N° de simulación:	04	Proceso:	Separación de hidrógeno																																																																
Criterio:	Aproximación al reactor de membrana de Pd (MSR + Separación)																																																																		
Características de la simulación:	Caudal:	Temperatura:	Presión:																																																																
	70,09 kg/h	709,4°K	166 KPa																																																																
Resultados de simulación:																																																																			
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Vapour</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> </tr> <tr> <td>Temperature [C]</td> <td>436,3</td> <td>436,3</td> <td>436,3</td> </tr> <tr> <td>Pressure [bar]</td> <td>1,000e-002</td> <td>1,660</td> <td>0,1952</td> </tr> <tr> <td>Molar Flow [kgmole/h]</td> <td>5,920</td> <td>3,616</td> <td>2,304</td> </tr> <tr> <td>Mass Flow [kg/h]</td> <td>70,09</td> <td>7,290</td> <td>62,80</td> </tr> <tr> <td>Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]</td> <td>0,1771</td> <td>0,1044</td> <td>7,278e-002</td> </tr> <tr> <td>Molar Enthalpy [kcal/kgmole]</td> <td>-2,237e+004</td> <td>2847</td> <td>-6,195e+004</td> </tr> <tr> <td>Molar Entropy [kJ/kgmole-C]</td> <td>217,1</td> <td>143,9</td> <td>226,3</td> </tr> <tr> <td>Heat Flow [kcal/h]</td> <td>-1,324e+005</td> <td>1,029e+004</td> <td>-1,427e+005</td> </tr> </tbody> </table> <table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Methane</td> <td>0,0068</td> <td>0,0000</td> <td>0,0174</td> </tr> <tr> <td>H2O</td> <td>0,2202</td> <td>0,0000</td> <td>0,5659</td> </tr> <tr> <td>Hydrogen</td> <td>0,6108</td> <td>1,0000</td> <td>0,0000</td> </tr> <tr> <td>CO</td> <td>0,0378</td> <td>0,0000</td> <td>0,0971</td> </tr> <tr> <td>CO2</td> <td>0,1244</td> <td>0,0000</td> <td>0,3196</td> </tr> </tbody> </table>				Name	V1	P	R	Vapour	1,0000	1,0000	1,0000	Temperature [C]	436,3	436,3	436,3	Pressure [bar]	1,000e-002	1,660	0,1952	Molar Flow [kgmole/h]	5,920	3,616	2,304	Mass Flow [kg/h]	70,09	7,290	62,80	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1771	0,1044	7,278e-002	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,237e+004	2847	-6,195e+004	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	217,1	143,9	226,3	Heat Flow [kcal/h]	-1,324e+005	1,029e+004	-1,427e+005		V1	P	R	Methane	0,0068	0,0000	0,0174	H2O	0,2202	0,0000	0,5659	Hydrogen	0,6108	1,0000	0,0000	CO	0,0378	0,0000	0,0971	CO2	0,1244	0,0000	0,3196
Name	V1	P	R																																																																
Vapour	1,0000	1,0000	1,0000																																																																
Temperature [C]	436,3	436,3	436,3																																																																
Pressure [bar]	1,000e-002	1,660	0,1952																																																																
Molar Flow [kgmole/h]	5,920	3,616	2,304																																																																
Mass Flow [kg/h]	70,09	7,290	62,80																																																																
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1771	0,1044	7,278e-002																																																																
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,237e+004	2847	-6,195e+004																																																																
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	217,1	143,9	226,3																																																																
Heat Flow [kcal/h]	-1,324e+005	1,029e+004	-1,427e+005																																																																
	V1	P	R																																																																
Methane	0,0068	0,0000	0,0174																																																																
H2O	0,2202	0,0000	0,5659																																																																
Hydrogen	0,6108	1,0000	0,0000																																																																
CO	0,0378	0,0000	0,0971																																																																
CO2	0,1244	0,0000	0,3196																																																																

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La tabla 8-4 indica que en el proceso se obtuvo un total de 3,616 kgmol/h de hidrógeno que corresponde al 61,08% de conversión como resultado. En este caso la cantidad llega al punto mínimo de conversión que tradicionalmente se obtiene con los sistemas de MSR y WGS.

Tabla 9-4: Resultados de la quinta simulación

N° de simulación:	05	Proceso:	Separación de hidrógeno																																								
Criterio:	Aproximación al reactor de membrana de Pd (MSR + Separación)																																										
Características de la simulación:	Caudal:	Temperatura:	Presión:																																								
	70,09 kg/h	754,9°K	188 KPa																																								
Resultados de simulación:																																											
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Vapour</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> <td>1,0000</td> </tr> <tr> <td>Temperature [C]</td> <td>481,8</td> <td>481,8</td> <td>481,8</td> </tr> <tr> <td>Pressure [bar]</td> <td>1,000e-002</td> <td>1,880</td> <td>0,2641</td> </tr> <tr> <td>Molar Flow [kgmole/h]</td> <td>5,988</td> <td>3,667</td> <td>2,321</td> </tr> <tr> <td>Mass Flow [kg/h]</td> <td>70,09</td> <td>7,392</td> <td>62,70</td> </tr> <tr> <td>Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]</td> <td>0,1774</td> <td>0,1058</td> <td>7,153e-002</td> </tr> <tr> <td>Molar Enthalpy [kcal/kgmole]</td> <td>-2,137e+004</td> <td>3169</td> <td>-6,015e+004</td> </tr> <tr> <td>Molar Entropy [kJ/kgmole-C]</td> <td>218,7</td> <td>144,7</td> <td>225,1</td> </tr> <tr> <td>Heat Flow [kcal/h]</td> <td>-1,280e+005</td> <td>1,162e+004</td> <td>-1,396e+005</td> </tr> </tbody> </table>				Name	V1	P	R	Vapour	1,0000	1,0000	1,0000	Temperature [C]	481,8	481,8	481,8	Pressure [bar]	1,000e-002	1,880	0,2641	Molar Flow [kgmole/h]	5,988	3,667	2,321	Mass Flow [kg/h]	70,09	7,392	62,70	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1774	0,1058	7,153e-002	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,137e+004	3169	-6,015e+004	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	218,7	144,7	225,1	Heat Flow [kcal/h]	-1,280e+005	1,162e+004	-1,396e+005
Name	V1	P	R																																								
Vapour	1,0000	1,0000	1,0000																																								
Temperature [C]	481,8	481,8	481,8																																								
Pressure [bar]	1,000e-002	1,880	0,2641																																								
Molar Flow [kgmole/h]	5,988	3,667	2,321																																								
Mass Flow [kg/h]	70,09	7,392	62,70																																								
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1774	0,1058	7,153e-002																																								
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,137e+004	3169	-6,015e+004																																								
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	218,7	144,7	225,1																																								
Heat Flow [kcal/h]	-1,280e+005	1,162e+004	-1,396e+005																																								
<table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>V1</th> <th>P</th> <th>R</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Methane</td> <td>0,0068</td> <td>0,0000</td> <td>0,0174</td> </tr> <tr> <td>H2O</td> <td>0,2202</td> <td>0,0000</td> <td>0,5659</td> </tr> <tr> <td>Hydrogen</td> <td>0,6108</td> <td>1,0000</td> <td>0,0000</td> </tr> <tr> <td>CO</td> <td>0,0378</td> <td>0,0000</td> <td>0,0971</td> </tr> <tr> <td>CO2</td> <td>0,1244</td> <td>0,0000</td> <td>0,3196</td> </tr> </tbody> </table>					V1	P	R	Methane	0,0068	0,0000	0,0174	H2O	0,2202	0,0000	0,5659	Hydrogen	0,6108	1,0000	0,0000	CO	0,0378	0,0000	0,0971	CO2	0,1244	0,0000	0,3196																
	V1	P	R																																								
Methane	0,0068	0,0000	0,0174																																								
H2O	0,2202	0,0000	0,5659																																								
Hydrogen	0,6108	1,0000	0,0000																																								
CO	0,0378	0,0000	0,0971																																								
CO2	0,1244	0,0000	0,3196																																								

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La tabla 9-4 indica que en el proceso se obtuvo un total de 3,667 kgmol/h de hidrógeno que corresponde al 61,23% de conversión como resultado. En este caso la cantidad se iguala al porcentaje de conversión que se obtuvo con la validación del modelo.

Tabla 10-4: Resultados de la sexta simulación

N° de simulación:	06	Proceso:	Separación de hidrógeno
Criterio:	Aproximación al reactor de membrana de Pd (MSR + Separación)		
Características de la simulación:	Caudal:	Temperatura:	Presión:
	70,09 kg/h	800,4°K	210 KPa
Resultados de simulación:			
Name	V1	P	R
Vapour	1,0000	1,0000	1,0000
Temperature [C]	527,3	527,3	527,3
Pressure [bar]	1,000e-002	2,100	0,3329
Molar Flow [kgmole/h]	5,998	3,621	2,377
Mass Flow [kg/h]	70,09	7,301	62,79
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1758	0,1045	7,132e-002
Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-2,083e+004	3492	-5,788e+004
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	220,9	145,6	224,8
Heat Flow [kcal/h]	-1,249e+005	1,265e+004	-1,376e+005
	V1	P	R
Methane	0,0002	0,0000	0,0004
H2O	0,2295	0,0000	0,5792
Hydrogen	0,6038	1,0000	0,0000
CO	0,0625	0,0000	0,1576
CO2	0,1041	0,0000	0,2627

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La tabla 10-4 indica que en el proceso se obtuvo un total de 3,621 kgmol/h de hidrógeno que corresponde al 60,37% de conversión como resultado. En este caso la cantidad es ligeramente inferior al porcentaje de conversión que se obtuvo con la validación del modelo.

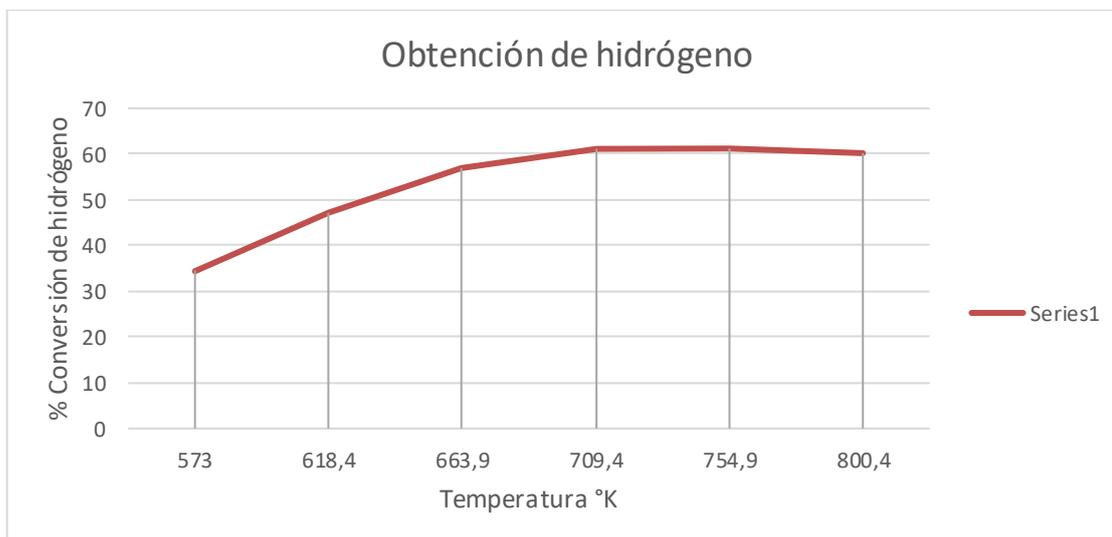


Gráfico 1-4. Influencia de la temperatura en la conversión de H_2

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

En la figura 1-4 se observa la curva del comportamiento de conversión de hidrógeno en función de la temperatura, en la gráfica se efectúa un incremento gradual, sin embargo, a los 754,9 °K se mantiene un nivel de producción sobre el 60%; por lo tanto, se puede asumir que el punto óptimo se encuentra en el rango de temperaturas entre 700 a 750 °K.

4.3.2. Resultados obtenidos de la simulación en el software CFD

En esta sección se presentan los resultados de producción de hidrógeno en función de los parámetros que se varían, principalmente de la presión de entrada y la temperatura a la que se produce el proceso, la membrana tiene un espesor de 0,7 mm que se mantiene constante.

Se puede apreciar cómo cambia la concentración de hidrógeno en función de los cambios realizados en los parámetros de funcionamiento del sistema.

4.3.2.1. Flujo de difusión de hidrógeno a través de la membrana

La difusión molecular es un proceso físico irreversible, consiste en el flujo neto de átomos, iones u otra especie dentro de un material, las partículas se mueven de una región de alta concentración a un área de baja concentración hasta obtener una distribución uniforme. Inducido por la temperatura y el gradiente de concentración. Para esta investigación este parámetro es relevante para obtener la producción de hidrógeno en función del caudal de entrada planteado para la entrada de metano.

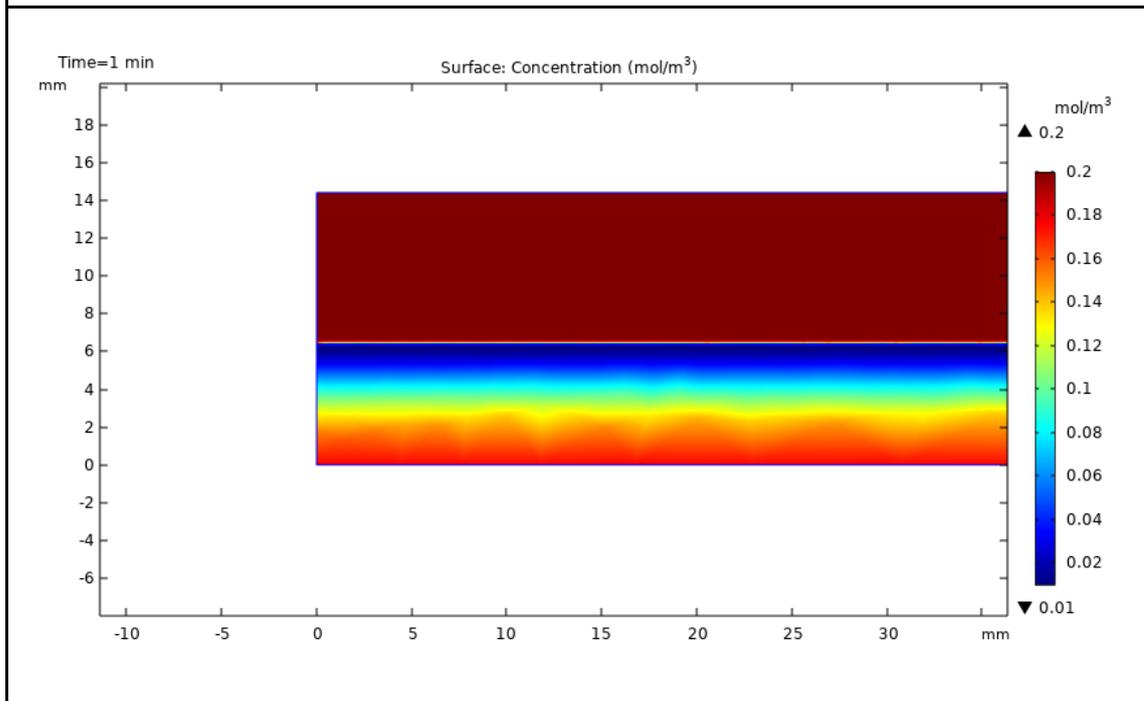
4.3.2.2. Velocidad del fluido

Describe el movimiento o tránsito de ambos gases de los dos lados de la membrana que indica el desplazamiento dentro del conducto respecto al tiempo.

Tabla 11-4: Concentración molar de H₂

N° de simulación:	01	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 573 K P= 1, x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



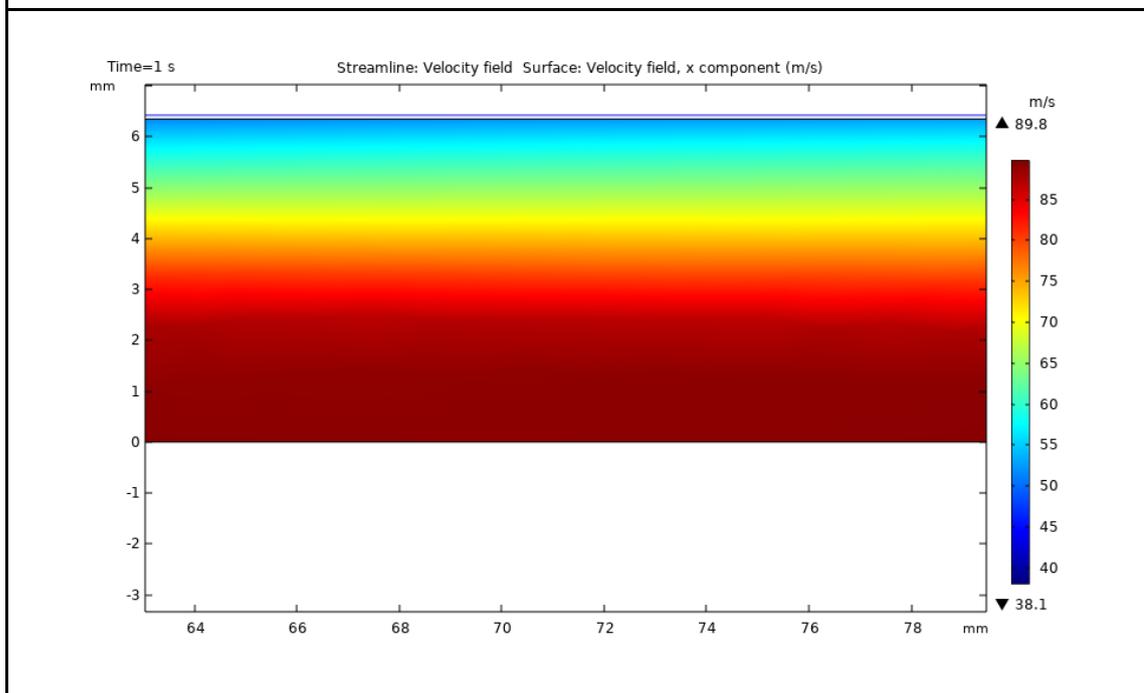
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La producción de hidrógeno medida a través de la concentración en el área del producto permeado visualizando la gráfica tiene un valor aproximado entre 0,16 y 0,18 mol/m³ para los parámetros descritos.

Tabla 12-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H₂

N° de simulación:	01	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 573 K P= 1, x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



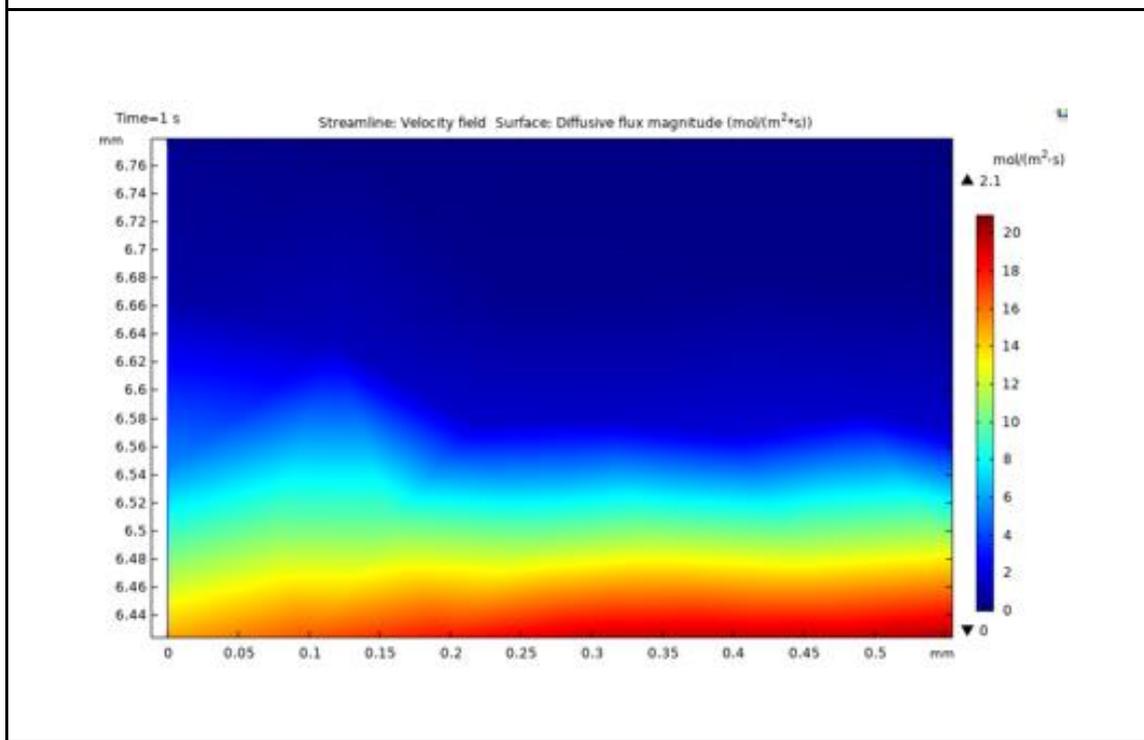
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La velocidad máxima obtenida para esta combinación de parámetros resultó ser de 89.8 m/s.

Tabla 13-4: Flujo de difusión de H₂

N° de simulación:	01	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 573 K P= 1, x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga :	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



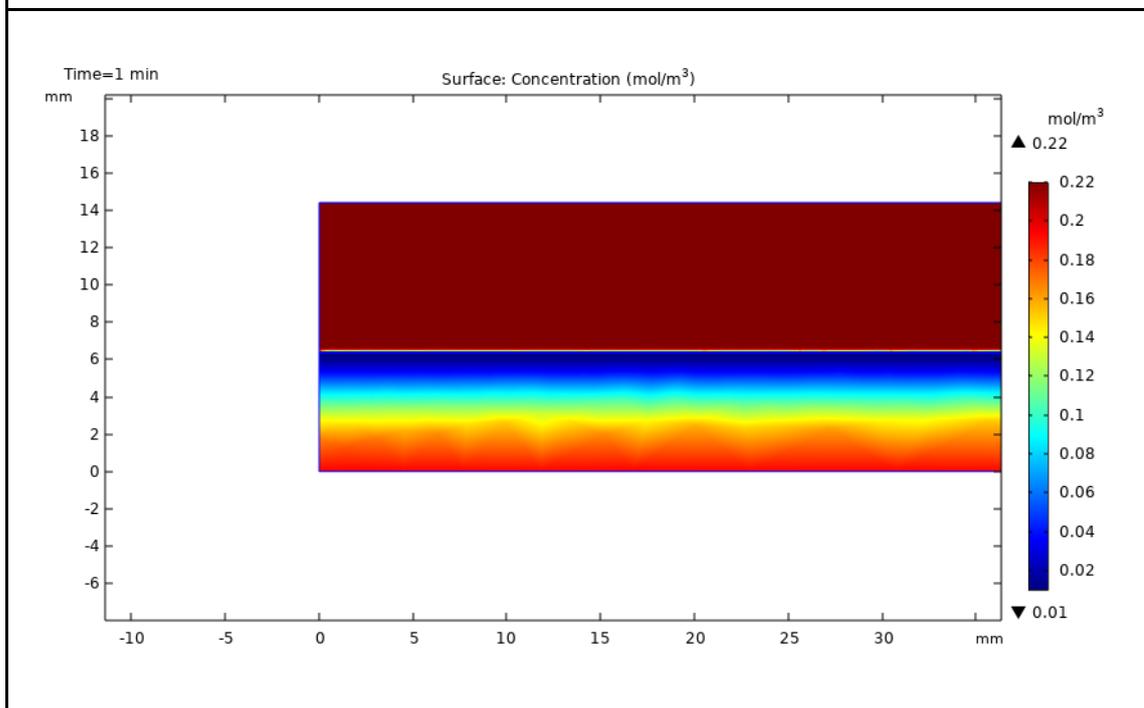
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

El flujo de difusión de hidrógeno a través de la membrana de paladio resultó de 2.1 mol/m².s.

Tabla 14-4: Concentración molar de H₂

N° de simulación:	02	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 618 K P= 1,22x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



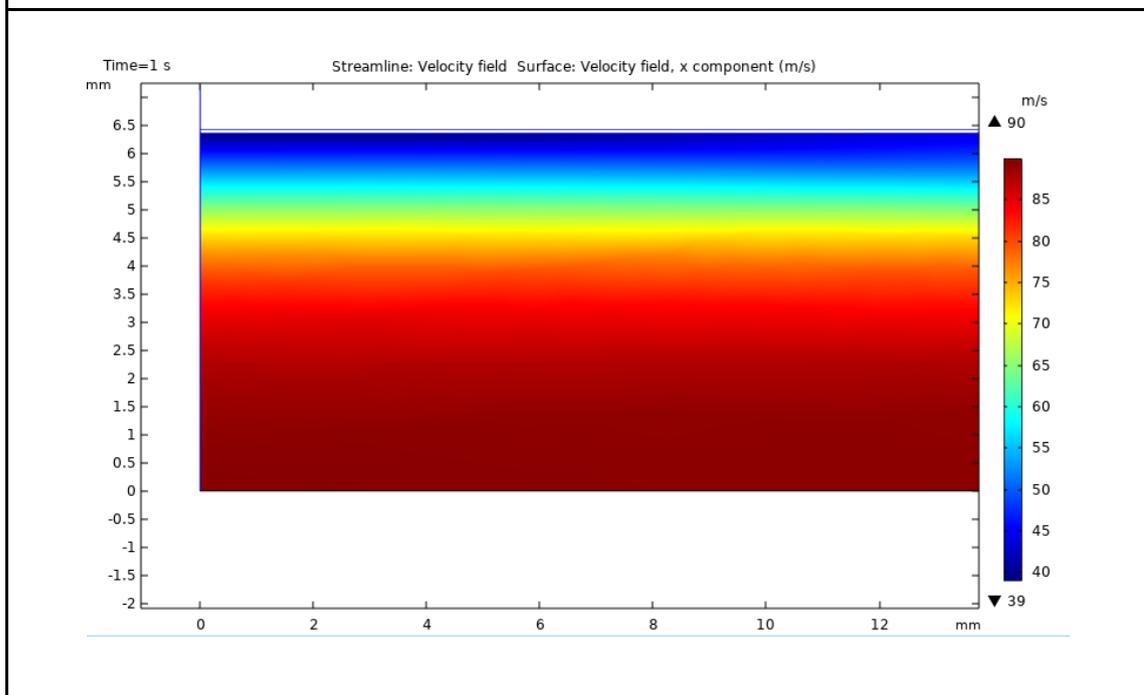
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La producción de hidrógeno medida a través de la concentración en el área del producto permeado visualizando la gráfica tiene un valor aproximado entre 0,18 y 0,2 mol/m³ para los parámetros descritos.

Tabla 15-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H₂

N° de simulación:	02	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 618 K P= 1,22x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



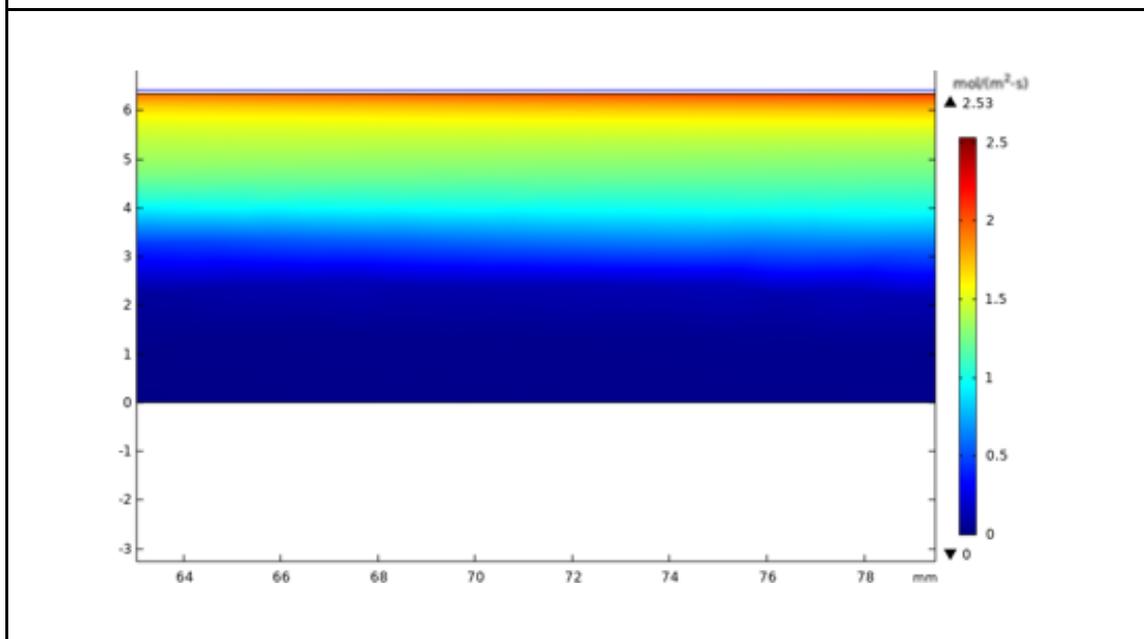
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La velocidad máxima obtenida para esta combinación de parámetros resultó ser de 90 m/s.

Tabla 16-4: Flujo de difusión de H₂

N° de simulación:	02	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 618 K P= 1,22x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



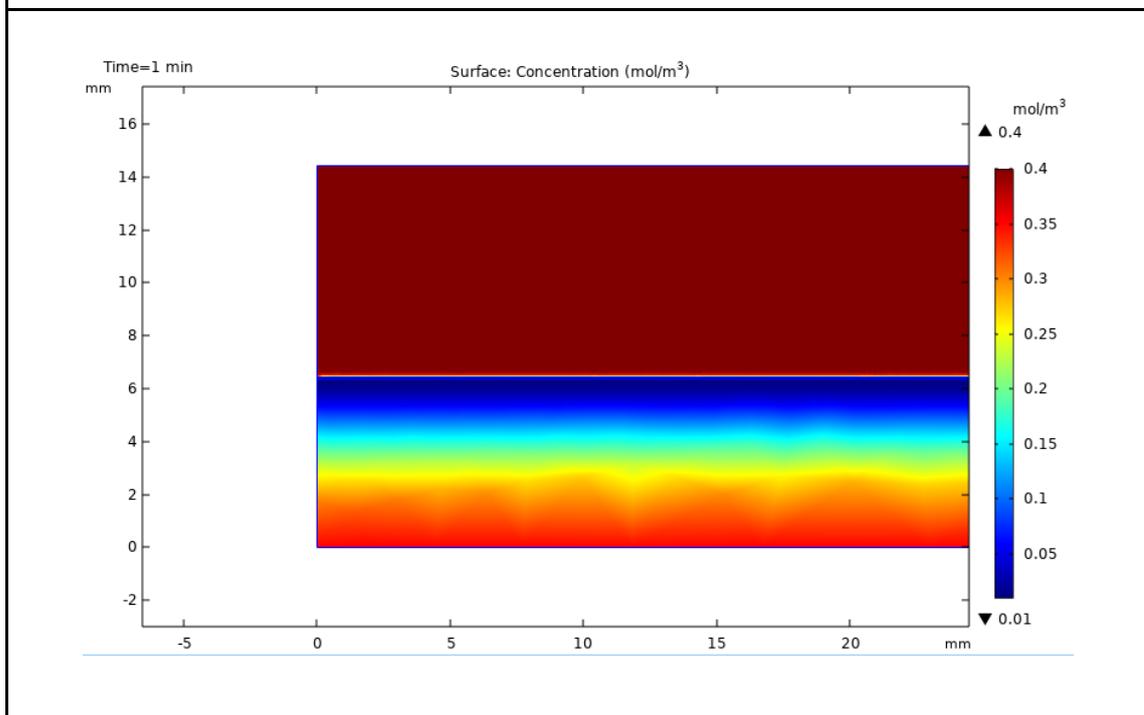
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

El flujo de difusión de Hidrógeno a través de la membrana de paladio resultó de 2,53 mol/m².s.

Tabla 17-4: Concentración molar de H₂

N° de simulación:	03	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 800,4 K P= 2,1x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



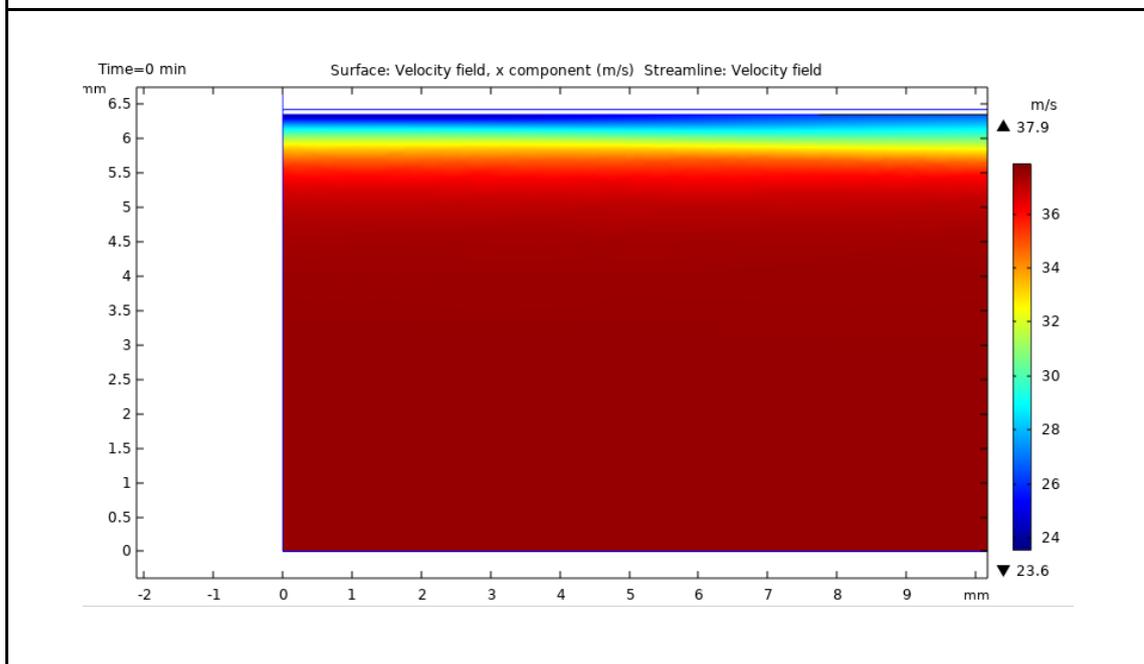
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La producción de hidrógeno medida a través de la concentración en el área del producto permeado visualizando la gráfica tiene un valor aproximado entre 0,3 y 0,35 mol/m³ para los parámetros descritos.

Tabla 18-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H_2

N° de simulación:	03	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 800,4 K P= $2,1 \times 10^5$ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



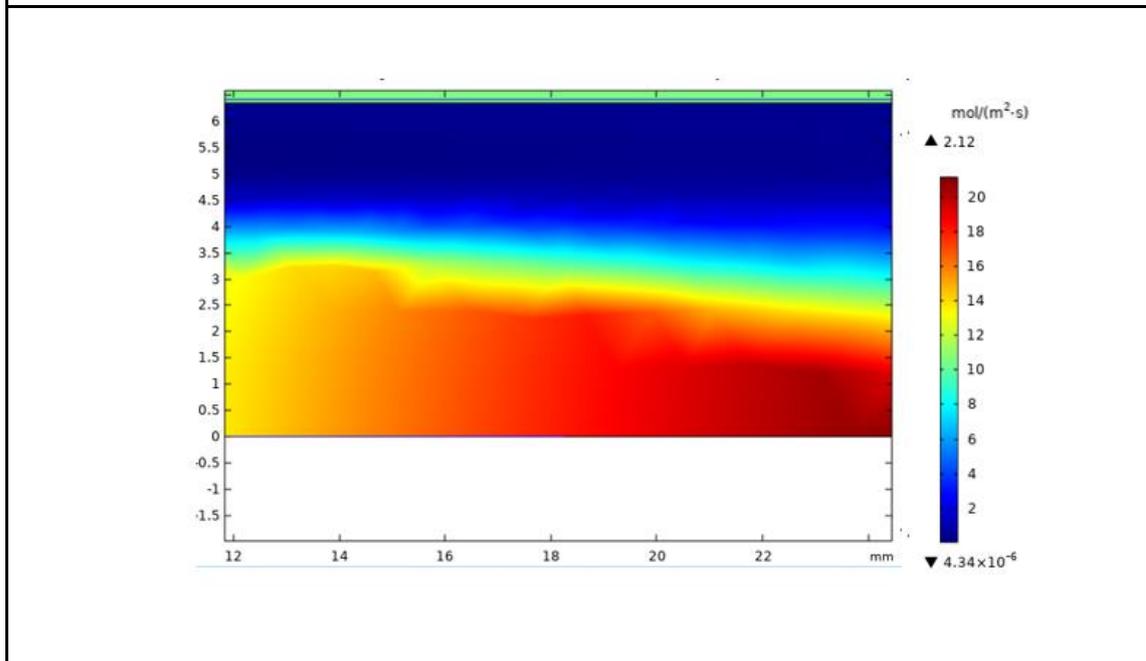
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La velocidad obtenida en el lado permeado para el flujo de hidrógeno corresponde a un valor máximo de 37,9 m/s y un mínimo de 24 m/s.

Tabla 19-4: Flujo de difusión de H₂

N° de simulación:	03	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 800,4 K P= 2,1x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



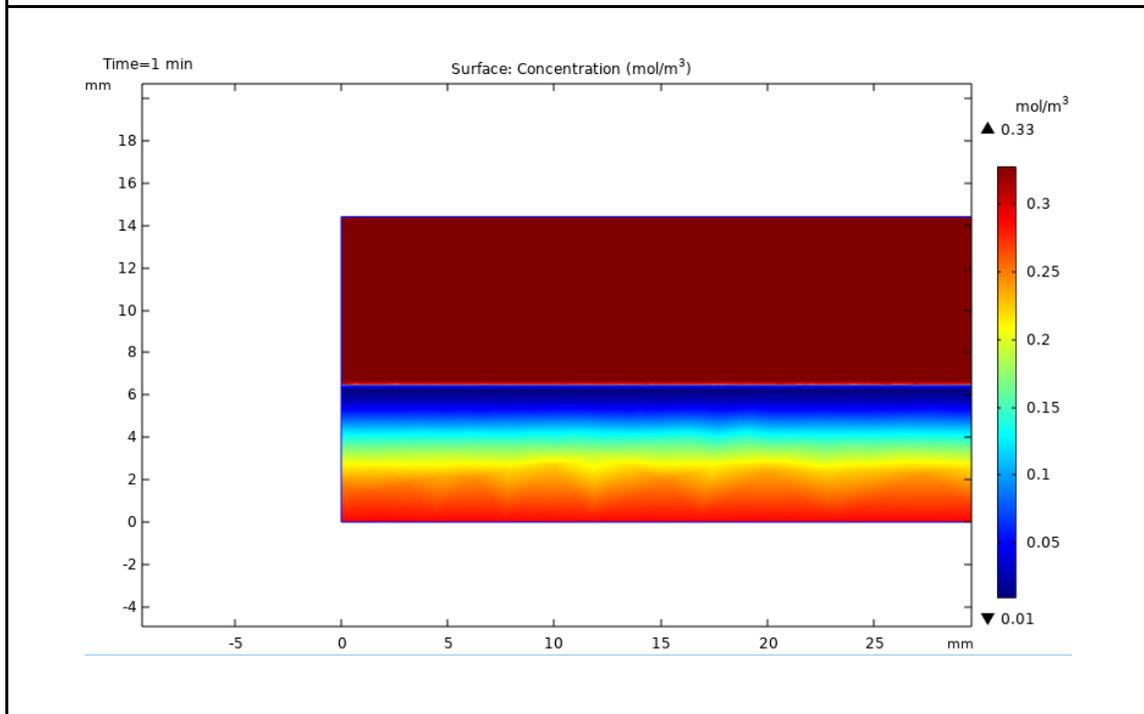
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

El flujo de difusión de hidrógeno a través de la membrana de paladio resultó de 2.12 mol/m².s.

Tabla 20-4: Concentración molar de H₂

N° de simulación:	04	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 754,9 K P= 1,88x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



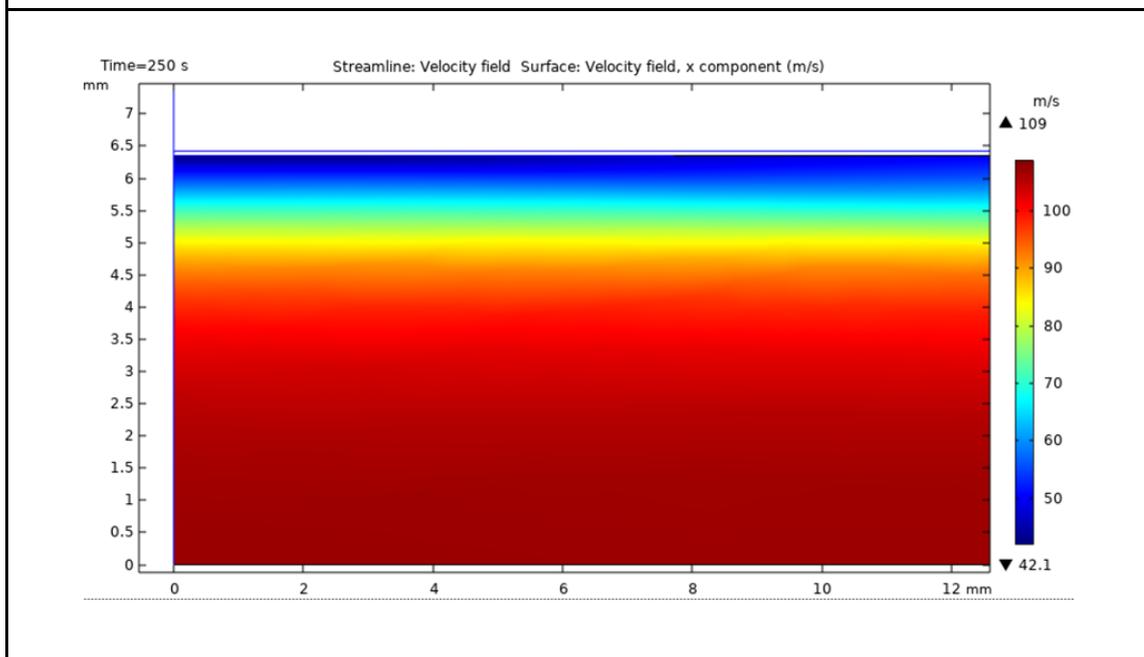
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La producción de hidrógeno medida a través de la concentración en el área del producto permeado visualizando la gráfica tiene un valor aproximado entre 0,25 y 0,3 mol/m³ para los parámetros descritos.

Tabla 21-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H₂

N° de simulación:	04	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 754,9 K P= 1,88x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



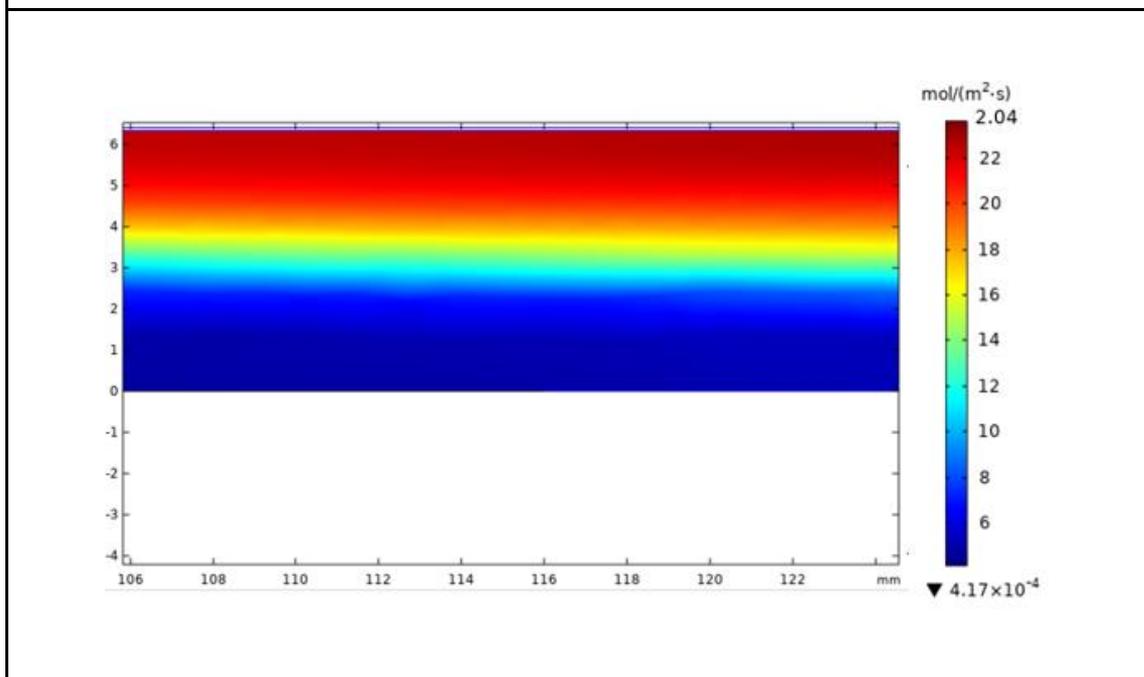
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La velocidad obtenida para esta configuración de parámetros corresponde a un valor máximo de 109 m/s y un mínimo de 42. m/s.

Tabla 22-4: Flujo de difusión de H₂

N° de simulación:	04	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 754,9 K P= 1,88x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



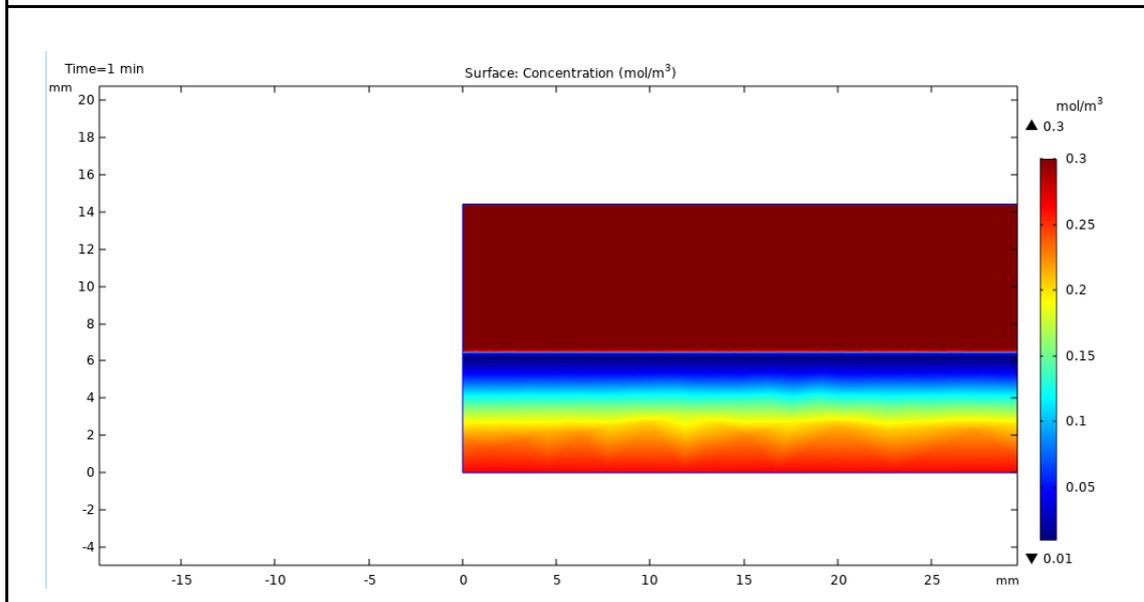
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

El flujo de difusión de hidrógeno a través de la membrana de paladio resultó de 2.04 mol/m².s.

Tabla 23-4: Concentración molar de H₂

N° de simulación:	05	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 709,4 K P= 1,66x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



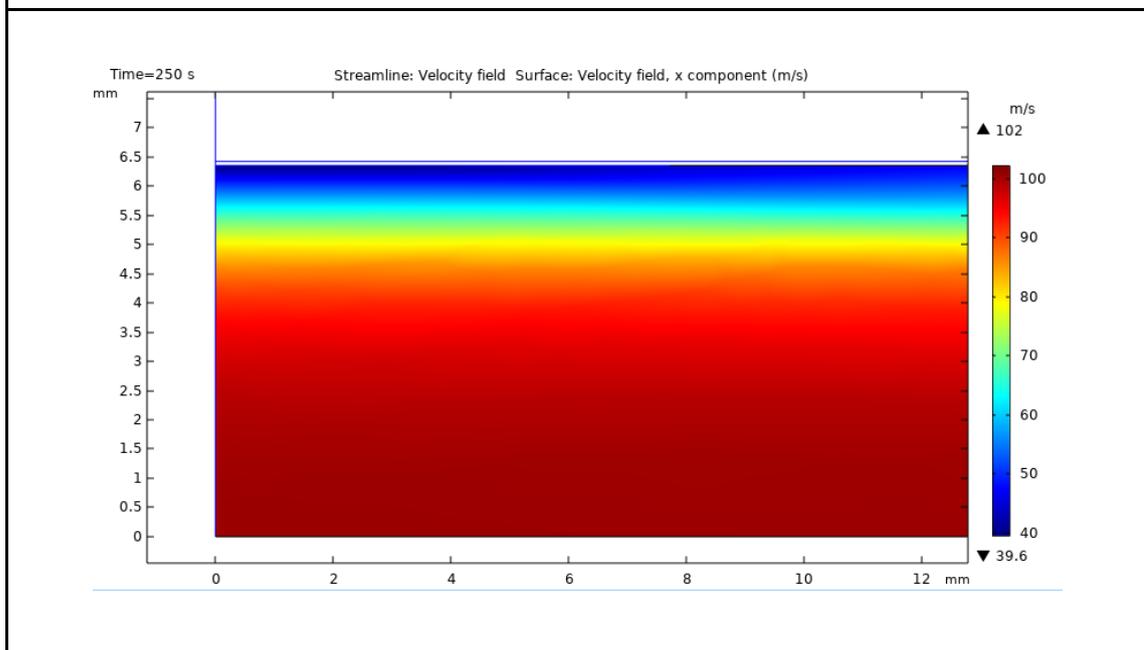
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La producción de hidrógeno medida a través de la concentración en el área del producto permeado visualizando la gráfica tiene un valor aproximado entre 0,25 y 0,27 mol/m³ para los parámetros descritos.

Tabla 24-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H₂

N° de simulación:	05	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 709,4 K P= 1,66x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



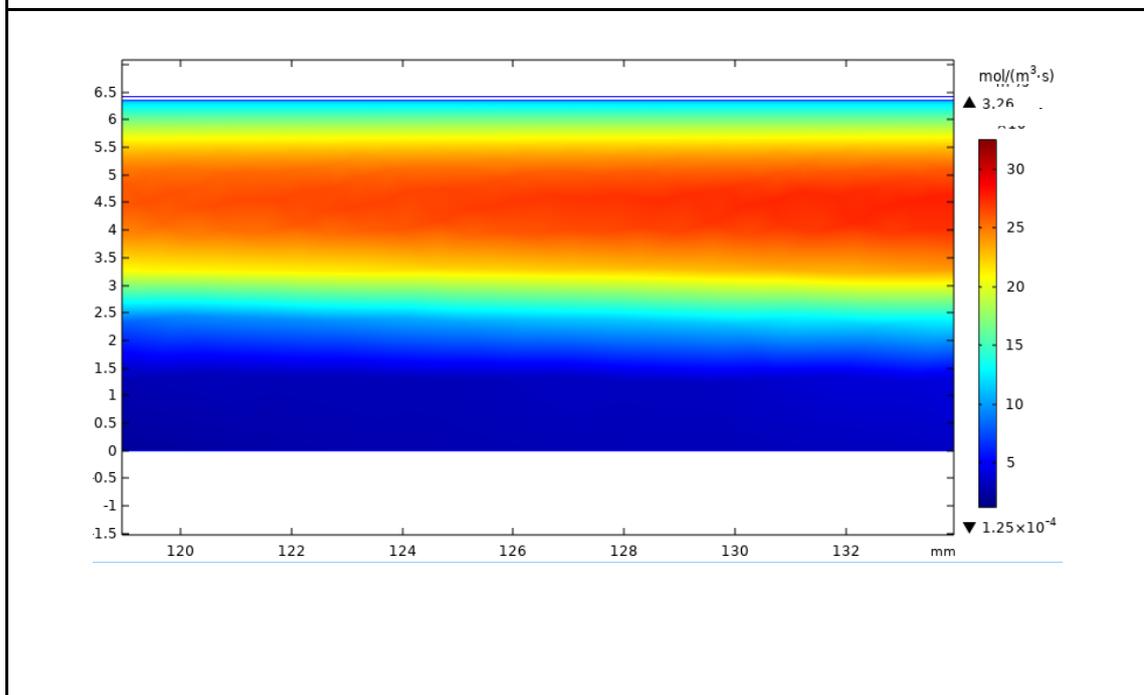
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La velocidad máxima obtenida para esta combinación de parámetros resultó ser de 102 m/s.

Tabla 25-4: Flujo de difusión de H₂

N° de simulación:	05	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 709,4 K P= 1,66x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



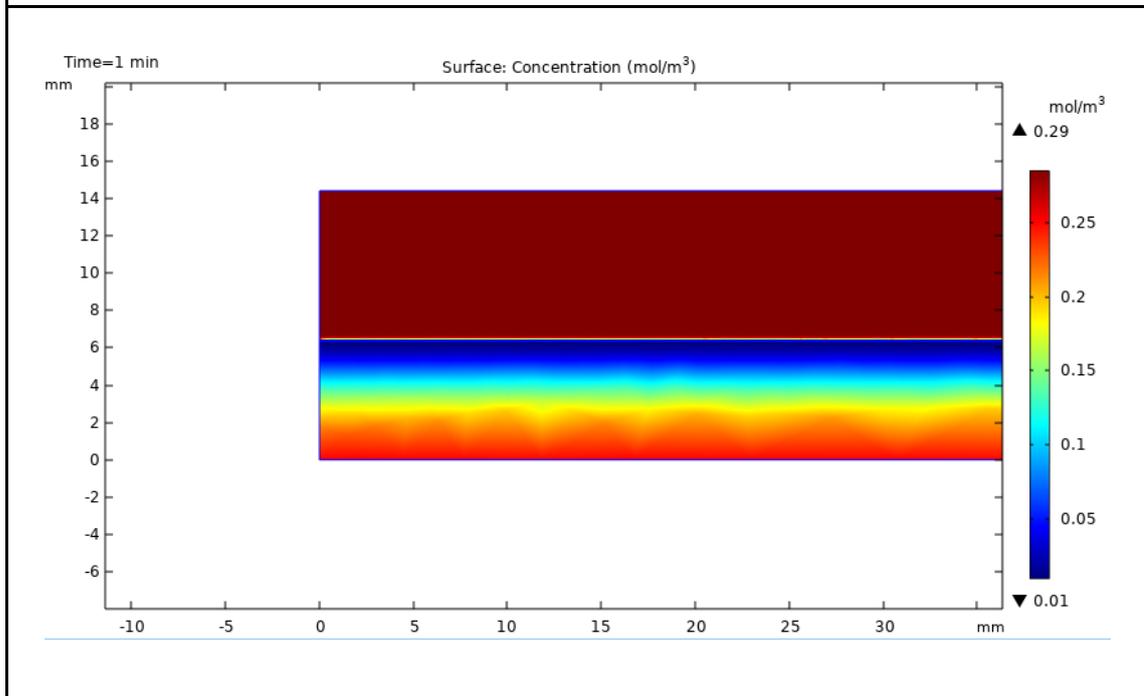
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

El flujo de difusión de hidrógeno a través de la membrana de paladio resultó de 3.26 mol/m².s.

Tabla 26-4: Concentración molar de H₂

N° de simulación:	06	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 663,9 K P= 1,44x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



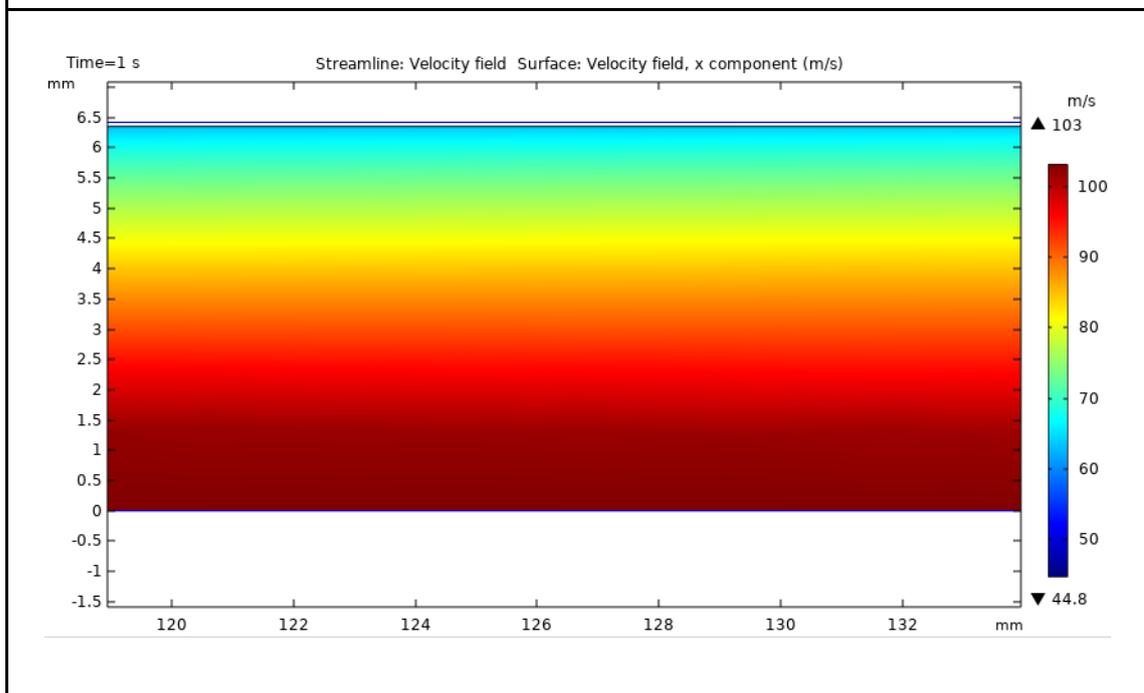
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La producción de hidrógeno medida a través de la concentración en el área del producto permeado visualizando la gráfica tiene un valor aproximado entre 0,22 y 0,25 mol/m³ para los parámetros descritos.

Tabla 27-4: Velocidad de flujo del lado permeado de H₂

N° de simulación:	06	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 663,9 K P= 1,44x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



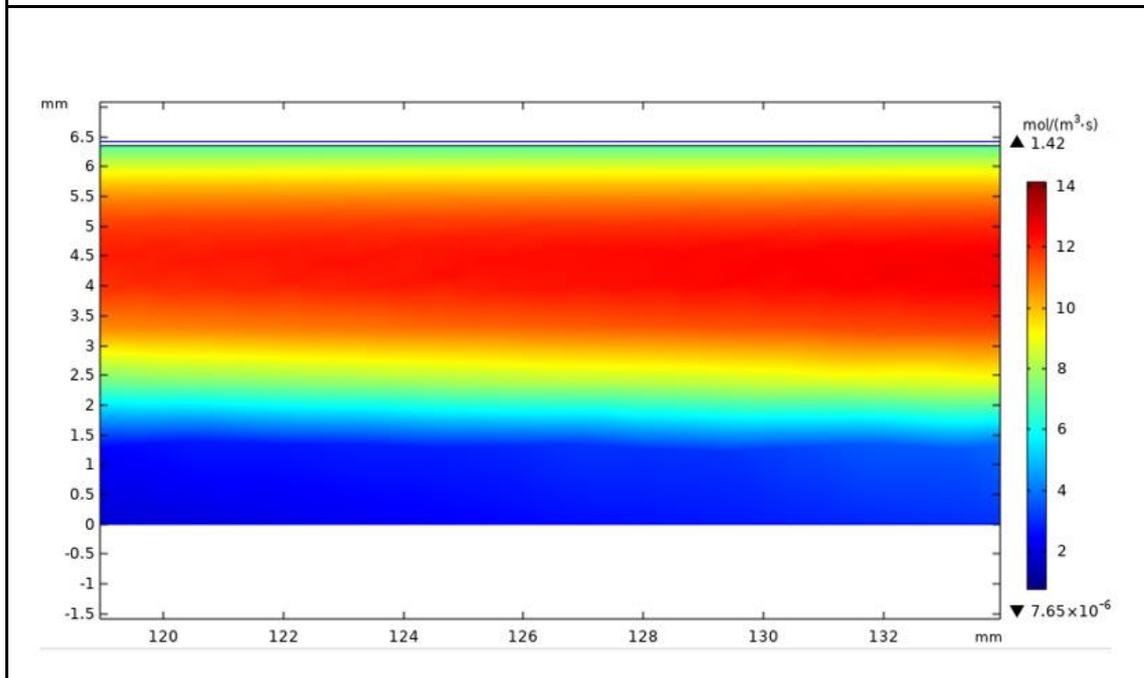
Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La velocidad máxima obtenida para esta combinación de parámetros resultó ser de 103 m/s.

Tabla 28-4: Flujo de difusión de H₂

N° de simulación:	06	Equipo:	Reactor de Membrana de Paladio para Producción de Hidrógeno
Criterio:	Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 663,9 K P= 1,44x10 ⁵ Pa		
Características de la simulación:	Carga:	Geometría:	Tiempo de procesamiento:
	Multifase	Shell	40 minutos
N° de nodos:	28834	Tipo de análisis:	CFD-TDS
N° de elementos:	49508	Tipo de elemento:	Shell 181

Resultados de simulación:



Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

El flujo de difusión de hidrógeno a través de la membrana de paladio resultó de 1,42 mol/m².s.

Tabla 29-4: Resultados de las distintas combinaciones de parámetros para velocidad, concentración y flujo de difusión de hidrógeno

Parámetros	Concentración molar (mol/m ³)	Velocidad (m/s)	Flujo de difusión de hidrógeno (mol/m ² .s)
Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 573 K P= 1, x10 ⁵ Pa	0,18	89,8	2,1
Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 618 K P= 1,22x10 ⁵ Pa	0,2	90	2,53
Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 800,4 K P= 2,1x10 ⁵ Pa	0,35	37,9	2,12
Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 754,9 K P= 1,88x10 ⁵ Pa	0,3	109	2,04
Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 709,4 K P= 1,66x10 ⁵ Pa	0,27	102	3,26
Espesor de Membrana= 0,07 mm T= 663,9 K P= 1,44x10 ⁵ Pa	0,25	103	1,42

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

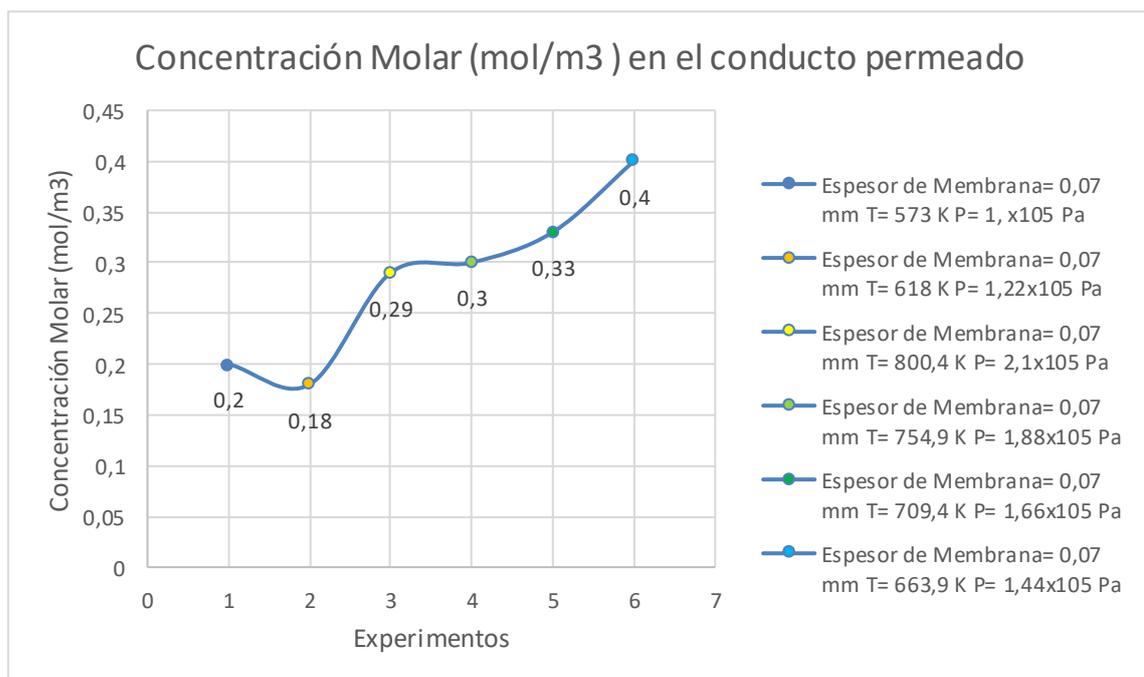


Gráfico 2-4. Comportamiento de la concentración de flujo de H₂

Realizado por: Guerrero, Marlid, 2021.

La concentración molar presenta un crecimiento exponencial empezando con una combinación de temperatura y presión correspondiente a 573 K y 1×10^5 Pa y observamos que existe una mayor concentración en la temperatura y presión correspondiente a $0,4 \text{ mol/m}^3$ a $T= 663,9 \text{ K}$ $P= 1,44 \times 10^5 \text{ Pa}$ mediante este análisis podemos concluir que la concentración molar mantiene un comportamiento propio de la presión y temperatura con la que opere en ese momento.

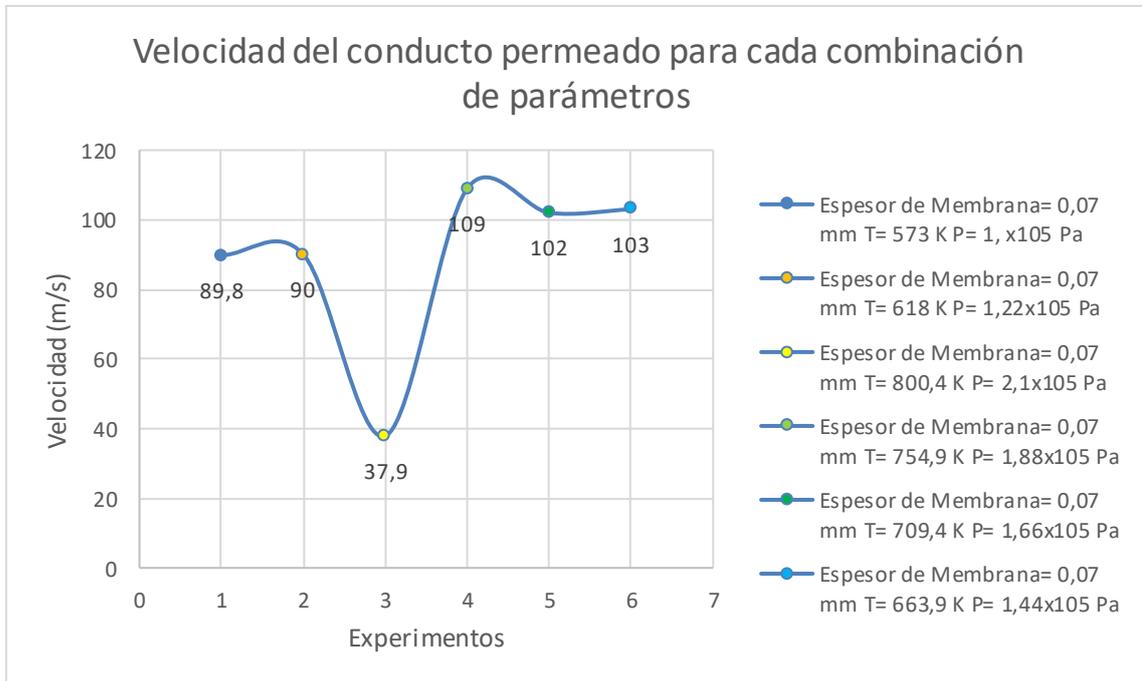


Gráfico 3-4. Comportamiento de la velocidad de fluido de H_2 en el interior del conducto

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021.

La velocidad de flujo máxima se obtiene a una temperatura de 754,9 K y a una presión de $1,88 \times 10^5$ Pa el valor máximo corresponde a 109 m/s mientras que el más bajo es de 37,9 que se obtuvo a 880,4 K y $2,1 \times 10^5$ Pa las velocidades más altas corresponden a los valores máximos de presión ingresados en la simulación, y presentan estos valores debido a la sección reducida en el conducto del lado permeado.

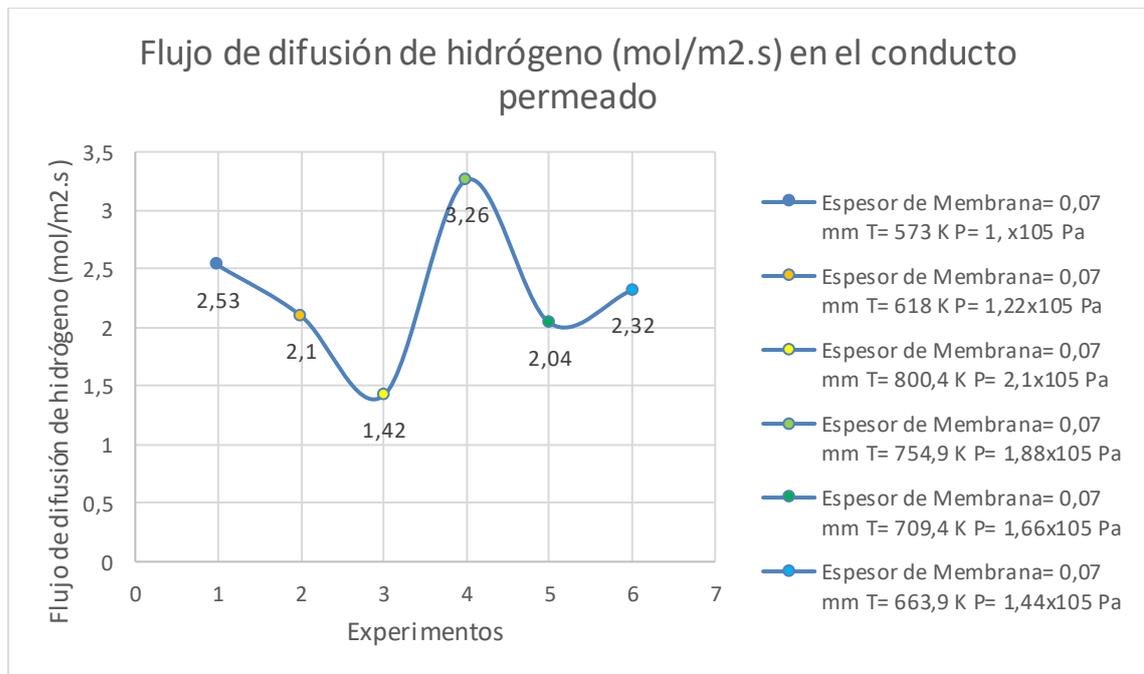


Gráfico 4-4. Comportamiento del flujo de difusión de H_2

Realizado por: Guerrero, Marlid. 2021.

El flujo de difusión es un indicador de producción de hidrógeno en el lado permeado, observamos que la máxima difusión a través de la membrana ocurre a una temperatura de 754,9 K y 1.88×10^5 Pa el valor corresponde a 3.26 mol/m².s.

4.3.2.3. Evaluación de los resultados en las dos simulaciones

De los programas para simulación mediante los cuales se elaboró este estudio, se puede determinar que el software de simulación CFD ofrece resultados más específicos acerca del comportamiento de la membrana debido a que se puede simular su geometría mediante el método de elementos finitos, aplicando las propiedades y parámetros que rigen en el sistema.

Usando el software de simulación para procesos químicos se pudo obtener resultados favorables, sin embargo, se usó una aproximación del proceso real para poder determinar el comportamiento más cercano a un reactor de membrana debido a que no existe un equipo como tal en la librería del programa. Empleando el método de elementos finitos se puede obtener resultados más detallados acerca del comportamiento del flujo del hidrógeno como la velocidad, difusión de hidrógeno y concentración molar, mientras que en el diagrama de flujo elaborado en el software para procesos químicos se pudo conocer parámetros como el flujo molar y flujo másico con lo cual se obtuvo la conversión de hidrógeno.

En las dos simulaciones se obtuvo una mayor producción con los parámetros de temperatura de 754,9 K y presión de 1.88×10^5 Pa con un valor de difusión de hidrógeno de 3.26 mol/m².s superior

a los valores obtenidos en las demás combinaciones, y en el mismo caso una conversión de hidrógeno de 61,23%. El modelo planteado en el software para procesos químicos y el comportamiento de la membrana simulada en el software CFD tiene un rendimiento aceptable dentro del rango de operación de procesos de obtención de hidrógeno a través del reformado de metano con vapor con permeación mediante membrana de paladio, se puede considerar que es igual al proceso tradicional sin embargo en este tipo de procesos se disminuye drásticamente la utilización de equipos adicionales.

CONCLUSIONES

- El proceso para la obtención y purificación de hidrógeno a partir del biogás mediante el uso de la tecnología de membrana de paladio se simuló en los softwares de simulación química y simulación CFD arrojando resultados de flujo molar, flujo másico, concentración molar, velocidad de flujo del lado permeado, flujo de difusión de hidrógeno, cuyos resultados son favorables ya que en las dos simulaciones existe un rendimiento aceptable dentro del rango de operación de procesos de obtención de hidrógeno que tradicionalmente alcanzaría valores de entre el 50 y 80% de conversión de CH₄/H₂.
- Se identificó que los parámetros manejables al inicio del proceso de la simulación en el software de simulación química fueron temperatura, presión y flujo másico inicial; en el diagrama de flujo que se obtuvo luego de la implementación de todos los equipos del modelo propuesto se manipularon únicamente la presión y temperatura en el reformado de vapor y en la separación de hidrógeno debido a que se busca el rango de operación que tiene el rendimiento más alto. Como resultado se obtuvo un porcentaje de conversión del 61%.
- Se diseñó el modelo de simulación para lo cual se empleó el paquete termodinámico de Peng Robinson como base para el modelo implementado en la simulación, además del uso de reacciones cinéticas y los equipos necesarios para completar el diagrama de flujo en la emulación del reactor de membrana de paladio, este análisis permitió obtener un comportamiento aproximado; en cuanto al análisis CFD, el programa emplea las ecuaciones que rigen el comportamiento del flujo de biogás a través de la membrana, el modelo incluye la consideración del medio poroso de paladio, presiones, temperaturas, propiedades del material de la membrana y de los otros elementos de cuales se compone el gas natural.
- Se validó los resultados que se obtuvo en dichas simulaciones lo cual indica que el modelo cumple satisfactoriamente con las condiciones de operación en donde se obtiene una conversión del 61,4% para los dos casos, estos análisis se encuentran dentro del rango propuesto en bibliografía en donde se expone que un sistema de reformado de vapor opera con rangos de conversión del 50 al 80%.

RECOMENDACIONES

- Se puede completar el análisis considerando además del proceso de obtención de hidrógeno, el tratamiento del CO₂ que queda como residuos de la reacción de separación.
- Realizar un análisis en 3D para obtener resultados más cercanos a la realidad y poder considerar las variaciones tanto en el sentido axial como radial.
- Elaborar un análisis económico con ayuda de softwares especializados para conocer la viabilidad de la implementación de este proyecto.

BIBLIOGRAFÍA

ALI-KHAN, I., DIETZ, K.J., WAELBROECK, F.G. y WIENHOLD, P. "The rate of hydrogen release out of clean metallic surfaces". *Journal of Nuclear Materials* [en línea], 1978, (Alemania), pp. 337-343. [Consulta: 31 marzo 2021]. ISSN 00223115. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0022311578901678>.

ALIQUE, D., MARTINEZ, D., SANZ, R. y CALLES, J. "Review of supported pd-based membranes preparation by electroless plating for ultra-pure hydrogen production". *Membranes* [en línea], 2018, (España) 8(1), pp. 1-4. [Consulta: 11 abril 2021]. ISSN 20770375. Disponible en: <https://doi.org/10.3390/membranes8010005>.

ALVES, H., CÍCERO, J., NIKLEVICZ, R., PIRES, E., SATO, M. y COIMBRA, C. "Overview of hydrogen production technologies from biogas and the applications in fuel cells". *International Journal of Hydrogen Energy* [en línea], 2013, (Brasil), no. xxxx, pp. 4. [Consulta: 7 abril 2021] ISSN 03603199. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.02.057>.

BAKER, R. *Membrane Technology and Applications* [en línea]. 2nd ed. California: McGraw-Hill, 2004. [Consulta: 22 marzo 2021]. Disponible en: <https://books.google.com.ec/books?hl=es&lr=&id=FhtBKUq4rL8C&oi=fnd&pg=PR11&dq=MEMBRANE+TECHNOLOGY+AND+APPLICATIONS&ots=afq3-GEJgY&sig=rR73cGzLL3-8T9VgunnxI9CMEK8#v=onepage&q=MEMBRANE%20TECHNOLOGY%20AND%20APPLICATIONS&f=false>.

BOTAS, J., CALLES, J., DUFOUR, J. y SANMIGUEL, G. "La economía del hidrogeno- Una vision global sobre la revolucion energética del siglo XXI". *La economía del hidrógeno* [en línea], 2005, (España), pp. 2-5. [Consulta: 5 abril 2021]. Disponible en: <http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:Producci?n+y+almacenamiento+de+hidr?geno#1>.

CALVO, M. Producción de hidrógeno por oxidación parcial de metano sobre catalizadores derivados de aluminato de níquel [en línea] (Trabajo de titulación). (Doctoral) Universidad del País Vasco, Leioa, España. 2018. pp. 17-18. [Consulta: 2021-04-07]. Disponible en: <https://addi.ehu.eus/handle/10810/31648>.

CHANG, H., LIAU, J., HO, C. y WANG, W. "Simulation of membrane distillation modules for desalination by developing user's model on Aspen Plus platform". *Desalination* [en línea],

2009, (China) vol. 249, pp. 380-387. [Consulta: 2 mayo 2021]. ISSN 0011-9164. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2008.11.026>.

COMSOL, 2018. COMSOL Software License Agreement. [en línea], pp. 8-9. [Consulta: 9 abril 2021]. Disponible en: https://www.comsol.com/shared/downloads/products/COMSOL_SoftwareLicenseAgreement.pdf.

DE FALCO, M., MARRELLI, L. y IAQUANIELLO, G. "Membrane Reactors for Hydrogen Production Processes". [en línea]. New York-USA: s.n., 2011. [Consulta: 22 marzo 2021]. Disponible en: [https://books.google.com.ec/books?id=g2huAO89aQC&pg=PA21&lpg=PA21&dq=Basile,+A.,+Iulianelli,+A.,+Longo,+T.,+Liguori,+S.,+%26+De+Falco,+M.+\(2011\).+Pd-based+selective+membrane+state-of-the-art.+In+Membrane+reactors+for+hydrogen+production+processes&source=](https://books.google.com.ec/books?id=g2huAO89aQC&pg=PA21&lpg=PA21&dq=Basile,+A.,+Iulianelli,+A.,+Longo,+T.,+Liguori,+S.,+%26+De+Falco,+M.+(2011).+Pd-based+selective+membrane+state-of-the-art.+In+Membrane+reactors+for+hydrogen+production+processes&source=).

GOBIERNO DEL ECUADOR, 2008. Decreto Ejecutivo 1014. [en línea]. Quito: s.n. [Consulta: 9 abril 2021]. ISBN 15000.000.00. Disponible en: https://www.obraspublicas.gob.ec/wp-content/uploads/downloads/2017/01/APP_2017_MTOP_ESP_DECRETO-1040-REGLAMENTO-DE-APP.pdf.

GOBIERNO ELECTRÓNICO, 2015. "Plan Nacional de Gobierno Electrónico" Gobierno Electrónico [en línea], pp. 84. [Consulta: 9 abril 2021]. Disponible en: https://www.obraspublicas.gob.ec/wp-content/uploads/downloads/2017/01/APP_2017_MTOP_ESP_DECRETO-1040-REGLAMENTO-DE-APP.pdf.

HARYANTO, A., FERNANDO, S., MURALI, N. y ADHIKARI, S. "Current status of Hydrogen Production Techniques by Steam Reforming of Ethanol: A review". *Energy and Fuels* [en línea], 2005, (United States) 19(5), pp. 2098-2106. [Consulta: 7 abril 2021]. ISSN 08870624. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/ef0500538>

HOU, K. y HUGHES, R. 2001. "The kinetics of methane steam reforming over a Ni/ α -Al₂O₃ catalyst". *Chemical Engineering Journal* [en línea], 2001, (England), vol. 82, pp. 8-10. [Consulta: 1 junio 2021]. ISSN 13858947. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1385894700003673>.

IDRISS, H., SCOTT, M. y SUBRAMANI, V. *Compendium of Hydrogen Energy: Hydrogen*

Production and Purification [en línea], Cambridge-England: Elsevier Ltd, 2015. [Consulta: 7 abril 2021]. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-1-78242-361-4.00001-7>.

ISHAQ, H. y DINCER, I. "Comparative assessment of renewable energy-based hydrogen production methods". *Renewable and Sustainable Energy Reviews* [en línea], 2020, (Canadá) vol. 135, pp. 2-12. [Consulta: 4 abril 2021] ISSN 18790690. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110192>.

IULIANELLI, A., LIGUORI, S., HUANG, Y. y BASILE, A. "Model biogas steam reforming in a thin Pd-supported membrane reactor to generate clean hydrogen for fuel cells". *Journal of Power Sources* [en línea], 2015, (Italy) vol. 273, pp. 25-26. [Consulta: 7 abril 2021]. ISSN 03787753. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.09.058>.

IULIANELLI, A., RIBEIRINHA, P., MENDES, A. y BASILE, A. "Methanol steam reforming for hydrogen generation via conventional and membrane reactors: A review". *Renewable and Sustainable Energy Reviews* [en línea], 2014, (Italy) vol. 29, pp. 358-362. [Consulta: 11 abril 2021] ISSN 13640321. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2013.08.032>.

JI, G., ZHAO, M. y WANG, G. "Computational fluid dynamic simulation of a sorption-enhanced palladium membrane reactor for enhancing hydrogen production from methane steam reforming". *Energy* [en línea], 2018, pp. 884-890. [Consulta: 1 junio 2021]. ISSN 03605442. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0360544218301105>.

KIM, C., HAN, J., KIM, S., LEE, B., LIM, H., LEE, K. y RYI, S. "Hydrogen production by steam methane reforming in a membrane reactor equipped with a Pd composite membrane deposited on a porous stainless steel". *International Journal of Hydrogen Energy* [en línea], 2017, (Korea) vol. 43, pp. 2-6. [Consulta: 1 junio 2021]. ISSN 03603199. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.11.176>.

KONG, F., SWIFT, J., ZHANG, Q., FAN, L.S. y TONG, A. 2020. "Biogas to H₂ conversion with CO₂ capture using chemical looping technology: Process simulation and comparison to conventional reforming processes". *Fuel* [en línea], 2020, (United States) vol. 279, pp. 1-2. [Consulta: 5 abril 2021]. ISSN 00162361. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118479>.

LU, G.Q., DINIZ DA COSTA, J.C., DUKE, M., GIESSLER, S., SOCOLOW, R., WILLIAMS, R.H. y KREUTZ, T. "Inorganic membranes for hydrogen production and

purification: A critical review and perspective". *Colloid and Interface Science* [en línea], 2007, (Australia) vol. 314, pp. 591-593. [Consulta: 20 enero 2021]. ISSN 00219797. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0021979707007485>.

MARTÍNEZ, A. Estudio de la separación de hidrógeno en una mezcla gaseosa por membranas densas de paladio. [en línea]. (Trabajo de titulación). Universidad Politécnica de Madrid, España. 2018. pp. 39-41. [Consulta: 2021-01-05]. Disponible en: http://oa.upm.es/51944/1/TFG_ANA_MARTINEZ_DIAZ.pdf.

MEL, M., SYAMIN, A., AVICENNA, IZAN, S. y HENDROKO, R. "Simulation Study for Economic Analysis of Biogas Production from Agricultural Biomass". *Energy Procedia* [en línea], 2015, (Malaysia) vol. 65, pp. 204-214. [Consulta: 5 abril 2021]. ISSN 18766102. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2015.01.026>.

MONTES ALZATE, R.J. Aplicación del programa COMSOL Multiphysics en la ingeniería mecánica [en línea] (Trabajo de Titulación). Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia. 2015. pp. 12-17. [Consulta: 2021-04-08]. Disponible en: <https://core.ac.uk/download/pdf/71398532.pdf>.

MORICO, B., SALLADINI, A., PALO, E. y IAQUANIELLO, G. "Solar Energy Assisted Membrane Reactor for Hydrogen Production". *Chemengineering* [en línea], 2019, (Italy), pp. 1-2. [Consulta: 11 abril 2021]. Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/330417547_Solar_Energy_Assisted_Membrane_Reactor_for_Hydrogen_Production.

MULDER, M. *Basic Principles of Membrane Technology* [en línea]. Enschede-Países Bajos: Springer-Science+Business Media, 1991. [Consulta: 22 marzo 2021]. Disponible en: https://books.google.com.ec/books?hl=es&lr=&id=SP2_GYvL384C&oi=fnd&pg=PA1&dq=Basic+Principles+of+Membrane+Technology&ots=GtA63gO900&sig=YJfEUddJ48L4NdGNb727KpQnozcv=onepage&q=Basic%20Principles%20of%20Membrane%20Technology&f=false.

NIKOLAIDIS, P. y POULLIKKAS, A. "A comparative overview of hydrogen production processes". *Renewable and Sustainable Energy Reviews* [en línea], 2017, vol. 67, pp. 597-611. [Consulta: 7 abril 2021]. ISSN 18790690. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2016.09.044>.

PALACIO, L., PRÁDANOS, P. y HERNÁNDEZ, A. "Procesos de separación: membranas en

el día a día". *Revista de ciencias* [en línea], 2014, (España) pp. 5-10. [Consulta: 23 marzo 2021]. ISSN 2255-5943. Disponible en: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=4674758>.

ROBERTS, M., ZABRANSKY, R., DOONG, S. y LIN, J. "Single Membrane Reactor Configuration for Separation of Hydrogen, Carbon Dioxide and Hydrogen Sulfide". *Energy* [en línea], 2008, (United States), pp. 32-42. [Consulta: 1 junio 2021]. Disponible en: <https://doi.org/10.2172/958104>.

SHAKEEL AHMAD, M., SYUKRI ALI, M. y ABD RAHIM, N. "Hydrogen energy vision 2060: Hydrogen as energy Carrier in Malaysian primary energy mix – Developing P2G case". *Energy Strategy Reviews* [en línea], 2021, (Malaysia) vol. 35, pp. 3. [Consulta: 4 abril 2021]. ISSN 2211467X. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.esr.2021.100632>.

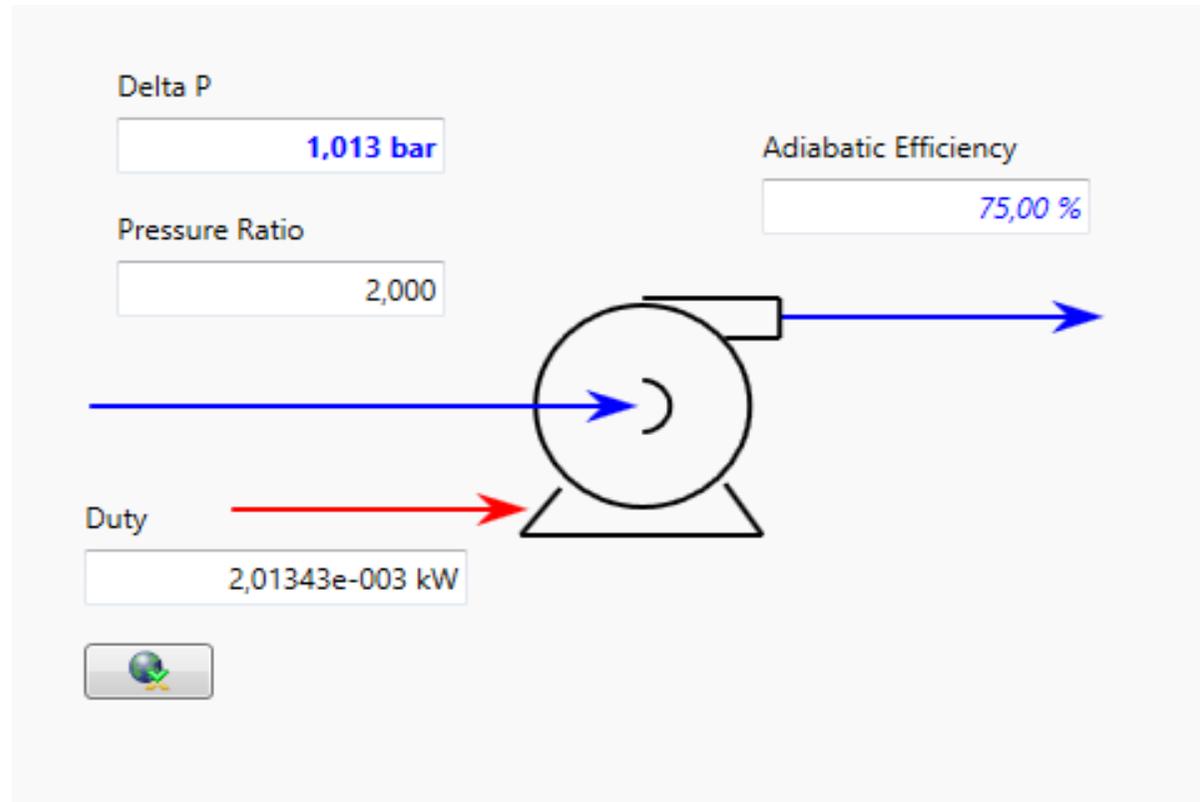
SUAREZ, V., HERNÁNDEZ, J., NOGAL, A., CALDERÓN, J., ROJAS, A. y JUÁREZ, E. "Study of the heat transfer in solids using infrared photothermal radiometry and simulation by COMSOL Multiphysics". *Applied Radiation and Isotopes* [en línea], 2013, (México), pp. 1-3. [Consulta: 8 abril 2021]. ISSN 09698043. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apradiso.2013.04.010>.

UEMIYA, S., SATO, N., ANDO, H., KUDE, Y., MATSUDA, T. y KIKUCHI, E. "Separation of hydrogen through palladium thin film supported on a porous glass tube". *Journal of Membrane Science* [en línea], 1991, (Países Bajos) vol. 56, pp. 303-313. [Consulta: 31 marzo 2021]. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S0376-7388\(00\)83040-9](https://doi.org/10.1016/S0376-7388(00)83040-9).

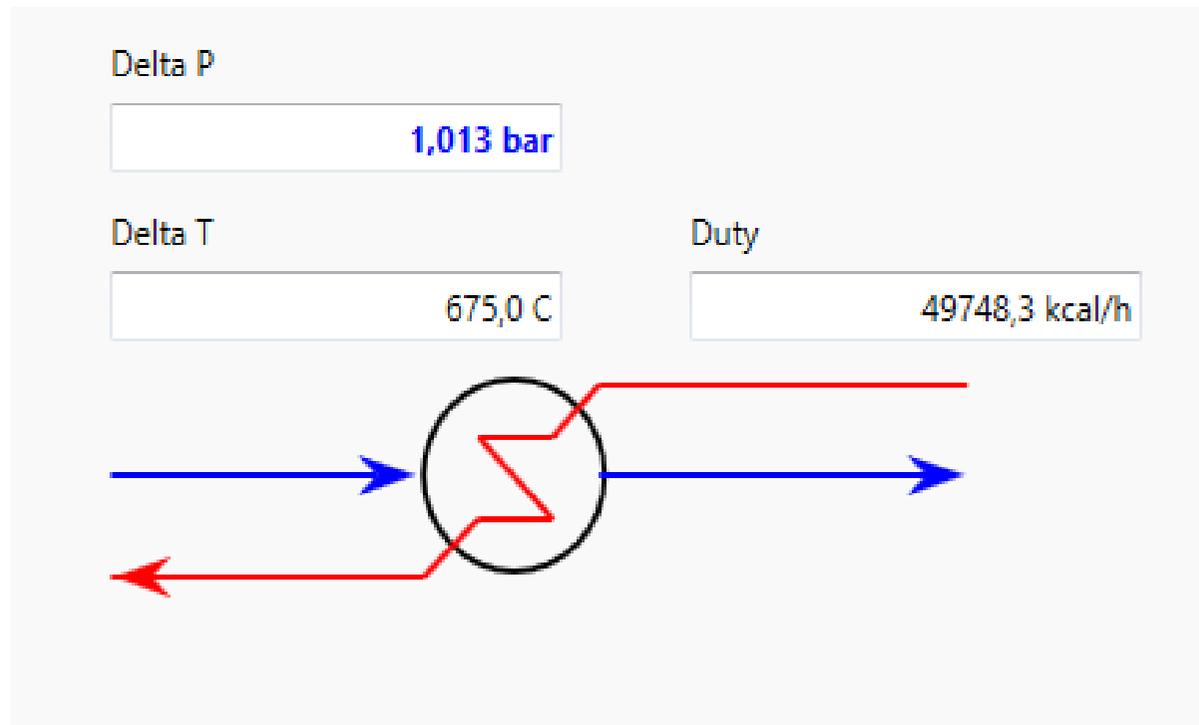
WARD, T.L. y DAO, T. "Model of hydrogen permeation behavior in palladium membranes". *Journal of Membrane Science* [en línea], 1999, (México) 153(2), pp. 211-231. [Consulta: 31 marzo 2021]. ISSN 03767388. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S0376-7388\(98\)00256-7](https://doi.org/10.1016/S0376-7388(98)00256-7).

ANEXOS

Anexo A: Configuración de la bomba



Anexo B: Configuración del calentador 1



Anexo C: Configuración del compresor

Efficiency

Adiabatic Efficiency	75,000
Polytropic Efficiency	75,028

Polytropic Method

- Schultz
- Huntington
- Reference

Duty

9,46297e-003 kW

Operating Mode

- Centrifugal
- Reciprocating
- Screw Compressor

Curve Input Option

- Single-MW
- Multiple MW
- Multiple IGV
- Non-Dimensional
- Quasi-Dimensionless

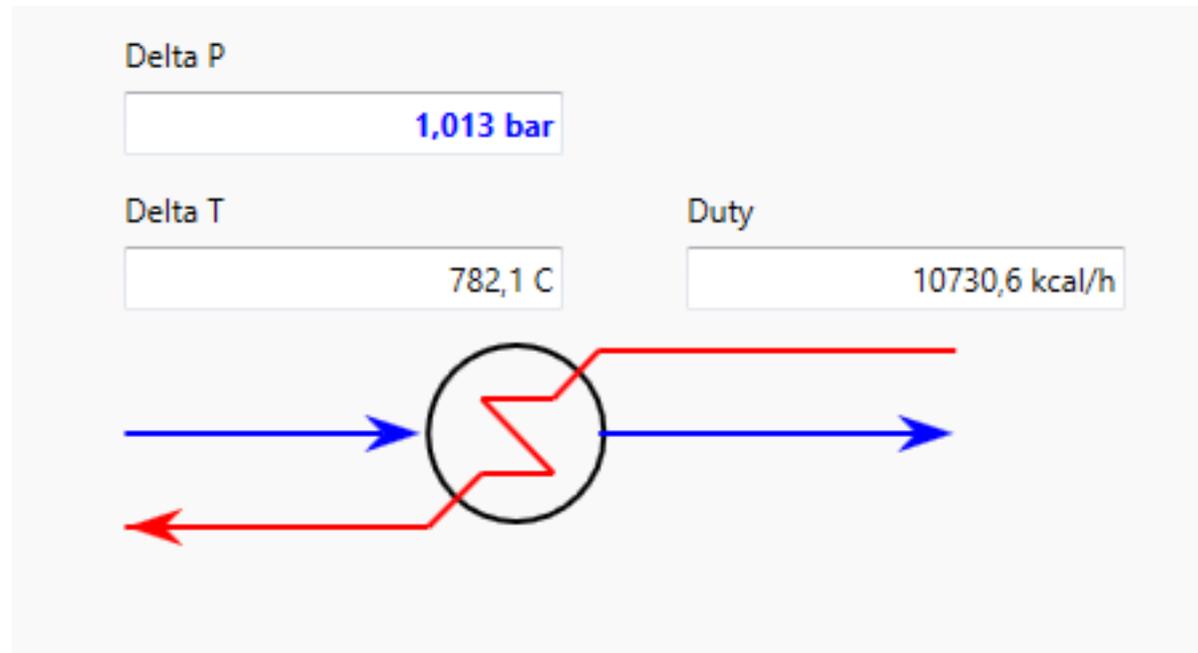
Pressure Specs

Delta P: 1,000e-002 bai Pressure Ratio: 1,010

Surge Analysis

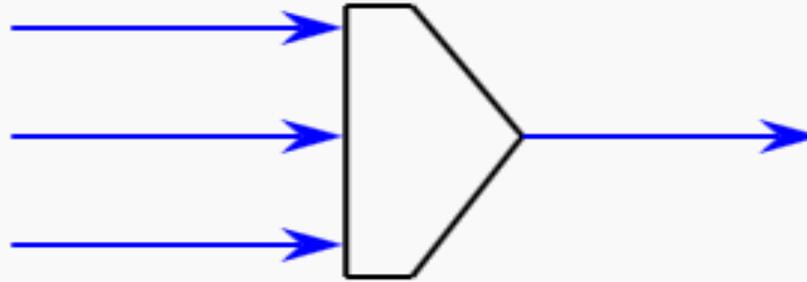
To study compressor surge under different emergency scenarios, click the "Surge Analysis" button here: [Surge Analysis](#)

Anexo D: Configuración del calentador 2



Anexo E: Configuración del mezclador

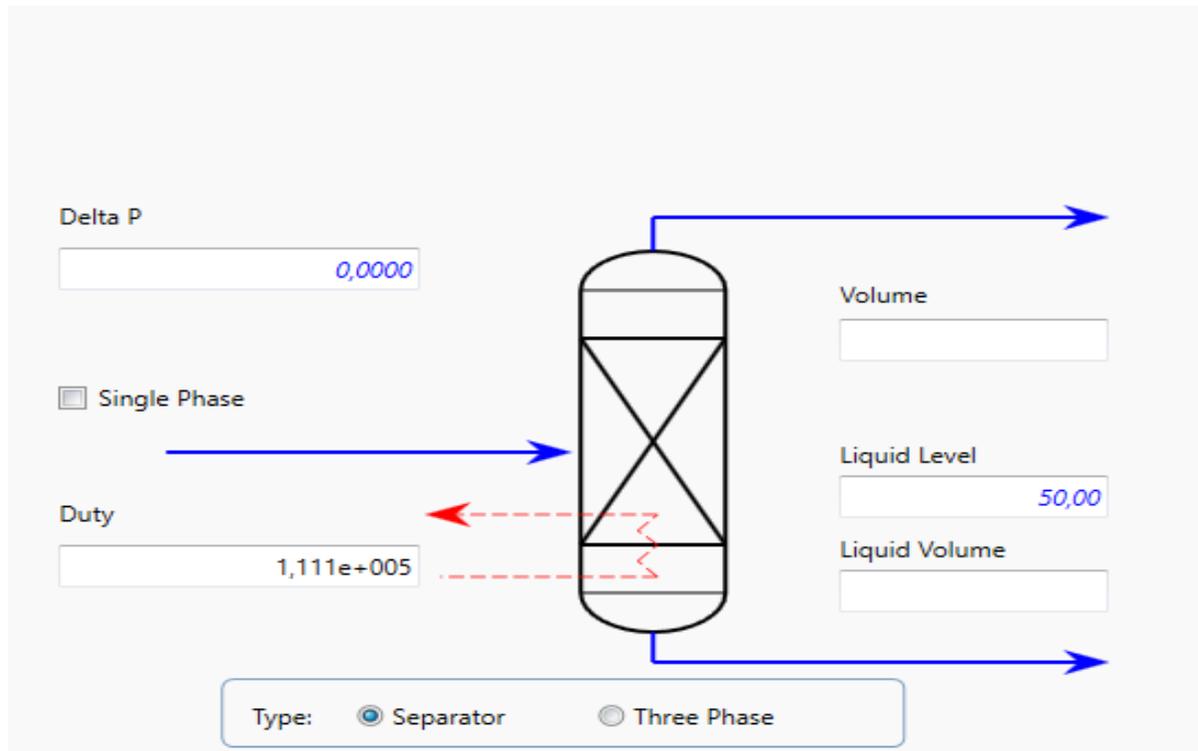
Use trivial zero flow solution (when applicable)



Automatic Pressure Assignment

- Equalize All
- Set Outlet to Lowest Inlet

Anexo F: Configuración del Reactor Gibbs



Anexo G: Configuración del divisor de componentes

Stream Specifications

Calculate Equal Temperatures (Two Products Only)

Use Stream Flash Specifications:

Generic

	P	R	
Vapour Fraction	1,0000	1,0000	
Temperature	450,0	450,0	
Enthalpy	2943	-6,155e+004	
Pressure	1,000e-002	5,218e-003	

Use Stream Pressure Specifications

Equalize All Stream Pressures

Use Lowest Feed Pressure for All Products (Equalize in Dynamics Mode)



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

*DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS DEL APRENDIZAJE
UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y DOCUMENTAL*

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 26 / 08 / 2021

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: <i>Jhajaira Marlid Guerrero Hidalgo</i>
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: <i>Ciencias</i>
Carrera: <i>Ingeniería Química</i>
Título a optar: <i>Ingeniera Química</i>
f. Analista de Biblioteca responsable: <i>Ing. Leonardo Medina Ñuste MSc.</i>

**LEONARDO
FABIO MEDINA
NUSTE**

Firmado digitalmente por LEONARDO
FABIO MEDINA NUSTE
Nombre de reconocimiento (DN): c=EC,
o=BANCO CENTRAL DEL ECUADOR,
ou=ENTIDAD DE CERTIFICACION DE
INFORMACION-ECIBCE, l=QUITO,
serialNumber=0000621485,
cn=LEONARDO FABIO MEDINA NUSTE
Fecha: 2021.08.26 17:31:24 -05'00'



1657-DBRA-UTP-2021