



UNIVERSIDAD CENTRAL  
"MARTA ABREU" DE LAS VILLAS

FACULTAD DE QUÍMICA – FARMACIA  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

## *Trabajo de Diploma*

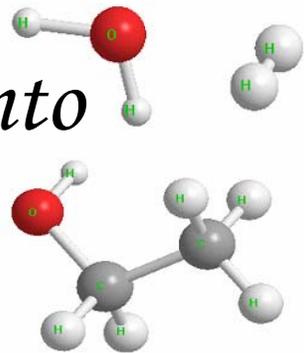
DISEÑO DEL PROCESO DE REFORMACIÓN  
DE BIOETANOL PARA LA OBTENCIÓN DE  
H<sub>2</sub>, CON CATALIZADOR DE Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Autor: Alexander Santos Rodríguez

Tutores: Dr. Luis M. Peralta Suárez  
Ing. Luis E. Arteaga Pérez

2005 – 2006  
"Año de la Revolución Energética en Cuba"

*Pensamiento*

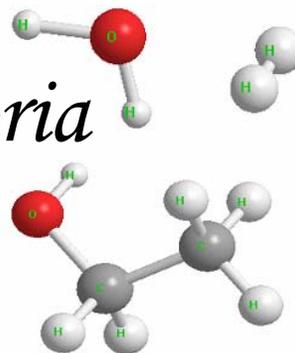




*“Ahora, cuando se acabe el petróleo la ciencia tendrá que buscar fuentes de combustible diferentes, y tendrá tal vez que usar el hidrógeno u otras materias primas para lograr un combustible no contaminante; pero la pobreza del mundo, por un lado, y el exceso de los gastos del mundo capitalista desarrollado, por otro, han ido mucho más rápido que los progresos de la ciencia. Esto es indiscutible, y el capitalismo no ha permitido un desarrollo parejo de la sociedad y de la ciencia, un desarrollo proporcional entre las necesidades del hombre y los avances de la ciencia.”*

*Fidel Castro Ruz*

*Dedicataria*

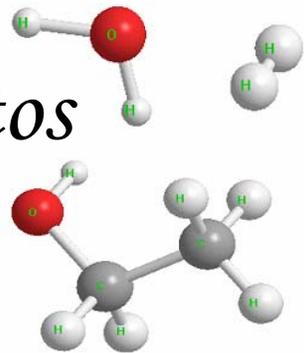


*A mi abuela Mercedes que desde las alturas me da lluvias de alegrías. Gracias por la herencia de tus virtudes, sencillez, nobleza y entrega plena.*

*A mi madre: fiel compañera y amiga, que entre el cariño, el amor y el sacrificio pleno jamás ha perdido, ni en las peores circunstancias, esa capacidad de entrega y ese caudal insospechado de dignidad máxima.*

*A mi hermana, al ingenioso padre Noel que me dio y devolvió lo que había dado por perdido: el calor paternal.*

*Agradecimientos*



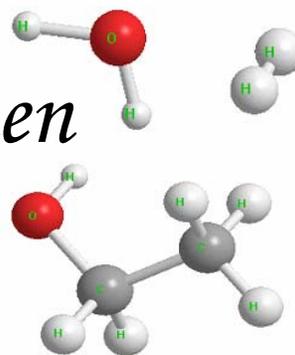
*A mis familiares por confiar en mí, también por esa perseverancia, paciencia y fe en mi presente y futuro.*

*A mis tutores y profesores, por esa dedicación y entrega incondicional, por esos conocimientos brindados y por colaborar con esta alegría de convertirme en un futuro profesional, no solo en el día de hoy sino también en los precedentes. En ustedes he podido ver mucha adhesión y con su presencia alentadora hoy recogen el fruto de cada empeño y de cada sueño.*

*A mis amigos, por esa admiración que siempre aflora en sus corazones, desbordando a cada instante las orillas de mi alma. Gracias por esa entrega sin titubeos ni fatigas. Les confieso que siempre me ha asombrado ese cariño y esa fe por encima de todo desaliento.*

*A otras tantas personas que no me atrevo a enumerarlas, porque correría el riesgo de ocurrir en omisiones involuntarias que no por serlo, resultarían menos lamentables.*

# *Resumen*



El presente proyecto está encaminado a realizar un estudio de las características teóricas y técnicas de la etapa de reformación de Bioetanol, con fines de obtener Gas de Síntesis para la generación de 200 kW de potencia a través de celdas combustibles.

En el mismo se analiza el estado actual del conocimiento referente al tema, con el fin de obtener el basamento teórico necesario para llevar a cabo la selección y diseño de la variante de reformación adecuada (reformación por vapor). Se destacan los principales catalizadores empleados en la etapa seleccionada y se definen las condiciones de operación para la misma [ $\text{Ni/Al}_2\text{O}_3$ ,  $450 < T \text{ (}^\circ\text{C)} < 600$ ,  $3 < R_{\text{AE}} < 6$ ].

Todos los equipos auxiliares son diseñados (tanque de mezclado, vaporizador y calentador) en conjunto con la etapa principal, para la cual se propone un esquema de reacción, con el patrón cinético correspondiente. El procedimiento utilizado se implementa en forma de Software, permitiendo hacer una evaluación de alternativas.

Con los resultados obtenidos se realiza la simulación del proceso en estado estacionario, empleando para ello el software Hysys 3.2. Queda demostrado que la variante diseñada no es factible desde el punto de vista económico, en las condiciones actuales.

Se concluye el proyecto con un grupo de aspectos que se derivan del estudio realizado y se emiten recomendaciones para el futuro desarrollo del tema abordado.

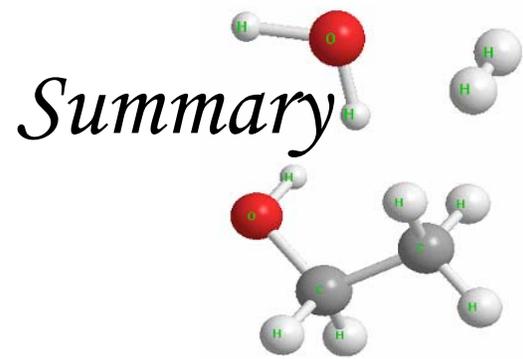
Palabras claves:

Reformación

Celdas

Combustible

Diseño



A theoretical and technical study, guided to analyze the characteristics of Gas synthesis production via Bioethanol reforming was carried out in the present project, to evaluate a whole system for 200 kW of electricity production using fuel cells.

To obtain the necessary theoretical basement to carry out the selection and design of the appropriate Bioethanol reforming technology a current state of the knowledge was analyzed too. The catalyst and operational conditions were highlighted as a result of the mentioned study [Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 450<T (°C) <600, 3<R<sub>AE</sub><6].

All auxiliary devices are designed (tank of blended, vaporizer and heater) together with the main stage (reformer), for which a reaction scheme and the corresponding kinetic pattern were proposed. The used procedure was implemented as Software scheduling, allowing in this way an alternative screening.

A process simulation was carried out using the results obtained in the design step, using the Hysys 3.2 facilities, also the non feasibility from the economic point of view of the process, was proved under the current conditions.

A group of aspects derived of the carried out study were used as the project conclusions and some useful recommendations were emitted for the future development of the approached topic.

Key words:

Reforming

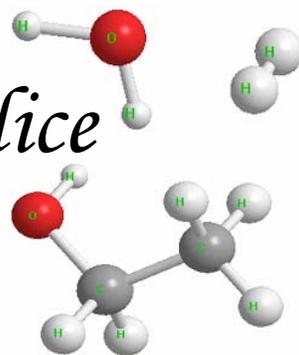
Cells

Fuel

Design

Simulation

# *Índice*



---

	<i>Pág.</i>
Introducción.....	1
<b><i>Capítulo I. Revisión Bibliográfica.</i></b>	
1.1 Estado actual de los combustibles fósiles y la contaminación ambiental.....	4
1.2 Generalidades sobre Celdas combustibles.....	4
1.2.1 Celdas de combustible.....	4
1.2.2 Aplicaciones de las celdas combustibles.....	5
1.2.3 Tipos y características generales de celdas combustibles.....	6
1.3 Generalidades sobre el hidrógeno.....	7
1.3.1 Ventajas de la utilización de la tecnología del hidrógeno. ....	8
1.3.2 Fuentes de energía para producir Hidrógeno.....	9
1.4 Producción de Hidrógeno por métodos reformativos.....	10
1.4.1 Reformador de oxidación parcial.....	10
1.4.2 Reformación por vapor.....	12
1.4.3 Reformación por descomposición térmica.....	13
1.4.4 Reformador autotérmico.....	14
1.5 Catálisis y catalizadores.....	15
1.5.1 Catalizadores empleados en la reformación por vapor.....	15
1.6 Reactores y equipos utilizados en procesos reformativos.....	18
1.6.1 Tipos de Reactores químicos. ....	18
1.6.2 Reactores utilizados en sistemas gas - sólido. ....	20
1.7 Simulación de procesos.....	22
1.7.1 Hysys como simulador de procesos. ....	23
Conclusiones parciales.....	24
<b><i>Capítulo II. Diseño de un proceso para producir Gas de Síntesis.</i></b>	
2.1 Descripción del proceso para obtener Gas de Síntesis a partir del bioetanol....	25
2.2 Cálculo de las corrientes involucradas en el proceso.....	25

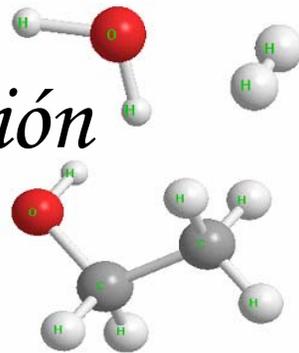
---

2.2.1 Cálculo del hidrógeno necesario para la celda.....	25
2.2.2 Cálculo de la mezcla de alimentación al Vaporizador.....	26
2.3 Cálculo del Tanque Agitado. ....	27
2.3.1 Selección del Agitador.....	28
2.3.2 Resultados del Tanque Agitado.....	28
2.4 Metodología para el Diseño del Vaporizador y Calentador.....	29
2.4.1 Cálculo de la caída de presión.....	29
2.4.1.1 Caída de presión en los tubos.....	30
2.4.1.2 Caída de presión en la carcaza.....	30
2.4.2 Diseño y selección de la variante para el vaporizador y calentador.....	31
2.5 Diseño y simulación del reformador.....	37
2.5.1 Esquema de reacción y modelo cinético.....	37
2.5.1.1 Esquema de reacción.....	38
2.5.1.2 Modelo cinético para el Reformado Húmedo de Bioetanol.....	38
2.5.2 Diseño del Reformador.....	43
2.5.2.1 Balance de masa. ....	44
2.5.2.2 Balance de Energía.....	44
2.5.2.3 Caída de presión.....	45
2.5.3 Diseño general y elección de la variante.....	46
2.5.3.1 Influencia del Tiempo Espacial y el Número de tubos.....	46
2.5.3.2 Diámetro de Tubo.....	49
2.5.3.3 Diámetro de Partículas.....	51
2.5.3.4 Conclusiones Preliminares de la simulación.....	52
2.5.4 Simulación del reformador.....	53
2.6 Cálculo del sistema de flujo.....	55
2.6.1 Cálculo del consumo de potencia de la bomba y selección del motor.....	55
2.6.2 Transporte de fluidos compresibles.....	58

---

Conclusiones parciales.....	60
Nomenclatura.....	61
<i>Capítulo III. Simulación y Estimación de los costos del Proceso.</i>	
3.1 Consideraciones tomadas para la simulación.....	65
3.1.1 Mezclador.....	65
3.1.2 Intercambiadores de Calor.....	66
3.1.3 Reformador de Bioetanol.....	67
3.1.4 Horno.....	68
3.2 Simulación del proceso.....	68
3.2.1 Resultados para variaciones de R <sub>AE</sub> .....	69
3.2.2 Resultados para variaciones de la T <sub>reformación</sub> .....	71
3.3 Comportamiento interior del reactor.....	73
3.4 Estimación de los costos.....	75
3.4.1 Capital Total Invertido.....	75
3.4.2 Costo Total de Producción.....	78
3.4.3 Valor de la Producción y Ganancia unitaria.....	80
Conclusiones parciales.....	83
Nomenclatura.....	84
Conclusiones.....	86
Recomendaciones.....	87
Bibliografía.....	88
Anexos.....	93

# *Introducción*



La energía no es sólo un producto primario más de nuestro sistema económico moderno, es un recurso fundamental en la que todo se basa y la que hace “más productiva” la infraestructura económica moderna (menos mano de obra). Se obtiene fundamentalmente de los combustibles fósiles, principalmente del petróleo y de sus derivados. El petróleo es la fuente de energía dominante en la red de transporte y la industria, que sostiene la economía mundial, pero el alza de los precios, observado en el 2004, ha dado nuevo ímpetu al debate sobre la disponibilidad de este recurso en el futuro.

La transición de los combustibles fósiles a las fuentes de energía renovables ha comenzado vertiginosamente. Las tres fuentes de energía más importantes que seguramente se utilizarán aún en un futuro cercano son: los combustibles fósiles, (el carbón, el petróleo y el gas natural), la energía nuclear (fisión en la actualidad, fusión en un futuro) y las fuentes de energía renovable (incluyen la energía solar directa, la energía hidroeléctrica, la biomasa, el viento y la energía geotérmica).

Durante esta última década ha surgido un importante interés por la promoción de las llamadas celdas combustibles, que no son otra cosa que sistemas en los cuales se utiliza el hidrógeno como combustible el cual al mezclarse con oxígeno sobre un electrolito produce electricidad, con una eficiencia superior a todos los sistemas implementados en la actualidad. Este proceso no está limitado por el ciclo de Carnot debido a que la energía química del combustible pasa directamente a electricidad sin necesidad de que intervengan pasos de conversión mecánica. Otro tema importante relacionado con las celdas de combustible es que el hidrógeno, fuente de energía, se encuentra en forma abundante en el universo, aunque no en forma libre, se puede extraer de la naturaleza, y si se tiene la tecnología para su separación de los productos primarios, ésta es una fuente inagotable de energía.

En la actualidad se conocen varias formas de producción de hidrógeno como son:

1. Electrólisis del agua con energía proveniente de fuentes renovables:
  - ✓ Energía eólica.
  - ✓ Hidroenergía.

- ✓ Energía solar.
- ✓ Geotérmica.
- 2. Reformación de combustibles biogénicos:
  - ✓ Bioetanol.
  - ✓ Biogas.
  - ✓ Aceite Pirofítico.

Pero por sus potencialidades en la producción a gran escala se centra la atención en la tecnología de reformación, en la cual éste es obtenido de los hidrocarburos, separando el Carbono del Hidrógeno.

En Cuba, se realizan investigaciones acerca de la utilización del Bioetanol y la Biomasa, en general, para la producción de Hidrógeno, con el fin de generar electricidad de bajo costo y suplir algunas necesidades en la industria azucarera o en las destilerías donde se produce el Bioetanol. Esta es una variante potencial y prometedora, debido a la elevada productividad y compatibilidad ambiental de dichos compuestos, que al acoplarse a sistemas generativos de alta eficiencia conforman un ciclo natural con emisiones de CO<sub>2</sub> fácilmente asimilables por el medio ambiente. Además, poseen carácter renovable, fácil transportación, aprovechamiento de infraestructuras existentes para su distribución y producción, fácil extinción en caso de incendio y baja toxicidad.

La presente tesis está soportada sobre la base de que en Cuba existe la infraestructura favorable para la producción de Bioetanol a partir de mieles de caña y otras corrientes del proceso azucarero.

**Problema Científico:**

Ante la realidad presente y futura del agotamiento de los combustibles fósiles, lo que resulta en precios cada vez más elevados de estos recursos no renovables y los imperativos de un medio ambiente menos contaminado por los gases de efecto invernadero, producidos por la generación eléctrica y el transporte moderno, se abre paso la necesidad de desarrollar procesos tecnológicos para la obtención de H<sub>2</sub> a partir de materias primas renovables como el bioetanol. En nuestro País sería factible la aplicación de estas tecnologías, dada la existencia de infraestructura y experiencia tecnológica y agrícola azucarera y de sus derivados, incluyendo al etanol.

**Hipótesis de Solución:**

El Bioetanol tiene grandes potencialidades para su uso en la obtención de gas de síntesis, siempre que se logre un adecuado diseño global del proceso, lo cual puede hacerse a través de las herramientas y procedimientos para la simulación y modelación de procesos químicos.

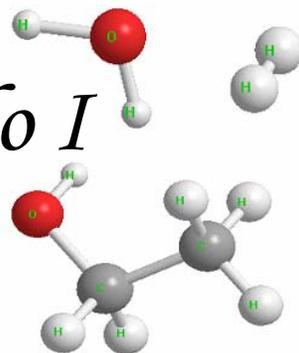
**Objetivo principal:**

Diseñar y analizar técnica y económicamente un sistema para la producción de gas de síntesis, utilizando el bioetanol como portador energético primario.

**Objetivos Parciales**

1. Realizar un estudio teórico de las tecnologías existentes para la producción de gas de síntesis a partir de recursos renovables y seleccionar a priori la variante tecnológica a implementar.
2. Diseñar conceptualmente el reactor de reformación y los equipos auxiliares del proceso.
3. Realizar la modelación y simulación de la Planta con vistas a su análisis general.
4. Evaluar económicamente la variante diseñada.

# Capítulo I



El desarrollo de tecnologías para la producción de gas de síntesis e hidrógeno ha venido aparejado al crecimiento de la industria petroquímica, de los fertilizantes y en menor medida de la termo-energética. A raíz del eminente agotamiento que han sufrido los combustibles fósiles y la reducción cada vez mayor de sus reservas, surge la necesidad de incrementar la utilización del hidrógeno como portador energético, unido a dispositivos de combustión y fundamentalmente las celdas combustibles. El desarrollo de las celdas combustibles había sido dirigido a sistemas con alta confiabilidad pero también con un alto costo (aplicaciones espaciales); actualmente el empleo de las mismas es considerado como variante potencial para todo tipo de aplicación que van desde dispositivos portátiles (teléfonos, PC, etc.) hasta plantas de mediana y alta capacidad con ciclos combinados.

### **1.8 Estado actual de los combustibles fósiles y la contaminación ambiental.**

El carbón, petróleo y gas natural (hidrocarburos) son las fuentes principales de energía de las cuales la humanidad depende en gran medida. En los estudios realizados por algunos expertos, ha quedado al descubierto que el agotamiento de estas fuentes no recuperables va por senda irreversible. En efecto, los planificadores más optimistas creen que el petróleo se agotará en unos 40 ó 50 años y se prevé que aunque un poco más duraderos el carbón y el gas natural (100 años) sufrirán el efecto negativo de dicha política de consumo, la cual en lugar de decrecer cada vez se hace más aguda.

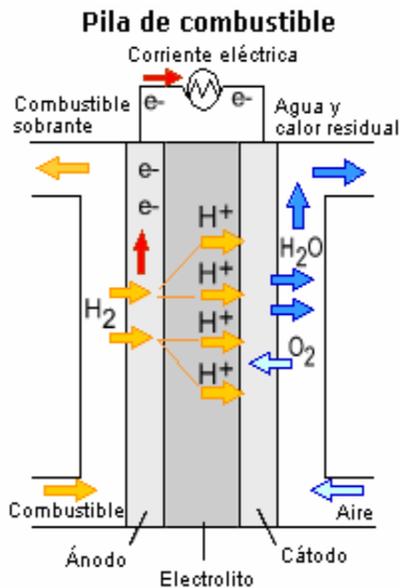
Tal agotamiento unido al deterioro drástico del medio ambiente, ha provocado que la búsqueda de nuevas alternativas se haya tornado más que un reto científico un problema de supervivencia humana. (Figura 1 y 2 Anexo 1.1) (Laborde, M. 2004).

### **1.9 Generalidades sobre Celdas Combustibles.**

#### **1.9.1 Celdas combustibles.**

Una celda combustible es un equipo que se encarga de convertir directamente la energía de una reacción química a energía eléctrica. Consiste en dos electrodos separados por un electrolito, donde se alimenta por el ánodo (electrodo negativo)

una corriente rica en hidrógeno y por el cátodo (electrodo positivo) una de oxígeno, como se muestra en la Figura 1.1. La migración protónica se produce a través del electrolito hasta llegar al cátodo donde se obtiene H<sub>2</sub>O (único residuo) por la combinación del O<sub>2</sub> del aire y el flujo protónico (Hirschenhofer, J.H. et al., 2002).



**Figura 1.1.** Principio de funcionamiento de una celda combustible.

### **1.9.2 Aplicaciones de las celdas combustibles.**

Como se destacó con anterioridad, las celdas combustibles pueden abarcar una amplia variedad de productos: desde equipos donde las pilas empleadas son de pequeño tamaño (dispositivos portátiles), pasando por aplicaciones móviles como vehículos de todo tipo (coches, autobuses y barcos), hasta generadores de calor y energía en aplicaciones estacionarias para empresas, hospitales, zonas residenciales, etcétera.

Se ha previsto que los futuros sistemas energéticos dispondrán de convertidores mejorados de energía convencional basados en el hidrógeno.

A continuación se presentan los principales usos que pueden tener las pilas de combustible:

- Industria militar.
- Dispositivos portátiles.

- Abastecimiento energético en viviendas.
- Misiones espaciales.
- Generación de energía a gran escala.
- Transporte.

La eficacia, versatilidad, prolongado tiempo de funcionamiento y su operatividad sin ruidos, hacen de las celdas combustibles un sistema a la medida para estas aplicaciones.

Además puede ofrecer grandes ventajas sobre las pilas sólidas convencionales voluminosas, ya que se eliminaría el problema de su recarga. Los vehículos serían capaces de recorrer grandes distancias o trabajar en áreas remotas durante más tiempo. (<http://www.tecnociencia.es/especiales/hidrógeno.htm>)

### **1.9.3 Tipos y características generales de las celdas combustibles.**

En la Tabla 1.1 se encuentran las características fundamentales de distintos tipos de celdas.

**Tabla 1.1.** Características de distintos tipos de celdas combustibles.

<b>Tipo de celda</b>	<b>AFC</b>	<b>PEMFC</b>	<b>PAFC</b>	<b>MCFC</b>	<b>SOFC</b>
Electrolito	KOH	Membrana de intercambio protónico	Ac. Fosfórico	Mezcla de carbonatos	Oxido de Zirconio e Ytrio
T operación [°C]	90-100	60-100	175-200	600-1000	600-1000
Electrodo	Níquel	Platino	Platino	Níquel	Perovskitas
Eficiencia de conversión eléctrica (%)	40-50	40-50	40-45	50-60	50-60
Máximo contenido de CO [ppm]	-	50	500	Sin límite	Sin límite

Donde:

AFC: Celdas Combustibles Alcalinas.

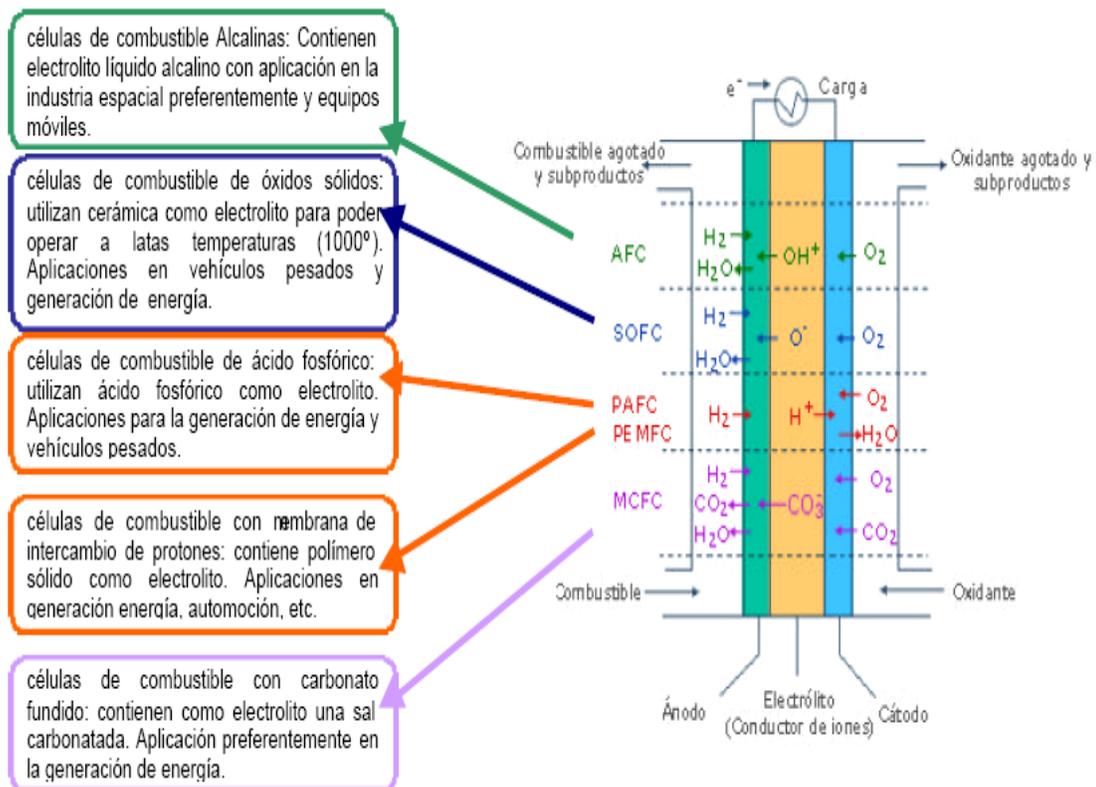
PEMFC: Celdas Combustibles de membrana Polimérica.

PAFC: Celdas Combustibles de Ácido Fosfórico.

MCFC: Celdas Combustibles de Carbonato Fundido.

SOFC: Celdas Combustibles de Oxido Sólido.

En la Figura 1.2 se resumen algunos aspectos y aplicaciones de estas celdas.

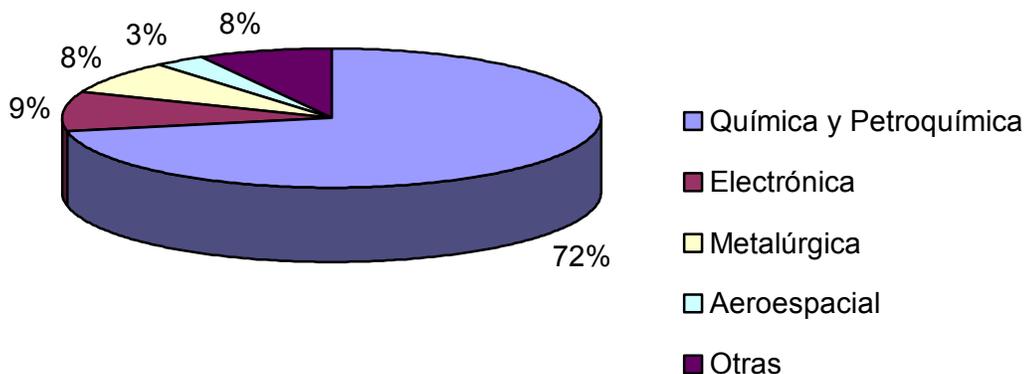


**Figura 1.2.** Tipos de celdas combustibles.

### 1.10 Generalidades sobre el hidrógeno.

El hidrógeno ha tomado un gran auge mundialmente, siendo muy utilizado en las refinerías de petróleo, la síntesis de amoníaco, la fabricación de peróxido de hidrógeno. La industria de alimentos lo utiliza para los procesos de hidrogenación y

en menor medida tiene aplicaciones en las industrias farmacéuticas y electrónicas (Figura 1.3) (Laborde, M. 2004).



**Figura 1.3.** Distribución del consumo de hidrógeno en el mundo.

El creciente interés de emplear el hidrógeno como combustible, se basa en que el mismo es eficiente, no contaminante, inagotable y económicamente atractivo, siempre y cuando su producción esté integrada a sistemas basados en el empleo de fuentes renovables y esquemas integrados de alta eficiencia.

### **1.10.1 Ventajas de la utilización de la tecnología del hidrógeno.**

El hidrógeno ha sido un combustible confiable por varios años, desde su uso como gas doméstico en muchas casas en el siglo XIX, hasta los poderosos motores de los cohetes espaciales de hoy. Ahora, con el desarrollo de las celdas combustibles, tiene la gran oportunidad de convertirse en el mayor portador de energía para nuestra sociedad. (<http://www.humboldt.edu>).

Las ventajas que hacen que el Hidrógeno sea utilizado como combustible son:

➤ **Seguridad.**

Los sistemas de hidrógeno tienen una historia de seguridad muy impresionante. En muchos casos, es más seguro que el mismo combustible que está siendo reemplazado. Además de disiparse rápidamente en la atmósfera si se fuga, el hidrógeno, en contraste con los otros combustibles, no es tóxico en absoluto.

➤ **Alta eficiencia.**

Las celdas combustibles convierten la energía química directamente a electricidad con mayor eficiencia que ningún otro sistema de energía.

➤ **Larga vida y poco mantenimiento.**

Aunque las celdas combustibles todavía no han comprobado la extensión de su vida útil, probablemente tendrán una vida significativamente más larga que las máquinas que reemplacen.

➤ **Modularidad.**

Se puede elaborar las celdas combustibles en cualquier tamaño: tan pequeñas como para impulsar una carretilla de golf o tan grandes como para generar energía para una comunidad entera. Esta modularidad permite aumentar la energía de los sistemas según los crecimientos de la demanda energética, reduciendo drásticamente los costos iniciales.

### **13.2. Fuentes de energía para producir Hidrógeno**

En la actualidad existen disímiles vías para obtener el hidrógeno de forma ecológica a partir de combustibles y fuentes de energía recuperables a continuación se da muy brevemente una idea de estas a nivel mundial.

3. Electrólisis del agua con energía proveniente de fuentes renovables

- Energía eólica
- Hidroenergía
- Energía Solar

4. Reformación de combustibles biogénicos (CO<sub>2</sub>-Neutral)

- Biomasa sólida
- Biogás
- Aceite Pirofítico
- Bioetanol

En el presente proyecto se refiere únicamente al caso reformativo por la importancia que reviste en el estudio realizado, específicamente del Bioetanol el cual es un combustible de características renovables que actúa como parte de un ciclo natural es decir el dióxido de carbono producido en su elaboración es consumido en un periodo de tiempo discreto por la biomasa que participa en el flujo productivo, por lo que se reduce en un porcentaje considerable la contaminación por concepto de emisiones de este gas. Se elimina la necesidad de una etapa de purificación exhaustiva debido a que este no introduce impurezas de gran importancia al proceso (sulfuros), además la sustancia tiene elevado contenido energético (Rampe, T. 2000). Además de las ventajas de disponibilidad y compatibilidad ambiental, en Cuba existe la experiencia y la infraestructura necesaria para producir y distribuir etanol a gran escala. Por otra parte los residuales y subproductos de la misma industria del azúcar pueden emplearse como sustrato en su producción por vía fermentativa.

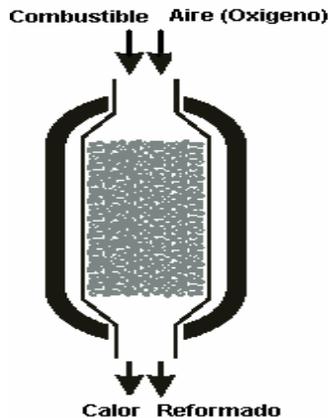
### **1.11 Producción de Hidrógeno por métodos reformativos.**

Existen en la actualidad varias alternativas de reformado del bioetanol para la generación de gas de síntesis. Fundamentalmente:

1. Reformación con vapor
2. Oxidación parcial
3. Reformación por descomposición térmica.
4. Reformación autotérmica.

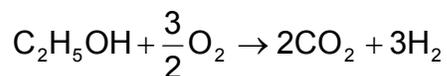
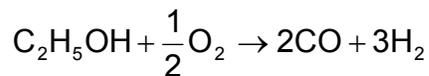
#### **1.11.1 Reformador de oxidación parcial.**

El funcionamiento del reformador de oxidación parcial (POX) (Figura 1.4) se basa en hacer reaccionar una mezcla fina de oxígeno con el combustible, para producir una mezcla de Hidrógeno y monóxido de carbono.



**Figura 1.4.** Reformador de Oxidación Parcial.

La ecuación general para la reacción es la siguiente:



Los POX son reactores de relativa compactación y con potencialidades en el arranque (Hubner, P. 2002), pero los productos en su composición contienen fracciones de materiales sin reaccionar y el monóxido de carbono debe convertirse en dióxido por procesos auxiliares (Mariño, F. et al., 2004).

Presentan menor eficiencia térmica, producto del carácter exotérmico de la reacción, pero no requieren de calentamiento indirecto como los reformadores de vapor (Ahmed, S. 1998). El rendimiento de Hidrógeno no se incrementa prácticamente debido a que no existe hidrógeno adicional en forma de agua y por la dilución en la corriente de productos (Hubner, P. 2002). Fundamentalmente presentan una disminución en la eficiencia con relación a los reformadores de vapor entre un 5 y 10 % (Manual, 2002), por lo que actualmente existe una tendencia a su integración con estos, denominándose este resultado reformador auto - térmico. (Hubner, P. 2002).

### 1.11.2 Reformación por vapor.

Los reformadores de vapor (Figura 1.5) son actualmente los más eficaces, baratos y ampliamente utilizados como técnica para la producción de hidrógeno, cuando se requieren elevadas producciones (Manual, 2002; Hubner, P. 2002 y Laborde, M. 2004). La reformación por vapor se basa en el principio que plantea que los combustibles que contienen hidrógeno se descomponen en presencia de un catalizador para obtener una mezcla de hidrógeno, monóxido de carbono y otros subproductos que dependen de las condiciones de operación (Arteaga, L.E. 2004 y Hubner, P. 2002).

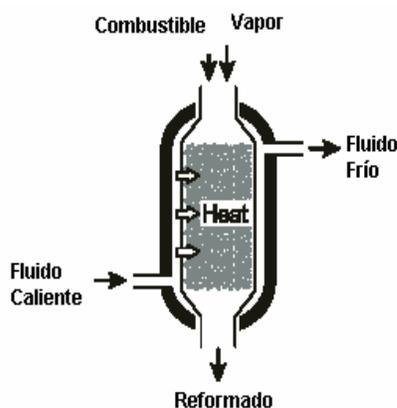
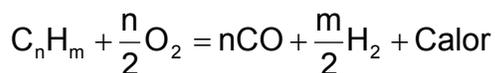
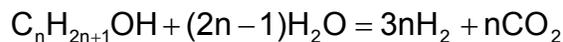


Figura 1.5. Reformador de vapor.

La ecuación general para la reacción a partir de un hidrocarburo genérico es la siguiente:



En este proceso solo hidrocarburos ligeros pueden ser completamente vaporizados sin dejar residuos carbonados y los productos contienen una porción de combustible que no reacciona y agua. El agua contribuye al rendimiento general de la reacción, pues se desprende el hidrógeno que contiene (Mariño, F. et al., 2004 y Manual, 2002). Cuando se opera sin la presencia de catalizador se trabaja a temperaturas de 450 – 925 ° C y a presiones de 290 a 500psig (Manual, 2002).

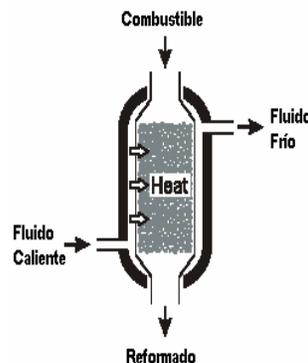
La eficiencia en el proceso puede alcanzar índices entre 70 - 80% y tecnologías más modernas podrían alcanzar el 90%. La eficiencia esta determinada en gran medida por las condiciones de operación, la efectividad de los procesos individuales y la capacidad del sistema para cogenerar (Laborde, M. 2004).

En el caso del trabajo con celdas combustibles de óxido sólido se puede eliminar las etapas de purificación (*COPROX* y *WGSR*) puesto que los componentes de este tipo de celdas son tolerantes al monóxido de carbono y pueden soportar en su interior las reacciones de reformación (Hirschenhofer, J.H. et al., 2002).

Para la reformación de etanol se necesita controlar la formación de carbón que pudiera depositarse sobre el catalizador y la formación de subproductos tales como: acetaldehído y dietil éster (Mariño, F. et al., 2004).

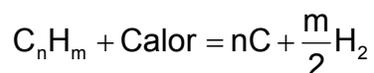
### **1.11.3 Reformación por descomposición térmica.**

Los reformadores de descomposición térmica (crackeadores catalíticos) (Figura 1.6), utilizan el calor para descomponer los combustibles y rendir una corriente de Hidrógeno de elevada pureza (> 95%) y carbón sólido.



**Figura 1.6.** Reformador de Descomposición térmica.

La ecuación general para este proceso es la siguiente:



Los reformadores de descomposición térmica son muy compactos con una puesta en marcha rápida, pero presentan la menor eficiencia energética de todos los

sistemas de reformación (55-65 %). Esto se debe a que gran parte de la energía del combustible se mantiene en forma de carbón, no como compuestos de mayor degradación (CO, CO<sub>2</sub>). (Arteaga, L.E. 2004).

#### 1.11.4 Reformador autotérmico.

Los reformadores autotérmicos (Figura 1.7) son la combinación de la eficiencia de los reformadores de vapor y la compactación y capacidad de arranque de los reformadores de oxidación parcial, por la unión de ambos reactores en una sola unidad (Hubner, P. 2002).

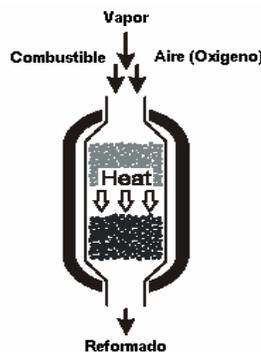
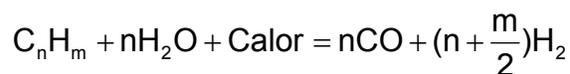


Figura 1.7. Reformador autotérmico.

El reactor es alimentado con una mezcla de hidrocarburos, agua y aire, la energía para la producción de Monóxido de Carbono e Hidrógeno es producida por la oxidación parcial de los hidrocarburos. El resultado global es una reacción ligeramente exotérmica (Hubner, P. 2002).



Requieren una integración energética minuciosa a fin de establecer un equilibrio entre ambas reacciones. El O<sub>2</sub> en la alimentación se puede utilizar para regular:

- La cantidad de agua requerida para convertir el CO a CO<sub>2</sub>.
- Rendimiento de H<sub>2</sub>.

- La concentración de H<sub>2</sub> en los productos.
- El calor de reacción.

### **1.12 Catálisis y catalizadores.**

En la catálisis se agrupa al conjunto de procedimientos y conocimientos que permiten que la velocidad con la que transcurre una reacción se incremente o reduzca. Bajo tal condición la catálisis es una rama de la cinética química.

La catálisis puede ser homogénea o heterogénea, de acuerdo al estado de agregación de los reactantes y del catalizador. La catálisis homogénea se pone de manifiesto cuando el reactante y el catalizador están en el mismo estado de agregación y la heterogénea es lo contrario cuando al menos uno no este en el mismo estado de agregación (Levenspiel, O. 1985).

Los catalizadores son sustancias que afectan la velocidad de numerosas reacciones sin formar parte de los reactivos originales ni de los productos finales de las mismas. Cuando el efecto producido conlleva un retardo en la velocidad de reacción se denominan negativos y cuando se incrementa dicha velocidad se denominan catalizadores positivos.

Aunque un catalizador puede hacer variar la velocidad de las reacciones en miles o millones de veces, en muchas ocasiones el principal objetivo es el de aprovechar una propiedad básica de los mismos como lo es su selectividad. Esta es la característica que tienen de modificar solamente la velocidad de ciertas reacciones sin afectar las demás, lo que conlleva a obtener la distribución deseada de los productos a partir de una alimentación determinada (Viera, R. 1991).

#### **1.12.1 Catalizadores empleados en la reformación por vapor.**

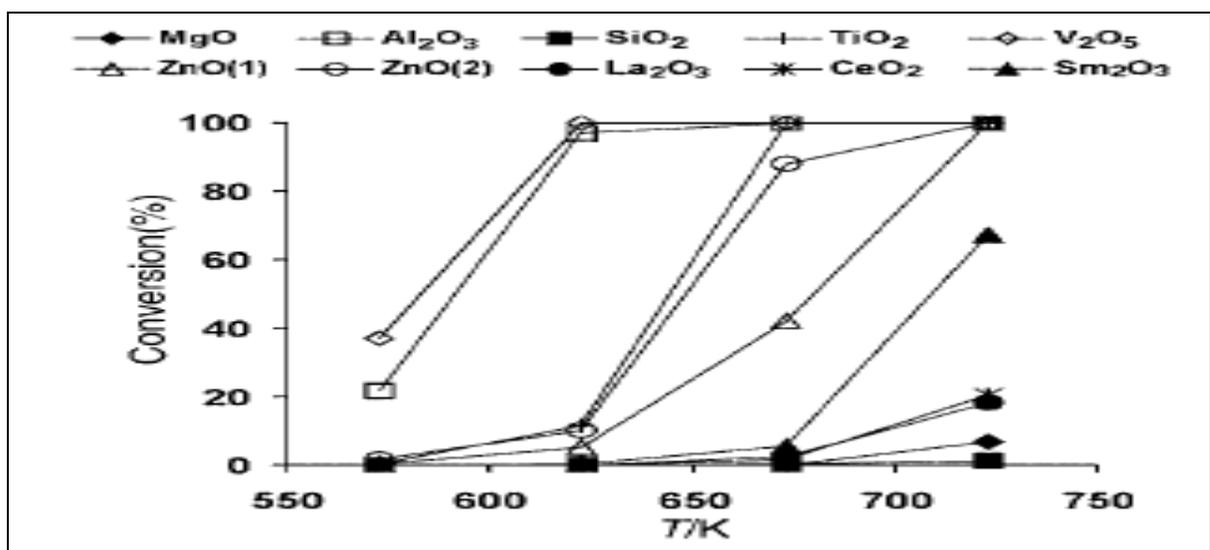
Para el desarrollo de la reformación con vapor del Bioetanol es imprescindible la utilización de catalizadores (Fateev, R. et al, 2003), debido a que sin la presencia de los mismos se requieren temperaturas muy elevadas (750 -1000 °C), para poder llevar a cabo la ruptura y formación de enlaces.

La selección del catalizador para la operación se vincula directamente con el carácter ácido-base y/o redox de los elementos que conforman la formulación, y esta restringido por los niveles de selectividad, rendimiento y conversión requeridos (Fierro, V. et al, 2002 y Rampe, T. et al, 2000).

Los metales de transición (Cu, Ni, Co, Rh, Pt, Fe), soportados sobre óxidos simples (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZnO, MgO, SiO<sub>2</sub>), son ampliamente utilizados como catalizadores en la reformación por vapor del bioetanol (Navarro, M.C. et al, 2003).

El empleo de formulaciones de (Cu, Ni, Co, Zn) (Mariño, F. et al, 2004) y sus combinaciones binarias, soportadas sobre diferentes bases, ofrecen resultados favorables para la operación, en cuanto a conversión, selectividad y rendimiento a H<sub>2</sub>. Según Comas, J. et al, (2004) está definido, que el mecanismo mediante el cual ocurre la reformación está formado por varias reacciones en serie – paralelo, y la ocurrencia de una u otra reacción se rige por las condiciones termodinámicas en las cuales se lleve a cabo el proceso.

En la Figura 1.8, LLorca, J. et al, (2001) analiza el comportamiento de la conversión para diferentes soportes de óxidos metálicos, demostrándose que se obtienen mayores conversiones de etanol con los V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> y Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, para los cuales se llega el 100 % de conversión a temperaturas por encima de los 620 ° K.

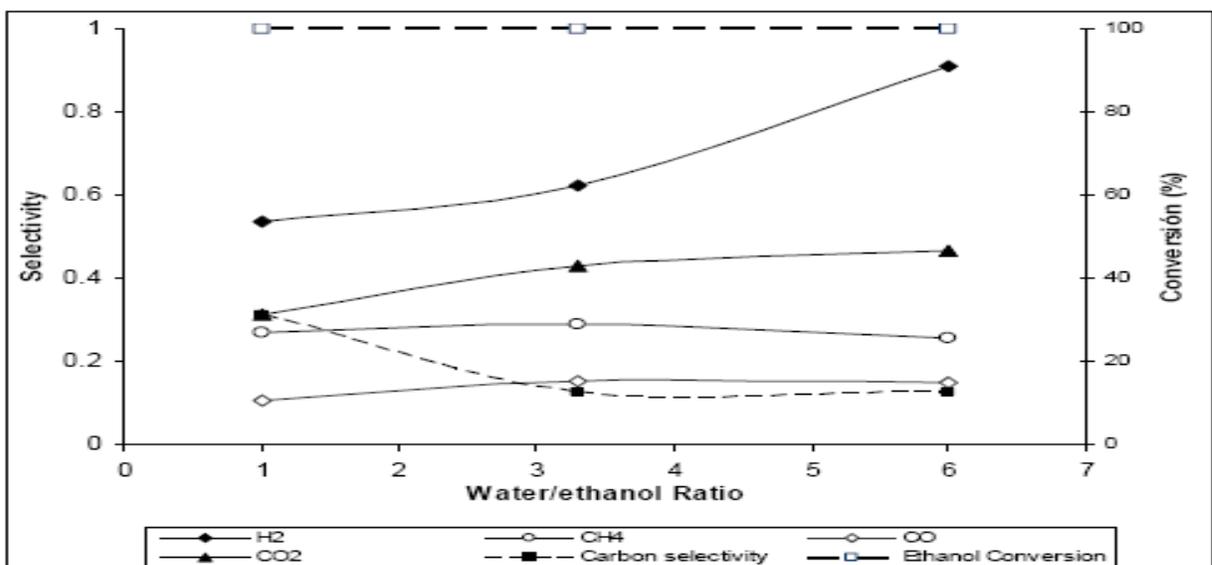


**Figura 1.8.** Conversión de etanol en función de la temperatura para diferentes óxidos.

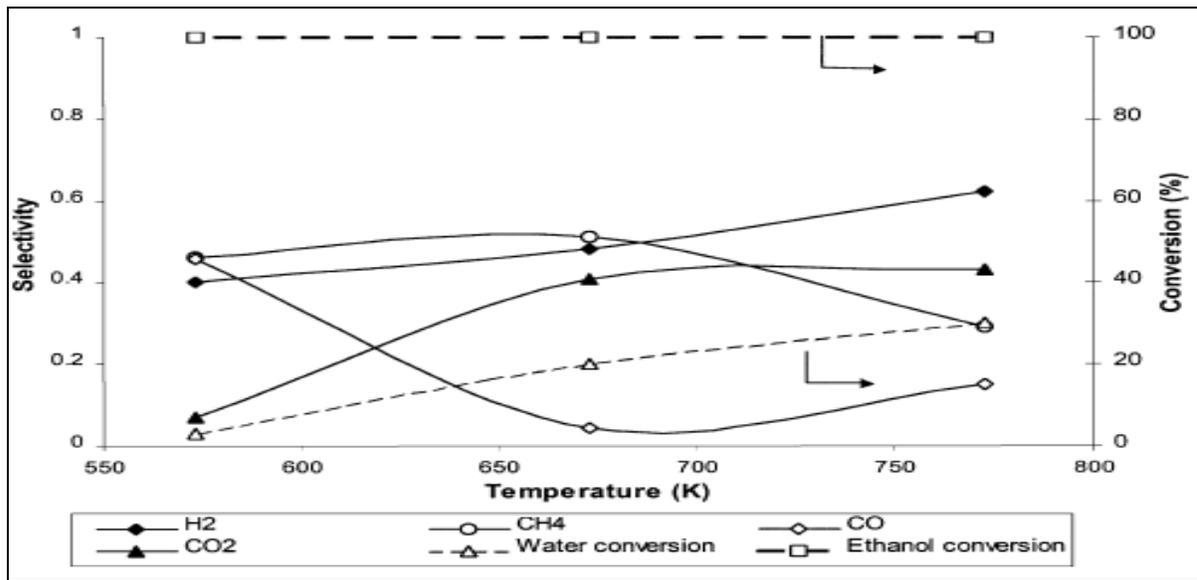
Debido a la fácil accesibilidad en el mercado se analizan los catalizadores de Cu y/o Ni sobre Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Sin embargo, en estudios realizados se demuestra que sobre el Ni ocurre la deshidrogenación y las reacciones de descomposición, mientras que sobre Cu ocurre la deshidrogenación, pero no la descomposición (Rivera, O. M. et al., 2005).

En un estudio realizado por Therdtianwong, et al., (2001) utilizando un catalizador de Ni sobre alúmina, se demostró que en el rango de 400 a 650 ° C y presión atmosférica, la selectividad por el Hidrógeno aumentaba al incrementarse la temperatura y que por encima de 650 ° C ocurre un significativo cracking térmico.

Comas, J. et al., (2004) empleando un catalizador semejante (Ni/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) para la reformación de etanol, analizan la influencia de la relación entre reactantes (agua/etanol) y comprueban que el etanol es convertido totalmente en todas las Rae y que la selectividad por el Hidrógeno aumenta a medida que se incrementa dicha relación (Figura 1.9). También se aprecia cómo la selectividad por el carbono disminuye hasta Rae = 3.3 y luego permanece prácticamente constante para Rae > 3.3. Además dichos autores analizan el efecto de la temperatura en un amplio rango de valores (Figura 1.10), quedando demostrado su efecto positivo en cuanto a la selectividad de hidrógeno.



**Figura 1.9.** Comportamiento de la selectividad y de la conversión con la Rae.



**Figura 1.10.** Comportamiento de la selectividad y de la conversión con la Temperatura.

En fin, el catalizador idóneo para el proceso de reformación es el Ni/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> por sus propiedades catalíticas, como son: selectividad, rendimiento a hidrógeno, rango de temperatura de trabajo y que nuestro país dispone de las materias primas necesarias para su posible elaboración.

### 1.13 Reactores y equipos utilizados en procesos reformativos.

Un reactor químico es un equipo en el cual la transferencia de calor y masa, la difusividad y la fricción son fenómenos que marchan a la par de la reacción y deben ser controlables y estar de acuerdo con los resultados que se persiguen. Por lo que en el proceso de diseño de reactores tenemos que ser cuidadosos en la identificación del tipo de reactor y en la caracterización fenomenológica del mismo.

#### 1.13.1 Tipos de Reactores químicos.

Existen diversos criterios para clasificar los reactores químicos (Viera, R. 1991), como son:

- Según el número de fases.

Los reactores se clasifican en homogéneos y heterogéneos. Los homogéneos es donde el sistema reaccionante (los reactivos, los productos y el catalizador si lo

hay) se encuentran en todo momento en una misma fase. Los reactores heterogéneos es donde no se cumple la condición expuesta anteriormente para los reactores homogéneos, es decir donde al menos un compuesto este en otra fase.

- Según la forma de operación.

Según esta clasificación los reactores pueden ser:

#### 1. Discontinuos.

Estos son generalmente tanques agitados y una vez cargados permanecen sin recibir ni descargar materiales hasta que la reacción alcanza un grado de conversión determinado. Son utilizados en producciones a pequeña escala, cuando los tiempos de residencia son grandes o en reacciones donde se requiere elevada selectividad.

#### 2. Continuos.

Estos reactores trabajan con alimentación y extracción permanentes. Los mismos pueden tener forma de tanque, estructura tubular o de torres. Se aplican en procesos a gran escala con el propósito de reducir los costos de operación y facilitar el control en la calidad del producto.

##### a) Tubulares.

La composición del sistema reaccionante varía en forma progresiva desde la entrada hasta la salida. Se caracterizan por un gradiente de concentración constante en la dirección del flujo que se aproxima al flujo en pistón. Están conformados generalmente por una serie de tubos en paralelo.

##### b) Continuos con agitación.

La composición dentro de este tipo de reactor es prácticamente la misma en todos los puntos. Estos equipos son utilizados fundamentalmente en serie.

#### 3. Semicontinuos.

En estos reactores la alimentación se hace diferenciada, es decir algunos de los reactantes son dosificados sobre los otros que conforman la carga inicial. Este tipo

de equipo se utiliza cuando los efectos térmicos de la reacción son importantes. El contacto entre la corriente de reaccionantes y el catalizador (para cada uno de estos reactores), puede efectuarse de diferentes maneras y cada una ofrece ventajas y desventajas específicas. En el presente proyecto solo se analizan las características de los reactores de lecho fijo debido a que estos son los equipos típicos utilizados en la obtención de hidrógeno para aplicaciones de celdas combustibles y para ellos se han encontrado resultados relevantes.

- Según el carácter térmico de la operación.

Los reactores químicos según este criterio pueden ser:

1. Isotérmicos.
2. Adiabáticos.
3. No isotérmicos no adiabáticos.

### **1.13.2 Reactores utilizados en sistemas gas - sólido. (Viera, R. 1991)**

#### **➤ Reactores de cama móvil.**

Estos reactores son aquellos en que el relleno sólido se mueve como un todo en sentido vertical descendiente, pudiendo ascender nuevamente por un dispositivo exterior.

Se utilizan fundamentalmente para:

- Donde sea necesario un alto intercambio calórico.
- Para reacciones donde el catalizador se ensucia fácilmente pero puede regenerarse de modo continuo.

#### **➤ Reactores de cama fluidizada.**

Son aquellos en que el relleno se mantiene fluidizado por la mezcla gaseosa reaccionante que entra por la parte inferior del equipo.

Se utilizan fundamentalmente para:

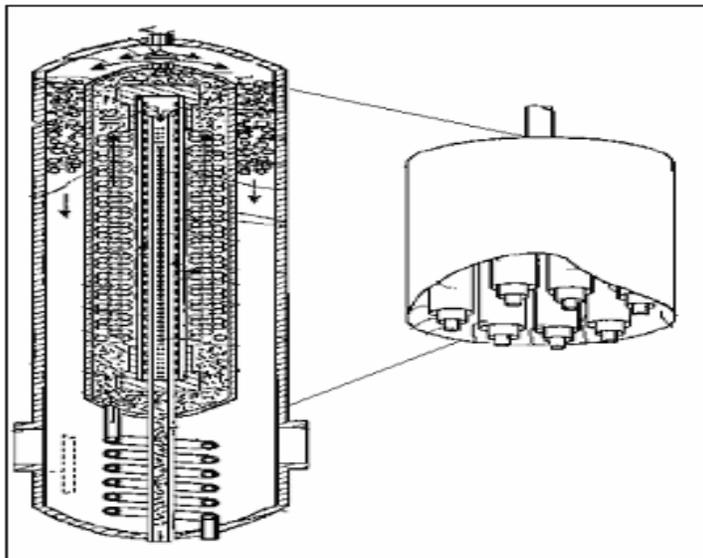
- Cuando el ciclo de regeneración es muy alto.

- Cuando el catalizador es muy fino.
- Cuando se requiere un control de temperatura muy riguroso.
- **Reactor Adiabático de relleno por etapas:** Estos reactores cuando poseen un adecuado flujo de gas e intercambio de calor, suelen ser sistemas versátiles y con capacidad de aproximarse a cualquier progresión de temperatura deseada.
- **Lechos de relleno por etapas con enfriamiento intermedio:** Según el número de etapas más se acercará a la progresión óptima de temperatura, para cualquier número de etapas la condición óptima de operación es la que sea capaz de minimizar las necesidades de catalizador.
- **Lechos de Relleno por Etapas con recirculación:** Este en general es un sistema flexible con posibilidades de aproximar su comportamiento a un reactor de mezcla completa y como tal es capaz de evitar las regiones de baja velocidad. Presenta como facilidad adicional que se pueden situar cambiadores de calor entre las etapas, lo que permite llegar a un balance energético adecuado en la operación.
- **Reactores de cama fija.**

Están constituidos por una masa catalítica de pequeñas partículas sólidas a través de la cual circula la mezcla gaseosa reaccionante. Fundamentalmente estos reactores se emplean en reacciones donde se requieren grandes áreas de transferencia de calor, en procesos de cracking térmico en la industria del petróleo, en la etapa de reformado en la producción de amoníaco, etc. La configuración del reactor llamado cama fija en muchas ocasiones está definida por los requerimientos de la reacción que tomará lugar, de aquí que surjan los llamados reactores multitubos, que son geoméricamente semejantes a los intercambiadores de tubo y coraza. El costo de operación y mantenimiento de estos reactores es menor que para los diseños de cama fluidizada. En cuanto a su diseño y operación es primordial garantizar un contacto eficiente entre las fases de manera que se reduzcan al mínimo los efectos limitantes de la transferencia de masa dejando solamente como paso retardador la cinética intrínseca propiamente dicha.

Reactores de Cama Fija en la reformación del Bioetanol:

Los reactores formados por una bancada de tubos a través de los cuales el flujo se arregla de forma que el contacto entre las camas catalíticas y la mezcla gaseosa sea máximo; a fin de obtener un óptimo rendimiento e intercambio de energía entre las mezclas reaccionantes han sido empleados extensivamente en la reformación de bioetanol (Verykios, X. 1999-2002) (Figura 1.11).



**Figura 1.11** Reformador de vapor con purificación interna. Tomado de (Pledjer, W. 1999).

#### **1.14 Simulación de procesos.**

La simulación de procesos químicos está vinculada al cálculo de los balances de masa y energía de un sistema químico - productivo, cuya estructura y los datos preliminares de los equipos son conocidos. Este procedimiento permite monitorear de forma interactiva situaciones problemáticas, en las cuales se conozcan datos de entrada, permitiendo al ingeniero apropiarse de una idea general del proceso tal que le facilite tomar decisiones (evaluación de alternativas). La simulación robusta se vincula directamente con los principios de las operaciones unitarias y en muchas ocasiones requiere del empleo de varios programas de forma acoplada, con el objetivo de solucionar un problema determinado. Las herramientas de simulación pueden clasificarse de acuerdo al tipo de procesos, si involucra el tiempo

(estacionario o dinámico), si maneja variables estocásticas o determinísticas, variables cuantitativas o cualitativas (Scenna, N.J. et al., 2002).

#### **1.14.1 Hysys como simulador de procesos.**

Dentro de los paquetes de software comerciales de reciente desarrollo e implantación en la industria química se encuentra el HYSYS. El Hysys es un simulador muy potente, por lo que constituye una herramienta fundamental para el Ingeniero Químico, con el cual se puede realizar la simulación estacionaria y dinámica de un proceso químico complejo.

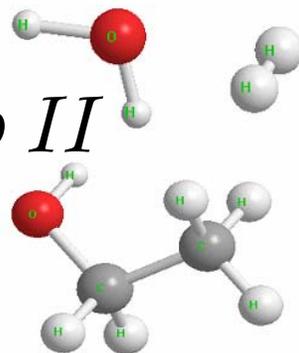
Con el paquete HYSYS, los ingenieros solo necesitan desarrollar un modelo simple de procesos a partir de un diseño conceptual, para mejorar los diseños, optimizar la producción y agilizar la toma de decisiones. Permite la integración de operaciones unitarias, reacciones y paquetes de propiedades y la interacción de otras aplicaciones para crear un programa híbrido. El simulador es útil para maximizar los beneficios de nuevos diseños y mejorar las operaciones existentes, asegurando que los equipos estén trabajando sobre especificaciones.

Este simulador fue diseñado por AEA Technology Engineering Software Products, que es un distribuidor de software de ingeniería y soluciones al sector de la Industria Química, cuyo representante es Hyprotech.

### **Conclusiones Parciales**

1. El hidrógeno es un portador energético con grandes potencialidades para la generación a cualquier escala por medio de celdas combustibles.
2. La reformación húmeda del Bioetanol es el proceso reformativo que mejores resultados brinda cuando se compara con las demás variantes.
3. El empleo de catalizadores de Ni, Cu soportados en Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> brindan los mejores resultados cuando se trabaja en la reformación húmeda de bioetanol.
4. Las variables que mayor incidencia tienen en la reformación de Bioetanol son: La relación entre reactantes [R<sub>AE</sub>] y la temperatura [T].
5. El empleo de reactores de cama fija es la variante técnica de mayor potencial para desarrollar el proceso, siempre y cuando se cuente con un modelo cinético de calidad.
6. El desarrollo del proceso debe concebir el empleo de métodos de modelación y simulación que permitan evaluar el sistema de forma integral.

# Capítulo II



## **2.1 Descripción del proceso para obtener Gas de Síntesis a partir del bioetanol.**

El proceso tecnológico propuesto para la producción de gas de síntesis a partir de Bioetanol se basa fundamentalmente en la reformación con vapor. El esquema productivo se puede dividir en sub-secciones Figura 1 (Anexo 2.1), la primera de las cuales tiene como equipos principales un vaporizador y un calentador. La mezcla alimentada al vaporizador está en condiciones normales (T, P) y proviene de un tanque de preparación de solución. La misma se lleva hasta las condiciones de saturación (Temperatura de rocío) utilizando como medio de intercambio vapor tecnológico. Posteriormente, el calentador eleva la temperatura del fluido (vapor) hasta la temperatura de reacción (500 °C), utilizando los gases provenientes de un reactor de combustión de  $CH_4$ . En una segunda sección ocurre la reacción química propiamente dicha donde se genera el gas de síntesis por medio de un reformador que no es más que un reactor de cama fija multitubo cargado con un catalizador de  $Ni/Al_2O_3$ .

El gas de síntesis ( $CH_4$ ,  $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ) producido en la Sección 2, debe ser purificado para su posterior utilización en la generación de electricidad por medio de celdas combustibles, proceso este que es flexible en función del tipo de celda a utilizar y en las condiciones de implementación. Con este objetivo se reconoce la utilización de disímiles procedimientos basados en sistemas con reacción química (WGSR-COPROX), sistemas de separación por membranas (Pd) y sistemas de adsorción preferencial PSA.

## **2.2 Cálculo de las corrientes involucradas en el proceso.**

### **2.2.1 Cálculo del hidrógeno necesario para la celda.**

La cantidad de hidrógeno a producir es estimada para una planta generadora con una capacidad de 200 KW de energía. Dicha necesidad es calculada a partir de las correlaciones de circuitos de corriente continua y las leyes de Faraday aplicadas al sistema de celdas de combustible, suponiendo un voltaje de operación de celda de 0.6V (Hirschenhofe, J.H. et al, 2002). Siendo la eficiencia de la celda:

$$\eta_{\text{celda}} = \frac{0.83 V_c}{V_i} = \frac{0.83 V_c}{1.229} = 0.675 V_c = 40.5 \% \quad (2.1)$$

Para un arreglo en paralelo (voltaje de pila igual a voltaje de celda y la corriente total de la pila igual a n veces la corriente de celda):

$$I = \frac{P_c}{V} = \frac{200000W}{0.6V} = 3.3 \cdot 10^5 \text{ A} \quad (2.2)$$

Por tanto, con esta información, las relaciones de Faraday y asumiendo un coeficiente de utilización del combustible de 0.85, se tiene que el hidrógeno teórico necesario asciende a:

$$F_{H_2} = 3.3 \cdot 10^5 \text{ A} \left( \frac{1C/s}{1A} \right) \left( \frac{1\text{mole}^-}{96487C} \right) \left( \frac{1\text{molH}_2}{2\text{mole}^-} \right) \left( \frac{3600s}{1h} \right) \left( \frac{1}{\text{cuc}} \right) = 7773.07 \frac{\text{molH}_2}{h} \quad (2.3)$$

$$F_{H_2} = 2.159 \frac{\text{mol H}_2}{s}$$

Partiendo de aquí se elabora una estrategia para el diseño del sistema general de reacción capaz de producir la cantidad de hidrógeno preestablecida, utilizando para ello los principios del diseño de reactores químicos en conjunto con los criterios de rendimiento y selectividad expuestos por Fierro et al. (2002).

$$Y_{\text{product}} = \frac{F_{\text{product}}}{F_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}}^{\text{IN}}} \quad (2.4)$$

$$S_H = \frac{F_{H_2}}{[3(F_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}}^{\text{IN}} + F_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}}) + (F_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{IN}} + F_{\text{H}_2\text{O}})]} \quad (2.5)$$

### **2.2.2 Cálculo de la mezcla de alimentación al Vaporizador.**

Para el cálculo de la mezcla bioetanol – agua, alimentada al Vaporizador, se utiliza la Ecuación 2.4. Suponiendo un rendimiento a hidrógeno de 2, con una relación agua - etanol de 5 y con las propiedades de las sustancias a condiciones ambientales (P = 1atm y T = 25 °C) se determinan los flujos molares de cada corriente de alimentación.

$$F_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}}^{\text{IN}} = \frac{F_{\text{H}_2}}{Y_{\text{H}_2}} = \frac{2.159}{2} = 1.0795 \frac{\text{mol}_{\text{ETANOL}}}{\text{s}}$$

$$F_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{IN}} = F_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}}^{\text{IN}} \cdot \text{Rae} = 1.0795 \cdot 5 = 5.3975 \frac{\text{mol}_{\text{AGUA}}}{\text{s}}$$

Con las densidades molares de cada sustancia se pueden calcular los flujos volumétricos para cada corriente:

$$\rho_{\text{molar}}(25\text{ }^\circ\text{C}(\text{Etanol})) = 17.10 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

$$\rho_{\text{molar}}(25\text{ }^\circ\text{C}(\text{Agua})) = 55.92 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

Por tanto:

$$Q_{\text{E}} = 0.227 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \quad Q_{\text{A}} = 0.347 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$$

### **2.3 Cálculo del Tanque Agitado.**

El tanque para la preparación de la mezcla de bioetanol – agua será de cuerpo cilíndrico. Por lo que los parámetros constructivos pueden determinarse de la siguiente forma:

$$V_{\text{L}} = Q_{\text{ae}} \cdot t_{\text{R}} \quad (2.6)$$

Con el volumen del tanque se calcula la altura y diámetro del equipo según:

$$V_{\text{T}} = \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot (H + 0.2 \cdot H) \quad (2.7)$$

$$V_{\text{L}} = \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot H \quad (2.8)$$

Se supone que  $H = D$ , por tanto:

$$V_{\text{L}} = \frac{\pi \cdot D^3}{4} \quad (2.9)$$

$$D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{\text{L}}}{\pi}} \quad (2.10)$$

El diseño del Tanque de Preparación se realizó con la ayuda del Software Profesional Excel, en el cual se programaron todas las ecuaciones utilizadas.

### 2.3.1 Selección del Agitador.

Para el cálculo del consumo de potencia y la selección del agitador se realizó una metodología de cálculo, expuesta en el diagrama de la Figura 1 (Anexo 2.3), donde se utilizan los principios expuestos por Rosabal, J.M. (1998).

Para la agitación se selecciona un agitador del tipo propela marina (hélice), ya que trabajan a altas velocidades de rotación, crean una alta turbulencia en la zona cercana a la propela, son baratos y consumen poca energía. Además son muy adecuados en la agitación de sistemas poco viscosos (<4000cP), no necesitan del uso de reductores pues pueden ser directamente conectados al eje del motor. Las características generales del mismo fueron obtenidas de la Tabla 2.1 del Rosabal, J.M. (1998).

### 2.3.2 Resultados del Tanque Agitado.

En la Tabla 2.1 se muestran los resultados del diseño del tanque, las principales dimensiones del agitador, así como del motor a instalar.

**Tabla 2.1** Principales parámetros del tanque de preparación, agitador y motor.

<b>Especificaciones del tanque de preparación</b>		
<b>Parámetro</b>	<b>Resultado</b>	<b>U/M</b>
Diámetro (D)	0.89	m
Altura (h)	1.07	m
<b>Especificaciones del agitador</b>		
Diámetro (d)	0.19	m
Número de paletas	3	---
Angulo de inclinación	40	°
Número de revoluciones (n)	700	r.p.m
Potencia de instalación (N)	2.5	kW
<b>Especificaciones del motor</b>		
Tipo	Trifásico 220/240 y 60Hz	
Potencia nominal	2.6	kW

Velocidad sincrónica	1200	r.p.m
	1800	
	3600	

## **2.4 Metodología para el Diseño del Vaporizador y Calentador.**

El diseño del vaporizador y calentador se basa en el método convencional de cálculo propuesto por Kern, D. (1999) para los intercambiadores de calor de tubos y concha (Anexo 2.4 Figura 1 y Figura 2 respectivamente).

Es importante destacar que en esta metodología se parte de suponer el número de tubos y por tanto se emplea el método de tanteo y error.

Para el cálculo del coeficiente pelicular interior en la vaporización se utiliza la Ec. 5-102 propuesta por Perry, R. et al., (1999) que incluye un coeficiente pelicular de ebullición.

### **2.4.1 Cálculo de la caída de presión.**

Determinar la caída de presión en un equipo de intercambio de calor es un paso fundamental en la evaluación de dichos aparatos y a su vez tiene incidencia directa sobre el comportamiento de las pérdidas de carga a través de un flujo tecnológico determinado. Es importante reconocer que existen normas establecidas dentro de las cuales debe oscilar la caída de presión de estos equipos. En referencia a esto Kern, D. (1999) destaca que la caída de presión en el interior de los tubos de un intercambiador de calor no deberá exceder las 0.068 atm (10 psi), por lo que al diseñar los equipos de intercambio de calor que se consideran en el presente proyecto se fue cuidadoso en este sentido, pues en la etapa de calentamiento la diferencia de temperatura a lograr es considerable (404.64 °C), por lo que el empleo de grandes flujos de gases como agente calefactor podrían acarrear pérdidas de carga considerables. Por otra parte las ecuaciones para la evaluación de las pérdidas de carga en sistemas de intercambio de calor son diversas y su exactitud está en estrecha correspondencia con los métodos de cálculo empleados en la determinación de las propiedades de los fluidos manejados y en la resolución de la ecuación en si misma. Este trabajo emplea una ecuación novedosa en la determinación de la caída de presión la cual es referenciada en el texto Peters, M.

et al., (2003). Es importante destacar que en el caso del vaporizador la expresión empleada es similar pero considera el cambio longitudinal de las propiedades del fluido y a su vez la evaluación de los coeficientes peliculares está en concordancia con la teoría desarrollada en este sentido por Perry, R. et al., (1999).

#### **2.4.1.1 Caída de presión en los tubos.**

Para la caída de presión en los tubos se utiliza la Ecuación 2.11 propuesta por Peters, M. et al., (2003):

$$\Delta P_{\text{tubos}} = \frac{2\beta_i \cdot f_i \cdot G_i^2 \cdot L \cdot n_p}{\rho_m \cdot D_i \cdot \varphi_i} \quad (2.11)$$

$$\beta_i = 1 + \frac{0.51 \cdot k_i \cdot n_p \cdot \Delta T f_i \left( \frac{\mu_i}{\mu_w} \right)^{0.28}}{(T_i - T_{\text{out}}) \cdot P_i^{2/3}} \quad (2.12)$$

$$f_i = 0.079 \text{Re}^{-0.25} \quad \text{para } \text{Re} \leq 2100 \quad (2.13)$$

$$\varphi_i = 1.02 \left( \frac{\mu_i}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad \text{para } \text{Re} \leq 2100 \quad (2.14)$$

$$f_i = 0.046 \text{Re}^{-0.2} \quad \text{para } \text{Re} > 2100 \quad (2.15)$$

$$\varphi_i = 1.1 \left( \frac{\mu_i}{\mu_w} \right)^{0.25} \quad \text{para } \text{Re} > 2100 \quad (2.16)$$

#### **2.4.1.2 Caída de presión en la carcaza.**

Para el cálculo de la caída de presión en la carcaza se utiliza la Ecuación 2.17 propuesta por Kern, D. (1999).

$$\Delta P_{\text{carcaza}} = \frac{4 \cdot f \cdot G_s^2 \cdot D_s \cdot (N_B + 1)}{2 \cdot \rho_v \cdot D_e \cdot \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14}} \quad (2.17)$$

Donde:

$$G_s = \frac{W}{S_m} \quad (2.18)$$

$$S_m = \frac{D_s \cdot \text{Esp} \cdot L_B}{P_t} \quad (2.19)$$

Para calcular De (diámetro equivalente) hay que tener en cuenta el arreglo de los tubos:

Para arreglo triangular:

$$D_e = \frac{4(0.86P_t^2 - 0.25\pi \cdot D_0^2)}{\pi D_0} \quad (2.20)$$

Para arreglo cuadrado:

$$D_e = \frac{4(P_t^2 - 0.25\pi \cdot D_0^2)}{\pi D_0} \quad (2.21)$$

#### **2.4.2 Diseño y selección de la variante para el vaporizador y calentador.**

Para el diseño del vaporizador y calentador se efectúa un proceso de evaluación de alternativas en cuanto a los parámetros constructivos y operacionales para los equipos a través de la simulación (Tabla 2.2).

**Tabla 2.2.** Rango de estudio de los parámetros de diseño.

<b>Variable</b>	<b>Rango</b>	<b>Parámetros a Determinar</b>
D <sub>tub</sub> (plg)	0.75 – 1 – 1.5	$\Delta P_{\text{tubos}}$ , $\Delta P_{\text{carcaza}}$ , Nt
L (m)	1.5 – 3	$\Delta P_{\text{tubos}}$ , $\Delta P_{\text{carcaza}}$ , Nt
R <sub>ae</sub> (mol H <sub>2</sub> O/mol ETOH)	3 – 6	Vaporizador: Q <sub>v</sub> , W Calentador: Q <sub>c</sub> , m <sub>G</sub>

Los resultados más significativos de la evaluación de alternativas para el vaporizador y calentador se muestran en el Anexo 2.5 (Tabla 1 y 2 respectivamente).

En la Tabla 2.3, Figura 2.1 y Tabla 2.4, Figura 2.2 se destacan las características y parámetros de operación y diseño fundamentales para el vaporizador y calentador de la mezcla etanol-agua respectivamente. Es importante destacar que los resultados son los que se consideran más alentadores. En la Figura 2.1 y Figura 2.2 se muestra el comportamiento de la caída de presión en el interior de los equipos,

ya sea para la concha como en el interior de los tubos. Como se aprecia, tanto el diámetro de tubo como la longitud de estos, son dos factores proporcionales a las pérdidas de carga en el equipo, las cuales a su vez son consecuencia directa de otros parámetros que fueron tomados en consideración como son el número de deflectores ( $N_B$ ), la distancia entre los tubos en el interior de la concha ( $Pt$ ) y el arreglo de estos. Los cuales se toman en consideración en un programa computacional, donde las principales ecuaciones son integradas matemáticamente.

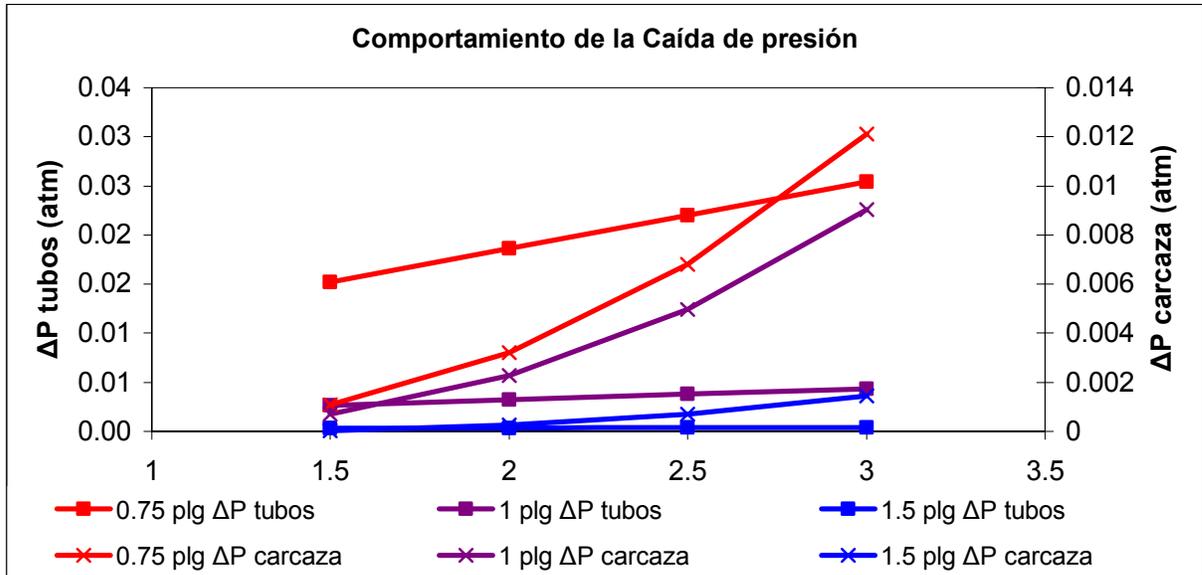
En la Figura 2.3 (a) y (b) se representa la relación entre la caída de presión de los tubos y el número de tubos con la longitud y el diámetro de estos en el vaporizador y calentador respectivamente. Como se observa el número de tubos es inversamente proporcional a la longitud y al diámetro.

**Tabla 2.3.** Parámetros de diseño fundamentales para un vaporizador de etanol-agua.

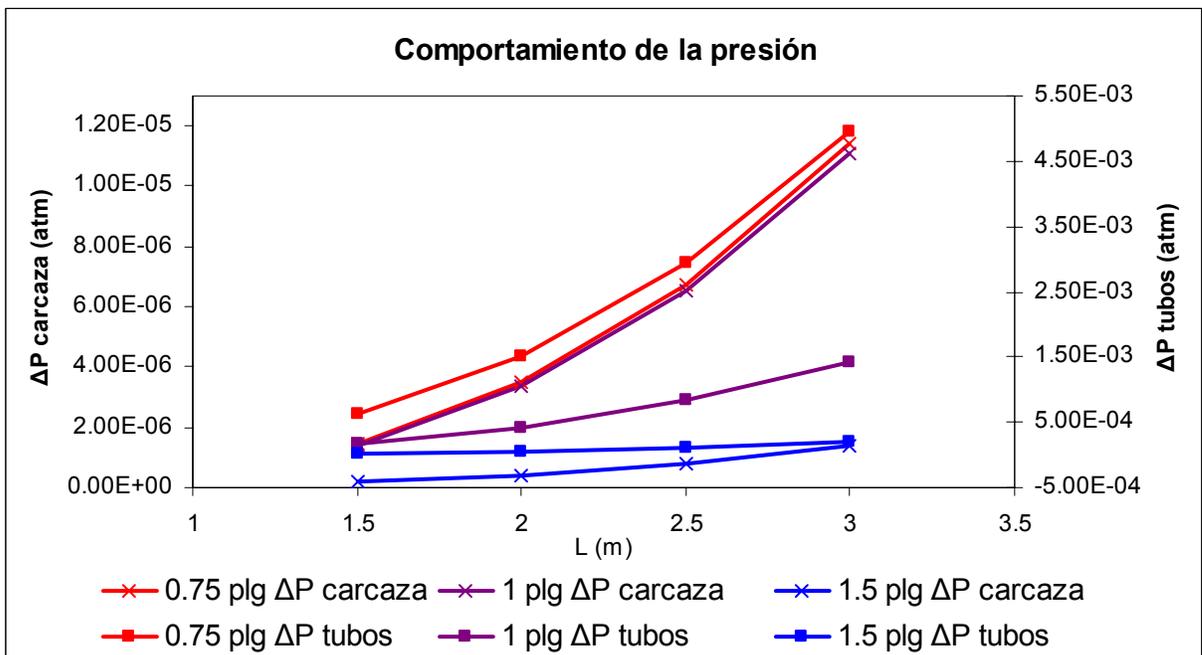
Dimensiones	Valor	Unid.
Longitud de los tubos	2	m
Diámetro interior de los tubos	0.02116	m
Diámetro exterior de los tubos	0.0254	m
Número de tubos	24	-
Área de transferencia de calor	3.72	m <sup>2</sup>
Coeficiente total de transferencia de calor	1685.39	W/m <sup>2</sup> °C
Longitud de la concha	2.19	m
Diámetro interior de la concha	0.19	m
Número de deflectores	11	-
Espaciado entre los tubos	0.0317	m
Arreglo	triangular	-
Paso	1.1875	plg
$\Delta P_{carcaza}$	$2.27 \cdot 10^{-3}$	atm
$\Delta P_{tubos}$	$3.22 \cdot 10^{-3}$	atm
Calor necesario	$1.125 \cdot 10^6$	kJ/h
Masa de vapor necesaria	561.36	Kg/h

**Tabla 2.4.** Parámetros de diseño fundamentales para un calentador de etanol-agua.

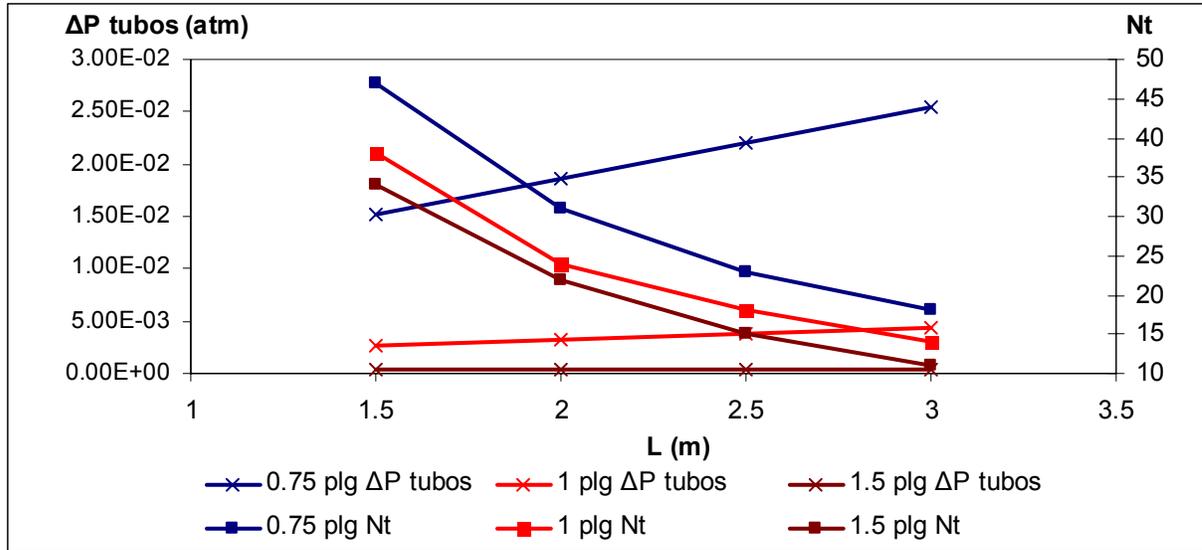
<b>Dimensiones</b>	<b>Valor</b>	<b>Unid.</b>
Longitud de los tubos	2	m
Diámetro interior de los tubos	0.02116	m
Diámetro exterior de los tubos	0.0254	m
Número de tubos	70	-
Área de transferencia de calor	11.03	m <sup>2</sup>
Coeficiente total de transferencia de calor	247.69	W/m <sup>2</sup> °C
Longitud de la concha	2.30	m
Diámetro interior de la concha	0.30	m
Número de deflectores	7	-
Espaciado entre los tubos	0.0317	m
Arreglo	triangular	-
Paso	1.1875	plg
$\Delta P_{\text{carcaza}}$	$3.38 \cdot 10^{-6}$	atm
$\Delta P_{\text{tubos}}$	$4.22 \cdot 10^{-4}$	atm
Calor necesario	$4.59 \cdot 10^5$	kJ/h
Masa de gas de combustión necesaria	566.41	Kg/h



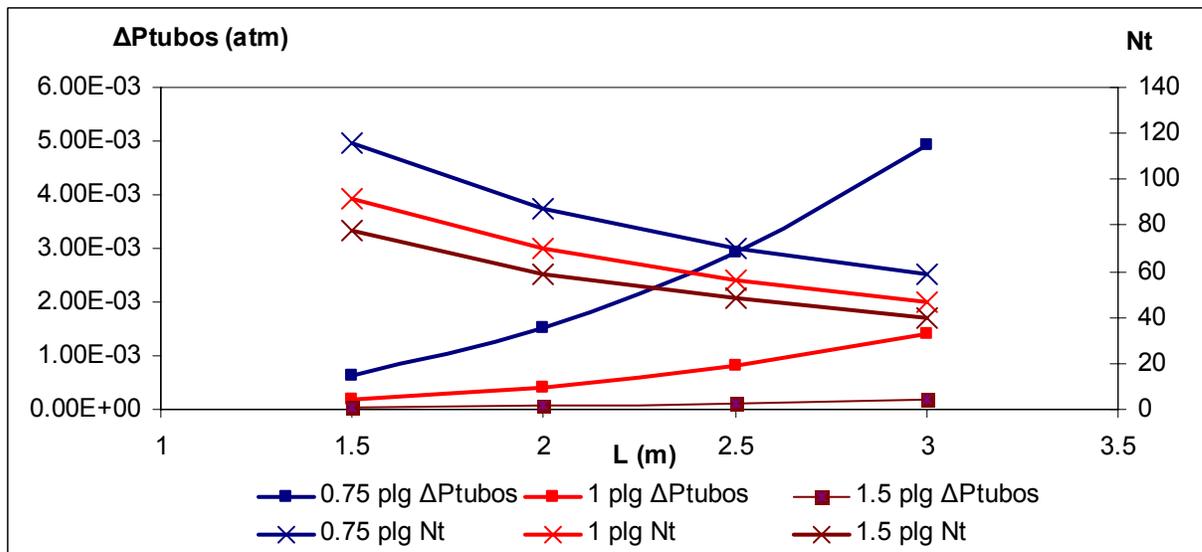
**Figura 2.1.** Comportamiento de la caída de presión en un vaporizador para mezcla etanol-agua.



**Figura 2.2.** Comportamiento de la caída de presión en un calentador para mezcla gaseosa etanol-agua.



**Figura 2.3 (a)** Comportamiento del número de tubos y de la caída de presión con la longitud en el vaporizador.



**Figura 2.3 (b)** Comportamiento del número de tubos y de la caída de presión con la longitud en el calentador.

En la Figura 2.4 se relaciona el calor necesario y la masa del medio calefactor para las operaciones de vaporización (a) y calentamiento (b) de la mezcla con la relación molar etanol – agua ( $R_{ae}$ ).

En la vaporización a medida que aumenta  $R_{ae}$ , aumenta las necesidades calóricas y por ende la cantidad de vapor tecnológico, pues cuando aumenta la cantidad de

agua en la mezcla aumenta el calor latente de cambio de fase y se necesita más calor para vaporizar la mezcla.

En el calentador el comportamiento es semejante al del vaporizador, y se debe a que cuando aumenta la  $R_{ae}$ , se incrementa la cantidad de mezcla a calentar y por ende se necesita mayor cantidad de gases de combustión caliente para obtener las condiciones deseadas (500 °C de la mezcla etanol – agua).

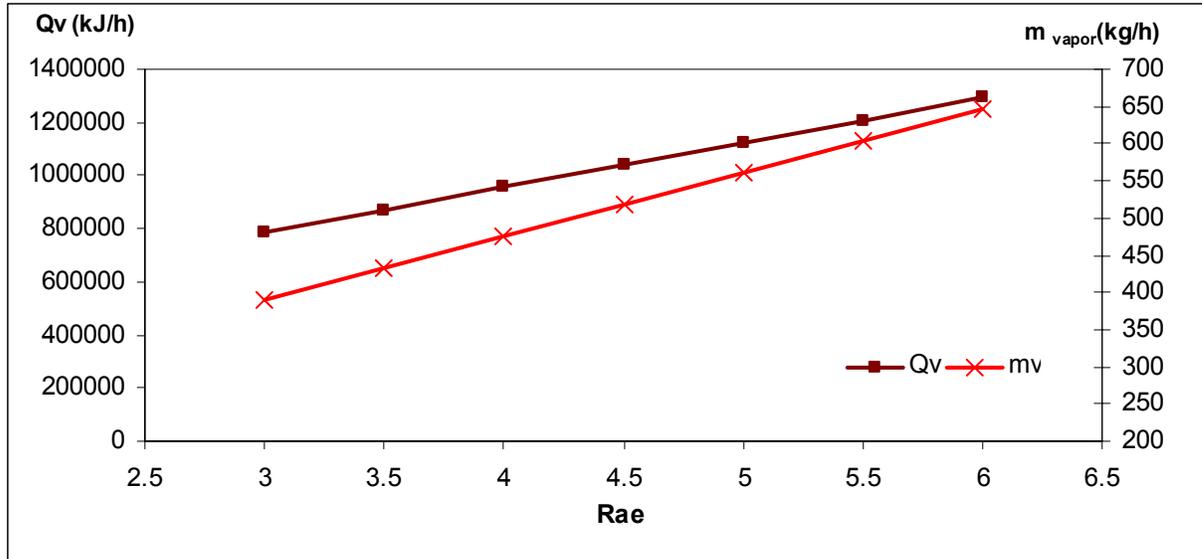


Figura 2.4 (a) Comportamiento del calor necesario y de la masa de vapor con la relación molar agua – etanol en el vaporizador.

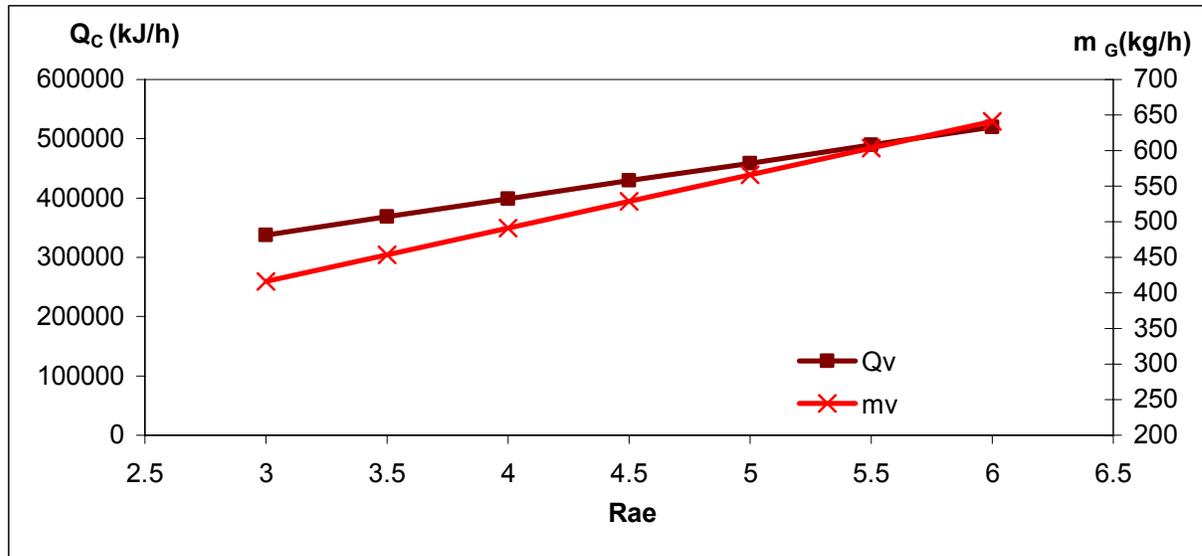


Figura 2.4 (b) Comportamiento del calor necesario y de la masa de vapor con la relación molar agua – etanol en el calentador.

## **2.5 Diseño y simulación del reformador.**

### **2.5.1 Esquema de reacción y modelo cinético.**

Aunque muchos artículos reportan el uso de formulaciones catalíticas a base níquel y el comportamiento de las mismas frente a diferentes condiciones operacionales (P, T, Flujo), existe muy poca información referente al patrón cinético general y al mecanismo de reacción por el cual se rige la reformación húmeda de bioetanol.

En este sentido Therdtianwong, A. et al., (2001), dedujo una ecuación cinética del tipo ley de potencia válida para 1atm y 400°C (Ecuación 2.22), la cual fue ajustada a partir de una data experimental obtenida con un catalizador comercial (Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), sin embargo el autor destaca sus limitaciones cuando se pretende emprender un proceso de diseño:

$$r_1 = k_{ap} \cdot pE^{2.5} pA^9 \quad (2.22)$$

$$k_{ap} = 280075$$

Recientemente, Akande, J.A. (2005) refiere el uso de un catalizador similar para la reformación de bioetanol crudo; en este caso la cinética es ajustada para dos modelos, uno según un mecanismo Eley-Rideal, siendo la etapa limitante la reacción superficial del Bioetanol (Ecuación 2.23) y otro basado en una ecuación tipo ley de potencia (Ecuación 2.24), sin embargo, ambas expresiones se deducen sobre el supuesto de que la reacción toma lugar como un paso simple ( $CH_3CH_2OH + 2H_2O = CO_2 + 6H_2$ ), lo que limita en gran medida los resultados en el diseño para los cuales no es posible conocer con exactitud la composición del reformado:

$$r_2 = \frac{2.08 \cdot 10^3 e^{(-4430/RT)} \cdot N_A}{[1 + 3.83 \cdot 10^7 N_A]^2} \quad (2.23)$$

$$r_3 = 3.12 \cdot 10^{-2} e^{(-7560/RT)} \cdot N_A^{0.43} \quad (2.24)$$

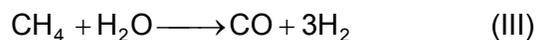
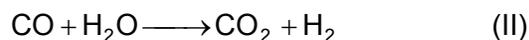
Aunque las expresiones anteriores tienen alto nivel práctico su uso para el desarrollo de modelos robustos que permitan el análisis del proceso de forma exhaustiva está limitado, por lo que en el presente trabajo se propone un sistema de

ecuaciones capaz de describir matemáticamente el mecanismo cinético por el cual ocurre la reformación, sin perder de vista el carácter práctico de dicho modelo.

### **5.2.1.1 Esquema de reacción.**

El esquema de reacción por el cual se rige la reformación de bioetanol no es rígido, por lo que no debe considerarse un paso simple para la reacción, sino que es fuertemente dependiente de las condiciones de trabajo (P, T) y de las características químico-físicas del catalizador empleado (propiedades redox y características superficiales). De aquí que se hayan reportado hasta la fecha varios esquemas donde figuran fundamentalmente las reacciones de descomposición y gasificación del bioetanol ( $T \geq 300^{\circ}\text{C}$ ) sobre catalizadores de Níquel.

Empleando datos reportados en la bibliografía especializada, en condiciones experimentales específicas, se propone el mecanismo de reacción conformado por seis reacciones que ocurren en serie y/o paralelo.



Las reacciones de WGS (II), reformación completa del metano (IV) y la formación y consumo de carbón (V y VI) se adicionaron al patrón propuesto por Comas, J. et al., (2004) cerrando de esta forma el ajuste en relación a los resultados experimentales. La reformación completa del bioetanol (produciendo CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>) no se toma en cuenta como una reacción independiente sino que está implícita como la suma de las reacciones (I, II y IV).

### **2.5.1.2 Modelo cinético para el Reformado Húmedo de Bioetanol.**

El modelo propuesto toma como aproximación inicial que la etapa controlante es la reacción en la superficie entre las especies adsorbidas, asumiendo una cinética intrínseca y despreciando la influencia de las limitaciones del transporte interno y

externo, lo cual fue obtenido experimentalmente para diámetros de partículas menores que 0.45mm y un flujo total de gas de 150 ml/min. Las expresiones cinéticas propuestas se dedujeron por medio de los principios de adsorción con reacción química, estas permiten explorar la influencia de la reacción superficial y la adsorción de reactantes y productos sobre el proceso en general.

Condiciones:

Las variables utilizadas fueron:

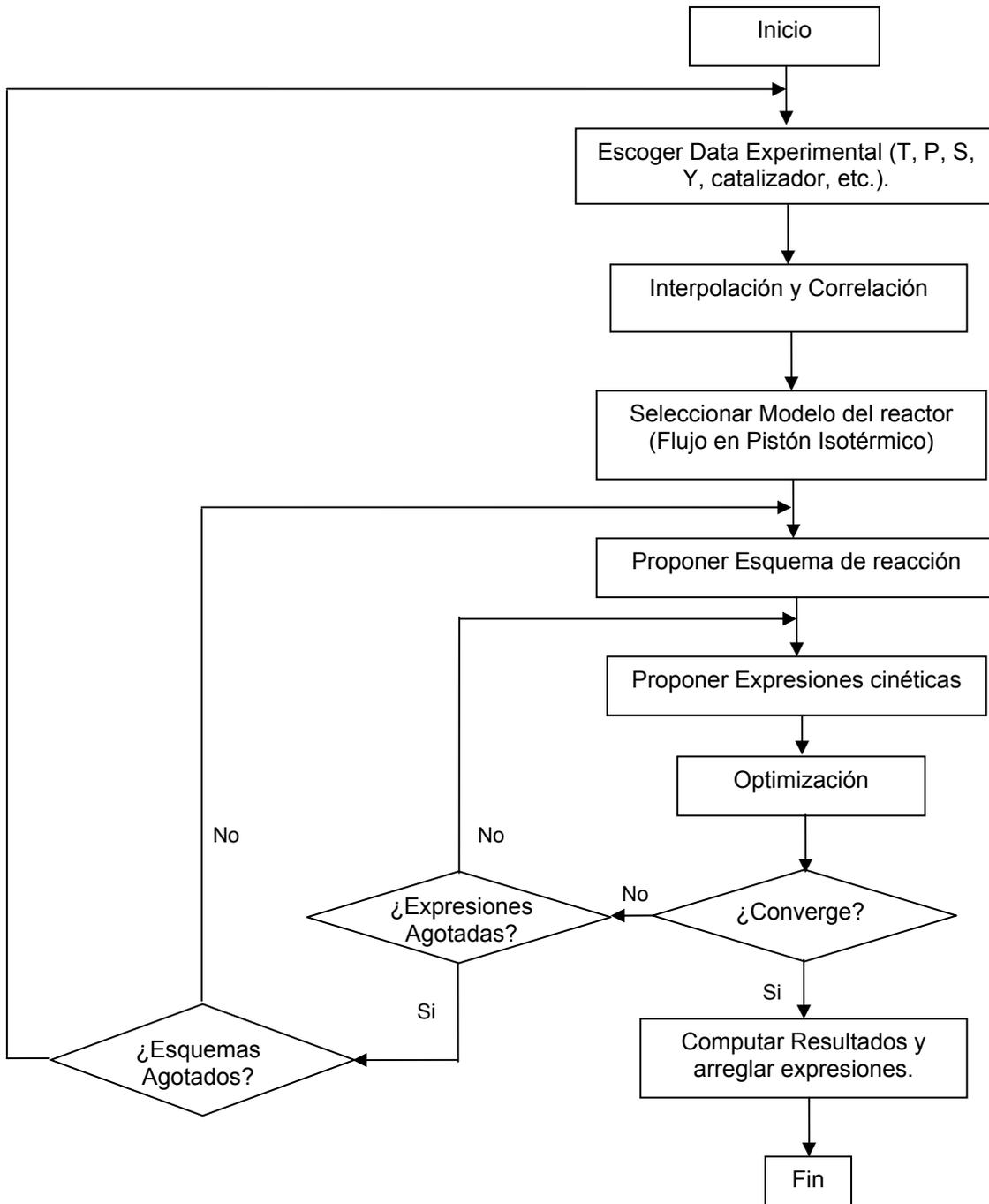
- ❖ Masa de catalizador: 0.105–0.840g.
- ❖ Temperatura: 573–773 K.
- ❖ Flujo de alimentación: 210 ml/min.
- ❖ Relación molar agua/etanol (R<sub>AE</sub>): 1–6.

Las composiciones de la alimentación y productos fueron analizadas por cromatografía gaseosa, utilizando tamices moleculares y un sistema de detección de conductividad térmica.

La selectividad de los compuestos [S<sub>i</sub> con i=CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>] y la conversión de etanol (C<sub>E</sub>), fueron las variables fundamentales empleadas para el ajuste matemático a través de una función objetivo multiparamétrica compleja (Ecuación 2.25), tomando como restricción que la conversión de etanol en todo el ajuste es de 100 %.

$$F_{obj} = \sum (S_{i-Modelo} - S_{Exp})^2 + \sum (C_{E-Modelo} - C_{Exp})^2 + \sum (Y_{i-Modelo} - Y_{iexp})^2 \quad (2.25)$$

Los resultados experimentales (Akande, J.A. et al., 2005 y Comas, J. et al., 2004) y las ecuaciones que describen el patrón cinético del mecanismo (Tabla 1 Anexo 2.6), se utilizaron simultáneamente siguiendo el algoritmo descrito en la Figura 2.5 para deducir las expresiones cinéticas.



**Figura 2.5.** Algoritmo empleado en el ajuste y optimización de las expresiones cinéticas.

El modelo unidimensional para un reactor de flujo en pistón fue empleado para el análisis del sistema, de esta forma los parámetros definidos con anterioridad y que están presentes en la función objetivo pueden determinarse y compararse con los resultados experimentales. Los métodos de integración y optimización elegidos

**Capítulo II. Diseño de un sistema para producir Gas de Síntesis.**

fueron el Runge-Kutta4 paso variable y el método de los mínimos cuadrados respectivamente.

Las expresiones cinéticas probadas se basan en la ocurrencia de un mecanismo Lagmuir-Hishelwood donde se toman como paso limitantes:

1. Adsorción de reactantes en la superficie.
2. Reacción Superficial entre moléculas adsorbidas de reactantes.
3. Desorción de productos desde la superficie al seno del gas.

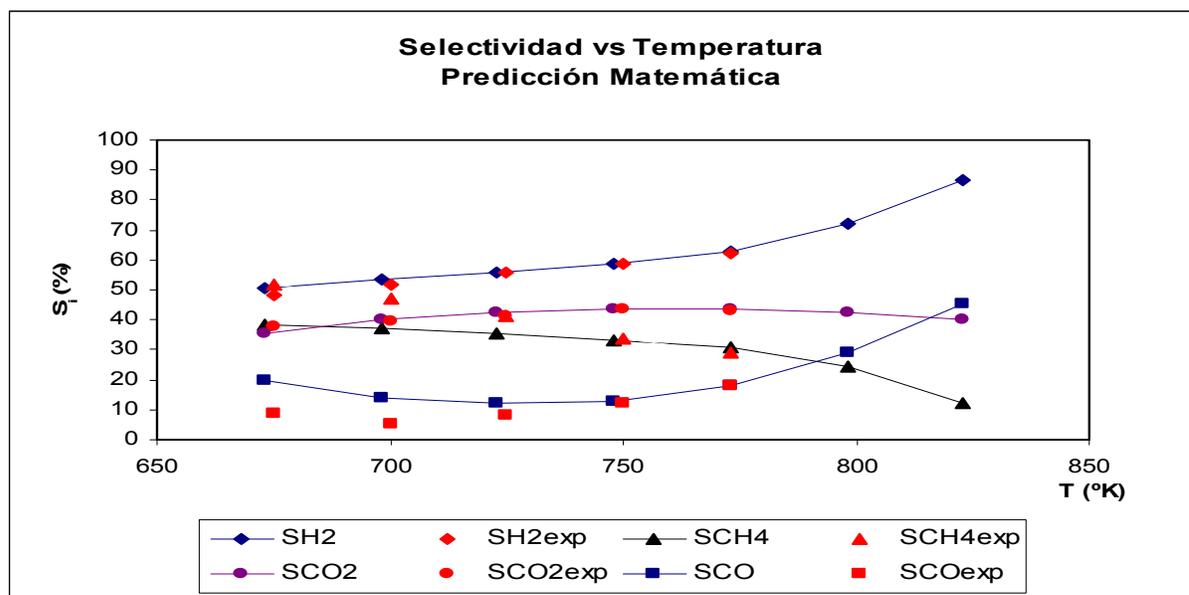
Cuyas expresiones se deducen suponiendo que todos los pasos, exceptuando el que se considera limitante, ocurren cercanos al equilibrio y basado fundamentalmente en la teoría de la adsorción de Lagmuir.

Las expresiones que mejor ajuste brindaron y para las cuales se prosiguió con el trabajo de diseño y simulado son representadas en la Tabla 2.5.

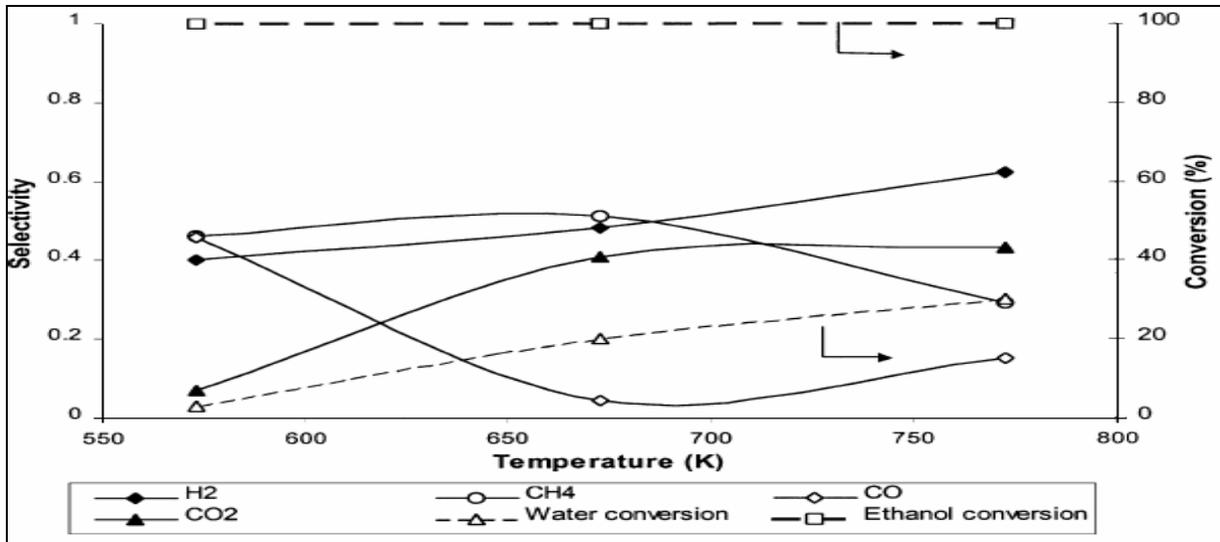
**Tabla 2.5.** Expresiones cinéticas deducidas.

Reacción	Tipo	Expresiones Propuestas (mol/s-gcat)
I	Hibrido (LH + LP)	$r_1 = K_1 \cdot \frac{p_E}{\alpha^2}$
II	Lagmuir-Hishelwood	$r_2 = \frac{K_2}{\alpha^2 \cdot p_H} \cdot \left( p_M p_A - \frac{p_D \cdot p_H}{K_{e_2}} \right)$
III	Lagmuir-Hishelwood	$r_3 = \frac{K_3}{\alpha^2 \cdot p_H^{2.5}} \cdot \left( p_{ME} p_A - \frac{p_M \cdot p_H^3}{K_{e_3}} \right)$
IV	Lagmuir-Hishelwood	$r_4 = \frac{K_4}{\alpha^2 \cdot p_H^{3.5}} \cdot \left( p_{ME} p_A^2 - \frac{p_D \cdot p_H^4}{K_{e_4}} \right)$
V	Lagmuir-Hishelwood	$r_5 = \frac{K_5}{\alpha^2} \cdot \left( p_M^2 - \frac{p_D}{K_{e_5}} \right)$
VI	Lagmuir-Hishelwood	$r_6 = \frac{K_6}{\alpha^2} \cdot \left( p_A - \frac{p_M \cdot p_H}{K_{e_6}} \right)$

La calidad de ajuste obtenida para el modelo propuesto puede decirse que fue adecuada ( $F_{OBJ} < 3\%$  para  $T > 450^{\circ}\text{C}$ ) aunque presenta limitaciones soportadas fundamentalmente en la escasez de datos experimentales. Sin embargo, si se analizan los resultados predichos matemáticamente (líneas continuas en la Figura 2.6), desde el punto de vista descriptivo del fenómeno en sí, puede decirse que son muy alentadores pues la composición final del reformado y las curvas de tendencia para todos los compuestos (incluyendo los intermediarios) se corresponden con los datos reportados por la bibliografía especializada (Figuras 2.6 y 2.7) para temperaturas superiores a los  $450^{\circ}\text{C}$ , sin embargo cuando la temperatura está por debajo de este punto se encuentra que el comportamiento descrito para los compuestos CO y CH<sub>4</sub> difiere considerablemente de los registros experimentales, lo que sería una debilidad del modelo, aunque si se toma en cuenta que el trabajo a temperaturas inferiores a  $450^{\circ}\text{C}$  no es recomendable, pues la reformación del metano (Reacciones III y IV) no ocurre a estas condiciones, entonces se podría afirmar categóricamente que el modelo es muy apropiado para el diseño conceptual de la etapa, por lo que será empleado en las secciones subsiguientes para el análisis y diseño de un reformador trabajando entre  $500 - 600^{\circ}\text{C}$  y 1 atm de presión.



**Figura 2.6.** Resultados de la predicción matemática.



**Figura 2.7.** Resultados experimentales. (Comas, J. et al., 2004).

Los parámetros del modelo que fueron ajustados se brindan en la Tabla 2.6, véase que las constantes de velocidad toman cuenta del efecto de la temperatura según la Ley de Arrhenius, además se extiende el rango de temperaturas hasta 600 °C a fin de obtener una ventana de temperaturas entre la etapa de reformado y la celda combustible (Oxido Sólido) lo más estrecha posible, reduciendo por este concepto las necesidades de calentamiento intermedio.

**Tabla 2.6.** Parámetros ajustados. Constantes de velocidad de reacción.

Parámetros (Ea (J/mol))	
$K_1 = 93.207 \cdot e^{\left(\frac{-64597.4}{RT}\right)}$	$K_4 = 8.01 \cdot 10^{-2} \cdot e^{\left(\frac{-83810}{RT}\right)}$
$K_2 = 2.17 \cdot 10^{-7} \cdot e^{\left(\frac{-5110.81}{RT}\right)}$	$K_5 = 4.625 \cdot e^{\left(\frac{-41934.9}{RT}\right)}$
$K_3 = 1.06 \cdot 10^{28} \cdot e^{\left(\frac{-524000}{RT}\right)}$	$K_6 = 3.23 \cdot e^{\left(\frac{-129500}{RT}\right)}$
$\alpha = 1 + K_{CO} \cdot P_M + K_{CH_4} \cdot P_{ME} + K_H \cdot P_H + \frac{K_{H_2O} \cdot P_A}{P_H}$	

### 2.5.2 Diseño del Reformador.

El establecimiento del modelo cinético de la reformación húmeda de bioetanol (Tabla 2.5 y 2.6) apenas fue el paso inicial en el diseño de la etapa, el cual será desarrollado a continuación, donde se analizarán el efecto tanto de las variables

operacionales como constructivas del reactor, llegando a obtenerse la variante adecuada. El diseño del equipo parte de los principios fundamentales del diseño de reactores de lecho fijo (Smith, J.M. 1991), aproximando el comportamiento del reactor al modelo de flujo en pistón y resolviendo los balances de masa, energía y momentum en todo el entorno de modelación por medio de la integración de las ecuaciones fundamentales.

### 2.5.1.1 Balance de masa.

$$\frac{dn(z,j)}{dz} = A(1-\varepsilon) \sum_i \alpha(j,i) \eta(i) r(z,i) \quad (2.26)$$

Las ecuaciones del balance de masa son resueltas de acuerdo a la Tabla 2.7:

**Tabla 2.7.** Aplicación del Balance de masa por componentes.

i	j
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH = CO + CH <sub>4</sub> + H <sub>2</sub> (i = 1)	1,2,3,4
CO + H <sub>2</sub> O = CO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> (i = 2)	3,4,5,6
CH <sub>4</sub> + H <sub>2</sub> O = CO + 3H <sub>2</sub> (i = 3)	2,3,4,6
CH <sub>4</sub> + 2H <sub>2</sub> O = CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> (i = 4)	2,4,5,6
2CO = C + CO <sub>2</sub> (i = 5)	3,5,7
C + H <sub>2</sub> O = CO + H <sub>2</sub> (i = 6)	3,4,6,7

### 2.5.1.2 Balance de Energía.

El balance de energía fue resuelto en conjunto con el balance de masa integrando las siguientes expresiones:

Para el interior de los Tubos:

$$\frac{dT(z)}{dz} = \frac{At}{G_m \cdot C_{pm}} \cdot \left[ \frac{4U_o}{Dt} \cdot (T_{pt}(z) - T(z)) - (1-\varepsilon) \sum_i \alpha(j,i) \cdot \eta(i) \cdot r(i) \cdot \Delta H_r(i) \right] \quad (2.27)$$

Para la coraza:

$$\frac{dT_g(z)}{dz} = \frac{As}{G_G \cdot C_{pG} \cdot (Ds^2 - Dt^2)} [4U_o \cdot Dt \cdot Nt(T_g(z) - T(z)) + 4U_{co} \cdot Ds(T_g(z) - Ta)] \quad (2.28)$$

Estas ecuaciones fueron resueltas de forma detallada considerando los tres mecanismos fundamentales de transferencia de calor (Convección, Conducción y Radiación) por medio de los coeficientes peliculares y la teoría de la radiación en superficies a elevadas temperaturas, en conjunto con la ecuación general del coeficiente global de transferencia de calor dada por Perry, R. et al., (1999):

Coeficientes peliculares:

$$h_i = 0.813 \cdot \frac{K^{eff}}{Dt} \cdot Re^{0.9} \exp\left(-6 \frac{Dp}{Dt}\right) \quad (2.29)$$

$$h_{cr} = \frac{Q_{cr}}{Atc(Tg(z) - T_p)} \quad (2.30)$$

$$h_1 = 0.36 \cdot \frac{K_G}{De} \cdot Re_G^{0.55} \cdot Pr_G^{0.33} \quad (2.31)$$

$$Q_{cr} = G_s \cdot K_B \cdot (Tg^4 - Tp^4) + h_1 \cdot Atc \cdot (Tg - Tp) \quad (2.32)$$

$$G_s = \left( \frac{ae}{\frac{ae}{E_g} + \frac{1}{E_1} - 1} \right) \cdot Atc \quad (2.33)$$

### **2.5.1.3 Caída de presión.**

En el reactor de reformación se elaboró un análisis detallado del comportamiento de las pérdidas de carga en su interior, empleando criterios novedosos en este sentido.

Es reconocido que el análisis de equipos donde se transporta un gas a través de un lecho fijo, el estudio de la caída de presión en el lecho siempre ha estado vinculado a la ecuación de Ergun:

$$\frac{dP(z)}{dz} = - \frac{G}{\rho \cdot gc \cdot Dp} \cdot \left( \frac{1 - \epsilon}{\epsilon^3} \right) \cdot \left[ \frac{150 \cdot (1 - \epsilon)}{Dp} + 1.75 \cdot G \right] \quad (2.34)$$

Por otra parte, la literatura moderna habla con mucha fuerza de que en procesos de transporte y reacción heterogénea en lechos fijos, la caída de presión se acoge a una expresión similar a la ecuación de Ergun pero las constantes en esta ecuación

son alteradas por factores diferentes (Wallas, S.M. 1990). Partiendo de estos criterios es que se elabora el estudio de carga efectuado:

$$\frac{dP(z)}{dz} = -\frac{G^2}{\rho \cdot A^2 \cdot Dp} \cdot \left(\frac{1-\epsilon}{\epsilon^3}\right) \cdot \left[1.75 + 4.2 \cdot Re^{0.833} \cdot \frac{1-\epsilon}{Re}\right] \quad (2.35)$$

### 2.5.2 Diseño general y elección de la variante.

Para efectuar el diseño general y la elección de la variante del reactor se efectúa un proceso de evaluación de alternativas en cuanto a los parámetros fundamentales de diseño para el equipo en cuestión a través de una simulación computacional compleja (Tabla 2.8):

**Tabla 2.8.** Rango de estudio de los parámetros generales de diseño.

Variable	Rango	Parámetros a Determinar
D <sub>tub</sub> (plg)	1.5 – 3	ΔP, L <sub>react</sub> , Y <sub>H</sub>
D <sub>p</sub> (mm)	1 – 5	ΔP, L <sub>react</sub> , Y <sub>H</sub>
θ (10 <sup>-2</sup> g-min/cc)	0.1 – 1	N <sub>EO</sub> , L <sub>react</sub> , Y <sub>H2</sub>
R <sub>AE</sub> (mol H <sub>2</sub> O/mol EtOH)	3 - 6	ΔP, Y <sub>H2</sub> , L <sub>react</sub> , Syngas Comp.
T (°K)	400 - 600	ΔP, L <sub>react</sub> , Syngas Comp. Y <sub>H2</sub>

#### 2.5.2.1 Influencia del Tiempo Espacial y el Número de tubos.

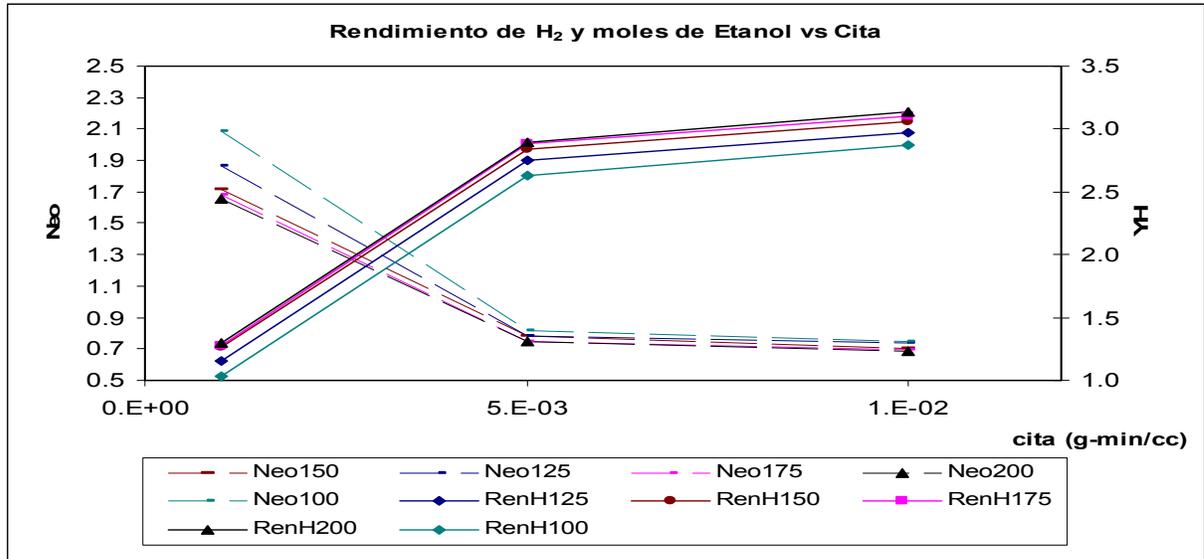
##### Tiempo de residencia:

Cuando se incrementa el tiempo de residencia en el reactor tiende a disminuir la necesidad de etanol a alimentar al reactor alrededor del 60% (Figura 2.8), para todas las variantes de reactor empleadas, solamente cuando el tiempo sobrepasa 0.005 g-min/cc estas variaciones se mantienen entre el 8 y 10% que aunque menores no dejan de ser importantes.

Por otra parte esta variable incide directamente sobre el rendimiento obtenido (Figura 2.8), el cual se afecta substancialmente con su disminución (caídas >55%). Los mejores resultados se obtienen para cita 10<sup>-2</sup> g-min/cm<sup>3</sup>, donde con reactores cercanos a 1 metro de longitud se obtienen rendimientos a hidrógeno que oscilan entre 2.85 y 3.2 molH<sub>2</sub>/molEtOH. Es importante destacar que con el empleo de configuraciones con 125 – 150 tubos se obtienen resultados comparativamente

**Capítulo II. Diseño de un sistema para producir Gas de Síntesis.**

buenos, en relación a arreglos que contienen mayor cantidad de tubos (175 - 200). En este punto es fundamental reconocer que la diferencia entre el rendimiento y el consumo de bioetanol obtenidos para Ntubos>150 no justifica su empleo; además, el empleo de un reactor con 100 tubos está limitado por la caída de presión (>0.7P<sub>0</sub> para cita = 10<sup>-3</sup> g-min/cm<sup>3</sup>) y a su vez supera en consumo de bioetanol a las variantes propuestas (125 – 150 tubos) por más del 10%.



**Figura 2.8.** Influencia del Tiempo espacial sobre los consumos de etanol y el rendimiento en un reformador de Bioetanol.

**Número de Tubos:**

El incremento en el número de tubos es un factor de costo considerable pues está directamente relacionado con las pérdidas de carga en el sistema, el rendimiento a hidrógeno y el consumo de bioetanol, apreciándose en los casos extremos explorados que:

Con  $\theta = 10^{-2}$  g-min/cm<sup>3</sup>

**Para 100 Tubos:**

$\Delta P = 0.69$  atm,  $Y_H = 2.87$ ,  $N_{EO} = 0.75$  mol/s

**Para 200 Tubos:**

$\Delta P = 0.053$  atm,  $Y_H = 3.14$ ,  $N_{EO} = 0.685$  mol/s

Las diferencias en la cantidad de etanol requerido no son substanciales para ambos casos (0.065mol/s). Sin embargo la caída de presión es inversamente proporcional al número de tubos empleados estando la operabilidad del reactor de 100 tubos limitada a las condiciones exploradas ( $\Delta P > 0.3 \cdot P_o$ ).

El rendimiento a hidrógeno como se destacó anteriormente es otro parámetro sensible a la cantidad de tubos empleados en el reactor sin embargo su variación aunque tangible tampoco es considerada como punto crítico (solo varía 9%).

Hasta el momento solo se han referenciado dos casos extremos o sea un reactor de 100 tubos el cual a determinadas condiciones llega a ser inoperable y un reactor de 200 tubos que está sobredimensionado para las necesidades del proceso. Como es lógico existe una zona comprendida entre ambas variantes que fue analizada (Figura 2.9), quedando demostrado que el empleo de reactores de 125, 150 y 175 tubos respectivamente tienen un comportamiento similar a las dos primeras variantes, estando soportados los resultados más alentadores en el uso de 125 y 150 tubos respectivamente, partiendo del hecho de que aunque los estudios realizados con 175 tubos superan a los mencionados, el nivel de diferencia no justifica su empleo (Tabla 1 (Anexo 2.7) y Figura 2.9).

Para diseñar un equipo capaz de trabajar a diferentes relaciones Agua/Etanol y tomando en cuenta que esto traería consigo el manejo de mayores flujos, la variante de 100 tubos estaría limitada por concepto de pérdidas de carga, por otro lado el empleo de un reactor con 200 tubos sería un sobre-diseño innecesario, si se verifica que las diferencias entre esta variante y la de 125 o 150 tubos no son considerables.

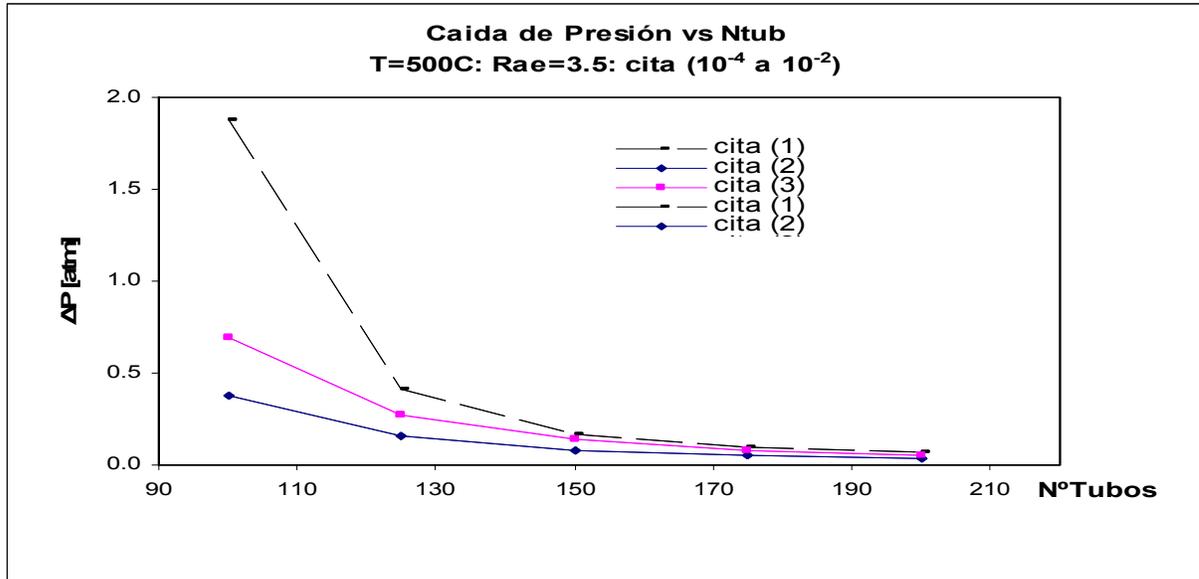


Figura 2.9. Caída de presión en un reformador para diferentes cantidades de tubos.

### 2.5.2.2 Diámetro de Tubo.

El empleo de tubos con  $D > 1.5''$  en equipos de intercambio de calor no es muy recomendable, pero sin embargo, cuando se habla de procesos de reacción química sobre camas catalíticas en muchas ocasiones el incremento en el diámetro del tubo favorece a la distribución interna del catalizador, permite el trabajo en condiciones de caída de presión permisibles y facilita el área de intercambio de calor necesaria para los requerimientos del proceso, por lo que un estudio en este sentido bien vale la pena.

Como se puede apreciar en las Figuras 2.10 (a) y (b), el incremento en los diámetros de tubos (de 1.5" a 3") tiene una región de máximo para todos los diámetros de partículas empleados, esto se vincula estrechamente con la relación específica que existe entre las características termodinámicas de la reacción que se desarrolla, la cual sufre una caída de  $Y_H$  con la presión (Laborde, M.A. et al., 1991 y Vasudeva, K. M. et al., 1996) y se favorece con el incremento de la temperatura, por lo que el aumento en el diámetro de tubo podría inferir una disminución en el rendimiento por concepto de presión total (pequeñas reducciones), sin embargo esta caída es compensada con el incremento del área de transferencia de calor la cual resulta ser clave por el carácter endotérmico de la reacción. Este comportamiento permite inferir el establecimiento de una zona de óptimo entre  $Dt =$

**Capítulo II. Diseño de un sistema para producir Gas de Síntesis.**

2" y 2.5" a partir de donde el rendimiento comienza a caer porque el efecto de presión supera al de la transferencia de calor. Por otra parte cuando se emplean partículas de 1mm de diámetro se verifica este mismo comportamiento aunque es importante destacar que la operación es completamente invalidada para  $Dt < 1.75$ ". Además el aumento en el diámetro favorece la compactación del equipo independientemente del diámetro de partícula que se seleccione, aunque como es lógico el empleo de partículas pequeñas es más apropiado debido a que eleva la efectividad en la reacción.

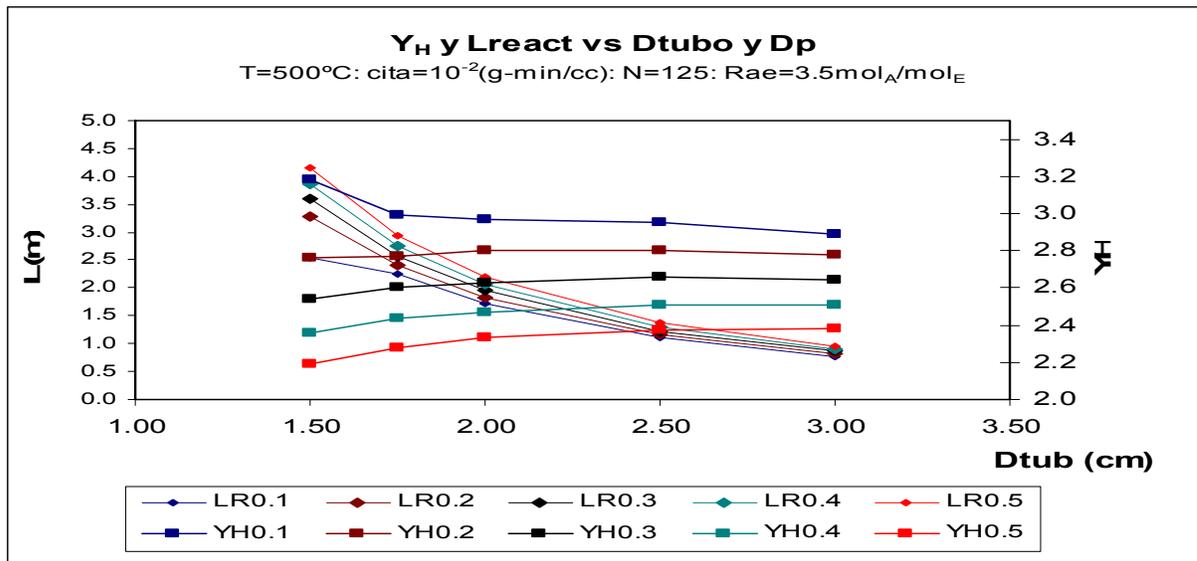


Figura 2.10 (a). Compacta. Los subíndices indican el diámetro de partícula empleado (cm).

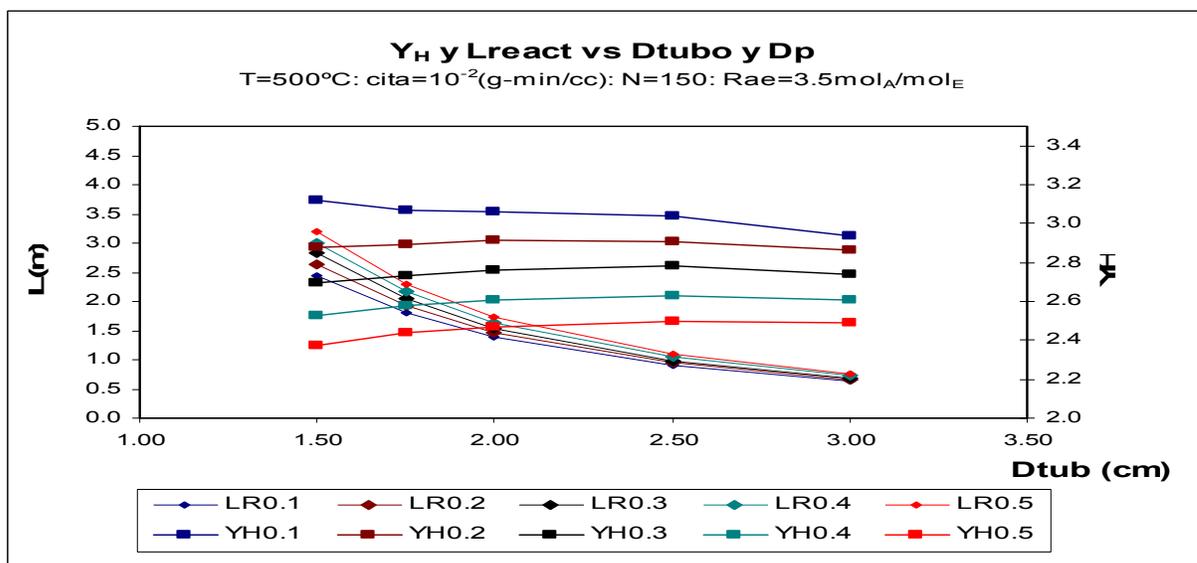


Figura 2.10 (b). Compacta. Los subíndices indican el diámetro de partícula empleado (cm).

### 2.5.2.3 Diámetro de Partículas (Pellet).

Como puede apreciarse en las Figuras 2.10 (a) y (b), el empleo de un diámetro de Pellet reducido favorece y en medida considerable, la efectividad de la reacción independientemente del número de tubos empleados, encontrándose una relación inversamente proporcional entre el rendimiento a hidrógeno y este parámetro (Para  $D_{tub} = 2''$ :  $YH_{1mm} = YH_{5mm} + 0.64$ ).

La longitud de reactor necesaria disminuye con el diámetro de partícula, debido a que la reducción de este último conlleva a un incremento en la productividad y la efectividad de la reacción, representado a través del rendimiento logrado; es importante destacar que este incremento en la productividad se traduce en una disminución de la cantidad de bioetanol a emplear y por ende a reducciones en el costo de producción de la instalación.

Otro factor importante a tomar en cuenta cuando se diseña un reactor de lecho fijo, es la pérdida de carga que sufre el fluido que atraviesa la cama llegando en muchas ocasiones a obstaculizar la operabilidad de esta. El comportamiento encontrado en este caso es típico (Perry, R. et al., 1999) y Smith, J.M. 1991) o sea el incremento en el diámetro de Pellet favorece a la reducción de las pérdidas de carga (Figura 2.11).

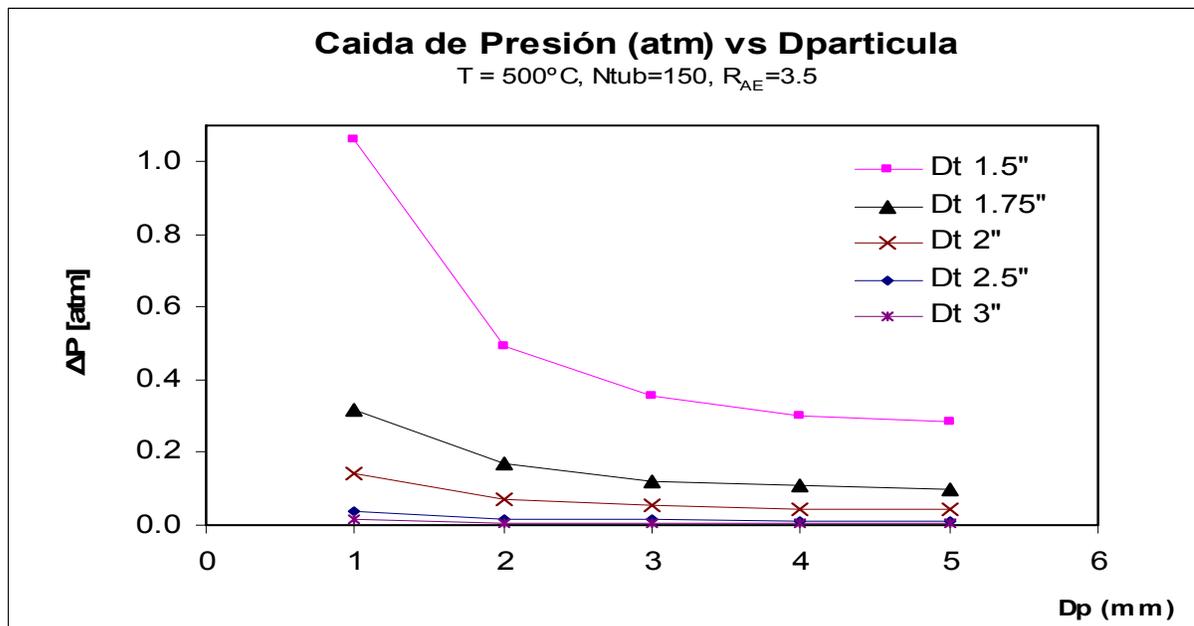


Figura 2.11. Caída de presión en un reformador para diferentes diámetros de tuberías y partículas.

#### 2.5.2.4 Conclusiones Preliminares de la simulación.

Puede afirmarse categóricamente que el empleo de tiempos de residencia inferiores a  $10^{-2}$  g-min/cc no se justifican puesto que los rendimientos obtenidos a estas condiciones son superiores y además la longitud del equipo que facilita el establecimiento de este tiempo de contacto no es excesiva (<2.5 m).

Por otra parte y luego de efectuar un análisis general de los resultados obtenidos hasta aquí, podría afirmarse que la utilización de la combinación correcta entre el tiempo espacial, número de tubos, diámetro de Pellet y diámetro de tubo, sería la forma más adecuada de obtener un reformador compacto y que rinda buen comportamiento ante los requerimientos del proceso. Partiendo de los análisis efectuados se prosigue el estudio de las variables operacionales ( $R_{AE}$  y  $T$ ) en un reactor de 150 tubos debido a que este arreglo arrojó los resultados más alentadores en cuanto a rendimiento a hidrógeno, pérdidas de carga y comportamiento de las reacciones Figura 2.10 (a) y (b).

Las variables fundamentales empleadas en el estudio y las características generales del reactor se muestran en la Tabla 2.9:

**Tabla 2.9.** Dimensiones y parámetros fundamentales.

Cita (g-min/cc)	Dp (mm)	Dtub (plg)	Ntub	T (°C)	Rae mol <sub>A</sub> /mol <sub>E</sub>	N <sub>H</sub> (mol <sub>H</sub> /s)
$10^{-2}$	1	2	150	400 – 600	3 – 6	2.159

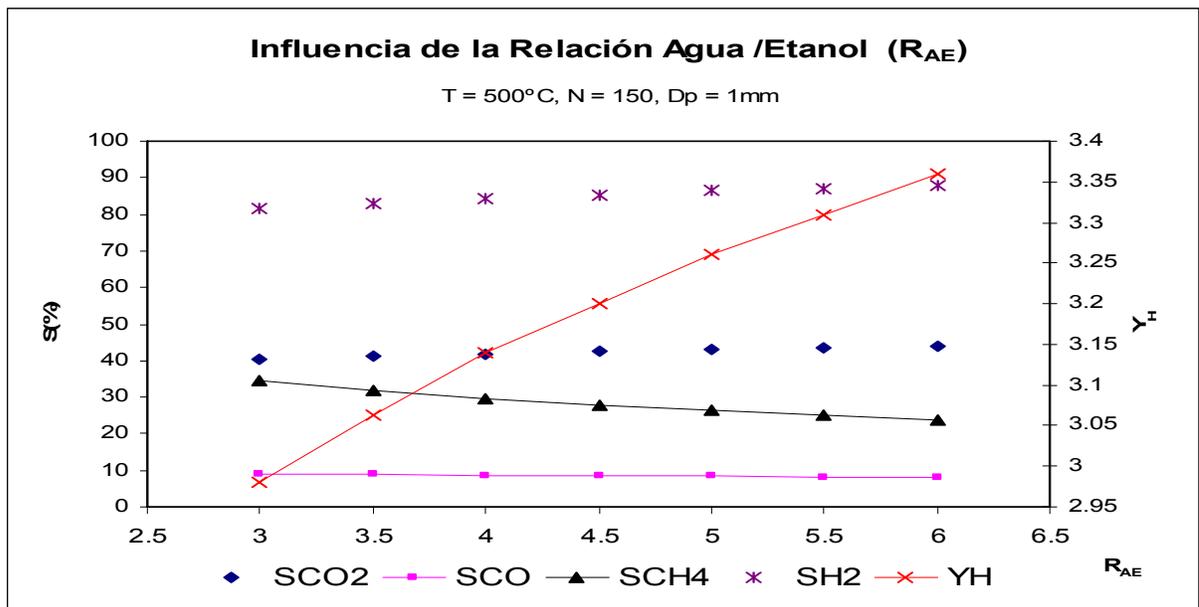
En la Tabla 2.10 se destacan las características y parámetros de operación y diseño fundamentales para el reformador, estos resultados son lo que se consideran más alentadores.

**Tabla 2.10.** Parámetros de diseño fundamentales para un reformador.

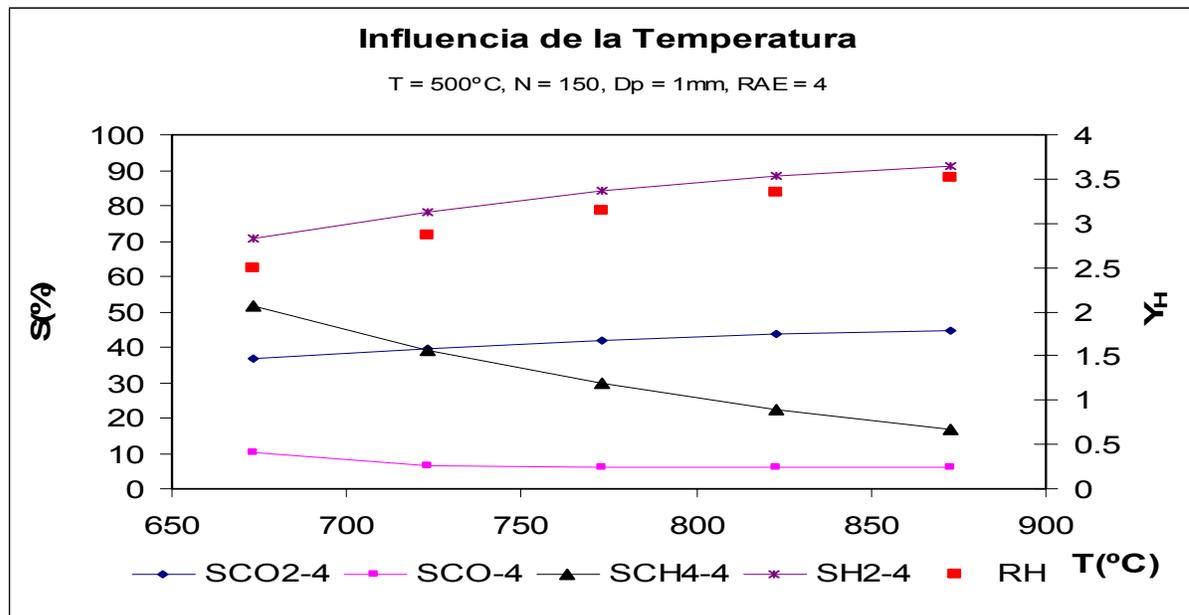
Cita (g-min/cc)	Dp (mm)	Dtub (plg)	Ntub	$\Delta P$ (atm)	L <sub>R</sub> (m)	T (°C)	Rae mol <sub>A</sub> /mol <sub>E</sub>	M <sub>cat</sub> (kg)
$10^{-2}$	1	2	150	0.2420	1.7460	500	5	75.58

### 2.5.3 Simulación del reformador.

Hasta aquí se ha trabajado con una relación molar de alimentación Etanol/Agua de 5, a una temperatura de 500°C y presión atmosférica, dichas condiciones fueron seleccionadas y establecidas a partir de criterios termodinámicos y datos de laboratorio expuestos en la literatura especializada en el tema. A pesar de que en muchas ocasiones se referencia el uso de exceso de agua como un factor favorable es importante destacar que esta variable puede afectar la eficiencia energética del proceso por concepto de evaporación (cuando se trabaja con etanol "puro"), además ha quedado demostrado que el uso de elevadas temperaturas favorece las reacciones químicas, donde se registra que los procesos reformativos de las sustancias intermedias ( $CH_4$ ) ocurren a temperaturas superiores a los 400°C. De aquí que se persiga concluir el análisis del reactor con el estudio de estos dos parámetros de operación fundamentales (Figura 2.12 y 2.13 respectivamente).



**Figura 2.12.** Influencia de la relación molar agua/etanol en la reformación de Bioetanol.

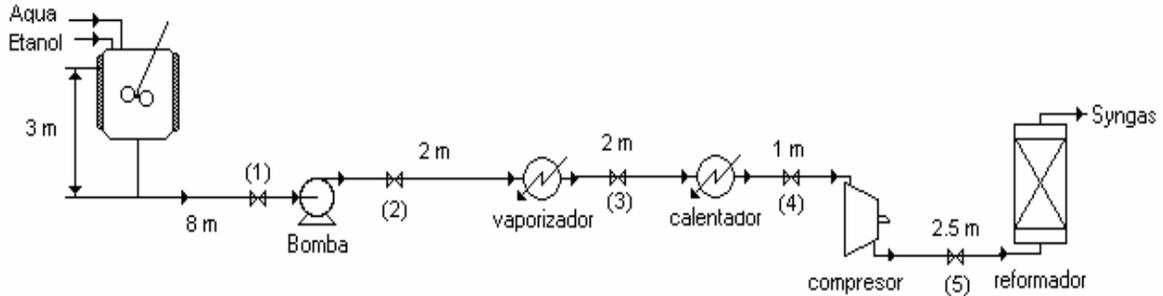


**Figura 2.13.** Influencia de la temperatura en la reformación de Bioetanol.

Como puede verse el efecto de la relación agua/etanol en la alimentación es fundamental para el rendimiento de hidrógeno el cual se favorece con el incremento de dicha relación en forma lineal. Ahora es importante destacar que aunque esta variable incide sobre el rendimiento, su influencia es menos importante que la de la temperatura donde el comportamiento responde a un modelo cuadrático, llegando a alcanzarse 3.5 de rendimiento a 600°C en las condiciones de trabajo establecidas, la selectividad a hidrógeno crece de forma significativa con el incremento de la temperatura llegando a estar cercana al 90% cuando se trabaja a 600°C. Además se describe como el  $CH_4$  es consumido con la temperatura, podría inferirse que este resultado se relaciona con la reformación completa de este compuesto pues su consumo está en concordancia con el incremento en la producción de  $CO_2$ . Al tiempo espacial empleado la producción de  $CO$  es prácticamente invariable después de los 450 °C sufriendo un leve incremento a los 600 °C debido al carácter reversible de dicha reacción.

**2.6 Cálculo del sistema de flujo.**

En la figura se representa en forma de diagrama el sistema de flujo sujeto a análisis.



En la Tabla 1 (Anexo 2.8) se encuentran los datos fundamentales de los fluidos que son transportados por las tuberías, así como el cálculo de los diámetros que se necesitan para las condiciones de flujo.

En la Tabla 2.11 se destacan los principales parámetros y características de las tuberías.

**Tabla 2.11.** Datos del Sistema en general.

Tubería	Datos		Accesorios	
1 – 2	$D_E$	17.15 mm	Válvulas de compuerta	1
	$D_I$	12.52 mm	Válvulas de globo	1
	$V_{trabajo}$	0.66 m/s	Codos rectangulares standard	1
3	$D_E$	140 mm	Válvulas de compuerta	1
	$D_I$	112 mm		
	$V_{trabajo}$	19.89 m/s		
4 – 5	$D_E$	219 mm	Válvulas de globo	2
	$D_I$	161.77 mm	Codos rectangulares standard	3
	$V_{trabajo}$	18.33 m/s		

**2.6.1 Cálculo del consumo de potencia de la bomba y selección del motor.**

Para transportar la mezcla de bioetanol – agua entre el Tanque agitado y el Vaporizador se utiliza una bomba centrífuga.

En la Tabla 1 y Tabla 2 (Anexo 2.9) se encuentran los datos necesarios para determinar pérdidas por fricción y las resistencias locales.

**Capítulo II. Diseño de un sistema para producir Gas de Síntesis.**

Para el cálculo de la potencia se parte del balance de energía mecánica (Rosabal, J.M. 1998):

$$H = \Delta Z + \frac{\Delta P}{\rho_m \cdot g} + \frac{\Delta(\alpha \cdot V^2)}{2g} + hp \quad (2.36)$$

Donde:

$$hp = \left[ \frac{f \cdot L}{D_1} + (\sum Ki) \right] \cdot \frac{v^2}{2g} = \left[ \frac{0.05 \cdot 13 \text{ m}}{0.01252 \text{ m}} + 9.15 \right] \cdot \frac{(0.66 \text{ m/s})^2}{2(9.8 \text{ m/s}^2)} = 2.85 \text{ m} \quad (2.37)$$

$$\Delta Z = 3 \text{ m}$$

$$\frac{\Delta(\alpha \cdot V^2)}{2 \cdot g} = 0.023 \text{ m}$$

$$H = 3 \text{ m} + 0 + 0.023 \text{ m} + 2.85 \text{ m} = 5.87 \text{ m}$$

La potencia útil para el sistema viene dada por la Ecuación 2.38:

$$N_{\text{útil}} = \frac{H \cdot Q_{ae} \cdot g \cdot \rho_m}{1000} \quad (2.38)$$

$$N_{\text{útil}} = \frac{5.87 \text{ m} \cdot 1.53 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s} \cdot 9.81 \text{ m/s}^2 \cdot 959.1 \text{ kg/m}^3}{1000}$$

$$N_{\text{útil}} = 0.0085 \text{ kW}$$

La potencia de instalación es calculada por la Ecuación 2.39:

$$N = \frac{\beta N_{\text{útil}}}{\xi} \quad (2.39)$$

$$\beta = 1.5 \text{ Tabla 3.3 Rosabal, J.M (1998)}$$

$$\xi = 0.8 \text{ Tabla 15 Rosabal, J.M (1998)}$$

$$N = 0.016 \text{ kW}$$

Unas veces que se determina la potencia de instalación se procede a seleccionar el motor, siendo este un motor monofásico 110/220 V, 60 Hz de 0.09 kW de potencia nominal, con velocidad sincrónica de 1800rpm.

**Capítulo II. Diseño de un sistema para producir Gas de Síntesis.**

Seleccionada la bomba hay que comprobar que no ocurra el fenómeno de la cavitación. Este fenómeno aparece cuando el fluido forma burbujas, las cuales pasan junto con el líquido a las zonas de altas presiones, donde se condensan instantáneamente; entonces el líquido rellena la cavidad donde se encontraba el vapor que ha condensado provocando impactos hidráulicos y vibraciones intensas. La cavitación no solo conduce a la rápida destrucción de la bomba debido a los choques hidráulicos y a la corrosión, sino que también disminuyen rápidamente su eficiencia y carga.

Para que no ocurra este fenómeno debe cumplirse que la succión neta positiva del sistema (SNP<sub>sist</sub>) sea mayor que la succión neta de la bomba (SNP<sub>b</sub>):

$$SNP_{sist} > SNP_b$$

Para el cálculo de la SNP<sub>sist</sub>, Rosabal, J.M. (1998) propone la Ecuación 7.22:

$$SNP_{sist} = \frac{P_s - P_v}{\rho_m \cdot g} \quad (2.40)$$

El cálculo de la presión de vapor de la mezcla (P<sub>v</sub>) se efectúa por el software VLE. Calculator, utilizando el Método UNIFAC. (P<sub>v</sub> = 6090.2 Pa)

Para calcular la presión de succión de la bomba (P<sub>s</sub>) se utiliza la Ecuación 2.41 propuesta por Rosabal, J.M. (1998):

$$H_s = Z_s - Z_1 = \frac{P_1 - P_s}{\rho_m \cdot g} - \frac{(\alpha_s V_s^2 - \alpha_1 V_1^2)}{2g} - hp \quad (2.41)$$

$$0 = -Z_1 = \frac{P_1 - P_s}{\rho_m \cdot g} - \frac{\alpha_s V_s^2}{2g} - hp \quad (2.42)$$

$$P_s = P_1 + g \cdot \rho_m \cdot Z_1 - \frac{\alpha_s \cdot \rho_m \cdot V_s^2}{2} - g \cdot \rho_m \cdot hp \quad (2.43)$$

$$P_s = 118281.79 \text{ Pa}$$

Donde:

$$Z_s = 0$$

$$P_1 = 101325 \text{ Pa}$$

$$h_p = \left[ \frac{f \cdot L}{D_i} + (\sum K_i) \right] \cdot \frac{v^2}{2g} = \left[ \frac{0.05 \cdot 11 \text{ m}}{0.01252 \text{ m}} + 9.15 \right] \cdot \frac{(0.66 \text{ m/s})^2}{2(9.8 \text{ m/s}^2)} = 1.17 \text{ m}$$

$$h_p = 1.17 \text{ m}$$

$$H_s = 0$$

Por tanto:

$$SNP_{\text{sist}} = \frac{118281.79 \text{ Pa} - 6090.2 \text{ Pa}}{959.1 \cdot 9.8}$$

$$SNP_{\text{sist}} = 11.9 \text{ m}$$

Seguidamente se calcula el  $SNP_b$  por la Ecuación 7.24 propuesta por Rosabal, J.M. (1998):

$$SNP_B = 0.00125(n^2 Q_{ae})^{2/3} \quad (2.44)$$

$$SNP_B = 0.00125 \left( (1800 \text{ rpm})^2 \cdot 1.02 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s} \right)^{2/3}$$

$$SNP_B = 0.059 \text{ m}$$

Como  $SNP_{\text{sist}} > SNP_b$  podemos concluir que no se manifiesta el fenómeno de cavitación.

### **2.6.2 Transporte de fluidos compresibles.**

En el sistema analizado se manejan tanto fluidos incompresibles (desde el tanque hasta el vaporizador) como fluidos compresibles (resto del sistema), por lo que el balance de energía mecánico efectuado toma en consideración estos aspectos, a fin de definir las características del equipo de impulsión que debe colocarse a la entrada del reactor, para el cual debe garantizarse una presión de alimentación de 1atm pues el empleo de mayores presiones puede acarrear deficiencias de rendimientos por las características termodinámicas de la reacción. Es importante destacar que como aproximación se considera el flujo isotérmico.

**Capítulo II. Diseño de un sistema para producir Gas de Síntesis.**

El Balance de energía mecánica para flujo isotérmico puede representarse, según Rosabal, J.M. (1998), como:

$$\frac{P_2 - P_1}{\rho_m} + \frac{\alpha \cdot G^2}{\rho_m^2} + \sum Fp = 0 \quad (2.45)$$

$$\sum Fp = \left( \frac{f \cdot L}{D} + \sum Ki \right) \cdot \frac{G^2}{2 \cdot \rho_m^2} \quad (2.46)$$

$$\sum Ki = \sum K_{turb} \frac{f}{f_{turb}} \quad (2.47)$$

Las características fundamentales para el sistema desde el vaporizador hasta el Reformador se encuentran en las Tablas 1, 2 y 3 (Anexo 2.10).

Para la selección del equipo de impulsión de los gases del calentador al reformador se realiza el BEM, los resultados se encuentran en la Tabla 2.12.

**Tabla 2.12.** Resultados del BEM.

<b>Equipo</b>	<b>P<sub>entrada</sub></b>	<b>P<sub>salida</sub></b>	<b>Unid.</b>
Vaporizador	101325	100998.73	Pa
Calentador	100310.54	100267.78	Pa
Ventilador	97759.43	103937.72	Pa
Reformador	101325	76804.35	Pa

Como la  $R_c = \frac{P_D}{P_S} = 1.06 < 1.1$  se emplea un ventilador con las características expuestas en el Anexo 2.11.

**Conclusiones parciales:**

1. El diámetro de partículas, diámetro de tubos y el número de tubos son los parámetros constructivos con mayor incidencia en el diseño, encontrándose una región de máximo para  $2 < D_{\text{tub}} \text{ (plg)} < 2.5$ .
2. Los mejores resultados en cuanto a rendimiento y ahorro de etanol se obtienen con un reformador de 150 tubos, de 2 plg de diámetro, empleando pellets de 1 mm y operando a  $10^{-2} \text{ g-min/cm}^3$ . En todo el rango explorado este prototipo mostró buen comportamiento y estabilidad.
3. Se dimensiona en un 100% el sistema hidráulico principal de la instalación, definiéndose la necesidad de emplear un ventilador centrífugo Modelo CMP-820-2M en la entrada del reformador.
4. El equipamiento auxiliar para el proceso se diseña en su totalidad, sin embargo queda establecida la necesidad de simular de forma integrada la planta en toda su extensión a fin de obtener resultados más integradores.

**Nomenclatura:**

**Símbolos:**

A: área de transferencia de calor, interior (i), media logarítmica (ml), exterior de los tubos (o), por coraza (s), de flujo por tubo (t) y receptora por tubo (1) (m<sup>2</sup>).

ae: fracción de energía del medio de calentamiento.

Cp: capacidad calorífica del gas (G), del componente puro (i), de la mezcla (m) y del vapor (v) (kJ/kg°C).

d: diámetro del agitador (m).

D: diámetro del tanque, carcasa (c), equivalente (e), exterior de la tubería (E), interior de la tubería (I), interior del tubo (i), nominal de la tubería (N), exterior del tubo (o), de partícula (p), de coraza (s) y de tubo (t) (m).

e: rugosidad.

E<sub>1</sub>: emisividad del Material de los tubos.

Eg: emisividad del medio de calentamiento.

Esp: espaciado entre los tubos (m).

F: flujo de calor (J/m<sup>2</sup>).

F: flujo inicial de agua (<sup>IN</sup>H<sub>2</sub>O), final de agua (H<sub>2</sub>O), inicial de etanol (<sup>IN</sup>CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH), final de etanol (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH) y de productos (product), (mol/s).

F<sub>H<sub>2</sub></sub>: flujo de hidrógeno (mol/s).

Fr: factor de reserva.

Ft: factor de corrección de la temperatura.

G: flujo másico superficial de gas (G), por los tubos (i), mezcla (m) y por la carcasa (s) (kg/m<sup>2</sup>s).

G: velocidad másica superficial en (g/cm<sup>2</sup>s, lb<sub>m</sub>/ft<sup>2</sup>h, o Kg/m<sup>2</sup>s).

g<sub>c</sub>: factor de conversión = 32.174 (lb<sub>m</sub>.ft/s<sup>2</sup>.lb<sub>f</sub>) = 4.17x10<sup>8</sup> (lb<sub>m</sub>.ft/h<sup>2</sup>.lb<sub>f</sub>).

GS: superficie emisora (m<sup>2</sup>).

H: altura del líquido en el tanque (m).

h: altura total del tanque (m).

h: coeficiente pelicular exterior (a) e interior (i) (W/m<sup>2</sup>°C).

h1: coeficiente local para la superficie de los tubos (W/m<sup>2</sup> °K).

hcr: coeficiente combinado de convección y radiación (W/m<sup>2</sup>°C).

**Capítulo II. Diseño de un sistema para producir Gas de Síntesis.**

hp: pérdidas de carga debido a las fricciones (m).

I: intensidad de corriente (A).

i: reacción química.

j: especies químicas: (j=1 CH<sub>3</sub>CH<sub>3</sub>O, j=2 CH<sub>4</sub>, j=3 CO, j=4 H<sub>2</sub>, j=5 CO<sub>2</sub>, j=6 H<sub>2</sub>O, j=7 C).

Ke: constante de equilibrio.

K<sup>eff</sup>: conductividad térmica efectiva de la cama.

k: conductividad térmica de los gases (G), de los componentes puros (i), de la mezcla (m), del vapor (v) y del material (x) (W/m<sup>2</sup>K).

K<sub>N</sub>: número de potencia.

K<sub>B</sub>: constante de Steffan – Boltzman [5.67\*10<sup>-8</sup> (W/m<sup>2</sup>K<sup>4</sup>)].

k<sub>ap</sub>: constante de reacción (mol/gcat-h atm<sup>9.52</sup>)

L: longitud de los tubos y de la carcaza (c), (m).

L<sub>B</sub>: distancia entre los baffles adyacentes (m).

M<sub>i</sub>: masa molecular de los componentes puros (g/mol).

MLDT: media logarítmica de la diferencia de temperatura (°C).

m: masa de los gases (G) y de la mezcla de Bioetanol – Agua (m) (kg/h).

N: potencia de instalación, de arranque (a) y útil (útil) (kW).

n: velocidad de rotación del rodete (r.p.s).

np: número de pases.

N<sub>A</sub>: flujo molar de etanol (kmol/s)

N<sub>B</sub>: número de baffles.

N<sub>t</sub>: número de tubos.

Nu: número de Nusselt.

P presión de succión de la bomba (s), de vapor de la mezcla (v), en la superficie del liquido (1) y en la entrada del vaporizador (2) (Pa).

P: presión del sistema (kPa o lb/ft<sup>2</sup>).

p: presión parcial de agua (A) y de etanol (E) (atm).

P<sub>c</sub>: potencia de la celda (W).

P<sub>cm</sub>: presión crítica de la mezcla (kPa).

Pr: número de Prandtl.

Pt: paso entre los tubos (plg).

Q: flujo volumetrico de agua (A), mezcla agua – etanol (ae) y de etanol (E) (m<sup>3</sup>/h).

Q: calor necesario en el calentador (c) y en el vaporizador (v) (kJ/h).

Qcr: calor transferido por radiación + convección (W).

r (z,i): velocidad de la reacción (i) en la posición (z).

r<sub>1</sub>: velocidad de reacción (mol/gcat-h)

r<sub>2,3</sub>: velocidad de reacción (kmol/kgcat-s).

R: constante universal de los gases.

Rae: relación molar agua – etanol.

Rd: coeficiente de obstrucción interior (i) y exterior (o) (m<sup>2</sup>°C/W).

Re: número de Reynolds.

Re<sub>m</sub>: criterio de Reynolds modificado.

S<sub>H</sub>: selectividad del catalizador por el hidrógeno.

Sm: área de flujo por la concha (m<sup>2</sup>).

SNP: succión neta positiva.

T: temperatura del medio (a), media entre las superficie emisora y receptora (c), de gas (g), de la pared del tubo (p), pseudocrítica de la mezcla (sc), de la mezcla vaporizada (1), de referencia (11), del vapor saturado (1c), del condensado (1f), de los gases de combustión calientes (1G), de la mezcla caliente (2), de calculo (12), de los vapores de de la mezcla bioetanol – agua (2c), de alimentación de la mezcla bioetanol – agua (2f), de los gases fríos (2G), (°C).

t<sub>R</sub>: tiempo de retención (h).

U: coeficiente total de transferencia de calor (D), para la coraza (C0) para tubos (0), (kJ/m<sup>2</sup>°C h).

V: velocidad de succión de la bomba (s), a la altura del líquido en el tanque (1), a la entrada del vaporizador (2), (m/s).

V: voltaje de la pila, de la celda (c) e ideal de la pila (i) (V).

V: volumen del líquido en el tanque (L) y total del tanque (T), (m<sup>3</sup>).

V<sub>r</sub>: velocidad de trabajo (m/s)

W: flujo másico de vapor (kg/s).

w: velocidad circunferencial del borde del rotor (3.8 – 16 m/s para μ < 0.1 Pa-s).

x: espesor de los tubos (m).

Y<sub>H<sub>2</sub></sub>: rendimiento a hidrógeno.

y<sub>i</sub>: fracción mole del compuesto i.

Y<sub>product</sub>: rendimiento.

z: longitud del tubo (ft).

Z: nivel de succión de la bomba (s), del liquido en el recipiente (1) y a la entrada del vaporizador (2).

**Símbolos griegos:**

$\alpha(j,i)$ : coeficiente estequiométrico de la especie (j) en la reacción (i).

$\alpha$ : factor de corrección de Energía Cinética.

$\beta_i$ ,  $\Phi_i$ ,  $f_i$ : números adimensionales

$\epsilon$ : porosidad.

$\zeta$ : eficiencia del motor.

$\eta$ : Factor de efectividad.

$\eta_{\text{celda}}$ : eficiencia de la celda (%).

$\theta$ : tiempo de residencia (g-min/cc).

$\lambda$ : calor latente de cambio de fase del componente puro (i) y de la mezcla (m), (kJ/kg).

$\mu$ : viscosidad de la mezcla (m), del vapor tecnológico (v), de los gases de combustión (G) a la temperatura media, a la temperatura de trabajo (b) y a la temperatura de la pared (w) (Pa-s).

$\rho$ : densidad de los gases de combustión (G), de la mezcla (m), del vapor tecnológico (v), de referencia a T y P dadas (11) y de calculo (12) (Kg/m<sup>3</sup>).

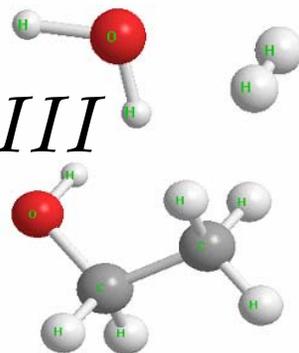
**Otros:**

$\Delta H_r$  (i): calor de reacción (i).

$\Delta T$ : diferencia de temperatura que experimenta la mezcla de bioetanol – Agua (°C).

$\Delta P$ : caída de presión en la carcaza (carcaza) y en los tubos (tubos) (atm).

# Capítulo III



En el presente capítulo se detallan los aspectos relacionados a la simulación del proceso global integrando todas las etapas diseñadas con anterioridad. Este proceder permite apropiarse al ingeniero de una idea más general de la problemática abordada. Los objetivos fundamentales que se persiguen son:

- Analizar la operación de la planta para el estado estacionario.
- Realizar un estudio de sensibilidad para las variables fundamentales del proceso (Relación entre reactantes, Temperatura de reacción).
- Describir los perfiles internos del reactor (Concentración, Temperatura) para las condiciones exploradas.
- Estimar los costos del proceso.

El software profesional Hysys 3.2, el cual forma parte de las técnicas más avanzadas en la simulación de procesos químicos fue la herramienta empleada para dar cumplimiento a los objetivos destacados anteriormente. Dicho programa puede ser empleado en problemas de diseño por medio de la interacción usuario-software, sin embargo sus principales potencialidades radican en la simulación propiamente dicha. Además su empleo permite corroborar la exactitud de los métodos de diseño empleados.

### **3.5 Consideraciones tomadas para la simulación.**

El software Hysys toma en consideración varios aspectos en cada equipo del sistema para obtener Gas de Síntesis, las cuales pueden desviarnos en parte del comportamiento real, sin dejar de proveer una idea general y de gran utilidad en relación a los fenómenos que toman lugar. A continuación se detallan las consideraciones generales tomadas en cada equipo.

#### **3.5.1 Mezclador.**

La operación de mezclado de dos o más corrientes se lleva a cabo por medio de la solución de los balances de masa y energía para el sistema en cuestión. Las propiedades de la corriente de productos (temperatura, presión, composición) son determinadas partiendo de las características de los fluidos alimentados. En el caso

en que se tenga toda la información referente a las corrientes alimentadas los grados de libertad son cero y por tanto el problema converge totalmente. Esta función puede ser muy útil pues toma en consideración los efectos de mezclado en aplicaciones de mayor complejidad donde se carezca de amplia información de la situación problemática.

### **3.5.2 Intercambiadores de Calor.**

Para el vaporizador y calentador el cálculo se basa en el balance de energía, donde el fluido caliente suministra la energía necesaria para elevar la temperatura de la corriente fría:

$$Q_g = Q_c \quad (3.1)$$

El Calor en los Intercambiadores de Calor se define también como la relación existente entre el coeficiente total de transferencia de calor (U), el área disponible para el intercambio del calor (A) y la diferencia de temperatura verdadera (MLDT · Ft):

$$Q = U \cdot A \cdot \text{MLDT} \cdot \text{Ft} \quad (3.2)$$

Para estos equipos el Hysys brinda varios métodos de solución, siendo los fundamentales:

- **Método del punto final (Exchanger Design End Point).**

El modelo Endpoint se basa en el cálculo del calor por la Ecuación 3.2, partiendo de las siguientes consideraciones:

- El coeficiente total de transferencia de calor es constante (U).
- Los calores específicos de los flujos que van por la carcasa y por los tubos son constantes.

Este modelo considera las curvas de calor por ambos lados del Intercambiador como funciones lineales, es decir no hay cambio de fase de ningún fluido y el calor específico (Cp) es relativamente constante. Este punto lo invalida para la aplicación que se persigue en el caso del vaporizador donde los fluidos se evaporan 100% o sea existe cambio de fase interno.

• **Método Ponderado (Exchanger Design Weighted).**

Es un método estupendo para lidiar con problemas no lineales. Con el cual las curvas de calor se dividen en intervalos para los cuales se resuelven los balances de energía y toman en cuenta:

- El cambio de fase de los componentes que conforman los flujos (de tomar lugar), ya sea en un lado del Intercambiador de Calor o en ambos.
- Una MLDT y un coeficiente de transferencia de calor por intervalos y se considera que el total es la suma de estos.

Este modelo solo se puede aplicar a Intercambiadores de Calor con flujos a contra corriente y se basa esencialmente en los modelos del balance de masa y energía tradicionales descritos por Kern, D. (1999), Holman, J.P. (1999) y TEMA, (1999).

**3.5.3 Reformador de Bioetanol.**

Consideraciones Generales:

- Se considera que el reactor tubular consiste en un banco de tubos.
- El campo de flujo se modela según un flujo en pistón ideal, lo que implica que la corriente es radialmente isotrópica (sin gradientes de masa ni energía).
- Como los reactantes fluyen en sentido de la longitud del reactor, son consumidos constantemente y habrá una variación axial en la concentración.
- La velocidad de reacción esta en función de la concentración y varía axialmente (excepto para reacciones de orden cero).

Para obtener la solución del reactor (los perfiles axiales de composiciones, la temperatura, etc.) este es dividido en varios subvolumen y se considera que la velocidad de la reacción es espacialmente uniforme dentro de cada subvolumen. Un balance molar en cada subvolumen (j) queda:

$$F_{j0} - F_j + \int_V r_j dV = \frac{dN_j}{dt} \quad (3.3)$$

***Capítulo III Simulación y Estimación de los costos del Proceso.***

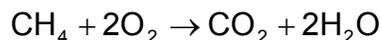
Como se considera la velocidad de reacción uniforme en cada uno de los subvolumenes, el tercer término se reduce a  $r_j V$ , y asumiendo estado estacionario la ecuación del balance toma la siguiente forma:

$$F_j = F_{j0} - r_j V \quad (3.4)$$

Dicha expresión, es el objetivo fundamental de solución perseguido por el programa, el cual fue solucionado en conjunto con las expresiones de velocidad deducidas en el Capítulo II del presente documento. Además los efectos de presión y energía son resueltos mediante la ecuación de Ergun y empleando las especificaciones del software propiamente dicho.

### **3.5.4 Horno.**

El reactor de conversión se representa como un equipo en el que se desarrollan reacciones de conversión únicamente. Las reacciones empleadas son predefinidas en función de las sustancias que se empleen como combustibles y partiendo de las relaciones estequiométricas entre dicho combustible y el aire. En el presente trabajo se emplea CH<sub>4</sub> como sustancia combustible para el cual se asume un 100% de conversión a través de la siguiente ecuación estequiométrica:



Los resultados obtenidos se corroboran con los datos reportados por Yunus, A.C. et al., (1994), y el flujo gaseoso obtenido tiene una composición mostrada en la Tabla 3.1.

**Tabla 3.1.** Composición de los gases de Combustión.

<b>Componente</b>	<b>Fracción mol</b>
Dióxido de Carbono	0.095
Agua	0.19
Nitrógeno	0.715

### **3.6 Simulación del proceso.**

En la simulación se estudian de forma múltiple cómo las variaciones de algunas condiciones de operación pueden influir sobre el proceso en general.

Las variaciones impuestas se encuentran en la Tabla 3.2, así como las variables en estudio.

**Tabla 3.2.** Variaciones impuestas para la simulación.

Variable	Rango	Parámetros a Determinar
R <sub>AE</sub>	3 – 6	Q <sub>Vap</sub> , Q <sub>Cal</sub> , Q <sub>Ref</sub> . ((kJ/h) Rendimiento a H <sub>2</sub> , Conversión de etanol Fracción mol en el Gas de Síntesis
Temperatura (° C) (Entrada al reformador)	400 - 600	Q <sub>Vap</sub> , Q <sub>Cal</sub> , Q <sub>Ref</sub> . ((kJ/h) Rendimiento a H <sub>2</sub> , Conversión de etanol Fracción mol en el Gas de Síntesis

En el Anexo 3.1 se encuentran los perfiles de composición dentro del reactor para las variaciones realizadas.

### 3.6.1 Resultados para variaciones de R<sub>AE</sub>.

En la Tabla 3.3 y Figura 3.1 (a y b) se encuentran los resultados para la variación de R<sub>AE</sub>.

**Tabla 3.3.** Resultados de la simulación del proceso para variaciones de R<sub>AE</sub>.

Rae	3	3.5	4	4.5	5	5.5	6
Q <sub>Vap</sub> .	7.24 · 10 <sup>5</sup>	8.1 · 10 <sup>5</sup>	9.04 · 10 <sup>5</sup>	9.95 · 10 <sup>5</sup>	1.08 · 10 <sup>6</sup>	1.17 · 10 <sup>6</sup>	1.27 · 10 <sup>6</sup>
Q <sub>Cal</sub> .	2.89 · 10 <sup>5</sup>	3.79 · 10 <sup>5</sup>	4.08 · 10 <sup>5</sup>	4.34 · 10 <sup>5</sup>	4.49 · 10 <sup>5</sup>	4.89 · 10 <sup>5</sup>	5.17 · 10 <sup>5</sup>
Q <sub>Ref</sub> .	1.05 · 10 <sup>5</sup>	1.14 · 10 <sup>5</sup>	1.23 · 10 <sup>5</sup>	1.32 · 10 <sup>5</sup>	1.36 · 10 <sup>5</sup>	1.44 · 10 <sup>5</sup>	1.53 · 10 <sup>5</sup>
Rend.	2.09	2.3	2.5	2.7	2.85	3.03	3.21
EtOH	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> O	0.4337	0.4389	0.4438	0.4487	0.4536	0.4609	0.4645
CH <sub>4</sub>	0.0514	0.0535	0.0553	0.0572	0.0599	0.0619	0.0633
CO <sub>2</sub>	0.1102	0.1083	0.1064	0.1044	0.1010	0.0999	0.0983
CO	0.0076	0.0087	0.0098	0.0110	0.0122	0.0136	0.0149
H <sub>2</sub>	0.3457	0.3397	0.3340	0.3284	0.3172	0.3144	0.3101

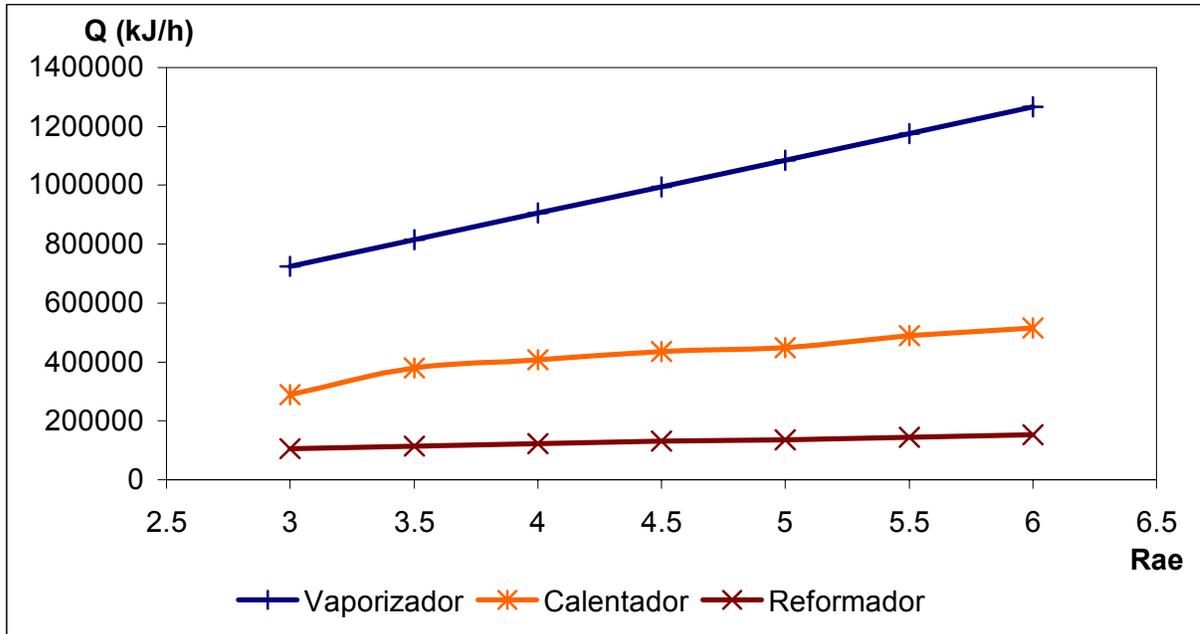


Figura 3.1 (a). Comportamiento de los calores intercambiados en el Vaporizador, Calentador y Reformador con la variación de la  $R_{AE}$ .

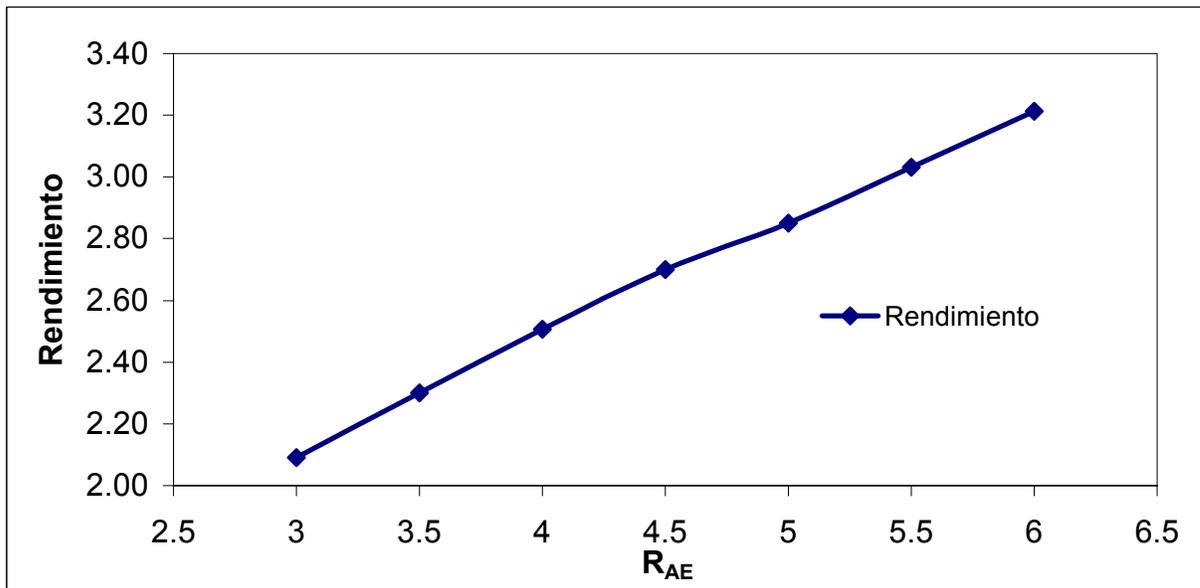


Figura 3.1 (b). Comportamiento del rendimiento a Hidrógeno con la variación de la  $R_{AE}$ .

Con la variación de la  $R_{AE}$  y manteniendo los otros parámetros constantes se puede concluir que:

1. Un aumento de la  $R_{AE}$  trae consigo un aumento en los calores intercambiados en el vaporizador y calentador, así como un aumento en el calor necesario para mantener la operación isotérmica en el reformador (Figura 3.1 (a)).

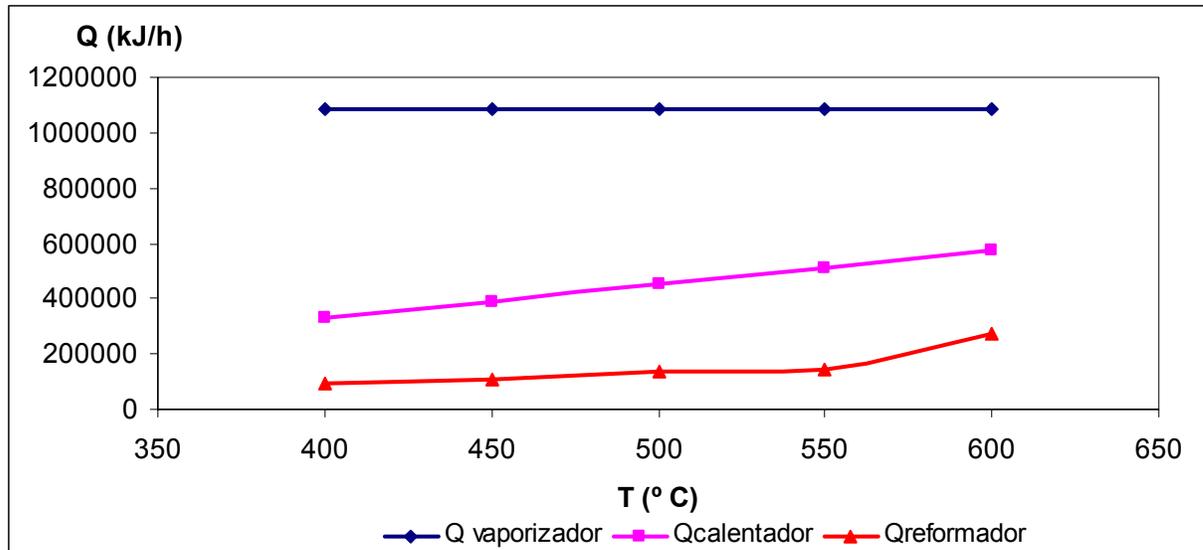
- En el Vaporizador el aumento del calor intercambiado se debe a que el calor latente de cambio de fase de mezcla se incrementa, pues esta se está enriqueciendo con el componente menos volátil (agua), además el flujo total es mayor.
- En el Calentador el incremento del calor necesario para calentar la mezcla se debe a que el flujo de alimentación aumenta y por ende se necesita más calor para que se mantenga la temperatura de salida (500 °C).
- En el Reformador la necesidad de calor es cada vez mayor pues el flujo de reactantes a tratar es proporcional a la cantidad de agua y como es lógico si esta se incrementa provocará un aumento en las necesidades de calor para la etapa. Por otra parte esto trae un efecto directo en el rendimiento final a hidrógeno (Figura 3.1 (b)) pues la molécula de agua aporta átomos al producto final.

### **3.6.2 Resultados para variaciones de la temperatura de la mezcla de alimentación al reformador.**

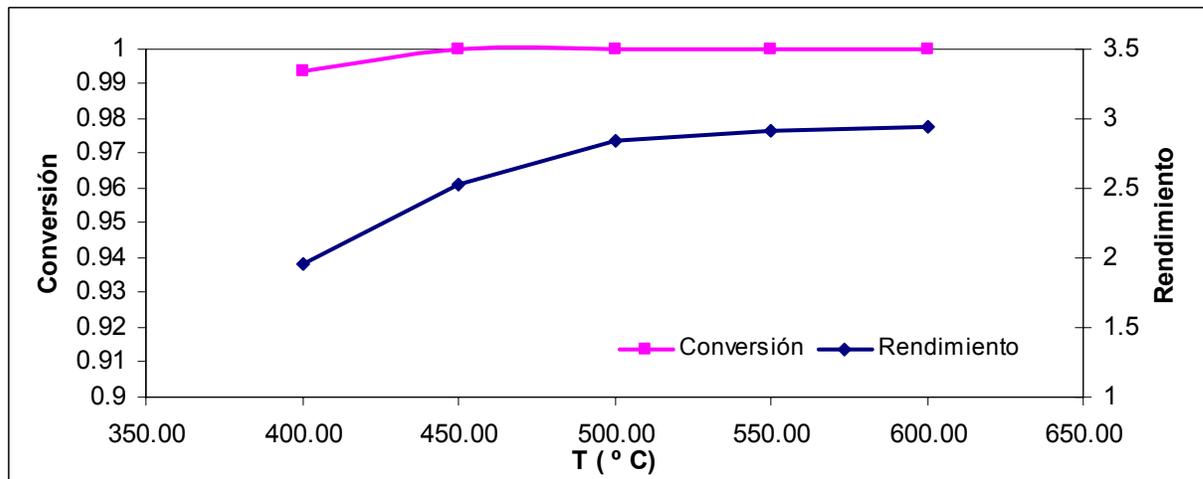
Variando la temperatura de la mezcla etanol – agua a la entrada del reformador y para  $R_{AE} = 5$  se obtienen los resultados que se muestran en la Tabla 3.4 y Figura 3.2 (a y b).

**Tabla 3.4.** Resultados de la simulación del proceso para variaciones en la temperatura de alimentación de la mezcla etanol – agua a la entrada del reformador.

<b>T<sub>reformador</sub></b>	<b>400</b>	<b>450</b>	<b>500</b>	<b>550</b>	<b>600</b>
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	0.00071566	0.00000055	0	0	0
H <sub>2</sub> O	0.5414	0.4962	0.4536	0.4566	0.3740
CH <sub>4</sub>	0.0921	0.0755	0.0599	0.0603	0.0152
CO <sub>2</sub>	0.0613	0.0856	0.1010	0.0102	0.1147
CO	0.0475	0.0233	0.0122	0.0123	0.0147
H <sub>2</sub>	0.2219	0.2736	0.3172	0.3192	0.4198
Rendimiento	1.96	2.53	2.85	2.92	2.95
Q <sub>vaporizador</sub>	1.08 · 10 <sup>6</sup>				
Q <sub>calentador</sub>	3.3 · 10 <sup>5</sup>	3.86 · 10 <sup>5</sup>	4.49 · 10 <sup>5</sup>	5.09 · 10 <sup>5</sup>	5.73 · 10 <sup>5</sup>
Q <sub>reformador</sub>	0.92 · 10 <sup>5</sup>	1.05 · 10 <sup>5</sup>	1.36 · 10 <sup>5</sup>	1.41 · 10 <sup>5</sup>	2.72 · 10 <sup>5</sup>



**Figura 3.2 (a).** Comportamiento de los calores intercambiados en el Vaporizador, Calentador y Reformador con la variación de la temperatura de alimentación de la mezcla etanol – agua a la entrada del reformador.



**Figura 3.2 (b).** Comportamiento del rendimiento a  $H_2$  y conversión de etanol con la variación de la temperatura de alimentación de la mezcla etanol – agua a la entrada del reformador.

Con la variación de la temperatura de la mezcla etanol – agua a la entrada del reformador y manteniendo los otros parámetros constantes se puede concluir que:

1. Cuando aumenta la temperatura de alimentación al reformador, no se afecta el calor necesario en la vaporización (Figura 3.2 (a)), debido a que el objetivo de esta operación es llevar la mezcla hasta la temperatura de ebullición y esta solo depende de la  $R_{AE}$ .

2. Cuando aumenta la temperatura de alimentación al reformador, aumenta el calor necesario en las operaciones de calentamiento y reformación (Figura 3.2 (a)).
  - a. En el Calentador, el aumento del calor intercambiado se debe a que la diferencia de temperatura de la mezcla de alimentación es mayor a medida que se quiera una mayor temperatura a la entrada del reformador.
  - b. En el reformador el aumento de la temperatura de alimentación de la mezcla, provoca un mayor consumo de calor para mantener la aproximación realizada ( $T_0 = T_f$ ); debido a que al aumentar la temperatura, hay un mayor consumo de reactantes por el carácter endotérmico de las reacciones y por ende se necesita un flujo de calor mayor.
3. A medida que aumenta la temperatura de la mezcla de alimentación, aumenta la conversión de etanol y el rendimiento a hidrógeno (Figura 3.2 (b)), debido a que los reactantes son consumidos a una mayor velocidad, provocado por el carácter endotérmico de las reacciones.

### **3.7 Comportamiento interior del reactor.**

A través de la solución de los balances de masa y energía en el interior del reformador, se pueden obtener los perfiles de temperatura, fracción mol de los compuestos a la salida y el comportamiento de la presión en el reactor (Tabla 3.5).

**Tabla 3.5.** Comportamiento en el interior del reactor.

<b>L (m)</b>	<b>CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>CO<sub>2</sub></b>	<b>CO</b>	<b>H<sub>2</sub></b>	<b>T (°C)</b>	<b>P (kPa)</b>
0.00	2.22	11.10	0.00	0.00	0.00	0.00	500.00	101.33
0.04	1.15	10.72	0.88	0.27	0.92	1.84	396.75	99.77
0.13	0.73	10.61	1.24	0.40	1.19	2.49	373.72	98.55
0.22	0.47	10.53	1.46	0.52	1.28	2.90	367.84	97.32
0.31	0.29	10.45	1.61	0.65	1.28	3.23	368.92	96.09
0.39	0.16	10.37	1.69	0.78	1.23	3.52	373.79	94.87
0.48	0.08	10.28	1.73	0.91	1.13	3.78	381.15	93.64
0.57	0.03	10.18	1.73	1.05	1.01	4.03	390.27	92.42
0.65	0.01	10.07	1.69	1.18	0.88	4.27	400.67	91.19

Capítulo III Simulación y Estimación de los costos del Proceso.

0.74	0.00	9.96	1.65	1.30	0.76	4.50	411.89	89.96
0.83	0.00	9.85	1.59	1.41	0.66	4.73	423.43	88.74
0.92	0.00	9.74	1.54	1.50	0.58	4.94	434.78	87.51
1.00	0.00	9.64	1.49	1.59	0.51	5.14	445.47	86.29
1.09	0.00	9.55	1.45	1.66	0.45	5.32	455.25	85.06
1.18	0.00	9.46	1.40	1.73	0.41	5.50	463.96	83.83
1.27	0.00	9.38	1.36	1.79	0.37	5.67	471.64	82.61
1.35	0.00	9.30	1.32	1.84	0.34	5.82	478.46	81.38
1.44	0.00	9.23	1.28	1.89	0.31	5.97	484.54	80.16
1.53	0.00	9.16	1.25	1.94	0.28	6.11	490.07	78.93
1.62	0.00	9.10	1.22	1.98	0.26	6.22	495.20	77.70
1.70	0.00	9.05	1.19	2.02	0.24	6.33	500	76.48

En la Figura 3.3 se puede observar como a la entrada del reactor hay una caída de temperatura considerable de 500 a 396 ° C, ya que la reacción ocurre rápidamente y por tanto consume gran cantidad de energía, debido al carácter endotérmico de la misma. Con el avance de la reacción, esta se hace más lenta y por tanto los requerimientos energéticos logran aproximar la operación a una temperatura de 500 ° C. Se sigue el comportamiento de la presión en el interior del reactor y se puede comprobar que hay una caída de esta a través de la cama catalítica la cual es consecuente con la aproximación hecha en la simulación (comportamiento lineal y respuesta según Ergun).

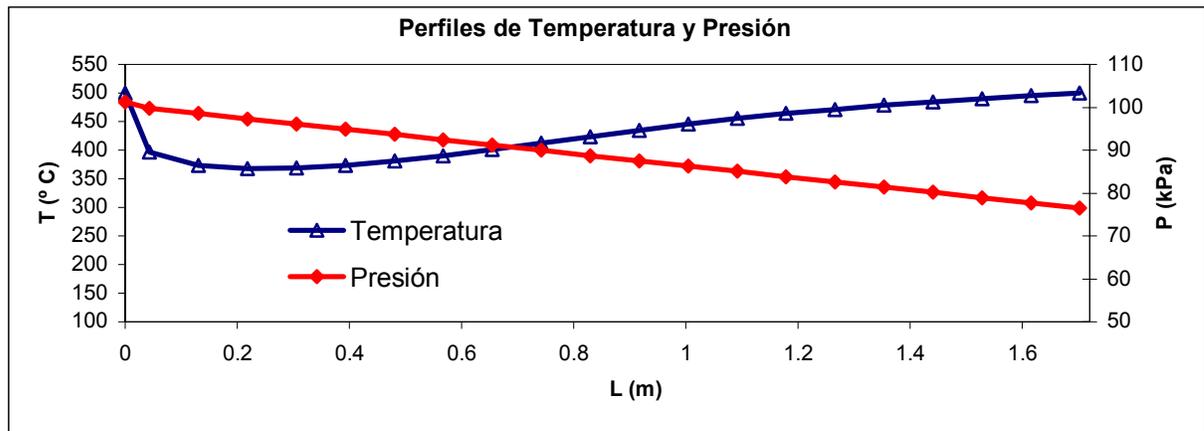


Figura 3.3. Comportamiento de la temperatura y presión en el interior del reactor.

El comportamiento interior de los perfiles de cada compuesto (Figura 3.4) demuestran la veracidad del sistema de reacción propuesto en el Capítulo II, donde a medida que avanza la reacción se consume el etanol y se comienza a producir hidrógeno y compuestos intermedios como el metano y monóxido de carbono (reacción I). A las condiciones dadas ( $T = 500\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $R_{AE} = 5$ ) estos compuestos intermedios comienzan a consumirse, debido a que ocurre la reformación de metano (reacciones III y IV) y la reacción de WGSR (reacción II) produciendo dióxido de carbono.

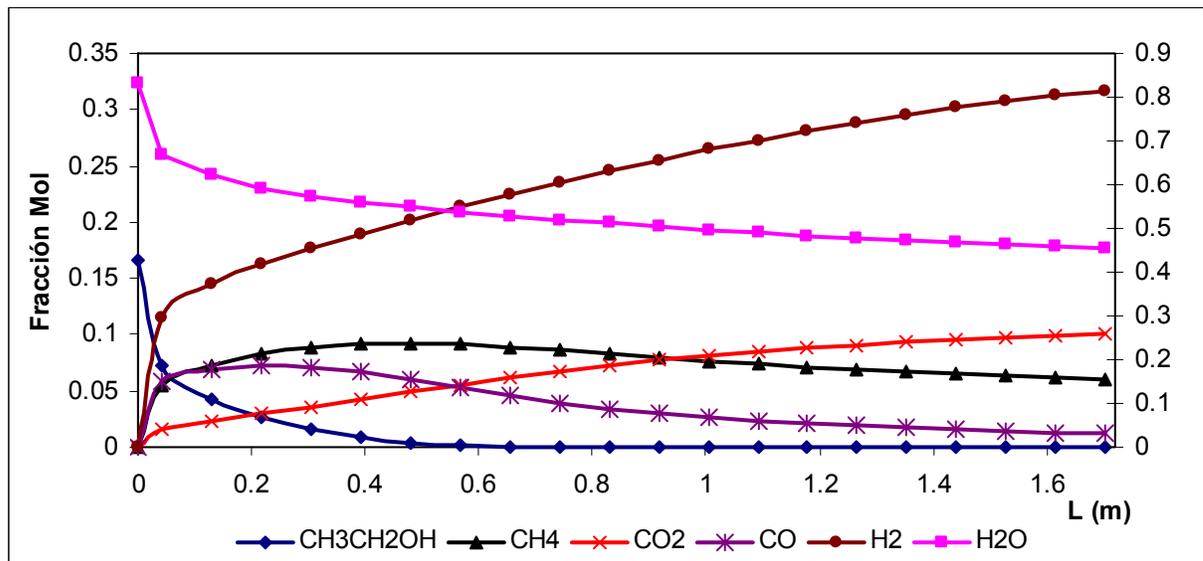


Figura 3.4. Perfiles interiores de los compuestos en el reformador.

### 3.8 Estimación de los costos.

En este proyecto se persigue evaluar cómo se comportan algunos indicadores económicos para de esta forma tener una visión sobre el proceso y su aplicabilidad en nuestro país.

#### 3.8.1 Capital Total Invertido (CTI).

Para la estimación del CTI Peters, M. et al., (2003), propone el Método C o Método del porcentaje de costo de compra de los equipos. Este método requiere del conocimiento del costo de adquisición de los equipos (CA). Los elementos incluidos en el costo directo total de la Planta se estiman como un por ciento del CA.

***Capítulo III Simulación y Estimación de los costos del Proceso.***

Los componentes adicionales del costo invertido se basan en porcentajes promedios del Costo Directo de la Planta (CDP), Costo Indirecto (CI) y capital total invertido (CTI). La ecuación 6.4 del Peters, M. et al., (2003) resume todo lo expuesto anteriormente:

$$C_n = \sum(E + f_1 \cdot E + f_2 \cdot E + \dots + f_n \cdot E) = E \cdot \sum(1 + f_1 + f_2 + \dots + f_n) \quad (3.5)$$

Donde  $f_1$ ,  $f_2$  y  $f_n$  son factores de multiplicación para costos de tuberías, eléctricos, indirectos, etcétera. Los factores empleados para realizar una estimación deben determinarse sobre la base del tipo proceso en que se trabaja, complejidad del diseño, materiales utilizados, localización de la Planta, experiencias y otros elementos que dependen del problema en cuestión. Valores promedios de estos porcentajes se presentan en la Tabla 6.9 del Peters, M. et al., (2003).

Este tipo de estimación es comúnmente empleado para estudios preliminares. Rinden mejores resultados cuando se aplican en proyectos de configuración semejante y para plantas de capacidades similares, encontrándose un error del 30 al 50% aproximadamente.

En la Tabla 3.6 se encuentran los porcentajes utilizados para la estimación de los costos para la Planta.

**Tabla 3.6.** Porcentajes para la estimación del Costo Total Invertido.

<b>Aspecto</b>	<b>Porcentaje</b>	<b>Costo (\$)</b>
Costo de adquisición (CA)	X	619689.7
Costo de Instalación	0.20X	123937.9
Instrumentación y control	0.15 X	92953.46
Tuberías	0.25 X	154922.4
Sistema Eléctrico	0.08 X	49575.18
Edificios	0.10 X	61968.97
Jardinería	0.05 X	30984.49
Facilidad de Servicios	0.50 X	309844.9
<b>Costos Total Directo (CTD)</b>	<b>2.33 X</b>	<b>1443877</b>
Ingeniería y Supervisión	0.1 X	61968.97
Gastos de Construcción	0.2 X	123937.9

***Capítulo III Simulación y Estimación de los costos del Proceso.***

Gastos Legales	0.04 X	24787.59
Contrataciones	0.15 X	92953.46
Contingencias	0.22 X	136331.7
<b>Costo Total Indirecto (CT<sub>Ind</sub>)</b>	<b>0.71 X</b>	<b>439979.7</b>
<b>Capital Fijo Invertido (CFI)</b>	3.04 X	1883857
<b>Capital de Trabajo (CT)</b>	0.89 X	551523.8
<b>Capital Total Invertido (CTI)</b>	<b>3.93 X</b>	<b>2435381</b>

El Capital Total Invertido (CTI) es calculado como:

$$CTI = CT + CFI \quad (3.6)$$

$$CFI = CTD + CT_{Ind} \quad (3.7)$$

Los costos de adquisición de los equipos se determinaron utilizando los modelos encontrados por Albernas, Y. (2005), basándose en los criterios planteados por Peters, M. et al. (2003).

Para los Intercambiadores de Calor (Vaporizador y Calentador) se basa en la Figura 14.20:

$$C_{Adq} = (5.5818 \cdot A_{TC} + 9760.1) \cdot C_d \cdot C_L \cdot C_p \cdot C_m \quad (3.8)$$

Este modelo es bastante efectivo pues tiene en consideración la corrección del efecto del diámetro ( $C_d$ ), de la longitud ( $C_L$ ), de la presión ( $C_p$ ) y del material de construcción ( $C_m$ ).

Para  $C_d$  Figura 14.21.

$$C_d = 661.11 \cdot D_i^2 - 13.907 \cdot D_i + 0.9335 \quad (3.9)$$

Para  $C_L$  Figura 14.22.

$$C_L = -0.009 \cdot L^3 + 0.1522 \cdot L^2 - 0.8739 \cdot L + 2.7025 \quad (3.10)$$

Para  $C_p$  Figura 14.23.

$$C_p = -3 \cdot 10^{-6} \cdot P^3 + 0.0004 \cdot P^2 + 0.0035 \cdot P + 0.9079 \quad (3.11)$$

Para  $C_m$  Figura 14.24.

$$C_m = (1.0521 \cdot A_{TC}^{0.149}) \frac{5}{2.2} \quad (3.12)$$

Para el horno se basa en la Figura 14.37:

$$C_{AdqH} = 1.2637 \cdot kW + 5385.6 \quad (3.13)$$

Para estimar el costo de adquisición del reformador se toma en consideración la analogía existente entre él y un intercambiador de calor de tubos y concha, teniendo en cuenta el costo del catalizador (Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>).

El costo del Tanque de Agitación se encuentra un en la Figura 12.52 del Peters, M. et al., (2003).

La depreciación de los equipos (D) se calcula según lo planteado por Peters, M. et al., (2003) y una vida útil de 20 años:

$$D = \frac{Co - Cf}{V_{\text{útil}}} \quad (3.14)$$

En la Tabla 3.7 se encuentran los resultados de los costos de adquisición y de la depreciación.

**Tabla 3.7.** Costo de adquisición de los diferentes equipos.

<b>Equipo</b>	<b>Costo actual (\$)</b>	<b>Depreciación (\$/a)</b>
Tanque Agitado	5760.00	288.00
Vaporizador	37091.66	1854.58
Calentador	52206.39	2610.32
Reformador	118807.55	5940.38
Horno	5824.10	291.21
Celda de Combustible	400000.00	20000.00
<b>Total</b>	<b>619689.70</b>	<b>30984.49</b>

### **3.8.2 Costo Total de Producción (CTP).**

El CTP se calcula a través de los criterios expuestos por Peters, M. et al., (2003) y los datos que se encuentran en la Tabla 3.8.

$$CTP = CD + CF + CI + GG \quad (3.15)$$

CI = 5 % CTP

(3.16)

**Tabla 3.8.** Datos necesarios para el cálculo del CD.

Datos	Valor	Unid.
Precio del etanol (17%mol)	53.68	\$/m <sup>3</sup>
Precio del Metano	0.26	\$/m <sup>3</sup>
Precio del Agua	8	\$/m <sup>3</sup>
Flujo de etanol	539.76	m <sup>3</sup> /a
Flujo de metano	249.6	m <sup>3</sup> /a
Flujo de agua	841.92	m <sup>3</sup> /a
Tiempo de operación	8	h
Días de trabajo en el año	300	días
Salario básico del operario	9.62	\$/8h
Número de operarios	3	-----
Precio de la Celda	2000	\$/kW
Potencia Celda	200	kW /h

Los CD (Tabla 3.9), CF (Tabla 3.10) y GG (Tabla 3.11) se calculan de acuerdo a lo expuesto por Peters, M. et al., (2003).

**Tabla 3.9.** Costos Directos (CD).

Aspecto	%	Costo (\$/a)
Materia prima	---	35776.85
Mano obra	---	69264.00
Mantenimiento	2 % CTI	48707.61
Supervisión	10% CTP	31346.54
Requerimientos del Proceso	0.5 % CTI	12176.90267

**Tabla 3.10.** Cargos fijos (CF).

Aspecto	%	Costo (\$/a)
Depreciación	---	30984.49
Impuestos	1% CFI	18838.57
Seguro	0.4 % CFI	7535.43

**Tabla 3.11.** Gastos Generales (GG).

Aspecto	%	Costo (\$/a)
Admón.	2 % CTP	6269.31
Dist. venta	2 % CTP	6269.31
Investigación. y Desarrollo	2 % CTP	6269.31
Financiamiento	1 % CTI	24353.81

En la **Tabla 3.12** se encuentran los resultados del análisis del CTP.

**Tabla 3.12.** Resultados del análisis del CTP.

Aspecto	Valor (\$/a)
Costos Directos (CD)	197271.90
Cargos Fijos (CF)	57358.48
Costos Indirectos (CI = 5 % CTP)	33055.86
Gastos Generales (GG)	15673.27
<b>Costo Total de Producción (CTP)</b>	<b>313465.371</b>

### 3.8.3 Valor de la Producción (VP) y Ganancia unitaria (G).

El Valor de la Producción viene dado por la siguiente ecuación:

$$VP = P_{\text{venta}} \cdot P \quad (3.17)$$

Donde el  $P_{\text{venta}}$  es  $0.09 \frac{\$}{\text{kW}}$  y la potencia generada (P) es  $480000 \text{ kW/a}$

Por lo que:

$$VP = 43200 \frac{\$}{\text{a}}$$

El costo unitario de la electricidad se calcula como:

$$CU = \frac{CTP}{P} \quad (3.18)$$

$$CU = \frac{313465.37 \frac{\$}{\text{a}}}{480000 \text{ kW/a}}$$

$$CU = 0.65 \frac{\$}{\text{kW}}$$

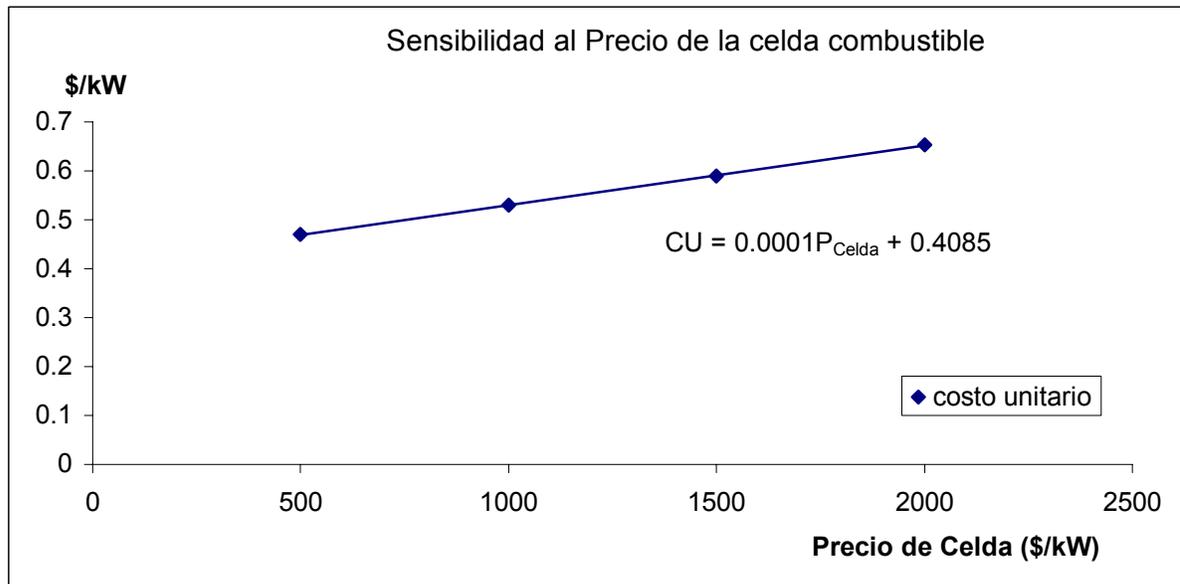
La ganancia unitaria viene dada por la Ecuación 3.19:

$$G = (P_{\text{venta}} - CU) P_c \quad (3.19)$$

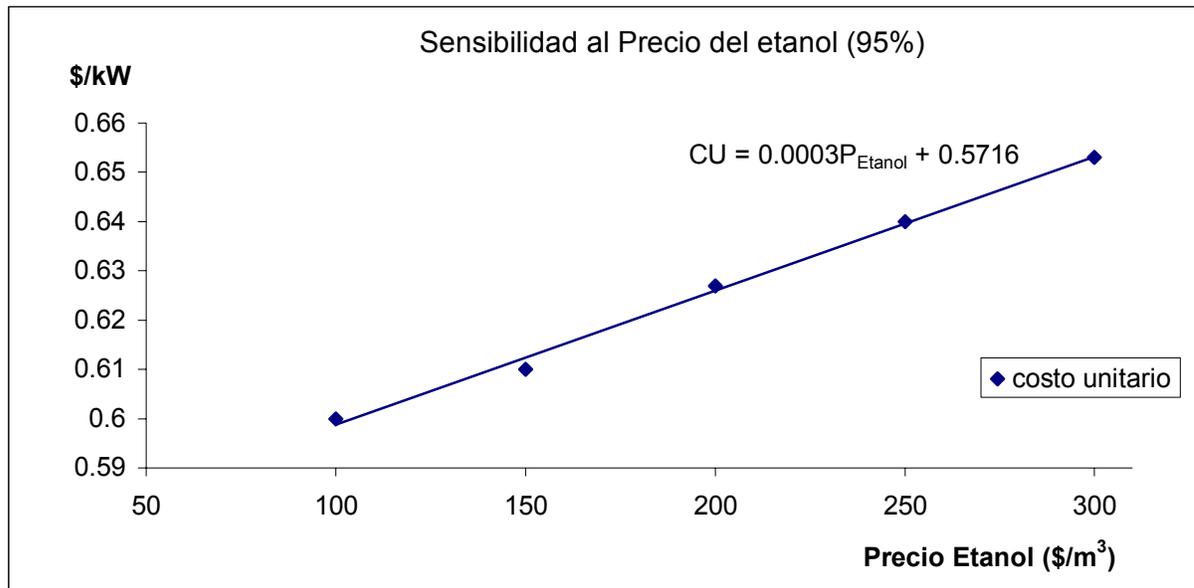
$$G = (0.09 \$/kW - 0.65 \$/kW) \cdot 200kW$$

$$G = -112.61\$$$

Como se puede observar, el proceso de obtención de Gas de Síntesis y su integración con la celda combustible no es rentable económicamente, esto se debe a que el precio de venta de la electricidad (0.09\$/kW) está muy lejos de los valores que se necesitarían alcanzar (0.65\$/kW) para que el proceso fuera rentable. Sin embargo esta es una problemática muy compleja si se analiza desde el punto de vista Cubano, o sea el costo de 0.09\$/kW es totalmente subsidiado por el estado, lo cual tiende a cambiar el próximos años debido a los resultados que se están obteniendo con los estudios realizados a raíz de la revolución energética en que esta inmerso el país en la actualidad. Esto unido a la caída de precios que debe tener el bioetanol cuando se potencie su producción a partir de diferentes materias primas hará que la balance se incline a favor de las nuevas tecnologías, esto ultimo puede corroborarse con un estudio de sensibilidad realizado en el que se evalúa la influencia del precio del etanol y la celda combustible sobre el costo unitario de producción (Figura 3.5 y 3.6). Además, el costo medioambiental de esta tecnología y el reemplazo de los combustibles no renovables, que están en agotamiento, más que justificar impondrán su uso como eslabón fundamental en el desarrollo de la sociedad.



**Figura 3.5.** Sensibilidad del costo unitario al precio de celda.



**Figura 3.6.** Sensibilidad del costo unitario al precio del etanol al 95%.

### **Conclusiones Parciales**

1. Tanto el rendimiento a hidrogeno como el consumo de energía en la etapa de vaporización son funciones fuertemente dependientes de la cantidad de agua empleada en la alimentación ( $R_{AE}$ ), los mejores resultados se exhiben para relaciones comprendidas entre 4.5 y 5.5.
2. El estudio de temperaturas realizado ( $450^{\circ}C < T < 600^{\circ}C$ ), arrojó dos resultados fundamentales; el primero relacionado con el consumo de energía en la etapa de precalentamiento de la mezcla y el segundo relacionado con la cinética de la reacción evidenciándose su beneficio por el incremento exhibido en el rendimiento a hidrogeno (de 1.96 con  $450^{\circ}C$  a 2.945 con  $600^{\circ}C$ ).
3. La evidencia de que la reformación del metano es una reacción fundamental para el proceso es clara cuando se inspecciona el comportamiento interno del reactor (perfiles de concentración).
4. Al realizar el análisis previo de factibilidad de la variante diseñada queda establecida la imposibilidad de su implementación en condiciones económicamente viables (CU: 0.65\$/kW).
5. El precio del bioetanol y la celda combustible son fundamentales en la rentabilidad futura del proceso, esto queda evidenciado por un análisis de sensibilidad donde se evidencia que el costo unitario se comporta como función lineal de estos parámetros:  $CU = 0.0003 \cdot P_{Etanol} + 0.5716$  y  $CU = 0.0001 \cdot P_{Celda} + 0.4085$ .

**Nomenclatura:**

**Símbolos:**

A: área de transferencia de calor ( $m^2$ ).

$A_{TC}$ : área total de transferencia de calor ( $m^2$ ).

C: corrección del efecto del diámetro (d), de la longitud (L), del material (m) y de la presión (p).

C: costo final de los equipos (f) e inicial (o) (\$).

$C_{Adq}$ : costo de adquisición de los Intercambiadores de Calor (\$).

$C_{AdqH}$ : costo de adquisición del horno (\$).

CD: costos directos (\$/a).

CF: cargos fijos (\$/a).

CFI: capital fijo invertido (\$).

CI: costos indirectos (\$/a).

CT: capital de trabajo (\$).

CTD: costo total directo (\$).

CTI: capital total invertido (\$).

$CT_{Ind}$ : costo total indirecto (\$).

CTP: costo total de producción (\$/a).

CU: costo unitario de la electricidad (\$/kW).

D: depreciación (\$/a).

$D_i$ : diámetro interno de los tubos (m).

F: flujo molar (kmol/s).

$F_t$ : factor de corrección de la temperatura.

G: ganancia unitaria (\$).

GG: gastos generales (\$/a).

kW: potencia generada por el horno (kW).

L: longitud de los tubos (m).

MLDT: media logarítmica de la diferencia de temperatura (° C).

P: potencia generada (kW /a).

P: presión de trabajo (atm).

P<sub>c</sub>: potencia de la celda (kW).

P<sub>venta</sub>: precio de venta de la electricidad (\$/kW – h).

Q: calor: necesario en el calentador (cal), reformador (ref), en el vaporizador (vap),  
cedido en el Intercambiador de calor ganado (c), ganado (g) (kJ/h).

R<sub>AE</sub>: relación molar agua – etanol.

r<sub>j</sub>: velocidad de reacción.

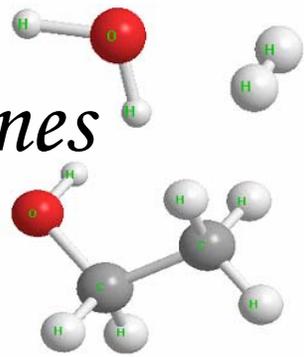
U: coeficiente total de transferencia de calor

V: volumen (m<sup>3</sup>).

VP: valor de la producción (\$/a).

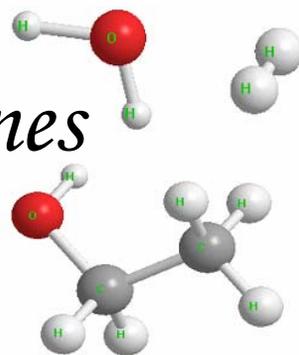
V<sub>útil</sub>: vida útil de los equipos (años).

*Conclusiones*



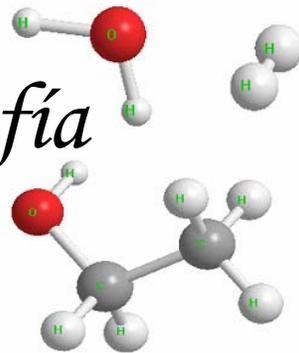
1. La reformación húmeda del Bioetanol es el proceso reformativo con más potencial para producir gas de síntesis a partir de este combustible, con el empleo de catalizadores de Ni, Cu soportados en Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.
2. Los mejores resultados en cuanto a rendimiento y ahorro de etanol se obtienen con un reformador de 150 tubos, de 2 plg de diámetro, empleando pellets de 1 mm y operando a 10<sup>-2</sup> g-min/cm<sup>3</sup>. En todo el rango explorado este prototipo mostró buen comportamiento y estabilidad.
3. Se dimensiona en un 100% el sistema hidráulico principal de la instalación, definiéndose la necesidad de emplear un ventilador centrífugo Modelo CMP-820-2M en la entrada del reformador.
4. El consumo de energía en la etapa de precalentamiento de la mezcla y la cinética de la reacción se benefician fuertemente con el incremento de la temperatura (Rendimiento de 1.96 con 450°C a 2.945 con 600°C).
5. La evidencia de que la reformación del metano es una reacción fundamental para el proceso es clara cuando se inspecciona el comportamiento interno del reactor (perfiles de concentración).
6. Al realizar el análisis previo de factibilidad de la variante diseñada queda establecida la imposibilidad de su implementación en condiciones económicamente viables (CU: 0.65\$/kW).
7. El precio del bioetanol y la celda combustible son fundamentales en la rentabilidad futura del proceso, esto queda evidenciado por un análisis de sensibilidad donde se evidencia que el costo unitario se comporta como función lineal de estos parámetros:  $CU = 0.0003 \cdot P_{\text{Etanol}} + 0.5716$  y  $CU = 0.0001 \cdot P_{\text{Celda}} + 0.4085$ .

# *Recomendaciones*



1. Analizar el sistema integrado Gas de síntesis – Hidrógeno – Celda combustible desde el punto de vista técnico – económico a fin de obtener una idea mas clara del comportamiento general del proceso.
2. Valorar la posibilidad de integración de la tecnología diseñada con un complejo Fábrica de Azúcar – Destilería.
3. Emplear el modelo desarrollado como base de estudio del proceso explorando el sistema dinámicamente, con vistas al diseño del sistema de control del proceso.
4. Validar de forma integral el modelo de planta completa a través de datos piloto, obtenidos en plantas similares.

# *Bibliografía*



1. Ahmed, S. (1998). **“Catalytic Partial Oxidation Reforming of Hydrocarbon Fuels”**. Conference Paper 1998 Fuel Cell Seminar. November 16-19. Palm Springs, California
2. Akande, J.A. (2005). **“Production of Hydrogen by Reforming of crude Ethanol”**. **Department of Chemical Engineering”**. University of Saskatchewan.105 Maintenance Road Saskatoon, Saskatchewan S7N 5C5. Canadá.
3. Albornas, Y. (2005). **“Diseño de Equipos para el Proceso de Reformación de Bioetanol con Vapor”**. Trabajo de Diploma. UCLV.
4. Arteaga, L.E. (2004). **“Estudio Cinético y Termodinámico de la Reformación Húmeda de Bioetanol. Diseño y Aplicaciones de la Operación”**. Trabajo de Diploma. Universidad Central Marta Abreu de las Villas.
5. Castro, F. (17 de noviembre del 2005). **Discurso pronunciado en el acto por el aniversario 60 de su ingreso a la universidad**. Efectuado en el Aula Magna de la Universidad de La Habana.
6. Comas, J. Mariño, F. Laborde, M. Amadeo, N. (2004). **“Reformado de etanol con vapor empleando un catalizador de Cu/Zn/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.”** SBCat, IBP, Anais do 12º Congresso Brasileiro de Catálise.
7. Comas, J. Mariño, F. Laborde, M.A, Amadeo, N. (2004). **“Bio-ethanol steam reforming on Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst”**. Chemical Engineering Journal, 98, 61-68.
8. Fateev, R. Blach, A. Vishnjakov, F. (2003). **“Facilities and Restrictions in the Technology of on Board Hydrogen Production and Purification for Zero Emission Vehicles”**. Paper 01ATT035.
9. Fierro, V. Klouz, V. Mirodatos, C. (2002). **“Oxidative reforming of biomass derived ethanol for hydrogen production in fuel cell applications”**. Catalysis Today 75. Institut de Recherches sur la Catalyse. France.

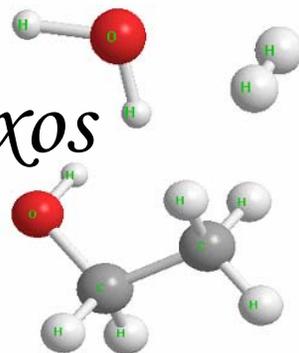
10. Hirschenhofer, J.H. Stauffer, D.B. Engleman, R.R. Klett, M.G. (2002). **"Fuel Cells Handbook"**. EG&G Technical Services, Inc. Science Applications International Corporation.
11. Hubner, P. (2002). **"Research on the Reforming of Ethanol"**. Fraunhofer, Institut Solare Energiesysteme. Brasilia.
12. Kern, D. Q. (1999). **"Procesos de transferencia de Calor."** Compañía Editorial Continental S.A de C.V. México.
13. Klouz, V. Fierro, V. Denton, P. Kats, H. Lisse, J.P. Mirodatos, C. (2002). **"Ethanol reforming for hydrogen production in a hybrid electric vehicle: process optimization"**. Journal of Power Sources. 105. p26-34.
14. Laborde, M. (2004). **"Hidrógeno y la Energía del Futuro"**. Universidad del Buenos Aires. Argentina.
15. Laborde, M.A. García, E.Y. (1991). **"Hydrogen production by steam reforming of ethanol: Thermodynamic analysis"**. International Journal of Hydrogen Energy. 16, 307.
16. Levenspiel, O. (1985). **Chemical Reaction Engineering**. Edición Revolucionaria. La Habana.
17. Llorca J. Ramírez, P. Sales, J. Homs, N. Fierro, J. (2004) **"Effect of sodium addition on the performance of Co-ZnO based catalysts for hydrogen production from bioethanol."** Journal of Catalysis 222.
18. Llorca J., Ramírez, P., Sales J. Homs, N. (2002). **"Efficient Production of Hydrogen over Supported Cobalt Catalysts from Ethanol Steam Reforming."** Journal of Catalysis 209, 306–317.
19. Llorca, J. Ramírez, P. Dalmon, J. Homs, N. (2003). **"CO-free hydrogen from steam-reforming of bioethanol over ZnO-supported cobalt catalysts Effect of the metallic precursor, Applied Catalysis B."** Environmental 43.

- 
20. Llorca, J. Ramírez, P. Dalmon, J. Homs, N. (2003). **“In situ magnetic characterisation of supported cobalt catalysts under steam-reforming of ethanol, Applied Catalysis A”** General 243.
21. Llorca, J. Ramírez, P. Sales, J. Homs, N. (2001). **“Direct production of hydrogen from ethanolic aqueous solutions over oxide Catalysts.”** Chem. Commun. 641. Departamento de química inorgánica. Universidad de Barcelona.
22. López, N. (2005). **“Alternativas de obtención de productos de alto valor agregado a partir de bioetanol, mediante técnicas de destilación”**. Tesis para optar por el grado de Doctor. Universidad Central Marta Abreu de las Villas.
23. Luigi, F. Macías, P. (2004). **“Nuevas Energías Renovables: Una alternativa Energética sustentable para México (Análisis y Propuesta).”** Instituto de Investigaciones Legislativas del Senado de la República.
24. Manual **“Hydrogen Fuel Cell Engines and Related Technologies”**. (Revision 0, December 2001). Energy Technology Training Center, College of the Desert.
25. Mariño, F. Boveri, M. Baronetti, G. Laborde, M. (2004). **“Hydrogen Production via catalytic gasification of ethanol. A mechanism proposal over copper-nickel catalyst.”** International Journal of Hydrogen Energy. Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Buenos Aires.
26. Navarro, M.C. Fierro, R. M. Rosa, F. (2003). **“Production of Hydrogen by Oxidative Reforming of Ethanol on Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalysts Doped with Ce and La.”** Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (CSIC), C/ Marie Curie s.n. Cantoblanco 28049, Madrid, Spain.
27. Parisi, D.R. (2003). **“Simulación de Reactores Sólido – Gas. Flujos Granulares – Redes Neuronales”**. Tesis para Obtener el Grado de Doctor Especialista en la Simulación de Procesos Industriales. Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ingeniería y Instituts National des Sciences Appliquées de Rennes. Argentina.

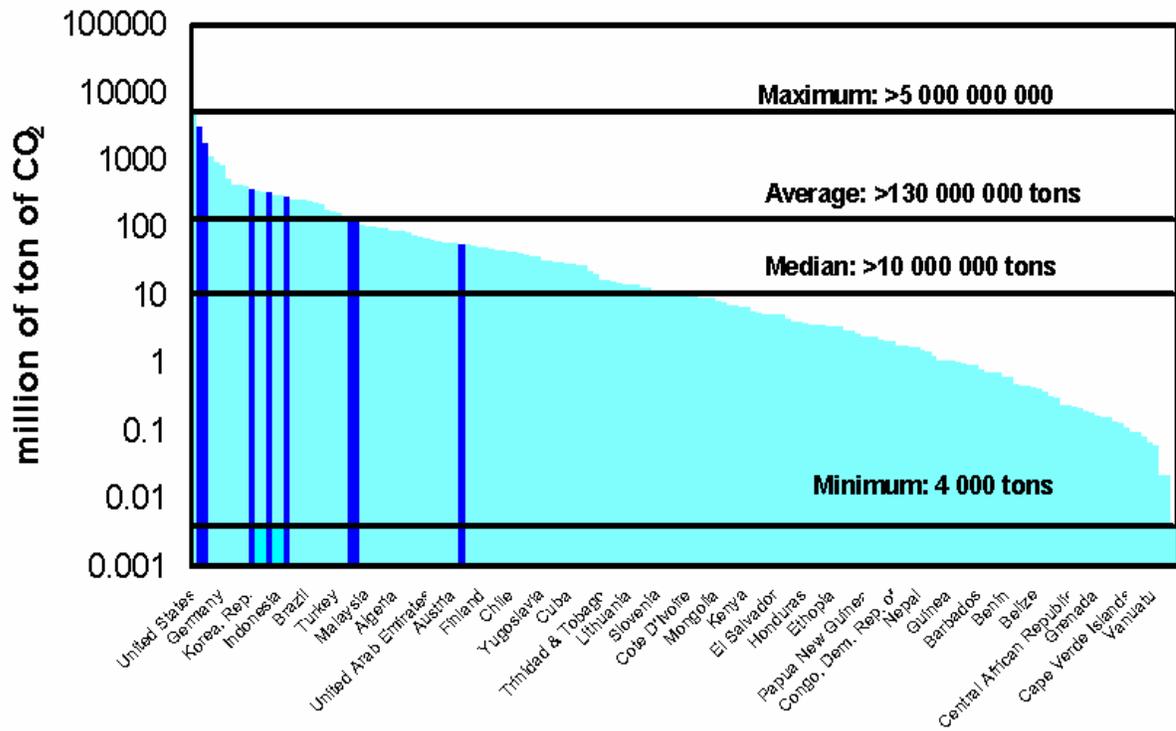
28. Pavlov, K. F. (1981). **“Problemas y Ejemplos Para el Curso de Operaciones Básicas y Aparatos en Tecnología Química”**. Tomos I y II. Editorial MIR. Moscú.
29. Perry, R. H. (1989). **“Chemical Engineering Handbook”**. Edición Revolucionaria.
30. Perry, R. H. Green, D.W. (1999). **“Chemical Engineers Handbook”**. Seventh Edition. Mc Graw Hill Handbooks. ISBN 0-07-049841-5.
31. Peters, M. S. Timmerhaus, K. D. West, R. E. (2003). **“Plant Design and Economics for Chemical Engineers”**. Fifth Edition. McGraw-Hill.
32. Pledjer, W. (1999). **“Steam reformer with internal hydrogen purification”**. Patente (CA2427464) (CA2458314).
33. Rampe, T. Hubner, P. Vogel, B. Heinzl, A. (2000). **“Hydrogen Generation from Ethanol by allothermal Reforming”**. Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems ISE.
34. Rivera, O. M. Peralta, L. M. Laborde, M. (2005). **“Comparación de Catalizadores en la Reformación Húmeda de Etanol para H<sub>2</sub>.”** Universidad Central Marta Abreu de las Villas.
35. Rosabal, J. M. (1998). **“Hidrodinámica y Separaciones Mecánicas”**. Edición ENPES. Habana.
36. Scenna, N.J. y colaboradores. (2002). **“Modelado, Simulación y optimización de procesos químicos”**.
37. Smith, J.M. (1991). **“Ingeniería de la Cinética Química”**. McGraw Hill Co. ISBN 0-07-058710-8.
38. Therdthianwong, A. Sakulkoakiet, T. Therdthianwong, S. (2001). **“Hydrogen Production by Catalytic Ethanol Steam Reforming”**. Science Asia, 27, 193 - 198.

39. Vasudeva, K. Mitra, N. Umasankar, P. Dhingra, S.C. (1996). **“Steam reforming of Ethanol for Hydrogen Production: Thermodynamic Analysis”**. International journal of Hydrogen Energy, 21, 13-18.
40. Verykios X. **“Process for the production of hydrogen and electrical energy from reforming of bio-ethanol with zero emission of pollutants”**. Patente 2002 (EA2382).
41. Verykios X. (1999). **“Process for the production of hydrogen and electricity generation by bio-ethanol reforming with the use of fuel cells and without emission of pollutants”**. Patente (GR1003235).
42. Verykios, X. (1999 y 2000). **“Process for the production of hydrogen and electrical energy from reforming of bio-ethanol”**. Patente (CA2294361) (EP1007472).
43. Viera, R, Soler, S. (1991). **“Diseño y análisis de reactores químicos”**. ENPES. La Habana.
44. Walas, M. (1990) **“Chemical Process Equipment. Selection and Design”**. Butterworth – Heinemann Series in Chemical Engineering. University of Kansas.
45. [http://www.ccar-reenlink.org/Spanish\\_Documents/Spanish\\_HTM/1707sp.htm](http://www.ccar-reenlink.org/Spanish_Documents/Spanish_HTM/1707sp.htm)
46. [http://es.encarta.msn.com/encyclopedia\\_961543773\\_5/Combustibles\\_fósiles.html#s2](http://es.encarta.msn.com/encyclopedia_961543773_5/Combustibles_fósiles.html#s2)
47. <http://www.tecnociencia.es/especiales/hidrógeno/aplicaciones.htm>
48. <http://www.humboldt.edu>
49. [http://hysys.che.ufl.edu/getting\\_started.html](http://hysys.che.ufl.edu/getting_started.html)

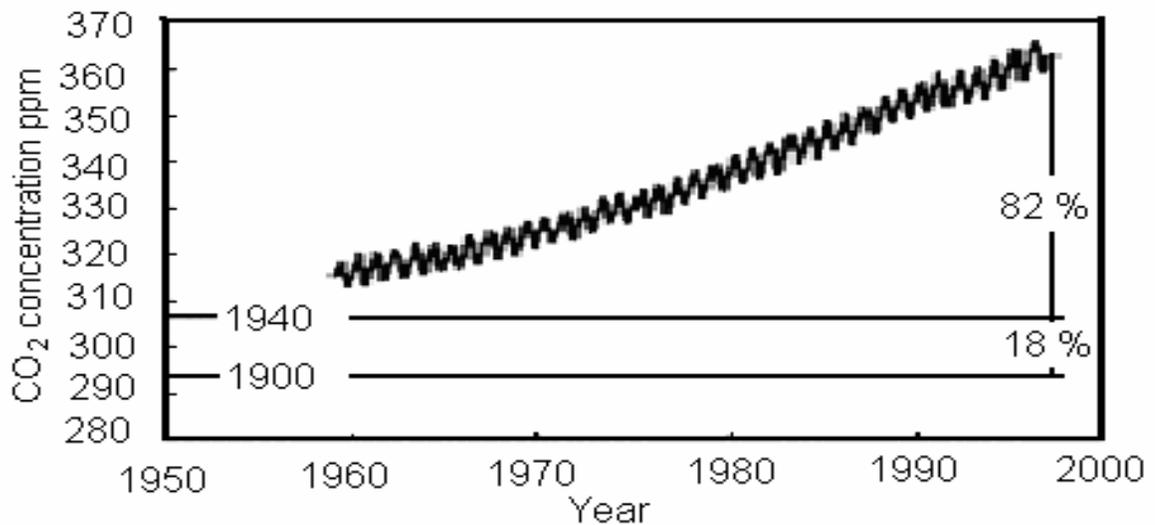
*Anexos*



**Anexo 1.1.** Estado de las emisiones nocivas. Año 2005.

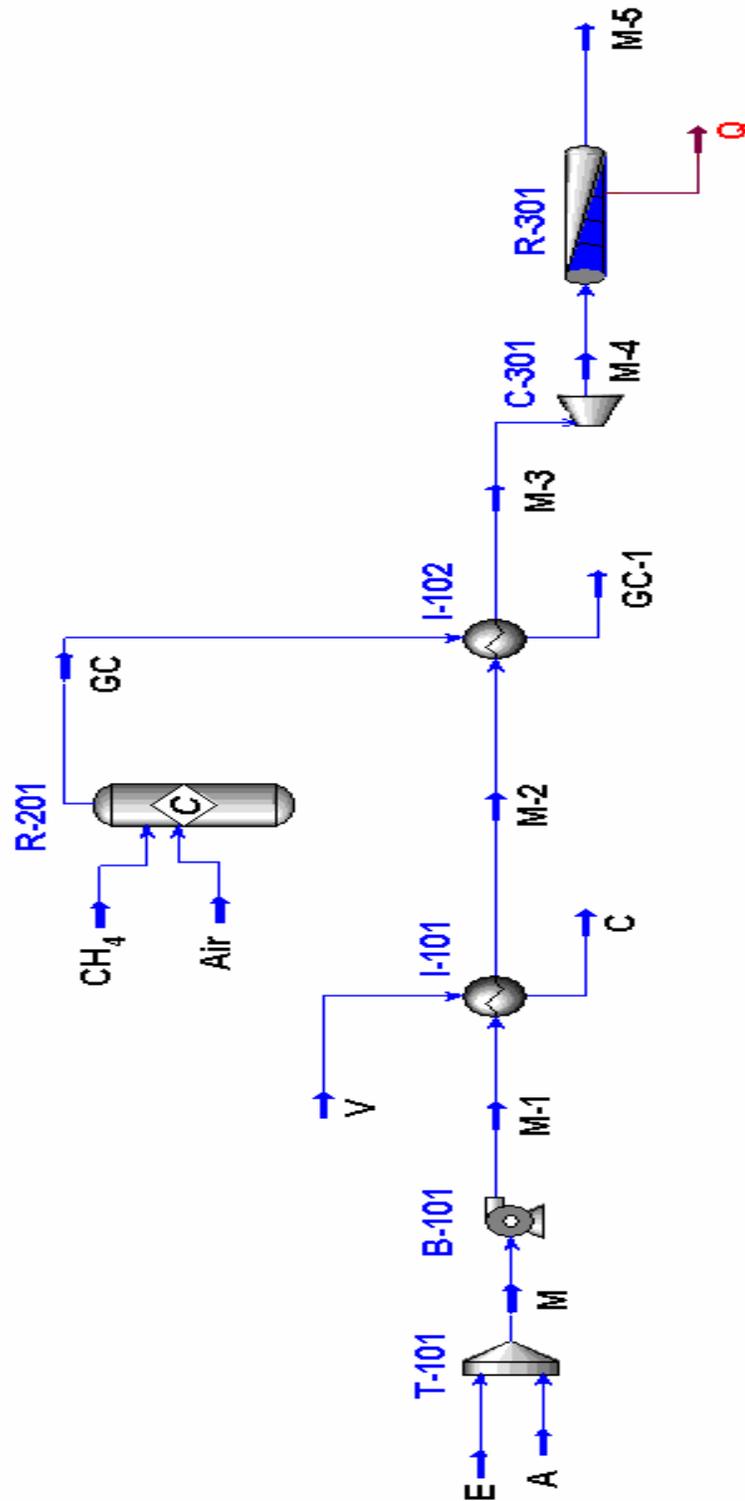


**Figura 1.** Emisiones de dióxido de carbono por diferentes países.



**Figura 2.** Elevación de las concentraciones de dióxido de carbono en el aire.

**Anexo 2.1. Diagrama de Flujo del proceso de Obtención de Gas de Síntesis.**



**Figura 1.** Diagrama de Flujo del proceso de obtención de Gas de Síntesis.

## **Anexo 2.2. Características de las corrientes manejadas en el Proceso.**

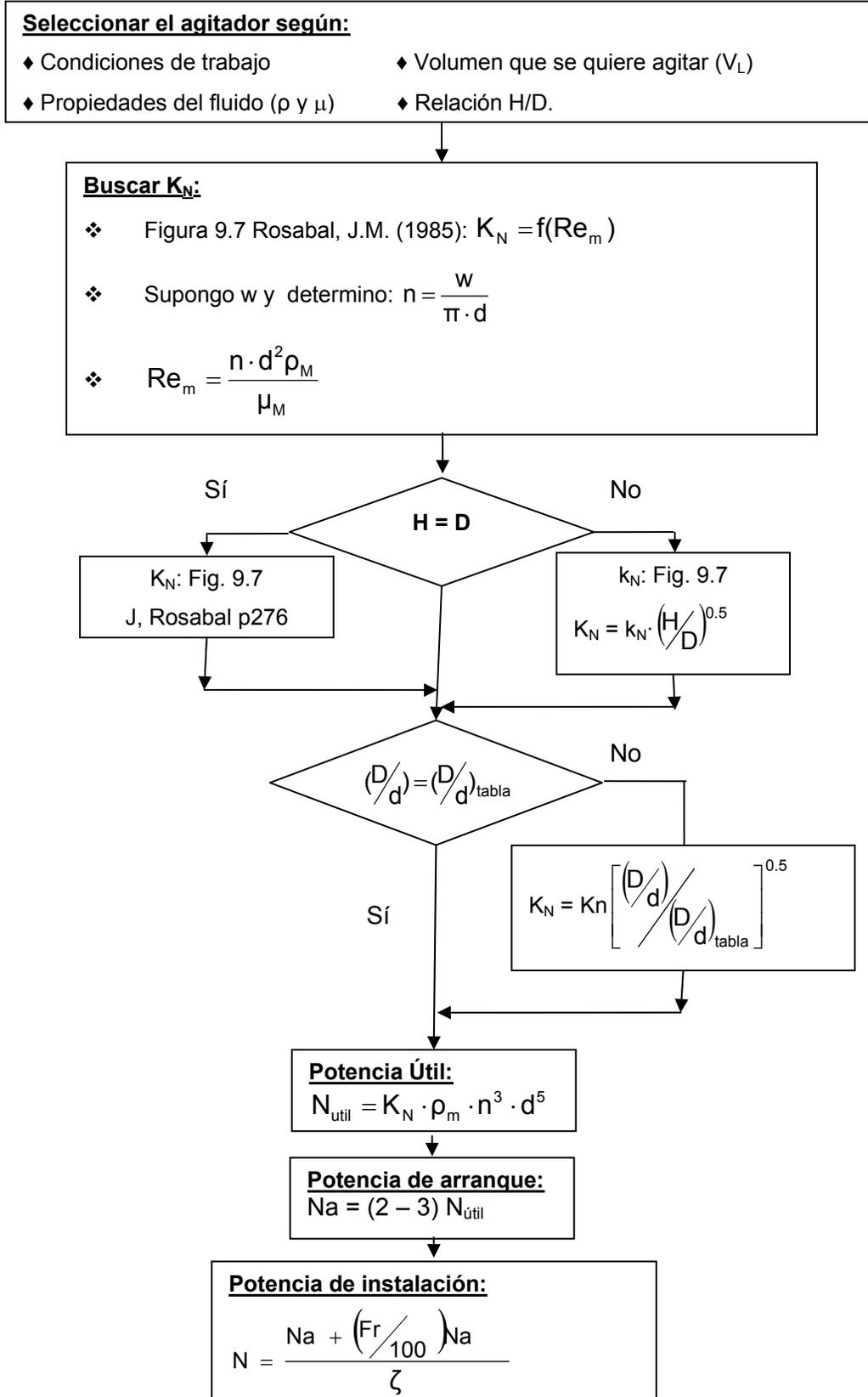
**Tabla 1.** Características de los fluidos del diagrama propuesto para la obtención de Gas de Síntesis.

Corriente	Fracción mol									T (°C)	P (kPa)
	EtOH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	C		
E	1	0	0	0	0	0	0	0	0	25	101.3
A	0	1	0	0	0	0	0	0	0	25	101.3
M	0.1667	0.8333	0	0	0	0	0	0	0	25	101.3
M – 1	0.1667	0.8333	0	0	0	0	0	0	0	25	101.3
M – 2	0.1667	0.8333	0	0	0	0	0	0	0	95.36	100.99
M – 3	0.1667	0.8333	0	0	0	0	0	0	0	500	100.28
M – 4	0.1667	0.8333	0	0	0	0	0	0	0	500	103.94
M – 5	0	0.4536	0.0599	0	0	0.3172	0.1010	0.0122	0.0495	500	76.80
CH <sub>4</sub>	0	0	1	0	0	0	0	0	0	25	101.3
Air	0	0	0	0.21	0.79	0	0	0	0	25	101.3
V	0	1	0	0	0	0	0	0	0	120.6	202.6
C	0	1	0	0	0	0	0	0	0	120.6	202.6
GC	0	0.19	0	0	0.715	0	0.095	0	0	900	393
GC – 1	0	0.19	0	0	0.715	0	0.095	0	0	276.9	392.9

**Tabla 2.** Nomenclatura de los equipos del diagrama de flujo.

Nomenclatura	Nombre
T – 101	Tanque de mezclado
B – 101	Bomba
I – 101	Vaporizador
I – 102	Calentador
R – 201	Reactor de conversión
C – 301	Ventilador
R - 301	Reactor Multitubo Catalítico

**Anexo 2.3. Metodología de cálculo de la potencia del agitador.**



**Figura 1.** Metodología para calcular el consumo de potencia.



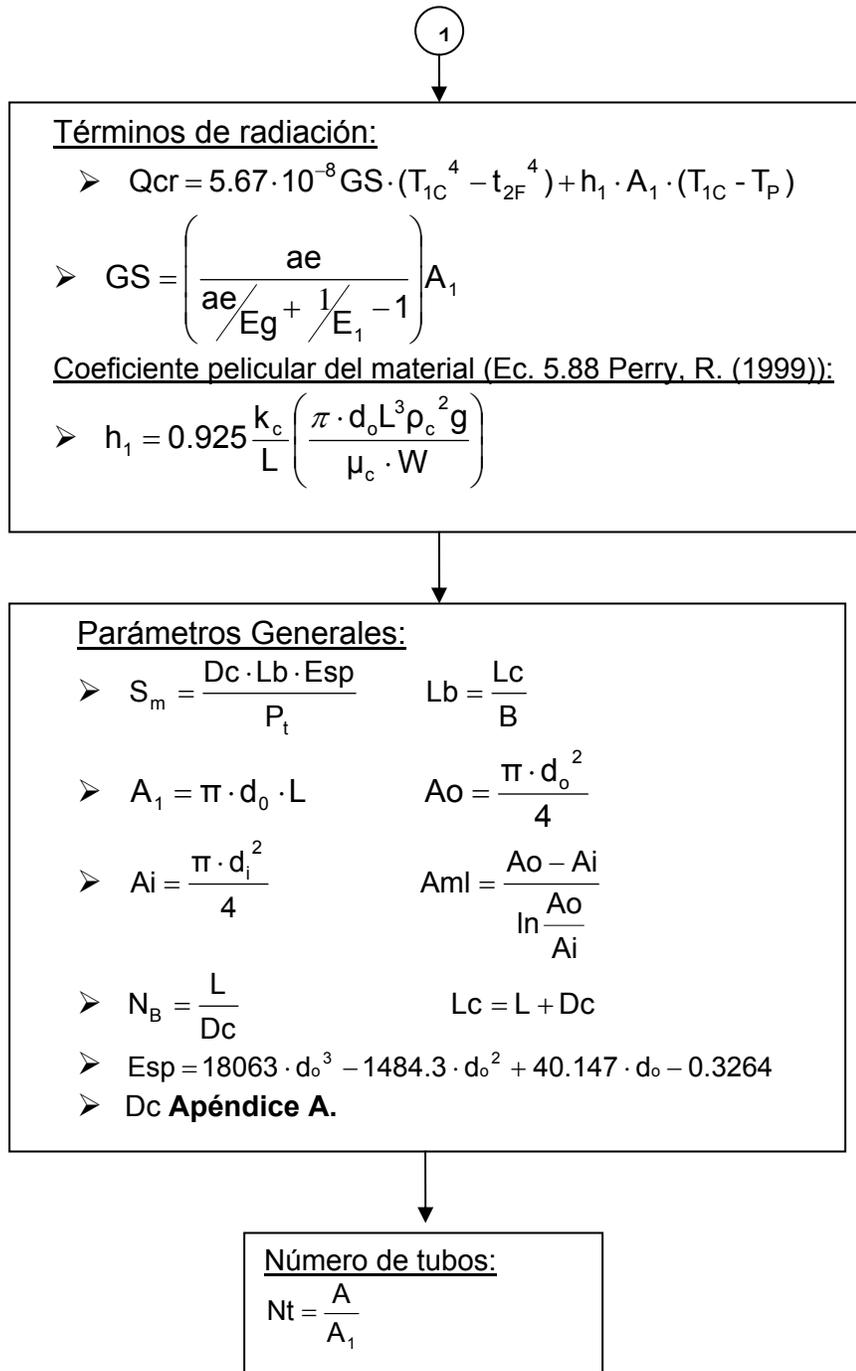


Figura 1. Metodología de cálculo para el diseño del vaporizador.

Datos a entrar:

$F_t, P, R, T_p, e$

Tuberías:

$L, d_i, d_o, P_t$

Gases de combustión:

$T_{1G}, T_{2G}, C_{pG}, k_G, \mu_G, \mu_b, \mu_w$

Mezcla etanol – agua:

$m_m, C_{pm}, T_2, T_1, P_{cA}, P_{cE}, y_E, y_A,$

$ae, Eg, E_1$

Cálculo de las propiedades de los componentes puros y de las mezclas. **Apéndice B y C respectivamente.**

Calor necesario en la operación:

$$Q_c = m_m C_{p_m} \cdot \Delta T$$

➤  $\Delta T = T_2 - T_1$

Área de Transferencia de Calor Total:

➤  $A = \frac{Q_c}{U_D \cdot F_t \cdot MLDT}$

➤  $MLDT = \frac{(T_{2G} - T_2) - (T_{1G} - T_1)}{\ln \frac{(T_{2G} - T_2)}{(T_{1G} - T_1)}}$

Coefficiente total de Transferencia de Calor (Ec. 11-2 Perry, R. (1999)):

➤ 
$$U_D = \frac{1}{\frac{1}{h_a} + R_{do} + \frac{x \cdot A_o}{K_x \cdot A_{ml}} + \left( \frac{1}{h_i} + R_{di} \right) \cdot \frac{A_o}{A_i}}$$

1

Coeficiente pelicular interior (Ec. 14.18 Peters, M. et al., (2003))

$$h_i = 0.23 \frac{k_m}{d_i} \left( \frac{d_i G_i}{\mu_m} \right)^{0.8} \left( \frac{Cp_m \mu_m}{k_m} \right)^{1/3} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14}$$

Coeficiente pelicular exterior (convección + radiación):

$$h_a = \frac{Q_{cr}}{A_1 \cdot T_c}$$

Términos de radiación:

$$\text{➤ } Q_{cr} = 5.67 \cdot 10^{-8} GS \cdot (T_{2G}^4 - T_1^4) + h_1 \cdot A_1 \cdot (T_{2G} - T_P)$$

$$GS = \left( \frac{ae}{ae/E_g + 1/E_1 - 1} \right) A_1$$

Coeficiente pelicular del material (ec. 14-30 Peters, M. et al (2003):

$$\text{➤ } h_1 = 0.36 \frac{k_G}{De} \left( \frac{De G_s}{\mu_G} \right)^{0.55} \left( \frac{Cp_G \mu_G}{k_G} \right)^{0.33} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14}$$

2

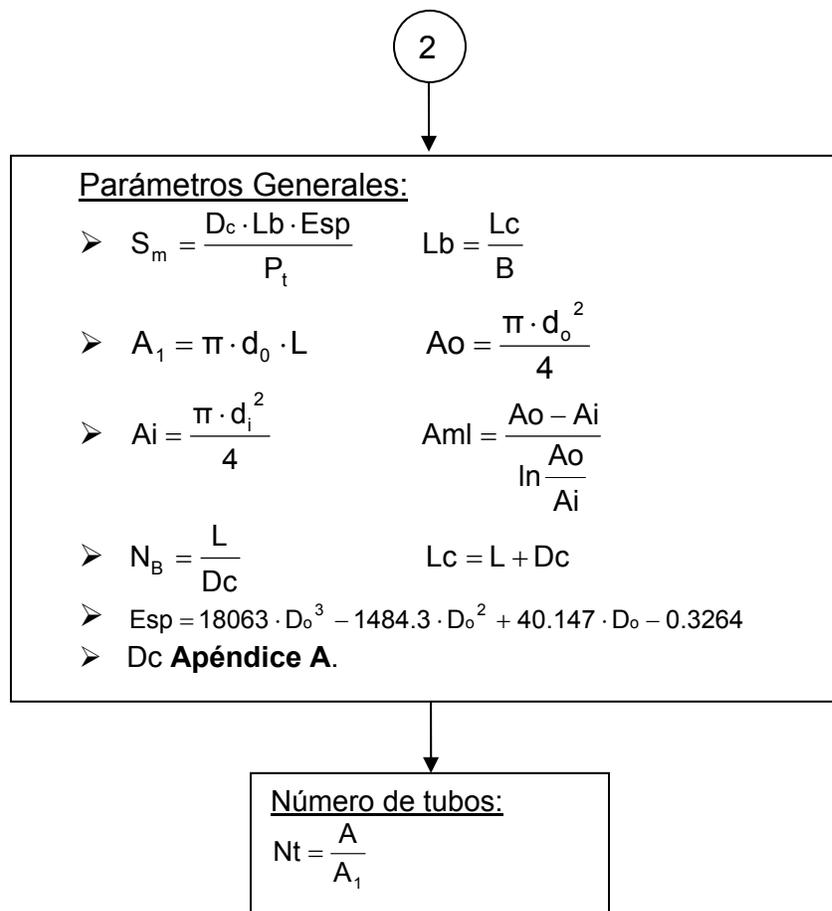


Figura 2. Metodología de cálculo para el diseño del calentador.

**Anexo 2.5. Evaluación de alternativas para el vaporizador y calentador.**

**Tabla 1.** Alternativas para el diseño del vaporizador.

<b>D<sub>0</sub> =0.75 plg Pt = 0.0254 m</b>				
Parámetros	Longitud (m)			
	1.5	2	2.5	3
Nt	47	31	23	18
U <sub>D</sub> (W/m <sup>2</sup> °C)	1498.99	1733.5	1866.88	1953.99
A (m <sup>2</sup> )	4.18	3.62	3.36	3.21
L <sub>concha</sub> (m)	1.71	2.17	2.65	3.14
D <sub>i concha</sub> (m)	0.21	0.17	0.15	0.14
D <sub>oconcha</sub> (m)	0.23	0.19	0.17	0.16
ΔPcarcaza	1.09E-03	3.22E-03	6.80E-03	1.21E-02
ΔPtubos	1.52E-02	1.86E-02	2.20E-02	2.54E-02

<b>D<sub>0</sub> =1 plg Pt = 0.0301625 m</b>				
Parámetros	Longitud (m)			
	1.5	2	2.5	3
Nt	38	24	18	14
U <sub>D</sub> (W/m <sup>2</sup> °C)	1399.42	1685.39	1846.47	1951.26
A (m <sup>2</sup> )	4.48	3.72	3.4	3.21
L <sub>concha</sub> (m)	1.73	2.19	2.66	3.15
D <sub>i concha</sub> (m)	0.23	0.19	0.16	0.15
D <sub>oconcha</sub> (m)	0.25	0.21	0.18	0.17
ΔPcarcaza	7.03E-04	2.27E-03	4.98E-03	9.02E-03
ΔPtubos	2.65E-03	3.22E-03	3.79E-03	4.36E-03

<b>D<sub>0</sub> =1.5 plg Pt = 0.047625 m</b>				
Parámetros	Longitud (m)			
	1.5	2	2.5	3
Nt	34	22	15	11
U <sub>D</sub> (W/m <sup>2</sup> °C)	653.156	1198.81	1470.33	1641.29
A (m <sup>2</sup> )	9.6	5.23	4.27	3.82
L <sub>concha</sub> (m)	1.92	2.28	2.73	3.2
D <sub>i concha</sub> (m)	0.42	0.28	0.23	0.2
D <sub>oconcha</sub> (m)	0.44	0.3	0.25	0.22
ΔPcarcaza	3.21E-05	2.52E-04	7.08E-04	1.45E-03
ΔPtubos	3.40E-04	3.14E-04	3.60E-04	4.08E-04

**Tabla 2.** Alternativas para el diseño del calentador.

<b>D<sub>0</sub> =0.75 plg Pt = 0.0254 m</b>				
Parámetros	Longitud (m)			
	1.5	2	2.5	3
Nt	116	87	70	59
U <sub>D</sub> (W/m <sup>2</sup> °C)	948.27	945.812	943.9	942.34
A (m <sup>2</sup> )	10.37	10.4	10.42	10.44
L <sub>concha</sub> (m)	1.83	2.29	2.76	3.24
D <sub>i concha</sub> (m)	0.33	0.29	0.26	0.24
D <sub>oconcha</sub> (m)	0.35	0.31	0.28	0.26
ΔPcarcaza	1.45E-06	3.47E-06	6.73E-06	1.14E-05
ΔPtubos	6.40E-04	1.52E-03	2.93E-03	4.94E-03

<b>D<sub>0</sub> =1 plg Pt = 0.0301625 m</b>				
Parámetros	Longitud (m)			
	1.5	2	2.5	3
Nt	92	70	56	47
U <sub>D</sub> (W/m <sup>2</sup> °C)	896.11	891.69	888.29	885.51
A (m <sup>2</sup> )	10.98	11.03	11.07	11.11
L <sub>concha</sub> (m)	1.84	2.3	2.77	3.25
D <sub>i concha</sub> (m)	0.34	0.3	0.27	0.25
D <sub>oconcha</sub> (m)	0.36	0.32	0.29	0.27
ΔPcarcaza	1.41E-06	3.38E-06	6.53E-06	1.11E-05
ΔPtubos	1.83E-04	4.22E-04	8.25E-04	1.41E-03

<b>D<sub>0</sub> =1.5 plg Pt = 0.047625 m</b>				
Parámetros	Longitud (m)			
	1.5	2	2.5	3
Nt	78	59	48	40
U <sub>D</sub> (W/m <sup>2</sup> °C)	704.02	697.52	692.54	688.5
A (m <sup>2</sup> )	13.97	14.1	14.2	14.29
L <sub>concha</sub> (m)	1.99	2.44	2.9	3.36
D <sub>i concha</sub> (m)	0.5	0.44	0.4	0.36
D <sub>oconcha</sub> (m)	0.52	0.46	0.42	0.38
ΔPcarcaza	1.65E-07	4.09E-07	8.06E-07	1.39E-06
ΔPtubos	2.67E-05	6.23E-05	1.18E-04	2.03E-04

**Anexo 2.6. Ecuaciones que describen el patrón cinético.**

**Tabla 1.** Regresión aplicada a data experimental para la reformación.

<b>Parámetros</b>	<b>Expresiones</b>
<b>S<sub>H2</sub></b>	$-0.379 + 4 \cdot 10^{-3} \cdot T - 7.74 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 + 5.5 \cdot 10^{-9} \cdot T^3$ to: $573 < T(^{\circ}\text{K}) < 773$
<b>S<sub>CH4</sub></b>	$-1.977 + 7.322 \cdot 10^{-3} \cdot T - 5.36 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$ to: $573 < T(^{\circ}\text{K}) < 650$ $2.0048 - 2.203 \cdot 10^{-3} \cdot T$ to: $650 < T(^{\circ}\text{K}) < 773$
<b>S<sub>CO</sub></b>	$S_{\text{CO}} = 3.155 - 4.7 \cdot 10^{-3} \cdot T$ to: $573 < T(^{\circ}\text{K}) < 650$ $S_{\text{CO}} = 22.194 - 6.435 \cdot 10^{-2} \cdot T + 4.67 \cdot 10^{-5} \cdot T^2$ to: $650 < T(^{\circ}\text{K}) < 700$ $S_{\text{CO}} = -1.1127 + 1.635 \cdot 10^{-3} \cdot T$ to: $700 < T(^{\circ}\text{K}) < 773$

**Anexo 2.7. Resultados para la simulación del Reformador.**

**Tabla 1.** Influencia del tiempo espacial y el número de tubos sobre los principales parámetros de operación.  $R_{AE} = 3.5$ ,  $T = 500^{\circ}\text{C}$  y  $D_p = 0.1\text{cm}$ .

<b>Cita</b> (g-min/cc)	<b>Ntub</b>	<b>Lreact</b> (m)	<b>X<sub>ETOH</sub></b> (%)	<b>Y<sub>H</sub></b> (mol <sub>H</sub> /mol <sub>EO</sub> )	<b>N<sub>ETANOL</sub></b> (mol/s)
$1.0 \cdot 10^{-3}$	100	0.62	100	1.03	2.09
$5.0 \cdot 10^{-3}$		1.21	100	2.63	0.82
$1.0 \cdot 10^{-2}$		2.22	100	2.87	0.75
$1.0 \cdot 10^{-3}$	125	0.44	100	1.15	1.87
$5.0 \cdot 10^{-3}$		0.93	100	2.75	0.785
$1.0 \cdot 10^{-2}$		1.72	100	2.97	0.735
$1.0 \cdot 10^{-3}$	150	0.34	100	1.26	1.72
$5.0 \cdot 10^{-3}$		0.75	100	2.84	0.78
$1.0 \cdot 10^{-2}$		1.40	100	3.06	0.705
$1.0 \cdot 10^{-3}$	175	0.29	100	1.28	1.68
$5.0 \cdot 10^{-3}$		0.64	100	2.88	0.75
$1.0 \cdot 10^{-2}$		1.18	100	3.10	0.695
$1.0 \cdot 10^{-3}$	200	0.25	100	1.30	1.65
$5.0 \cdot 10^{-3}$		0.55	100	2.89	0.745
$1.0 \cdot 10^{-2}$		1.02	100	3.14	0.685

**Anexo 2.8. Datos fundamentales para el cálculo de las tuberías.**

**Tabla 7.** Sistema de Flujo.

Ecuación	Datos	Resultados
$D_1 = \sqrt{\frac{Q}{0.785v_r}}$ <p>Donde</p> <p>Q<sub>1</sub>: Flujo volumétrico (m<sup>3</sup>/s)</p> <p>v<sub>r</sub>: Velocidad recomendada (m/s)</p>	<p>F<sub>ea</sub> = 529.1 kg/h</p> <p>ρ<sub>m(25 °C)</sub> = 959.1 kg/m<sup>3</sup></p> <p>μ<sub>m(25 °C)</sub> = 0.99 · 10<sup>-3</sup> Pa · s</p> <p>Q<sub>ae(25 °C)</sub> = 1.53 · 10<sup>-4</sup> m<sup>3</sup>/s</p> <p>v<sub>r</sub> = 1 m/s</p>	<p>D<sub>i</sub> = 13.96 mm</p> <p>D<sub>N</sub> = 3/4 plg T. 10, Ros.</p> <p>D<sub>E</sub> = 0.01715 m</p> <p>D<sub>I</sub> = 0.01252 m</p> <p>V<sub>trabajo</sub> = 0.66 m/s</p>
$D_2 = \sqrt{\frac{Q}{0.785v_r}}$ <p>Donde</p> <p>Q<sub>2</sub>: Flujo volumétrico (m<sup>3</sup>/s)</p> <p>v<sub>r</sub>: Velocidad recomendada (m/s)</p>	<p>ρ<sub>m(94 °C)</sub> = 0.7499 kg/m<sup>3</sup></p> <p>μ<sub>m(94 °C)</sub> = 5.3 · 10<sup>-5</sup> Pa · s</p> <p>Q<sub>ae(94 °C)</sub> = 0.355 m<sup>3</sup>/s</p> <p>ρ<sub>m(500 °C)</sub> = 0.3577 kg/m<sup>3</sup></p> <p>μ<sub>m(500 °C)</sub> = 2.77 · 10<sup>-5</sup> Pa · s</p> <p>Q<sub>ae(500 °C)</sub> = 0.41 m<sup>3</sup>/s</p> <p>v<sub>r</sub> = 20 m/s</p>	<p>D<sub>i(94 °C)</sub> = 111.73 mm</p> <p>D<sub>I(94 °C)</sub> = 112 mm</p> <p>D<sub>E(94 °C)</sub> = 140 mm</p> <p>D<sub>i(500 °C)</sub> = 161.77 mm</p> <p>D<sub>I(500 °C)</sub> = 169 mm</p> <p>D<sub>E(500 °C)</sub> = 219 mm</p> <p>V<sub>trabajo(94)</sub> = 19.89 m/s</p> <p>V<sub>trabajo(500)</sub> = 18.33 m/s</p>

**Anexo 2.9. Principales datos para el cálculo del sistema de flujo.**

**Tabla 1.** Datos necesarios para determinar pérdidas por fricción y consumo de potencia en la bomba.

Datos	Accesorios Totales del sistema
<u>Tramo:</u> Tanque agitado – Vaporizador. <u>Tubería nueva de acero</u> $D_E = 0.01715 \text{ m}$ $D_I = 0.01252 \text{ m}$ Longitud Total = 13 m $Z_1 = 3 \text{ m}$ y $Z_2 = 0 \text{ m}$ $P_1 = P_2 = 1 \text{ atm}$ $V_1 = 0 \text{ m/s}$ $V_2 = 0.66 \text{ m/s}$ $e = 0.2 \text{ mm}$ $\frac{e}{D_I} = 0.016$	2 Válvulas de compuerta. 3 Válvulas de globo 4 codos rectangulares standard.
Régimen de Flujo	$Re = \frac{D \cdot \rho \cdot v}{\mu} = \frac{0.01252 \cdot 959.1 \cdot 0.66}{0.99 \cdot 10^{-3}} = 8 \cdot 10^3$
Factor de fricción (Fig. 3.9 J, Rosabal)	$f = 0.05$ y $f_{turb} = 0.046$
Factor de corrección de Energía cinética (Fig. 3.4 J, Rosabal)	$\alpha = 1.113$

**Tabla 2.** Resistencias locales en el tramo Tanque agitado – Vaporizador.

Accesorio	N.Unid.	K <sub>turb.</sub>	N.Unid · K <sub>turb</sub>
Válvula de Cuña	1	0.17	0.17
Válvula de Globo	1	6	6
Codo 90 °	1	0.75	0.75
Entrada	1	0.5	0.5
Salida	1	1	1
$\Sigma K_{i_{turb}}$			8.42 m
$\Sigma K_i = \Sigma K_{turb} \frac{f}{f_{turb}}$			9.15

**Anexo 2.10. Características fundamentales para el sistema de flujo.**

**Tabla 1.** Características fundamentales del tramo Vaporizador-Calentador

Datos	Accesorios Totales del sistema	
<b>Tramo</b> (vaporizador-calentador) P <sub>1</sub> =100998.73 Pa $\rho_m = 0.7499 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ $\mu_m = 5.3 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ D <sub>I</sub> = 112 mm D <sub>E</sub> = 140 mm L = 2 m $v = 19.89 \text{ m/s}$ ; $G = 14.97 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$ $e/D_I = 0.0018$	1 Válvula de cuña	0.17
	1 Salida	1
	1 Entrada	0.5
Régimen de Flujo	$Re = \frac{D \cdot \rho \cdot v}{\mu} = 3.1 \cdot 10^4$	
Factor de fricción (Fig. 3.9 J, Rosabal)	$f_{\text{turb}} = 0.023$ y $f = 0.027$	
Factor de corrección de Energía cinética (Fig. 3.4 J, Rosabal)	$\alpha = 1.082$	
Presión de entrada al calentador	$P_2 = \left( -\frac{\alpha \cdot G^2}{\rho_m^2} - \sum Fp \right) \cdot \rho_m + P_1 = 100310.54 \text{ Pa}$	

**Tabla 2.** Características fundamentales del tramo Calentador-Ventilador

Datos	Accesorios Totales del sistema	
<b>Tramo</b> (calentador-ventilador) P <sub>1</sub> =100310.54 Pa - ΔP <sub>c</sub> = 100267.78 Pa $\rho_m = 0.3577 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ $\mu_m = 2.77 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ D <sub>I</sub> = 169 mm D <sub>E</sub> = 219 mm L = 1 m $e/D_I = 0.0012$ ΔP <sub>c</sub> = 42.76 Pa $v = 18.33 \text{ m/s}$ ; $G = 18.34 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$	1 Válvula de cuña	0.17
	1 Salida	1
	1 Entrada	0.5
	1 codo rectangular (90°)	0.75
Régimen de Flujo	$Re = \frac{D \cdot \rho \cdot v}{\mu} = 4 \cdot 10^4$	
Factor de fricción (Fig. 3.9 J, Rosabal)	$f_{\text{turb}} = 0.020$ y $f = 0.025$	
Factor de corrección de Energía cinética (Fig. 3.4 J, Rosabal)	$\alpha = 1.08$	
<b>Presión de succión al ventilador</b>	$P_2 = \left( -\frac{\alpha \cdot G^2}{\rho_m^2} - \sum Fp \right) \cdot \rho_m + P_1 = 97759.43 \text{ Pa}$	

**Tabla 3.** Características fundamentales del tramo Ventilador-Reactor

Datos	Accesorios Totales del sistema	
Tramo (ventilador-reactor) $P_2=101325\text{Pa}$ $\rho_m= 0.3577 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ $\mu_m= 2.77 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ $D_I = 169 \text{ mm } D_E = 219 \text{ mm}$ $L = 2.5 \text{ m}$ $v = 18.33 \text{ m/s} : G = 18.34 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}$ $e/D_I = 0.0012$	1 Válvula de globo	6
	1 Salida	1
	1 Entrada	0.5
	2 codo rectangular (90°)	2*0.75=1.5
Régimen de Flujo	$\text{Re} = \frac{D \cdot \rho \cdot v}{\mu} = 4 \cdot 10^4$	
Factor de fricción (Fig. 3.9 J, Rosabal)	$f_{\text{turb}} = 0.020$ y $f = 0.025$	
Factor de corrección de Energía cinética (Fig. 3.4 J, Rosabal)	$\alpha = 1.08$	
<b>Presión de descarga del ventilador</b>	$P_1 = P_2 + \left( \frac{\alpha \cdot G^2}{\rho_m^2} + \sum Fp \right) \cdot \rho_m = 103937.72 \text{ Pa}$	

### Anexo 2.11. Principales características del ventilador.



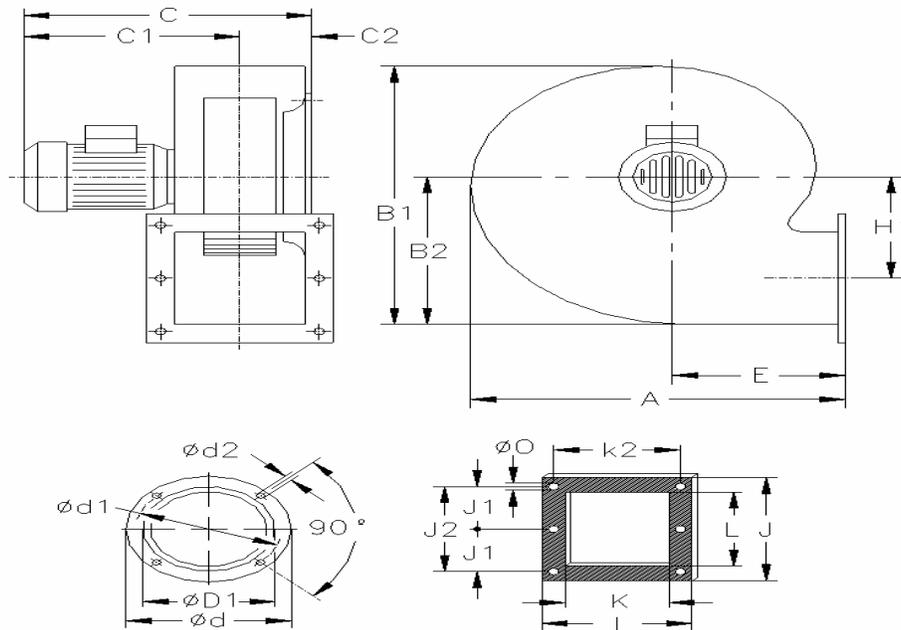
**Figura 1.** Ventilador centrífugo modelo CMP-820-2M.

#### **Características constructivas:**

- Carcaza en chapa de acero en todos los modelos (CMP-38-2M en fundición de aluminio).
- Turbina en chapa de acero galvanizado.
- Motor asíncrono con rotor de jaula de ardilla. En ejecución de serie se sirven con motor trifásico 230/400 V, 50 Hz y monofásico 230 V, 50 Hz. Aislamiento clase F y protección IP-55, (IP-54 modelos 616-4T/4M y 620-4T/4M; IP-21 modelo CMP-38)
- Acabado anticorrosivo en polvo de resina EPOXI, secado al horno a 200° C, con previo fosfatado al zinc.

#### **Dimensiones en mm.**

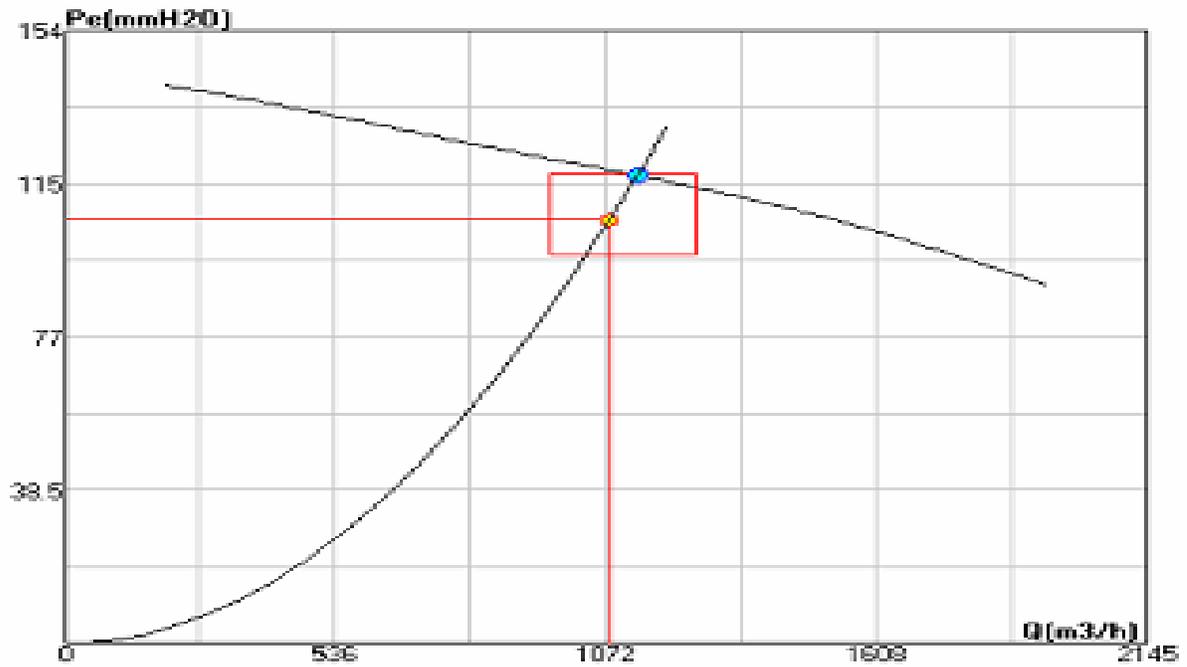
A	B1	B2	C	C1	C2	D1	DE	DE1	DE2	E	H1	I	J	J1
322	377	223	369.5	301	68.5	200	247	230	M,6	137.5	137	184	213	94.5
J2	K	K2	L	O										
189	130	160	156	9										



**Características técnicas:**

Parámetro	Valor
Velocidad (rpm)	2850
Intensidad máx. admisible (A)	7.3
Potencia (kW)	1.1
Caudal máximo ( $m^3/h$ )	1950
Nivel presión sonora dB (A)	73
Peso aprox. (kg)	16.7

**Curva característica:**



**Espectro potencia sonora (LwA):**

63	125	250	500	1000	2000	4000	8000	Hz
48	58	69	76	80	77	75	68	dB

### Anexo 3.1. Simulación del sistema.

#### Variando Relación molar de alimentación.

<b>R<sub>AE</sub> = 3 T<sub>reformador</sub> = 500 ° C</b>							
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C
0.00	0.2500	0.7500	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.04	0.0610	0.6601	0.0634	0.0198	0.0618	0.1267	0.0071
0.13	0.0305	0.6115	0.0823	0.0297	0.0706	0.1617	0.0137
0.22	0.0147	0.5834	0.0909	0.0389	0.0685	0.1832	0.0204
0.31	0.0061	0.5634	0.0938	0.0482	0.0613	0.2003	0.0268
0.39	0.0021	0.5476	0.0927	0.0574	0.0518	0.2157	0.0327
0.48	0.0006	0.5342	0.0894	0.0657	0.0425	0.2302	0.0375
0.57	0.0001	0.5222	0.0854	0.0728	0.0347	0.2436	0.0411
0.65	0.0000	0.5115	0.0814	0.0788	0.0286	0.2560	0.0437
0.74	0.0000	0.5018	0.0776	0.0837	0.0240	0.2672	0.0457
0.83	0.0000	0.4930	0.0743	0.0878	0.0205	0.2773	0.0471
0.92	0.0000	0.4850	0.0712	0.0913	0.0178	0.2865	0.0482
1.00	0.0000	0.4777	0.0684	0.0944	0.0156	0.2949	0.0490
1.09	0.0000	0.4710	0.0658	0.0971	0.0139	0.3027	0.0496
1.18	0.0000	0.4647	0.0634	0.0994	0.0125	0.3099	0.0500
1.27	0.0000	0.4589	0.0612	0.1016	0.0113	0.3166	0.0504
1.35	0.0000	0.4534	0.0590	0.1036	0.0103	0.3230	0.0507
1.44	0.0000	0.4481	0.0570	0.1054	0.0095	0.3291	0.0509
1.53	0.0000	0.4431	0.0551	0.1071	0.0088	0.3349	0.0511
1.62	0.0000	0.4383	0.0532	0.1087	0.0081	0.3404	0.0512
1.70	0.0000	0.4337	0.0514	0.1102	0.0076	0.3457	0.0513

<b>R<sub>AE</sub> = 3.5 T<sub>reformador</sub> = 500 ° C</b>							
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C
0.00	0.2222	0.7778	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.04	0.0644	0.6650	0.0611	0.0188	0.0609	0.1235	0.0063
0.13	0.0342	0.6173	0.0799	0.0278	0.0710	0.1576	0.0122
0.22	0.0181	0.5898	0.0892	0.0360	0.0706	0.1782	0.0181
0.31	0.0085	0.5699	0.0934	0.0444	0.0652	0.1944	0.0241
0.39	0.0034	0.5542	0.0937	0.0530	0.0570	0.2090	0.0298
0.48	0.0011	0.5410	0.0913	0.0611	0.0480	0.2227	0.0347
0.57	0.0003	0.5291	0.0878	0.0684	0.0398	0.2358	0.0387
0.65	0.0001	0.5183	0.0839	0.0747	0.0331	0.2481	0.0418
0.74	0.0000	0.5085	0.0802	0.0800	0.0278	0.2594	0.0440
0.83	0.0000	0.4995	0.0768	0.0845	0.0237	0.2698	0.0457
0.92	0.0000	0.4913	0.0736	0.0882	0.0205	0.2792	0.0470
1.00	0.0000	0.4838	0.0708	0.0915	0.0180	0.2878	0.0480
1.09	0.0000	0.4769	0.0681	0.0944	0.0160	0.2958	0.0487
1.18	0.0000	0.4705	0.0656	0.0970	0.0143	0.3032	0.0493
1.27	0.0000	0.4645	0.0633	0.0993	0.0130	0.3101	0.0498
1.35	0.0000	0.4589	0.0612	0.1013	0.0118	0.3166	0.0501
1.44	0.0000	0.4536	0.0591	0.1033	0.0108	0.3228	0.0504
1.53	0.0000	0.4485	0.0571	0.1050	0.0100	0.3287	0.0507
1.62	0.0000	0.4436	0.0553	0.1067	0.0093	0.3343	0.0508
1.70	0.0000	0.4389	0.0535	0.1083	0.0087	0.3397	0.0510

<b>R<sub>AE</sub> = 4 T<sub>reformador</sub> = 500 ° C</b>							
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C
0.00	0.2000	0.8000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.04	0.0674	0.6691	0.0590	0.0180	0.0600	0.1207	0.0056
0.13	0.0376	0.6224	0.0778	0.0263	0.0711	0.1540	0.0110
0.22	0.0212	0.5953	0.0875	0.0337	0.0720	0.1740	0.0163
0.31	0.0110	0.5757	0.0925	0.0413	0.0681	0.1895	0.0218
0.39	0.0050	0.5601	0.0940	0.0492	0.0613	0.2033	0.0272
0.48	0.0019	0.5470	0.0927	0.0570	0.0530	0.2163	0.0322
0.57	0.0006	0.5353	0.0898	0.0643	0.0447	0.2289	0.0364
0.65	0.0002	0.5246	0.0862	0.0708	0.0376	0.2409	0.0397
0.74	0.0000	0.5147	0.0826	0.0764	0.0317	0.2523	0.0423
0.83	0.0000	0.5056	0.0791	0.0811	0.0271	0.2627	0.0443
0.92	0.0000	0.4973	0.0759	0.0852	0.0235	0.2724	0.0458
1.00	0.0000	0.4896	0.0730	0.0887	0.0205	0.2812	0.0470
1.09	0.0000	0.4825	0.0703	0.0918	0.0182	0.2894	0.0479
1.18	0.0000	0.4760	0.0677	0.0945	0.0163	0.2970	0.0486
1.27	0.0000	0.4698	0.0654	0.0970	0.0147	0.3040	0.0491
1.35	0.0000	0.4641	0.0631	0.0992	0.0134	0.3107	0.0496
1.44	0.0000	0.4586	0.0611	0.1012	0.0123	0.3169	0.0499
1.53	0.0000	0.4535	0.0591	0.1030	0.0113	0.3229	0.0502
1.62	0.0000	0.4485	0.0572	0.1048	0.0105	0.3286	0.0504
1.70	0.0000	0.4438	0.0553	0.1064	0.0098	0.3340	0.0506

<b>R<sub>AE</sub> = 4.5 T<sub>reformador</sub> = 500 ° C</b>							
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C
0.00	0.1818	0.8182	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.04	0.0701	0.6728	0.0572	0.0173	0.0592	0.1183	0.0051
0.13	0.0405	0.6268	0.0758	0.0250	0.0709	0.1510	0.0099
0.22	0.0241	0.6001	0.0858	0.0318	0.0729	0.1704	0.0148
0.31	0.0135	0.5808	0.0914	0.0387	0.0703	0.1853	0.0199
0.39	0.0068	0.5654	0.0938	0.0459	0.0647	0.1984	0.0249
0.48	0.0029	0.5524	0.0935	0.0533	0.0573	0.2108	0.0298
0.57	0.0011	0.5409	0.0914	0.0604	0.0494	0.2228	0.0341
0.65	0.0003	0.5303	0.0882	0.0670	0.0420	0.2344	0.0376
0.74	0.0001	0.5205	0.0847	0.0728	0.0357	0.2456	0.0405
0.83	0.0000	0.5114	0.0813	0.0778	0.0306	0.2561	0.0428
0.92	0.0000	0.5029	0.0781	0.0822	0.0265	0.2659	0.0445
1.00	0.0000	0.4951	0.0751	0.0859	0.0232	0.2749	0.0458
1.09	0.0000	0.4879	0.0723	0.0892	0.0205	0.2832	0.0469
1.18	0.0000	0.4812	0.0697	0.0921	0.0184	0.2909	0.0477
1.27	0.0000	0.4749	0.0673	0.0947	0.0166	0.2982	0.0484
1.35	0.0000	0.4690	0.0651	0.0970	0.0151	0.3049	0.0489
1.44	0.0000	0.4635	0.0629	0.0991	0.0138	0.3113	0.0493
1.53	0.0000	0.4582	0.0609	0.1011	0.0127	0.3174	0.0497
1.62	0.0000	0.4536	0.0591	0.1027	0.0119	0.3228	0.0500
1.70	0.0000	0.4487	0.0572	0.1044	0.0110	0.3284	0.0502

<b>R<sub>AE</sub> = 5 T<sub>reformador</sub> = 500 ° C</b>							
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C
0.00	0.1667	0.8333	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.04	0.0719	0.6698	0.0549	0.0166	0.0577	0.1149	0.0046
0.13	0.0427	0.6206	0.0727	0.0235	0.0695	0.1456	0.0089
0.22	0.0265	0.5923	0.0822	0.0295	0.0720	0.1634	0.0132
0.31	0.0159	0.5731	0.0880	0.0356	0.0705	0.1772	0.0177
0.39	0.0088	0.5593	0.0913	0.0420	0.0663	0.1897	0.0223
0.48	0.0043	0.5483	0.0923	0.0488	0.0603	0.2016	0.0268
0.57	0.0018	0.5384	0.0913	0.0556	0.0533	0.2131	0.0311
0.65	0.0007	0.5291	0.0890	0.0620	0.0462	0.2243	0.0348
0.74	0.0002	0.5201	0.0860	0.0679	0.0397	0.2351	0.0379
0.83	0.0001	0.5116	0.0828	0.0731	0.0343	0.2454	0.0404
0.92	0.0000	0.5037	0.0797	0.0776	0.0298	0.2552	0.0424
1.00	0.0000	0.4964	0.0768	0.0816	0.0261	0.2644	0.0440
1.09	0.0000	0.4896	0.0741	0.0852	0.0232	0.2730	0.0453
1.18	0.0000	0.4832	0.0716	0.0883	0.0207	0.2809	0.0463
1.27	0.0000	0.4773	0.0692	0.0910	0.0187	0.2884	0.0471
1.35	0.0000	0.4717	0.0670	0.0935	0.0170	0.2953	0.0478
1.44	0.0000	0.4664	0.0649	0.0958	0.0156	0.3019	0.0483
1.53	0.0000	0.4618	0.0630	0.0978	0.0143	0.3078	0.0488
1.62	0.0000	0.4575	0.0614	0.0996	0.0132	0.3129	0.0492
1.70	0.0000	0.4536	0.0599	0.1010	0.0122	0.3172	0.0495

<b>R<sub>AE</sub> = 5.5 T<sub>reformador</sub> = 500 ° C</b>							
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C
0.00	0.1538	0.8462	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.04	0.0747	0.6793	0.0539	0.0163	0.0575	0.1141	0.0042
0.13	0.0459	0.6346	0.0722	0.0230	0.0703	0.1457	0.0083
0.22	0.0296	0.6089	0.0824	0.0288	0.0738	0.1641	0.0124
0.31	0.0186	0.5902	0.0887	0.0346	0.0732	0.1780	0.0166
0.39	0.0109	0.5753	0.0925	0.0406	0.0699	0.1899	0.0210
0.48	0.0058	0.5626	0.0939	0.0468	0.0645	0.2010	0.0253
0.57	0.0027	0.5515	0.0935	0.0533	0.0579	0.2117	0.0295
0.65	0.0011	0.5414	0.0915	0.0596	0.0509	0.2222	0.0333
0.74	0.0004	0.5319	0.0888	0.0655	0.0442	0.2326	0.0366
0.83	0.0001	0.5230	0.0857	0.0708	0.0383	0.2428	0.0393
0.92	0.0000	0.5146	0.0825	0.0756	0.0334	0.2524	0.0415
1.00	0.0000	0.5067	0.0795	0.0797	0.0293	0.2615	0.0432
1.09	0.0000	0.4993	0.0767	0.0834	0.0260	0.2700	0.0446
1.18	0.0000	0.4924	0.0741	0.0866	0.0232	0.2780	0.0457
1.27	0.0000	0.4860	0.0716	0.0895	0.0209	0.2854	0.0466
1.35	0.0000	0.4799	0.0692	0.0921	0.0190	0.2924	0.0474
1.44	0.0000	0.4743	0.0671	0.0944	0.0173	0.2988	0.0480
1.53	0.0000	0.4693	0.0652	0.0965	0.0159	0.3047	0.0485
1.62	0.0000	0.4648	0.0634	0.0983	0.0147	0.3098	0.0490
1.70	0.0000	0.4609	0.0619	0.0999	0.0136	0.3144	0.0494

<b>R<sub>AE</sub> = 6 T<sub>reformador</sub> = 500 ° C</b>							
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C
0.00	0.1429	0.8571	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.04	0.0766	0.6819	0.0526	0.0159	0.0567	0.1124	0.0039
0.13	0.0481	0.6378	0.0707	0.0223	0.0699	0.1436	0.0077
0.22	0.0319	0.6124	0.0809	0.0277	0.0740	0.1617	0.0115
0.31	0.0208	0.5940	0.0875	0.0330	0.0741	0.1752	0.0154
0.39	0.0129	0.5792	0.0916	0.0386	0.0716	0.1868	0.0195
0.48	0.0073	0.5666	0.0936	0.0444	0.0671	0.1974	0.0236
0.57	0.0037	0.5556	0.0938	0.0505	0.0612	0.2076	0.0276
0.65	0.0016	0.5456	0.0925	0.0566	0.0545	0.2177	0.0314
0.74	0.0007	0.5363	0.0901	0.0624	0.0479	0.2277	0.0348
0.83	0.0002	0.5275	0.0873	0.0678	0.0419	0.2376	0.0376
0.92	0.0001	0.5192	0.0843	0.0727	0.0366	0.2471	0.0400
1.00	0.0000	0.5112	0.0813	0.0770	0.0322	0.2563	0.0419
1.09	0.0000	0.5038	0.0784	0.0809	0.0286	0.2648	0.0435
1.18	0.0000	0.4968	0.0757	0.0843	0.0255	0.2729	0.0447
1.27	0.0000	0.4902	0.0732	0.0873	0.0230	0.2805	0.0458
1.35	0.0000	0.4841	0.0709	0.0900	0.0209	0.2876	0.0466
1.44	0.0000	0.4783	0.0686	0.0925	0.0190	0.2942	0.0473
1.53	0.0000	0.4731	0.0666	0.0947	0.0174	0.3003	0.0479
1.62	0.0000	0.4686	0.0649	0.0966	0.0161	0.3055	0.0484
1.70	0.0000	0.4645	0.0633	0.0983	0.0149	0.3101	0.0488

**Variando Temperatura de la mezcla bioetanol – agua a la entrada del reformador.**

<b>R<sub>AE</sub>=5 T<sub>reformador</sub> = 400 ° C</b>								
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C	T(° C)
0.00	0.1667	0.8333	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	400.00
0.04	0.1131	0.7370	0.0289	0.0100	0.0359	0.0740	0.0010	329.54
0.13	0.0914	0.7034	0.0427	0.0132	0.0494	0.0977	0.0021	310.00
0.22	0.0777	0.6832	0.0518	0.0154	0.0569	0.1116	0.0034	302.48
0.31	0.0675	0.6682	0.0586	0.0174	0.0618	0.1218	0.0047	299.99
0.39	0.0590	0.6560	0.0643	0.0193	0.0652	0.1301	0.0060	300.23
0.48	0.0517	0.6452	0.0693	0.0212	0.0677	0.1374	0.0075	302.30
0.57	0.0450	0.6355	0.0737	0.0232	0.0695	0.1440	0.0090	305.63
0.65	0.0389	0.6264	0.0777	0.0253	0.0707	0.1503	0.0106	309.92
0.74	0.0333	0.6179	0.0813	0.0275	0.0714	0.1563	0.0123	315.04
0.83	0.0281	0.6096	0.0847	0.0298	0.0716	0.1621	0.0141	320.88
0.92	0.0232	0.6017	0.0876	0.0323	0.0713	0.1679	0.0160	327.42
1.00	0.0187	0.5941	0.0902	0.0349	0.0705	0.1736	0.0180	334.58
1.09	0.0146	0.5867	0.0924	0.0377	0.0692	0.1793	0.0201	342.29
1.18	0.0111	0.5795	0.0940	0.0407	0.0673	0.1851	0.0223	350.48
1.27	0.0080	0.5726	0.0951	0.0439	0.0649	0.1909	0.0245	359.05
1.35	0.0055	0.5660	0.0956	0.0473	0.0620	0.1969	0.0268	367.79
1.44	0.0036	0.5596	0.0955	0.0507	0.0586	0.2030	0.0290	376.50
1.53	0.0022	0.5533	0.0948	0.0543	0.0550	0.2092	0.0311	384.91
1.62	0.0013	0.5473	0.0936	0.0578	0.0512	0.2155	0.0332	392.78
1.70	0.0007	0.5414	0.0921	0.0613	0.0475	0.2219	0.0351	399.94

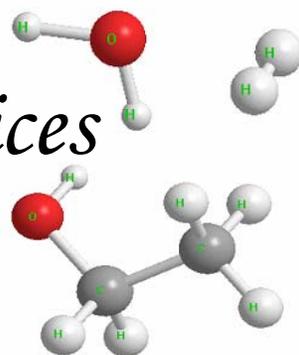
R <sub>AE</sub> =5 T <sub>reformador</sub> = 450 ° C								
L (m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C	T (° C)
0.00	0.1667	0.8333	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	450.00
0.04	0.0933	0.7076	0.0420	0.0128	0.0478	0.0943	0.0023	360.69
0.13	0.0674	0.6681	0.0586	0.0174	0.0618	0.1219	0.0047	339.76
0.22	0.0519	0.6450	0.0688	0.0210	0.0682	0.1379	0.0072	334.05
0.31	0.0406	0.6280	0.0762	0.0245	0.0714	0.1497	0.0097	334.64
0.39	0.0315	0.6140	0.0820	0.0279	0.0727	0.1595	0.0123	338.78
0.48	0.0239	0.6019	0.0867	0.0315	0.0726	0.1682	0.0151	345.31
0.57	0.0175	0.5910	0.0904	0.0354	0.0713	0.1764	0.0180	353.62
0.65	0.0122	0.5810	0.0931	0.0394	0.0690	0.1843	0.0211	363.33
0.74	0.0080	0.5717	0.0947	0.0438	0.0656	0.1920	0.0242	374.00
0.83	0.0049	0.5631	0.0953	0.0484	0.0613	0.1997	0.0273	385.14
0.92	0.0027	0.5550	0.0948	0.0531	0.0564	0.2076	0.0304	396.11
1.00	0.0014	0.5474	0.0935	0.0577	0.0513	0.2155	0.0332	406.38
1.09	0.0006	0.5400	0.0916	0.0623	0.0462	0.2234	0.0358	415.49
1.18	0.0003	0.5329	0.0893	0.0666	0.0415	0.2314	0.0380	423.25
1.27	0.0001	0.5261	0.0869	0.0706	0.0372	0.2392	0.0399	429.74
1.35	0.0000	0.5195	0.0845	0.0742	0.0335	0.2467	0.0415	435.11
1.44	0.0000	0.5132	0.0821	0.0775	0.0304	0.2540	0.0429	439.63
1.53	0.0000	0.5072	0.0798	0.0804	0.0276	0.2608	0.0440	443.52
1.62	0.0000	0.5016	0.0776	0.0831	0.0253	0.2674	0.0450	446.95
1.70	0.0000	0.4962	0.0755	0.0856	0.0233	0.2736	0.0458	450.05

R <sub>AE</sub> =5 T <sub>reformador</sub> = 500 ° C								
L(m)	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	H <sub>2</sub> O	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	H <sub>2</sub>	C	T (° C)
0.00	0.1667	0.8333	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	500.00
0.04	0.0719	0.6698	0.0549	0.0166	0.0577	0.1149	0.0046	396.75
0.13	0.0427	0.6206	0.0727	0.0235	0.0695	0.1456	0.0089	373.72
0.22	0.0265	0.5923	0.0822	0.0295	0.0720	0.1634	0.0132	367.84
0.31	0.0159	0.5731	0.0880	0.0356	0.0705	0.1772	0.0177	368.92
0.39	0.0088	0.5593	0.0913	0.0420	0.0663	0.1897	0.0223	373.79
0.48	0.0043	0.5483	0.0923	0.0488	0.0603	0.2016	0.0268	381.15
0.57	0.0018	0.5384	0.0913	0.0556	0.0533	0.2131	0.0311	390.27
0.65	0.0007	0.5291	0.0890	0.0620	0.0462	0.2243	0.0348	400.67
0.74	0.0002	0.5201	0.0860	0.0679	0.0397	0.2351	0.0379	411.89
0.83	0.0001	0.5116	0.0828	0.0731	0.0343	0.2454	0.0404	423.43
0.92	0.0000	0.5037	0.0797	0.0776	0.0298	0.2552	0.0424	434.78
1.00	0.0000	0.4964	0.0768	0.0816	0.0261	0.2644	0.0440	445.47
1.09	0.0000	0.4896	0.0741	0.0852	0.0232	0.2730	0.0453	455.25
1.18	0.0000	0.4832	0.0716	0.0883	0.0207	0.2809	0.0463	463.96
1.27	0.0000	0.4773	0.0692	0.0910	0.0187	0.2884	0.0471	471.64
1.35	0.0000	0.4717	0.0670	0.0935	0.0170	0.2953	0.0478	478.46
1.44	0.0000	0.4664	0.0649	0.0958	0.0156	0.3019	0.0483	484.54
1.53	0.0000	0.4618	0.0630	0.0978	0.0143	0.3078	0.0488	490.07
1.62	0.0000	0.4575	0.0614	0.0996	0.0132	0.3129	0.0492	495.20
1.70	0.0000	0.4536	0.0599	0.1010	0.0122	0.3172	0.0495	500.00

<b>R<sub>AE</sub>=5 T<sub>reformador</sub> = 550 ° C</b>								
<b>L (m)</b>	<b>CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>CO<sub>2</sub></b>	<b>CO</b>	<b>H<sub>2</sub></b>	<b>C</b>	<b>T (° C)</b>
0.00	0.1667	0.8333	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	550.00
0.04	0.0536	0.6460	0.0672	0.0220	0.0656	0.1378	0.0078	428.99
0.13	0.0242	0.5973	0.0846	0.0326	0.0729	0.1737	0.0147	415.16
0.22	0.0106	0.5708	0.0912	0.0421	0.0691	0.1949	0.0213	422.92
0.31	0.0040	0.5525	0.0922	0.0514	0.0610	0.2114	0.0275	437.39
0.39	0.0013	0.5382	0.0901	0.0601	0.0515	0.2260	0.0328	452.13
0.48	0.0004	0.5259	0.0865	0.0678	0.0428	0.2395	0.0371	464.22
0.57	0.0001	0.5150	0.0826	0.0743	0.0356	0.2520	0.0404	473.20
0.65	0.0000	0.5051	0.0789	0.0798	0.0300	0.2634	0.0428	479.80
0.74	0.0000	0.4961	0.0754	0.0844	0.0256	0.2737	0.0447	484.81
0.83	0.0000	0.4880	0.0723	0.0883	0.0222	0.2831	0.0461	488.90
0.92	0.0000	0.4806	0.0695	0.0916	0.0195	0.2916	0.0472	492.46
1.00	0.0000	0.4738	0.0669	0.0945	0.0174	0.2995	0.0480	495.72
1.09	0.0000	0.4675	0.0644	0.0971	0.0156	0.3067	0.0486	498.84
1.18	0.0000	0.4630	0.0627	0.0992	0.0139	0.3119	0.0493	504.72
1.27	0.0000	0.4597	0.0614	0.1007	0.0127	0.3158	0.0499	511.42
1.35	0.0000	0.4568	0.0603	0.1019	0.0116	0.3191	0.0503	518.52
1.44	0.0000	0.4544	0.0593	0.1030	0.0107	0.3218	0.0507	525.98
1.53	0.0000	0.4525	0.0585	0.1039	0.0100	0.3241	0.0510	533.79
1.62	0.0000	0.4508	0.0578	0.1046	0.0093	0.3260	0.0514	541.79
1.70	0.0000	0.4495	0.0572	0.1052	0.0088	0.3276	0.0517	550.03

<b>R<sub>AE</sub>=5 T<sub>reformador</sub> = 600 ° C</b>								
<b>L (m)</b>	<b>CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH</b>	<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b>CO<sub>2</sub></b>	<b>CO</b>	<b>H<sub>2</sub></b>	<b>C</b>	<b>T (° C)</b>
0.00	0.1667	0.8333	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	600.00
0.04	0.0345	0.6119	0.0774	0.0300	0.0695	0.1641	0.0126	473.32
0.13	0.0088	0.5593	0.0890	0.0467	0.0664	0.2069	0.0231	475.27
0.22	0.0018	0.5317	0.0869	0.0610	0.0531	0.2339	0.0316	495.29
0.31	0.0003	0.5116	0.0810	0.0726	0.0407	0.2560	0.0378	512.83
0.39	0.0000	0.4949	0.0747	0.0815	0.0316	0.2752	0.0420	524.70
0.48	0.0000	0.4805	0.0688	0.0883	0.0256	0.2920	0.0449	532.52
0.57	0.0000	0.4677	0.0635	0.0934	0.0216	0.3069	0.0469	538.09
0.65	0.0000	0.4564	0.0585	0.0975	0.0189	0.3202	0.0485	542.49
0.74	0.0000	0.4462	0.0540	0.1007	0.0172	0.3323	0.0497	546.26
0.83	0.0000	0.4368	0.0496	0.1033	0.0161	0.3434	0.0508	549.70
0.92	0.0000	0.4380	0.0504	0.1050	0.0125	0.3418	0.0522	553.00
1.00	0.0000	0.4398	0.0516	0.1061	0.0099	0.3396	0.0531	556.24
1.09	0.0000	0.4113	0.0356	0.1065	0.0185	0.3745	0.0537	559.51
1.18	0.0000	0.4149	0.0378	0.1082	0.0141	0.3700	0.0551	562.87
1.27	0.0000	0.3973	0.0279	0.1090	0.0182	0.3915	0.0561	566.56
1.35	0.0000	0.4006	0.0299	0.1106	0.0142	0.3874	0.0574	570.66
1.44	0.0000	0.3901	0.0240	0.1114	0.0160	0.4003	0.0582	575.44
1.53	0.0000	0.3833	0.0203	0.1125	0.0161	0.4086	0.0592	581.38
1.62	0.0000	0.3780	0.0174	0.1136	0.0157	0.4150	0.0603	589.22
1.70	0.0000	0.3740	0.0152	0.1147	0.0148	0.4199	0.0614	599.90

# *Apéndice*



**A. Modelo para calcular el diámetro de carcaza (Dc) de un Intercambiador de Calor de Tubos y concha.**

Para el cálculo del diámetro interior de la carcaza (Dc) se utilizan los siguientes modelos encontrados con la base de datos brindada por el Software Profesional Hysys. Estos modelos se obtienen de la relación del diámetro interno de la carcaza con el número de tubos, el diámetro interno de los tubos, el arreglo de los tubos y el paso.

1. Para diámetro exterior de los tubos de 0.75 plg y arreglo triangular.

- Pt =  $15/16$  plg:

$$Dc = 0.995846 + 1.05806\sqrt{Nt}$$

- Pt = 1plg:

$$Dc = 0.999778 + 1.12839\sqrt{Nt}$$

2. Para diámetro exterior de los tubos de 1 plg y arreglo triangular.

- Pt =  $1\frac{1}{4}$  plg:

$$Dc = 0.997631 + 1.41063\sqrt{Nt}$$

- Pt =  $19/16$  plg:

$$Dc = 0.995744 + 1.31029\sqrt{Nt}$$

3. Para diámetro exterior de los tubos de  $1\frac{1}{2}$  plg y arreglo triangular.

- Pt =  $1\frac{7}{8}$  plg:

$$Dc = 1.00027 + 2.11569\sqrt{Nt}$$

Los modelos para el cálculo de Dc tienen un coeficiente de correlación de 1, lo cual muestra la efectividad de los mismos.

**B. Cálculo de las propiedades de los componentes puros.**

**Tabla B.1.** Viscosidades de los Componentes.

Componente	Modelo	R <sup>2</sup>
Etanol	$\mu = 3 \cdot 10^{-8} T + 8 \cdot 10^{-6}$	0.9998
Dióxido de Carbono	$\mu = 4 \cdot 10^{-8} T + 2 \cdot 10^{-6}$	0.9986
Hidrógeno	$\mu = 2 \cdot 10^{-8} T + 4 \cdot 10^{-6}$	0.9989
Metano	$\mu = 3 \cdot 10^{-8} T + 3 \cdot 10^{-6}$	0.9977
Agua	$\mu = 4 \cdot 10^{-8} T - 2 \cdot 10^{-6}$	0.9941
Monóxido de Carbono	$\mu = 3 \cdot 10^{-8} T + 8 \cdot 10^{-6}$	0.9970
Nitrógeno	$\mu = 4 \cdot 10^{-8} T + 6 \cdot 10^{-6}$	0.9965
$\mu$ en Pas y T (K)		

**Tabla B.2.** Conductividad Térmica de los componentes (Ni y Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Pág. 2-334 Perry's).

Componente	Modelo
CO <sub>2</sub>	$K = 7 \cdot 10^{-5} T + 0.0075$
H <sub>2</sub>	$K = 0.0004 \cdot T + 0.0536$
CH <sub>4</sub>	$K = 0.0002 \cdot T - 0.0094$
H <sub>2</sub> O	$K = 0.0001 \cdot T - 0.0232$
CO	$K = 7 \cdot 10^{-7} \cdot T$
N <sub>2</sub>	$K = 6 \cdot 10^{-5} \cdot T + 0.0074$
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	$K = 7 \cdot 10^{-5} \cdot T + 0.031$
Alúmina	$K = 100.87 + 0.11748 \cdot T - 7.987 \cdot 10^{-4} T^2 + 1.33 \cdot 10^{-6} T^3 - 4.81 \cdot 10^{-10} T^4$
Ni	$K = 66.744 - 0.126 \cdot T + 6.766210^{-5} T^2$
K en W/m <sup>2</sup> K	

**Tabla B.3.** Capacidades caloríficas de los Componentes.

Componente	Modelo	R <sup>2</sup>
CO <sub>2</sub>	$C_p = 4.728 + 1.75 \cdot 10^{-2} T - 1.34 \cdot 10^{-5} T^2$	0.9971
H <sub>2</sub>	$C_p = 6.483 + 2.22 \cdot 10^{-3} T - 3.3 \cdot 10^{-6} T^2$	0.9931
CH <sub>4</sub>	$C_p = 4.598 + 1.25 \cdot 10^{-2} T + 2.86 \cdot 10^{-6} T^2$	0.9850
H <sub>2</sub> O	$C_p = 7.701 + 4.6 \cdot 10^{-4} T + 2.52 \cdot 10^{-6} T^2$	0.9961
CO	$C_p = 7.373 - 3.07 \cdot 10^{-3} T + 6.66 \cdot 10^{-6} T^2$	0.9800
N <sub>2</sub>	$C_p = 7.44 - 3.24 \cdot 10^{-3} T + 6.4 \cdot 10^{-6} T^2$	0.9915
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	$C_p = 2.153 + 5.113 \cdot 10^{-2} T - 2.004 \cdot 10^{-5} T^2$	0.9999
Cp en cal/mol <sup>o</sup> K y T (°K) = Cp·(4.19/Mm) J/g <sup>o</sup> K		

**Tabla B.4.** Densidad del Gas Ideal<sup>1</sup> (Kg/m<sup>3</sup> y T (°K))

Componente	Modelo	R <sup>2</sup>
CO <sub>2</sub>	$\rho = 2.6 - 3.885869 \cdot 10^{-3} T + 1.82 \cdot 10^{-6} T^2$	0.9972
H <sub>2</sub>	$\rho = 0.1221857 - 1.87923 \cdot 10^{-4} T + 8.96 \cdot 10^{-8} T^2$	0.9972
CH <sub>4</sub>	$\rho = 1.890221 - 5.59 \cdot 10^{-3} T + 6.1 \cdot 10^{-6} T^2 - 2.24 \cdot 10^{-9} T^3$	0.9972
H <sub>2</sub> O	$\rho = 1.0126353 - 1.530629 \cdot 10^{-3} T + 7.23 \cdot 10^{-7} T^2$	0.9972
CO	$\rho = 2.3792996 - 3.59709 \cdot 10^{-3} T + 1.7 \cdot 10^{-6} T^2$	0.9972
N <sub>2</sub>	$\rho = 1.6669032 - 2.518229 \cdot 10^{-3} T + 1.19 \cdot 10^{-6} T^2$	0.997
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	$\rho = 1.3549433 - 1.1567373 \cdot 10^{-3} T + 6.52 \cdot 10^{-7} T^2$	0.9972

Para el cálculo del calor latente de los compuestos se utiliza la Ecuación propuesta por Perry, R. (1999) en la Tabla 2.193.

$$\lambda = C_1 \cdot (1 - Tr)^{C_2 + C_3 \cdot Tr + C_4 \cdot Tr^2} \quad Tr = \frac{T}{T_c}$$

**Tabla B. 5.** Calor latente para los componentes puros.

Componente	Constantes				Tc (K)
	C1×10 <sup>-7</sup>	C2	C3	C4	
Etanol	5.69	0.3359	0	0	516.2
Agua	5.2053	0.3199	0.212	0.5795	647.3

### **C. Cálculo de las propiedades de las mezclas.**

#### **Densidad de la mezcla líquida:**

$$\rho_{11} = -9 \cdot 10^{-6} \text{Rae}^2 - 0.001 \text{Rae} + 0.9738 \quad T = 30^\circ\text{C} \quad \text{y} \quad P = 1 \text{ atm} \quad (\text{López, N. 2004})$$

Corrección de temperatura, utilizando la ecuación 3.26 a) (Perry, R. 1989) para la temperatura deseada.

$$\frac{(\rho_{12} - \rho_{v2})}{(\rho_{11} - \rho_{v1})} = \left( \frac{T_{sc} - T_{12}}{T_{sc} - T_{11}} \right)^{0.25}$$

$$\rho_{12} = \rho_{11} * \left( \frac{T_{sc} - T_{12}}{T_{sc} - T_{11}} \right)^{0.25}$$

#### **Conductividad térmica:**

$$k_m = \sum y_i k_i$$

#### **Calor específico.**

$$Cp_m = \sum y_i Cp_i$$

#### **Calor latente de vaporización:**

$$\lambda_m = \sum y_i \lambda_i$$

#### **Viscosidad:**

$$\mu_m = \frac{\sum y_i \cdot \mu_i \cdot M_i^{0.5}}{\sum y_i \cdot M_i^{0.5}} \quad \text{Método empírico propuesto por Pavlov, K.F. (1981) y Perry, R. (1989).}$$