

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Facultad de Ingeniería Química
División de Estudios de Posgrado



Doctorado en Ciencias en
Ingeniería Química



**“Análisis, Simulación y Optimización de Procesos para la
Valorización de Emisiones Gaseosas Industriales”**

Tesis Presentada Por:

M.C. Alejandro Solis Jácome

Para Obtener el grado de Doctor en Ciencias en Ingeniería Química

Director de Tesis:

Dr. José María Ponce Ortega

Co-Director de Tesis:

Dr. Miguel Ángel Morales Cabrera

Morelia, Mich., noviembre 2024.

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi asesor el Dr. José María Ponce Ortega por todos los conocimientos brindados y su apoyo en todo el transcurso de mis estudios de doctorado, por su dedicación y tiempo invertido para la dirección, revisión y mejora del presente trabajo, sin usted no hubiera podido culminar este trabajo de investigación. Por último, me queda decir que lo admiro mucho y espero poder seguir trabajando y aprendiendo de usted en la siguiente etapa y proyectos futuros.

De la misma manera agradezco a mi co-asesor el Dr. Miguel Ángel Morales Cabrera por todos los conocimientos que me ha brindado, su apoyo durante las revisiones del trabajo. Por todos los años que me ha apoyado (maestría y doctorado) como profesor y amigo le doy gracias con todo el corazón.

A mis padres, por guiarme para ser la persona que soy ahora y apoyarme en mis decisiones. Por enseñarme siempre a ser una mejor persona. Agradezco a toda mi familia por brindarme su cariño y preocuparse por mi bienestar.

Te agradezco a ti, por ser una persona tan especial en mi vida. Apoyarme durante estos cuatro años. Por estar a mi lado, siempre darme ánimos y ayudarme a mejorar como persona. Siempre estarás en mi corazón.

Agradezco a mi amiga Jazael Moguel por ser una gran amiga y por brindarme tu apoyo. De igual manera agradezco a mi amigo Jorge Romero, por ser tan buen amigo y siempre darme ánimos. A mi amigo Jorge Ochoa por todos los años de amistad que me has brindado, por todo tu apoyo y siempre estar ahí para mí.

Gracias a mis sinodales por sus revisiones constantes durante todo el doctorado, gracias por ayudar a mejorar el trabajo.

Agradezco al Consejo Nacional de Humanidades Ciencia y Tecnología de México (CONAHCyT) por brindarme el apoyo económico para desarrollar mis estudios de maestría y para la realización de este trabajo de investigación.

Índice

I	Resumen.....	IX
II	Abstrac.....	X
1	Capítulo I: Generalidades.....	10
1.1.	Introducción.....	11
1.2.	Antecedentes.....	14
1.3.	Planteamiento del problema.....	18
1.4.	Justificación.....	19
1.5.	Hipótesis.....	20
1.6.	Objetivos.....	21
	1.6.1. General.....	21
	1.6.2. Específicos.....	21
1.7.	Marco Teórico.....	22
	1.7.1. Modelado y simulación de procesos.....	22
	1.7.2. Optimización de procesos.....	23
	1.7.3. Algoritmos genéticos.....	24
	1.7.4. Aspen Plus.....	25
	1.7.5. Aspen Hysys.....	25
	1.7.6. I-MODE.....	26
2.	Capítulo II: Producción de syngas a partir de una corriente residual proveniente de una planta petroquímica.....	28
2.1.	Simulación del proceso.....	29
2.2.	Integración energética del proceso.....	31
2.3.	Diseño experimental.....	34
2.4.	Optimización Metaheurística.....	35
2.5.	Resultados.....	37
3.	Capítulo III; Producción de metanol a partir de una corriente residual proveniente de una planta endulzadora de gas natural.....	41
3.1.	Simulación del proceso.....	42
3.2.	Diseño experimental.....	47

3.3. Análisis económico-ambiental.....	48
3.4. Integración energética.....	49
3.5. Resultados.....	50
4. Conclusiones.....	54
Anexo I.....	57
Anexo II.....	58
Referencias bibliográficas.....	59

Índice de tablas

Tabla 1. Equipos utilizados en la simulación de la producción de syngas.....	33
Tabla 2. Composición de la corriente de alimentación al proceso.....	34
Tabla 3. Corrientes consideradas en la integración energética del proceso de syngas.....	38
Tabla 4. Valores analizados para las variables involucradas en el ANOVA.....	38
Tabla 5. Composición del flujo de syngas obtenido.....	41
Tabla 6. Comparación del consumo energético utilizado en la producción de syngas.....	43
Tabla 7. Comparación del proceso con y sin optimización.....	44
Tabla 8. Composición del gas amargo alimentado al proceso.....	46
Tabla 9. Condiciones del gas amargo alimentado al proceso.....	47
Tabla 10. Composición del solvente químico usado en el proceso.....	47
Tabla 11. Condiciones del solvente químico alimentado al proceso de absorción.....	47
Tabla 12. Equipos utilizados en el proceso de endulzamiento de gas natural.....	48
Tabla 13. Composición del gas ácido.....	49
Tabla 14. Equipos utilizados en la producción de syngas.....	50
Tabla 15. Equipos utilizados en la producción de metanol.....	51
Tabla 16. Valores analizados para las variables implicadas en el ANOVA.....	52
Tabla 17. Corrientes utilizadas en la integración energética del proceso de metanol.....	54
Tabla 18. Composición del flujo de syngas obtenido.....	54
Tabla 19. Condiciones de operación para el punto seleccionado.....	56
Tabla 20. Comparación entre los procesos con integración energética y sin integración energética.....	57

Índice de figuras

Figura 1. Esquema producción de syngas.....	33
Figura 2. Productos obtenidos a diferentes temperaturas de R2.....	42
Figura 3. Esquema de producción de syngas (Integrado).....	42
Figura 4. Esquema del proceso de endulzamiento de gas natural.....	48
Figura 5. Esquema del proceso de syngas acoplado a la planta endulzadora.....	49
Figura 6. Esquema del proceso de metanol acoplado a la planta endulzadora.....	50
Figura 7. Producción de metanol a partir de corrientes residuales de endulzamiento de gas natural.....	51
Figura 8. Pareto de la producción de metanol comparando las emisiones de CO ₂ producidas contra el profit.....	55
Figura 9. Producción de metanol a partir de corrientes residuales del endulzamiento de gas natural (Integrado).....	56
Figura 10. Producción de metanol a partir de corrientes residuales del endulzamiento de gas natural (Intensificado).....	57

Nomenclatura

ANOVA	Análisis de varianza
MINLP	Programación no lineal entera mixta
I-MODE	Evolución diferencial multiobjetivo mejorada
C_{CU}	Costo unitario de servicios de enfriamiento, \$/kW-año
C_{HU}	Costo unitario de servicios de calentamiento, \$/kW-año
CF	Costo fijo para intercambiadores, \$/año
EF1	Factor de emisión
EF2	Factos de eficiencia
FCp	Capacidad calorífica del caudal, kW/°C
h	Coefficiente de transferencia de calor de película, kW/m ² K
k_f	Factor utilizado para anualizar costos
β	Exponente del costo del área de los intercambiadores.
CaC	Costo capital para los intercambiadores, \$/año
CPS	
dt	Diferencia de temperatura, K.
EnergyCons	Consumo energético, BTU/hr
FiC	Costos fijos de los intercambiadores, \$/año
FlowSyngas	Flujo de syngas, kg/hr
GAMS	Sistema de modelado algebraico general
q	Calor transferido en los intercambiadores de calor, kW
Q_n	Calor asociado a cada reactor n
R_n	Emisiones de CO ₂ asociadas a cada reactor n
TAC	Costo total anual, \$/año
TAE	Emisiones totales anuales, tonCO ₂ /año
T_{IN}	Temperatura de entrada, K
T_{OUT}	Temperatura de salida, K
UtC	Costo de utilidad, \$/año

Resumen

En el presente trabajo de investigación se propone un estudio integral de plantas industriales enfocado en la aplicación de métodos de optimización que permitan el aprovechamiento de corrientes residuales industriales como materia prima y convertirlos en productos con valor agregado como lo es el gas de síntesis (syngas) y metanol. Se han reportado diferentes procesos para la obtención syngas y metanol; sin embargo, estas metodologías se basan en el extensivo uso de recursos naturales como el gas natural. En este trabajo se propone el uso de las corrientes de CO₂ y H₂S típicamente emitidas por plantas industriales y con la aplicación de métodos de optimización permite mejorar significativamente la obtención de productos de calidad, disminuyendo los costos y obteniendo altos rendimientos de producción de syngas. Se identificaron varias opciones de integración energética con plantas de potencia, además de identificar los mejores productos de valor agregado que se pueden obtener a partir del syngas generado. La propuesta contempla el uso de simuladores de procesos como Aspen Plus® y Aspen Hysys ® acoplado con métodos de optimización multi-objetivo. En el trabajo se involucrarán métricas para la evaluación técnica-económica-ambiental que están relacionadas con la valorización de las emisiones consideradas.

Palabras Clave: Corrientes residuales industriales, Producción de syngas, Producción de metanol, Optimización Multi-Objetivo, Integración Energética.

Abstract

This research work proposes an integral study of industrial plants focused on the application of optimization methods that allow the use of industrial waste streams as raw material and convert them into value-added products such as syngas and methanol. Different processes have been reported to obtain syngas and methanol; however, these methodologies are based on the extensive use of natural resources such as natural gas. In this work, the use of CO₂ and H₂S streams typically emitted by industrial plants is proposed and with the application of optimization methods allows to significantly improve the obtaining of quality products, decreasing costs and obtaining high syngas production yields. Several options for energy integration with power plants were identified, in addition to identifying the best value-added products that can be obtained from the syngas generated. The proposal contemplates the use of process simulators such as Aspen Plus® and Aspen Hysys® coupled with multi-objective optimization methods. The work will involve metrics for the technical-economic-environmental evaluation that are related to the valorization of the considered emissions.

Keywords: Industrial waste streams, Syngas production, Methanol production, Multi-objective optimization, Energy integration.

Capítulo I: Generalidades

1.1. Introducción

Actualmente la separación de gases es uno de los procesos más importantes en el campo de la ingeniería química; en específico, la separación de gases ácidos (CO_2 y H_2S) es de considerable importancia desde los puntos de vista ambiental e industrial, como lo es en la reducción de las emisiones gases de efecto invernadero (GEI) (Vakilifard *et al.*, 2022; Bayer *et al.*, 2020). Alrededor del 64% de la demanda final de energía en la industria mexicana corresponde al consumo de calor, donde el 94.5% es cubierto con combustibles fósiles (gas natural, GLP, diésel y gasolina). Esto representa emisiones de gases de efecto invernadero y gastos operativos considerables para las empresas, dado el alto nivel de inflación de los combustibles. Además, se estima que la demanda de calor industrial crecerá un 1,7% anual (Alibrahim *et al.*, 2021; Bayer & Aklin; Bahadori, 2014). Esta situación ha motivado el desarrollo de diferentes técnicas y metodologías llamadas verdes, las cuales están enfocadas a la producción de energías renovables como la eólica (Peng *et al.*, 2021), hidráulica (Xiao *et al.*, 2020) y solar (Almutairi *et al.*, 2022), entre otras. Sin embargo, la mayor cantidad de energía eléctrica se obtiene a partir de combustibles fósiles y esta tendencia puede continuar por más de 50 años (Vakilifard *et al.*, 2022).

Así, numerosos trabajos se han centrado en la mitigación del CO_2 y otros gases como el H_2S a partir del aprovechamiento de los mismos para la obtención de productos de alto valor añadido como el *syngas*, que es una mezcla de hidrógeno, monóxido de carbono y dióxido de carbono, y puede ser utilizado como materia prima para producir químicos como amoníaco y metanol (Mansoor *et al.*, 2021; Bac *et al.*, 2020); además, el H_2 obtenido puede ser utilizado en refinerías de petróleo para producir otros productos de alto valor agregado (Cao *et al.*, 2021; Ozturk *et al.*, 2019).

El *syngas* está desempeñando un papel cada vez mayor en la conversión de energía, además de que se puede producir a partir de casi cualquier fuente de carbono; por ejemplo, a partir de gas natural y productos del petróleo como el carbón y la biomasa mediante oxidación con vapor y oxígeno (Li *et al.*, 2021; Chan *et al.*; 2021). Por lo tanto, representa una clave para crear flexibilidad en la industria química y la fabricación de combustibles sintéticos (Frazão *et al.*, 2020). El uso futuro de *syngas* necesita plantas más eficientes, por lo que los procesos para la producción de *syngas* han sido ampliamente estudiados (Chan *et al.*, 2021),

buscando mejorar los procesos actuales a través de simulaciones de procesos (Dang *et al.*, 2021) mediante la optimización de los procesos productivos (Dell'Angelo *et al.* 2021a; Dell'Angelo *et al.*, 2021b).

Para mejorar la producción del *syngas*, se han propuesto diferentes simulaciones utilizando software comercial como Aspen Plus®, DSMOKE®, Simulation Suite PRO/II® (Dang *et al.*, 2021; Dell'Angelo *et al.* 2021b). Además, se han reportado diferentes enfoques de optimización (Li *et al.*, 2021; Chen *et al.*, 2021; Saidi *et al.*, 2020); sin embargo, las estrategias de optimización implementadas han sido limitadas (Asadi *et al.*, 2021; Al-Lagtah *et al.*, 2015), debido a que los enfoques de programación matemática solo se han centrado en el desarrollo de la optimización mono-objetivo. Los enfoques anteriores se limitan a encontrar una solución y, con frecuencia, solo a encontrar soluciones factibles, sin garantizar la solución óptima global. Además, los enfoques de programación matemática suelen considerar modelos simplificados para las unidades de procesamiento. En este contexto, recientemente se han reportado estrategias de optimización que permiten combinar técnicas de optimización metaheurística (Sharma & Rangaiah, 2013) con simuladores de procesos (Ponce-Ortega & Hernández-Pérez 2019), y de esta forma se garantiza encontrar mejores soluciones involucrando modelos detallados para las unidades de procesamiento.

Una limitación importante de las técnicas reportadas es que pueden manipular un número limitado de grados de libertad; además, si bien se han utilizado esquemas de optimización metaheurística en diferentes procesos como aspectos de seguridad (Hernández-Pérez *et al.*, 2021), biomasa (Ibarra-González *et al.*, 2021), integración energética (López-Flores *et al.*, 2021), producción de metanol (Hernández-Pérez *et al.*, 2020); sin embargo, las variables de decisión se han seleccionado arbitrariamente, por lo que las variables seleccionadas para el proceso de optimización pueden no ser las más adecuadas.

Por lo tanto, en este trabajo se propone un enfoque sistemático para optimizar los procesos para la valorización de corrientes residuales industriales y formulaciones de programación matemática que incorporan un análisis ANOVA para determinar las variables de decisión. Las técnicas de optimización metaheurística se utilizan para optimizar el proceso de producción de gas de síntesis a partir de corrientes de desechos industriales que contienen H₂S y CO₂ mediante simulaciones en Aspen Plus® para la producción de gas de síntesis. Se

espera que la aplicación de los métodos de optimización permita mejorar significativamente la obtención de productos de calidad, el ahorro de insumos energéticos y un buen rendimiento en la producción de *syngas* de la cual la planta pueda ser beneficiada.

1.2. Antecedentes

En la presente sección se abordarán trabajos previos enfocados al estudio de las emisiones de CO₂ y H₂S. Se presentan propuestas para la revalorización de estos gases y propuestas de optimización en diferentes procesos.

El aumento de las emisiones de gases de efecto invernadero en el medio ambiente ha contribuido al calentamiento global. La Agencia Internacional de Energía (2020) ha informado que la emisión del gas de efecto invernadero primario, CO₂, aumenta aproximadamente un 6% cada año debido a la dependencia de las economías mundiales de los combustibles fósiles como fuente de energía.

La contaminación atmosférica es uno de los principales focos de atención en la comunidad científica, pues es precursora del calentamiento global y a su vez del cambio climático que sufre el planeta. En general, la industria tiene un consumo energético elevado, lo que se traduce en la generación de altas cantidades de subproductos asociados con gases de efecto invernadero. Estos gases dañinos están compuestos por 80% de CO₂. Específicamente en 2019 se reportó un crecimiento del 2% en las emisiones de CO₂, alcanzando un total de 36.8 Gt anuales, siendo el volumen de emisiones más representativo. De esta cantidad, el sector industrial es responsable del 60-75% de su producción debido a actividades relacionadas principalmente a la ignición de material orgánico y combustibles fósiles (Tan *et al.*, 2019; Wang *et al.*, 2019).

En ese sentido, la tecnología para la captura y el almacenamiento del CO₂ para evitar que llegue a la atmósfera es una de las soluciones mayormente aplicables a nivel industrial. De acuerdo con la predicción del Instituto Global de Almacenamiento y Captura de Carbono (CCS), se debe lograr capturar el 14% del CO₂ producido a nivel mundial con la finalidad de reducir la temperatura global en 2°C para el 2060 y evitar daños irreversibles al planeta, por lo que es necesario que más de 2500 instalaciones para la captura de CO₂ con capacidades alrededor de 15 megatonnes (Mt) de CO₂ capturado al año para 2040 (Tan *et al.*, 2019) sean instaladas.

Sin embargo, la implementación de un proceso de captura de CO₂ en una planta química supone un incremento de costes y complejidad frente a los procesos convencionales,

ya que implican procesos emergentes en los que puede ser necesaria más de una operación (Borhani & Wang 2019). De esta forma, numerosos trabajos se han centrado en la mitigación de CO₂ y otros gases como el H₂S a partir de la utilización de los mismos para la obtención de productos de alto valor añadido como el *syngas*, que es una mezcla de hidrógeno, monóxido de carbono y pequeñas cantidades de dióxido de carbono que puede ser utilizada como materia prima para la producción de productos químicos como amoníaco y metanol (Mansoor y Tahir 2021; Bac et al. 2020), además, el H₂ obtenido puede ser utilizado en refinerías de petróleo para producir combustibles (Cao *et al.* 2021; Ozturk & Avci 2019).

Debido a esto, numerosos trabajos se han enfocado en la mitigación del CO₂ y otros gases como el H₂S a partir del aprovechamiento de estos para obtener productos de alto valor agregado como es el *syngas*, el cual puede ser usado como materia prima para la producción de productos químicos como el amoníaco y el metanol, además, el H₂ obtenido puede usarse en refinerías de petróleo para producir combustibles. En ese sentido, desarrollar estrategias que permitan disminuir el impacto ambiental, mejorar la calidad de los productos y tomar acciones inmediatas tales como la implementación de métodos de control y optimización representa un reto para el ingeniero de procesos. No obstante, una de las limitantes principales se debe a que en una planta existen numerosas variables que pueden brindar información global de su rendimiento, principalmente las variables clave del proceso principal, las cuales permiten determinar el rendimiento, estabilidad y la eficiencia de los productos. Aunado a esto, las características de los productos no dependen de una sola etapa, también dependen del pretratamiento de la materia prima y el postratamiento del producto.

Lo anterior hace evidente la necesidad de estudiar en conjunto los procesos de las plantas químicas, proponiendo estrategias que permitan obtener productos de alta calidad, integrando al estudio la captura del CO₂ generado mediante técnicas de ingeniería verde.

Para la eliminación de gases ácidos ya existen numerosos trabajos basados en el estudio del proceso de producción de *syngas*. Por ejemplo, Peng *et al.* (2017) analizaron la gasificación con vapor de aire de los residuos de madera en un lecho fluidizado con el uso de catalizadores metálicos, variando la carga de catalizador, tiempo de residencia y temperatura de gasificación y medir la producción de H₂ y *syngas*. Encontrando que el proceso se ve favorecido por altas temperaturas y cargas de catalizador.

Dang *et al.* (2021) desarrollaron una simulación de gasificación de biomasa para la producción de *syngas* con vapor como agente gasificante utilizando Aspen Plus con el objetivo de estudiar el efecto de parámetros importantes como la temperatura de gasificación, la relación de vapor a biomasa y la temperatura de reacción de cambio en la concentración de hidrógeno, concentración de CO, conversión de CO, conversión de CO₂ y relación H₂/CO en *syngas*. Ellos realizaron simulaciones para diferentes materias primas de biomasa para predecir su composición de *syngas*. El modelo fue validado con datos experimentales de la literatura sobre gasificación de biomasa realizada en un gasificador de lecho fluidizado. Chen *et al.* (2021) estudiaron la producción de *syngas* a partir de metano y utilizaron un ANOVA para determinar las variables más importantes del proceso, encontrando la temperatura como el factor más importante.

Dell' Angelo *et al.* (2021b) propusieron un estudio y optimización del rendimiento de la tecnología *Acid to Syngas* (AG2STM), analizando desde el proceso el punto de vista termodinámico y cinético, utilizaron datos experimentales para validar el modelo propuesto. Los resultados mostraron que la optimización de los parámetros sensibles del proceso mejora la sostenibilidad del proceso en términos de la calidad del gas producido.

También diferentes líneas de investigación se han centrado en el estudio de otros productos de alto valor agregado como lo es el metanol, por ejemplo, Luu *et al.* (2015) propusieron un esquema de producción de metanol a partir de gas natural. Cuantificaron costos del proceso y analizaron la tasa de metanol producida encontrando que el proceso puede ser rentable, sin embargo; es necesario estudiar diferentes escenarios de producción.

Mas adelante Acquarola *et al.* (2021) propusieron un diseño de metanol a partir de *syngas*. Realizaron una simulación utilizando Aspen Plus® encontrando que la temperatura y presión de los reactores son los parámetros más importantes en el proceso. Lograron obtener conversiones mayores al 90% para el *syngas*.

Para estudiar la producción de *syngas* y metanol se han propuesto diferentes simulaciones utilizando software comercial como Aspen Plus®, DSMOKE®, Simulation Suite PRO/II® (Dang *et al.* 2021; Dell'Angelo *et al.* 2021b). Además, se han reportado diferentes enfoques de optimización (Li *et al.* 2021; Chen *et al.* 2021); sin embargo, las estrategias de optimización implementadas han sido limitadas (Asadi *et al.* 2021; Al-Lagtah

et al. 2015), debido a que los enfoques de programación matemática sólo se han centrado en el desarrollo de la optimización mono-objetivo. Los enfoques anteriores se limitan a encontrar una solución óptima y, con frecuencia, a encontrar únicamente soluciones factibles. Además, los enfoques de programación matemática suelen modelar modelos simplificados de las unidades de proceso. En este contexto, recientemente se han propuesto metodologías que permiten el acoplamiento de técnicas de optimización metaheurísticas (Sharma & Rangaiah, 2013) con simuladores de procesos (Ponce-Ortega & Hernández-Pérez 2019), y de esta manera se garantiza encontrar mejores soluciones que involucran modelos detallados para las unidades de proceso.

En ese sentido, en este trabajo se propone un estudio integral basado en el diseño de esquemas de optimización que permitan el aprovechamiento de corrientes residuales de CO₂ y H₂S, provenientes de diferentes procesos industriales, tomando en cuenta aspectos económicos y ambientales.

1.3. Planteamiento del problema

Actualmente las emisiones de GEI son de mucho peso en el cambio climático y distintos problemas de contaminación; en específico, las emisiones de CO₂ y H₂S. Esto ha generado interés en la implementación de procesos que permitan mitigar las emisiones de GEI a la atmósfera, uno de ellos es la implementación de procesos de Claus; sin embargo, este proceso puede ser afectado fácilmente por diversos factores, como lo es la concentración de CO₂ y la presencia de otros componentes en el proceso, como hidrocarburos. Por ello, recientemente se han explorado otros procesos como es la producción de *syngas* y metanol, los cual tienen un alto valor agregado y pueden ser utilizados como combustible, además de considerarse materia prima de diversos productos químicos. Al respecto, la mayoría de las industrias no cuentan con este tipo de procesos en sus plantas, debido a que es necesaria una evaluación de la implementación del proceso, considerando los gastos energéticos y económicos que pueden generarse. Debido a esto, es importante la implementación de métodos de optimización para este proceso y así determinar condiciones de operación que permitan disminuir costos energéticos y aumentar la producción, incluyendo un análisis técnico-económico-ambiental.

1.4. Justificación

Actualmente la reducción de emisiones de GEI es un tema de investigación importante debido a los intentos de remediar la contaminación producida por gases residuales industriales. A pesar de que han sido propuesto diferentes procesos de almacenamiento y captura de CO₂ y H₂S, estos aún representan un gran costo económico al implementarlo en plantas químicas, por ello se ha optado por procesos que permitan obtener productos de alto valor agregado como lo es el *syngas* a partir de corrientes residuales industriales. Por ello es necesario la optimización de este proceso con el fin de minimizar el consumo energético, lo cual podría traducirse en notables beneficios económicos.

1.5. Hipótesis

La aplicación de técnicas de optimización a procesos para el aprovechamiento de corrientes residuales de CO₂ y H₂S provenientes de procesos industriales, permitirá analizar el desempeño global del proceso y evaluar el costo-beneficio entre la integración del proceso a una planta química.

1.6. Objetivos

1.6.1. General

Proponer y aplicar técnicas de optimización que incorporen simuladores de procesos para la evaluación costo-beneficio de procesos para el aprovechamiento de residuales de CO₂ y H₂S provenientes de diversos procesos industriales.

1.6.2. Específicos

- Simular procesos de producción de *syngas* y metanol a partir de corrientes residuales industriales.
- Aplicar técnicas de optimización metaheurísticas con la finalidad que permitan determinar condiciones óptimas de operación, la reducción de costos y el ahorro de recursos energéticos.
- Evaluar el costo-beneficio de los procesos de aprovechamiento de las corrientes residuales de CO₂ y H₂S.
- Proponer esquemas de integración energética que permitan la disminución de costos en los servicios de calentamiento y enfriamiento.

1.7. Marco teórico

En esta sección se presentan algunos de los conceptos principales asociados a este proyecto de investigación.

1.7.1. Modelado y simulación de procesos

Un modelo matemático es una representación simplificada, a través de ecuaciones, funciones o fórmulas matemáticas, de un fenómeno o de la relación entre dos o más variables. En general, un buen modelo es aquel que se ajusta al fenómeno real que representa de forma que nos permite comprender mejor sus propiedades y ampliar así el conocimiento de este. El modelado se refiere a todos los pasos involucrados en el desarrollo y validación de un modelo para el proceso (Ponce-Ortega *et al.*, 2023; Ponce-Ortega *et al.*, 2019; Ponce-Ortega *et al.*, 2012).

El modelado matemático de procesos es una herramienta fundamental en diversas disciplinas, desde la ingeniería y la economía hasta la biología y la ecología. Su importancia radica en su capacidad para representar, analizar y predecir el comportamiento de sistemas complejos en condiciones variables (Himmelblau & Bischoff, 2021). Una de las principales ventajas del modelado matemático es su capacidad para simplificar y representar sistemas complejos de manera estructurada. Los sistemas en el mundo real, como el clima, los procesos químicos o las dinámicas de poblaciones, suelen estar compuestos por múltiples variables interrelacionadas. El modelado permite abstraer estas complejidades en ecuaciones y gráficos, facilitando su análisis. Por ejemplo, en ingeniería, los modelos matemáticos se utilizan para predecir el comportamiento de estructuras bajo diferentes cargas, lo que es esencial para garantizar la seguridad y eficiencia de edificaciones y puentes (Himmelblau & Bischoff, 2021; Gramacy 2020.).

La simulación de procesos puede ser definida como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación de este, mediante modelos matemáticos (Cameron & Hangos 2001; Sifuentes, 2000.). La solución de éstos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento de dicho proceso. El número de variables que aparecen en la descripción matemática de una planta de proceso química puede necesitar un número de ecuaciones no lineales que deben

resolverse del orden de miles, por lo tanto, la única forma viable de resolver el problema es por medio de una computadora (Ponce-Ortega *et al.*, 2019).

Actualmente, existen varios simuladores de procesos comerciales que contienen ecuaciones de modelado para ciertos equipos y métodos numéricos programados para la solución de ecuaciones termodinámicas específicas; además de contar con bases de datos con componentes que se utilizan comúnmente en ingeniería química (Tovar *et al.*, 2021; Ponce-Ortega *et al.*, 2019; Gil *et al.*, 2011).

1.7.2. Optimización de procesos

La optimización de procesos es la disciplina de ajustar un proceso para optimizar (hacer el mejor uso o el más efectivo) de un conjunto específico de parámetros sin violar alguna restricción. Los objetivos comunes son minimizar el costo y maximizar el rendimiento y/o la eficiencia. Esta es una de las principales herramientas cuantitativas en la toma de decisiones industriales (Ponce-Ortega *et al.*, 2019).

Al optimizar un proceso, el objetivo es maximizar una o más de las especificaciones del proceso, manteniendo todas las demás dentro de sus limitaciones. Esto se puede hacer usando una herramienta de minería de procesos, descubriendo las actividades críticas y los cuellos de botella, y actuando solo en ellos (Tovar *et al.*, 2021; Del Castillo 2007).

Las técnicas generales de búsqueda y optimización se clasifican en tres categorías:

- Enumerativas
- Deterministas
- Estocásticas

Para superar algunos inconvenientes asociados con los enfoques de optimización determinista, se han informado enfoques de optimización metaheurística (Ponce-Ortega *et al.*, 2019).

La optimización metaheurística se basa en la simulación repetida de un proceso con el fin de asignar una función de aptitud para valores dados de los grados de libertad de esta forma se evita la posibilidad de quedar atrapado prematuramente en una solución subóptima;

además, estas técnicas de optimización se pueden vincular fácilmente a los simuladores de procesos para optimizar diferentes diagramas de flujo (Sharma & Rangaiah, 2013).

Otra ventaja que poseen los métodos metaheurísticos sobre los métodos deterministas es que los primeros no presentan problemas para resolver problemas no convexos y lineales, ya que, para la implementación de estos métodos de optimización, es necesario implementar todas las ecuaciones que describen el comportamiento del proceso mediante la formulación de un modelo matemático. Debido a que muchos problemas multi objetivos (MOP) científicos y de ingeniería del mundo real exhiben una o más de las características antes mencionadas, las búsquedas estocásticas se han desarrollado como enfoques alternativos para resolver estos problemas irregulares (Ponce-Ortega *et al.*, 2019; Sharma & Rangaiah, 2013).

1.7.3. Algoritmos genéticos

Los algoritmos genéticos (GA por sus siglas en inglés) son técnicas de búsqueda estocásticas basadas en el mecanismo de selección natural y genética. Los GA son particularmente útiles en problemas no convexos o que incluyen funciones discontinuas, estos se diferencian de las técnicas de optimización convencionales porque en lugar de tener una solución inicial (valores para el vector variable de optimización \mathbf{x}), se tiene un conjunto de soluciones para el vector de búsqueda llamado población (Ponce-Ortega *et al.*, 2019); cada individuo de la población se llama cromosoma, que representa una solución al problema. Los cromosomas evolucionan a través de iteraciones sucesivas que se denominan generaciones. Durante cada generación, los cromosomas se evalúan utilizando alguna forma de medir sus habilidades. Para crear la próxima generación, los nuevos cromosomas se denominan descendientes, que se crean combinando dos cromosomas de la generación actual mediante la operación de fusión o modificando un cromosoma al azar mediante la operación de mutación. La nueva generación se crea seleccionando, según el valor de sus capacidades, a los padres y descendientes, y rechazando a los demás para mantener constante el tamaño de la población. Los cromosomas más capaces tienen una mayor probabilidad de ser seleccionados. Después de varias generaciones, el algoritmo converge al mejor cromosoma, que probablemente representa la solución óptima del problema o una solución cercana a la óptima (Ponce-Ortega *et al.*, 2019).

1.7.4. Aspen Plus

El Sistema Avanzado para Ingeniería de Procesos - *Advanced System for Process Engineering* (ASPEN) es un software de modelado de procesos de diseño conceptual, optimización y monitoreo de desempeño para la industria química (Haydary, 2019). Aspen Plus es un simulador estacionario, secuencial modular y posiblemente sea el más usado en la industria.

Se ha utilizado para modelar procesos en industrias: química y petroquímica, refinado del petróleo, procesamientos de gas y aceites, generación de energía, metales y minerales, industrias del papel y la pulpa, entre otros (Ponce-Ortega *et al.*, 2019). Además, en él se puede modelar y simular cualquier tipo de proceso para el cual hay un flujo continuo de materiales y energía de una unidad de proceso a otra. Posee herramientas para cálculos de costos y optimizaciones del proceso, generación de resultados en forma gráfica y en tablas, entre otros. La principal ventaja de este simulador consiste en una gran base de datos de compuestos químicos específicos y de operaciones unitarias. Se puede implementar un modelo matemático para una nueva unidad de proceso en *Aspen Custom Modeler* (ACM), y luego se puede exportar a Aspen Plus® o Aspen HYSYS® para simular procesos, teniendo una nueva unidad de proceso además de unidades de proceso comunes como intercambiadores de calor, compresores, reactores y columnas (Ponce-Ortega *et al.*, 2019).

Con Aspen Plus® se pueden cambiar de forma interactiva las especificaciones, como la configuración del diagrama de flujo, las condiciones operativas y las composiciones de alimentación, para ejecutar nuevos casos y analizar alternativas de proceso. Además de la simulación de procesos, Aspen Plus® permite realizar una amplia gama de otras tareas, como estimar propiedades físicas, generar resultados gráficos y tabulares personalizados, ajustar los datos de la planta a modelos de simulación, optimizar procesos e interconectar los resultados con hojas de cálculo (Haydary, 2019; Ponce-Ortega *et al.*, 2019).

1.7.5. Aspen HYSYS

Aspen HYSYS es un software integrado que combina la simulación de procesos y el análisis termodinámico. Este software es conocido por su robustez en el manejo de sistemas

de procesos, incluyendo tanto operaciones unitarias como flujos de trabajo completos (Haydary, 2019; Ponce-Ortega *et al.*, 2019).

Una de las características más destacadas de HYSYS es su capacidad para realizar simulaciones de procesos en tiempo real, esto es particularmente valioso en la etapa de diseño, donde la optimización y el análisis de sensibilidad son cruciales para el desarrollo eficiente de proyectos (Haydary, 2019). Aspen HYSYS tiene una amplia gama de aplicaciones en diversas industrias, incluyendo la petroquímica, la farmacéutica, la alimentaria y la de energía. Algunas de las aplicaciones más relevantes son:

- Diseño de Plantas Químicas
- Optimización de Procesos:
- Simulación de Procesos de Separación:
- Análisis de Seguridad:

1.7.6. I-MODE

Los algoritmos genéticos han demostrado ser un enfoque versátil y eficaz para resolver problemas de optimización, pero hay muchas situaciones en las que el algoritmo genético simple no funciona particularmente bien y se han utilizado varios métodos de hibridación (Hernández-Pérez *et al.*, 2020; Tikadar *et al.*, 2020; Ponce-Ortega *et al.*, 2019). La mayoría de las aplicaciones se han realizado con la ayuda de software, como lo es MS Excel®. Sharma & Rangaiah (2013) desarrollaron un algoritmo de evolución diferencial multiobjetivo mejorado con un criterio de terminación para optimizar procesos químicos, que trabaja con un criterio de terminación utilizando las soluciones no dominadas obtenidas como proceso de búsqueda. El método híbrido de optimización multiobjetivo es, a saber, la evolución diferencial multiobjetivo mejorada (I-MODE).

En el I-MODE, una población de individuos NP se inicializa aleatoriamente dentro de los límites de las variables de decisión. Luego, se calculan los valores de los objetivos y las limitaciones para cada individuo de la población inicial. Se genera un individuo de prueba para cada individuo objetivo mediante mutación y cruzamiento en tres individuos

seleccionados al azar de la población inicial / actual / parental. Los elementos del vector mutante compiten con los del vector objetivo, con una probabilidad de generar un vector de prueba. La verificación tabú se implementa en el paso de generación del vector de prueba de I-MODE, y el individuo de prueba se genera repetidamente hasta que se aleja de cada individuo por una distancia específica llamada radio tabú (Tr). La distancia euclidiana entre el individuo del ensayo y cada individuo se calcula en el espacio normalizado de las variables de decisión para aceptar al individuo del ensayo. Después de eso, se calculan los objetivos y las limitaciones para el individuo de prueba aceptado temporalmente. El individuo de prueba se almacena en la población infantil. Después de generar los individuos de prueba para todos los individuos objetivo de la población actual, se realiza una clasificación no dominada de las poblaciones actual e infantil combinadas seguida por el cálculo de la distancia de apiñamiento, si es necesario, para seleccionar los individuos para la siguiente generación (G). Los mejores individuos NP se utilizan como población en la generación siguiente (Ponce-Ortega, 2019).

Capítulo II:
Producción de *syngas*
a partir de una
corriente residual
proveniente de una
planta petroquímica

En la siguiente sección se presenta el primer caso de estudio, el contenido del capítulo abarca una descripción de la simulación del proceso realizada en Aspen Plus®. Se implementó un diseño factorial y un ANOVA para realizar una adecuada selección de las variables de decisión en el proceso ya que tradicionalmente la selección de las variables de decisión se realiza de forma artificial y sin ningún método estándar. Posteriormente se detalla la optimización realizada multiobjetivo, considerando el consumo de energía, las emisiones producidas en el proceso y la tasa de producción de *syngas*. Además, se implementó una integración energética en el proceso buscando reducir las utilidades de calentamiento del proceso.

2.1. Simulación del proceso

Para simular el proceso de producción de *syngas*, los diseños propuestos por Bassani *et al.* (2020) y Dell' Angelo *et al.* (2021b) fueron considerados; sin embargo, en este trabajo, durante la simulación y mediante la manipulación de las condiciones de operación, se logró incrementar la conversión de H₂S y CO₂; debido a esto, se evitó el uso de columnas de absorción y recuperación de aminas. Además, se incorporó una segunda corriente de alimentación de SO₂ para mejorar la conversión de H₂S. La **Tabla 1** presenta cada uno de los equipos utilizados en la simulación.

Tabla 1. Equipos utilizados en la simulación de la producción de *syngas*.

Equipo	Operación unitaria	Temperatura (°C)	Presión (atm)
I1	Heat exchanger (heating)	800	1
R1	Gibbs reactor	800	1
M1	Mixer	800	1
I2	Heat exchanger (heating)	1000	1
R2	Gibbs reactor	1000	1
I3	Heat exchanger (cooling)	250	1
F1	Flash	250	1
I4	Heat exchanger (cooling)	35	1
F2	Flash	35	1

Como caso de estudio se tomó una corriente de desecho con condiciones similares a las de una planta petroquímica (Dell'Angelo *et al.* 2021b), la corriente de alimentación está a 200 °C y 1.5 atm, además contiene 4230 kg/hr. En la **Tabla 2** se presentan las

composiciones de alimentación al proceso, mientras que la **Figura 2** muestra el diagrama de flujo del proceso.

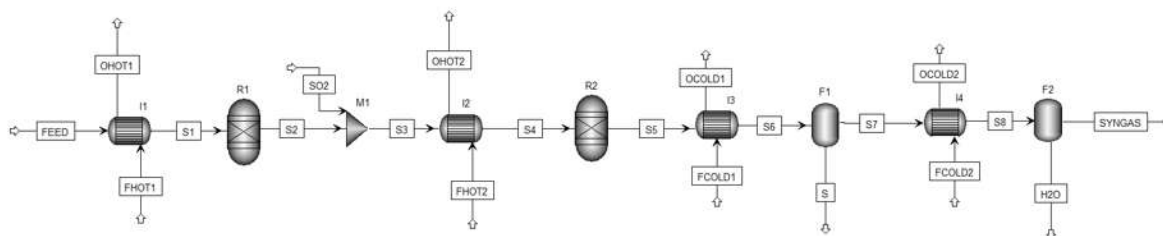
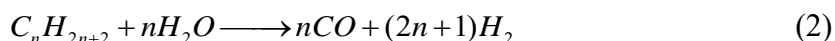
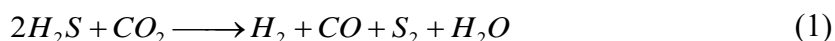


Figura 1. Esquema de producción de *syngas*.

Tabla 2. Composición de la corriente de alimentación al proceso.

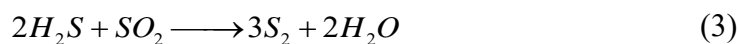
Componente	Fracción mol
H ₂ S	0.795
CH ₄	0.021
C ₂ H ₆	0.014
C ₃ H ₈	0.019
H ₂ O	0.064
CO	0.003
CO ₂	0.066
H ₂	0.004
NH ₃	0.005

Los reactivos (CO₂ y H₂S) de las corrientes residuales de las plantas industriales se alimentan a una temperatura de 200 °C al primer intercambiador de calor (I1) para ser precalentados a 800 °C y posteriormente se alimentan al primer reactor Gibbs (R1), donde la conversión de H₂S, CO₂ y cualquier hidrocarburo presente en la mezcla se realiza siguiendo la estequiometría de las reacciones 1 y 2.



Es en este reactor donde se obtienen los productos de interés (CO y H₂) y los residuos de H₂S y CO₂ que no se han podido convertir se conectan a un mezclador (M1) con corriente que contiene SO₂ a 800 °C y se alimentan a un segundo intercambiador de calor (I2) para calentar la mezcla de gases a 1000 °C y se alimentan a un segundo reactor Gibbs (R2) donde el H₂S

que no se consumió en el primer reactor reacciona con SO_2 para producir S_2 y agua, como se presenta en reacción 3.



El objetivo de esta reacción es eliminar la mayor cantidad de ácido posible, además se realiza nuevamente la reacción 2 para consumir los restos de hidrocarburos que no hayan reaccionado en el primer reactor, posteriormente la corriente se alimenta a un tercer intercambiador de calor (I3) y se alimenta a un flash (F1) donde se elimina el azufre de la corriente, luego la corriente se enfría a $30\text{ }^\circ\text{C}$ y se alimenta a un segundo flash (F2) donde se separa el H_2O para obtener la corriente de *syngas*.

2.2. Integración energética del proceso

La **Tabla 3** muestra que en el proceso de producción de *syngas* son necesarias altas temperaturas para llevar a cabo las reacciones dentro de R1 y R2, donde la energía requerida por estos reactores es satisfecha por las utilidades de calefacción suministradas en los intercambiadores de calor I1 e I2. Además, también se requieren servicios de refrigeración en el proceso que se suministran en los intercambiadores I3 e I4. Con base en lo anterior, se propuso integrar energéticamente el proceso (ver **Figura 2**) para minimizar el uso de utilidades y al mismo tiempo reducir los costos asociados.

Para llevar a cabo la integración energética, se ha considerado un modelo MINLP (mixed-integer non-linear programming), el cual se basa en los modelos presentados previamente por Yee y Grossman (1990) y Lira-Barragán et al. (2014). El modelo tiene como objetivo minimizar el costo total anual y satisfacer las utilidades de calefacción y refrigeración, además, ha sido programado en el software GAMS® (Brooke *et al.* 2013). El intercambio de calor se realiza por cualquier coincidencia en cada etapa entre *HPS* y *CPS*. Después de que el *HPS* transfiera su energía al *CPS*, el *HPS* puede transferir su carga de calor restante a través de enfriadores que funcionan con servicios de enfriamiento (*CU*). Por otro lado, *CPS* puede completar su calentamiento a través de calentadores utilizando servicios de calentamiento (*HU*) para alcanzar su temperatura objetivo. Mientras que la formulación matemática del modelo está definida por las siguientes secciones: balances de energía total para las corrientes

del proceso, balance de energía para las etapas internas, balance de energía para las etapas externas, asignación de temperatura para los bordes extremos de las etapas internas, restricciones para la temperatura factibilidad en la superestructura, la existencia de los intercambiadores de calor, factibilidades para las diferencias de temperatura y función objetivo.

La función objetivo del modelo es minimizar el costo total anual (TAC) de la red, lo que involucra la combinación del costo de utilidad (UtC), los costos fijos (FiC) de los intercambiadores y los costos de capital (CaC) de cada intercambiador:

$$\text{Min TAC} = \text{UtC} + \text{FiC} + \text{CaC} \quad (4)$$

El costo de la utilidad (UtC) tiene en cuenta los costos de enfriamiento para enfriar el HPS, así como los costos para calentar el CPS,

$$\text{UtC} = \sum_{i \in \text{HPS}} C_{CU} q_i^{CU} + \sum_{j \in \text{CPS}} C_{HU} q_j^{HU} \quad (5)$$

donde C_{CU} y C_{HU} representan los costos unitarios de los servicios externos de calentamiento y enfriamiento.

Los costos fijos (FiC) son los costos fijos de todos los intercambiadores requeridos en la solución óptima,

$$\text{FiC} = k_f \left[\sum_{i \in \text{HPS}} \sum_{j \in \text{CPS}} \sum_{k \in \text{ST}} CF_{i,j} z_{i,j,k} + \sum_{i \in \text{HPS}} CF_i^{CU} z_i^{CU} + \sum_{j \in \text{CPS}} CF_j^{HU} z_{ij}^{HU} \right] \quad (6)$$

Donde k_f es un factor utilizado para anualizar la inversión, además, $CF_{i,j}$, CF_i^{CU} y CF_j^{HU} representan los costos fijos de intercambiadores, enfriadores y calentadores, respectivamente.

Los costos de capital (CaC) incluidos son los costos de capital de todas las unidades de intercambio de calor que se muestran en la **Figura 3**. Los términos LMTD se aproximan usando la ecuación reportada por Chen (1987),

$$\text{CaC} = k_f \left[\sum_{i \in \text{HPS}} \sum_{j \in \text{CPS}} \sum_{k \in \text{ST}} C_{i,j} \left\{ \frac{q_{i,j,k} \left(\frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_j} \right)}{\left[(dt_{i,j,k})(dt_{i,j,k+1}) \left(\frac{dt_{i,j,k} + dt_{i,j,k+1}}{2} \right) + \delta \right]^{1/3}} \right\}^\beta + \right. \\
\left. \sum_{i \in \text{HPS}} C_i^{CU} \left\{ \frac{q_{i,k}^{CU} \left(\frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{CU}} \right)}{\left[(dt_{i,k}^{CU})(dt_{i,k+1}^{CU}) \left(\frac{dt_{i,k}^{CU} + dt_{i,k+1}^{CU}}{2} \right) + \delta \right]^{1/3}} \right\}^\beta + \right. \\
\left. \sum_{j \in \text{CPS}} C_j^{HU} \left\{ \frac{q_j^{HU} \left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{HU}} \right)}{\left[(T_{IN}^{HU} - T_{OUT,j})(dt_j^{HU}) \left(\frac{(T_{IN}^{HU} - T_{OUT,j}) + dt_j^{HU}}{2} \right) + \delta \right]^{1/3}} \right\}^\beta \right] \quad (7)$$

Donde $C_{i,j}$, C_i^{CU} y C_j^{HU} son los coeficientes de costo de área para intercambiadores entre flujos de proceso, unidades que intercambian calor entre *HPS* con servicio de refrigeración y unidades que intercambian calor entre *CPS* con servicio de calor, respectivamente. es un pequeño parámetro utilizado para evitar inviabilidades en el proceso de optimización y representa los coeficientes de transferencia de calor de la película.

Con base en los datos presentados en la **Tabla 1** y la simulación del proceso de producción de gas de síntesis (**Figura 2**), se consideran dos *HPS* y dos *CPS* para la integración energética, mientras que los datos de flujo se presentan en la **Tabla 3**. Se debe tener en cuenta que el objetivo de integración energética es obtener la configuración óptima y posteriormente remodelar el proceso (**Figura 2**) con los resultados obtenidos.

Tabla 3. Corrientes consideradas en la integración energética del proceso de *syngas*

Corriente	Temperatura de entrada (°C)	Temperatura de salida (°C)	FCp (kW/°C)	Q (kW)
C1 (FEED-S1)	200	800	1.61	969.4
C2 (S3-S4)	800	1,000	1.88	376.0
H1 (S5-S6)	1,000	250	2.31	-1,732.5
H2 (S7-S8)	250	30	1.49	-327.8

2.3. Diseño experimental

Una parte fundamental del proceso de optimización es la selección de las variables de decisión ya que estas son las variables que se van a manipular para mejorar el proceso global. La selección adecuada de estas variables es de vital importancia. Por lo tanto, se propuso el uso de un análisis ANOVA para determinar las variables de decisión más importantes en el proceso (Anderson *et al.*, 2018). En la literatura se ha informado que los factores importantes en el proceso son el flujo de alimentación y la temperatura del proceso (Hernández-Pérez *et al.*, 2022; Alsuhaibani *et al.*, 2020; Sun *et al.* 2019), por lo que se propuso un diseño fraccionado 3^5 con cada uno de estos factores para determinar su significación estadística sobre las variables de respuesta. En este caso, como variables de respuesta se seleccionaron el caudal de *syngas* obtenido y el consumo energético del proceso. La **Tabla 4** muestra los niveles seleccionados para cada factor utilizado en el diseño experimental.

Tabla 4. Valores analizados para las variables involucradas en el ANOVA.

Factor	Valor				
Feed (kg/hr)	500	750	1000	1250	1500
Temperatura R1 (°C)	400	600	800	1000	1200
Temperatura R2 (°C)	400	600	800	1000	1200

Una vez obtenidos los resultados de cada una de las corridas, se realizó un ANOVA utilizando el software Minitab 2019, considerando estadísticamente significativos aquellos parámetros que tengan un valor de $p < 0.5$ (Montgomery 2004).

2.4. Optimización metaheurística

El enfoque de optimización metaheurística se establece a través de un enlace entre los programas Microsoft Excel®-Visual Basic for Applications®-Aspen Plus®, donde se utiliza el algoritmo I-MODE (Improve Multi-Objective Differential Evolution) (Sharma y Rangaiah 2013) para la optimización multiobjetivo del proceso de producción de *syngas* a partir de flujos de residuos industriales. Específicamente, se implementa la tecnología de módulos de objetos componentes (COM) para establecer un vínculo entre Aspen Plus® y Microsoft Excel® (Ponce-Ortega y Hernández-Pérez, 2019). Con la tecnología COM, es posible agregar código para permitir que las aplicaciones se comporten como un servidor de automatización de vinculación e incrustación de objetos (OLE) donde se usa Visual Basic para aplicaciones (VBA) para interactuar con otras aplicaciones. En cuanto a la etapa de optimización, se envía un vector con las variables de decisión de diseño desde MS Excel® a Aspen Plus® (por ejemplo, temperaturas, caudal másico, etc.), donde se encuentran todos los cálculos termodinámicos, balances de materia y energía. se realizan para cada una de las unidades utilizadas. Posteriormente, se devuelve un vector con las variables de respuesta de Aspen Plus® a Ms Excel® para calcular las funciones objetivo, donde se evalúa el desempeño de las funciones objetivo para proponer nuevos valores para las variables de decisión. Tras realizar este proceso de forma consecutiva hasta llegar al máximo número de generaciones (MNG) se obtienen los resultados.

La función objetivo propuesta (*OF*). consiste en maximizar el flujo de *syngas* (*FlowSyngas*), minimizar el consumo de energía del proceso (*EnergyCons*) y minimizar las emisiones totales anuales (*TAE*).

$$O.F. = \{ \max FlowSyngas, \min EnergyCons, \min TAE \} \quad (8)$$

El consumo de energía (*EnergyCons*) del proceso proviene de la energía requerida por los reactores (R1 y R2) y el segundo intercambiador de calor (I2). Cabe señalar que R1, R2 e I2 fueron seleccionados luego de realizar la integración energética. Mientras que para los intercambiadores de calor I3 e I4 se consideró agua de refrigeración a temperatura ambiente. Se utilizaron las emisiones producidas en los equipos (R1, R2 e I2).

Para el cálculo de las emisiones generadas se ha seguido la metodología de Hernández-Pérez *et al.* (2020), que se determina con la Ecuación 9 donde el calentamiento necesario en el equipo (Btu/h) está asociado a las emisiones de CO₂ producidas:

$$TAE = \sum_{n=1} R_n (kg / h) * 24(h / d) * 330(d / yr) \quad (9)$$

donde R_n corresponde a las emisiones de CO₂ correspondientes al equipo “n”. Además, se utilizó el estándar US-EPA-E9-5711 como fuente de datos para el factor CO₂ (EF1). El factor de eficiencia (EF2) de la fuente de energía CO₂ depende del tipo de utilidad, el cual es de 0.85 para las emisiones de CO₂ asociadas al combustible necesario para obtener alta temperatura en un equipo específico a través del calor quemado.

Además, las emisiones de CO₂ son directamente proporcionales al calor necesario (Q) asociado al equipo “n” obtenido por los cálculos de Aspen Plus V9. El valor R se calcula usando la Ecuación 10:

$$R = \sum_{n=1} Q_n (Btu / h) * EF1(lb / BTU) * EF2 * 24(h / d) * 330(d / yr) \quad (10)$$

Los valores considerados para los parámetros asociados a la implementación del algoritmo I-MODE consisten en tamaño poblacional (PS) de 10 individuos, número máximo de generaciones (MNG) de 50, tamaño de lista tabú (TLS) de 5 individuos, tabú proporción (TR) por 0,05, fracciones cruzadas (CF) por 0,8 y fracción de mutación (MF) por 0,5. El equipo de cómputo utilizado contó con una tarjeta gráfica NVIDIA® GEFORCE® GTX, un procesador Intel CORE i7+ 8th Gen y una memoria RAM de 24 GB.

2.5 Resultados

A continuación, se presenta la evaluación de la aplicación de la producción de *syngas* utilizando flujos de desechos de CO₂ y H₂S como materia prima. En la **Tabla 5** se muestra la composición de la corriente de gas de síntesis obtenida, donde se observa que el H₂S y el CO₂ fueron consumidos en su totalidad, resultados coincidentes con lo informado por Bassani *et al.* (2020).

Tabla 5. Composición del flujo de *syngas* obtenido.

Componente	Flujo másico (kg/hr)
Total	976.88
H ₂ S	0
CO ₂	0
N ₂	8.99
CH ₄	0.19
H ₂ O	84.11
CO	629.28
H ₂	254.3
S	0.0003
SO ₂	0

La corriente de *syngas* obtenida contiene 25% H₂ y 65% CO, esta composición ha sido reportada en la literatura para otros procesos que utilizan como materia prima corrientes residuales de flujos de desechos industriales (Dell'Angelo *et al.* 2021b; Bassani *et al.* 2020; Park *et al.* 2020; Peng *et al.* 2020).

La **Figura 3** muestra la composición másica de la corriente de gas de síntesis obtenida al variar la temperatura del segundo reactor de Gibbs (R2), a temperaturas por debajo de 700 °C el componente principal en la corriente de salida es CH₄ mientras que la conversión de H₂ y CO es pequeña en comparación con En el compuesto anterior, a medida que aumenta la temperatura de R2, se favorece la conversión de H₂ y CO debido al consumo de CH₄ presente en la mezcla gaseosa, que es precursor de los productos de interés (H₂ y CO) (Bassani *et al.* 2020; Afzal *et al.*, 2018; Martinez-Gomez *et al.*, 2017). Al alcanzar una temperatura aproximada de 1,000 °C, se alcanza un estado estacionario en la producción de H₂ y CO y en el consumo de CH₄, es decir, a temperaturas superiores no se producen cambios significativos en la composición de la corriente de gas de síntesis obtenida.

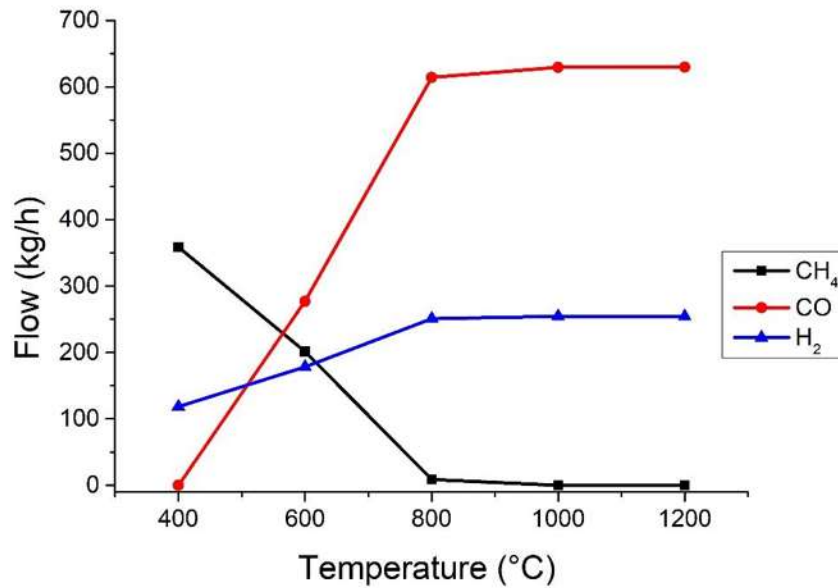


Figura 2. Productos obtenidos a diferentes temperaturas de R2.

La **Figura 4** muestra el modelo del proceso de producción de *syngas* obtenido por integración energética. Cabe señalar que, debido a la gran diferencia de temperatura entre las corrientes de proceso, solo las utilidades calientes requeridas por la corriente C1 (FEED-S1) se satisfacen a través de la corriente H1 (S5-S6), mientras que la carga de calor restante en H1, el total calor disponible en H2 (S7-S8), y el calor requerido para calentar C2 (S3-S4) son satisfechos por las utilidades de calefacción y refrigeración. Con respecto a la **Figura 3**, la corriente de salida del reactor 2 se recircula (S5) y se usa para calentar la corriente alimentada al primer reactor, luego la corriente (OHOT1) se alimenta a un enfriador y regresa al proceso de producción de *syngas*.

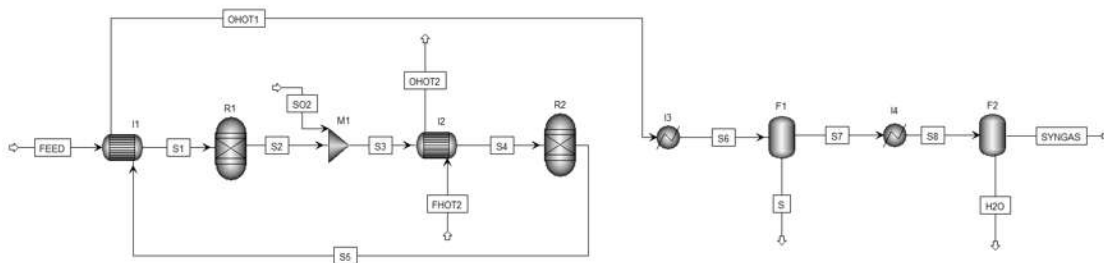


Figura 3. Esquema de producción de *syngas* (Integrado).

En la **Tabla 6** se muestra la comparación del consumo energético requerido para llevar a cabo los procesos de producción de gas de síntesis con integración energética y sin integración energética, donde se obtuvo un ahorro energético del 52% en los servicios de calefacción.

Tabla 6. Comparación del consumo energético utilizado en la producción de *syngas*.

Proceso	Consumo energético (BTU/h)
Proceso sin integración energética	1.81E+07
Proceso con integración energética	9.53E+06

Mediante la simulación del proceso y el análisis ANOVA, se demostró que la temperatura del segundo reactor (R2) tiene un mayor efecto en la conversión de gas de síntesis, en comparación con la temperatura del primer reactor (R1).

El ANOVA mostró que el efecto de las temperaturas utilizadas fue estadísticamente significativo en la producción de gas de síntesis y la energía requerida en el proceso ($p < 0.5$), mientras que la velocidad de alimentación no tuvo un efecto significativo en el proceso. Por lo tanto, las temperaturas de los reactores R1 y R2 se consideraron como variables de decisión, mientras que el caudal de alimentación se utilizó en el valor fijo presentado anteriormente (4230 kg/hr).

La **Tabla 7** muestra una comparación entre las mejores condiciones obtenidas a través de la técnica de optimización metaheurística y las condiciones recomendadas para el proceso. Las mejores condiciones obtenidas fueron 415 °C para el primer reactor (R1) y 970 °C para el segundo reactor (R2), estos resultados demostraron que la primera etapa del proceso se puede realizar a menor temperatura, resultados coinciden con valores reportados en literatura (Rahbari *et al.*, 2018; Martinez-Gomez *et al.*, 2017; Noureldin *et al.*, 2014).

Tabla 7. Comparación del proceso con y sin optimización.

Parámetro	Proceso sin optimizar	Proceso optimizado
Temperatura R1 (°C)	800	415
Temperatura R2 (°C)	1000	970
Flujo <i>syngas</i> (kg/hr)	948	952
Consumo energético (BTU/hr)	5.35×10^7	4.21×10^7
Emisiones CO ₂ (tonCO ₂ /year)	2.97×10^7	2.69×10^7

En cuanto al flujo de *syngas*, se observa que no hubo diferencia significativa entre ambos procesos, sin embargo, en el consumo de energía, al operar en las condiciones obtenidas con la optimización metaheurística, hubo un ahorro de energía del 21%, esto debido a la integración energética implantada y reducción de las temperaturas de funcionamiento. Además, al comparar la tasa de emisiones de CO₂ que producen anualmente los reactores entre ambos procesos, se logró una disminución del 8%, lo que beneficia al intentar mitigar las emisiones de CO₂ en los procesos industriales.

Capítulo III:
Producción de
metanol a partir de
una corriente residual
proveniente de una
planta endulzadora de
gas natural

En la presente sección se describe el segundo caso de estudio donde se obtiene metanol a partir de una corriente residual de una planta de producción de gas natural. Primero es descrita la simulación del proceso utilizando Aspen Hysys®, seguido de una validación de la planta de endulzamiento de gas natural con datos industriales. Posteriormente se acoplaron las plantas de producción de *syngas* y de metanol; se realizó un análisis de sensibilidad además de un ANOVA para determinar las variables más importantes del proceso. Se calcularon los costos del proceso y la producción de metanol y se realizó un análisis costo-beneficio del proceso. Posteriormente se propuso una integración energética al proceso buscando disminuir los gastos energéticos del proceso.

3.1. Simulación del proceso.

La planta de endulzamiento de gas natural estudiada en el presente trabajo recibe el gas natural amargo de pozos petroleros que se encuentran en la cuenca del Papaloapan, en el estado de Veracruz, teniendo la composición mostrada en la siguiente **Tabla 8**.

Tabla 8. Composición del gas amargo alimentado al proceso.

Compuesto	Fracción molar
Metano	0.8226
Etano	0.0664
Propano	0.0301
i-Butano	0.0053
N-Butano	0.0118
i-Pentano	0.0042
N-Pentano	0.0045
N-Hexano	0.0027
Nitrógeno	0.0099
Dióxido de Carbono	0.0215
Ácido Sulfhídrico	0.0150

Las condiciones en las que dicho gas llega al complejo son presentadas a continuación en la **Tabla 9**.

Tabla 9. Condiciones del gas amargo alimentado al proceso.

Condición	Valor
Fración de vapor	1
Temperatura (°C)	34
Presión (kPa)	6862
Flujo molar (kmol/h)	2096

El solvente químico que usa la planta es Metildietanolamina (MDEA), en la **Tabla 10** se detalla la composición con la que esta amina terciaria entra al proceso de absorción mientras que en la **Tabla 11** se detallan sus condiciones.

Tabla 10. Composición del solvente químico usado en el proceso.

Compuesto	Fración masa
Agua	0.4920
Dióxido de Carbono	0.0005
Ácido Sulhídrico	0.0002
MDEA	0.5073

Tabla 11. Condiciones del solvente químico alimentado al proceso de absorción.

Condición	Valor
Fración de vapor	0
Temperatura (°C)	43.93
Presión (kPa)	6762
Flujo molar (kmol/h)	1263

En la **Figura 5** se presenta un diagrama del presente caso de estudio, en el cual se muestran los equipos y corrientes de proceso. Posteriormente, todos los detalles de las condiciones de operación e identificación de cada uno de los equipos son presentados en la **Tabla 12**.

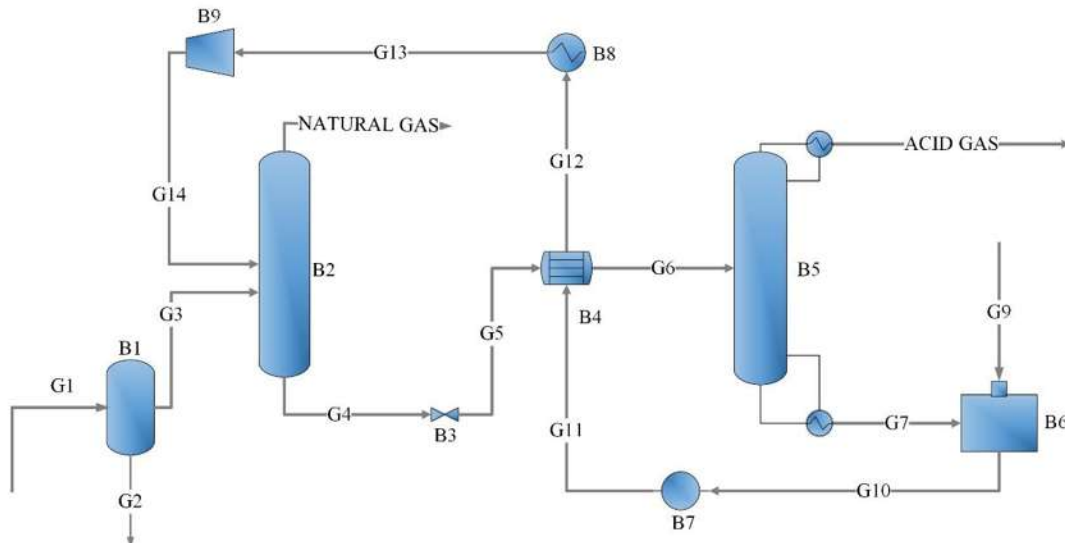


Figura 4. Esquema del proceso de endulzamiento de gas natural.

Tabla 12. Equipos utilizados en el proceso de endulzamiento de gas natural.

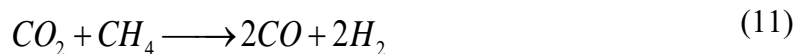
Block	Equipo	Presión (kPa)	Temperatura (°C)
B1	Tanque separador	6282	34
B2	Columna de absorción	6282	34
B3	Válvula	6282	34
B4	Intercambiador de calor	6282	87.47
B5	Columna de desorción	179.2	33
B6	Tanque	179.2	33
B7	Bomba	290	33
B8	Intercambiador de calor	290	43
B9	Compresor	6782	34

En la **Tabla 13** se presenta la composición de la mezcla del gas ácido que se obtiene como residuo al hacer el proceso de endulzamiento, donde se observa que el CO₂ y H₂S aparecen en la misma proporción.

Tabla 13. Composición del gas ácido.

Compuesto	Fracción molar
Metano	0.0023
Etano	0.0004
Propano	0.0001
i-Pentano	0.0246
Dióxido de Carbono	0.4551
Ácido Sulfhídrico	0.4826

Esta corriente es usada como alimentación para el proceso de *syngas* descrito en la sección 8.1, sin embargo; en se propuso que en el tercer reactor se empleara la siguiente reacción:



Utilizando una recirculación de CH₄, obtenido previamente en el proceso limpieza de gas natural. Como se muestra en la **Figura 6**. En la **Tabla 14** se presentan los equipos utilizados en la producción de *syngas*.

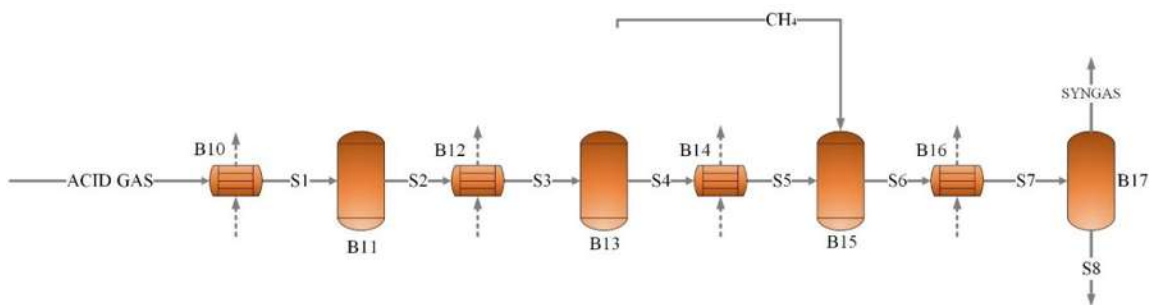


Figura 5. Esquema del proceso *syngas* acoplado a la planta endulzadora.

Tabla 14. Equipos utilizados en la producción de *syngas*.

Block	Equipo	Temperatura (°C)	Presión (kPa)
B10	Intercambiador de calor	600	101.32
B11	Reactor	600	101.32
B12	Intercambiador de calor	800	101.32
B13	Reactor	800	101.32
B14	Intercambiador de calor	1000	101.32
B15	Reactor	250	101.32
B16	Intercambiador de calor	35	101.32
B17	Flash	35	101.32

Posteriormente se acopló una planta para la producción de metanol (Hernández-Pérez *et al.*, 2020), donde a partir de la corriente de *syngas* obtenida se produce el metanol, a partir de la reacción:



Para ello es necesario elevar la presión del sistema a 7535 kPa y una temperatura de 200 C, por lo cual pasa por una serie de compresores e intercambiadores de calor como se muestra en la **Figura 7**, posteriormente del proceso de reacción es llevado a una columna de destilación para separar el metanol del agua, obteniéndose así el metanol puro. En la **Tabla 15** se presentan los equipos utilizados en la simulación.

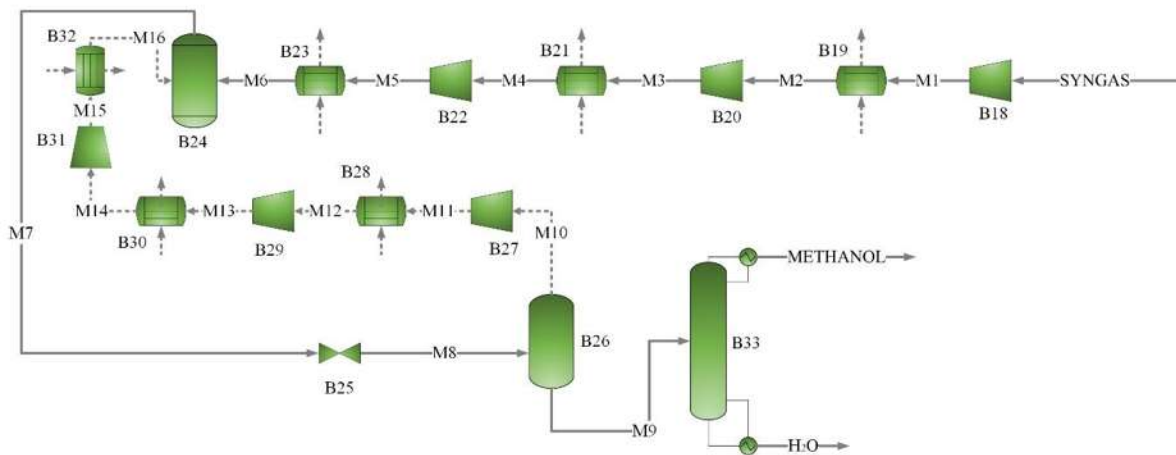


Figura 6. Esquema del proceso de metanol acoplado a la planta endulzadora.

Tabla 15. Equipos utilizados en la producción de metanol.

Block	Equipo	Temperatura (°C)	Presión (kPa)
B18	Compresor	714	506
B19	Intercambiador de calor	300	506
B20	Compresor	511	1500
B21	Intercambiador de calor	300	1500
B22	Compresor	500	7880
B23	Intercambiador de calor	200	7880
B24	Reactor	200	7880
B25	Válvula	35	535
B26	Flash	35	535
B27	Compresor	650	1480
B28	Intercambiador de calor	280	1480
B29	Compresor	800	3200
B30	Intercambiador de calor	350	3200
B31	Compresor	570	7880
B32	Intercambiador de calor	200	7880
B33	Columna de destilación	60	234

3.2. Diseño experimental

Una parte fundamental del análisis económico y ambiental es la selección de las variables de decisión, ya que son las variables que se manipularán para mejorar el proceso global. En este proceso hay un gran número de variables que pueden manipularse (**Figura 8**).

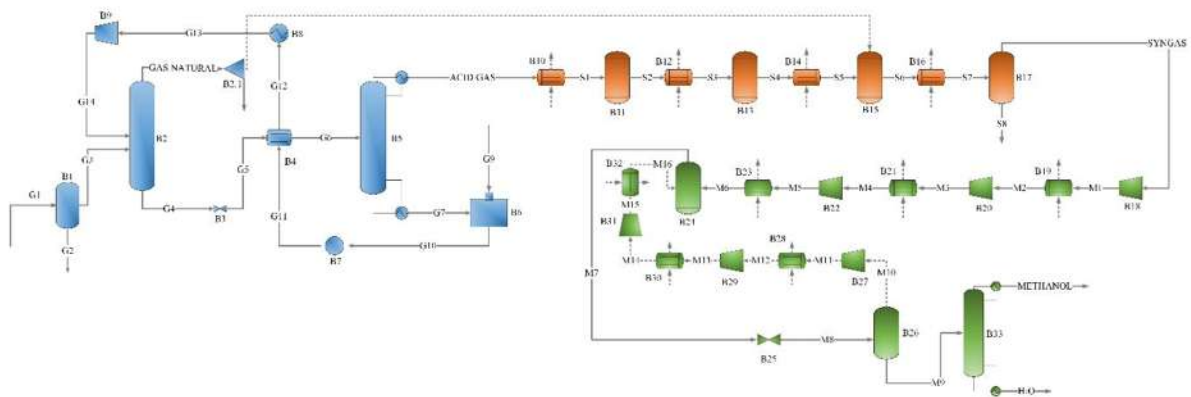


Figura 7. Producción de metanol a partir de corrientes residuales del endulzamiento de gas natural.

La selección adecuada de estas variables es de vital importancia. Por lo tanto, se propuso el uso de un análisis ANOVA para determinar las variables de decisión más importantes en el proceso (Anderson *et al.* 2018). Se propuso un diseño fraccionado 6^3 con cada uno de estos factores para determinar su significancia estadística sobre las variables de respuesta. En este caso, como variables de respuesta se seleccionaron el caudal de *syngas* obtenido y el consumo energético del proceso. La **Tabla 16** muestra los niveles seleccionados para cada factor utilizado en el diseño experimental (Jamekhorshid *et al.*, 2021; Xian & Yuan, 2020; Kidnay *et al.*, 2019; Palo *et al.*, 2007).

Tabla 16. Valores analizados para las variables implicadas en el ANOVA.

Factor	Valor		
Alimentación (kmol/hr)	1800	2096	2200
Temperatura B12 (°C)	600	800	1000
Temperatura B14 (°C)	600	800	1000
Temperatura B16 (°C)	400	600	800
Temperatura B25 (°C)	100	200	300
Reflux B33	1.2	3	5

Una vez obtenidos los resultados de cada una de las corridas, se realizó un ANOVA utilizando el software Minitab 2019, considerando estadísticamente significativos aquellos parámetros que tuvieran un valor de $p < 0.5$ (Montgomery 2004).

3.3. Análisis económico-ambiental

Para realizar el análisis económico-ambiental se han considerado los siguientes aspectos: las emisiones totales anuales de CO₂ (EAT), el coste total anual (CTA) y la producción anual de metanol obtenida.

Para el cálculo de las emisiones de CO₂ se utilizó la metodología propuesta por Gadalla *et al.* (2016). Donde consideran el CO₂ generado de hornos, turbinas de gas y calderas, debido a la combustión de combustibles. Se utilizó el software APSEN HYSYS para cuantificar los calores de cada uno de los intercambiadores de calor utilizados y se cuantificó la producción anual de emisiones de CO₂.

Para el cálculo del TAC se consideró el costo de servicios de los intercambiadores, compresores y bombas y el costo de capital anualizado a 15 años para cada uno de los equipos, utilizando las ecuaciones de Turton (2011). Para la utilidad obtenida en el proceso, se consideró la producción anual de metanol (PAM), considerando un precio de venta de 0,576 US\$/kg (Methanol Institute, 2023). Se calcula entonces el “PROFIT”, utilizando la Ecuación 5:

$$PROFIT = AMP - TAC \quad (13)$$

El TAE y el PROFIT se calcularon para cada una de las combinaciones propuestas mediante el diseño experimental. Así, se analizó el comportamiento de estos parámetros respecto a sus condiciones de operación.

3.4. Integración energética

Las condiciones de operación mostraron que en el proceso de producción de metanol y *syngas* son necesarias altas temperaturas para llevar a cabo la reacción, donde la energía requerida por estos reactores es satisfecha por las utilidades de calefacción suministradas en intercambiadores de calor. Además, en el proceso también son necesarias utilidades de refrigeración que se suministran en intercambiadores. Basándose en lo anterior, se propuso integrar energéticamente el proceso para minimizar el uso de utilidades y, al mismo tiempo, reducir los costes asociados.

Se utilizó la metodología empleada en la sección 2.2. En la **Tabla 17** se presenta la información de las corrientes utilizadas en el proceso.

Tabla 17. Corrientes utilizadas en la producción de metanol.

Corriente	Entrada T (°C)	Salida T (°C)	FCp (kW/°C)	Q (kW)
H1 (G12-G13)	88	43	35.98	1619.24
C1 (ACID GAS-S1)	33	400	0.82	436.24
C2 (S2-S3)	400	800	0.80	159.72
C3 (S4-S5)	800	1,000	0.78	157.76
H2 (S6-S7)	1,000	35	1.35	1305.28
H3 (M1-M2)	714	300	0.91	375.72
H4 (M3-M4)	511	300	0.89	187.87
H5 (M5-M6)	500	200	0.88	264.69
H6 (M11-M12)	650	280	27.92	10329.4
H7 (M13-M14)	800	350	29.54	13292.8
H8 (M15-M16)	570	200	26.64	9857.27

3.5. Resultados

A continuación, se presenta la evaluación de la aplicación de la producción de *syngas* utilizando corrientes residuales de CO₂ y H₂S como materia prima. La **Tabla 18** presenta la composición obtenida de la corriente de *syngas* (1770 kg/h), donde la mezcla se compone principalmente de H₂ y CO, y se obtuvieron conversiones superiores al 95% para CO₂ y H₂S, resultados similares han sido reportados (Dell'Angelo *et al.* 2021b; Bassani *et al.* 2020; Park *et al.* 2020; Peng *et al.* 2020).

Tabla 18. Composición del flujo de *syngas* obtenido.

Componente	Fracción mol
CH ₄	0.0576
C ₂ H ₆	0.0002
C ₃ H ₈	0.0001
H ₂	0.4797
CO	0.4009
H ₂ O	0.0515
CO ₂	0.0016
H ₂ S	0.0131

Posteriormente, el flujo de *syngas* obtenido se utilizó como materia prima para la producción de metanol; al final del proceso se obtuvo metanol con una pureza de 0,99. Con respecto al análisis ANOVA implementado, se encontró que los factores que presentaron un efecto significativo sobre el TAE y el beneficio fueron el flujo de gas amargo, las temperaturas de los reactores B12 y B14 y el reflujo del destilador B33. Se propuso entonces un nuevo diseño experimental con estos parámetros y se realizó un barrido dentro de los límites de operación y se calcularon el TAE y el beneficio para cada combinación. La **Figura 9** muestra el comportamiento del PROFIT frente al TAE para cada una de las combinaciones estudiadas.

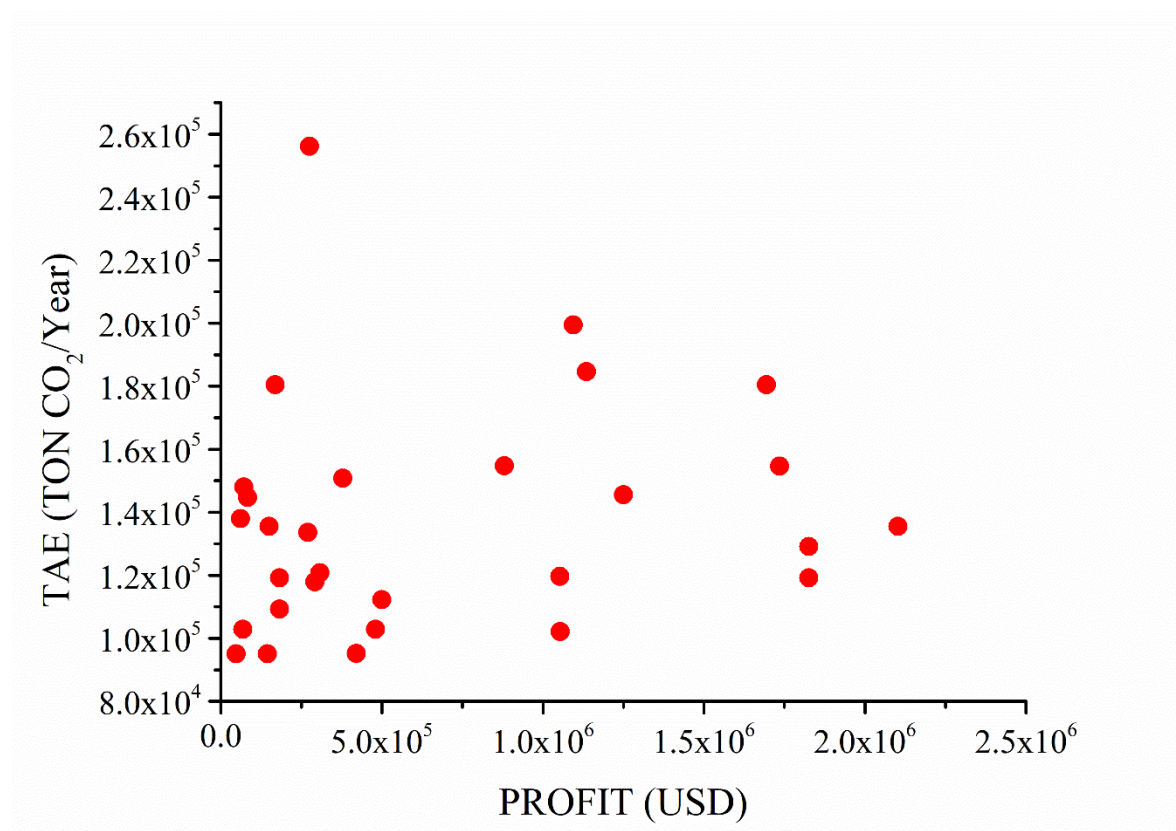


Figure 8. Pareto de la producción de metanol comparando las emisiones de CO₂ producidas contra el PROFIT.

Es claro observar que existen diferentes escenarios para la producción de metanol, donde se pueden obtener valores de beneficio con valores cercanos a 0 y superiores a 2×10^6 USD, resultados que contrastan con la literatura (Hernández-Pérez *et al.*, 2020; Yang y You, 2018; Zhang *et al.*, 2013). Algo similar ocurre con el TAE, hay presencia de escenarios donde la

operación parece ser favorable (Hernández-Pérez *et al.*, 2020). Sin embargo, hay un punto que presentó un mayor beneficio de 2.10×10^6 , el valor más alto obtenido en este análisis. También tiene un valor medio con respecto al TAE de 1.35×10^5 . Este punto parece ser la mejor opción al comparar el beneficio obtenido y su respectivo TAE. Las respectivas condiciones de funcionamiento para este punto se presentan en la **Tabla 19**.

Tabla 19. Condiciones de operación para el punto seleccionado.

Alimentación (kmol/h)	Temperatura B12 (°C)	Temperatura B14 (°C)	Reflujo B33
2096	600	400	1.2

Posteriormente, como estrategia de intensificación, se realizó una integración energética en el punto seleccionado, con el fin de reducir los servicios de calefacción y refrigeración en el proceso y, a su vez, el número de intercambiadores de calor utilizados. La **Figura 10** muestra los resultados obtenidos de la integración energética. Se puede observar que fue posible realizar una recirculación de corrientes. La corriente S7 se utiliza para calentar las corrientes "S4", "S2" y "GAS ÁCIDO", y posteriormente se incorpora al equipo B17. Además, la corriente M6 se utiliza para calentar el "GAS ÁCIDO".

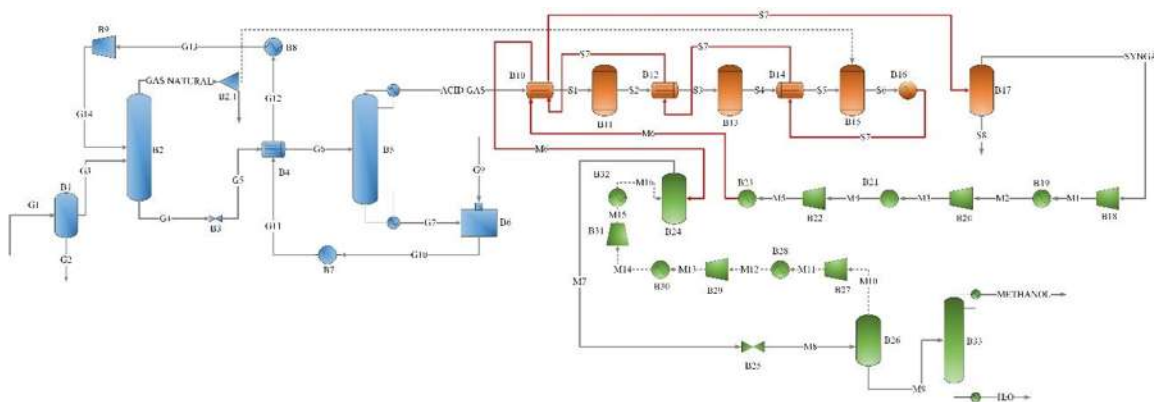


Figura 9. Producción de metanol a partir de corrientes residuales del endulzamiento de gas natural (Integrado).

Con la nueva configuración obtenida mediante la integración energética, se calcularon el beneficio y el TAE y se compararon con los obtenidos anteriormente (**Tabla 20**).

Tabla 20. Comparación entre los procesos con integración energética y sin integración energética.

Proceso	PROFIT (USD)	TAE (Ton CO ₂ /año)
Proceso sin integración energética	2.1×10^6	1.35×10^5
Proceso con integración energética	2.45×10^6	9.01×10^4

Los resultados muestran que se produjo un aumento del beneficio del proceso de $3,5 \times 10^5$ USD y una disminución de la TAE de $4,49 \times 10^4$ Ton CO₂/año. Otra propuesta de intensificación para reducir el número de equipos utilizados fue sustituir los compresores "B18", "B20" y "B22" por un único compresor, así como los compresores "B27", "B29" y "B31" por un único compresor (**Figura 11**).

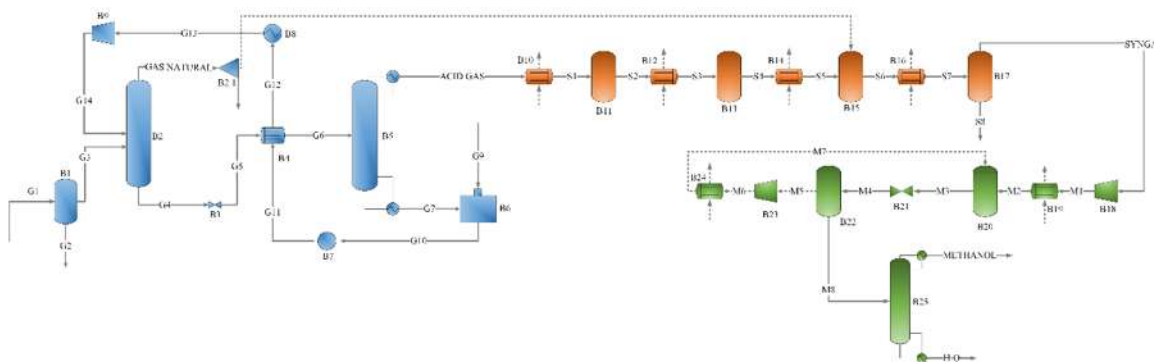


Figure 10. Producción de metanol a partir de corrientes residuales del endulzamiento de gas natural (Intensificado).

Al calcular el beneficio y el TAE obtenidos en la nueva propuesta intensificada, se obtuvo un aumento del PROFIT de 1.05×10^4 USD y de 2.3×10^3 Ton CO₂/año para el TAE, en comparación con el primer proceso propuesto (**Figura 8**). También se propuso una integración energética en el proceso, sin embargo, los ahorros obtenidos no consiguieron un mejor beneficio que el primer proceso.

Capítulo IV: Conclusiones

En este trabajo se han presentado dos casos de estudio para el aprovechamiento de corrientes residuales industriales provenientes de diferentes procesos (planta petroquímica y endulzadora de gas natural). En particular, se consideró un proceso para producir *syngas* y otro para la producción de metanol.

Para el primer caso de estudio se presentó un método de optimización multiobjetivo para el proceso de producción de gas de síntesis a partir de emisiones gaseosas industriales provenientes de una planta petroquímica, considerando el consumo energético, las emisiones producidas en el proceso y la tasa de producción de gas de síntesis. Para ello, se implementó un acoplamiento de un método de optimización multiobjetivo (I-MODE) con la simulación del proceso realizada en Aspen Plus®. Se implementó un diseño factorial y un ANOVA para realizar una adecuada selección de las variables de decisión en el proceso ya que tradicionalmente la selección de las variables de decisión se realiza de forma artificial y sin ningún método estándar. Además, se implementó una integración energética en el proceso buscando reducir las utilidades de calentamiento del proceso.

Utilizando el enfoque propuesto, se planteó un nuevo diseño de proceso para el tratamiento de emisiones gaseosas industriales y la obtención de productos de valor añadido. En particular, se consideró un proceso que recupera una corriente residual que contiene principalmente H₂S y CO₂ para obtener *syngas*. El nuevo proceso se optimizó y se integró energéticamente. Los resultados mostraron que las temperaturas de los reactores eran los factores más significativos del proceso y a partir de su manipulación mediante la técnica de optimización metaheurística, se consiguió un ahorro energético del 21% del proceso y una disminución de la tasa total de emisiones anuales de CO₂ en un 8%, lo que beneficia la implementación del proceso.

Para el segundo caso, se presentó análisis técnico-económico del proceso de producción de metanol a partir de una corriente residual del proceso de endulzamiento del gas natural. La simulación del proceso se llevó a cabo utilizando ASPEN HYSYS®, considerando el costo total anual, las emisiones de CO₂ generadas y la tasa de producción de metanol.

Se implementó un diseño factorial y ANOVA para seleccionar adecuadamente las variables de decisión, ya que la selección tradicional de estas variables se ha realizado de manera

arbitraria y sin un método estándar. Además, se llevó a cabo una integración energética en el proceso con el objetivo de reducir el consumo de energía de calentamiento.

El enfoque propuesto permitió sugerir un nuevo diseño de proceso para el tratamiento del flujo de residuos en el proceso de endulzamiento del gas natural, orientado a la obtención de productos de valor añadido. Este nuevo proceso fue energéticamente integrado, y los resultados indicaron que las temperaturas del reactor eran los factores más significativos. También se observó que la corriente de gas amargo manipulada en las condiciones de operación adecuadas permitió un aumento del beneficio, manteniendo un bajo índice de emisiones de CO₂.

Los resultados mostraron un incremento en los beneficios del proceso de 350,000 USD, junto con una reducción de 44,900 toneladas de CO₂ anuales. Una propuesta de intensificación, que buscaba reducir el número de unidades de proceso, consistió en sustituir tres compresores por un único compresor en dos instancias diferentes. Al calcular el beneficio y el EAT de esta nueva propuesta, se logró un aumento en el beneficio de 10,500 USD y una disminución de 2,300 toneladas de CO₂ anuales en comparación con el primer proceso propuesto.

ANEXO I

Process Integration and Optimization for Sustainability
<https://doi.org/10.1007/s41660-022-00263-1>

ORIGINAL RESEARCH PAPER



Reusing Industrial Gaseous Emissions for Syngas Production

Alejandro Solís-Jacome¹ · Francisco Javier López-Flores¹ · José María Ponce-Ortega¹

Received: 23 March 2022 / Revised: 23 May 2022 / Accepted: 26 May 2022
© The Author(s), under exclusive licence to Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2022

Abstract

This work presents a comprehensive study of industrial plants, focused on the application of optimization methods that allow the coupling of a syngas production process. Different processes have been reported for the production of syngas; however, these methodologies are based on the use of fossil resources such as natural gas. In this work, the use of CO₂ and H₂S waste streams emitted by industrial plants to obtain high value-added products and through the application of optimization methods to reduce the associated costs and significantly improve the performance in the production of syngas is proposed. The study of the syngas production process using residual streams of CO₂ and H₂S as raw material is proposed based on a simulation in the Aspen Plus® software. First, a factorial experimental design and an ANOVA analysis are proposed to determine the decision variables of the process; in addition, the process is energetically improved through energy integration. Then, the proposal contemplates the implementation of a metaheuristic optimization method for the syngas production process, considering a multi-objective approach in such a way that a technical–economic–environmental optimization of the process can be carried out. The results showed that the temperatures of the reactors were the most significant factors in the process; this is thanks to the design of experiments and the ANOVA implemented. Furthermore, through the metaheuristic optimization technique, an energy saving of 21% was achieved and a decrease in the total CO₂ emissions of 8%, which will benefit the implementation of the process.

Keywords Industrial waste streams · Syngas production · Multi-objective optimization · Valorization of gaseous emissions

ANEXO II

Chemical Engineering & Processing: Process Intensification 199 (2024) 109746



Contents lists available at [ScienceDirect](#)

Chemical Engineering and Processing - Process Intensification

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cep



Methanol production from residual streams of natural gas sweetening for achieving the sustainable development goals

Alejandro Solis-Jacome^{a,1,*}, César Ramírez-Márquez^{a,*}, Miguel A. Morales-Cabrera^{b,1}, José M. Ponce-Ortega^{a,1,*}

^a Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán, Mexico

^b Chemical Engineering Department, Universidad Veracruzana, Xalapa, Veracruz, Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:

Reusing industrial waste streams
Sustainable methanol production
Economic-environmental analysis
Valorization of gaseous emissions

ABSTRACT

Greenhouse gas emissions, specifically CO₂ and H₂S, are recognized as a serious environmental issue. To address this, various strategies have been suggested. Among these, an economic-environmental study is presented, focusing on a methanol production process that utilizes CO₂ and H₂S waste streams from a natural gas sweetening plant. The study aims to identify conditions that enhance the production of value-added products and increase methanol yields while reducing costs. Given the complexity of processes involving numerous variables such as pressure, temperature, flow rates, and others, pinpointing the most impactful variables for effective manipulation poses a significant challenge. To tackle this, the study adopts a factorial experimental design coupled with ANOVA analysis to determine the variables that most significantly affect the process. Based on this analysis, the study suggests process improvement through energy integration. Results, derived from the experimental design and ANOVA analysis, reveal that reactor temperatures play a crucial role in influencing the process's effectiveness.

Referencias bibliográficas

1. Acquarola, C., Ao, M., Bhatelia, T., Prakash, B., Faka, S., Pareek, V., & Shah, M. T. (2021). Simulations and optimization of a reduced CO₂ emission process for methanol production using syngas from bi-reforming. *Energy & Fuels*, 35(10), 8844-8856. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.1c00227
2. Afzal, S., Sengupta, D., Sarkar, A., El-Halwagi, M., & Elbashir, N. (2018). Optimization approach to the reduction of CO₂ emissions for syngas production involving dry reforming. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 6(6), 7532-7544. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.8b00235>
3. Alibrahim, H. A., Khalafalla, S. S., Ahmed, U., Park, S., Lee, C. J., & Zahid, U. (2021). Conceptual design of syngas production by the integration of gasification and dry-reforming technologies with CO₂ capture and utilization. *Energy Conversion and Management*, 244, 114485. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114485>
4. Al-Lagtah NM, Al-Habsi S, & Onaizi SA. (2015). Optimization and performance improvement of Lekhwair natural gas sweetening plant using Aspen HYSYS. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 26, 367-381. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2015.06.030>
5. Almutairi, K., Nazari, M. A., Salem, M., Rashidi, M. M., Assad, M. E. H., & Padmanaban, S. (2022). A review on applications of solar energy for preheating in power plants. *Alexandria Engineering Journal*, 61(7), 5283-5294. <https://doi.org/10.1016/j.aej.2021.10.045>
6. Alsuhaibani, A. S., Afzal, S., Challiwala, M., Elbashir, N. O., & El-Halwagi, M. M. (2020). The impact of the development of catalyst and reaction system of the methanol synthesis stage on the overall profitability of the entire plant: A techno-economic study. *Catalysis Today*, 343, 191-198., <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2019.03.070>
7. Anderson VL, & McLean RA. (2018). *Design of experiments: a realistic approach*. CRC Press. New York.USA.
8. Asadi J, Yazdani E, Dehaghani YH, & Kazempoor P. (2021). Technical evaluation and optimization of a flare gas recovery system for improving energy efficiency and reducing emissions. *Energy Conversion and Management*, 236, 114076. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114076>
9. Asimakopoulos K, Łężyk M, Grimalt-Aleman A, Melas A, Wen Z, Gavala HN, & Skiadas IV. (2020). Temperature effects on syngas biomethanation performed in a trickle bed reactor. *Chemical Engineering Journal*, 393, 124739. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.124739>
10. Bac S, Keskin S, & Avcı AK. (2020). Recent advances in sustainable syngas production by catalytic CO₂ reforming of ethanol and glycerol. *Sustainable Energy & Fuels*, 4(3), 1029-1047. <https://doi.org/10.1039/C9SE00967A>
11. Bahadori, A. (2014). *Natural gas processing: technology and engineering design*. Gulf Professional Publishing.

12. Bassani A, Previtali D, Pirola C, Bozzano G, Colombo S, & Manenti F. (2020). Mitigating carbon dioxide impact of industrial steam methane reformers by acid gas to syngas technology: Technical and environmental feasibility. *Journal of Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems*, 8(1), 71-87. <https://doi.org/10.13044/j.sdewes.d7.0258>
13. Bayer P, & Aklin M. (2020). The European Union emissions trading system reduced CO₂ emissions despite low prices. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(16), 8804-8812. <https://doi.org/10.1073/pnas.1918128117>
14. Borhani, T. N., & Wang, M. (2019). Role of solvents in CO₂ capture processes: The review of selection and design methods. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 114, 109299. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109299>
15. Brooke A, Kendrick D, Meeruas A, Raman R. (2013). GAMS-language guide. Washington, D.C.: GAMS Development Corporation, USA.
16. Cameron, I. T., & Hangos, K. (2001). Process modelling and model analysis. Elsevier.
17. Cao K, Ji Y, Bai S, Huang X, Li Y, & Shao Q. (2021). A wide range of CO: H₂ syngas ratios enabled by a tellurization-induced amorphous telluride–palladium surface. *Journal of Materials Chemistry A*, 9(34), 18349-18355. <https://doi.org/10.1039/D1TA04035A>
18. Chan YH, Rahman SNFSA, Lahuri HM, & Khalid A. (2021). Recent progress on CO-rich syngas production via CO₂ gasification of various wastes: A critical review on efficiency, challenges and outlook. *Environmental Pollution*, 278, 116843. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2021.116843>
19. Chen JJJ. (1987). Comments on improvements on a replacement for the logarithmic mean. *Chemical Engineering Science*, 42(10), 2488-2489. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(87\)80128-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(87)80128-8)
20. Chen WH, Chiu GL, Ong HC, Lam SS, Lim S, Ok YS, & Kwon EE. (2021). Optimization and analysis of syngas production from methane and CO₂ via Taguchi approach, response surface methodology (RSM) and analysis of variance (ANOVA). *Fuel*, 296, 120642. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.120642>
21. Dang Q, Zhang X, Zhou Y, & Jia X. (2021). Prediction and optimization of syngas production from a kinetic-based biomass gasification process model. *Fuel Processing Technology*, 212, 106604. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2020.106604>
22. Deka, T. J., Osman, A. I., Baruah, D. C., & Rooney, D. W. (2022). Methanol fuel production, utilization, and techno-economy: a review. *Environmental Chemistry Letters*, 20(6), 3525-3554. <https://doi.org/10.1007/s10311-022-01485-y>
23. Del Castillo, E. (2007). *Process optimization: a statistical approach* (Vol. 105). Springer Science & Business Media.
24. Dell Angelo A, Andoglu EM, Bozzano G, Kaytakoglu S, & Manenti F. (2021a). Mitigating carbon dioxide impact of fossil/bio-refineries by acid gas to syngas technology: sensitivity analysis and techno-economic assessment. *Journal of Sustainable*

- Development of Energy, Water and Environment Systems*, 9 (3), 1-14.
<https://doi.org/10.13044/j.sdewes.d8.0366>
25. Dell' Angelo A, Micheli GJL, & Manenti F. (2021b). Techno-economic feasibility study of acid gas to syngas (AG2STM) technology applied to oil refinery. <http://hdl.handle.net/11311/1196612>
 26. Dwivedi, A., Gudi, R., & Biswas, P. (2017). An improved tri-reforming based methanol production process for enhanced CO₂ valorization. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(36), 23227-23241. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.07.166>
 27. Frazão CJ, & Walther T. (2020). Syngas and methanol-based biorefinery concepts. *Chemie Ingenieur Technik*, 92(11), 1680-1699. <https://doi.org/10.1002/cite.202000108>
 28. Gadalla, M., Olujić, Ž., Jobson, M., & Smith, R. (2006). Estimation and reduction of CO₂ emissions from crude oil distillation units. *Energy*, 31(13), 2398-2408. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2005.10.030>
 29. Gil, I., Guevara, J., & García, J. (2011). *Análisis y simulación de procesos en Ingeniería Química*. Universidad Nacional de Colombia.
 30. Gramacy, R. B. (2020). *Surrogates: Gaussian process modeling, design, and optimization for the applied sciences*. Chapman and Hall/CRC.
 31. Harris, K., Grim, R. G., Huang, Z., & Tao, L. (2021). A comparative techno-economic analysis of renewable methanol synthesis from biomass and CO₂: Opportunities and barriers to commercialization. *Applied Energy*, 303, 117637. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2021.117637>
 32. Haw, J. F., Song, W., Marcus, D. M., & Nicholas, J. B. (2003). The mechanism of methanol to hydrocarbon catalysis. *Accounts of chemical research*, 36(5), 317-326. DOI: 10.1021/ar020006o
 33. Haydary, J. (2019). *Chemical process design and simulation: Aspen Plus and Aspen Hysys applications*. John Wiley & Sons.
 34. Hernandez-Perez LG, Alsuhaibani AS, Radwan N, El-Halwagi MM, & Ponce-Ortega JM. (2020). Structural and operating optimization of the methanol process using a metaheuristic technique. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 8(8), 3135-3150. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b05981>
 35. Hernández-Pérez, L. G., & Ponce-Ortega, J. M. (2021). Use of statistic functions to consider uncertainty in multi-objective optimization methods based on metaheuristic algorithms. *Process Integration and Optimization for Sustainability*, 1-14. <https://doi.org/10.1007/s41660-021-00211-5>
 36. Hernández-Pérez, L. G., Villicaña-García, E., Cansino-Loeza, B., Alsuhaibani, A. S., El-Halwagi, M. M., & Ponce-Ortega, J. M. (2022). Incorporating the occupational health in the optimization for the methanol process. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 74, 104660. <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2021.104660>
 37. Himmelblau, D. M., & Bischoff, K. B. (2021). *Análisis y simulación de procesos*. Reverté.

38. Iaquaniello, G., Centi, G., Salladini, A., Palo, E., Perathoner, S., & Spadaccini, L. (2017). Waste-to-methanol: Process and economics assessment. *Bioresource technology*, 243, 611-619. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2017.06.172>
39. Ibarra-González P, Rong BG, Segovia-Hernández JG, & Sánchez-Ramírez E. (2021). Multi-objective optimization methodology for process synthesis and intensification: Gasification-based biomass conversion into transportation fuels. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 162, 108327. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2021.108327>
40. Jamekhorshid, A., Davani, Z. K., Salehi, A., & Khosravi, A. (2021). Gas sweetening simulation and its optimization by two typical amine solutions: An industrial case study in Persian Gulf region. *Natural Gas Industry B*, 8(3), 309-316. <https://doi.org/10.1016/j.ngib.2021.04.006>
41. Julián-Durán, L. M., Ortiz-Espinoza, A. P., El-Halwagi, M. M., & Jiménez-Gutiérrez, A. (2014). Techno-economic assessment and environmental impact of shale gas alternatives to methanol. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2(10), 2338-2344. <https://doi.org/10.1021/sc500330g>
42. Kidnay, A. J., Parrish, W. R., & McCartney, D. G. (2019). *Fundamentals of natural gas processing*. CRC press.
43. Koytsoumpa EI, Bergins C, & Kakaras E. (2018). The CO₂ economy: Review of CO₂ capture and reuse technologies. *The Journal of Supercritical Fluids*, 132, 3-16. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2017.07.029>
44. Li J, Xu K, Yao X, & Chen S. (2021). Prediction and optimization of syngas production from steam gasification: Numerical study of operating conditions and biomass composition. *Energy Conversion and Management*, 236, 114077. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114077>
45. Li, W., Zhuang, Y., Zhang, L., Liu, L., Du, J., (2019). Economic evaluation and environmental assessment of shale gas dehydration process. *J. Clean. Prod.* 232,487–498. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2019.05.361>
46. Lira-Barragán LF, Ponce-Ortega JM, Serna-González M, El-Halwagi MM. (2014). Optimal design of process energy systems integrating sustainable considerations. *Energy*, 76, 139–160. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2014.04.111>
47. Liu, K., Song, C., & Subramani, V. (2010). *Hydrogen and syngas production and purification technologies*. John Wiley & Sons.
48. López-Flores, F. J., Hernández-Pérez, L. G., Lira-Barragán, L. F., Rubio-Castro, E., & Ponce-Ortega, J. (2021). Energy integration for waste heat in industrial plants through a metaheuristic-deterministic approach. In *2021 AIChE Annual Meeting*. AIChE.
49. Luu, M. T., Milani, D., Bahadori, A., & Abbas, A. (2015). A comparative study of CO₂ utilization in methanol synthesis with various syngas production technologies. *Journal of CO₂ Utilization*, 12, 62-76. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2015.07.001>

50. Mansoor R, & Tahir M. (2021). Recent developments in natural gas flaring reduction and reformation to energy-efficient fuels: a review. *Energy & Fuels*, 35(5), 3675-3714. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c04269>
51. Martinez-Gomez, J., Nápoles-Rivera, F., Ponce-Ortega, J. M., & El-Halwagi, M. M. (2017). Optimization of the production of syngas from shale gas with economic and safety considerations. *Applied Thermal Engineering*, 110, 678-685. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.08.201>
52. Montgomery DC. (2004). *Design and Analysis of Experiments*. New York, USA, Limusa Wiley.
53. Narine, K., Mahabir, J., Koylass, N., Samaroo, N., Singh-Gryzbon, S., Baboolal, A., ... & Ward, K. (2021). Climate smart process design for current and future methanol production. *Journal of CO₂ Utilization*, 44, 101399. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2020.101399>
54. Nong, D., Simshauser, P., & Nguyen, D. B. (2021). Greenhouse gas emissions vs CO₂ emissions: Comparative analysis of a global carbon tax. *Applied Energy*, 298, 117223. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2021.117223>
55. Noureldin, M. M., Elbashir, N. O., & El-Halwagi, M. M. (2014). Optimization and selection of reforming approaches for syngas generation from natural/shale gas. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(5), 1841-1855. <https://doi.org/10.1021/ie402382w>
56. Olah, G. A., Goepfert, A., & Prakash, G. S. (2011). *Beyond oil and gas: the methanol economy*. John Wiley & Sons.
57. Ozturk NF, & Avci AK. (2019). Intensified dimethyl ether production from synthesis gas with CO₂. *Chemical Engineering Journal*, 370, 885-896. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.03.210>
58. Palo, D. R., Dagle, R. A., & Holladay, J. D. (2007). Methanol steam reforming for hydrogen production. *Chemical reviews*, 107(10), 3992-4021. DOI: 10.1021/cr050198b
59. Park KS, Jeong MH, & Bae JW. (2020). Synergy effects of cobalt oxides on Ni/Co-embedded Al₂O₃ for hydrogen-rich syngas production by steam reforming of propane. *Catalysts*, 10(4), 461. <https://doi.org/10.3390/catal10040461>
60. Peng N, Gai C, & Peng C. (2020). Enhancing hydrogen-rich syngas production and energy recovery efficiency by integrating hydrothermal carbonization pretreatment with steam gasification. *Energy*, 210, 118655. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118655>
61. Peng X, Liu Z, & Jiang D. (2021). A review of multiphase energy conversion in wind power generation. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 147, 111172. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111172>
62. Ponce-Ortega JM, Hernández-Pérez LG (2019) Optimization of process flowsheets through metaheuristic techniques. Springer, Switzerland. isbn:978-3-319-91722-1

63. Ponce-Ortega, J. M., Al-Thubaiti, M. M., & El-Halwagi, M. M. (2012). Process intensification: new understanding and systematic approach. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 53, 63-75. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2011.12.010>
64. Rahbari, A., Ramdin, M., Van Den Broeke, L. J., & Vlugt, T. J. (2018). Combined steam reforming of methane and formic acid to produce syngas with an adjustable H₂: CO ratio. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 57(31), 10663-10674. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b02443>
65. Ramírez-Márquez, C., Al-Thubaiti, M. M., Martín, M., El-Halwagi, M. M., & Ponce-Ortega, J. M. (2023). Processes Intensification for Sustainability: Prospects and Opportunities. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 62(6), 2428-2443. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c04305>
66. Roode-Gutzmer, Q. I., Kaiser, D., & Bertau, M. (2019). Renewable methanol synthesis. *ChemBioEng Reviews*, 6(6), 209-236. <https://doi.org/10.1002/cben.201900012>
67. Saidi, M., & Kadkhodayan, H. (2020). Experimental and simulation study of copper recovery process from copper oxide ore using aspen plus software: Optimization and sensitivity analysis of effective parameters. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 8(3), 103772. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.103772>
68. Sharma S, Rangaiah GP. (2013). An improved multi-objective differential evolution with a termination criterion for optimizing chemical processes. *Comput. Chem. Eng.* 3, 56, 155–173. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.05.004>
69. Sheldon, D. (2017). Methanol production-a technical history. *Johnson Matthey Technology Review*, 61(3), 172-182. <https://doi.org/10.1595/205651317X695622>
70. Sifuentes, V. H. M. (2000). *Simulación de procesos en Ingeniería Química*. Plaza y Valdes.
71. Sun X, Atiyeh HK, Huhnke RL, & Tanner RS. (2019). Syngas fermentation process development for production of biofuels and chemicals: A review. *Bioresource Technology Reports*, 7, 100279. <https://doi.org/10.1016/j.biteb.2019.100279>
72. Tan X, Li H, Guo J, Gu B, & Zeng Y. (2019). Energy-saving and emission reduction technology selection and CO₂ emission reduction potential of China's iron and steel industry under energy substitution policy. *Journal of Cleaner Production*, 222, 823-834. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2019.03.133>
73. Tikadar, D., Gujarathi, A. M., & Guria, C. (2021). Safety, economics, environment and energy based criteria towards multi-objective optimization of natural gas sweetening process: an industrial case study. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 95, 104207. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2021.104207>
74. Tovar-Facio, J., Martín, M., & Ponce-Ortega, J. M. (2021). Sustainable energy transition: modeling and optimization. *Current opinion in chemical engineering*, 31, 100661.
75. Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., & Shaeiwitz, J. A. (2011). *Analysis, synthesis and design of chemical processes*. Pearson Education.

76. Vakilifard N, Williams RG, Holden PB, Turner K, Edwards NR, & Beerling DJ. (2022). Assessment of negative and positive CO₂ emissions on global warming metrics using large ensemble Earth system model simulations. *Biogeosciences Discussions*, 1-33. <https://doi.org/10.5194/bg-2022-38>
77. Verhelst, S., Turner, J. W., Sileghem, L., & Vancoillie, J. (2019). Methanol as a fuel for internal combustion engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 70, 43-88. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2018.10.001>
78. Wang H, & Zhang R. (2022). Effects of environmental regulation on CO₂ emissions: An empirical analysis of 282 cities in China. *Sustainable Production and Consumption*, 29, 259-272. <https://doi.org/10.1016/j.spc.2021.10.016>
79. Wang S, Wang J, Fang C, & Li S. (2019). Estimating the impacts of urban form on CO₂ emission efficiency in the Pearl River Delta, China. *Cities*, 85, 117-129. <https://doi.org/10.1016/j.cities.2018.08.009>
80. Xiang, D., Li, P., Yuan, X., (2020). System optimization and performance evaluation of shale gas chemical looping reforming process for efficient and clean production of methanol and hydrogen. *Energy Convers. Manag.* 220, 113099. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113099>.
81. Xiao H, Pan M, Chu JYH, Bowen CR, BaderS, Aranda J, & Zhu M. (2022). Hydraulic pressure ripple energy harvesting: Structures, materials, and applications. *Advanced Energy Materials*, 2103185. <https://doi.org/10.1002/aenm.202103185>
82. Yang, M., & You, F. (2018). Modular methanol manufacturing from shale gas: Techno-economic and environmental analyses of conventional large-scale production versus small-scale distributed, modular processing. *AIChE Journal*, 64(2), 495-510. <https://doi.org/10.1002/aic.15958>
83. Yee TF, & Grossmann IE. (1990). Simultaneous optimization models for heat integration—II. Heat exchanger network synthesis. *Computers & Chemical Engineering*, 14(10), 1165-1184. [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(90\)85010-8](https://doi.org/10.1016/0098-1354(90)85010-8)
84. Zhang, Y., Cruz, J., Zhang, S., Lou, H. H., & Benson, T. J. (2013). Process simulation and optimization of methanol production coupled to tri-reforming process. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(31), 13617-13630. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.08.009>

Alejandro Solis Jácome

Análisis, Simulación y Optimización de Procesos para la Valorización de Emisiones Gaseosas Industria

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Detalles del documento

Identificador de la entrega

trn:oid:::3117:404720050

Fecha de entrega

12 nov 2024, 1:09 p.m. GMT-6

Fecha de descarga

12 nov 2024, 1:11 p.m. GMT-6

Nombre de archivo

Análisis, Simulación y Optimización de Procesos para la Valorización de Emisiones Gaseosas Indu....pdf

Tamaño de archivo

1.4 MB

65 Páginas




15,254 Palabras

83,558 Caracteres

37% Similitud general

El total combinado de todas las coincidencias, incluidas las fuentes superpuestas, para ca...

Fuentes principales

- 35%  Fuentes de Internet
- 24%  Publicaciones
- 0%  Trabajos entregados (trabajos del estudiante)

Marcas de integridad

N.º de alertas de integridad para revisión

No se han detectado manipulaciones de texto sospechosas.

Los algoritmos de nuestro sistema analizan un documento en profundidad para buscar inconsistencias que permitirían distinguirlo de una entrega normal. Si advertimos algo extraño, lo marcamos como una alerta para que pueda revisarlo.

Una marca de alerta no es necesariamente un indicador de problemas. Sin embargo, recomendamos que preste atención y la revise.

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



A quien corresponda,

Por este medio, quien abajo firma, bajo protesta de decir verdad, declara lo siguiente:

- Que presenta para revisión de originalidad el manuscrito cuyos detalles se especifican abajo.
- Que todas las fuentes consultadas para la elaboración del manuscrito están debidamente identificadas dentro del cuerpo del texto, e incluidas en la lista de referencias.
- Que, en caso de haber usado un sistema de inteligencia artificial, en cualquier etapa del desarrollo de su trabajo, lo ha especificado en la tabla que se encuentra en este documento.
- Que conoce la normativa de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, en particular los Incisos IX y XII del artículo 85, y los artículos 88 y 101 del Estatuto Universitario de la UMSNH, además del transitorio tercero del Reglamento General para los Estudios de Posgrado de la UMSNH.

Datos del manuscrito que se presenta a revisión		
Programa educativo	Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química	
Título del trabajo	Análisis, Simulación y Optimización de Procesos para la Valorización de Emisiones Gaseosas Industriales	
	Nombre	Correo electrónico
Autor/es	Alejandro Solis Jácome	2023264a@umich.mx
Director	José María Ponce Ortega	Jose.ponce@umich.mx
Codirector	Miguel Angel Morales Cabrera	miguelmor
Coordinador del programa	José Apolinar Cortes	jose.apolinar@umich.mx

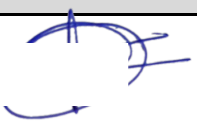
Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Asistencia en la redacción	No	

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Traducción al español	No	
Traducción a otra lengua	No	
Revisión y corrección de estilo	No	
Análisis de datos	No	
Búsqueda y organización de información	No	
Formateo de las referencias bibliográficas	No	
Generación de contenido multimedia	No	
Otro		

Datos del solicitante	
Nombre y firma	Alejandro Solís Jácome 
Lugar y fecha	Xalapa, Veracruz, 8 de noviembre de 2024