



DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE UN PROCESO SOSTENIBLE PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO VERDE

Laura Lucía Moreno Jalhk ^{a,*}, Dr. Segovia Hernández Juan Gabriel ^a, Dr. Ramírez Sánchez Eduardo ^a,
Rangel López Alden Paul ^a, Torres Ayala Antonio ^a, Velázquez Sámano Tadeo Elías ^a, Calderón García
Karen Yazmín ^a, Coronel Muñoz Melanie ^a, Salgado Escoto Jesús Aarón ^a

^a Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas,
Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, Guanajuato, Gto., México 36050.

ll.morenojalkh@ugto.mx

Resumen

Actualmente, se están explorando diversas alternativas al uso de combustibles fósiles. Una de las principales preocupaciones de la sociedad es el cambio climático, una problemática enfrentada durante años, pero que ahora representa un riesgo potencial aún mayor. Por esta razón, se busca reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, contribuyendo así al cumplimiento del Acuerdo de París y la más reciente Agenda 2030 presentada en 2023 en Dubái.

Una de las alternativas que ha captado la atención a nivel mundial es la producción de hidrógeno. Se han estudiado diversos procesos para la producción de hidrógeno, como la electrólisis del agua, el reformado de hidrocarburos, la fotocatalisis y la biotecnología. Entre estos, el más conocido y utilizado es el reformado de metano, ampliamente considerado en investigaciones como la mejor alternativa para la producción de hidrógeno. Sin embargo, el etanol ha sido presentado como un candidato prometedor para sustituir al metano en el proceso de reformado debido a sus numerosas ventajas. El etanol puede producirse a partir de fuentes renovables como la biomasa, no es tóxico y presenta un alto contenido de hidrógeno.

En este documento, se busca realizar un análisis exhaustivo del reformado de etanol con vapor, basado en la literatura consultada. Se pretende determinar las composiciones, las mejores condiciones para el proceso y las dimensiones de los equipos utilizados, con el fin de obtener un resultado factible en cuanto a la producción de hidrógeno. Además, se realizará un análisis económico y de seguridad del proceso estudiado.

Palabras claves: Reformado de etanol; Producción de Hidrógeno; Hidrógeno Verde;



DESIGN AND OPTIMIZATION OF A SUSTAINABLE PROCESS FOR THE PRODUCTION OF GREEN HYDROGEN

Abstract

Currently, various alternatives to fossil fuel use are being explored. One of the primary concerns of society is climate change, a challenge that has been faced for years but now represents an even greater potential risk. Consequently, efforts are being made to reduce greenhouse gas emissions, thereby contributing to the fulfillment of the Paris Agreement and the most recent Agenda 2030 presented in 2023 in Dubai.

One of the alternatives that has garnered global attention is hydrogen production. Various processes for hydrogen production have been studied, including water electrolysis, hydrocarbon reforming, photocatalysis, and biotechnology. Among these, methane reforming is the most well-known and widely utilized, often regarded in research as the optimal alternative for hydrogen production. However, ethanol has emerged as a promising candidate to replace methane in the reforming process due to its numerous advantages. Ethanol can be produced from renewable sources such as biomass, is non-toxic, and possesses a high hydrogen content. Despite the advantages of ethanol in reducing fossil fuel dependence, methane reforming remains the preferred option.

This document aims to conduct a comprehensive analysis of ethanol steam reforming based on the reviewed literature. The objective is to determine the compositions, optimal process conditions, and dimensions of the equipment used, in order to achieve a feasible outcome regarding hydrogen production.

Keywords: Ethanol Reforming; Hydrogen Production; Green Hydrogen.

1. Introducción

Hay una frecuente crisis en la energía mundial, lo que impulsa investigaciones orientadas a desarrollar posibles soluciones para la generación de energía que logren ser más eficientes y sostenibles buscando minimizar los problemas derivados del calentamiento global y la escasez de recursos fósiles. En este contexto, la reducción de

emisiones de gases contaminantes se ha vuelto una prioridad. La quema de combustibles fósiles constituye aproximadamente el 80% de la energía consumida a nivel mundial, United Nations, (n.d.), lo que implica un riesgo significativo para el medio ambiente y el planeta. Dado el inminente peligro que representa el cambio climático, se han buscado diversas alternativas para cumplir con el Acuerdo de



París, cuyo objetivo es mantener el aumento de la temperatura global por debajo de los 2 °C. Cambridge University Press eBooks (pp. 295–408). Además, en 2023, Dubái asumió un papel protagónico en la adopción e implementación de la Agenda 2030 y sus Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS). Uno de los puntos más importantes de esta agenda es la reducción de las emisiones globales de gases de efecto invernadero en un 43% para 2030, unfccc.int/news. La meta es una transición hacia energías renovables, reduciendo el uso de combustibles fósiles. Una de las alternativas más prometedoras para esta transición es el hidrógeno. Recientemente, el hidrógeno ha sido reconocido más como combustible potencial y una solución energética única, ya que ofrece ventajas significativas con su uso y disponibilidad de soluciones libres de carbono, lo que contribuye a reducir CO₂ y otros gases invernadero.

2. Metodología.

La producción de hidrógeno mediante reformado húmedo de etanol consta de tres etapas, fermentación de biomasa, concentración del caldo de fermentación, y la producción de hidrógeno (Figura 1). La mezcla de bioetanol y agua procedente del fermentador es destilada para llevarla a una composición deseada, el cual se

alimentará a un primer reactor en donde se llevará a cabo la reacción de reformado de etanol $\text{EtOH} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{CO} + 4\text{H}_2$ Kadier, A.2014. Posteriormente, el efluente del primer reactor es alimentado a un segundo reactor donde se llevará a cabo la reacción de desplazamiento de gas-agua $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ Basile, A. 2017. En el efluente del reactor de fermentación se considerará una composición en masa de 5.26% de etanol y 94.74% de agua, Rizza Othman 2019. Así mismo, se fija un flujo de 1000 kmol/h de destilado en la columna, mismo que será alimentado al primer reactor para la producción de hidrógeno.

Las composiciones objetivo en la salida del domo de la columna fueron establecidas en proporciones molares vapor-etanol de 50:50, 55:45, 60:40 y 70:30. Se modelaron la columna de destilación para cada una de estas mezclas y los reactores del proceso. Para evaluar y seleccionar la mejor configuración de la columna de destilación y el sistema reactivo, se realizaron estudios detallados de análisis de sensibilidad. Además, se analizaron los aspectos económicos del proceso, (incluyendo los costos de capital y operación), ambientales (considerando las emisiones de CO₂ y otros contaminantes) y de seguridad (se evaluaron los riesgos asociados con la operación de los reactores y la columna de destilación).

Este enfoque metodológico permite optimizar la producción de hidrógeno a partir de etanol,



utilizando tecnologías sostenibles y económicamente viables, contribuyendo al desarrollo de fuentes de energía limpias y renovables.

La estimación del costo total anualizado (TAC) se llevó a cabo empleando la ecuación 1 a partir de los costos de quipos y servicios calculados con el método de Guthrie explicado por Turton (2012). Los costos de equipos se estimaron para cada uno de los módulos del proceso a partir de sus dimensiones, materiales y presiones de operación, dividiendo el monto en un plazo de 10 años como tiempo de retorno (TR) con fines de comparación. Los costos de servicios para un año de operación se obtienen a partir de las cargas térmicas requeridas por los equipos para lograr las temperaturas necesarias del proceso, a partir de las cuales se estima la cantidad de agua de enfriamiento o vapor de calentamiento requeridos para suministrar o retirar esa energía según sea el caso.

$$TAC = \frac{\text{Costo de equipos}}{TR} + \text{Costo de servicios} \quad (\text{ec. 1})$$

Para el análisis de seguridad del proceso se empleó la metodología descrita por el Center for Chemical Process Safety (CCPS) de la American Institute Chemical Engineers (AIChE) 1999, en el que se hace uso de modelos de fuente y de efectos para determinar la probabilidad de riesgo, para finalmente determinar el Índice de Riesgos (IR). Para los modelos de fuente, se utilizaron los modelos para el caso de descarga causada por

perforaciones en tanques y tuberías presurizadas tanto en fase líquida como gas que se encuentran en el capítulo 2 de dicho libro. Los modelos se representan con las siguientes ecuaciones, para flujo másico liberado continuamente.

$$\dot{m}_{liq} = C_D A \rho \sqrt{\left(\frac{g_c P_g}{\rho} + g h_L\right)} \quad (\text{ec. 2})$$

$$\dot{m}_{vap} = C_D A P_1 \sqrt{\frac{K g_c M}{R_g T_1} \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k+1}{k-1}}} \quad (\text{ec. 3})$$

3. Resultados.

Columnas de destilación.

En la Figura 2 se puede observar los resultados de los costos de las columnas para la composición de destilado 70:30, en donde cada curva representa una columna con cierta cantidad de etapas totales, el eje X es la etapa de alimentación y el eje Y el TAC de la columna.

En dicha gráfica se puede observar que los costos disminuyen al tener una sección de rectificación corta, es decir, que la alimentación se encuentre cerca del domo. Además, se puede observar que la columna de 50 etapas tiene menor TAC, y el disminuir las etapas aumenta el TAC de la columna. Sin embargo, se aprecia que hay zonas en las que no hay diferencia significativa del TAC entre la columna de 50 etapas y otras de menores, lo que nos permite elegir entre varios diseños



de columnas que puedan costar ligeramente más, pero sean más pequeños e incluso más seguros. Las columnas con menor cantidad de emisiones de CO₂ se pueden encontrar en los diseños con composición objetivo 70:30 (agua:etanol), teniendo un notable aumento en emisiones al aumentar la composición respecto al etanol. Por último, las columnas que presentan menor riesgo son los diseños con composición 70:30 y en donde notamos también un menor costo.

Sistema de Reactores.

Las Figuras 3 y 4 muestran los resultados del análisis de sensibilidad tanto para el primer como para el segundo reactor respectivamente (ambos análisis llevándose a cabo a 675°C y para la composición 70:30). En la Figura 3 se puede observar la conversión del etanol en función de la longitud total del reactor a diferentes presiones de alimentación. La Figura 4 sigue el mismo formato, teniendo en el eje x la longitud total del segundo reactor y en el eje Y la conversión del agua (cabe resaltar que la alimentación para el análisis del segundo reactor se tomó del diseño con mejor solución del primer reactor para cada presión).

Para el caso estudiado se puede observar que al aumentar la presión en el primer reactor se tienen altas conversiones con longitudes pequeñas, pero alcanzando todos los casos conversiones del

100% con longitudes menores a 1m. Por otra parte, el segundo reactor tiene un comportamiento muy similar entre las dos presiones diferentes analizadas, y se puede observar que se tiene una máxima conversión de 25%.

Si bien el caso 70:30 tiene un menor flujo de hidrógeno de salida, se observa que en ese caso se tienen los reactores más pequeños, así como la menor cantidad de catalizador, por lo que su costo se vería reducido. Se calculó el costo de los equipos, los catalizadores y los servicios para obtener el TAC de cada año, así mismo se realizó el análisis de seguridad, obteniéndose los resultados que se muestran en la tabla 1 donde se observa que el costo de las columnas con alimentación de composición 70:30 son las de menor costo, y que se aumenta conforme sube la composición respecto al etanol. Al igual que las columnas, los reactores que menor riesgo tienen son aquellos que presentan los diseños con composición 70:30 y comparando ambos reactores se debe hacer énfasis en que el segundo reactor es más seguro de operar que el primero.

4. Conclusiones

La investigación ha determinado que la columna de destilación óptima opera con una composición de 30:70 de etanol/agua, utilizando 35 platos con una alimentación en el plato 10. Este diseño, con una relación de reflujo de 0.79, bajo una presión de 1 bar y



una temperatura de 354.601 K en el domo, permite maximizar la eficiencia del proceso. Los análisis de sensibilidad indican que un mayor número de etapas en la columna de destilación reduce el TAC debido a la disminución de los diámetros de las columnas y de la carga térmica, resultando en menores costos de operación y fabricación.

La mezcla de etanol/agua en una proporción de 30:70 resultó ser la más eficaz no solo en términos de TAC y emisiones de CO₂, sino también para la eficiencia de la reacción de reformado de etanol. Se demostró que una mayor presencia de agua en la mezcla mejora la eficiencia y la rapidez de la reacción, siendo óptima una relación de agua a etanol de 2.33 a 1. Este hallazgo es clave para la optimización del proceso de producción de hidrógeno, indicando que el control de la composición de la mezcla inicial es crucial para maximizar la producción de hidrógeno.

El tamaño y diseño de los equipos también tienen implicaciones significativas para la seguridad del proceso. Las grandes dimensiones de las columnas de destilación presentan un riesgo mayor debido a la posibilidad de incidentes de liberación de gases, mientras que los reactores más pequeños, que manejan una fase gaseosa

única, presentan un riesgo reducido de incidentes graves.

5. Referencias bibliográficas

United Nations. (n.d.). *El papel de los combustibles fósiles en un sistema energético sostenible*. Naciones Unidas. <https://www.un.org/es/chronicle/article/el-papel-de-los-combustibles-fosiles-en-un-sistema-energetico-sostenible>

Mitigation Pathways Compatible with Long-term Goals. (2023). In Cambridge University Press eBooks (pp. 295–408). <https://doi.org/10.1017/9781009157926.005>

<https://unfccc.int/news/cop28-agreement-signals-beginning-of-the-end-of-the-fossil-fuel-era>

Kadier, A., Simayi, Y., Kalil, M. S., Abdesahian, P., & Hamid, A. A. (2014). *A review of the substrates used in microbial electrolysis cells (MECs) for producing sustainable and clean hydrogen gas*. *Renewable Energy*, 71, 466–472. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2014.05.052>

Basile, A., Dalena, F., Tong, J., Veziroğlu, T. N., & Technology, I. O. E. A. (2017). *Hydrogen production, separation and purification for energy*. *IET*.



Rizza Othman (2019)(*Environment and Economic Assessment of Hydrogen Production from Methane*).

Turton, Richard. (2012). *Analysis, synthesis, and design of chemical processes* (4). New York: Pearson.

CCPS For Chemical Process,(1999). *Guidelines For Consequence Analysis of Chemical Releases*. Wiley-AIChE.

Comas, J., Mariño, F., Laborde, M., & Amadeo, N. (2004). *Bio-ethanol steam reforming on Ni/Al₂O₃ catalyst*. *Chemical Engineering Journal*, 98(1–2), 61–68.
[https://doi.org/10.1016/s1385-8947\(03\)00186-4](https://doi.org/10.1016/s1385-8947(03)00186-4)

Amran, U. I., Ahmad, A. & Othman, M. R. (2017). *Kinetic base simulation of methane steam reforming and water gas shift for hydrogen production using Aspen Plus*. *Chemical Engineering transactions*, vol. 56, 1681-1686.

Rivas Interián, R.M. (2021). *Optimización de sistemas intensificados para la producción de Bioturbosina a través de alcoholes de forma sustentable*.

Rodríguez, H. (2024, 15 enero). *Hidrógeno (H): Propiedades químicas del elemento de la tabla periódica*.
www.nationalgeographic.com.es.
https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/propiedades-hidrogeno-h_1865

INFORMACIÓN ADICIONAL

FIGURAS Y TABLAS.

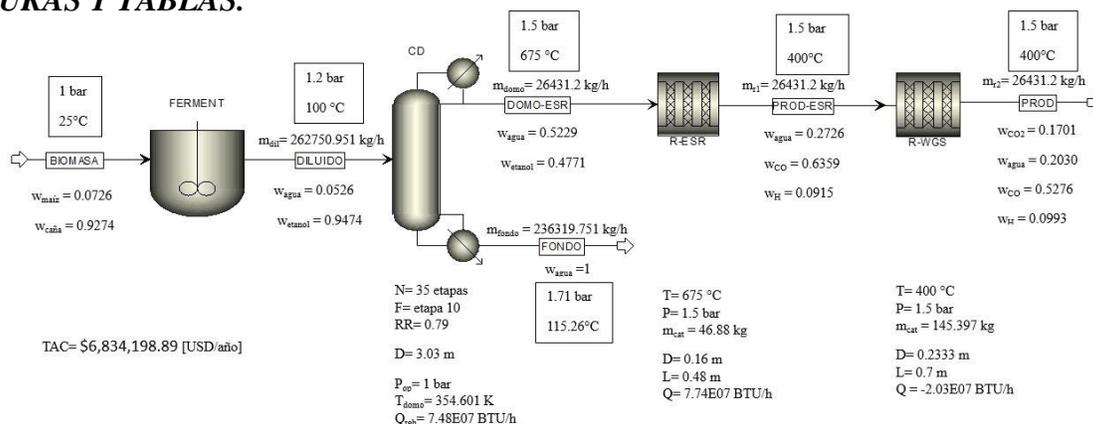


Figura 1. Diagrama proceso de producción de Hidrógeno verde.

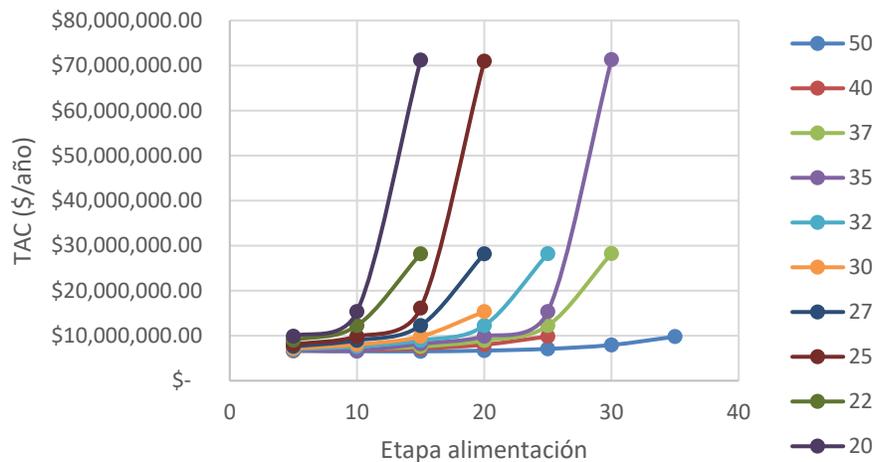


Figura 2. Gráfica Etapa de alimentación vs TAC a diferentes etapas totales para la composición 30:70.

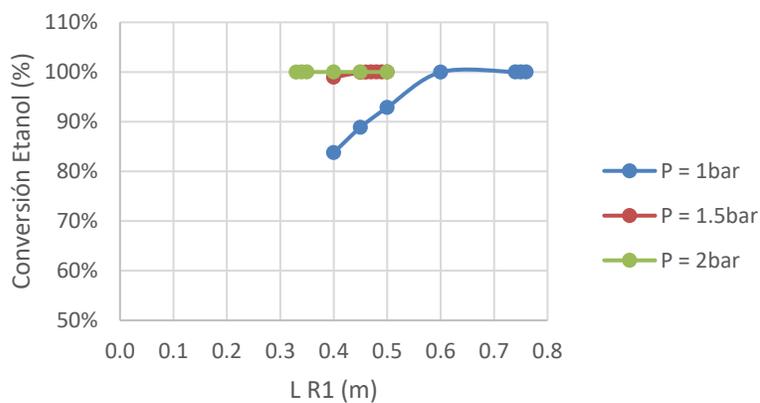


Figura 3. Gráfica de conversión de etanol vs Longitud de primer reactor.

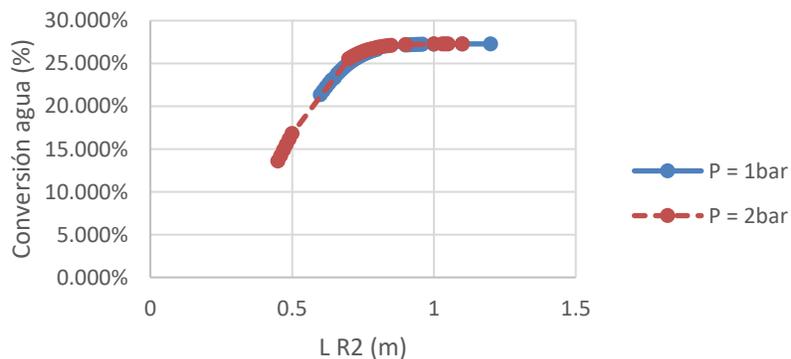


Figura 4. Gráfica de conversión de agua vs Longitud de segundo reactor.



Tabla 1. Costos de reactores mejores resultados seleccionados

R alimentación	T [°C]	P [bar]	L1 [m]	L2 [m]	Costo equipo y cat (\$/año)	Servicios (\$/año)	TAC (\$/año)	IRR1 (x10 ⁻⁵)	IRR2 (x10 ⁻⁵)
50/50	700	1.5	2.5	2.5	819061.7595	35544	854605.76	13.307	9.466
	700	2	2.5	2.5	819061.7595	35544	854605.76	14.001	10.993
55/45	650	1.5	2	1	309465.0239	35544	345009.024	12.046	4.981
	675	1.5	2	1	309465.0239	35544	345009.024	12.019	4.979
60/40	650	1.5	1.5	1	139758.9782	35544	175302.978	7.736	4.933
	675	1.5	1.5	1	139758.9782	35544	175302.978	7.726	4.933
70/30	650	1.5	0.49	0.7	9483.384038	35544	45027.38404	7.351	4.687
	675	1.5	0.48	0.7	9223.602935	35544	44767.6029	7.35	4.804