



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“SÍNTESIS DE UN CICLO DE POTENCIA PARA
LA PRODUCCIÓN DE ELECTRICIDAD A
PARTIR DE LA COMBUSTIÓN DE HIDRÓGENO”**

**TESIS PRESENTADA PARA OBTENER EL
TÍTULO DE:
LICENCIATURA EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**PRESENTA:
ANGEL ISRAEL MUÑOZ CORA**

**ASESOR DE TESIS:
DRA. MAYRA RUIZ REYES**

**CO-ASESOR DE TESIS:
DR. FRANCISCO MANUEL PACHECO AGUIRRE**

AGOSTO 2018





Dedicatoria

Quiero dedicar esta tesis en primera instancia a mi madre, el ser más amoroso, comprensible, dedicado y fuerte, de toda la faz de la tierra. A ti madre de mi corazón te doy las gracias por todo lo que has hecho y sigues haciendo por mí, a ti te debo todo y todo lo que tengo eres tú.

A mi padre a quien quise y quiero con toda el alma, gracias padre mío por todo lo que me enseñaste, gracias a ti, a tu trabajo y a tus consejos soy lo que soy ahora. Lo único que lamento es que ya no estés aquí físicamente para poder verme y sentirte orgulloso de mi casi tanto como yo lo estoy de ti. Tú vives en mis recuerdos y siempre los tendré conmigo.

A mis increíbles hermanos Flavio, Érica y Marina ustedes siempre han sido mi ejemplo a seguir, cada uno me han enseñado muchas cosas diferentes pero lo que más aprecio es que me inculcaron desde pequeño a no desperdiciar el gran esfuerzo que mamá y papá hacen por nosotros. Les tengo un inmenso cariño y un profundo respeto.



Agradecimientos

Quiero dar el más sincero agradecimiento:

A mi asesora de tesis, Dra. Mayra Ruiz Reyes, por la infinita paciencia y dedicación que tubo conmigo y por compartir conmigo parte del inmenso conocimiento que posee, gracias a usted, a su guía y tutela pude desarrollar este trabajo de tesis.

A mi co-asesor de tesis, Dr. Francisco Manuel Pacheco Aguirre cuya enseñanza, guía y experiencia ayudaron a sustentar este trabajo de tesis. También quiero agradecerle todos sus consejos, que le aseguro los llevare conmigo.

A mi familia sin duda por el apoyo que me han dado toda mi vida.

A mis queridos amigos, que con sus muchos defectos y virtudes hicieron la estadía en esta institución más interesante.

A todas las personas que de forma directa o indirecta hicieron posible todo esto.

A mi alma máter, la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por abrirme las puertas del conocimiento, permitiéndome pensar bien, para vivir mejor.



Índice general

Dedicatoria	I
Agradecimientos	II
Índice general	III
Índice de figuras	VI
Índice de tablas	XI
Resumen	XIII
CAPÍTULO I : INTRODUCCIÓN	I
1.1 Introducción	I
1.2 Planteamiento del problema	IV
1.3 Justificación	V
1.4 Hipótesis	V
1.5 Objetivo general	VI
1.5.1 Objetivos específicos	VI
CAPÍTULO II : ANTECEDENTES Y MARCO TEÓRICO	1
2.1 Introducción	2
2.2 Generación de energía eléctrica	3
2.3 Ciclos de potencias	6
2.3.1 Ciclo de Carnot	7
2.3.2 Ciclos de potencia de turbinas de vapor	11
1.3.2.1 Caracterización del ciclo Rankine	12
2.3.3 Ciclo de potencia de turbinas de gas	14
1.3.3.1 Caracterización del ciclo Brayton.	16
2.3.4 Ciclo de potencia combinado	17
2.4 Combustión y combustibles.	18
2.4.1 Combustión de combustibles en fase gas.	22
2.4.2 Combustión catalítica	24



2.5 Trabajos sobre ciclos de potencia -----	26
2.5.1 Simulación de procesos para la generación de potencia -----	26
2.5.2 Estudios experimentales para la generación de potencia.-----	28
2.6 Modelos termodinámicos-----	29
CAPÍTULO III : METODOLOGÍA-----	32
3.1 Introducción-----	33
3.2 Identificación y descripción del mecanismo de reacción -----	36
3.2.1 Metano-----	36
3.2.2 Propano -----	41
3.2.3 Hidrógeno-----	44
3.2.4 Relación de estequiometria -----	45
3.3 Selección de modelos termodinámicos.-----	48
3.4 Marco de referencia del diagrama de flujo de proceso.-----	48
3.4.1 Descripción del sistema de referencia -----	48
3.4.2 Variables analizadas en el sistema de referencia-----	50
3.5 Simulación del proceso de referencia -----	53
3.6 Escalamiento -----	57
3.6 Heurísticas consideradas para la síntesis del proceso.-----	57
3.6.1 Eliminación y adición de calor en el sistema de reacción.-----	57
3.6.2 Intercambiadores de calor y hornos. -----	58
3.6.3 Operaciones de incremento de presión-----	59
CAPÍTULO IV : RESULTADOS-----	60
4.1 Introducción-----	61
4.2 Validación simulación del sistema de reacción-----	61
4.2.1. Metano-----	61
4.2.2. Propano-----	66
4.2.3. Hidrógeno-----	69
4.3 Modelo termodinámico-----	75
4.4 Simulación del ciclo de potencia base.-----	76
4.5 Análisis paramétrico del ciclo de potencia.-----	85



4.6 Reacción de combustión de hidrógeno limitada por el equilibrio termodinámico y por modelo cinético. -----	93
4.7 Viabilidad técnica-----	94
CAPÍTULO V : CONCLUSIONES-----	100
BIBLIOGRAFÍA -----	103

Índice de figuras

Figura I-1.-Esquema de la producción neta de electricidad por tipo de combustible (U.S. Energy Information, 2018).	I
Figura II-1.- Generación bruta de energía eléctrica por tecnología al mes de septiembre de 2017 (Sistema de Información energética, 2017).....	4
Figura II-2.-Producción de energía eléctrica proveniente de las plantas hidroeléctricas y termoeléctricas (Sistema de Información energética, 2017).	4
Figura II-3.- Generación de energía eléctrica por tipo de tecnología dentro de las centrales termoeléctricas (Sistema de Información energética, 2017).....	6
Figura II-4.- Esquema de ciclo de Carnot para un ciclo de vapor (Granet , y otros, 2015).....	9
Figura II-5.- Ciclo de Carnot respecto a P-V para un gas no condensable (Granet , y otros, 2015).....	9
Figura II-6.-Ciclo de potencia Rankine simple (Cengel, y otros, 2015).	12
Figura II-7. Diagrama simplificado de una planta de energía de vapor (Cengel, y otros, 2015).....	13
Figura II-8.-Diagrama de ciclo Brayton ideal a) P-V, b)T-S.	15
Figura II-9.-Motor de turbina de gas de ciclo abierto (Cengel, y otros, 2015). .	15
Figura II-10.- Esquema del ciclo combinado de gas y vapor (Cengel & Boles, 2015).....	18
Figura II-11.- Características de la llama en el borde de un mechero a)caso de pre-mezcla, b) caso de difusión.	23
Figura II-12.- Elementos que componen a un quemador de gas (Hernández Martín , 2008).....	24
Figura II-13.-Esquema de una turbina de gas utilizando una cámara de combustión catalítica.	26
Figura II-14.- Primera parte del mapa de decisión para la selección de modelo termodinámico (Carson, 1996).....	30



Figura III-1.- Resumen en forma de esquema de las actividades a realizar en el presente trabajo de tesis.....	35
Figura III-2.- Diagrama del sistema de reacción para el estudio cinético de metano.....	36
Figura III-3.- Conversión de metano a diferentes temperaturas sobre catalizador de Pt-Pd tratado con vapor, a una concentración de metano de 4067 ppm vol. y un flujo total de 234.5 cm^3/min , sin adición de agua en la alimentación presentada en el trabajo de Abbasi, L., Wanke, & Hayes, (2012).....	39
Figura III-4.- Diagrama de proceso experimental para la oxidación de propano.	42
Figura III-5.- Conversión de propano a diferentes temperaturas para el modelo cinético descrito por la Ec. III-8 del trabajo experimental reportado por Beld, y otros, (1995).....	44
Figura III-6.- Diagrama del turbocompresor usado en el experimento. reportado por S. Kato y N. Nomura (1997).....	49
Figura III-7.- Relación de aire –hidrógeno respecto al flujo másico de aire de admisión reportado por S. Kato y N. Nomura (1997).	50
Figura III-8.- Revoluciones por minuto generadas en la turbina respecto al flujo másico de aire reportados por S. Kato y N. Nomura (1997).	52
Figura III-9.- Potencia generada en la turbina respecto a las revoluciones por minuto (rpm) reportada por S. Kato y N. Nomura (1997).	52
Figura III-10.- Esquema de la discretización en el reactor.	54
Figura IV-1.- Diagrama de flujo de proceso en Aspen Plus que representa el trabajo experimental presentado por Abbasi, y otros (2012).....	62
Figura IV-2.- Implementación de heurísticas al sistema de proceso para la validación de los datos cinéticos.....	63
Figura IV-3.- Perfil térmico del intercambiador EX1 del diagrama de flujo de procesos de la Figura IV-3.....	63
Figura IV-4.- Comparación de la conversión de metano a diferentes temperaturas de los datos reportados por Abbasi, L., Wanke, & Hayes (2012) y la simulación en Aspen Plus V8.8.....	65



Figura IV-5.- Comparación de la conversión obtenida del trabajo experimental y la conversión obtenida mediante simulación.....	65
Figura IV-6.- Análisis de sensibilidad respecto al número de nodos del balance de masa.	66
Figura IV-7.-Diagrama de flujo de proceso en Aspen Plus V8.8 para la oxidación de propano.....	67
Figura IV-8.- Conversión de propano respecto a diferentes temperaturas de los datos reportados por Beld, Ven, & Westerterp (1995) y los datos obtenidos en Aspen Plus V8.8.	69
Figura IV-9.- Potencia generada en la turbina con relación al flujo de aire en la admisión del compresor.	70
Figura IV-10.- Diagrama de flujo de proceso en Aspen Plus V8.8 para el trabajo experimental reportado por Kato & Nomura (1997).	70
Figura IV-11.- Potencia generada en la turbina respecto al flujo de aire en la admisión para el trabajo experimental reportado por S. Kato & N. Nomura (1997) y los datos obtenidos mediante simulación en Aspen Plus V8.8 ...	73
Figura IV-12.- Relación hidrógeno-aire con respecto al flujo de aire, para los flujos originales y modificados en cada sección.....	73
Figura IV-13.- Diagrama de ciclo de potencia para el análisis energético y de emisiones.....	76
Figura IV-14.-Esquema del ciclo de potencia empleando hidrógeno-metano e hidrógeno-propano como combustibles considerando a) alimentación conjunta y b) modo de intercambio.	77
Figura IV-15.- Potencia generada en la turbina respecto al flujo de aire en la admisión para el ciclo de potencia usando hidrogeno, combustibles convencionales y sus mezclas.....	79
Figura IV-16.- Energía mínima de ignición en función de la relación equivalente para mezclas hidrógeno/aire, propano/aire y metano/aire (Häber, y otros, 2017).....	80
Figura IV-17.- Temperatura a la salida de la cámara de combustión respecto a la relación combustible-aire.	80



Figura IV-18.-Eficiencia calculada para el ciclo de potencia respecto a la relación combustible-aire.....	82
Figura IV-19.-Graficas comparativas que describen a)el trabajo total, b) las emisiones de CO ₂ , c) las emisiones de NO ₂ . Para los diferentes combustibles (1=H ₂ , 2=CH ₄ , 3=CH ₄ -80%, 4=CH ₄ -70%, 5=CH ₄ -20%, 6=C ₃ H ₈ , 7=C ₃ H ₈ -80%, 8=C ₃ H ₈ -70%, 9=C ₃ H ₈ -20%).....	83
Figura IV-20.-Graficas comparativas que describen d) la potencia obtenida en la turbina, e) la eficiencia termodinámica y d) la temperatura del combustor. Para los diferentes combustibles (1=H ₂ , 2=CH ₄ , 3=CH ₄ -80%, 4=CH ₄ -70%, 5=CH ₄ -20%, 6=C ₃ H ₈ , 7=C ₃ H ₈ -80%, 8=C ₃ H ₈ -70%, 9=C ₃ H ₈ -20%)	84
Figura IV-21.- Potencia generada en la turbina respecto a la relación combustible-aire manteniendo el flujo total constante.	85
Figura IV-22.- Trabajo total del proceso respecto a la relación combustible-aire para los diferentes combustibles manteniendo un flujo de alimentación constante.	86
Figura IV-23.- Cambio en la temperatura respecto a la relación combustible-aire para los diferentes combustibles manteniendo un flujo constante de alimentación.....	87
Figura IV-24.- Temperatura de la cámara de combustión en función de la relación equivalente ϕ al usar metano como combustible (Glaude, y otros, 2014). 87	87
Figura IV-25.-Variación de la temperatura a la salida del reactor con respecto a ϕ manteniendo un flujo de combustible constante.....	88
Figura IV-26.-Temperatura de flama adiabática contra la composición del oxidante para flamas adiabáticas en equilibrio estequiométrico para aire/H ₂ ,, aire/CH ₄ y aire/C ₃ H ₈ (Baukal, Jr., 2000).	88
Figura IV-27.-Variación de la eficiencia termodinámica para cada combustible a un flujo constante de alimentación.	89
Figura IV-28.-Flujo másico de NO _x respecto a la relación combustible-aire con un flujo de alimentación constante.....	90
Figura IV-29.-Producción de NO _x respecto a ϕ para a) metano-aire y b) propano-aire (Casimir, y otros, 1980).....	91



Figura IV-30.- Dependencia de NO y CO sobre la relación combustible-aire para mezclas aire-metano en equilibrio adiabático.	91
Figura IV-31.- Flujo de CO ₂ producido por cada combustible, respecto a la relación combustible-aire.	92
Figura IV-32.-Composición de los gases de combustión en función de ϕ (Heywood, 1988).....	92
Figura IV-33.-Comparación de la reacción de combustión de hidrógeno limitada por el equilibrio y por modelo cinético para cada variable analizada.	93
Figura IV-34.- Diagrama de ciclo de potencia propuesto para este trabajo de tesis donde es integrado el hidrógeno como combustible.....	96

Índice de tablas

Tabla II-1.-Combustibles típicamente usados por tipo de central eléctrica en América del Norte	19
Tabla II-2.-Parámetros termodinámicos de los combustibles.....	20
Tabla II-3.- Parámetros del proceso de combustión (E. Gelfand , y otros, 2012; Sluka, 2008).....	21
Tabla II-4.- Clasificación de los métodos termodinámicos	30
Tabla II-5.- Modelos para el cálculo de propiedades termodinámicas empleadas en simulación (Carson, 1996).	31
Tabla III-1.-Especificaciones del reactor para el trabajo experimental reportado por Abbasi y colaboradores (2012)	37
Tabla III-2.- Especificaciones del catalizador para el trabajo experimental reportado por Abbasi y colaboradores (2012).....	37
Tabla III-3.-Valores de los parámetros cinéticos para el catalizador de Pt-Pd (Abbasi, y otros, 2012).	38
Tabla III-4.- Parámetros del catalizador (Abbasi, L., Wanke, & Hayes, 2012). ..	41
Tabla III-5.- Especificaciones del reactor para el trabajo experimental.	42
Tabla III-6.- Parámetros cinéticos para el modelo de la Ec. III-8.....	43
Tabla III-7.-Propiedades el catalizador para la oxidación de propano.....	43
Tabla III-8.- Relación estequiometria de aire-combustible y combustible-aire para hidrógeno, metano y propano y sus diferentes mezclas..	47
Tabla III-9.-Flujos máxicos de hidrógeno y aire obtenidos de la Figura III-7 reportada por S. Kato y N. Nomura (1997)	51
Tabla III-10.- Valores de los parámetros para la combustión de hidrógeno (Marinov, Westbrook, & Pitz, 1995).	56
Tabla III-11.- Valores de los parámetros involucrados en la oxidación del metano sobre catalizador de Pt-Pd tratado con vapor (Abbasi, L., Wanke, & Hayes, 2012)).....	56
Tabla III-12.-Valores de los parámetros involucrados en la oxidación de propano sobre catalizador de $PdAL_2O_3$ (Beld, Ven, & Westerterp, 1995).	57



Tabla IV-1.-Variables de operación de los equipos del diagrama de proceso para la oxidación de metano	62
Tabla IV-2.-Datos de las corrientes del proceso	64
Tabla IV-3.-Variables de operación de los equipos del diagrama de proceso para la oxidación de propano.....	67
Tabla IV-4.-Datos de las corrientes del proceso descrito en la Figura IV-7.	68
Tabla IV-5.-Especificaciones de los equipos del proceso.	71
Tabla IV-6.-Flujos másicos de hidrógeno y aire de la simulación en Aspen Plus V8.8.	72
Tabla IV-7.- Datos de las corrientes de proceso descrito por la Figura IV-10. .	74
Tabla IV-8.- Valores máximos de las variables analizadas en el ciclo de potencia	83
Tabla IV-9.-Estimación de costos mediante Aspen Plus V8.8	95
Tabla IV-10.-Características de los reactores empleados en el proceso.	97
Tabla IV-11.- Características de los intercambiadores de calor empleados en el proceso.	98
Tabla IV-12.Caractersiticas de compresores y turbinas del proceso.	99



Resumen

La gran era tecnológica que vivimos actualmente se ha desarrollado en gran medida gracias a la explotación del carbón, el petróleo y el gas natural. Rifkin, (2000) afirma que todos los avances de los últimos siglos sean de naturaleza comercial, política o social, se encuentran conectados de manera directa o indirecta con el aumento masivo de la energía generada por la quema de combustibles fósiles.

En el presente trabajo de tesis se realiza la caracterización de los equipos principales del ciclo de potencia para la generación de energía eléctrica, a nivel experimental, así como también la identificación y descripción del mecanismo de reacción del proceso de combustión, estableciendo los modelos cinéticos correspondientes. Posteriormente se seleccionan los métodos termodinámicos apropiados para el cálculo de propiedades fisicoquímicas (capacidad calorífica, calor de mezclado, composición, presión parcial) y de transporte (densidad, viscosidad, tensión superficial), requeridos en cada etapa del proceso

Esto permitió desarrollar la síntesis del proceso para la generación de electricidad, basado en simulación mediante ASPEN PLUS V8.8 en donde se realizaron análisis de sensibilidad para evaluar el efecto de las condiciones de operación en el rendimiento del proceso, y se determinó la viabilidad técnica del proceso basado en el cálculo del rendimiento energético resultante de la quema de hidrógeno comparado con el uso de combustibles convencionales (metano y propano) y sus mezclas (hidrógeno-metano e hidrogeno propano) con un contenido de hidrógeno el 20%, 30% y 80% para cada mezcla.



CAPÍTULO I : INTRODUCCIÓN

“El trabajo te da significado y propósito, y la vida está vacía sin ambos”.

Stephen Hawking

1.1 Introducción

El descubrimiento y evolución de una fuente de energía define el progreso de la población. La fuente principal de energía utilizada marca la época en la que se ha estado: el carbón en el siglo XIX, el petróleo en el siglo XX y parte del siglo XXI, son los ejemplos más recientes (Ricón, 2014); y aunque a finales del siglo XVIII, el hidrógeno encontró su primera aplicación práctica no es sino hasta ahora en donde la preocupación por el ambiente y la inquietud sobre el agotamiento de los combustibles fósiles ha otorgado un nuevo impulso al uso a gran escala del hidrógeno (Gutiérrez, 2005; Rifkin, 2000).deterioro

Hoy en día aproximadamente el 80% del consumo energético del mundo proviene de los combustibles fósiles y aunque estos presentan la mayor demanda en el consumo energético (Gonzales, 2009), son la energía renovable y la energía nuclear las que presentan el crecimiento más rápido del mundo. Uno de los principales usos de los combustibles es la producción de electricidad, en donde el carbón es su principal fuente de energía, sin embargo actualmente es reemplazado cada vez más por el gas natural, las energías renovables y la energía nuclear (en el caso de China) como se aprecia en la Figura I-1(Sistema de Información energética, 2017; U.S. Energy Information, 2018).

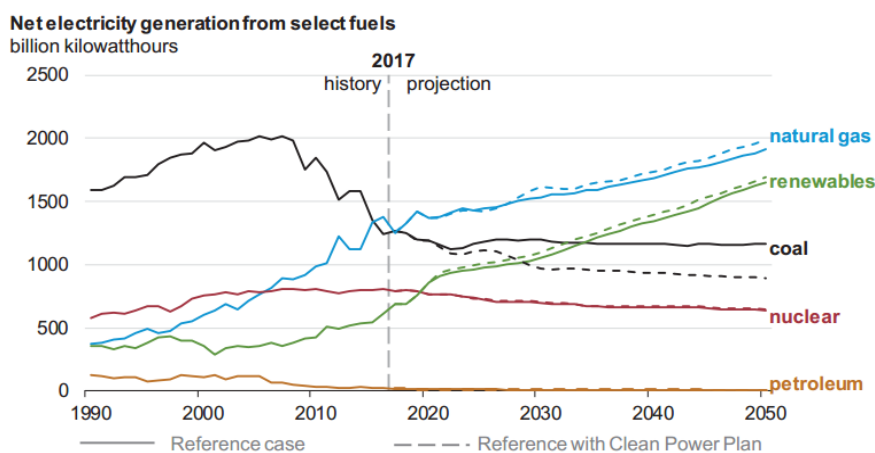


Figura I-1.-Esquema de la producción neta de electricidad por tipo de combustible (U.S. Energy Information, 2018).



Si bien se han generado nuevas fuentes de energía limpia, el desarrollo de tecnología con las cuales podemos aprovecharlas todavía es limitado aunado al hecho de que las fuentes renovables de energía son intrínsecamente intermitentes (Martínez, 1992) esto debido a la dinámica oscilatoria de la fuente de energía. Debido a esto, el consumo de combustibles fósiles sigue en aumento; en el 2015 se consumieron 95 millones de barriles por día (b/d), se prevé que para el 2040 sean 113 millones b/d. Así mismo, la IEO2017 (International Energy Outlook 2017) ha reportado que, el consumo de energía en los países que no pertenecen a la OCDE (Organization for Economic Cooperation and Development) aumentará un 41% entre 2015 y 2040, en contraste con un aumento del 9% en los países de la OCDE, indicando que no solo no disminuye el uso de combustibles fósiles como fuente primaria, sino que aumenta ligeramente con el paso del tiempo, por lo que es indispensable continuar con la evolución energética haciendo uso de nuevas fuentes de energía limpias y vectores energéticos sustentables como el hidrógeno (U.S. Energy Information Administration, 2017; Ulleberg, 2003).

En México, el porcentaje de energía eléctrica generada a partir de la combustión de combustibles fósiles es del 80% (SENER, 2009). Esto ocurre en la mayoría de los países a nivel mundial donde la combustión de combustibles fósiles, promueve las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI). Es por ello que en 1997 se estableció el Protocolo de Kioto con el fin mitigar los efectos del cambio climático reduciendo las cantidades de GEI liberadas en la atmósfera. En los últimos años se ha incrementado el interés de la investigación dirigida a la producción de energía verde utilizando recursos renovables por medios sostenibles (Hara, 2013; SEMARNAT; SPPA; DGPC, 2013; SENER, 2009; Venkata, et al., 2007; Davis, et al., 2007; Moon, et al., 2006). En nuestro país, dentro de las principales líneas de acción para reducir las emisiones de GEI se encuentran: (1) Promover el uso de combustibles no fósiles, (2) Promover la eficiencia energética y cogeneración de energía y (3) Impulsar la investigación, desarrollo y adecuación para México de tecnologías avanzadas de generación y uso de energía renovable



En México, la energía eléctrica se obtiene principalmente de centrales termoeléctricas, en donde el proceso Ciclo combinado (ciclos de potencia) es el mayormente empleado. La necesidad de optimizar estos procesos ha motivado a evaluar diferentes arreglos y/o combustibles, mediante análisis termodinámico y/o simulación de plantas de energía. En el presente trabajo se pretende realizar el análisis basado en simulación de sistemas convencionales de producción de electricidad con el objetivo de establecer las bases teóricas para el desarrollo y adaptación de un ciclo de potencia para la producción de energía eléctrica a partir de la combustión de hidrógeno.



1.2 Planteamiento del problema

En la actualidad existe una alta dependencia de los combustibles fósiles de los cuales se tienen contempladas cantidades finitas, siendo el sector energético uno de los principales consumidores de combustibles fósiles debido a la naturaleza de producción basada en la quema de combustibles en ciclos de turbina. Aunado a esto la explotación de combustibles fósiles para la producción de electricidad presenta serios problemas de insostenibilidad en el sector medioambiental.

Debido al aumento del índice poblacional dentro de las grandes ciudades, las necesidades energéticas se incrementan provocando a la par que los índices de contaminación causados por los GEI resultantes de la combustión de combustibles convencionales también se eleven. México es el país que más emisiones de CO₂ produce en América Latina según datos del Banco Mundial (2015) (Huesca & López, 2016) y cuya demanda energética sobrepasa la capacidad de su producción, afectando la viabilidad técnica y económica de los procesos actuales. Por ello es de vital importancia el estudio e implementación de nuevos vectores energéticos.



1.3 Justificación

El impulso a la implementación de nuevos vectores energéticos como el hidrógeno conlleva a múltiples beneficios, dentro de los que se destacan: (1) disminución de la emisión de GEI y (2) Contribución en la diversificación de los medios por los cuales es producida la energía eléctrica, trayendo consigo un impacto positivo en la seguridad de energía eléctrica de México. El gran atractivo del hidrógeno consiste en que a largo plazo ofrece la posibilidad de generar un escenario energético cerrado, relativamente limpio.

Cabe recalcar que nuestro principal soporte energético actual se basa en la quema de combustibles fósiles de las cuales estimaciones reportan reservas de: petróleo para 40 años, gas natural para 60 y las del carbón para 200 años (Linares, y otros, 2007). Por el cual, en el presente trabajo, se busca estudiar los factores que contribuyan a transformar la matriz de generación eléctrica, aumentando la participación de fuentes limpias y/o de tecnologías fósiles más eficientes.

1.4 Hipótesis

La adaptación de tecnología actual para la producción de electricidad a partir de la combustión de hidrógeno proveniente de la hidrólisis del agua es técnicamente viable; factores como cantidad y calidad de las fuentes de calor, acoplamiento de unidades de separación y/o acondicionamiento determinan la eficiencia energética. Por lo que su estudio basado en simulación permitirá establecer especificaciones de diseño para la adaptación de tecnologías actuales.



1.5 Objetivo general

Realizar la síntesis de proceso para la producción de electricidad, basada en el uso de ciclos de potencia, a partir de la combustión de hidrógeno.

1.5.1 Objetivos específicos

1. Caracterización de los sistemas para la generación de energía eléctrica a partir de la quema de combustibles convencionales.
2. Realizar la simulación en Aspen Plus del ciclo de potencia para la generación de energía eléctrica a partir del uso de combustibles convencionales, así como la selección del modelo cinético para el proceso de combustión.
3. Adaptación del ciclo de potencia convencional para la implementación de hidrógeno como combustible.
4. Determinar la viabilidad técnica del proceso basado en el cálculo del rendimiento energético resultante de la quema de hidrógeno comparado con el uso de combustibles convencionales.



CAPÍTULO II : ANTECEDENTES Y MARCO TEÓRICO

“Lo más importante no es el conocimiento, si no saber dónde encontrarlo.”

Samuel Johnson



2.1 Introducción

La electricidad se convirtió en un pilar de nuestra vida moderna ya que la humanidad necesita energía eléctrica para iluminación, calefacción, transporte, fabricación, construcción, entre muchas otras cosas, es decir, está relacionada con todo aquello que nos hace las cosas más prácticas (Electronics, 2003). La electricidad es la forma de energía más utilizada en todos los ámbitos de la sociedad y es importante puesto que, 1) es relativamente simple de convertir a (y desde) cualquier otra forma de energía y, 2) su traslado entre diferentes ubicaciones es relativamente sencillo (Gross , y otros, 2012), además una vez que la energía está en forma eléctrica podemos emplearla en sofisticados sistemas como aparatos eléctricos.

Existen 4 problemas básicos a la hora de diseñar un sistema de energía eléctrica: 1) Conversión de la energía a energía eléctrica (generación), 2) procesamiento es decir cambio de niveles de voltaje y/o corriente (transformación), 3) transporte de la energía a través de diferentes distancias (transmisión) y 4) conversión de la energía eléctrica en alguna forma útil (utilización) (CCA, 2011; Gross , y otros, 2012). La mayor parte de las emisiones de contaminantes atmosféricos de criterio (CAC) de este sistema se produce durante la etapa de generación (CCA, 2011).

El presente trabajo de tesis se enfoca en la primera problemática al diseñar un sistema de energía eléctrica es decir la generación, por lo que en este capítulo se abordaran temas relevantes que ayuden a tener una perspectiva global para comprender la importancia de este trabajo. Se revisará la forma en que la energía eléctrica es producida en México, así como los combustibles mayormente empleados para este fin y se analizaran las características termodinámicas involucradas en un ciclo de potencia.



2.2 Generación de energía eléctrica

La electricidad que usamos todos los días proviene de diferentes fuentes de energía primaria. Las “energías primarias” son las que se obtienen directamente de la naturaleza: solar, hidráulica, eólica, geotérmica, biomasa, petróleo, gas natural o carbón (Prieto, 2009). De todas las fuentes de energía que existen, únicamente cinco se emplean de forma masiva, que de acuerdo a su demanda son: petróleo, carbón, gas natural, nuclear de fisión y energía hidráulica. Juntas suman el 95% del consumo mundial (U.S. Energy Information Administration, 2017).

En la caracterización de tecnologías para la producción de electricidad, lo primero a considerar es la fuente de energía empleada: 1) Fuentes naturales de electricidad, cuyo potencial producido es pequeño y difícil de controlar, por ello no es considerada como una fuente importante de energía; 2) energía química, la cual es convertida a electricidad como ocurre en las baterías o celdas de combustible, 3) energía de rotación, en motores primarios no térmicos tales como los usados en la generación hidroeléctrica y los motores impulsados por la marea y el viento; motores térmicos primarios sin turbina, como en los generadores convencionales, y motores térmicos primarios con turbina, como las turbinas de vapor y de gas (CCA, 2011; Prieto, 2009; Gross , y otros, 2012).

En México la energía eléctrica es generada empleando tanto tecnologías convencionales como tecnologías limpias. La capacidad efectiva de generación de energía eléctrica a cargo de la CFE al 31 de diciembre de 2016 está constituida por 186 centrales generadoras de energía eléctrica (Reporte CFE, 2017) de las cuales la mayor cantidad de electricidad es obtenida a partir de las centrales termoeléctricas seguido de las hidroeléctricas, carboeléctricas, nucleoeléctricas, geotermoeléctricas, eólicas y fotovoltaicas como se muestra en la Figura II-1. Más aun, haciendo un análisis comparativo de la producción eléctrica generada en el transcurso del año 2017 por medio de las tecnologías más importantes en México (termoeléctricas e hidroeléctricas) tenemos que la

producción más alta de energía eléctrica proviene de las plantas termoeléctricas (Figura II-2) (Sistema de Información energética, 2017).

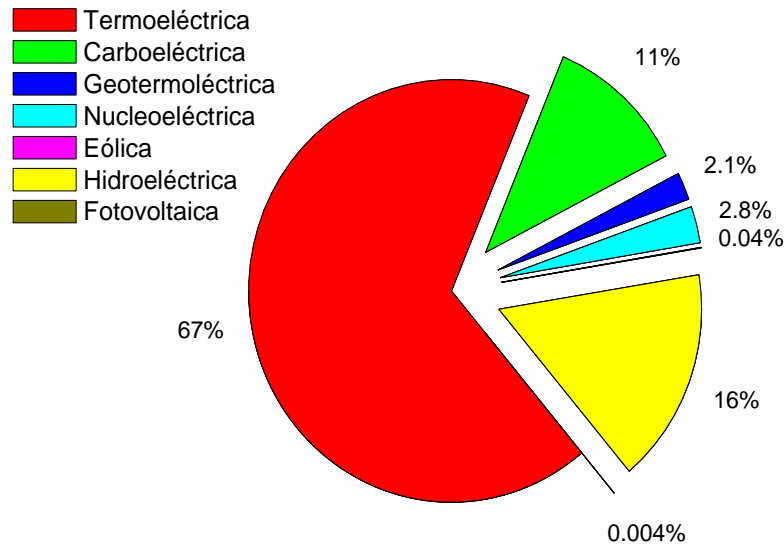


Figura II-1.- Generación bruta de energía eléctrica por tecnología al mes de septiembre de 2017 (Sistema de Información energética, 2017)

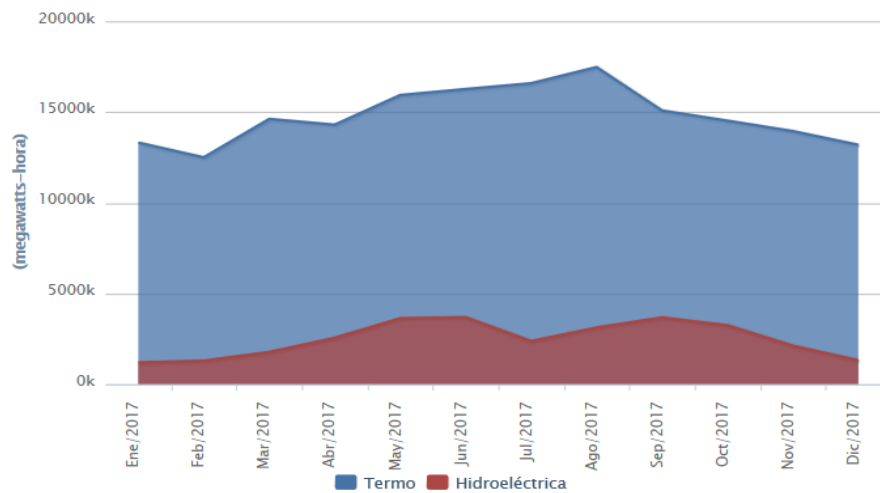


Figura II-2.-Producción de energía eléctrica proveniente de las plantas hidroeléctricas y termoeléctricas (Sistema de Información energética, 2017).

Como se puede apreciar en la Figura II-1, el 67 % de la energía eléctrica en México se obtiene mediante las tecnologías convencionales (termoeléctricas) las



cuales están compuestas por unidades y centrales que generan electricidad a partir del uso de combustibles fósiles (petróleo, carbón, gas natural entre otros) como energético primario, estas centrales suelen satisfacer la demanda base y para generar electricidad con combustibles fósiles estos han de quemarse en presencia del oxígeno contenido en el aire mediante un proceso de combustión.

La combustión es el proceso químico en el cual un material, llamado combustible (generalmente conformado por una mezcla de hidrocarburos y en algunos casos azufre y/u otros elementos), al interactuar con oxígeno del aire, se desprende una gran cantidad de luz y calor, arrojando como productos: CO , CO_2 , H_2O , SO_x (si el combustible contiene azufre) y NO_x (dependiendo de la temperatura y la cantidad de oxígeno en la reacción) (Rubio, y otros, 2013)

Este proceso de combustión permite liberar la energía contenida en los combustibles en forma de calor, lo que origina gases muy calientes. La energía liberada se puede usar de dos maneras: 1) en los motores de combustión interna, en donde los gases calientes producidos por la combustión se comprimen y luego se usan directamente para accionar el generador eléctrico, o bien; 2) en los motores de combustión externa, donde se utilizan los gases calientes provenientes de la combustión para calentar agua y producir así vapor a temperaturas y presiones elevadas, el vapor producido acciona entonces una turbina o unidad de generación para producir electricidad, (CCA, 2011).

La manera en que se aprovecha la energía liberada durante la combustión depende del tipo de tecnología empleada en la central termoeléctrica, en México las tecnologías más empleada es el ciclo combinado seguido del ciclo de vapor, turbogas y combustión interna tal como se describe en la Figura II-3, dichas tecnologías emplean máquinas o dispositivos (generalmente llamados máquinas térmicas) que generan una salida de trabajo, estas máquinas operan mediante ciclos termodinámicos llamados ciclos de potencia.

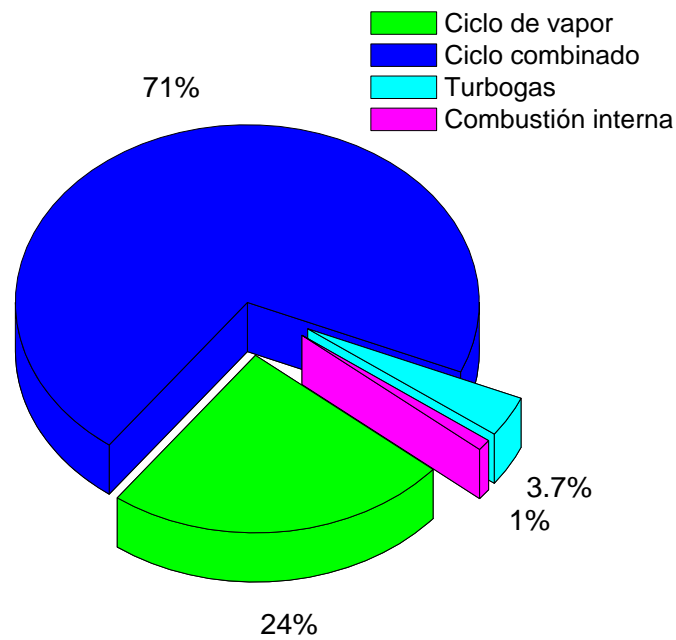


Figura II-3.- Generación de energía eléctrica por tipo de tecnología dentro de las centrales termoeléctricas (Sistema de Información energética, 2017)

2.3 Ciclos de potencias

Dentro de las áreas de aplicación de la termodinámica se encuentra la generación de potencia la cual se realiza mediante sistemas que operan en un ciclo termodinámico. Los ciclos térmicos pueden dividirse en dos categorías generales: los ciclos de refrigeración y los ciclos de potencia. Los ciclos de potencia son los ciclos termodinámicos en los que operan los dispositivos o sistemas que se usan para generar una salida neta de potencia, generalmente llamados motores o máquinas térmicas. Del mismo modo los ciclos termodinámicos también pueden dividirse dependiendo de la fase del flujo de trabajo, como ciclos de gas y ciclos de vapor. En los ciclos de gas el fluido de trabajo permanece en la fase gaseosa durante todo el ciclo, mientras que en los ciclos de vapor el fluido de trabajo permanece como vapor en una parte del ciclo y como líquido durante la otra. De acuerdo con la clasificación de sistemas estos pueden ser cerrados y abiertos. En los ciclos cerrados el fluido de trabajo vuelve a su estado inicial y se recircula, mientras que en los ciclos abiertos el fluido de



trabajo se renueva al final de cada ciclo en vez de recircularse (Smith, Van Ness, & Abbott, 2007; Cengel & Boles, 2015).

En México, para la producción de electricidad se emplean tecnologías descritas de manera ideal por modificaciones al ciclo de Carnot, que por sus características se pueden clasificar como: ciclo Rankine (ciclo de vapor), con combustóleo y carbón como combustibles, ciclo Brayton (ciclo de gas) con gas natural y diésel, y recientemente ciclos combinados (ciclo gas-vapor) de gas natural CCGN (Llamas, et al., 2004).

2.3.1 Ciclo de Carnot

Para que el estudio de un ciclo de potencia sea más fácil de realizar, es necesario mantener las complejidades de este a un nivel manejable por lo que se usan algunas idealizaciones. Es preciso primero considerar un prospecto de ciclo ideal para las centrales eléctricas de vapor y gas el cual se trata del ciclo de Carnot (Cengel, y otros, 2015).

El ciclo de Carnot fue descrito por primera vez por el ingeniero francés Nicolás Leonard Sadi Carnot en 1824 el cual es considerado como el más eficiente de los ciclos que operan entre dos límites especificados de temperatura (Cengel & Boles, 2015) y puede ser ejecutado en un sistema cerrado (un dispositivo de cilindro-émbolo) o en un sistema de flujo estacionario (usando dos turbinas y dos compresores) empleando gas o vapor como fluido de trabajo (Shavit, y otros, 2008).

Las idealizaciones y simplificaciones comúnmente empleadas en el análisis de los ciclos de potencia se pueden reducir del siguiente modo (Cengel, y otros, 2015):

1. Los efectos de fricción son despreciables, debido a que el fluido de trabajo no experimenta ninguna caída de presión cuando fluye en tuberías o dispositivos como intercambiadores de calor.



2. Las tuberías que conectan a los diferentes componentes en un ciclo de potencia se encuentran muy bien aislados por lo que la transferencia de calor a través de ellos es insignificante.

Las cuatro etapas que constituyen un ciclo de Carnot se desarrollan de la siguiente manera (Smith, y otros, 2007; Granet , y otros, 2015):

- Etapa 1: Un sistema con una temperatura inicial T_C se somete a un proceso adiabático reversible que origina que su temperatura aumente hasta un valor T_H .
- Etapa 2: El sistema se mantiene en contacto con el depósito caliente a T_H y se somete a un proceso isotérmico reversible, durante el cual se absorbe calor $|Q_H|$ desde el depósito caliente.
- Etapa 3: El sistema se somete a un proceso adiabático reversible con dirección contraria a la de la etapa 1, que conduce a su temperatura de regreso T_C .
- Etapa 4: El sistema se mantiene en contacto con el depósito a T_C y se somete a un proceso isotérmico reversible en dirección opuesta a la etapa 2 que lo regresa a su estado inicial con disipación de calor $|Q_C|$ hacia el depósito frío.

El orden de estas etapas están descritas en un diagrama T-S como se muestra en la Figura II-4 para un ciclo de vapor.

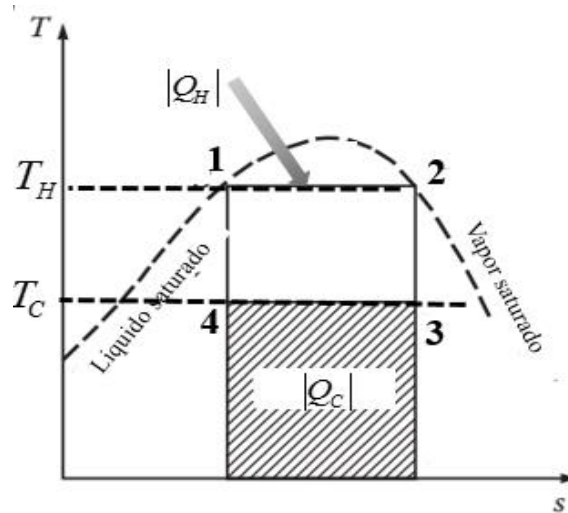


Figura II-4.- Esquema de ciclo de Carnot para un ciclo de vapor (Granet , y otros, 2015).

Para un gas sin condensación, los pasos del ciclo se describen en coordenadas de presión y volumen como se observa en la Figura II-5.

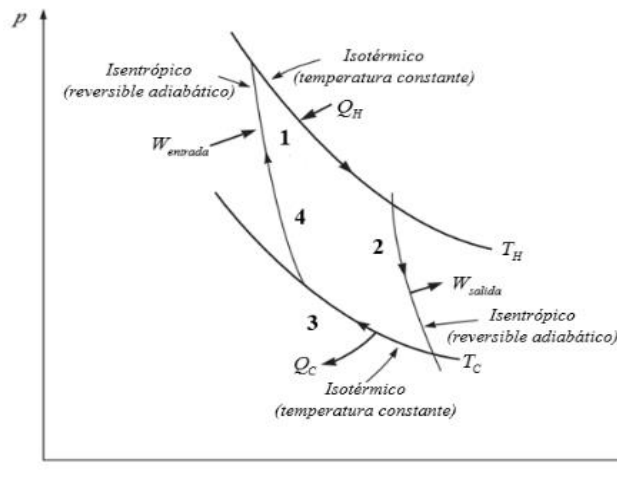


Figura II-5.- Ciclo de Carnot respecto a P-V para un gas no condensable (Granet , y otros, 2015).

El cambio en la energía total durante un proceso es la suma de los cambios en su energía interna, cinética y potencial la cual se expresa de la siguiente manera (Smith, y otros, 2007):

$$\Delta U + E_C + E_P = Q \pm W$$

Ec. II-1



Los cambios en las energías cinéticas y potencial del fluido de trabajo son comúnmente despreciables en el análisis del ciclo de potencia ya que en los dispositivos que desarrollan un trabajo de eje (turbinas, compresores y bombas) la magnitud numérica de la energía potencial y cinética es usualmente pequeña respecto a otros términos de la ecuación de energía (Ec. II-1). Asimismo, las velocidades del fluido encontradas en dispositivos como condensadores, calderas y cámaras de mezclado por lo general son bajas además los fluidos de trabajo experimentan poco cambio en su velocidad, a consecuencia de esto los cambios en la energía cinética también son despreciables por lo que la expresión puede reducirse como sigue (Cengel, y otros, 2015).

$$\Delta U = Q \pm W \quad \text{Ec. II-2}$$

Durante el funcionamiento, el fluido de trabajo de una máquina térmica absorbe calor desde un depósito caliente, produce una cantidad neta de trabajo desprendiendo calor hacia un depósito frío y regresa a su estado inicial. Por lo tanto, la primera ley de la termodinámica (Ec. II-2) se puede expresar como (Smith, y otros, 2007).

$$|W| = |Q_H| - |Q_C| \quad \text{Ec. II-3}$$

El desempeño de una máquina térmica se expresa en términos de la eficiencia térmica que es la relación entre el trabajo neto producido por la máquina y la entrada de calor total como sigue (Cengel, y otros, 2015; Smith, y otros, 2007):

$$\eta \equiv \frac{|W|}{|Q_H|} = \frac{|Q_H| - |Q_C|}{|Q_H|} = 1 - \frac{|Q_C|}{|Q_H|} \quad \text{Ec. II-4}$$

Aunque bien es cierto que el ciclo de Carnot es un concepto teórico del funcionamiento de una máquina térmica, esta no tiene aplicaciones mecánicas si no que su importancia radica en que es el estándar contra el cual puede compararse ciclos reales o ideales ya que el trabajo neto obtenido por este ciclo será el trabajo máximo que un proceso basado en ciclo de potencia puede



generar al igual que la eficiencia en la que operan entre los mismos niveles de temperatura.

2.3.2 Ciclos de potencia de turbinas de vapor

La mayor parte de los ciclos que se encuentran en casos de generación de eléctrica reales difieren significativamente del ciclo de Carnot ya que este ciclo idealizado no es un modelo apropiado para los ciclos de potencia.

El ciclo de Carnot presenta serias dificultades para realizar las etapas 2-3 y 4-1 descritas en la Figura II-4. Como se observa las turbinas que reciben vapor saturado producen una mezcla con un alto contenido de agua la cual causa severos problemas de desgaste en los alabes de la turbina y en la turbina en general, del mismo modo es complicado diseñar una bomba que reciba una mezcla de líquido y vapor y descargue un líquido saturado (etapa 4-1), por lo que es conveniente modificar el ciclo de Carnot y proponer un ciclo alternativo para las plantas de energía que queman combustible fósil (Cengel, y otros, 2015; Smith, y otros, 2007).

Dicho ciclo alternativo resultante es el ciclo de Rankine propuesto por ingeniero y físico Escocés William John Macquorn Rankine, el cual es el ciclo ideal para las centrales eléctricas de vapor. El ciclo Rankine difiere del ciclo de Carnot en dos aspectos al ciclo de la Figura II-4 (Smith, y otros, 2007):

- La etapa de calentamiento (etapa 1-2) es llevada más allá de la vaporización para poder producir vapor sobrecalentado.
- La etapa de enfriamiento (etapa 3-4) origina una condensación completa produciendo líquido saturado para que este se pueda bombear a la caldera.

Estas consideraciones se observan en la Figura II-6.

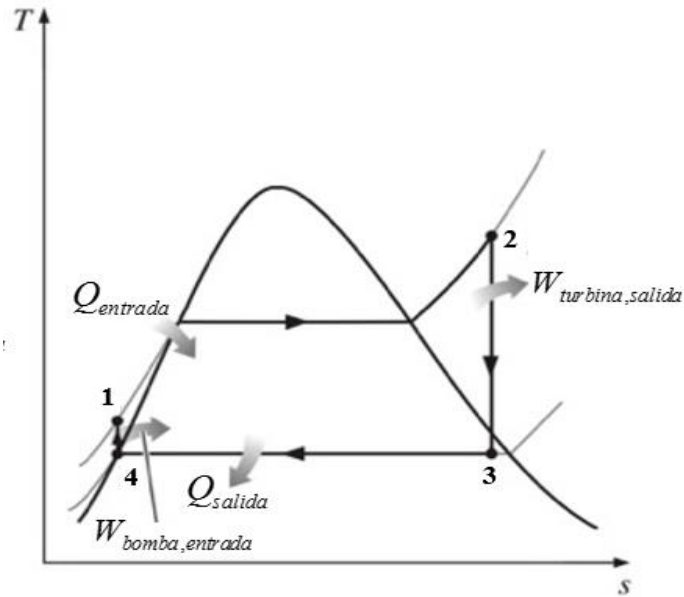


Figura II-6.-Ciclo de potencia Rankine simple (Cengel, y otros, 2015).

Las plantas de energía se pueden diseñar a partir del ciclo idealizado Rankine introduciendo adaptaciones al modelo debido a irreversibilidades de la producción de trabajo real o de las etapas que lo requieran.

1.3.2.1 Caracterización del ciclo Rankine

El ciclo Rankine ideal no incluye ninguna irreversibilidad interna y está compuesto por las siguientes 4 etapas ilustradas por la Figura II-7 (Cengel, y otros, 2015):

1-2 Compresión isentrópica en una bomba.

2-3 Adición de calor a presión constante mediante una caldera

3-4 Expansión isentrópica en una turbina.

4-1 Retiro de calor a presión constante mediante un condensador

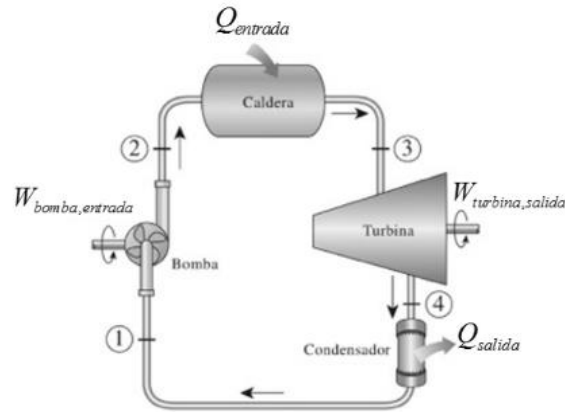


Figura II-7. Diagrama simplificado de una planta de energía de vapor (Cengel,

Los 4 componentes asociados con el ciclo Rankine (bomba, caldera, turbina y condensador) son dispositivos de flujo estacionario por lo que las 4 etapas que conforman el ciclo pueden ser estudiadas de la misma manera. De la ecuación de energía de flujo estacionario (Ec. II-1) por unidad de masa de vapor se establece a (Cengel, y otros, 2015):

$$(Q_{entrada} - Q_{salida}) + (W_{entrada} - W_{salida}) = H_s - H_e \quad \text{Ec. II-5}$$

La caldera y el condensador no contempla ningún trabajo y se supone que la bomba y la turbina son isentrópicos por lo que la relación de la conservación de la energía para cada equipo (Figura II-7) puede expresarse como (Cengel, y otros, 2015; Granet , y otros, 2015):

Bomba ($Q = 0$):

$$W_{bomba} = H_{salida} - H_{entrada} \quad \text{Ec. II-6}$$

$$W_{bomaba} = v(P_{salida} - P_{entrada}) \quad \text{Ec. II-7}$$

Caldera ($W = 0$):

$$Q_{entrada} = H_{salida} - H_{entrada} \quad \text{Ec. II-8}$$

Turbina ($Q = 0$):

$$W_{turbina} = H_{entrada} - H_{salida} \quad Ec. II-9$$

La eficiencia térmica del ciclo Rankine se determina a partir de:

$$\eta_{tér} = \frac{W_{neto}}{Q_{entrada}} = \frac{W_{turbina} - W_{bomba}}{Q_{entrada}} = 1 - \frac{Q_{salida}}{Q_{entrada}} \quad Ec. II-10$$

Regularmente las plantas basadas en un ciclo de vapor reportan una mayor eficiencia térmica y la energía de retroceso (energía producida por la turbina que se destina para alimentar a la bomba y/o compresor) es menor que las plantas basadas en turbinas de gas, sin embargo, tienen un mayor tamaño físico. En la actualidad las temperaturas del vapor permisibles en las turbinas de vapor van de 500°C a 620°C y cualquier incremento de este valor está fuertemente ligado al desarrollo de nuevos materiales que soporten temperaturas muy altas cerámicos (Cengel, y otros, 2015; Dick , 2015; Martínez, 1992).

2.3.3 Ciclo de potencia de turbinas de gas

El ciclo de potencia para una turbina de gas es descrito idealmente por el ciclo Brayton propuesto por primera vez por George Brayton alrededor de 1870. Las etapas del ciclo Brayton son similares a las de ciclo Rankine y su comportamiento se puede mostrar en un diagrama P-V o T-S (Figura II-8). Se diferencia del ciclo Rankine en que el fluido de trabajo permanece en fase gaseosa durante todo el ciclo, aunado al hecho de que la adición de calor ocurre dentro de las fronteras del mismo sistema, es decir, una turbina de gas es impulsada directamente por el gas a alta temperatura proveniente de la cámara de combustión.

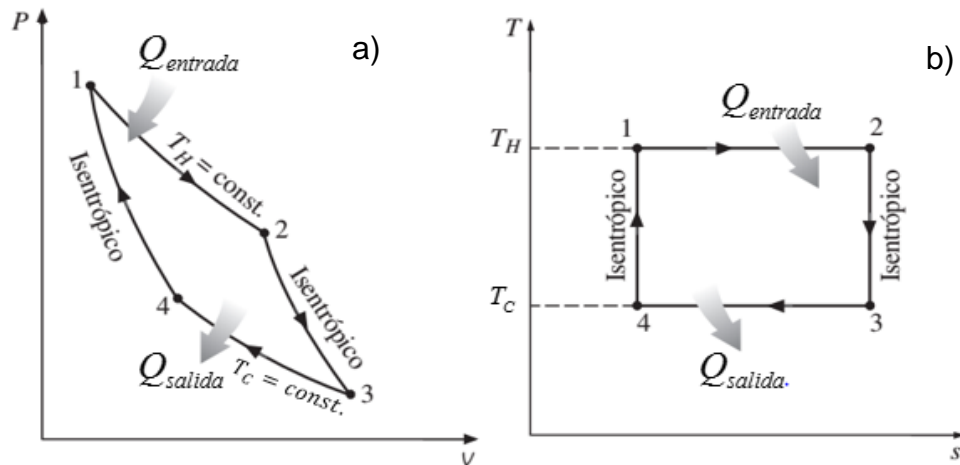


Figura II-8.-Diagrama de ciclo Brayton ideal a) P-V, b) T-S.

Las turbinas de gas generalmente operan en un ciclo abierto (Figura II-9), se introduce aire fresco en condiciones ambiente a un compresor en donde tanto la presión como la temperatura son elevados. El aire de alta presión continua hacia una cámara de combustión donde el combustible es oxidado a presión constante. Los gases de alta temperatura resultantes de la combustión entran a una turbina donde se expanden hasta la presión atmosférica produciendo de esta manera potencia (Cengel, y otros, 2015).

Este ciclo abierto puede modelarse como un ciclo cerrado, las etapas de compresión y expansión permanecen igual pero el proceso de combustión es sustituido por uno de adición de calor a presión constante desde una fuente externa mientras que el proceso de escape es sustituido por otro de rechazo de calor a presión constante (Cengel, y otros, 2015; Smith, y otros, 2007).

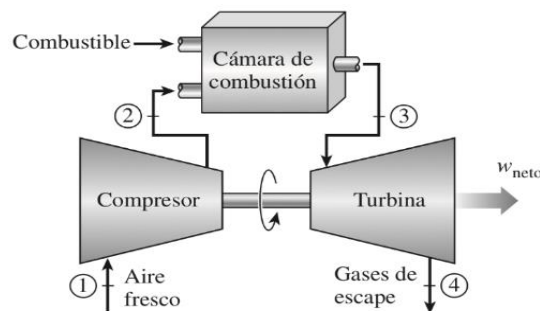


Figura II-9.-Motor de turbina de gas de ciclo abierto (Cengel, y otros, 2015).

1.3.3.1 Caracterización del ciclo Brayton.

Dentro de los equipos principales que componen el ciclo Brayton se encuentran: compresor, turbina y cámara de combustión (Figura II-9). Estos equipos se describen matemáticamente como sigue (Smith, y otros, 2007):

Compresor ($Q = 0$):

$$W_{(compresor)} = \frac{C_p(T_2 - T_1)}{\eta_c} \quad \text{Ec. II-11}$$

Cámara de combustión ($W = 0$):

$$Q = C_p(T_3 - T_2) \quad \text{Ec. II-12}$$

Turbina ($Q = 0$):

$$W_{(turbina)} = \eta_t C_p(T_3 - T_4) \quad \text{Ec. II-13}$$

Donde η_c y η_t son las eficiencias termodinámicas del compresor y turbina respectivamente. La eficiencia termodinámica del ciclo Brayton se calcula de la siguiente manera:

$$\eta_{th} = \frac{W_{turbina} - W_{compresor}}{Q_{entrada}} \quad \text{Ec. II-14}$$

Combinando las ecuaciones Ec. II-11, Ec. II-12 y Ec. II-13 es posible reescribir la Ec. II-14 como sigue:

$$\eta_{th} = \frac{\eta_t \eta_c (T_3/T_1)(1 - 1/\alpha) - (\alpha - 1)}{\eta_c (T_3/T_1 - 1) - (\alpha - 1)} \quad \text{Ec. II-15}$$

Donde:

$$\alpha = \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \quad \text{Ec. II-16}$$



En esta expresión P_1 y P_2 son la presión a la entrada y salida del compresor respectivamente, mientras que $\gamma = C_p/C_v$. En las turbinas de gas el aire alimentado en la admisión tiene dos principales funciones: 1) Suministrar el oxidante necesario para lograr la combustión completa del combustible y 2) Servir como refrigerante para mantener una temperatura adecuada de los diversos componentes en los equipos (P. Boyce, y otros, 2005).

Para la generación de energía eléctrica las turbinas de gas se usan como unidades independientes o en conjunto con centrales eléctricas de vapor. En la actualidad gracias al gran avance en el desarrollo de materiales se han podido alcanzar temperaturas iguales o mayores a 1,426 °C a la entrada de la turbina (Cengel, y otros, 2015; P. Boyce, y otros, 2005).

2.3.4 Ciclo de potencia combinado

Debido a los progresivos esfuerzos por aumentar la eficiencia de los ciclos individuales discutidos anteriormente se han desarrollado modificaciones importantes que proponen la implementación de un ciclo de potencia de gas (Brayton) como primera etapa que completa a un ciclo de potencia de vapor (Rankine) como segunda etapa, a esto se le llama ciclo combinado de gas y vapor o solo ciclo combinado.

Generalmente los ciclos se pueden clasificar como ciclos “topping” y “bottoming”. El ciclo de topping hace referencia a la primera etapa del ciclo combinado en la cual se produce la mayor cantidad de carga térmica, el calor residual que se produce posteriormente se utiliza en una segunda etapa que opera a un menor nivel de temperatura y a esta parte del ciclo se le denomina bottoming (Kehlhofer, y otros, 1997). Las características del ciclo combinado junto con su diagrama T-S se ilustran en la Figura II-10.

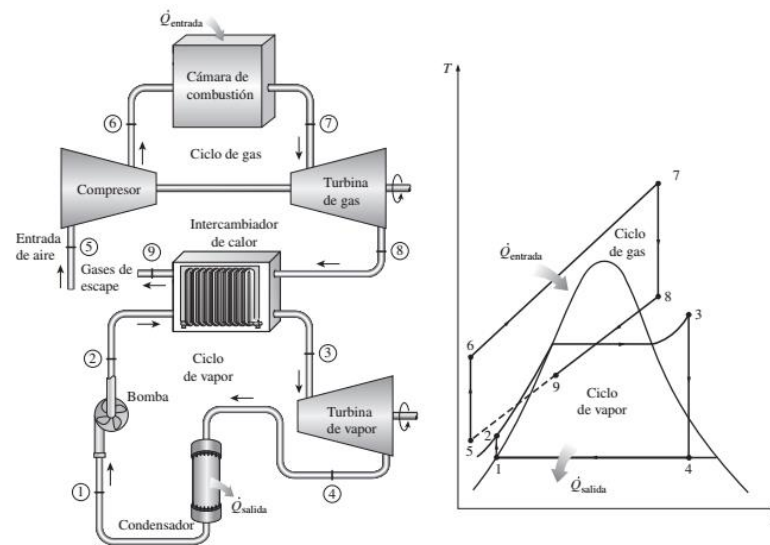


Figura II-10.- Esquema del ciclo combinado de gas y vapor (Cengel & Boles, 2015)

Para aumentar la eficiencia termodinámica de cualquiera de estos ciclos es necesario reducir las pérdidas de energía a lo largo del proceso y esto se puede lograr al aumentar la temperatura máxima en el ciclo o bien liberando el calor residual a la temperatura más baja posible. El interés por los ciclos combinados surge de estas dos consideraciones ya que por su naturaleza ningún ciclo puede hacer ambas mejoras de forma individual por lo que al combinar ambos ciclos se obtiene uno con altas temperaturas del proceso y el otro con temperaturas residuales bajas.

2.4 Combustión y combustibles.

Una reacción química mediante la cual se oxida un combustible liberando una gran cantidad de energía, recibe el nombre de combustión; esta oxidación es lograda a través de un número sustancial de reacciones que describen la colisión entre moléculas, este conjunto de reacciones elementales con sus correspondientes parámetros cinéticos definen un mecanismo de combustión (Mendoza Orbegoso, y otros, 2011). Los combustibles convencionales se



encuentran formados principalmente de hidrógeno y carbono los cuales reciben el nombre de hidrocarburos, siendo estos los más conocidos. Estos pueden existir en todas las fases denotándose por la formula general C_aH_b (Cengel, y otros, 2015).

Entre los tipos de combustibles de uso común en las centrales eléctricas de América del Norte se encuentran el carbón, el combustóleo, y el gas natural junto “con otros combustibles”, como el gas licuado de petróleo (gas LP), el diésel y el coque. En la Tabla II-1 se presentan los combustibles de uso más común por tipo de central eléctrica. Cada país usa estos combustibles de forma variada dependiendo de factores como su disponibilidad y la infraestructura para la generación eléctrica (CCA, 2011).

Tabla II-1.-Combustibles típicamente usados por tipo de central eléctrica en América del Norte

Tipo de central	Combustible
Vapor	Combustóleo-carbón-gas natural
Ciclo combinado	Gas natural
Turbina	Gas natural-diésel
Dual	Carbón-combustóleo
Combustión interna	Diésel
Nuclear	Uranio

El gas natural (combustible hidrocarburo gaseoso) se obtiene de rocas porosas en el interior de la corteza terrestre, es extraído de pozos de gas o pozos de petróleo ricos en este gas, está conformado principalmente de metano (CH_4) pero contiene también pequeñas cantidades de propano, etano, hidrógeno, helio, dióxido de carbono, nitrógeno, sulfato de hidrogeno y vapor de agua. Por otro lado, el gas licuado de petróleo (LPG, por sus siglas en inglés) es un subproducto del procesamiento de gas natural y consiste principalmente en propano (C_3H_8)



(Cengel, y otros, 2015). Ya que estos hidrocarburos gaseosos se conforman de una mezcla de diferentes hidrocarburos por simplicidad suelen considerarse como un solo hidrocarburo como por ejemplo metano y propano para gas natural y gas licuado de petróleo respectivamente. Por esta razón en este trabajo de tesis se realiza una comparación de la eficiencia energética de la producción de energía eléctrica a partir de hidrogeno en comparación al obtenido a partir de metano y propano.

Las propiedades más significativas de los combustibles son: la composición y contenido de impurezas, el poder calorífico, la densidad, viscosidad y el coeficiente de dilatación, la entalpia de vaporización, la presión de vapor, los límites de ignición y la toxicidad (Martínez, 1992). Algunas de las parámetros termodinámicos más relevantes así como parámetros del proceso de combustión de los combustibles hidrógeno, metano y propano se enlistan en las Tabla II-2 y Tabla II-3 respectivamente.

Tabla II-2.-Parámetros termodinámicos de los combustibles.

Parámetro	Hidrógeno, H_2	Metano, CH_4	Propano, C_3H_8
Peso molecular (Kg/Kmol)	2.016	16.04	44.10
Poder calorífico inferior, LHV (MJ/kg)	120	50	46.4
*Cp, gas (KJ/Kg-K)	14.2779	2.2301	1.6832
*Densidad del gas, (Kg/m³)	0.0824	0.6572	1.8332
*Presión de vapor (MPa):	1442.4240	36.6657	0.8516
Coeficiente de difusión (cm²/s)	0.61	0.16	0.10

*Aspen Plus V8.8 a NTP

CAPITULO I: ANTECEDENTES Y MARCO TEÓRICO



Tabla II-3.- Parámetros del proceso de combustión (E. Gelfand , y otros, 2012; Sluka, 2008).

Parámetro	Hidrógeno, H_2	Metano, CH_4	Propano, C_3H_8
Límites de concentración de combustión.	4-75 vol. %	5-15 vol. %	1.8-9.3 vol. %
Composición estequiométrica en aire, vol. %	29.53	9.48	23.86
Energía mínima de ignición, KJ	≈ 20	≈ 290	≈ 305
Temperatura de la flama en aire, K	≈ 2,300	≈ 2,150	≈ 2253
Temperatura de ignición, K	≈ 750	≈ 810	≈ 708.15
Velocidad normal de la flama, cm/s	≈ 265-325	≈ 37-545	≈ 43-52

Para que un proceso de combustión se desarrolle de manera estable y completa se deben satisfacer tres condiciones dentro de la cámara de combustión, las cuales determinan la eficiencia de la combustión:

- Adecuada proporción entre el combustible y oxidante.
- Llevarse a cabo la mezcla de combustible y oxidante, de modo que una mezcla uniforme esté presente en la zona de combustión.
- Establecer y monitorear la temperatura de ignición de modo que el combustible continúe su ignición sin calor externo cuando la combustión de inicio.



2.4.1 Combustión de combustibles en fase gas.

La combustión de gases se desarrolla de dos maneras que dependen de la forma en la que se combinan el combustible y el oxidante. Cuando dicha mezcla se origina antes de la ignición la combustión se lleva a cabo mediante hidroxilación formada por los hidrocarburos y el oxígeno que posteriormente se convierten en aldehídos; estos aldehídos son descompuestos en H_2 , CO , CO_2 y H_2O . Conforme el carbono se convierte en aldehído no se podrá formar hollín ni siquiera cuando se extinga la llama por lo que se generan menos contaminantes (Perry, y otros, 2001). Más aun en las llamas originadas de gases premezclados la cinética química es el mecanismo dominante, la combustión es más intensa al igual que la eficiente es decir se obtiene más potencia térmica, también el color de la llama suele ser azulado y la velocidad de la llama varía mucho con la composición. Por otro lado, en las llamas de difusión el oxígeno es agregado a los hidrocarburos después de que se calientan descomponiéndose en hidrógeno y carbono que cuando se combinan con cantidades suficientes de oxígeno forman CO_2 y H_2O . En este tipo de llamas la difusión de especies es el mecanismo dominante, el rango de velocidades en que puede arder es más amplio, son de un color amarillento, al ser una combustión deficiente se forma más hollín, son mucho más voluminosas para una misma potencia térmica y son más seguras puesto que no se forma una pre-mezcla reactiva hasta la salida del inyector (Perry, y otros, 2001; Martínez, 1992). En la Figura II-11 se esquematiza las características de la llama con y sin pre-mezclado donde V_q es la velocidad normal de quemado y v_1 , v_2 , v_3 es el perfil de velocidades.

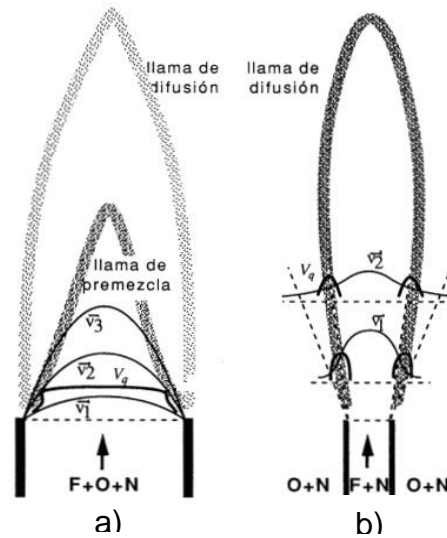


Figura II-11.- Características de la llama en el borde de un mechero a) caso de pre-mezcla, b) caso de difusión.

El oxidante que se utiliza con mayor frecuencia en los procesos de combustión es el aire ya que es gratuito y fácil de conseguir, por otra parte, el O_2 puro solo se emplea como oxidante en algunas aplicaciones especializadas donde no es factible utilizar aire. Tanto en base molar como volumétrica el aire seco está compuesto por 20.9 % de oxígeno, 78.1% de nitrógeno, 0.9% argón y pequeñas cantidades de dióxido de carbono, helio, neón e hidrogeno, no obstante en los análisis de los procesos de combustión el argón en el aire es considerado como nitrógeno y los gases que existen en cantidades muy pequeñas se descartan por lo que generalmente se considera al aire seco como aproximadamente 21% de oxígeno y 79% de nitrógeno en números molares (Cengel, y otros, 2015)

La combustión de los gases se lleva a cabo mediante quemadores de gas (Figura II-12) de los cuales existe una gran variedad (tubular, anular, atmosféricos, automáticos entre otros) no obstante un quemador de gas es principalmente un dispositivo proporcionador y mezclador, aunque también es un aparato para generar y estabilizar una llama de forma controlable y segura que además debe desempeñar las siguientes funciones (Martínez, 1992):

- Suministrador: Debe aportar los reactantes a la velocidad que se van quemando.

- Mezclador: Debe mezclar combustible y oxidante dentro de los límites de ignición.
- Encendedor: Debe suministrar la energía de ignición para llevar a cabo la reacción.
- Estabilizador: Debe anclar la llama en una posición estable.

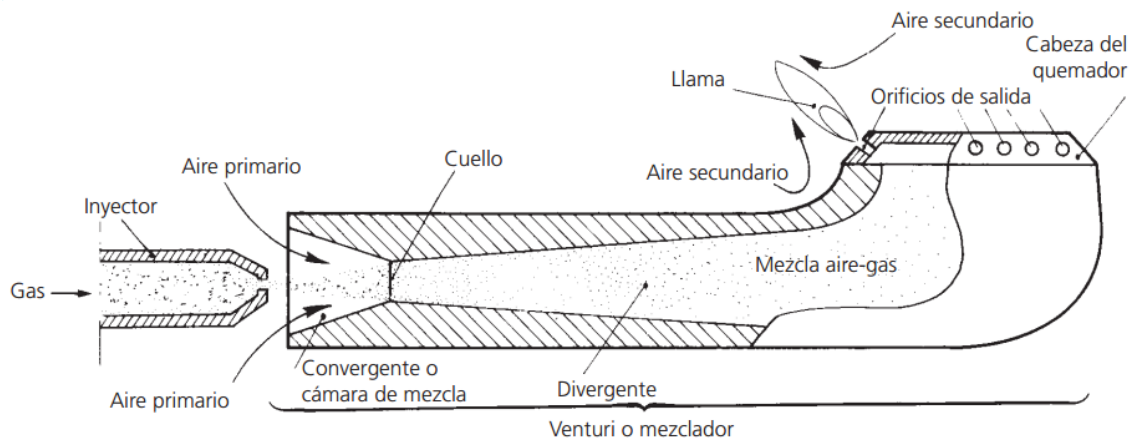


Figura II-12.- Elementos que componen a un quemador de gas (Hernández Martín , 2008)

2.4.2 Combustión catalítica

Debido a los esfuerzos por aumentar la eficiencia de los ciclos de potencia a través del aumento de temperatura a la cual salen los gases de combustión y a la disponibilidad de oxígeno y nitrógeno dentro de la cámara de combustión, trae consigo un efecto indeseable, la formación de emisiones de NO_x . Para contrarrestar este efecto se han desarrollado tecnologías para el control de la combustión y pos-combustión en las que destacan los combustores catalíticos (Tibaquirá G., y otros, 2003).

La combustión catalítica puede dividirse en combustión primaria y secundaria, las turbinas de gas pertenecen a la primera categoría cuyo objetivo principal es producir calor limitando la formación de contaminantes para el medio ambiente. En esta técnica se utiliza un catalizador el cual es colocado en la cámara de combustión donde el combustible es oxidado en la superficie del catalizador. La



unidad catalítica en la cámara de combustión consta de un sustrato (estructura del soporte), un revestimiento delgado (washcoat) y un componente activo. El sustrato provee fuerza mecánica mientras que el washcoat ofrece una alta área superficial (típicamente un óxido metálico con una alta área superficial como Al_2O_3 , ZrO_2 o SiO_2) para la deposición del componente activo o catalizador. El sustrato adecuado para su implementación en turbinas de gas es el monolito o estructura de panal el cual combina una alta relación de superficie a volumen con una baja caída de presión y el material de construcción para estos soportes pueden ser cerámicos y metálicos puesto que se requiere que tengan un alto punto de fusión, baja expansión térmica, resistencia a los choques térmicos y por supuesto debe ser químicamente inerte hacia otros componentes del catalizador (Eriksson, 2006; Ahlström-Silversand, y otros, 1997; Zwinkels , y otros, 1993; Pfefferle, y otros, 1987), en la Figura II-13 se muestra las partes de un combustor catalítico de una turbina de gas.

En la actualidad son ampliamente utilizados metales preciosos como platino (Pt) y paladio (Pd) como catalizadores efectivos para la combustión del gas natural siendo actualmente el Pd el que tiene el precio mínimo entre los metales preciosos, lo cual enfatiza la elección de Pd como un catalizador adecuado de combustión, sin embargo, para incrementar su actividad suele combinarse con otros metales diferentes (Pt, Rh, Au). La adición de Pt a un catalizador de Pd aumenta la actividad para la combustión de hidrocarburos y monóxido de carbono (Ahlström-Silversand, y otros, 1997; Zwinkels , y otros, 1993), además el Pt también es utilizado actualmente en los convertidores catalíticos para automóviles.

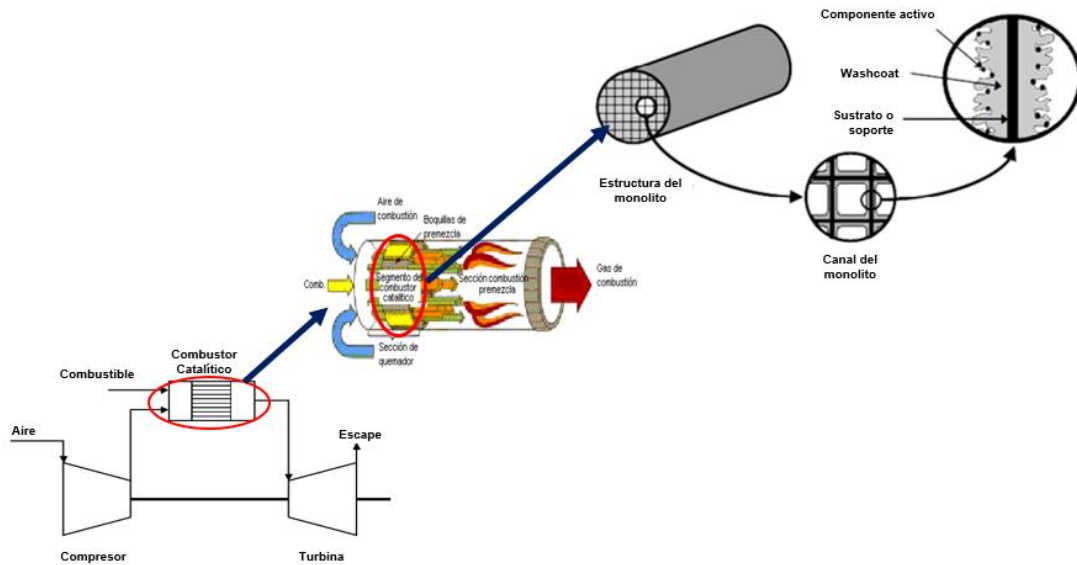


Figura II-13.-Esquema de una turbina de gas utilizando una cámara de combustión catalítica.

2.5 Trabajos sobre ciclos de potencia

En la actualidad existe una amplia variedad de trabajos reportados donde se llevan a cabo diversos estudios encaminados entre otras cosas a la optimización, el aumento en la eficiencia he incluso a la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) en procesos basados en ciclos de potencia para la generación de energía eléctrica. Esta investigación es abordada principalmente de dos formas: 1) mediante trabajos basados en simulación y 2) mediante trabajos experimentales.

2.5.1 Simulación de procesos para la generación de potencia

Dentro de los diversos estudios que han realizado el análisis basado en simulación de plantas de ciclos de potencia, algunos de sus principales objetivos contemplan la evaluación de la eficiencia térmica de diferentes arreglos empleando como principal fuente energética el carbón, en donde factores como la temperatura del agua de entrada en el generador de vapor fueron observados



al igual que la variación de la presión en la cámara de combustión (Ravindra Kumar, RAmachandra, & Ravi Kumar, 2016; Hong, Chaudhry, Brisson, Field, & Gazzino, 2009), así como también condiciones de operación de los componentes de la planta de energía, tamaño de la instalación, composición en las alimentaciones frescas y potencia de salida (AbdAllah Mokhtar.Mb, Tawfiag Ahmed, eldin, & Abdalrahimb, 2016; Souman Rudra, Rosendahl, Sadahat Sayem, & Ashekuzzaman, 2010).

A su vez también se ha analizado las variaciones de generación eléctrica junto con el rendimiento térmico al utilizar diferentes fluidos de trabajo (tales como refrigerantes) dentro del ciclo de potencia (Rowshanaie, Mustapha, & Ahmand, 2015), incluso autores como Zhuang, Geddis, Runstedtler, & Clements (2017) proponen el empleo de gas natural descarburado como combustible en un ciclo de potencia donde se analiza la eficiencia energética alcanzada. Más aun Kumar Khaitan & Raju (2011) estudiarón la dinámica de una central eléctrica desarrollando modelos basados en Simulink para cada uno de los componentes individuales que intervienen en el ciclo de potencia (compresor, combustor, turbina). Estos mismos autores consideraron el uso de gas natural como combustible aproximando el comportamiento de un combustor a las características que presenta un reactor de tanque completamente agitado (CSTR), el cual está definido como un reactor de estado estable en el que el flujo másico de entrada y salida son iguales, también se supone que el fluido entrante al reactor se mezcla al instante y la composición de la corriente de salida es igual que en cualquier punto dentro del reactor (Fogler, 2008; Levenspiel, 2004).

Así mismo, el análisis de tecnología emergente como ciclos basados en el uso de energía solar se han estudiados basado en simulación en donde factores como área de contacto, flujo de energía solar y propiedades de fluidos de trabajo son evaluados en relación a la eficiencia energética (Suresh, et al., 2015). Del mismo modo también se han empleado datos meteorológicos de lugares específicos para determinar el calor disponible en el colector solar que podría ser utilizado dentro de un ciclo Rankine y se analiza le eficiencia de la turbina que puede alcanzar (Spayde , y otros, 2017). Incluso autores como Khalid, Aydin,



Dincer, & Rosen (2016) realizaron una comparación de dos sistemas integrados por energía de hidrógeno. Estos sistemas usan un arreglo fotovoltaico y turbinas de viento para suministrar la energía eléctrica necesaria para alimentar una vivienda, la energía excedente es utilizada en un electrolizador para separar agua en hidrogeno y oxigeno posteriormente estas corrientes son dirigidas hacia una cámara de combustión o bien a una celda de combustible y se analiza la eficiencia, la potencia y las pérdidas de exergía para cada sistema junto con un análisis económico.

2.5.2 Estudios experimentales para la generación de potencia.

De manera experimental se han estudiado diversos sistemas basados en motores de vehículos sustituyendo la gasolina por mezclas de hidrógeno y gas natural. Estudios realizados en motores de un solo cilindro, encendido por chispa, utilizando mezclas de hidrógeno en metano que van de 0% a 60% volumen a diferentes velocidades (rpm) muestran el efecto de la relación aire-combustible en la potencia generada en el motor, la eficiencia térmica alcanzada y las emisiones de CO_2 , CO , NO_x por kWh producidos (Karim, Wierzba, & Al-Alousi, 1996; Sierens).

Incluso se han utilizado mezclas de hidrógeno y biogás a diferentes relaciones equivalentes donde se estudian los efectos en las emisiones, la potencia, la temperatura, presión en la cámara de combustión y la eficiencia térmica del proceso (Porpatham, Ramesh, & Nagalingam, 2007; Gómez, Montoya, Cagua, Madero, Iral, Galeano, & Amell, Arrieta, 2013).

Por otra parte, se han desarrollado modelos basados en expresiones algebraicas que describen la estequiometría de la reacción de combustión, la relación estequiométrica aire-combustible y el poder calorífico inferior (LHV), en términos de la fracción volumen de hidrógeno presente en la mezcla (Bauer & Forest, 2001), del mismo modo son analizados factores como la duración de combustión, la temperatura del gas del cilindro en el motor (Ma, y otros, 2007), comparando propiedades como límites de ignición, LHV volumétrico y la



velocidad de la flama laminar de hidrógeno y gas natural como combustibles de motor (Nagalingam, y otros, 1983).

2.6 Modelos termodinámicos

La selección de modelo termodinámico es crucial para un trabajo de simulación ya que este calculara las propiedades termodinámicas y equilibrios de fases que servirán para resolver balances de materia y energía en los equipos involucrados en la simulación. Incluso la selección de un modelo termodinámico inadecuado puede invalidar los resultados de la simulación. Los métodos termodinámicos disponibles pueden se clasificados en 4 tipos fundamentales:

- 1.- Ecuaciones de estado (EOS)
- 2.- Modelos de coeficientes de actividad (LACT)
- 3.- Modelos combinados (EOS-LACT)
- 4.- Correlaciones especiales para sistemas específicos (polímeros, electrolíticos entre otros).

La elección del método termodinámico depende de los compuestos presentes, la composición de la mezcla, el rango de presión y temperatura y la disposición de parámetros del proceso a simular. El modelo de fluidos puros y mezclas de moléculas apolares (hidrocarburos) solo incluyen las fuerzas de atracción y repulsión físicas entre moléculas. Para este tipo de sistemas las EOS son más apropiadas. Por otro lado, Eric C. Carson (1996) realiza una clasificación de los métodos termodinámicos y establece un sencillo mapa de decisión que ayuda a identificar los métodos termodinámicos viables de acuerdo a cada tipo de proceso, en la Figura II-14 se muestra la primera parte del mapa de decisión para seleccionar modelos termodinámicos.

Las ecuaciones de estado son aquellas expresiones algebraicas que relacionan las variables de estado fundamentales de un fluido (presión, volumen y temperatura), siendo la ley de los gases ideales la EOS más simple, aunque también existen EOS virial y las ecuaciones de estado cubicas (Dimian, 2003) siendo algunas de las más importantes. En la



Tabla II-4 se presenta una clasificación de métodos termodinámicos recomendados para algunos tipos de componentes en determinados intervalos de presión y en la Tabla II-5 se muestra una clasificación de modelos termodinámicos para el cálculo de propiedades empleados en simulación.

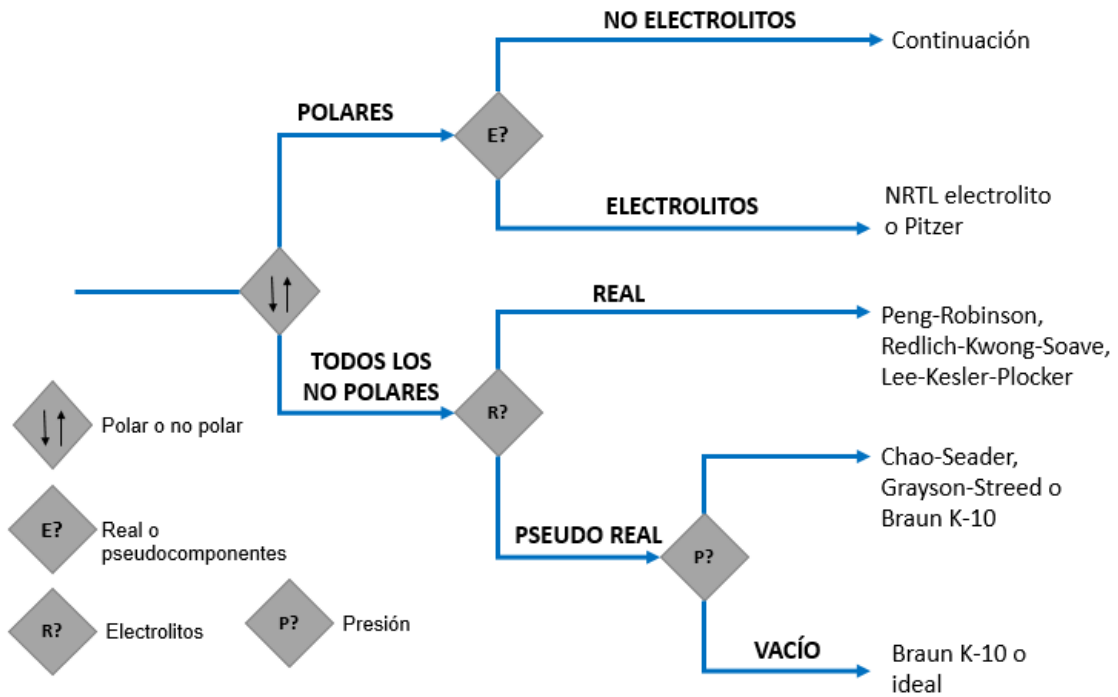


Figura II-14.- Primera parte del mapa de decisión para la selección de modelo termodinámico (Carson, 1996).

Tabla II-4.- Clasificación de los métodos termodinámicos

	Baja presión 0.1-3 bar	Mediana presión 3-20 bar	Alta presión >20 bar
Mezclas líquidas ideales	Raoult-Dalton	EOS	EOS
Hidrocarburos + componentes supercríticos	EOS	EOS	EOS
Mezclas líquidas no ideales	V-ideal/EOS L-LACT	1)V-EOS, L-LACT 2)EOS modificadas	EOS modificadas
No ideales + componentes supercríticos	V-EOS L-LACT+coef. Henry	EOS modificadas	EOS modificadas

EOS=ecuaciones de estado; LACT=modelos vasados en coeficientes de actividad; V=fase vapor; L=fase líquida (Dimian, 2003)



Tabla II-5.- Modelos para el cálculo de propiedades termodinámicas empleadas en simulación (Carson, 1996).

Equation-of-State Models	Activity Coefficient Models
Benedict-Webb-Rubin(BWR)-Lee-Starling	Electrolyte NRTL
Hayden-O'Connell*	Flory-Huggins
Hydrogen-fluoride equation of state for hexamerization*	NRTL
Ideal gas law*	Scatchard-Hildebrand
Lee-Kesler (LK)	UNIQUAC
Lee-Kesler-Plocker	UNIFAC
Peng-Robinson (PR)	Van Laar
Perturbed-Hard-Chain	Wilson
Predictive SRK	
Redlich-Kwong (RK)	Special Models
Redlich-Kwong-Soave (RKS)	API sour-water method
RKS or PR with Wong-Sandler mixing rule	Braun K-10
RKS or PR with modified-Huron-Vidal-2 mixing rule	Chao-Seader
Sanchez-Lacombe for polymers	Grayson-Streed
	Kent-Eisenberg
	Steam Tables
* Not used for the liquid phase	

Activar



CAPÍTULO III : METODOLOGÍA

“Uno no advierte jamás lo que está hecho, sólo puede ver lo que falta por hacer”

Marie Curie



3.1 Introducción

Para el desarrollo de este trabajo de tesis se contemplaron dos etapas, en la primera etapa se busca caracterizar los elementos que conforman el ciclo de potencia para la generación de energía eléctrica a partir de combustibles convencionales, para lo cual se realizaron las siguientes actividades:

- 1.- Caracterización de los equipos principales del ciclo de potencia para la generación de energía eléctrica, a nivel experimental.
- 2.- Identificación y descripción del mecanismo de reacción del proceso de combustión, estableciendo los modelos cinéticos correspondientes.
- 3.- Selección de los métodos termodinámicos para el cálculo de propiedades fisicoquímicas (capacidad calorífica, calor de mezclado, composición, presión parcial) y de transporte (densidad, viscosidad, tensión superficial), requeridos en cada etapa del proceso.

En la segunda etapa, se desarrolla la síntesis, basado en simulación en ASPEN PLUS V8.8 del proceso para la generación de electricidad realizando las siguientes actividades:

- 1.- Desarrollo del diagrama de flujo preliminar del sistema de generación de energía a partir de la quema de combustibles convencionales.
- 2.- Implementación de heurísticas y análisis paramétrico, para realizar el dimensionamiento de los equipos principales del ciclo de potencia.
- 3.- Desarrollo de análisis de sensibilidad para evaluar el efecto de las condiciones de operación en el rendimiento del proceso.

CAPITULO II: METODOLOGÍA



4.-Determinacion de la viabilidad técnica del proceso basado en el cálculo del rendimiento energético resultante de la quema de hidrógeno comparado con el uso de combustibles convencionales.

En la Figura III-1 se describen los factores a analizar en cada etapa de este trabajo de tesis.

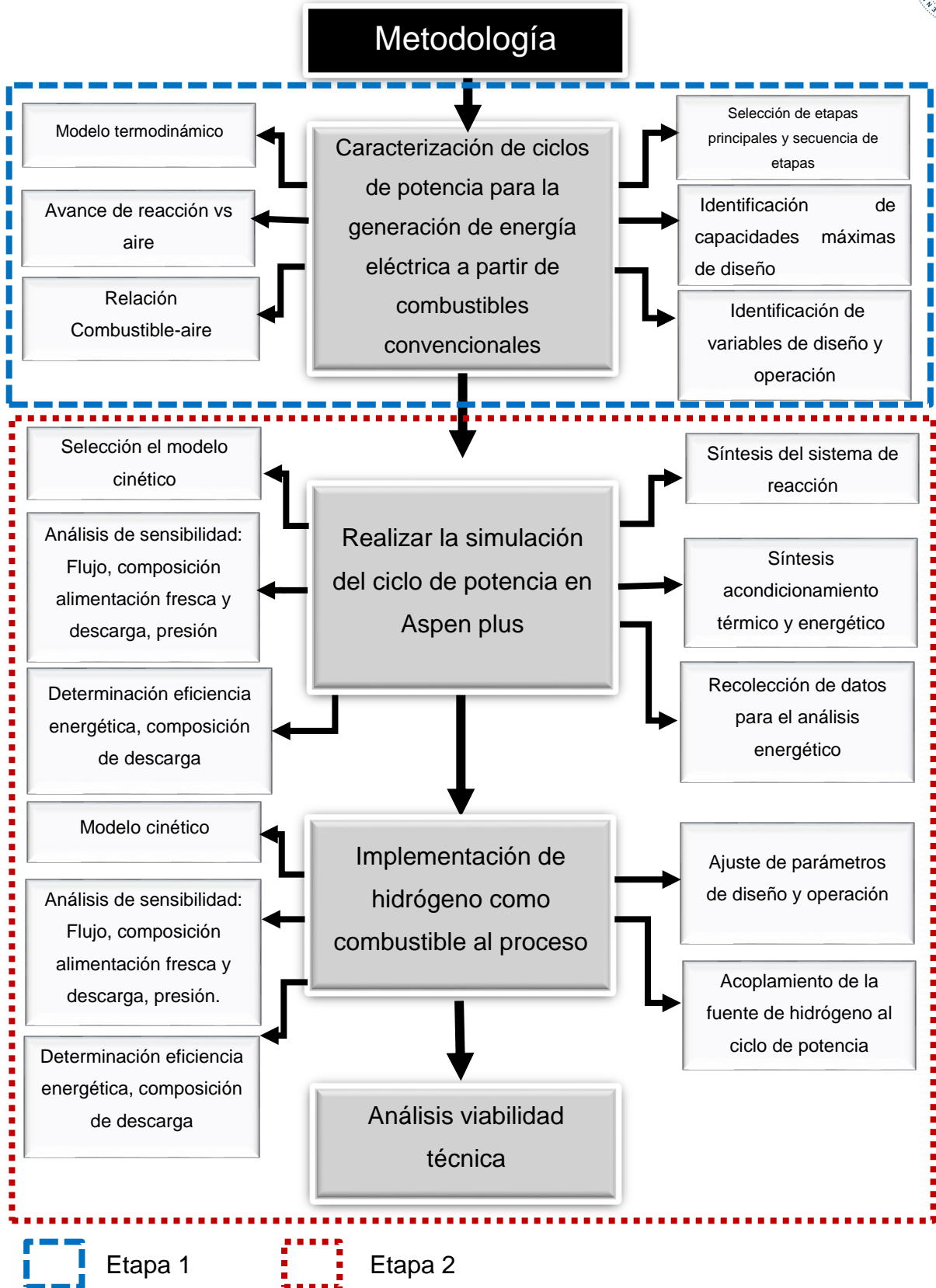


Figura III-1.- Resumen en forma de esquema de las actividades a realizar en el presente trabajo de tesis.

3.2 Identificación y descripción del mecanismo de reacción

3.2.1 Metano

El modelo cinético para la combustión del metano fue tomado del trabajo experimental reportado por Abbasi, L., Wanke, & Hayes (2012). En este trabajo experimental se realizó un estudio cinético para analizar la combustión de metano sobre catalizadores de Pt y Pt-Pd frescos y tratados con vapor. En donde, el diseño experimental se llevó a cabo en un reactor de lecho fijo micro catalítico hecho de acero inoxidable 316 y cuyas especificaciones se enlistan en la Tabla III-1. En el trabajo experimental, el reactor fue colocado dentro de un horno eléctrico equipado con un controlador de temperatura PID. El esquema del arreglo experimental se muestra en la Figura III-2. Los datos del catalizador empleado se presentan en la Tabla III-2, al reactor se alimentó metano, aire seco y agua .

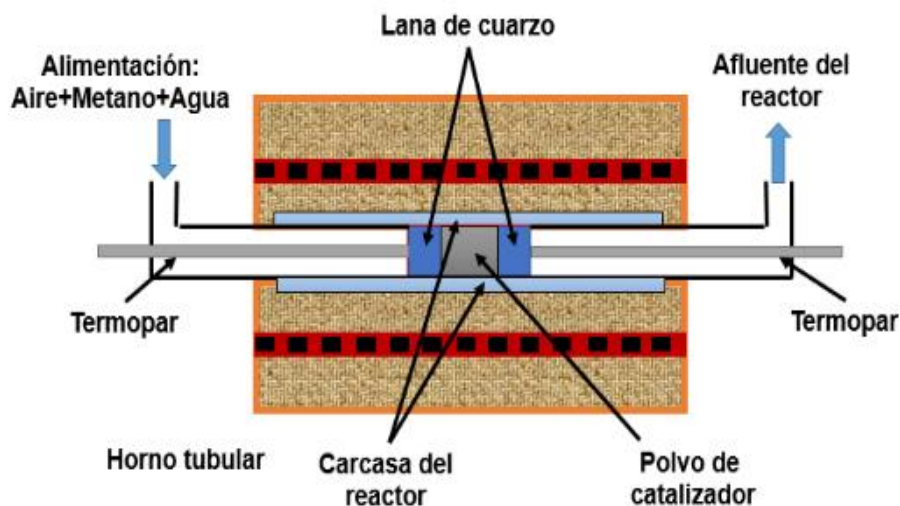


Figura III-2.- Diagrama del sistema de reacción para el estudio cinético de metano.

CAPITULO II: METODOLOGÍA



Tabla III-1.-Especificaciones del reactor para el trabajo experimental reportado por Abbasi y colaboradores (2012)

Tipo de reactor	Reactor de lecho empacado
Diámetro interno (m)	0.0076
Presión (MPa)	0.2432
Cantidad de catalizador (Kg)	0.0005

Tabla III-2.- Especificaciones del catalizador para el trabajo experimental reportado por Abbasi, y otros (2012).

Catalizador	Pt, Pt-Pd
Longitud (m)	0.011
Densidad de la partícula (Kg/m ³)	1000
Porosidad del lecho	0.35

El modelo del reactor propuesto por Abbasi, y otros (2012) se basa en la teoría de equilibrio molar, expresado en términos de fracción mol como se muestra en la siguiente ecuación:

$$-C_f U_s \frac{dY_{CH_4,f}}{dz} - \eta(1 - \varepsilon_{bed})(-R_{CH_4}) = 0 \quad \text{Ec. III-1}$$

En donde $Y_{CH_4,f}$ es la fracción mol de metano en la fase gas, C_f es la concentración total de fluido, U_s es la velocidad superficial molar promedio, ε_{bed} es la fracción de vacío de lecho catalítico, R_{CH_4} es la velocidad de reacción y η es el factor de efectividad.

CAPITULO II: METODOLOGÍA



El modelo empleado para la combustión de metano sobre catalizador de Pt-Pd tratado con vapor del trabajo experimental reportado por Abbasi, y otros, (2012) se describe mediante la Ec. III-2

$$-R_{CH_4} = \frac{k_{0,CH_4} \cdot e^{-E/RT} \cdot C_{CH_4}}{1 + K_{0,H_2O} \cdot e^{\Delta H_{ads}/RT} \cdot C_{H_2O}} \quad \text{Ec. III-2}$$

La expresión descrita en la Ec. III-2 es de tipo LHHW y toma en cuenta la inhibición de la reacción por formación de agua. Los datos cinéticos obtenidos tras el trabajo experimental se describen en la Tabla III-3.

Tabla III-3.-Valores de los parámetros cinéticos para el catalizador de Pt-Pd (Abbasi, y otros, 2012).

Catalizador de Pt-Pd	
Región de baja temp. (debajo de 545 °C)	
$A_{CH_4} (s^{-1})$	E(kJ/mol)
$1.81 \times 10^6 (10^{-2} - 10^9)$	72.6 (20 - 180)
Región de alta temp. (encima de 545 °C)	
$8.01 \times 10^3 (10^{-2} - 10^9)$	35.7 (20 - 180)
Constantes de Adsorción	
$A_{H_2O} (m^3/mol)$	$\Delta H_{ads} (kJ/mol)$
0.0527 $(10^{-4} - 10^9)$	24.1 (10 - 60)

*Los valores entre paréntesis indican los límites inferior y superior del rango de parámetros utilizado en el simulador GA

Para validar la simulación empleando el modelo cinético mostrado en la Ec. III-2 se utilizaron los datos experimentales de Abbasi, y otros (2012) correspondientes a una concentración de metano en la alimentación de 4067 ppm vol. y un flujo total de 234.5 cm³/min, sin adición de agua en la alimentación, con un catalizador de Pt-Pd tratado con vapor, en regiones de baja temperatura (debajo de 545 °C).

CAPITULO II: METODOLOGÍA



Usando diferentes flujos volumétricos de alimentación y diferentes concentraciones de metano los datos de la simulación fueron comparados con los datos experimentales reportados en la literatura. En la Figura III-3 se presenta la gráfica reportada por Abbasi, y otros (2012) que compara la conversión obtenida de metano respecto a un intervalo de temperaturas (350-700 °C), la cual se tomó como referencia para la validación de la simulación en Aspen Plus V8.8.

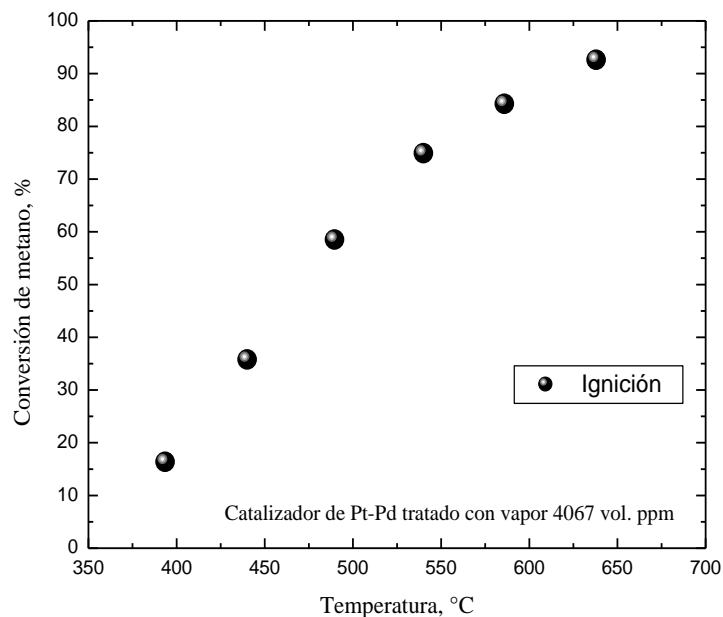


Figura III-3.-Conversión de metano a diferentes temperaturas sobre catalizador de Pt-Pd tratado con vapor, a una concentración de metano de 4067 ppm vol. y un flujo total de $234.5 \text{ cm}^3 / \text{min}$, sin adición de agua en la alimentación presentada en el trabajo de Abbasi, L., Wanke, & Hayes, (2012).

Abbasi, y otros, (2012) demuestran que la diferencia en la conversión del metano calculada empleando la ecuación del factor de efectividad para una cinética de primero orden, en un catalizador esférico isotermico y la solución numerica empleando un modelo LHHW acoplado a la ecuación reacción-difusión es insignificante, por lo que en este trabajo de tesis el factor de efectividad requerido en la Ec. III-1 se calculó empleando las Ec. III-3 y el módulo de Thiele θ generado por la Ec. III-4 (Levenspiel, 2004; Tiscareño Lechuga, 2008).



$$\eta = \frac{1}{\theta} \left(\frac{1}{\tanh(3\theta)} - \frac{1}{3\theta} \right) \quad \text{Ec. III-3}$$

$$\theta = L_c \sqrt{\frac{k}{D_{\text{eff}}}} = \frac{V_p}{A_p} \sqrt{\frac{k}{D_{\text{eff}}}} \quad \text{Ec. III-4}$$

En donde k es la constante de velocidad de primer orden en s^{-1} , L_c es la longitud característica definida como $D_p/6$ para un catalizador esférico (con D_p siendo el diámetro de la partícula) y D_{eff} es el coeficiente de difusión efectiva el cual se calculó con la siguiente expresión (Tiscareño Lechuga, 2008; Abbasi, y otros, 2012):

$$D_{\text{eff}} = \frac{\varepsilon_{\text{cat}}}{\tau} \left[\frac{1}{D_K} + \frac{1}{D_{AB}} \right]^{-1} \quad \text{Ec. III-5}$$

En esta expresión ε_{cat} es la porosidad del catalizador, τ es el factor de tortuosidad, D_{AB} es el coeficiente de difusión en masa y D_K es el coeficiente de difusión Knudsen expresado en m^2/s calculado mediante la siguiente expresión (Abbasi, y otros, 2012):

$$D_K = 48.5 d_p \sqrt{\frac{T}{M}} \quad \text{Ec. III-6}$$

En donde, M es la masa molecular en g/mol de la especie difusora, T es la temperatura absoluto en K , d_p es el diámetro del poro en metros. Para el coeficiente de difusión en masa se empleó la ecuación Ec. III-7, la cual es considerada como la correlación más completa para metano que se difunde en el aire expresada en m^2/s , esta ecuación es (Abbasi, y otros, 2012):

$$D_{AB} = 9.99 \times 10^{-5} \left(\frac{T^{1.75}}{P} \right) \quad \text{Ec. III-7}$$

Los valores de los parámetros del catalizador empleados para la solución de las ecuaciones anteriormente mencionadas para este trabajo de tesis, se presentan en la Tabla III-4 (Abbasi, y otros, 2012).

Tabla III-4.- Parámetros del catalizador (Abbasi, L., Wanke, & Hayes, 2012).

Variable	Valor
Diámetro del poro (d_p), nm	10
Factor de tortuosidad (τ)	2
Porosidad del catalizador (ϵ_{cat})	0.5
Diámetro de la partícula (D_p), micrones	360
Fracción de vacío del lecho catalítico (ϵ_{bed})	0.35

3.2.2 Propano

El modelo cinético para la combustión de propano fue tomado del trabajo experimental reportado por Beld, Ven, & Westerterp (1995). En este trabajo se estudia la oxidación completa de propano y etano sobre Pd/Al_2O_3 como catalizador y el efecto que tiene la adición de agua sobre la velocidad de reacción para cuatro diferentes modelos cinéticos.

Dicho experimento se llevó a cabo en un reactor con recirculación interna tipo Berty en el cual un impulsor proporciona la recirculación interna del gas (se asume que el reactor tiene mezclado perfecto para los experimentos cinéticos).

El lecho del reactor está conformado por 30 g de Pd/Al_2O_3 cuya temperatura y la del gas se midieron en la parte superior del lecho usando 2 termopares de tipo K. El sistema de reacción cuenta con dos alimentaciones frescas, propano (C1) y aire (C2); La corriente de aire cuenta con un dispositivo que permite modificar el contenido de humedad en la cual el agua es suministrada a través de la corriente C6 proveniente de un evaporador, el flujo de agua en dicha corriente es regulada variando la cantidad de aire de arrastre (C5). La corriente de propano y aire entran a un mezclador cuya composición es regulada mediante un

controlador de flujo que define el contenido de propano respecto al aire en la corriente C3 como se aprecia en la Figura III-4. En la Tabla III-5 se enlistan las variables de operación para el reactor.

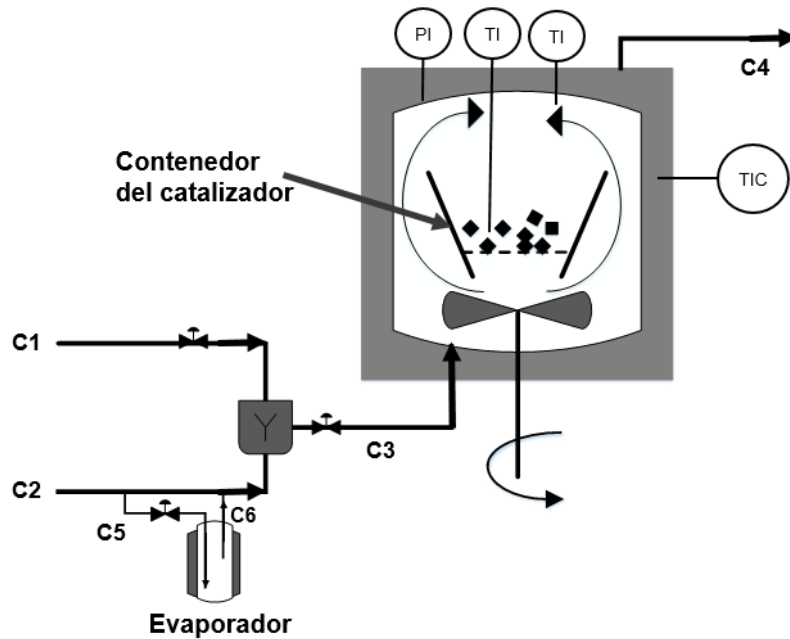


Figura III-4.-Diagrama de proceso experimental para la oxidación de propano.

Tabla III-5.- Especificaciones del reactor para el trabajo experimental.

Tipo de reactor	Berty (CSTR)
Presión (Mpa)	0.1
Volumen (m³)	0.0005
Carga de catalizador (Kg)	0.03

El modelo para la combustión de propano sobre un catalizador de Pd/AL₂O₃ propuesto por Beld, y otros (1995) se describe en la Ec. III-8, la cual es tipo LHHW con inhibición por presencia de humedad y adsorción del combustible sobre el catalizador.

$$-R_{C_3H_8} = \frac{k_1 \cdot e^{-E_a/RT} \cdot P_p}{1 + K_{H_2O} \cdot P_{H_2O} + k' \cdot P_p} \quad \text{Ec. III-8}$$

En la Tabla III-6 se muestran los parámetros cinéticos y en la Tabla III-7 se muestran las propiedades del catalizador (Beld, y otros, 1995).

Tabla III-6.- Parámetros cinéticos para el modelo de la Ec. III-8.

Parámetro	Valor
E_{act} (kJ/mol)	101.2
k_1 (mol/kg s Mpa)	3.2×10^8
K_{H_2O} (Mpa ⁻¹)	1.5×10^3
k' (Mpa ⁻¹)	9.1×10^3

Tabla III-7.-Propiedades el catalizador para la oxidación de propano

Catalizador	Cilindros de Pd/AL ₂ O ₃
Diámetro, (mm)	4.5
Altura, (mm)	4.5
Densidad de la partícula, (kg · m ⁻³)	1327

El modelo cinético descrito por la Ec. III-8 y sus correspondientes parámetros cinéticos se alimentaron al simulador Aspen Plus V8.8 empleando los flujos propuestos por Rubio, y otros, (2013) para la reproducción de la Figura III-5.

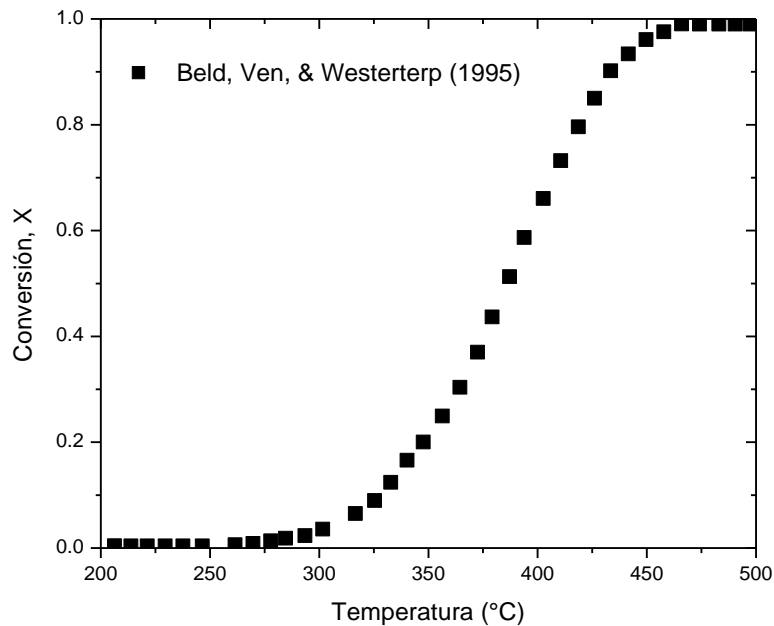


Figura III-5.- Conversión de propano a diferentes temperaturas para el modelo cinético descrito por la Ec. III-8 del trabajo experimental reportado por Beld, y otros, (1995).

En la Figura III-5 se muestra la dinámica de variación de la conversión de propano respecto a la temperatura obtenidos por Beld, y otros (1995), la cual fue utilizada como referencia para la validación del proceso de combustión.

3.2.3 Hidrógeno

El modelo cinético para la combustión de hidrógeno fue presentado por Marinov, y otros (1995) que a su vez fue incluido en el trabajo reportado por Appel, y otros (2004), en el cual se hace una comparación de mecanismos de reacción en fase gas para sistemas de reacción homogéneos y heterogéneos, empleando mezclas hidrogeno-aire. El modelo cinético reportado por Marinov, y otros (1995) empleado en la simulación se muestra en la Ec. III-9.

$$-R_{H_2} = k_{0,H_2} C_{H_2} C_{O_2}^{0.5} \exp(-E/RT) \quad \text{Ec. III-9}$$

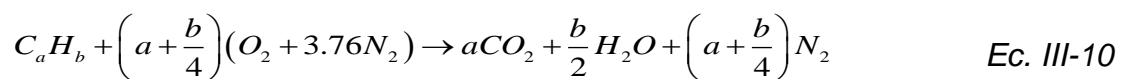
CAPITULO II: METODOLOGÍA



El modelo cinético es de tipo “Ley de potencia” homogéneo de un solo paso en donde $k_{0,H_2} = 1.8 \times 10^{13} \text{ mol}^{-0.5} \cdot \text{cm}^{1.5} \cdot \text{s}^{-1}$ y $E = 146.4 \text{ kJ/mol}$. Para validar el modelo cinético se utilizó el proceso descrito por S. Kata & N. Nomura (1997) del cual se habla con detalle en la sección 3.4.

3.2.4 Relación de estequiometria

El aire está conformado principalmente por oxígeno y nitrógeno los cuales pueden estar sujetos a reacciones químicas dependiendo de la temperatura del sistema de reacción. Cuando la temperatura de reacción está por debajo de los 1500 K contiene el nitrógeno no se ve significativamente afectado por la reacción (P. Boyce, y otros, 2005), por lo que la formación de NOx es despreciable. Si consideramos la combustión completa de un combustible hidrocarburo general de composición molecular promedio C_aH_b con aire, la ecuación estequiometria para una combustión completa será (Heywood, 1988):



De la Ec. III-10 podemos afirmar que la estequiometria está determinada por el tipo de combustible hidrocarburo utilizado, por lo que podemos deducir la ecuación estequiometria para la combustión de hidrógeno, metano y propano.



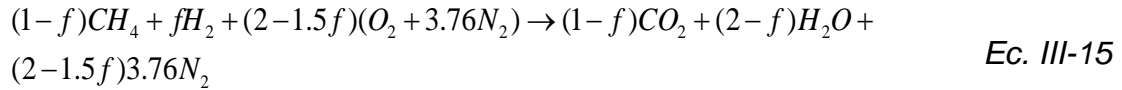
Cuando las temperaturas son mayores a 1500 K se incluye la siguiente reacción:



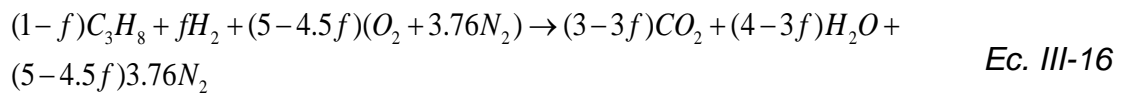
CAPITULO II: METODOLOGÍA



Conociendo la fracción molar f de hidrógeno en una mezcla hidrógeno-metano se puede lograr un equilibrio estequiométrico (Bauer, y otros, 2001) asumiendo la combustión completa como sigue:



Por lo que por analogía en este trabajo de tesis se propone la siguiente expresión para una mezcla hidrógeno-propano:



A partir de la proporción estequiométrica entre el combustible y el aire (Ec. III-10) se deduce la relación estequiométrica aire-combustible o combustible-aire en la Ec. III-17 (Heywood, 1988).

$$\left(\frac{A}{F}\right)_s = \left(\frac{F}{A}\right)_s^{-1} = \frac{\left(a + \frac{b}{4}\right)(PM_{O_2} + 3.76PM_{N_2})}{aPM_C + bPM_H} \quad \text{Ec. III-17}$$

En donde PM_{O_2} , PM_{N_2} , PM_C y PM_H son los pesos moleculares del oxígeno, nitrógeno atmosférico, carbón atómico e hidrógeno atómico respectivamente.

A partir de la Ec. III-15 se deduce la Ec. III-18 (Bauer, y otros, 2001):

$$\left(\frac{A}{F}\right)_{s,CH_4} = \frac{(2-1.5f)4.76PM_{aire}}{(1-f)PM_{CH_4} + f(PM_{H_2})} \quad \text{Ec. III-18}$$

De la misma forma en este trabajo de tesis a partir de las ecuaciones Ec. III-15 y Ec. III-16 se deduce las expresiones matemáticas para el cálculo de las relaciones aire/combustible para la mezcla propano-hidrógeno en la Ec. III-19.

$$\left(\frac{A}{F}\right)_{S, C_3H_8} = \frac{(5 - 4.5f)4.76PM_{aire}}{(1-f)PM_{C_3H_8} + f(PM_{H_2})} \quad \text{Ec. III-19}$$

En las ecuaciones Ec. III-18 y Ec. III-19, PM_{aire} , PM_{CH_4} , $PM_{C_3H_8}$ PM_{H_2} , corresponden al peso molecular de aire, metano, propano e hidrógeno diatómico respectivamente y f es la fracción molar de H_2 en la mezcla combustible. En la Tabla III-8 se enlistan los valores de $(A/F)_s$ y $(F/A)_s$ para el hidrógeno, metano, propano y sus mezclas calculadas con la Ec. III-17, Ec. III-18 y Ec. III-19 empleadas para este trabajo de tesis.

Tabla III-8.- Relación estequiometría de aire-combustible y combustible-aire para hidrógeno, metano y propano y sus diferentes mezclas..

Componente	$(A/F)_s$	$(F/A)_s$
H₂	34.1968	0.0292
CH₄	17.1890	0.0582
CH₄ 80% mol	17.7075	0.0565
CH₄ 70% mol	18.0586	0.0554
CH₄ 20% mol	22.8790	0.0437
C₃H₈	15.6339	0.0640
C₃H₈ 80% mol	15.8401	0.0631
C₃H₈ 70% mol	15.9870	0.0626
C₃H₈ 20% mol	18.5	0.0541

Para definir la calidad de la mezcla se emplea la relación de equivalencia o ϕ (relación equivalente combustible/aire) (Heywood, 1988):

$$\phi = \frac{\left(\frac{F}{A}\right)_{actual}}{\left(\frac{F}{A}\right)_s} \quad \text{Ec. III-20}$$



El valor de la relación equivalente descrito por la Ec. III-20 nos indica la calidad de la mezcla respecto al combustible presente de la siguiente manera (Heywood, 1988):

Para mezclas pobres en combustible: $\phi < 1$

Para una mezcla estequiometria= $\phi = 1$

Para una mezcla rica en combustible: $\phi > 1$

3.3 Selección de modelos termodinámicos.

Los modelos termodinámicos calculan las propiedades termodinámicas y equilibrios de fase que sirven para poder resolver balances de materia y energía en los equipos usados en simulación. La selección de modelo termodinámico se realizó de acuerdo a lo establecido en el árbol de decisión propuesto por Carson (1996) y las recomendaciones de Dimian (2003) y de Aspen Plus V8.8.

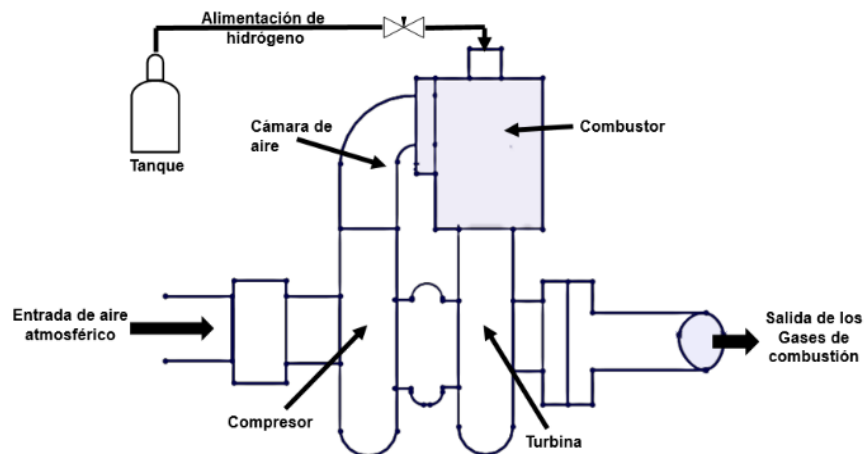
3.4 Marco de referencia del diagrama de flujo de proceso.

La simulación del proceso para la generación de energía a partir de la quema de combustible, tiene como base de referencia el sistema de estudio reportado por S. Kato & N. Nomura (1997), en él, los autores plantean el uso de gas hidrógeno como combustible en un turbocompresor. Para este trabajo de tesis se emplearon además del hidrógeno, metano, propano y mezclas de los mismos para el análisis de rendimiento del proceso. Los datos obtenidos en la simulación fueron comparados con datos reportados de la literatura.

3.4.1 Descripción del sistema de referencia

En el trabajo experimental presentado por S. Kato y N. Nomura (1997) se estudia el uso de hidrógeno como único combustible en una turbina de gas en la cual son analizadas sus características energéticas. Los datos experimentales fueron

obtenidos a partir de un arreglo que consiste principalmente de un turbocompresor para auto de peso ligero mismo que se encuentra conformado por una turbina y un compresor ambos de flujo radial-axial, conectados en un solo eje. El movimiento rotacional de la turbina es generado por los gases provenientes del combustor en donde se lleva a cabo la reacción química entre el combustible y el oxidante, cuya regulación se lleva a cabo mediante la variación de flujos de hidrógeno y aire en la alimentación. La presión inicial del gas de entrada a la cámara de combustión es de 5×10^5 Pa, empleando un caudalímetro de masa para medir el flujo correspondiente. El aire suministrado al compresor fue tomado de la atmosfera. En la Figura III-6 se observa un diagrama del arreglo experimental.



*Figura III-6.-Diagrama del turbocompresor usado en el experimento.
reportado por S. Kato y N. Nomura (1997).*

Puesto que el arreglo experimental está diseñado para el uso a una escala domestica (10 kW), las pérdidas de calor hacia el exterior del proceso al igual que la caída de presión originada por fricción en ductos y equipos se considera despreciable, este equipo cuenta con impulsores de cerámica en la turbina y de acero en el compresor y se considera una eficiencia termodinámica para el compresor y la turbina de 0.9.

3.4.2 Variables analizadas en el sistema de referencia

Dentro de las variables analizadas en el trabajo experimental reportado por S. Kato y N. Nomura (1997) se encuentran: la relación de la mezcla combustible-aire $m_{F/A} = G_{H_2}/G_{Aire}$, donde G_{H_2} es el flujo másico de hidrógeno en kg/h y G_{Aire} es el flujo másico de aire de admisión también en kg/h. En la Figura III-7 se presenta la relación hidrógeno-aire contra el flujo másico de aire de admisión del trabajo experimental. Para la Identificación de los flujos necesarios en las alimentaciones frescas del proceso, se dividió la Figura III-7 en 4 secciones con el fin de identificar los incrementos en los flujos tanto del oxidante como del combustible a partir del flujo de aire empleado. Los flujos resultantes, extraídos a partir de la Figura III-7, se muestran en la Tabla III-9.

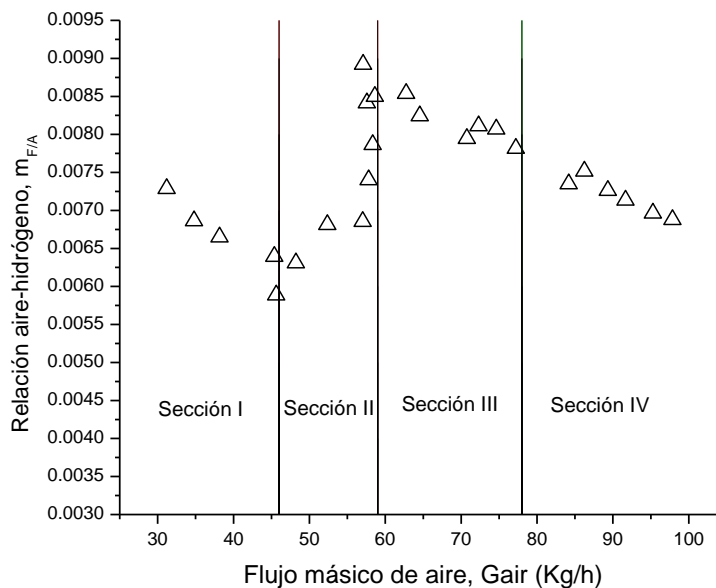


Figura III-7.-. Relación de hidrógeno-aire respecto al flujo másico de aire de admisión reportado por S. Kato y N. Nomura (1997).

CAPITULO II: METODOLOGÍA



Tabla III-9.-Flujos máxicos de hidrógeno y aire obtenidos de la Figura III-7 reportada por S. Kato y N. Nomura (1997)

G_{Aire} (kg/h)	G_{H_2} (kg/h)	$m_{F/A}$	G_{Aire} (kg/h)	G_{H_2} (kg/h)	$m_{F/A}$
Primera sección			Tercera sección		
31	0.2294	0.0074	63	0.4938	0.0079
35	0.2436	0.0070	65	0.5170	0.0080
38	0.2500	0.0066	71	0.5962	0.0084
45	0.2826	0.0062	72	0.6186	0.0086
46	0.2795	0.0061	75	0.6267	0.0084
Segunda sección			Cuarta sección		
48	0.3020	0.0063	77	0.6211	0.0080
52	0.3388	0.0065	84	0.6437	0.0076
57	0.4026	0.0071	86	0.6311	0.0073
57	0.4314	0.0076	95	0.7100	0.0075
58	0.4531	0.0079	98	0.6484	0.0066
59	0.4612	0.0079			

Del trabajo experimental reportado por S. Kato y N. Nomura (1997) se obtuvieron las revoluciones por minuto (rpm) generadas en la turbina respecto al flujo de aire en la admisión, así como también la potencia obtenida en la turbina respecto a las revoluciones por minuto (rpm) como se observa en la Figura III-8 y Figura III-9 respectivamente

A partir de las Figura III-8 y Figura III-9 se elaboró en este trabajo de tesis una curva que describe la relación entre el flujo de aire de admisión y la potencia alcanzada en la turbina.

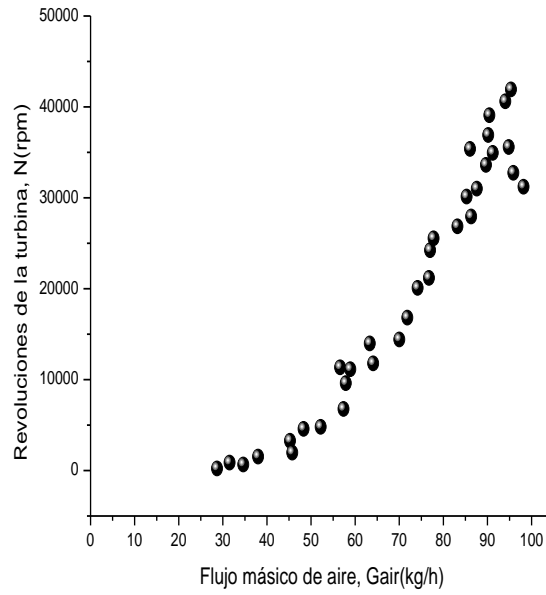


Figura III-8.-Revoluciones por minuto generadas en la turbina respecto al flujo másico de aire reportados por S. Kato y N. Nomura (1997).

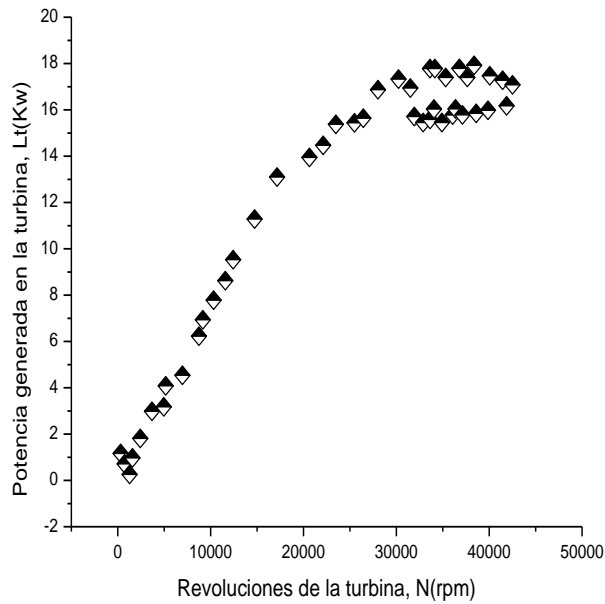


Figura III-9.-Potencia generada en la turbina respecto a las revoluciones por minuto (rpm) reportada por S. Kato y N. Nomura (1997).



3.5 Simulación del proceso de referencia

Para realizar la simulación del ciclo de potencia se tomaron las siguientes consideraciones:

1. El flujo de proceso a través de las líneas de distribución tiene propiedades uniformes en su sección transversal.
2. La caída de presión en tuberías es despreciable en comparación con la caída de presión de los equipos principales (compresor y turbina) esto debido a que el material de construcción de tuberías es de baja rugosidad, la longitud equivalente es mínima para sistemas a pequeña escala, no se consideran fugas de vapor a lo largo de las líneas de distribución y se consideran el material de construcción es de baja conductividad térmica por lo que se comportan como sistemas térmicamente aislados.
3. La etapa de combustión es representada por un reactor CSTR para hidrógeno y propano, y un PFR para metano, que contemplan las restricciones del modelo cinético (Abbasi, y otros, 2012; Kumar Khaitan, y otros, 2011; Beld, y otros, 1995).

El efecto de inhibición de la humedad en el proceso de combustión se contempla en el análisis del ciclo de potencia.

4. La simulación del proceso de combustión del hidrogeno se desarrolló considerando: (1) la reacción de combustión de hidrógeno está limitada por el equilibrio termodinámico y (2) la reacción de combustión del hidrógeno está limitada por la cinética del proceso mediante el modelo descrito por Marinov, y otros (1995).
5. Los parámetros de diseño preliminar incluyen el empleo de compresor y turbina con eficiencia adiabática (proceso isoentrópico). Asimismo se considera que para evitar la presencia de dos fases en la turbina la condición térmica de la corriente de descarga del reactor, la cual a su vez es la alimentación a la turbina, deberá de corresponder a la temperatura de

un vapor sobrecalentado ($T_{RX2} > T_b$) esto permitirá evitar una carga de impacto fluctuante en las paletas del impulsor (ya que las burbujas de vapor así como el líquido presente inciden alternativamente en la superficie del impulsor) erosionando la superficie y dañando la maquinaria; en la práctica dentro de las especificaciones de diseño se establece que, no es aconsejable que la cantidad de vapor en la turbina sea menor del 90%. Bajo estas consideraciones el ciclo Rankine se conoce como ciclo Rankine con sobrecalentamiento.

6. El hidrógeno alimentado proviene de la producción de oxy-hidrógeno a partir de hidrólisis del agua.
7. La relación mínima combustible-aire está determinada por la estequiometria de reacción del proceso de combustión generalizada como se aprecia en las ecuaciones Ec. III-17, Ec. III-18, Ec. III-19 por lo que los flujos máscicos y/o molares se determinaran a partir de la relación mínima combustible-aire.
8. Para la cámara de combustión representada por un PFR se empleó el método de discretización con diferencias finitas centrales en la simulación para la solución espacial de los balances de masa, utilizando 10 nodos de cálculo distribuidos uniformemente a lo largo del reactor (Figura III-10).

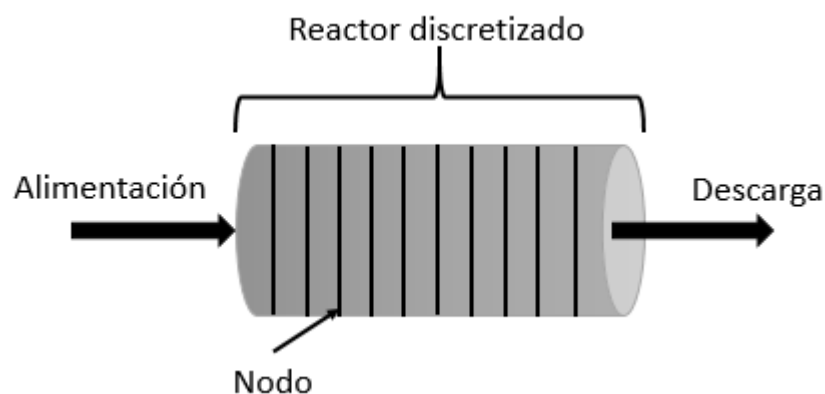


Figura III-10.-Esquema de la discretización en el reactor.

Con el diseño preliminar se realizaron análisis de sensibilidad variando los flujos de entrada de combustible y oxidante para evaluar el efecto de los parámetros de operación en la eficiencia energética (Ec. II-15). Una vez simulado el ciclo de potencia se sustituyó el combustible hidrógeno con metano, propano y posteriormente se emplearon mezclas de hidrógeno-metano e hidrógeno-propano con un contenido de hidrógeno de 20%, 30% y 80% en mol para cada caso, dentro de el mismo proceso, para analizar sus efectos en la eficiencia térmica y trabajo producido manteniendo los mismos flujos de combustible y oxidante.

Para introducir la información de los parámetros cinéticos en Aspen Plus V8.8 se emplearon dos tipos de modelos cinéticos: (1) Ley de potencia y (2) LHHW (Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson) para lo cual fue necesario modificar el formato de dichos parámetros de acuerdo a las siguientes expresiones matemáticas (I.M. & Al-Malah, 2017; Tiscareño Lechuga, 2008):

Para una expresión general basada en Ley de potencia:

$$r = k(T)^n e^{(-E/R)\left[\frac{1}{T}\right]} \prod_{i=1}^N C_i^{\alpha_i} \quad \text{Ec. III-21}$$

Para una expresión general basada en Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson:

$$r = \frac{(\text{Factor cinético})(\text{Fuerza motriz neta})}{(\text{Término de adsorción})} \quad \text{Ec. III-22}$$

Factor cinético:

$$k^* e^{-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T}\right)} \quad \text{Ec. III-23}$$

Fuerza motriz neta:

$$k_1 \prod_{i=1}^N C_i^{\alpha_i} - k_2 \prod_{j=1}^N C_j^{\beta_j} \quad \text{Ec. III-24}$$

Término de adsorción:

$$\left(\sum_{i=1}^M K_i \left(\prod_{j=1}^N C_j^{v_j} \right) \right)^m$$

Ec. III-25

En la Tabla III-10, Tabla III-11 y Tabla III-12 se presentan los modelos y parámetros cinéticos que intervienen en la oxidación de hidrógeno, metano y propano en el formato requerido por Aspen Plus V8.8 (Abbasi, y otros, 2012; Appel, y otros, 2004; Beld, y otros, 1995; Marinov, y otros, 1995).

Las especificaciones del compresor y la turbina fueron las mismas para todos los combustibles sin embargo las especificaciones del reactor cambiaron en cuanto a las características del catalizador empleado según el tipo de combustible, las especificaciones del catalizador empleadas en la simulación de este trabajo de tesis son las que se mostraron anteriormente en las Tabla III-2 y Tabla III-7, para metano y propano respectivamente.

Tabla III-10.- Valores de los parámetros para la combustión de hidrógeno (Marinov, Westbrook, & Pitz, 1995).

Modelo cinético	k_{0,H_2}	E (kJ/mol)
$-R_{H_2} = k_{0,H_2} C_{H_2} C_{O_2}^{0.5} \exp(-E/RT)$	$1.8 \times 10^{13} \text{ kmol}^{-0.5} \text{ m}^{1.5} \text{ s}^{-1}$	146.4

Tabla III-11.- Valores de los parámetros involucrados en la oxidación del metano sobre catalizador de Pt-Pd tratado con vapor (Abbasi, L., Wanke, & Hayes, 2012)).

Modelo cinético	Factores pre-exponenciales		E kJ/mol	ΔH_{abs} kJ/mol	A ($\ln(k_0)$)	B -E/R
	$-R_{CH_4} = \frac{k_{0,CH_4} e^{-E/RT} C_{CH_4}}{1 + K_{0,H_2O} e^{\Delta H_{abs}/RT} C_{H_2O}}$	k_{0,CH_4}	$8.01 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$	35.7	-----	8.9884
K_{0,H_2O}		$0.0527 \text{ m}^3/\text{mol}$	-----	24.1	-2.9431	2898.7250

Tabla III-12.-Valores de los parámetros involucrados en la oxidación de propano sobre catalizador de Pd/AL₂O₃ (Beld, Ven, & Westerterp, 1995).

Modelo cinético	Factores pre-exponenciales		E kJ/mol	A ln(k ₀)	B -Ea/R
$-R_{C_3H_8} = \frac{k_{0,C_3H_8} \cdot e^{-E/RT} \cdot P_{C_3H_8}}{1 + K_{0,H_2O} \cdot P_{H_2O} + k' \cdot P_{C_3H_8}}$	k_{0,C_3H_8}	3.2 $\times 10^{-1}$ kmol/kg · s · Pa ⁻¹	101.2	5.7683	-12172.2
	K_{0,H_2O}	1.5×10^{-3} Pa ⁻¹	-----	-6.5022	-----
	k'	9.1×10^{-3} Pa ⁻¹	-----	-4.6994	-----

3.6 Escalamiento

Una vez obtenido el arreglo preliminar (diseño conceptual) del ciclo de potencia, se realiza el escalamiento del proceso (basado en semejanza geométrica y capacidad) para lograr la producción de energía eléctrica generada en la central termoeléctrica San Lorenzo Potencia ubicada en el estado de Puebla, la cual cuenta con un total de 3 unidades de generación con una capacidad conjunta de 382 MW anuales (CFE). Considerando un año laboral de 365 días y jornadas laborales de 8 horas con 3 turnos la producción de electricidad demandada es de 44 kWh.

3.6 Heurísticas consideradas para la síntesis del proceso.

Las heurísticas empleadas para la síntesis del proceso se enlistan a continuación (Seider, y otros, 2009; Couper, y otros, 2012).

3.6.1 Eliminación y adición de calor en el sistema de reacción.

- Para remover un alto calor de reacción exotérmico, considerar el uso de reactivos en exceso, un diluyente inerte o tomas frías.
- Para menores calores de reacción exotérmicos, recircular el fluido del reactor a un enfriador externo, usar un recipiente enchaquetado o serpentín



frío. También, considerar el uso de refrigerantes entre etapas de reacciones adiabáticas.

3.6.2 Intercambiadores de calor y hornos.

- A menos que se requiera como parte del diseño del separador o reactor, proporcione el intercambio de calor necesario para calentar o enfriar corrientes de fluido de proceso, con o sin servicios públicos, en un intercambiador de tubo y coraza utilice un flujo a contracorriente. Sin embargo, si una corriente de proceso requiere un calentamiento superior a 750 °F, use un horno a menos que el fluido del proceso esté sujeto a la descomposición química.

- La temperatura optima mínima que se alcanza en los intercambiadores de calor dependen del nivel de temperatura como sigue:
 - 10°F o menos para temperaturas por debajo del ambiente
 - 20°F para temperaturas a ó sobre el ambiente hacia los 300°F
 - 50°F para altas temperaturas
 - 250 a 350°F en un horno para la temperatura del gas de combustión sobre la temperatura del fluido de entrada del proceso

- Típicamente, un hidrocarburo da una temperatura de flama adiabática de aproximadamente 3500°F cuando se usa la cantidad estequiométrica de aire. Sin embargo, usar aire en exceso para alcanzar la combustión completa y dar una máxima temperatura de gas de combustión de 2000°F. Fijar la temperatura del gas en 650 a 950°F para prevenir la condensación de los componentes corrosivos del gas de combustión.

- Las caídas de presión de los intercambiadores de calor se pueden establecer como sigue:
 - 1.5 psi para hervimiento y condensado.
 - 3 psi para un gas.
 - 5 psi para un líquido de baja viscosidad.



- 7-9 psi para un líquido de alta viscosidad.
- 20 psi para un fluido del proceso pasando a través de un horno.

3.6.3 Operaciones de incremento de presión

- Usar un ventilador para elevar la presión del gas desde la presión atmosférica hasta tan alto como 40 pulgadas de espesor del agua (10.1 kPa gauge o 1.47psig). Usar un soplador o compresor para elevar la presión del gas tan alto como 206 kPa gauge o 30 psig. Usar un compresor o un sistema de compresor de etapa para conseguir presiones mayores a 206 kPa gauge o 30 psig.



CAPÍTULO IV : RESULTADOS

“Hoy se pueden calcular cosas que no podemos ver.”

Martinus Veltman

“En algún lugar, alguna cosa increíble aguarda a ser descubierta”.

Carl Sagan



4.1 Introducción

En este capítulo se presentan los diagramas de flujo y especificaciones de equipos, resultantes en: (1) Etapa de validación de la simulación con datos experimentales reportados en la literatura y (2) Síntesis del ciclo de potencia. A partir de la simulación del ciclo de potencia basado en el trabajo experimental reportado por S. Kato y N. Nomura (1997) se realizó la síntesis de los ciclos de potencia para el análisis de rendimiento energético respecto a la relación aire-combustible, consumo de operación y temperatura de entrada; comparando los diferentes combustibles y sus mezclas respectivas (metano-hidrógeno y propano-hidrógeno) empleando 20%, 30% y 80% mol de hidrógeno.

4.2 Validación simulación del sistema de reacción

4.2.1. Metano

El modelo y los parámetros cinéticos para la oxidación de metano sobre catalizador de Pt-Pd fueron validados mediante una simulación en Aspen Plus V8.8. Dentro del simulador se optó por un reactor tubular tipo PFR adiabático para representar el reactor empacado del trabajo experimental reportado por Abbasi, L., Wanke, & Hayes, (2012). También se usó un intercambiador de calor para elevar la temperatura de la corriente de entrada al reactor hasta una temperatura de 813 K, la cual se encuentra dentro del rango donde los datos usados en el caso de estudio seleccionado para su reproducción funcionan correctamente (debajo de la 818 K). En la Figura IV-1 se muestra el diagrama de proceso empleado para la simulación, en la Tabla IV-1 se describen las variables de operación de los equipos y en la Tabla IV-2 se enlistan los datos de temperatura, presión, flujo y composición de todas las corrientes del proceso presentadas en la Figura IV-1.

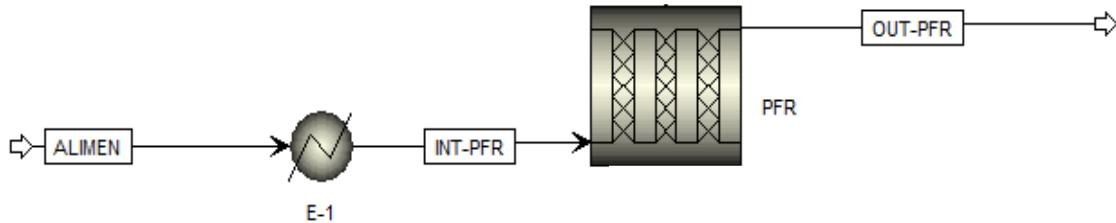


Figura IV-1.-Diagrama de flujo de proceso en Aspen Plus que representa el trabajo experimental presentado por Abbasi, y otros (2012).

Tabla IV-1.-Variables de operación de los equipos del diagrama de proceso para la oxidación de metano

EQUIPO	Reactor PFR
Tipo	Adiabático
Presión (MPa)	0.2432
Temperatura (K)	810
Longitud (m)	0.011
Diámetro (m)	0.0076
Porosidad del lecho	0.35
Densidad de la partícula (Kg/m^3)	1000
EQUIPO	Intercambiador de calor
Caída de presión (MPa)	0.0006894
Temperatura (K)	813

Como se observa en la Tabla IV-1 la temperatura del reactor es de 810 K, esto implica que el servicio auxiliar a la salida deberá de tener aproximadamente 800 K ($\Delta T_{min} = 10 K$) dando como resultado la obtención de vapor sobrecalentado, el cual puede ser utilizado para el acondicionamiento térmico de la corriente EX1-E. Siguiendo la heurística que dicta una caída de presión en los intercambiadores

CAPITULO III: RESULTADOS



de calor de proceso de 0.1 a 3 psi así como un gradiente térmico mínimo 10 K (50 °F) entre la salida del fluido caliente y la entrada del fluido frío en operación a contracorriente, se obtiene el diagrama de flujo de proceso descrito por la Figura IV-2.

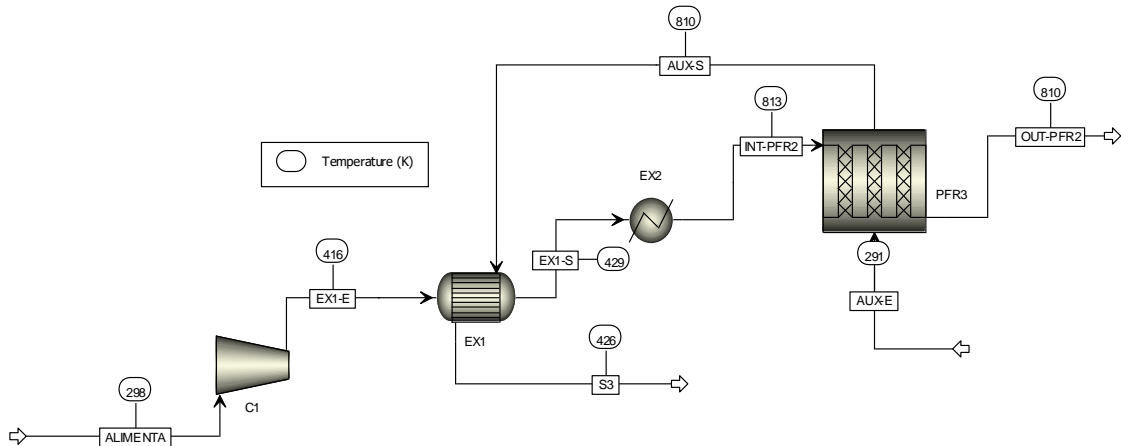


Figura IV-2.-Implementación de heurísticas al sistema de proceso para la validación de los datos cinéticos.

Dentro de los resultados obtenidos en la combinación de corrientes en EX1 para la optimización de los servicios auxiliares se obtiene el perfil térmico descrito por la Figura IV-3. El área requerida del intercambiador EX1 es de 7.28E-07 m² el cual corresponde a un flujo de 0.0166 Kg/h (0.0047 g/s) el cual se encuentra por debajo del rango permisible (0.0362874 Kg/h a 3.6E+18 Kg/h), cuya caída de presión se considera despreciable.

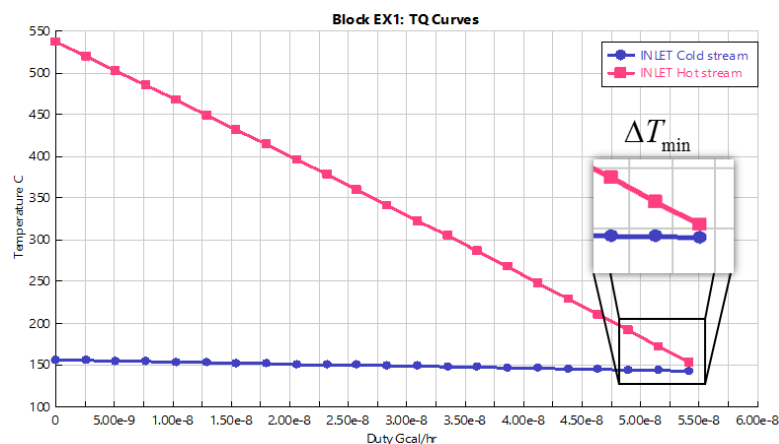


Figura IV-3.-Perfil térmico del intercambiador EX1 del diagrama de flujo de procesos de la Figura IV-3

CAPITULO III: RESULTADOS



Al proceso descrito en la Figura IV-2 se realizaron análisis de sensibilidad en donde se varió la temperatura a la cual se lleva a cabo la reacción y se analizó la conversión de metano obtenida en el reactor. Posteriormente se compararon los datos obtenidos mediante simulación con los datos reportados por Abbasi, y otros (2012) y los resultados se muestran en la Figura IV-4.

Tabla IV-2.-Datos de las corrientes del proceso

CORRIENTES	ALIMEN	INT-PFR	OUT-PFR	AUX-1	AUX-2
Temperatura (K)	273.15	813.15	810	291.15	809.9
Presión (Mpa)	0.1013	0.1013	0.2432	0.1013	0.1013
Flujo (Kg/h)	0.0181	0.0181	0.0181	0.0003	0.0003
Flujo molar (kmol/h)	6.28E-04	6.28E-04	6.28E-04	1.61E-05	1.61E-05
Fracción molar					
CH_4	0.0041	0.0041	0.0020	0.0000	0.0000
O_2	0.2092	0.2092	0.2050	0.0000	0.0000
CO_2	0.0000	0.0000	0.0021	0.0000	0.0000
H_2O	0.0000	0.0000	0.0042	1.0000	1.0000
N_2	0.7867	0.7867	0.7867	0.0000	0.0000

Los datos que se muestran en la Figura IV-4 corresponden a un valor del factor de efectividad de 0.75 calculado con la Ec. III-3, el cual mostro la mayor aproximación a los datos experimentales reportados por Abbasi, y otros (2012) con un valor del coeficiente de correlación (R^2) de 91.41% calculada mediante la ecuación Ec. IV-1.

$$R^2 = 1 - \left(\frac{\sum (Y - y)^2}{\sum (Y - \bar{y})^2} \right)$$

Ec. IV-1

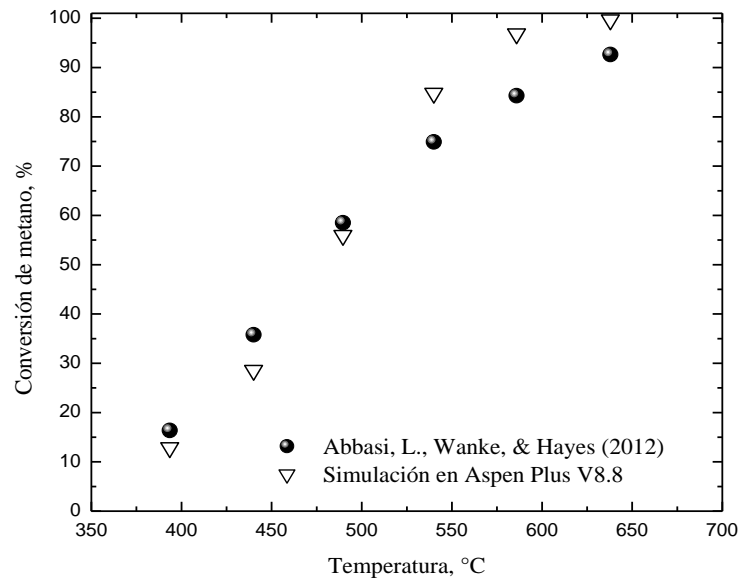


Figura IV-4.-Comparación de la conversión de metano a diferentes temperaturas de los datos reportados por Abbasi, L., Wanke, & Hayes (2012) y la simulación en Aspen Plus V8.8.

En la Figura IV-5 se muestra una comparación de la conversión reportada en el trabajo experimental y la obtenida mediante simulación en este trabajo de tesis, en donde se puede observar una exactitud razonable en la predicción de la dinámica de variación de la conversión de metano con un valor de R^2 correspondiente a 96.75 % al emplear el modelo cinético descrito por la Ec. III-2.

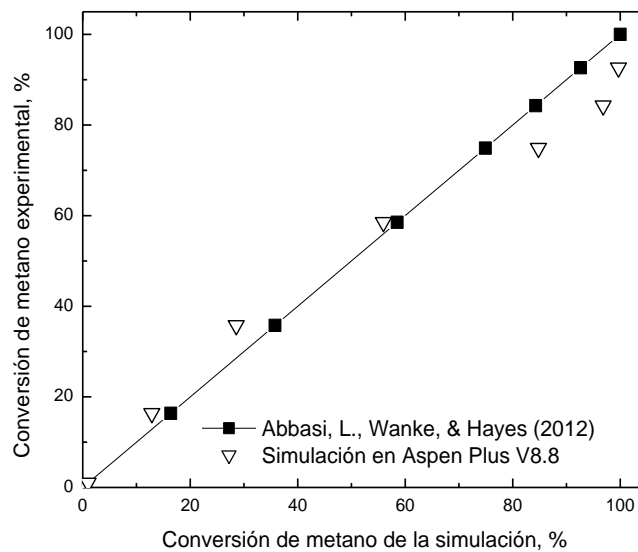


Figura IV-5.- Comparación de la conversión obtenida del trabajo experimental y la conversión obtenida mediante simulación.

Para la solución espacial de los balances de masa se empleó el método de discretización, por lo que se realizó un análisis de sensibilidad en donde se varió la cantidad de nodos utilizados en dicha discretización para determinar el perfil de temperatura dentro del reactor respecto al tiempo de residencia y tal como se observa en la Figura IV-6, el perfil de temperatura es el mismo para cada número de nodos empleado, por lo que se elige emplear la simulación con 10 nodos para reducir el tiempo computo en la solución.

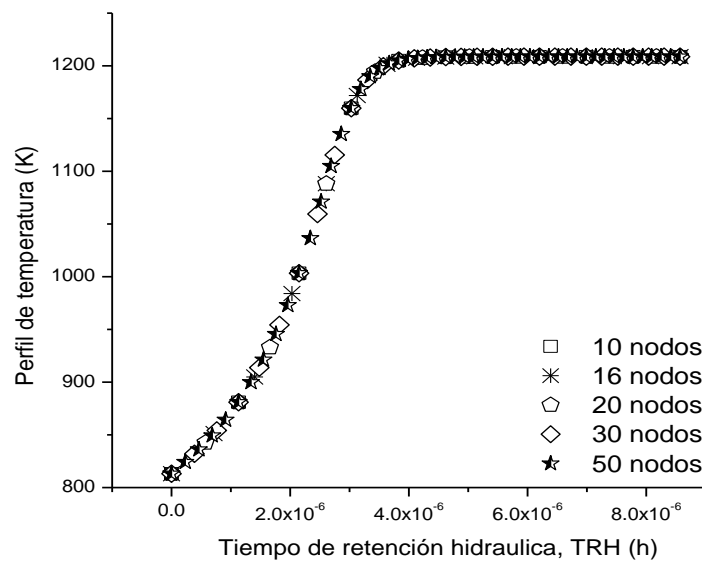


Figura IV-6.- Análisis de sensibilidad respecto al número de nodos del balance de masa.

4.2.2. Propano

Para validar el modelo y datos cinéticos que intervienen en la oxidación de propano sobre catalizador de Pd/Al₂O₃ se tomó un caso de estudio reportado por Beld, Ven, & Westerterp (1995) para reproducirlo mediante simulación en Aspen Plus V8.8. Para este proceso es alimentado propano, oxidante (O₂ y N₂) y agua a un reactor CSTR adiabático cuya hidrodinámica es apropiada para representar el reactor tipo Berty del experimento y cuya corriente de alimentación es calentada mediante un intercambiador de calor a 772 K, temperatura a la que se calcula la conversión más alta de propano. En la Figura IV-7 se muestra el diagrama de flujo de proceso para la oxidación de propano en Aspen Plus V8.8.

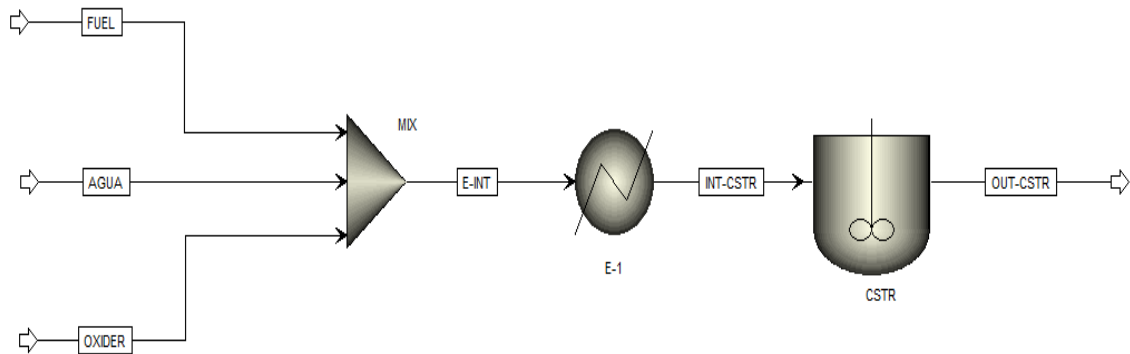


Figura IV-7.-Diagrama de flujo de proceso en Aspen Plus V8.8 para la oxidación de propano.

En la Tabla IV-3 se dan las especificaciones de los equipos del proceso y en la Tabla IV-4 se enlistan los datos de temperatura, presión, flujo y composición de las corrientes descritas en la Figura IV-7. Posteriormente al proceso descrito anteriormente se realizaron análisis de sensibilidad en donde se varió la temperatura a la cual se lleva a cabo la reacción y se analizó la conversión de propano obtenida en el reactor.

Tabla IV-3.-Variables de operación de los equipos del diagrama de proceso para la oxidación de propano.

EQUIPO	Reactor CSTR
Tipo	Adiabático
Presión (Mpa)	0.16
Carga térmica (kW)	0
Volumen (m ³)	0.0005
Carga de catalizador (kg)	0.03
Densidad de la partícula (kg/m ³)	1327
EQUIPO	Intercambiador de calor
Caída de presión (psi)	0.1
Temperatura (K)	773.15

CAPITULO III: RESULTADOS



Tabla IV-4.-Datos de las corrientes del proceso descrito en la Figura IV-7.

CORRIENTES	FUEL	AGUA	OXIDER	E-INT	INT-CSTR	OUT-CSTR
Temperatura (K)	298.15	389.15	298.15	337.5263	773.15	821.7334
Presión (Mpa)	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16
Fracción vapor	1	1	1	1	1	1
Flujo másico (Kg/h)	8.50E-05*	7.00E-03	5.60E-02*	6.31E-02	6.31E-02	6.31E-02
Flujo molar (kmol/h)	1.93E-06	3.89E-04	1.94E-03	2.33E-03	2.33E-03	2.33E-03
Fracción molar						
C_3H_8	1.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	8.27E-04	8.27E-04	3.77E-05
O_2	0.00E+00	0.00E+00	2.09E-01*	1.74E-01	1.74E-01	1.70E-01
H_2O	0.00E+00	1.00E+00	0.00E+00	1.67E-01	1.67E-01	1.70E-01
CO_2	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.37E-03
N_2	0.00E+00	0.00E+00	7.91E-01*	6.58E-01	6.58E-01	6.58E-01

*Flujos usados en el trabajo reportado por Rubio, Ruiz, & Pacheco (2013)

Los resultados adquiridos mediante simulación fueron comparados con los datos obtenidos por Beld, Ven, & Westerterp (1995). Para lograr el ajuste de las curvas, se empleó un flujo de vapor de agua de 0.007 Kg/h, como se observa en la Figura IV-8 la adición de vapor de agua en la alimentación afecta significativamente el avance de la reacción para la combustión de propano.

Los resultados de la simulación mostrados en Figura IV-8 presentan una correlación de $R^2=98.61\%$ (calculada con la Ec. IV-1) respecto a los datos experimentales.

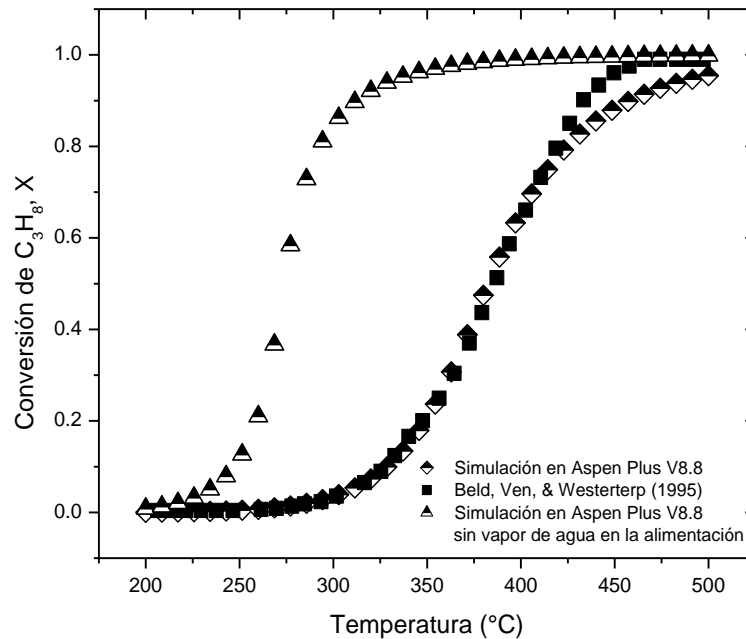


Figura IV-8.- Conversión de propano respecto a diferentes temperaturas de los datos reportados por Beld, Ven, & Westerterp (1995) y los datos obtenidos en Aspen Plus V8.8.

4.2.3. Hidrógeno

A partir de los resultados reportados por S. Kato y N. Nomura (1997) mostrados en las Figura III-8 y Figura III-9, se elaboró una curva que correlaciona el efecto del flujo de aire en la admisión del compresor con la potencia generada en la turbina (Figura IV-9). La curva mostrada en la Figura IV-9 se tomó como referencia para validar los resultados de la simulación de esta etapa.

La síntesis del proceso empleando el modelo cinético que describe la combustión completa de hidrógeno reportado por Marinov, y otros (1995) y Appel, y otros (2004), aplicando el caso base del ciclo de potencia descrito por S. Kato y N. Nomura (1997) dio como resultado el diagrama de flujo de proceso mostrado en la Figura IV-10, el cual comprende compresor, turbina y cámara de combustión como equipos principales. La cámara de combustión fue simulada a partir de un reactor tipo CSTR adiabático cuya hidrodinámica representa de manera

CAPITULO III: RESULTADOS



adecuada el funcionamiento de una cámara de combustión (Kumar Khaitan & Raju, 2011).

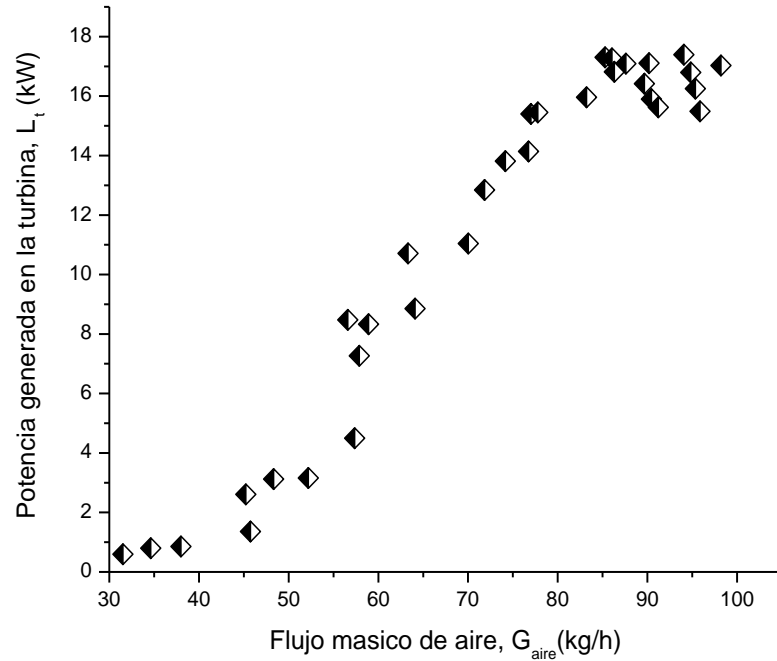


Figura IV-9.- Potencia generada en la turbina con relación al flujo de aire en la admisión del compresor.

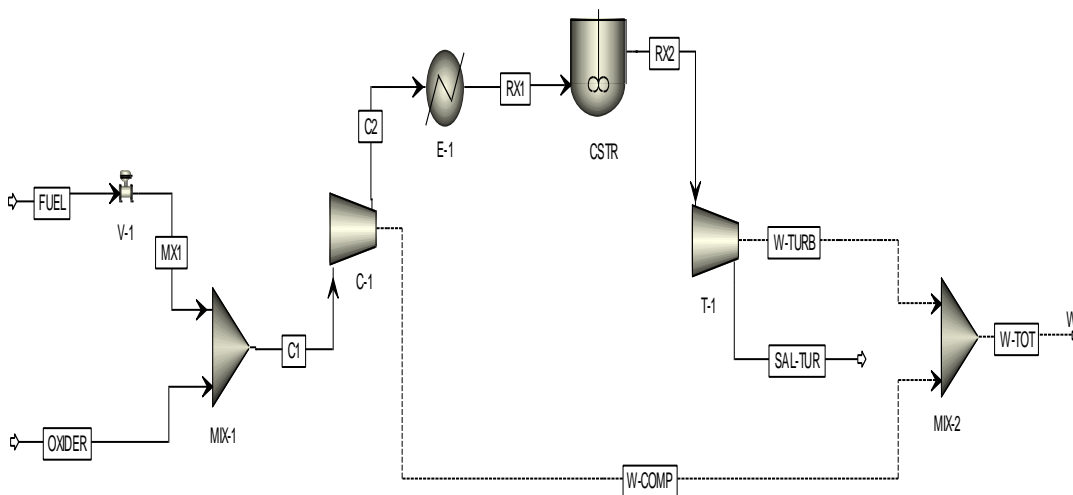


Figura IV-10.- Diagrama de flujo de proceso en Aspen Plus V8.8 para el trabajo experimental reportado por Kato & Nomura (1997).

CAPITULO III: RESULTADOS



Debido a que la combustión del hidrógeno en un sistema homogéneo (sin catalizador) se lleva a cabo a altas temperaturas, se empleó un intercambiador de calor para el precalentamiento de la corriente de alimentación al reactor (913 K), lo cual permitió una alta conversión de hidrógeno (alrededor de 99%), las variables de operación para cada equipo descrito por la Figura IV-10 se enlistan en la Tabla IV-5.

Tabla IV-5.-Especificaciones de los equipos del proceso.

Equipo	REACTOR
Tipo	CSTR
Presión (Mpa)	2.32
Temperatura (K)	1785
Carga de calor (Kw)	0
Tiempo de residencia (s)	1
Equipo	COMPRESOR
Presión de descarga (Mpa)	2.32
Eficiencia adiabática	0.9
Tipo	Isentrópico
Equipo	TURBINA
Presión de descarga (Mpa)	0.35
Eficiencia adiabática	0.9
Tipo	Isentrópico
Equipo	Intercambiador de calor
Caída de prasio (psi)	0.1
Temperatura (K)	913

Al proceso descrito por la Figura IV-10 se realizaron análisis de sensibilidad variando los flujos de alimentación de combustible y oxidante, para ello los flujos descritos en la Tabla III-9 que pertenecen al trabajo experimental de S. Kato y N. Nomura (1997) se tomaron como referencia con el fin de reproducir la curva de potencia respecto al flujo de aire en la admisión (Figura IV-9). Como resultado en la Tabla IV-6 se describen los flujos de combustible y oxidante usados en la simulación.

CAPITULO III: RESULTADOS



Tabla IV-6.-Flujos máxicos de hidrógeno y aire de la simulación en Aspen Plus V8.8.

Incremento -s de G _{air} (kg/h)	G _{Aire} (kg/h)	G _{H₂} (kg/h)	m _{F/A}	Incremento -tos de G _{air} (kg/h)	G _{Aire} (kg/h)	G _{H₂} (kg/h)	m _{F/A}
Primera sección				Tercera sección			
0	31	0.2170	0.0070	1	58	0.5470	0.0094
3	34	0.2170	0.0064	4	62	0.5770	0.0093
3	37	0.2170	0.0059	4	66	0.6070	0.0092
3	40	0.2170	0.0054	4	70	0.6370	0.0091
3	43	0.2170	0.0050	4	74	0.6670	0.0090
3	46	0.2170	0.0047	4	78	0.6970	0.0089
Segunda sección				Cuarta sección			
2	48	0.2670	0.0056	8	86	0.6971	0.0081
4	52	0.3170	0.0061	8	94	0.6972	0.0074
3	55	0.3670	0.0067	4	98	0.6970	0.0071
2	57	0.4170	0.0073				
0	57	0.4670	0.0082				
0	57	0.5170	0.0091				

En la Figura IV-12 se presentan las curvas en donde se comparan la relación combustible-aire ($m_{F/A}$) con respecto al flujo de aire en la admisión (G_{aire}), empleados por S. Kato y N. Nomura (1997) y en este trabajo de tesis. La mayor desviación en los valores de $m_{F/A}$ se presenta en los intervalos de 35-45 kg/h y 65-80 kg/h en el flujo máxico de aire, lo que significa que en la sección I necesitamos menos cantidad de combustible en nuestro proceso para obtener una potencia similar a la del trabajo reportado por S. Kato & N. Nomura (1997). Por el contrario, en la sección III y IV necesitamos una mayor cantidad de combustible.

Finalmente en la Figura IV-11 se muestra la potencia generada en la turbina respecto al flujo de aire en la admisión del compresor en la simulación en Aspen Plus del proceso descrito por la Figura IV-10 y los resultados presentados en el trabajo experimental reportado por S. Kato & N. Nomura (1997). Los resultados de la simulación presentan una correlación de $R^2=96.45\%$ respecto a los datos experimentales.

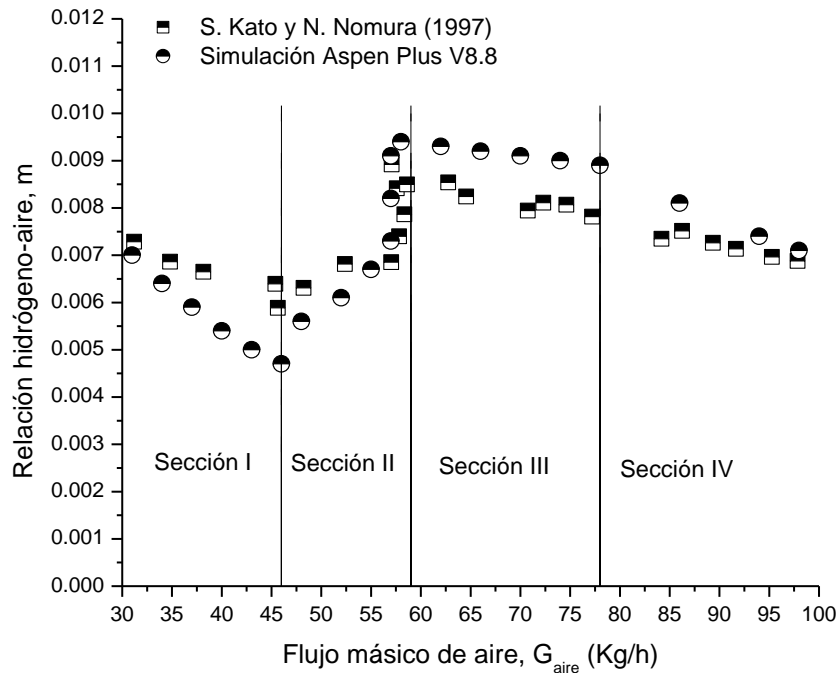


Figura IV-12.- Relación hidrógeno-aire con respecto al flujo de aire, para los flujos originales y modificados en cada sección.

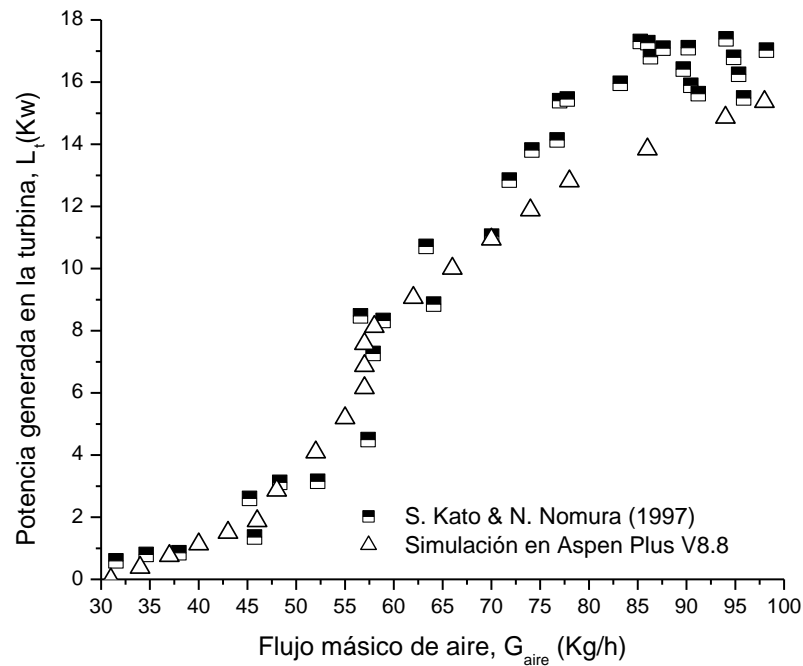


Figura IV-11.- Potencia generada en la turbina respecto al flujo de aire en la admisión para el trabajo experimental reportado por S. Kato & N. Nomura (1997) y los datos obtenidos mediante simulación en Aspen Plus V8.8

CAPITULO III: RESULTADOS



Posteriormente se calculó la eficiencia termodinámica del proceso para cada flujo de aire y combustible empleando la Ec. II-15; el flujo que corresponde a 58 kg/h de aire y 0.547 kg/h de hidrógeno presenta la mayor eficiencia termodinámica con un valor de 45.12 %. Tomando como optimo este flujo de aire y combustible la potencia total del proceso (W_t) que se define como la potencia producida en la turbina menos la potencia requerida por el compresor es de 6.37 KW; los datos de temperatura, presión, flujo y composición para todas las corrientes de la Figura IV-10 se enlistan en la Tabla IV-7.

Tabla IV-7.- Datos de las corrientes de proceso descrito por la Figura IV-10.

Corriente	Unidades	FUEL	MX1	OXIDER	C1
Variable					
Temperatura	K	298	298	298	298
Presión	Mpa	0.5	0.49	0.1013	0.1013
Fracción vapor		1	1	1	1
Flujo másico	Kg/h	0.5470	0.5470	58	58.5470
Flujo molar	Kmol/h	0.2713	0.2713	2.0104	2.2817
Fracción molar					
H_2		1	1	0	1.19E-01
O_2		0	0	0.21	1.85E-01
N_2		0	0	0.79	6.96E-01
H_2O		0	0	0	0.00E+00
NO_2		0	0	0	0.00E+00

CAPITULO III: RESULTADOS



Tabla III-7.- Continuación

Corriente	Unidades	C2	RX1	RX2	SAL-TUR
Variable					
Temperatura	K	759	913	1785	1085
Presión	Mpa	2.32	2.32	2.32	0.35
Fracción vapor		1	1	1	1
Flujo másico	Kg/h	58.5470	58.5470	58.5470	58.5470
Flujo molar	Kmol/h	2.2817	2.2817	2.1460	2.1460
Fracción molar					
H_2		1.19E-01	1.19E-01	9.36E-07	9.36E-07
O_2		1.85E-01	1.85E-01	1.33E-01	1.33E-01
N_2		6.96E-01	6.96E-01	7.40E-01	7.40E-01
H_2O		0.00E+00	0.00E+00	1.26E-01	1.26E-01
NO_2		0.00E+00	0.00E+00	3.03E-05	3.03E-05

4.3 Modelo termodinámico

De los métodos termodinámicos disponibles, las ecuaciones de estado (equations of state) fueron desarrolladas inicialmente para mezclas de hidrocarburos y gases ligeros. Además las EOS son recomendables para modelar la no idealidad en fase gas en un rango amplio de presión y temperatura como se muestra en la Tabla II-4 (Dimian, 2003).

Considerando que las mezclas empleadas en este trabajo de tesis constan principalmente de hidrocarburos y que se trabaja a altos valores de presión y temperatura la EOS seleccionado para el cálculo de propiedades requeridas en cada etapa del proceso fue Peng-Robinson, la cual es recomendado para aplicaciones de procesamiento de mezclas no polares o levemente polares tales como hidrocarburos y que además describe de manera adecuada el comportamiento de gases ligeros como CO_2 e H_2 (Aspen Plus V8.8).

4.4 Simulación del ciclo de potencia base.

Tras la validación de la simulación con los modelos y datos cinéticos que describen la combustión de combustibles convencionales e hidrógeno, se desarrolla el diagrama de flujo del ciclo de potencia preliminar mostrado en la Figura IV-13 para realizar la simulación, tomando como caso base el sistema descrito por S. Kato y N. Nomura (1997). Con lo cual se realiza el análisis energético y de emisiones para los mismos flujos propuestos en el caso base (Tabla IV-6) empleando como combustible: (1) hidrógeno, (2) metano, y (3) propano; en la Figura IV-14 se muestra el diagrama de proceso empleando como combustible, (4) metano-hidrógeno y (5) propano-hidrógeno. Las variables de operación de C-1, E-1 y T-1 fueron las mismas para cada caso en donde, de acuerdo al caso base se varió ϕ y el flujo total de trabajo. En la cámara de combustión, el tipo de reactor y las características del catalizador se establecieron conforme al tipo de combustible empleado y modelo cinético característico de acuerdo a la metodología descrita previamente.

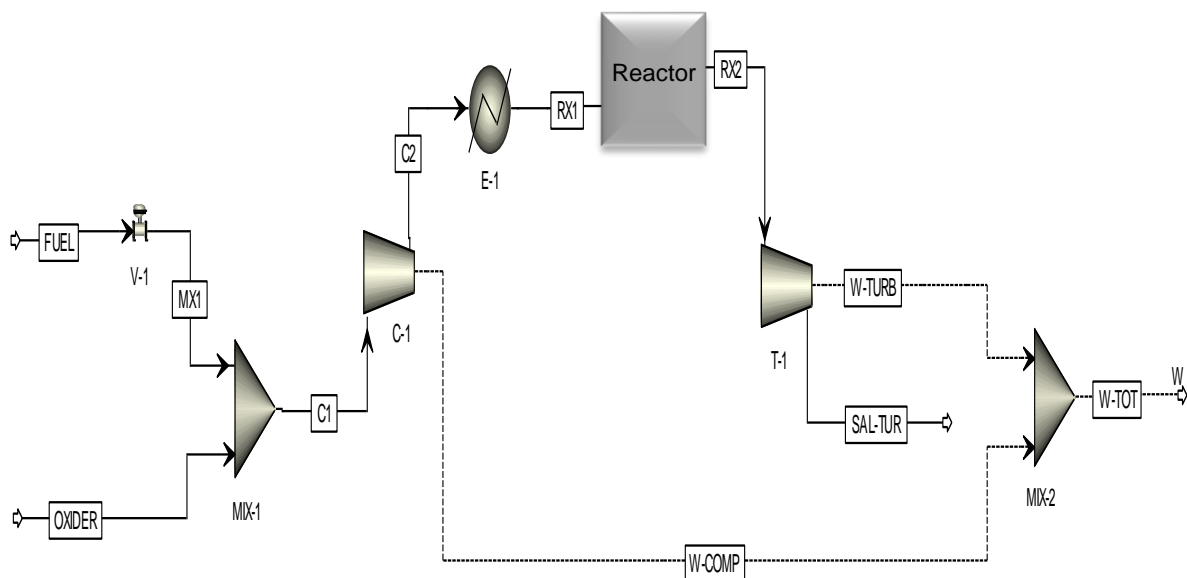


Figura IV-13.- Diagrama de ciclo de potencia para el análisis energético y de emisiones.

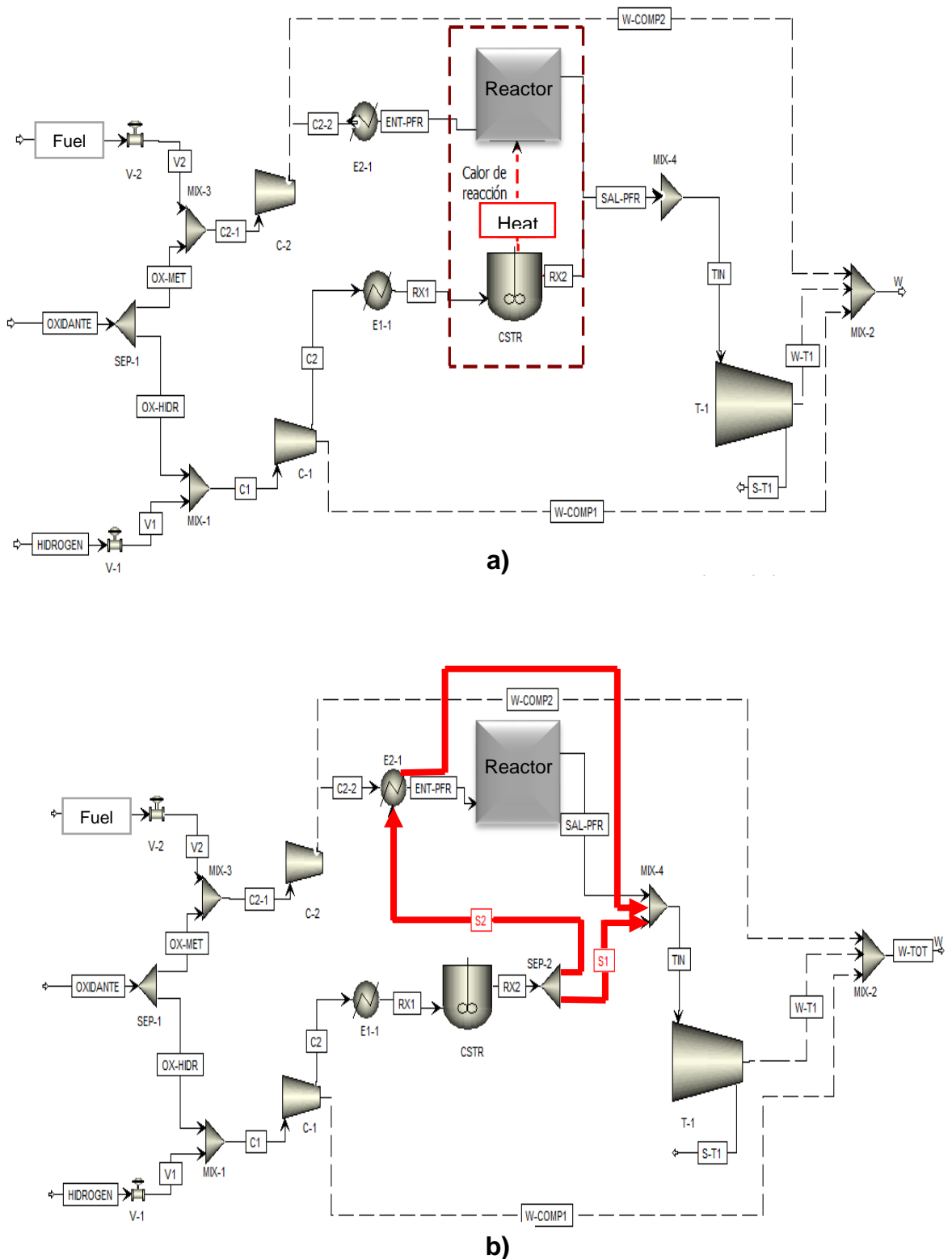


Figura IV-14.-Esquema del ciclo de potencia empleando hidrógeno-metano e hidrógeno-propano como combustibles considerando a) alimentación conjunta y b) modo de intercambio.

CAPITULO III: RESULTADOS



La combustión del hidrógeno puede emplearse para encender mezclas de combustible y aire, debido a que la temperatura de combustión del hidrogeno es más alta en comparación con la combustión de combustibles como metano y propano, lo que se conoce como combustión o ignición asistida (Chen, y otros, 2015). Dentro de los diferentes procedimientos para llevar a cabo la ignición se distinguen:

1.- Alimentación conjunta: En este método la alimentación de hidrógeno, combustible y aire, sucede de manera simultánea hasta lograr el encendido del combustible, después de este punto el flujo de hidrógeno es suspendido mientras que los flujos de combustible y aire son aumentados hasta lograr una velocidad de flujo total constante.

2.- Modo de intercambio: En este método es precalentado el sistema de reacción usando la combustión del hidrógeno hasta alcanzar la temperatura de ignición del combustible momento en el cual es alimentado el combustible al proceso y se cierra la alimentación de hidrógeno. La alimentación del combustible puede ser aumentado hasta alcanzar un flujo constante deseado.

En la Figura IV-14 a) y b), se describe el diagrama de proceso empleado para la combustión asistida de metano y propano en un ciclo de potencia.

En la Figura IV-15 se puede observar la potencia generada en T-1 para cada combustible, como se puede apreciar al utilizar hidrógeno puro como combustible los resultados de la simulación se aproximan a los datos experimentales reportados por S. Kato y N. Nomura (1997). En comparación con el metano y propano, el hidrógeno presentó un mejor desempeño en la turbina cuando se empleó un flujo mayor a 58 Kg/h de aire correspondiente a un $m_{F/A}$ de 0.00943 y a un ϕ de 0.3230, esto ocurre debido a que el exceso de aire, aumenta la cantidad de oxígeno disponible en el reactor favoreciendo el proceso de combustión al igual que y la presencia de una mayor cantidad de combustible.

Al usar metano y propano con hidrógeno en una proporción de hasta el 30 % es poco evidente el efecto del hidrógeno en la potencia de la turbina, sin embargo,

CAPITULO III: RESULTADOS



se observa un ligero incremento (punto de inflexión) en la trayectoria que describen los resultados de la simulación cuando el flujo de alimentación del aire es mayor a 58 Kg/h. El efecto del hidrogeno en la potencia se evidencia cuando se maneja 80% en mol.

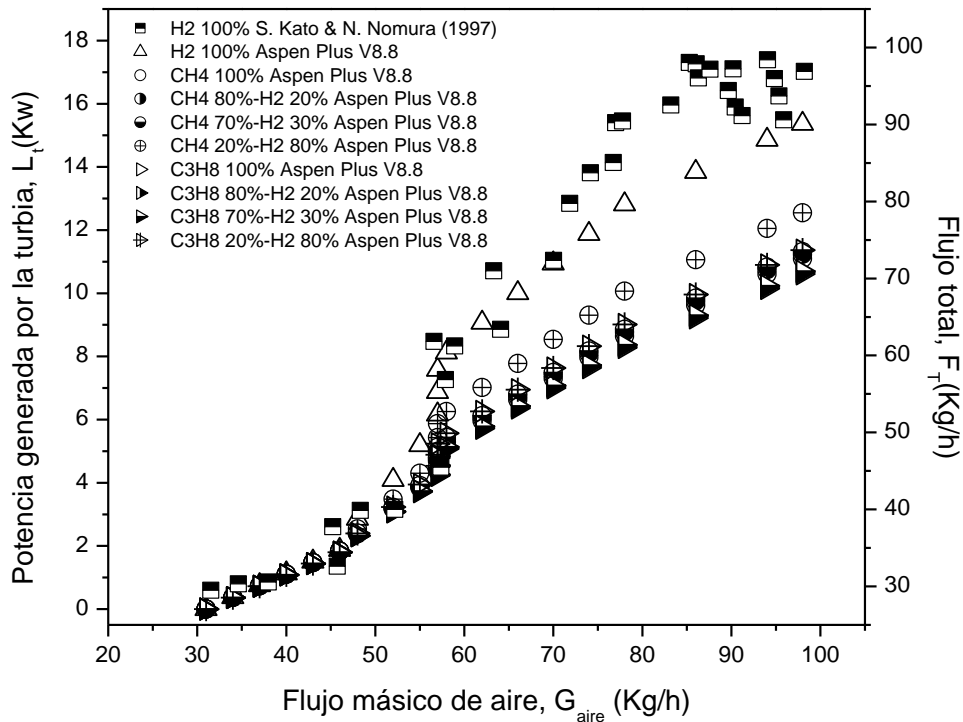


Figura IV-15.- Potencia generada en la turbina respecto al flujo de aire en la admisión para el ciclo de potencia usando hidrogeno, combustibles convencionales y sus mezclas.

Tanto el propano como el metano son los principales componentes del gas natural, este presenta un incremento en la eficiencia de combustión cuando se tiene aproximadamente un 10% de exceso de aire, no obstante, estos combustibles presentan una reducción en la energía necesaria para la ignición cuando se logran valores de $\phi > 1$ (mezcla rica en combustible) a diferencia del requerido cuando se emplea como combustible hidrógeno que requiere valores de $\phi < 1$ (mezcla rica en oxidante), esto concuerda con los reportado en la literatura como se observa en la Figura IV-16.

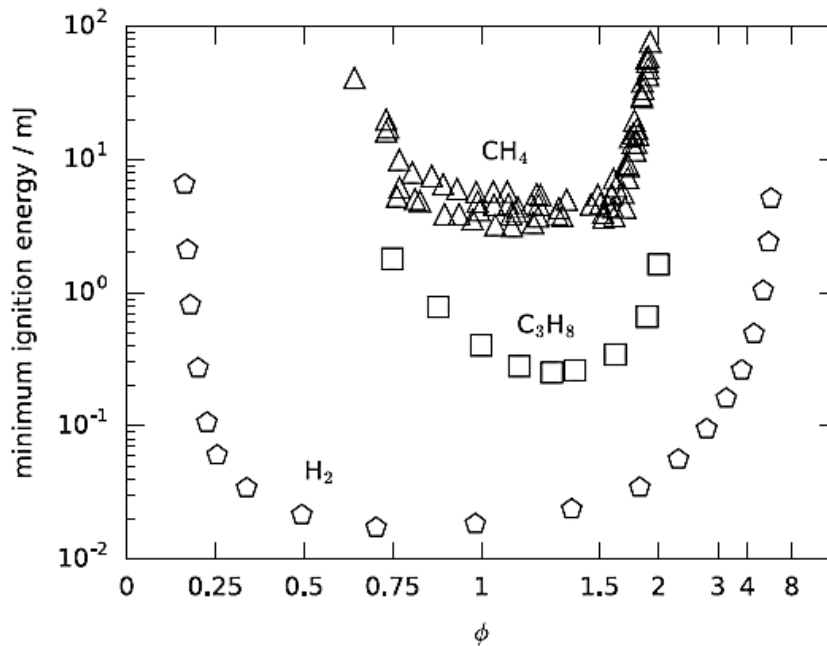


Figura IV-16.- Energía mínima de ignición en función de la relación equivalente para mezclas hidrógeno/aire, propano/aire y metano/aire (Häber, y otros, 2017)

El efecto de ϕ en la reacción de combustión también se ve reflejado en la temperatura de los gases de descarga del reactor (Figura IV-17), como consecuencia de la variación en la eficiencia de la combustión.

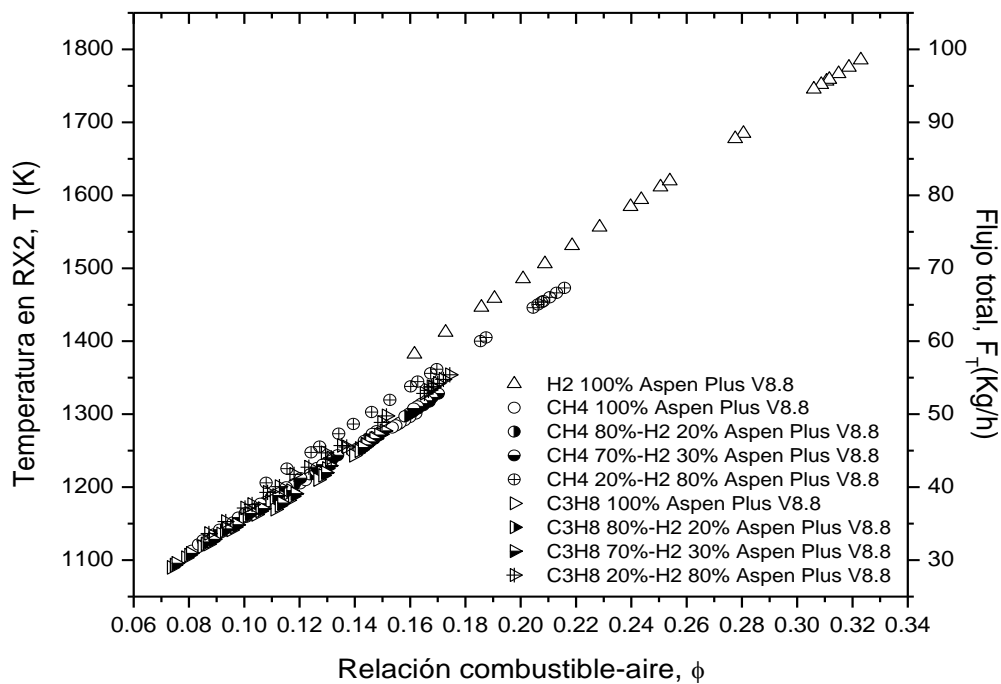


Figura IV-17.- Temperatura a la salida de la cámara de combustión respecto a la relación combustible-aire.

CAPITULO III: RESULTADOS



En la Figura IV-17 se observa que cuando se emplea hidrógeno como combustible o adicionado al metano y propano la temperatura alcanzada en la salida de la cámara de combustión es superior en comparación con la obtenida por los combustibles convencionales puros, esto se debe a:

1.- La diferencia en la estequiometría de cada combustible, otorga al hidrógeno la relación estequiométrica combustible-aire más pequeña en comparación con la del metano y propano, por lo que a mismos flujos el valor ϕ en el hidrógeno es siempre mayor respecto a la del metano y propano, por lo que la eficiencia en la combustión de metano y propano es menor en comparación con la del hidrógeno en el intervalo de ϕ analizado.

2.- Así mismo, la masa en la corriente de proceso que actúa como vector energético es menor cuando se emplea hidrógeno (se necesita menor cantidad de combustible por cada parte unitaria de aire) permitiendo un mayor incremento térmico durante la reacción es decir:

$$Q_{RX} = \dot{m} \cdot C_p (T_{RX2} - T_{RX1}) \quad \text{Ec. IV-2}$$

Entonces:

$$T_{RX2} = \frac{Q_{RX}}{\dot{m} \cdot C_p} + T_{RX1} \quad \text{Ec. IV-3}$$

Como se observa en la Ec. IV-3 al disminuir el flujo másico se incrementa la temperatura de los gases de combustión.

3.- Para un mismo flujo combustible-aire, el calor generado en el reactor es mayor cuando se emplea hidrógeno ($\Delta H_{rx}=120$ MJ/kg) en comparación con la generada cuando se emplea metano ($\Delta H_{rx}=50$ MJ/kg) y/o propano ($\Delta H_{rx}=46.4$ MJ/kg).

CAPITULO III: RESULTADOS



Con respecto a la eficiencia del ciclo de potencia (η_{th}), el empleo de hidrogeno como combustible tiene un efecto positivo tal como se observa en la Figura IV-18. En la Figura IV-18 se muestra la eficiencia del ciclo de potencia, en la cual se evidencia que el uso de hidrógeno como combustible puro o combinado se tiene un incremento en eficiencia en relación a los combustibles convencionales. Este resultado es consistente con lo reportado en la literatura.

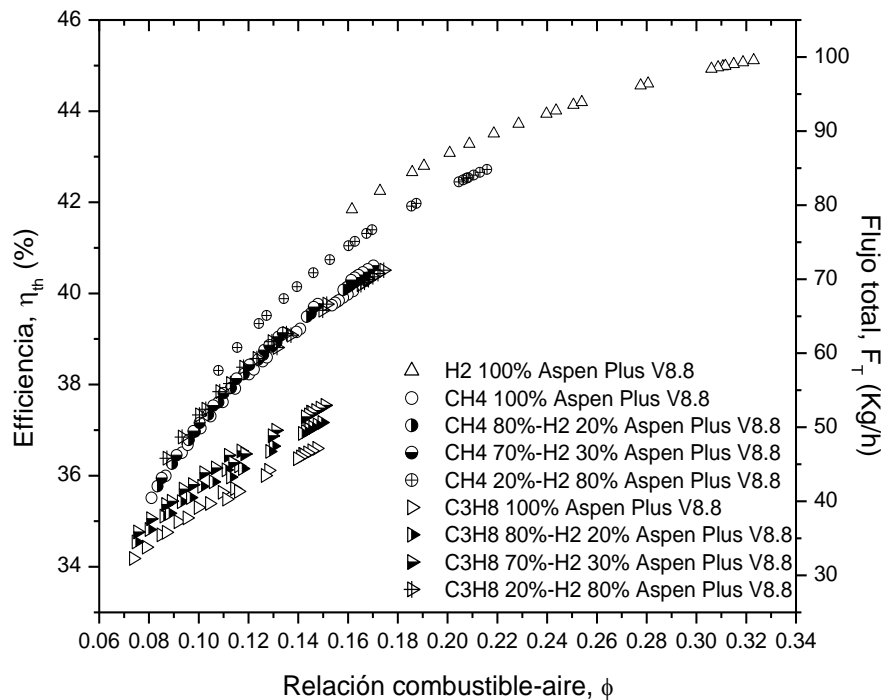


Figura IV-18.-Eficiencia calculada para el ciclo de potencia respecto a la relación combustible-aire.

Tras el análisis en la Tabla IV-8 se resumen los valores máximos obtenidos de las variables analizadas en el ciclo de potencia que corresponden a cada tipo de combustible utilizado y en la Figura IV-19 se muestra la variación de a) el trabajo total del ciclo de potencia, b) las emisiones de CO_2 , c) las emisiones de NO_2 mientras que en la Figura IV-20 se observa d) la potencia de la turbina, e) la eficiencia termodinámica y f) la temperatura de la cámara de combustión, manteniendo un mismo flujo de combustible y aire para todos los casos. Se puede observar que el hidrógeno tiene ventaja respecto a los combustibles convencionales en cuanto a potencia, trabajo total, temperatura de la cámara de combustión, aunado al hecho de que no produce emisiones de CO_2 ; a diferencia

CAPITULO III: RESULTADOS



de las emisiones de NO_2 las cuales tienden a aumentar con el aumento en el contenido de hidrógeno.

Tabla IV-8.- Valores máximos de las variables analizadas en el ciclo de potencia

Combustible	L_i (Kw)	W_T (Kw)	η_{th} (%)	T_{RX2} (K)	NO_2 (Kg / Kwh)	CO_2 (Kg / Kwh)
H_2	15.37	8.093	45.12	1785.24	0.0001979	0
CH_4	11.10	3.19	40.05	1300.89	0.0001607	0.1440
$\text{CH}_4 - 80\%$	11.23	3.35	40.39	1317.03	0.0001633	0.1376
$\text{CH}_4 - 70\%$	11.32	3.45	40.61	1327.91	0.0001650	0.1334
$\text{CH}_4 - 20\%$	14.03	3.85	42.72	1472.97	0.0001833	0.0829
C_3H_8	10.61	2.85	36.60	1266.12	0.0001567	0.1579
$\text{C}_3\text{H}_8 - 80\%$	10.66	2.91	37.17	1272.57	0.0001578	0.1552
$\text{C}_3\text{H}_8 - 70\%$	10.69	2.95	37.54	1277.08	0.0001586	0.1534
$\text{C}_3\text{H}_8 - 20\%$	12.76	3.69	40.50	1353.93	0.0001705	0.1238

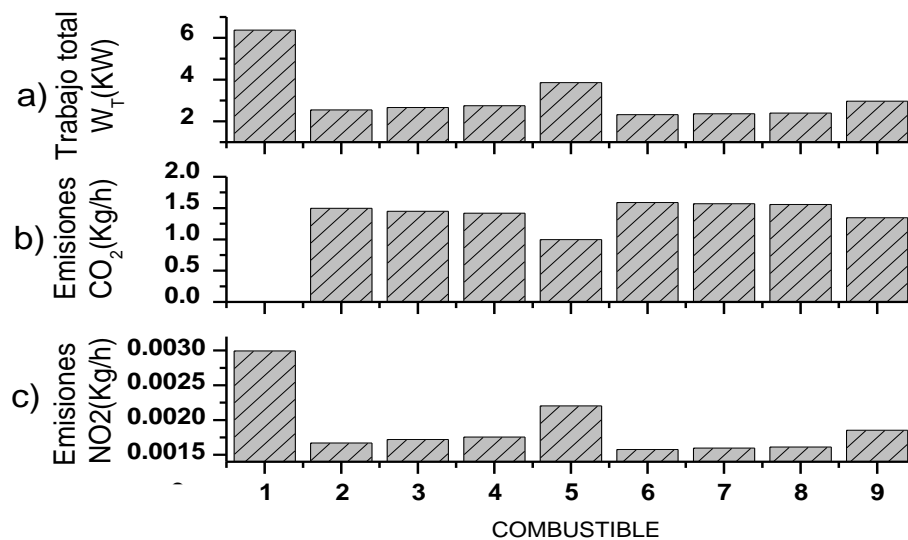


Figura IV-19.- Graficas comparativas que describen a) el trabajo total, b) las emisiones de CO_2 , c) las emisiones de NO_2 . Para los diferentes combustibles (1= H_2 , 2= CH_4 , 3= $\text{CH}_4 - 80\%$, 4= $\text{CH}_4 - 70\%$, 5= $\text{CH}_4 - 20\%$, 6= C_3H_8 , 7= $\text{C}_3\text{H}_8 - 80\%$, 8= $\text{C}_3\text{H}_8 - 70\%$, 9= $\text{C}_3\text{H}_8 - 20\%$)

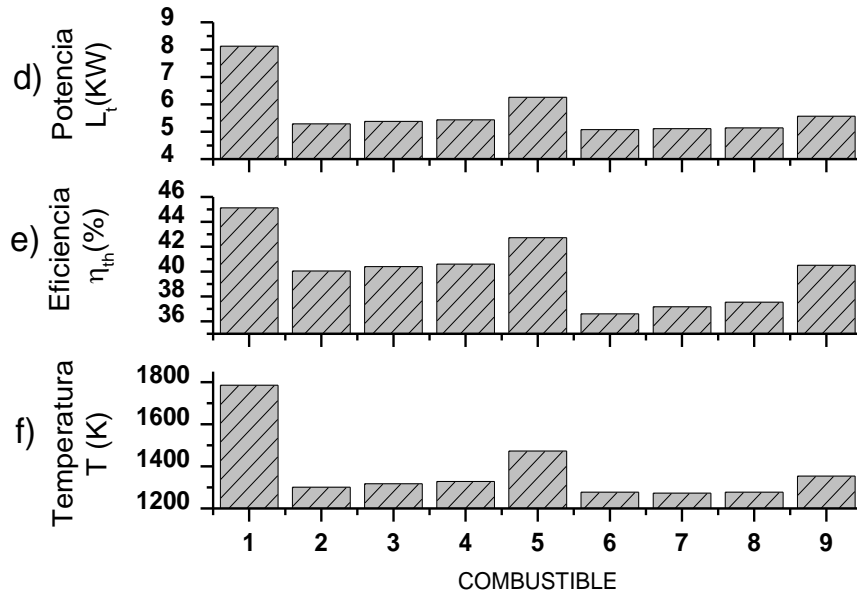


Figura IV-20.-Graficas comparativas que describen d) la potencia obtenida en la turbina, e) la eficiencia termodinámica y d) la temperatura del combustor. Para los diferentes combustibles (1=H2, 2=CH4, 3=CH4-80%, 4=CH4-70%, 5=CH4-20%, 6=C3H8, 7=C3H8-80%, 8=C3H8-70%, 9=C3H8-20%)

4.5 Análisis paramétrico del ciclo de potencia.

El análisis anterior se realizó empleando los flujos propuestos por S. Kato y N. Nomura (1997), en donde se observa el empleo de $\phi < 1$, limitando la eficiencia del proceso de combustión principalmente para el metano y propano. Por lo que para el análisis paramétrico se decide incrementar el rango de $0 < \phi < 1.3$ manteniendo el flujo total de trabajo constante. Variando la relación combustible-aire se realiza el análisis de los parámetros: L_t , W_T , T_{RX} , η_{th} , NO_x , CO_2 .

En la Figura IV-21 se muestra que la potencia generada en la turbina al emplear hidrógeno es superior a la obtenida con los combustibles convencionales teniendo un valor máximo de 28.73 kW a diferencia del metano con un valor máximo de 23.85 kW y del propano con un valor máximo de 23.49 kW.

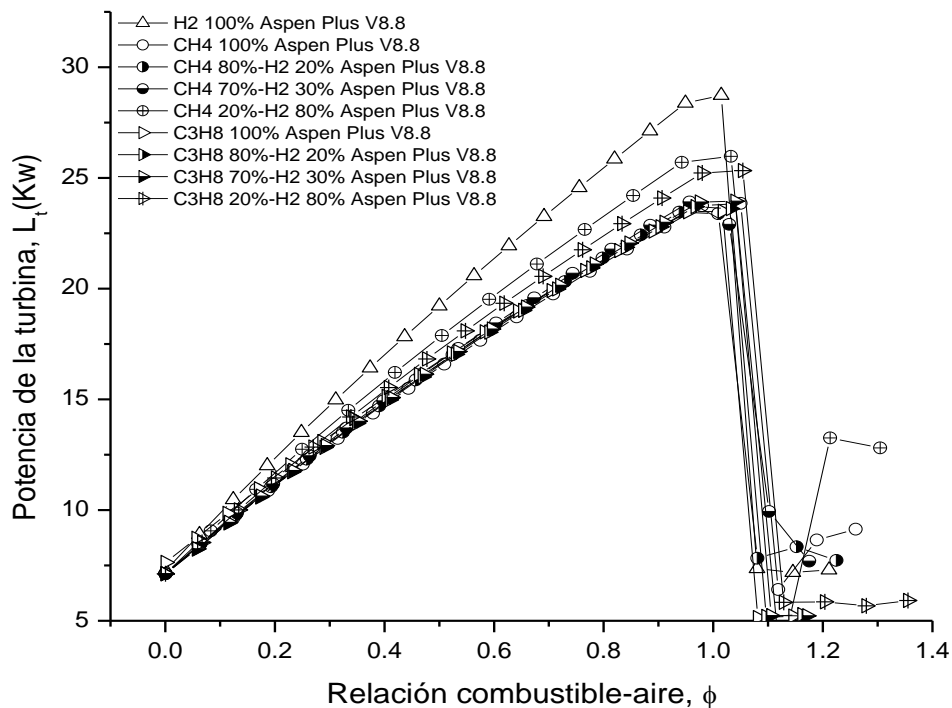


Figura IV-21.- Potencia generada en la turbina respecto a la relación combustible-aire manteniendo el flujo total constante.

A relaciones combustible-aire superiores al valor estequiométrico ($\phi = 1$) la potencia disminuye drásticamente provocando que el trabajo total del proceso también disminuya. Lo cual se refleja en el trabajo total útil del ciclo de potencia

CAPITULO III: RESULTADOS



mostrado en la Figura IV-22 en donde inclusive se observa que W_T es negativo, ello implica que el compresor realiza más trabajo de lo que la turbina produce.

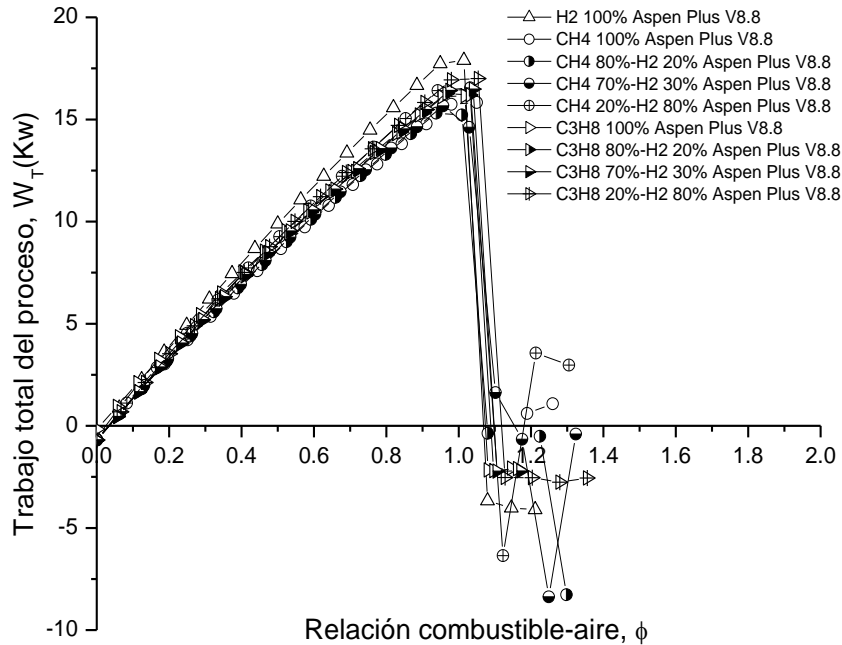


Figura IV-22.- Trabajo total del proceso respecto a la relación combustible-aire para los diferentes combustibles manteniendo un flujo de alimentación.

En la Figura IV-21 se observa una reducción en la potencia generada por la turbina, esto es debido a que, al aumentar el flujo del combustible, manteniendo el flujo de trabajo constante, se reduce la cantidad de oxígeno disponible para la combustión reduciendo la eficiencia de la reacción. Lo que conlleva a una reducción de la temperatura en los gases de salida del reactor como se muestra en la Figura IV-23. No obstante, la temperatura máxima alcanzada por el hidrógeno (2953 K) con un valor de la relación combustible-aire de 0.94 es superior a la obtenida por el metano (2767 K) con un valor de la relación combustible-aire de 0.97 y por el propano (2804.4 K) con un valor de la relación combustible-aire de 0.95. Estos valores máximos corresponden a flujos de combustible de 1.58 Kg/h, 3.15 Kg/h, y 3.38 Kg/h para hidrógeno, metano y propano respectivamente.

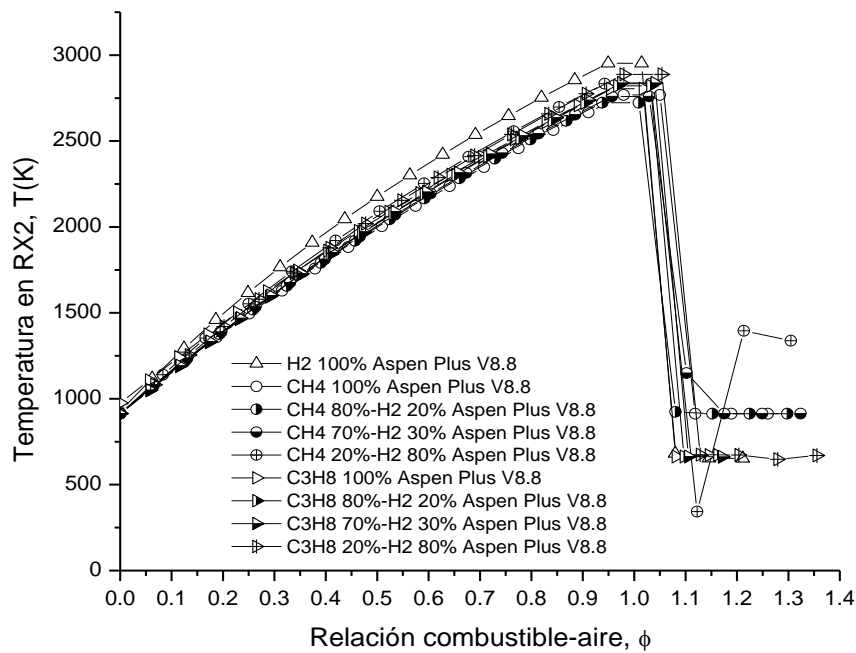


Figura IV-23.- Cambio en la temperatura respecto a la relación combustible-aire para los diferentes combustibles manteniendo un flujo constante de alimentación.

Este comportamiento es consistente con lo reportado en la literatura como se observa en la Figura IV-24 donde se muestra la temperatura de flama adiabática alcanzada por el metano en relación a ϕ (Glaude, y otros, 2014).

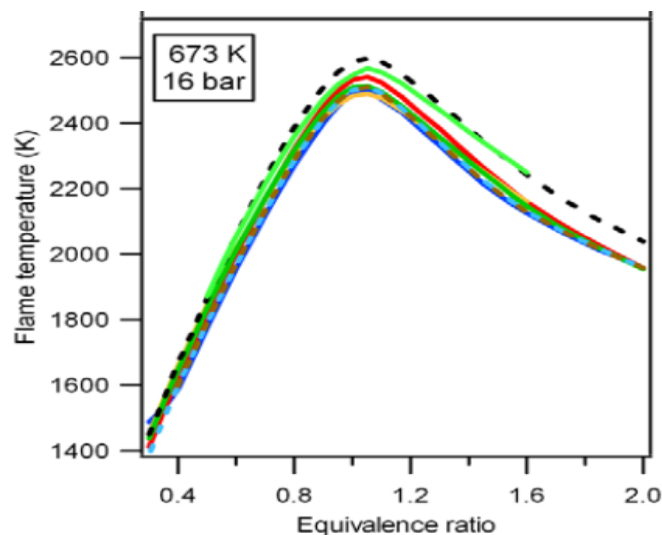


Figura IV-24.- Temperatura de la cámara de combustión en función de la relación equivalente ϕ al usar metano como combustible (Glaude, y otros, 2014).

CAPITULO III: RESULTADOS



Si analizamos el efecto de ϕ , manteniendo el flujo del combustible constante, variando la cantidad de oxidante en la alimentación el resultado se muestra en la Figura IV-25 donde se aprecia que a valores de $\phi > 1$ donde existe una mezcla pobre en oxidante, existe una reducción drástica de la temperatura en la cámara de combustión. Este comportamiento concuerda con lo reportado por (Baukal, Jr., 2000) como se observa en la Figura IV-26 que nos indica que la combustión se ve favorecida a concentraciones mayores de oxidante ($\phi < 1$).

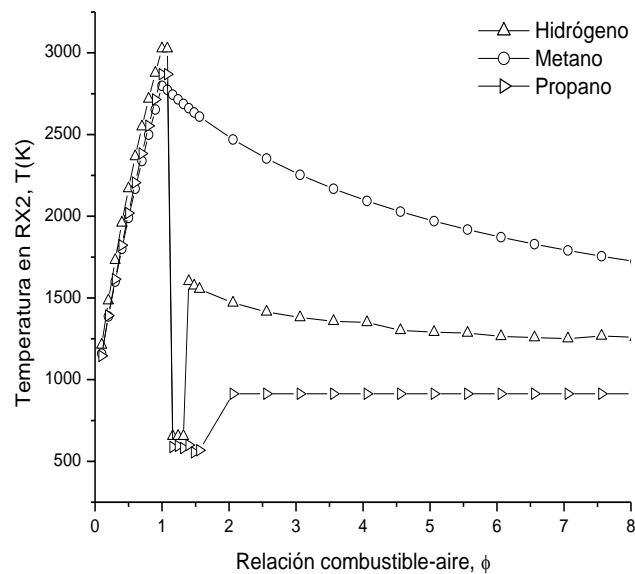


Figura IV-25.-Variación de la temperatura a la salida del reactor con respecto a ϕ manteniendo un flujo de combustible constante.

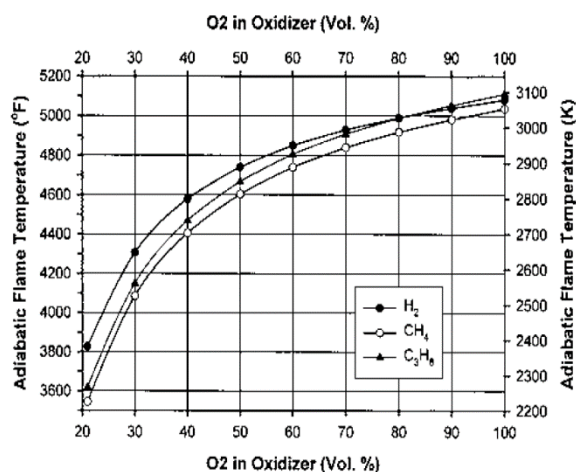


Figura IV-26.-Temperatura de flama adiabática contra la composición del oxidante para flamas adiabáticas en equilibrio estequiométrico para aire/H₂, aire/CH₄ y aire/C₃H₈ (Baukal, Jr., 2000).

CAPITULO III: RESULTADOS



Como consecuencia del descenso drástico de la temperatura a la cual salen los gases de combustión después del valor estequiométrico de la relación aire-combustible, el valor de la eficiencia también se reduce como se puede apreciar en la Figura IV-27 no obstante para valores de ϕ menores al estequiométrico el valor de la eficiencia permanece estable. También se distingue claramente que el hidrógeno arroja los valores más altos de eficiencia seguido del metano y propano y se percibe un aumento para los flujos con mayor contenido de hidrógeno en la mezcla.

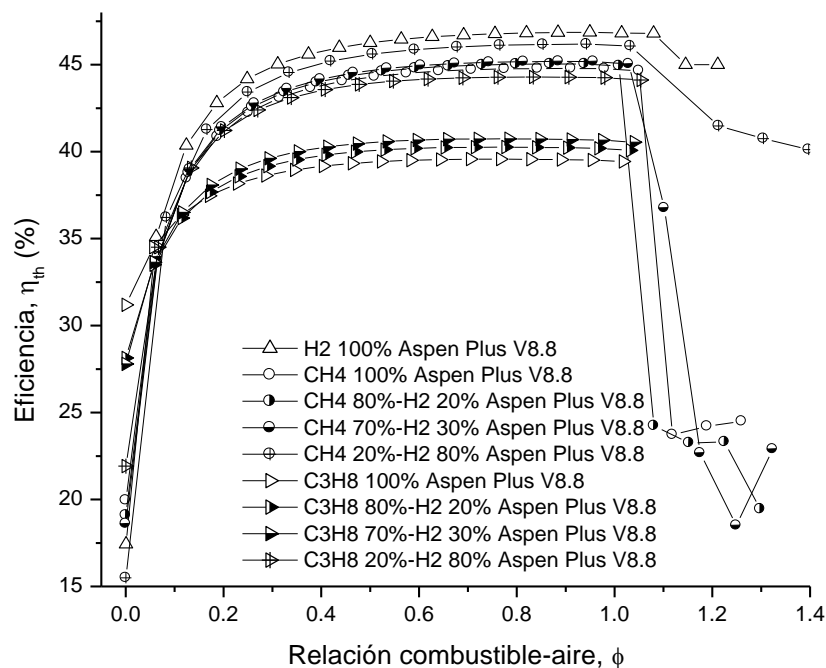


Figura IV-27.-Variación de la eficiencia termodinámica para cada combustible a un flujo constante de alimentación.

El incremento en la eficiencia del ciclo de potencia como consecuencia del incremento térmico en la cámara de combustión al usar hidrógeno como combustible, da como consecuencia el incremento en las emisiones de NO_x , esto se puede apreciar en la Figura IV-28 donde se muestra la producción de NO_x respecto a ϕ . Como se observa al incrementarse ϕ las emisiones de NO_x presentan un aumento, aunado a las altas temperaturas alcanzadas por el hidrógeno.

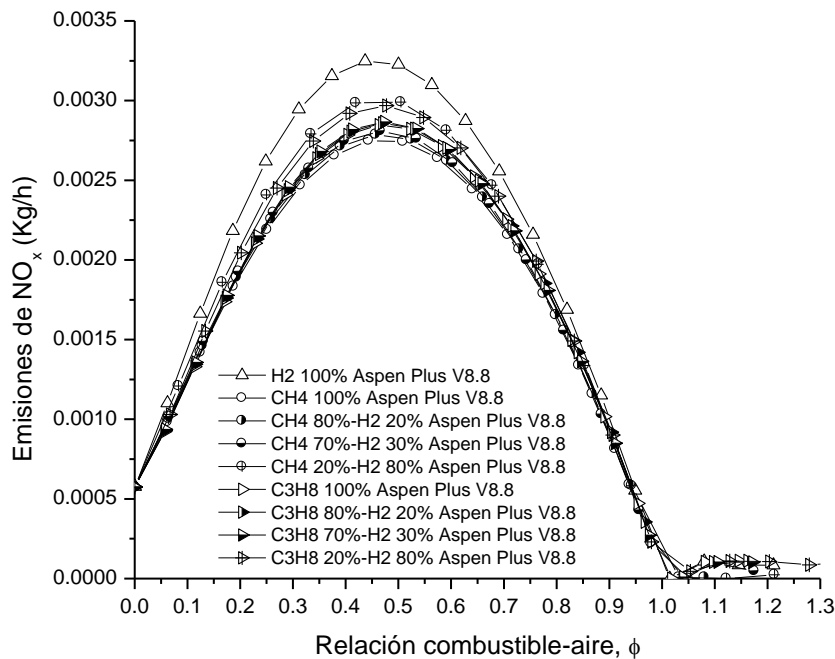


Figura IV-28.-Flujo másico de NO_x respecto a la relación combustible-aire con un flujo de alimentación constante.

Aunque para este proceso la producción de NO_x no es significativa se llega a apreciar que al utilizar hidrógeno como combustible las emisiones de NO_x son superiores (flujo máximo de 0.00325 Kg/h en un valor de $\phi = 0.437$) en comparación con las obtenidas al emplear metano (flujo máximo de 0.00275 Kg/h en un valor de $\phi = 0.444$) y propano (flujo máximo de 0.00285 Kg/h en un valor de $\phi = 0.463$), como es de esperarse tal y como ocurre con la temperatura la emisión de NO_x aumenta conforme aumenta el contenido de hidrógeno en la mezcla.

El comportamiento de las curvas descritas en la Figura IV-28 para metano y propano son consistentes con lo reportado en la literatura como se observa en la Figura IV-29 donde se describe la relación de producción de NO_x respecto a ϕ para metano mientras que en la Figura IV-30 se presenta la emisión de NO_x para mezclas metano-aire y propano-aire (Casimir, y otros, 1980).

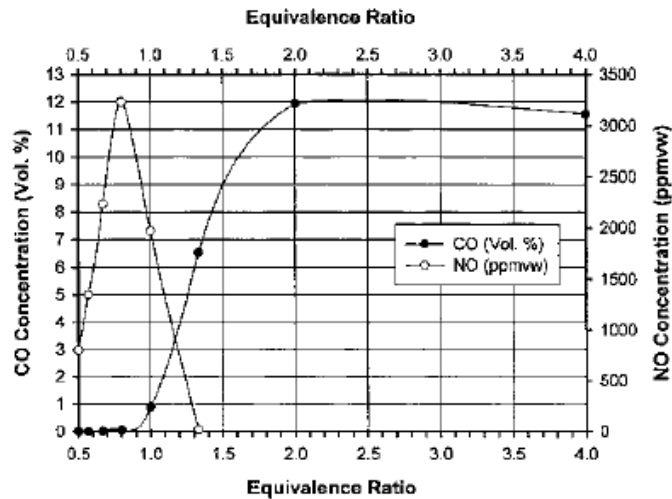


Figura IV-29.- Dependencia de NO y CO sobre la relación combustible-aire para mezclas aire-metano en equilibrio adiabático.

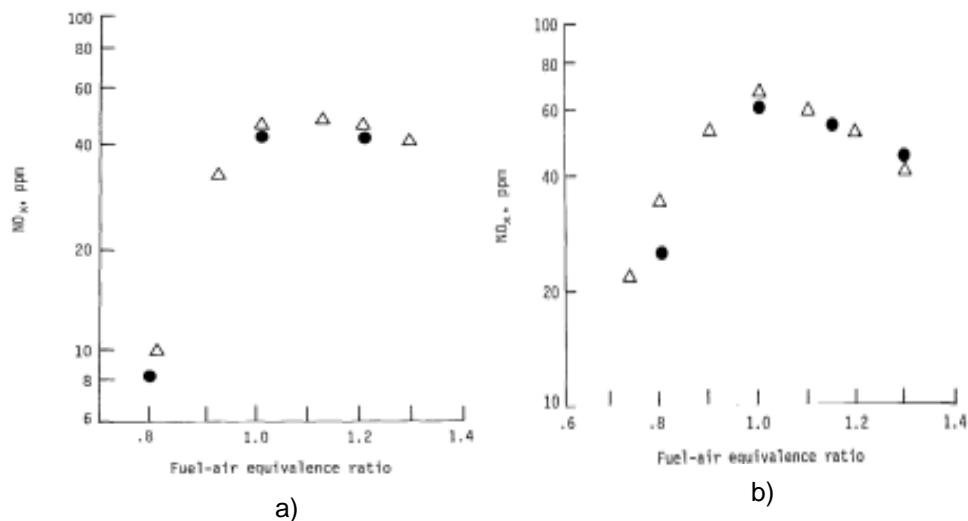


Figura IV-30.-Producción de NO_x respecto a ϕ para a) metano-aire y b) propano-aire (Casimir, y otros, 1980).

Un análisis similar respecto a la producción de CO₂ se muestra en la Figura IV-31. Puesto que en la estequiometria que describe la reacción de combustión de hidrógeno (Ec. III-11) no se generan emisiones de CO₂ en la Figura IV-31 se presenta la variación de las emisiones de CO₂ respecto a la relación combustible-aire para los flujos de combustibles convencionales puros y los enriquecidos con hidrógeno. Se puede apreciar que el combustible que genera una mayor cantidad de emisiones de CO₂ es el gas propano (C₃H₈) y se percibe que la reducción de emisiones de CO₂ con la adición de hidrógeno aumenta conforme aumenta el

CAPITULO III: RESULTADOS



valor de ϕ hasta 1, posterior a este valor se distingue un comportamiento similar al de las gráficas anteriores en el que las emisiones también descienden bruscamente.

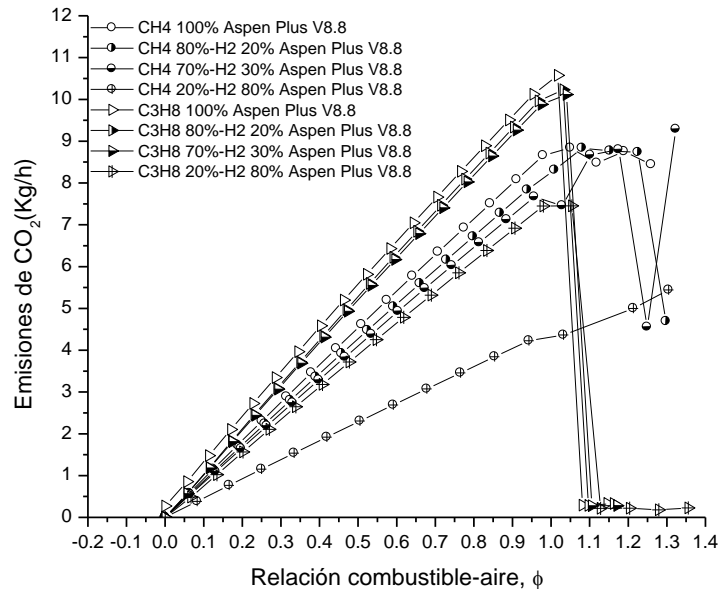


Figura IV-31.- Flujo de CO₂ producido por cada combustible, respecto a la relación combustible-aire.

La tendencia de las curvas presentes en la Figura IV-31 son consistentes con los datos reportados en la literatura como se muestra en la Figura IV-32 donde se presentan la concentración de las especies resultantes de una combustión en relación a ϕ (Heywood, 1988).

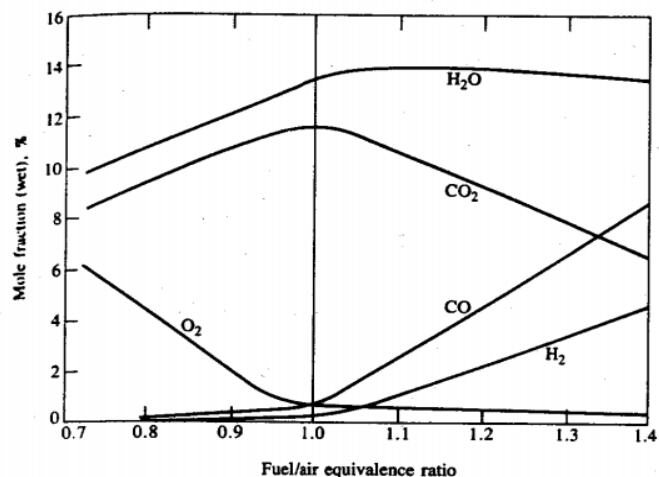


Figura IV-32.- Composición de los gases de combustión en función de ϕ (Heywood, 1988).

4.6 Reacción de combustión de hidrógeno limitada por el equilibrio termodinámico y por modelo cinético.

Se realizó una comparación del rendimiento energético obtenido cuando la reacción de combustión de hidrógeno se encuentra limitada por el equilibrio termodinámico y por el modelo cinético presentado por Marinov, y otros, (1995). Al igual que en el análisis anterior se varió la relación combustible-aire (ϕ) y como se observa en la Figura IV-33 se analiza: a) potencia generada en la turbina, b) trabajo total del proceso, c) temperatura a la salida de la cámara de combustión. La variación de los resultados para cada variable es mínima y se percibe que para el modelo cinético ocurre una caída brusca al llegar al valor estequiométrico de ϕ , mientras que en el equilibrio esa misma tendencia a bajar se desarrolla de manera uniforme.

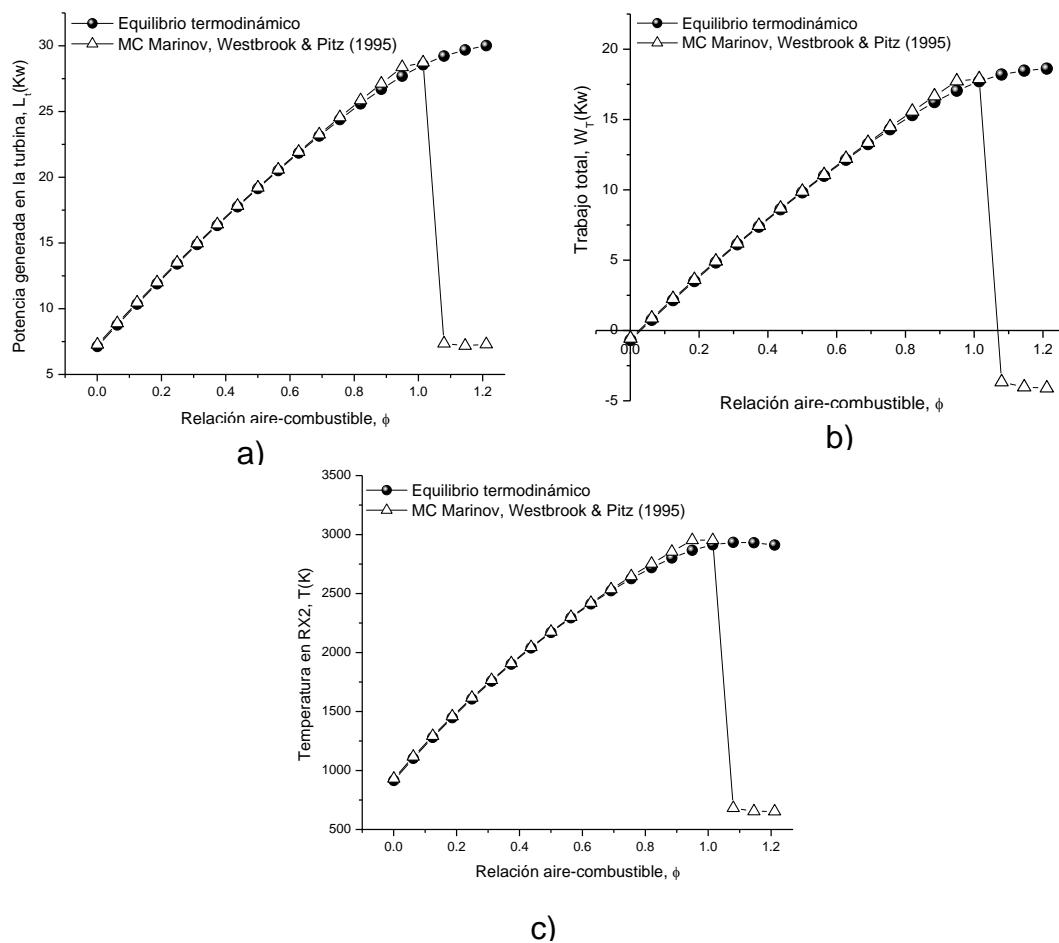


Figura IV-33.-Comparación de la reacción de combustión de hidrógeno limitada por el equilibrio y por modelo cinético para cada variable analizada.



4.7 Viabilidad técnica

La viabilidad técnica está estrechamente relacionada con el desarrollo continuo de nuevos materiales que sean capaces de soportar grandes temperaturas, resistencia a la corrosión, a la erosión entre otras propiedades. Para los ciclos de vapor convencionales los rangos de trabajo respecto a la temperatura van de 400 °C a 600 °C (673 K a 873 K) y respecto a la presión van de 20 bar a 300 bar (2 Mpa-30 Mpa), lo cual permite la expansión hasta una presión de 5 kPa (especificación de diseño para arreglos convencionales) y con una capacidad de producción de 45 kW a 1000 MW. En este trabajo de tesis se logra una temperatura de 768 K (495 °C) a la entrada de la turbina de vapor y una presión de operación de 2.32 Mpa, estas condiciones se encuentran dentro de los rangos permisibles. En este trabajo de tesis se propone el uso de acero inoxidable 422 que soporta temperaturas de hasta 650 °C (CENDI, 2002; P. Boyce, y otros, 2005; SIEMENS, 2009; Singh, y otros, 2011; Dick , 2015).

Por otra parte, en los ciclos de gas (turbinas de gas) son permisibles temperaturas de hasta 1426 °C (1699 K) a la entrada de la turbina y pueden generar potencias de 20 kW a 480 MW. En este trabajo de tesis la temperatura máxima se obtuvo en la cámara de combustión, la cual corresponde a 1386 °C (1659 K) empleando hidrógeno como combustible dicha condición no sobrepasa el límite térmico del material elegido (1728 K súper aleaciones a base de níquel). La potencia generada en la turbina de gas para este trabajo de tesis es de 99.23 kW. Para arreglos convencionales, las relaciones de presión en el compresor varían de 7:1 a 40:1, en este trabajo de tesis es de 23.2:1, para las diferentes combinaciones del combustible empleado. La cantidad de energía suministrada para la ignición del sistema depende principalmente de su naturaleza (composición), la relación de presión lograda en el compresor y la temperatura adiabática de compresión. Para diseños convencionales las temperaturas a la entrada de la cámara de combustión oscilan entre 454 °C y 649 °C (727 K-922 K). En este trabajo de tesis para obtener altas conversiones del sistema donde se empleó hidrógeno, la adición de energía antes del combustor fue determinante por lo que se acoplo un intercambiado de calor para facilitar la

CAPITULO III: RESULTADOS



ignición, aumentando la temperatura hasta un valor de 640 °C (913 K). Los materiales empleados para la fabricación de las cámaras de combustión, álabes de turbina y demás componentes de los sistemas convencionales, son aleaciones de níquel, cromo y cobalto. En el presente trabajo se optó por una súper aleación N-263 (Nimonic Alloy-263) (CENDI, 2002; P. Boyce, y otros, 2005; Dick , 2015).

El arreglo final del ciclo de potencia de este trabajo de tesis presentado en la Figura IV-34 realiza el acoplamiento de dos sistemas: 1) ciclo de vapor empleando la combustión de hidrogeno y 2) ciclo de gas empleando la combustión de metano cuyas variables de operación se encuentran dentro de los limites presentados anteriormente.

Usando la ecuación de Ergun para calcular la caída de presión dentro del reactor PFR se obtuvo un valor de 0.000115 MPa el cual se considera despreciable. La potencia efectiva generada en el proceso (Figura IV-34) fue de 45.30 kW. Utilizado la herramienta de estimación de costos se estimó el costo del proceso como se muestra en la Tabla IV-9.

Tabla IV-9.-Estimación de costos mediante Aspen Plus V8.8

Nombre	Costo
Costo total de capital [USD]	\$1,263,500.00
Costo total de operación (USD/año)	\$914,350.00
Costo del equipo [USD]	\$2,241,700.00
Costo total instalado [USD]	\$2,677,100.00

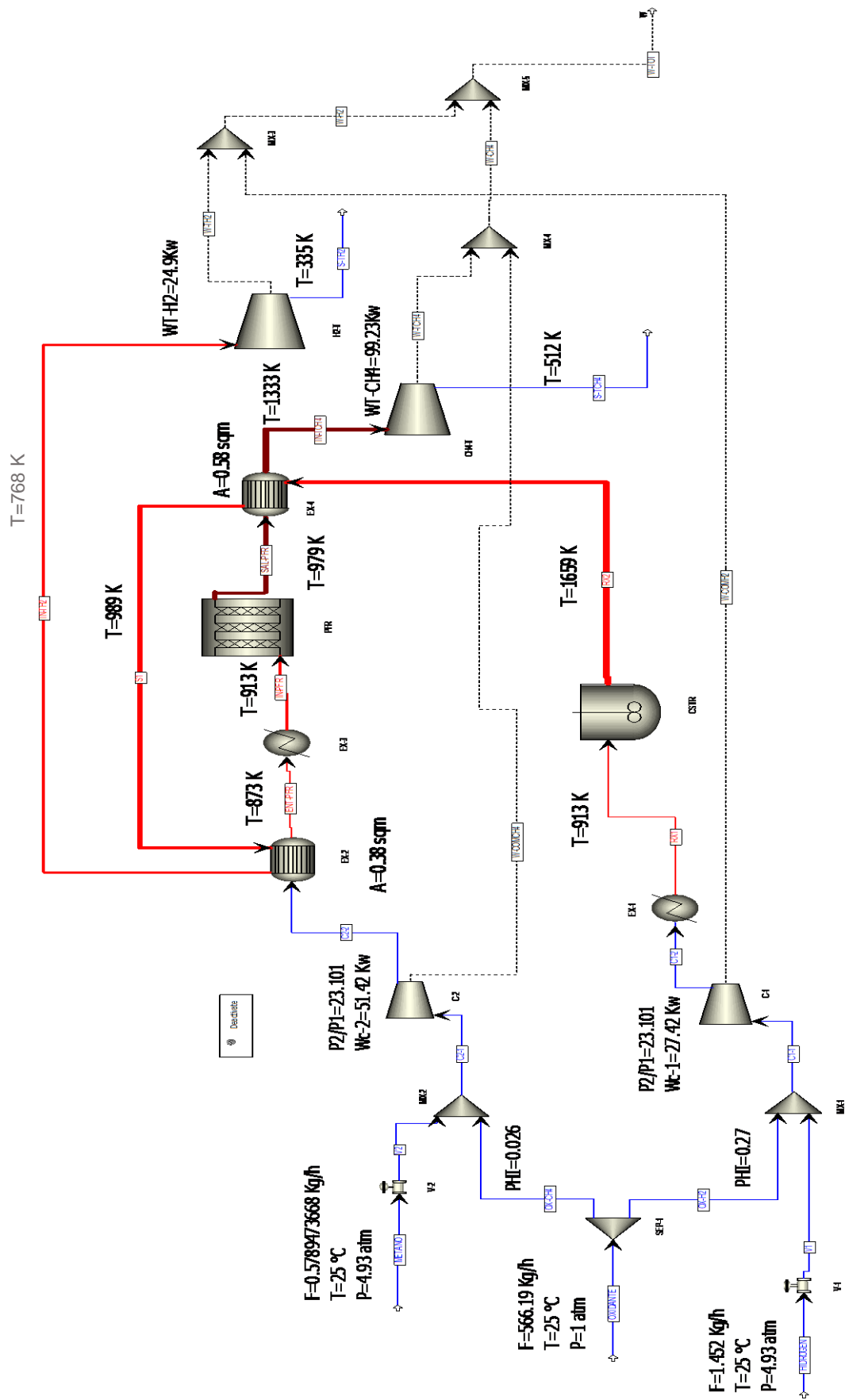


Figura IV-34.- Diagrama de ciclo de potencia propuesto para este trabajo de tesis donde es integrado el hidrógeno como combustible.

CAPITULO III: RESULTADOS



Tabla IV-10.-Características de los reactores empleados en el proceso.

Reactores del proceso		
Name	PFR	CSTR
Process stream property method	PENG-ROB	PENG-ROB
Process stream use true species approach for electrolytes	YES	YES
Process stream free-water phase properties method	STEAM-TA	STEAM-TA
Process stream water solubility method	3	3
Thermal fluid property method	PENG-ROB	-
Thermal fluid use true species approach for electrolytes	YES	-
Thermal fluid free-water phase properties method	STEAM-TA	-
Thermal fluid water solubility method	3	-
Reactor dimensions length [meter]	0.7530	-
Reactor dimensions diameter [meter]	0.2510	-
Pressure at reactor inlet: process stream [bar]	0	-
Heat duty [Gcal/hr]	0	-
Minimum reactor temperature [C]	640.0000	-
Maximum reactor temperature [C]	705.8699	-
Residence time [hr]	0.0003	0.0003
Total feed stream CO2e flow [kg/hr]	14.4737	0
Total product stream CO2e flow [kg/hr]	1.5882	0
Net stream CO2e production [kg/hr]	-12.8855	0
Specified pressure [MPa]	-	0
Specified temperature [K]	-	1687.1500
Specified heat duty [kW]	-	0
Reactor volume [l]	-	0.5
Reactor residence time [sec]	-	1
Outlet temperature [C]	-	1385.8780
Calculated heat duty [Gcal/hr]	-	0
Net heat duty [Gcal/hr]	-	0
Reactor volume [cum]	-	0.0111
Vapor phase volume [cum]	-	0.0111
Vapor phase residence time [hr]	-	0.0003

CAPITULO III: RESULTADOS



Tabla IV-11.- Características de los intercambiadores de calor empleados en el proceso.

INTERCAMBIADORES DE CALOR				
Name	EX-1	EX-2	EX-3	EX-4
Hot side property method	PENG-ROB	PENG-ROB	PENG-ROB	PENG-ROB
Hot side free-water phase properties method	STEAM-TA	STEAM-TA	STEAM-TA	STEAM-TA
Hot side water solubility method	3	3	3	3
Cold side property method	-	PENG-ROB	-	PENG-ROB
Cold side use true species approach for electrolytes	-	YES	-	YES
Cold side free-water phase properties method	-	STEAM-TA	-	STEAM-TA
Cold side water solubility method	-	3	-	3
Exchanger specification	-	10	-	10
Units of exchanger specification	-	DELTA-C	-	DELTA-C
Minimum temperature approach [C]	-	1.0000	-	1.0000
Hot side outlet pressure [bar]	-	23.2000	-	23.2000
Cold side outlet pressure [bar]	-	0.0000	-	0.0000
Inlet hot stream temperature [C]	-	715.8617	-	1385.8780
Inlet hot stream pressure [bar]	-	23.2000	-	23.2000
Inlet hot stream vapor fraction	-	1.0000	-	1.0000
Outlet hot stream temperature [C]	-	494.7237	-	715.8617
Outlet hot stream pressure [bar]	-	23.2000	-	23.2000
Outlet hot stream vapor fraction	-	1.0000	-	1.0000
Inlet cold stream temperature [C]	-	484.7237	-	705.8617
Inlet cold stream pressure [bar]	-	23.4068	-	23.1988
Inlet cold stream vapor fraction	-	1.0000	-	1.0000
Outlet cold stream temperature [C]	-	600.0700	-	1060.2489
Outlet cold stream pressure [bar]	-	23.4068	-	23.1988
Outlet cold stream vapor fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Heat duty [Gcal/hr]	-	0.0118	-	0.0383
Calculated heat duty [Gcal/hr]	0.0083	0.0118	0.0041	0.0383
Required exchanger area [sqm]	-	0.3738	-	0.5788
Actual exchanger area [sqm]	-	0.3738	-	0.5788
Average U (Dirty) [kcal/hr-sqm-K]	-	730.8684	-	730.8684
UA [cal/sec-K]	-	75.8919	-	117.5038
LMTD (Corrected) [C]	-	43.1942	-	90.6154
LMTD correction factor	-	1.0000	-	1.0000
Number of shells in series	-	1.0000	-	1.0000
Total feed stream CO2e flow [kg/hr]	0.0000	14.4737	14.4737	1.5882
Total product stream CO2e flow [kg/hr]	0.0000	14.4737	14.4737	1.5882
Specified pressure [bar]	-0.2068	-0.2068	-0.2068	-
Specified temperature [C]	640.0000	-	640.0000	-
Calculated pressure [bar]	23.2000	-	23.2000	-
Calculated temperature [C]	640.0000	-	640.0000	-
Net duty [Gcal/hr]	0.0083	-	0.0041	-

CAPITULO III: RESULTADOS



Tabla IV-12. Características de compresores y turbinas del proceso.

Compresores y turbinas				
Name	C-1	C-2	CH4-T	H2-T
Property method	PENG-ROB	PENG-ROB	PENG-ROB	PENG-ROB
Use true species approach for electrolytes	YES	YES	YES	YES
Free-water phase properties method	STEAM-TA	STEAM-TA	STEAM-TA	STEAM-TA
Water solubility method	3.0000	3.0000	3.0000	3.0000
Specified discharge pressure [MPa]	2.3407	23.4068	1.0133	1.7000
Specified pressure increase [atm]	0.9869			0.0000
Isentropic efficiency	0.9000	0.9000	0.9000	0.9000
Indicated horsepower [kW]	27.4147	51.4119	-99.2227	-24.8998
Calculated brake horsepower [kW]	27.4147	51.4119	-99.2227	-24.8998
Net work required [kW]	27.4147	51.4119	-99.2227	-24.8998
Power loss [kW]	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Efficiency (polytropic / isentropic) used	0.9000	0.9000	0.9000	0.9000
Calculated discharge pressure [bar]	23.4068	23.4068	1.0133	1.7225
Calculated pressure change [bar]	22.3936	22.3936	22.1856	21.4775
Calculated pressure ratio	23.1007	23.1007	0.0437	0.0742
Outlet temperature [C]	487.2552	484.7237	238.8684	62.3394
Isentropic outlet temperature [C]	442.8730	440.8066	327.4668	107.0046
Vapor fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Head developed [meter]	48951.3569	44329.0579	-85553.1626	-44460.8618
Isentropic power requirement [kW]	24.6732	46.2707	-89.3005	-22.4099
Inlet heat capacity ratio	1.4017	1.4008	1.3145	1.3512
Inlet volumetric flow rate [cum/hr]	173.1763	325.1396	63.8538	18.6096
Outlet volumetric flow rate [cum/hr]	19.2651	36.0590	558.8340	108.7061
Inlet compressibility factor	0.9996	0.9995	1.0048	1.0060
Outlet compressibility factor	1.0072	1.0073	1.0003	0.9986
Total feed stream CO ₂ e flow [kg/hr]	0.0000	14.4737	1.5882	0.0000
Total product stream CO ₂ e flow [kg/hr]	0.0000	14.4737	1.5882	0.0000



CAPÍTULO V : CONCLUSIONES

“Haz las cosas lo más simple que puedas, pero no te limites a lo simple”.

Albert Einstein



Los ciclos de potencia están conformados por 3 principales elementos: compresor, cámara de combustión y turbina. La cámara de combustión puede operar bajo 2 criterios: 1) combustión simple, donde solo interactúa el combustible y el oxidante y 2) combustión asistida, donde es empleada la combustión de hidrógeno para encender combustibles convencionales.

De acuerdo a la hidrodinámica que presenta cada arreglo experimental fue posible el empleo de los reactores ideales conocidos (PFR y CSTR) para simular el proceso de combustión de acuerdo a los requerimientos para cada tipo de combustible.

Es posible realizar la comparación de los resultados obtenidos de la simulación del proceso de combustión con los obtenidos de manera experimental reportados en la literatura para cada tipo de combustible, obteniendo la dinámica de variación de la conversión de hidrógeno con un valor de $R^2 = 96.45 \%$, para metano $R^2 = 91.41\%$ y para propano $R^2 = 98.61 \%$, siendo la temperatura la variable manipulada en el análisis de sensibilidad en el caso de metano y propano en un intervalo de 473 K - 923 K mientras que para hidrógeno se varió el flujo total de alimentación.

El modelo de ley de potencias que describe la combustión de hidrógeno, así como el modelo LHHW que describe la combustión de metano y propano, aplican de manera satisfactoria con lo reportado en sus correspondientes artículos pudiendo reproducir los datos que estos manejan. Poda poder obtener altas conversiones en el reactor fue necesario el acondicionamiento térmico de la corriente de alimentación, esto para cada tipo de combustible, requiriendo 913 K para el H_2 , 813 K para CH_4 y 772 K para C_3H_8 .

Debido a la menor energía de ignición requerida por el hidrógeno, así como también a la mayor carga térmica que proporciona durante su combustión, es posible la adaptación de hidrógeno como combustible a los ciclos convencionales para la generación de electricidad, a esto se le conoce como



combustión o ignición asistida por hidrógeno cuya adaptación se realizó en modo de intercambio.

Es poco evidente el efecto que tiene el H_2 en mezclas de combustible cuando se maneja hasta un 30 % mol, el efecto del H_2 en mezclas con combustible es más pronunciado cuando se maneja 80% mol.

Al mantener los mismos flujos totales de combustible y oxidante para cada tipo de combustible, al emplear hidrógeno incrementa la condición térmica en el sistema de reacción hasta un 37 % en comparación con el empleo de metano o propano puro. Por el contrario al mantener mismos valores de ϕ se obtiene una optimización en el requerimiento de combustible al usar hidrógeno de hasta un 50 % y un incremento en la potencia de la turbina de hasta un 18 % en comparación con el metano y propano puros.

Se determinó la viabilidad técnica tomando como parámetros: la emisión de NOx, el límite térmico de los materiales, además de la mejora en el uso y distribución de insumos.



BIBLIOGRAFÍA

“Si no conozco una cosa, la investigaré”.

Louis Pasteur



Abbasi R. [y otros] Kinetics of methane combustion over Pt and Pt–Pd catalysts [Publicación periódica] // Chemical Engineering Research and Design. - Edmonton, Alberta, Canada : [s.n.], 2012. - págs. 1930-1942.

AbdAllah Mokhtar.Mb Mohammed Elayeb, M. [et al.] Thermodynamics Optimization of GARRI (1) Combined Cycle Power Plant by Using ASPEN HYSYS Simulation [Journal] // International Journal on Recent and Innovation Trends in Computing and Communication. - 2016. - 1 : Vol. 4. - pp. 69-78.

Ahlström-Silversand Anders Fredrik y Ingemar Odenbrand Claes Ulf Combustion of methane over a Pd-Al₂O₃/SiO₂ catalyst, catalyst activity and stability [Publicación periódica] // Applied Catalysis. - 1997. - págs. 157-175.

Alobaid Falah y Mertens Nicolas. Progress in dynamic simulation of thermal power plants [Publicación periódica] // Progress in Energy and Combustion Science. - 2016. - págs. 79-162.

Appel C. [y otros] Catalytic Combustion of Hydrogen-Air Mixtures over Platinum:Validation of Hetero/Homogeneous Chemical Reaction Schemes [Publicación periódica] // Clean Air. - 2004. - págs. 21-44.

Bauer C.G. y Forest T.W. Effect of hydrogen addition on the performance of methane -fueled vehicles. Part I: effect on S.I. engine performance [Publicación periódica] // International Journal of Hydrogen Energy. - 2001. - págs. 55-70.

Baukal, Jr. Charles E HEAT TRANSFER IN INDUSTRIAL COMBUSTION [Book]. - [s.l.] : CRC Press LLC, 2000.

Beld L. van De., Ven M. C. Van Der. y Westerterp K. R. A kinetic study of the complete oxidation of ethene, propane and their mixtures on a Pd/Al₂O₃ catalyst [Publicación periódica] // Chemical Engineering and Processing. - 1995. - págs. 469-478.

Bloch Heinz P. y Singh Murari P. Steam turbines design, applications, and rating [Libro]. - USA : The McGraw-Hill Companies, Inc., 2009. - Segunda.

Carson Eric C. Don't Gamble With Physical Properties For Simulation [Publicación periódica] // Chemical engineering progress. - 1996. - págs. 35-46.

Casimir J, Jachimowski y Wilson Charles H. Chemical kinetic models for combustion of hydrocarbons and formation of nitric oxide [Publicación periódica]. - Virginia : National Aeronautics and Space Administration, 1980.



CCA Comisión para la cooperación ambiental. Émissiones atmosféricas de las centrales eléctricas en América del Norte [En línea] // Comisión para la cooperación ambiental. - 7 de Diciembre de 2011. - <http://www3.cec.org/islandora/es/item/10236-north-american-power-plant-air-emissions-es.pdf>.

CENDI Centro nacional para el desarrollo del acero inoxidable Acero inoxidable, clasificación y características [En línea]. - mayo de 2002. - Junio de 2018. -

http://www.iminox.org.mx/downloads/publicaciones/manual_caracteristicas_y_clasificacion.pdf.

Cengel Yunus A. y Boles Michael A. Thermodynamics an engineering approach [Libro]. - New York : McGraw Hill, 2015. - Octava .

CFE Comisión Federal de Electricidad Sector eléctrico nacional [En línea] // Subsecretaria de electricidad . - SENER. - 17 de Febrero de 2018. - <http://egob2.energia.gob.mx/portal/electricidad.html>.

Chen Junjie, Yan Longfei y Song Wenya Hydrogen assisted catalytic ignition characteristics of propane-air with a chemical kinetic model in a Pt/Al₂O₃ micro-combustor in different fueling modes [Publicación periódica]. - [s.l.] : RSC Advances, 2015.

Choudhary V. R., Deshmukh G. M. y Mishra D. P. Kinetics of the Complete Combustion of Dilute Propane and Toluene over Iron-Doped ZrO₂ Catalyst [Publicación periódica] // Energy & Fuels. - 2005. - págs. 54-63.

Coldwell Pedro Joaquín Plan nacional de desarrollo 2013-2018 [En línea] // Programa especial de la transición energética 2017-2018. - <https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/213322/PETE.pdf>.

Couper James R. [y otros] Chemical Process Equipment Selection and Design [Libro]. - USA : Elsevier Inc., 2012. - Tercera.

Davis F, Seamus P and Higson J Biofuel cells—recent advances and applications [Journal] // Biosens Bioelectron. - 2007. - Vol. 22. - pp. 1224-1235.

Dick Erik Fundamentals of Turbomachines [Libro]. - Bélgica : Springer, 2015. - Vol. 109.



Dimian Alexandre C. Integrated design and simulation of chemical processes. Computer-Aided Chemical Engineering Series [Libro]. - Amsterdam : ELSEVIER, 2003. - Vol. XIII.

Dufour Anthony Thermochemical Conversion of Biomass for the Production of Energy and Chemicals [Libro]. - Great Britain : WILEY, 2016.

E. Gelfand Boris [y otros] Thermo-Gas Dynamics of Hydrogen Combustion and Explosion [Libro]. - [s.l.] : Springer, 2012.

Electronics SparkFun Sparkfun start something [En línea] // Sparkfun start something. - 2003. - <https://learn.sparkfun.com/tutorials/what-is-electricity>.

Energía Nuclear Energía Nuclear [En línea] // Centrales nucleares en México. - 1 de Noviembre de 2016. - https://energia-nuclear.net/centrales_nucleares/mexico/laguna-verde-1.html.

Eriksson Sara Development of catalysts for natural gas-fired gas turbine combustors (tesis doctoral) [Libro]. - Stockholm, Sweden : KTH chemical engineering and technology, 2006.

Española Foro de la industria nuclear Foro nuclear [En línea] // Foro de la industria nuclear Española. - <http://www.foronuclear.org/es/100957-faqas-sobre-energia/capitulo-2/115629-23-ique-energias-primarias-se-utilizan-en-el-mundo>.

Fogler H. Scott Elementos de ingeniería de las reacciones químicas [Libro]. - México : Pearson educación, 2008.

Glaude Pierre Alexandre [y otros] Combustion and oxidation kinetics of alternative gas turbine fuels [Publicación periódica]. - Francia : [s.n.], 2014.

Global Electricity Global Electricity, Electricidad y energía [En línea] // lobalectricity, Electricidad y energia. - 7 de octubre de 2013. - <https://globalelectricity.wordpress.com/2013/10/07/centrales-hidroelectricas/>.

Gómez, Montoya Juan Pablo [y otros] Effect of biogas enriched with hydrogen on the operation and performance of a diesel-biogas dual engine [Publicación periódica] // Journal Ciencia, Tecnología y Futuro. - 2013. - 2 : Vol. 5. - págs. 61-72.

Gonzales Santalo José Miguel La generacion electrica a partir de combustibles fosiles [Publicación periódica] // Divulgación . - 2009.



Granet Irving y Bluestein Maurice Thermodynamics and Heat Power [Libro]. - New York : CRC Press, 2015.

Gross Charles A. y Roppel Thaddeus A. Fundamentals of Electrical Engineering [Libro]. - [s.l.] : CRC Press, 2012.

Gutiérrez Jodra Luis El hidrogeno, combustible del futuro [Publicación periódica] // Programa de promoción de la cultura científica y tecnológica. - 2005. - págs. 49-57.

Häber Thomas [y otros] Numerical simulation of the ignition of fuel/air gas mixtures around small hot particles [Publicación periódica] // Z. Phys. Chem.. - Karlsruhe : [s.n.], 2017. - págs. 1625-1654.

Hara I Current status of H2 and fuel cell programs of Japan [Online] // International Partnership for Hydrogen and Fuel Cells in the Economy (IPHE). - 2013. - Octubre 15, 2017. - http://www.iphe.net/docs/HomePage_RecentInfo/IPHE%20Presentation%20to%20Ministries%20of%20the%20Govt%20of%20Canada%20June%202017.pdf.

Hernández Martín E. Alberto Especificaciones técnicas CONAIF-SEDIGAS para la certificación de instaladores de gas. Materias comunes Tipos A,B y C. [Informe]. - 2008.

Heywood John B. Internal combustion engine fundamentals [Libro]. - [s.l.] : McGraw-Hill, 1988.

Hong Jongsup [y otros] Analysis of oxy-fuel combustion power cycle utilizing a pressurized combustor [Publicación periódica] // Elsevier. - 2009. - págs. 1332-1340.

I.M. Kamal y Al-Malah Aspen Plus: chemical engineering applications [Libro]. - New Jersey : Wiley, 2017.

Ibarra Rocío Ciencia Zaragoza [En línea] // La biomasa y su polémica en Monzón. - 11 de Mayo de 2016. - <https://cienciazaragoza.com/2016/05/11/la-biomasa-y-su-polemica-en-monzon/>.

IEA International Energy Agency y OECD IEA, International Energy Agency [En línea] // IEA, International Energy Agency. - 2018. - <https://www.iea.org/tcp/fossilfuels/fbc/>.



Karim G. A., Wierzba I. y Al-Alousi Y. Methane-hydrogen mixtures as fuels [Publicación periódica] // Int J. Hydrogen Energy. - 1996. - 7 : Vol. 21. - págs. 625-631.

Kato S. y Nomura N. Hydrogen gas-turbine characteristics and hydrogen energy system schemes [Publicación periódica] // Energy Convers.. - 1997. - págs. 1319-132.

Kehlhofer Rolf [y otros] Combined-Cycle Gas & Steam Turbine Power Plants [Libro]. - U.S.A : PennWell, 1997.

Khalid F. [y otros] Comparative assessment of two integrated hydrogen energy system using electrolyzers and fuel cells [Publicación periódica] // International journal of hydrogen energy. - 2016. - págs. 19836-19846.

Kumar Khaitan Siddhartha y Raju Mandhapati Dynamics simulation of air storage-based gas turbine plants [Publicación periódica] // International journal of energy research. - 2011. - págs. 558-569.

Lau Jason, Dey Gangotri y Licht Stuart Thermodynamic assessment of CO2 to carbon nanofiber transformation for carbon sequestration in a combined cycle gas or a coal power plant [Publicación periódica] // Energy Conversion and Management. - Washington : [s.n.], 2016. - págs. 400-410.

Levenspiel Octave Ingeniería de las reacciones químicas [Libro]. - México : Limusa Wiley, 2004.

Leyzerovich Alexander S. Steam turbines for modern fossil-fuel power plants [Libro]. - USA : The Fairmont Press, 2008.

LIE Ley de la industria eléctrica LIE, Ley de la industria eléctrica [En línea] // LIE, Ley de la industria eléctrica. - 11 de Agosto de 2014. - <https://legalzone.com.mx/wp-content/uploads/2017/01/Ley-de-la-Industria-Eléctrica-Legalzone-Mx.pdf>.

Linares Hurtado José Ignacio y Moratilla Soria Beatriz Yolanda El hidrogeno y la energia [Libro]. - Madrid : Asociacion nacional de ingenieros del ICAI, 2007.

Llamas Armando and Viromantes Federico Tecnologías y combustibles para la generacion eléctrica [Journal] // IEEE seccion Mexico. - 2004.



Ma Fanhua [y otros] Experimental study on thermal efficiency and emission characteristics of a lean burn hydrogen enriched natural gas engine [Publicación periódica] // International journal of hydrogen energy. - 2007. - págs. 5067-5075.

Marinov N.M., Westbrook C.K. y Pitz W.J. Detailed and Global Chemical Kinetics Model for Hydrogen [Publicación periódica] // 8 th Int'l Symp. on Transport Properties. - 1995. - págs. 118-124.

Martínez Isidoro Termodinamica basica y aplicada [Libro]. - [s.l.] : DOSSAT, 1992.

Mendoza Orbegoso Elder M., Figueira da Silva Luis F. y Novgorodcev Junior Andrés R. On the predictability of chemical kinetics for the description of the combustion of simple fuels [Publicación periódica] // J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng.. - 2011. - 4 : Vol. 33. - págs. 492-505.

Mokhtar.M Abd Al lah. [y otros] Thermodynamics optimization of GARRI (1) combined cycle power plant by using ASPEN HYSYS simulation. [Publicación periódica] // International Journal on Recent and Innovation Trends in Computing and Communication. - 2016. - págs. 69-78.

Moon H, Chang I and Kim B Continuous electricity production from artificial [Journal] // Biores Technol. - 2006. - 97 : Vol. 4. - pp. 621-627.

Nagalingam B., Duebel F. y Schmillen K. Performance study using natural gas, hydrogen-supplemented natural gas and hydrogen in AVL research engine [Publicación periódica] // Int. J. Hydrogen Energy. - 1983. - 9 : Vol. 8. - págs. 715-720.

P. Boyce Meherwan, Ph.D y P.E. Gas Turbine Engineering Handbook [Libro]. - Houston, Texas : GPP, 2005. - Vol. III.

Pacheco Aguirre Francisco Manuel [y otros] Modelación y simulación de la generación de hidrógeno a partir de reactores electroliticos de celda seca y fotoceldas de silicio monocristalino en la ciudad de Puebla. [Informe]. - Puebla, Puebla. : [s.n.], 2016.

Perry Robert H., Green Don W. y Maloney James O. Perry manual del ingeniero químico [Libro]. - México : McGRAW-HILL, 2001. - Vol. III : VI.

Pfefferle L. D. y Pfefferle W.C. Catalysis in combustion [Publicación periódica] // Catalysis reviews:Science and engineering. - 1987. - págs. 219-267.



Porpatham E., Ramesh A. y Nagalingam B. Effect of hydrogen addition on the performance of a biogas fuelled spark ignition engine [Publicación periódica] // International Journal of Hydrogen Energy . - 2007. - págs. 2057-2065.

Prieto Ismael Centrales termicas [En línea] // Sistemas de combustion en lecho fluido . -
http://ocw.uniovi.es/pluginfile.php/1011/mod_resource/content/1/1C_C12757_0910/04_GT13_Centrales_termicas_de_lecho_fluido.pdf.

Prieto Joaquin Energía Eficiente [En línea] // Eficiencia y uso responsable de la energía. - 12 de octubre de 2009. -
<https://energiaeficiente.wordpress.com/2009/10/12/energias-primarias-y-energias-secundarias/>.

PRODESEN Programa de desarrollo del sistema eléctrico nacional 2016-2030 [Informe]. - Mexico : [s.n.], 2017.

Ravindra Kumar P. Simulation and parametric optimisation of thermal power plant cycles [Publicación periódica] // Recent trends in engineering and material sciences. - 2016. - págs. 304-306.

Ravindra Kumar P., RAmachandra Raju, V. and Ravi Kumar N. Simulation and parametric optimisation of thermal power plant cycle [Journal] // Perspectives in Science. - [s.l.] : ELSEVIER, 2016. - Vol. 8. - pp. 304-306.

Red Mexicana de Bioenergía Red Mexicana de Bioenergía [En línea] // Red Mexicana de Bioenergía . - 2017. - <http://rembio.org.mx/webinar-bioenergy-the-role-of-bioenergy-in-balancing-the-electricity-grid-and-providing-storage-options/>.

Reporte CFE Comisión Federal de electricidad Reporte anual 2016 [Informe]. - México : CFE, 2017.

Ricón Ruiz Xabier Estudio de la aplicacion de hidrogeno como combustible alternativo a bordo de buques (Tesis de pregrado) [Libro]. - Barcelona : Universidad Politecnica de Catalunya, 2014.

Rifkin Jeremy La economía del hidrogeno [Libro]. - España : Perguin Putnam Inc. , 2000.



Rowshanaie Omid., Mustapha Saari. y Ahmand K. A. Simulation of organic rankine cycle through fluegas to large scale electricity generation purpose [Publicación periódica] // Jurnal Teknologi. - 2015. - págs. 9-18.

Rubio Castro Emmanuel Fernando, Ruiz Reyes Mayra y Pacheco Aguirre Francisco Manuel Modelacion y simulacion de emisiones gaseosas resultantes de procesos de combustion para equipos de calentamiento directo e indirecto (Tesis de maestria). - Benemerita universidad autónoma de Puebla, Puebla, Puebla : [s.n.], Diciembre de 2013.

Rudra Souman. y Rosendahl L. Simulation of IGFC power generation system by Aspen Plus [Publicación periódica] // Proceedings of the 13th Asian Congress of Fluid Mechanics. - 2010. - págs. 17-21.

Sanchez Eduardo [y otros] Modeling and simulation of the production process of electrical energy in a geothermal power plant. [Publicación periódica]. - 2011. - págs. 2140-2148.

SEGOB Diario oficial de la federación [En línea] // Diario oficial de la federación. - 24 de 12 de 2015. - http://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5421295&fecha=24/12/2015.

Seider Warren D. [y otros] Product and process desingn principles. Synthesis, Analysis, and Evaluation [Libro]. - [s.l.] : John Wile & Sons, Inc., 2009.

Semarnat La 171 CC Agua Prieta II (Con campo solar) [En línea] // Estudio de riesgos nivel 2. - <http://sinat.semarnat.gob.mx/dgiraDocs/documentos/son/estudios/2006/26SO2006E0013.pdf>.

SEMARNAT; SPPA; DGPCC [Online] = ESTRATEGIA NACIONAL VISIÓN 10-20-40 DE CAMBIO CLIMÁTICO. - 2013. - Noviembre 2016. - <https://www.gob.mx/inecc/documentos/estrategia-nacional-de-cambio-climatico-vision-10-20-40>.

SENER Diario Oficial de la Federación [Online]. - Agosto 2009. - Septiembre 2017. - http://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5101826&fecha=06/08/2009.

Shavit Arthur y Gutfinger Chaim Thermodynamics from concepts to applications [Libro]. - Boca Raton : CRC Press, 2008. - Segunda.



SIEMENS Turbinas de vapor industriales [En línea]. - 2009. - 5 de Mayo de 2018. - [https://www.energy.siemens.com/co/pool/hq/power-generation/steam-turbines/downloads/E50001-W410-A101-V3-](https://www.energy.siemens.com/co/pool/hq/power-generation/steam-turbines/downloads/E50001-W410-A101-V3-7800_ST%20Broschuere_SP_LR.pdf)

[7800_ST%20Broschuere_SP_LR.pdf](https://www.energy.siemens.com/co/pool/hq/power-generation/steam-turbines/downloads/E50001-W410-A101-V3-7800_ST%20Broschuere_SP_LR.pdf).

Sierens R. Variable composition hydrogen/natural gas mixtures for increased engine efficiency and decreased emissions [Publicación periódica] // Laboratory of transporttechnology.

Silva Mattos Heitor August, Brinhent Cleverson y Cavalca Diogo Ferraz. Combined cycle performance evaluation and dynamic response simulation. [Publicación periódica]. - 2016. - págs. 491-497.

Singh Murari P., Lucas George M. y PE Blade design and analysis for steam turbines [Libro]. - [s.l.] : McGraw-Hill, 2011.

Sistema de Información energética CFE Sistema de Información Energética [En línea]. - Septiembre de 2017. - Octubre de 2017. - <http://sie.energia.gob.mx/bdiController.do?action=cuadro&cvecua=IIIA1C05..>

Sluka J. Rate Of Propane Diffusion In Air [En línea]. - 3 de Junio de 2008. - 3 de Mayo de 2018. - http://www.inpharmix.com/jps/Propane_dif_polycarb.html.

Smith J.M., Van Ness H.C. y Abbott M.M. Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química. [Libro]. - México : McGraw-Hill, 2007. - Séptima.

Souman Rudra [et al.] Simulation of IGFC power generation system by Aspen Plus [Journal] // Proceedings of the 13th Asian Congress of Fluid Mechanics. - 2010. - pp. 876-880.

Spayde Emily, Mago Pedro J. y Cho Heejin Performance Evaluation of a solar-powered regenerative organic rankine cycle in different climate conditions [Publicación periódica] // Energies. - 2017. - págs. 2-20.

Suresh Baral and Kyung Chun K. Simulation, Validation and Economic Analysis of Solar Powered Organic Rankine Cycle for Electricity Generation [Journal] // Journal of Clean Energy Technologies. - 2015. - 1 : Vol. 3. - pp. 62-67.

The shift project data portal The shift project data portal Browse Energy and Climate Data [En línea] // The shift project data portal Browse Energy and Climate Data. - 2014. - <http://www.tsp-data-portal.org/TOP-20-Generation#tspQvChart>.



Tibaquirá G. Juan Esteban y Burbano J. Juan Carlos Técnicas para controlar las emisiones de NOx en turbinas de gas [Publicación periódica] // Scientia et technica . - 2003.

Tiscareño Lechuga Fernando ABC para comprender reactores químicos con multireacción [Libro]. - México : Reverté Instituto tecnológico de Celaya, 2008.

U.S. Energy Information Administration Annual Energy Outlook 2018 [En línea] // U.S. Energy Information Administration. - 6 de Febrero de 2018. - 8 de Febrero de 2018. - <https://www.eia.gov/outlooks/aeo/>.

U.S. Energy Information Administration <https://www.eia.gov> [Online] = International Energy Outlook 2017. - Septiembre 2017. - Octubre 2017. - <https://www.eia.gov/outlooks/ieo/>.

Ulleberg Oystein Modeling of advanced alkaline electrolyzers: a system simulation approach [Journal] // International Journal of Hydrogen Energy. - 2003. - pp. 21-33.

Venkata M, Bhaskar Y and Sarma P Biohydrogen production from chemical wastewater treatment by selectively enriched anaerobic mixed consortia in biofilm configured reactor operated in periodic discontinuous batch mode [Journal] // Water Res. - 2007. - Vol. 41. - pp. 2652-2664.

Zhuang Quan [y otros] An integrated natural gas power cycle using hydrogen and carbon fuel cells [Publicación periódica] // Elsevier. - 2017. - págs. 76-84.

Zwinkels Marcus F. M., Jaras Sven G. y Govind Menon P. Catalytic materials for high-temperature combustion [Publicación periódica] // Catalysis reviews: Science and engineering. - 1993. - págs. 319-358.