



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**

División de ciencias básicas e ingeniería

Posgrado en Ingeniería de Procesos

**“Ingeniería de procesos en equipos de absorción empacada y con membranas para el endulzamiento de gas natural”**

**TESIS**

Que para obtener el grado de:

**Doctor en Ingeniería de Procesos**

Presenta:

**MIA. Jorge Arturo Romero Bustamante**

Directores:

**Dr. Miguel Ángel Gutiérrez Limón**

Departamento de Energía, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco

**Dr. Eliseo Hernández Martínez**

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana Región Xalapa

**Ciudad de México, septiembre de 2024**

## RESUMEN

El gas natural se ha posicionado como uno de los combustibles alternativos para enfrentar la crisis energética y la disminución de gases de efecto en la atmósfera. Por ende, operar las plantas de endulzamiento de gas natural dentro de las normativas para la obtención de un producto de calidad es de suma importancia. En este proceso, el elevado consumo energético es una de las principales problemáticas que enfrenta actualmente. Esto ha motivado la búsqueda de procesos de mayor eficiencia y de menor costo. En el presente trabajo, se realizó un estudio de ingeniería de procesos en la operación unitaria de absorción con la finalidad de buscar alternativas para la mejora de una planta actualmente en operación. Como alternativa principal se propone la sustitución del equipo de absorción empacado por un equipo de contactor de membranas. Para ello, se parte del modelado de los procesos de absorción para la implementación de trayectorias de optimización y control. Se realizó un análisis de costo-beneficio comparando 3 escenarios: i) operación actual de la planta, ii) operación con proceso de absorción empacado optimizado y controlado y iii) operación con proceso de contactor de membrana optimizado y controlado. Los resultados muestran que las simulaciones realizadas permiten la sustitución teórica de la columna de absorción empacada por un sistema de contactor de membrana con errores menores al 5% respecto a lo reportado por la planta. La estrategia de optimización y control permitió encontrar mejoras en los procesos de absorción reduciendo hasta en 80% el  $\text{CO}_2$  y en 70% el  $\text{H}_2\text{S}$  de la corriente de gas natural. El esquema de control basado en la compensación de error de modelado se sugiere como una alternativa potencial para controlar los procesos de absorción. La sustitución teórica de la columna empacada por el sistema de membranas representa una reducción del 44% y el 27% en costos y gasto energético, respectivamente. Lo anterior favorece al desarrollo de conocimiento de frontera para la posible implementación a futuro de esta tecnología de absorción a nivel industrial.

## ABSTRACT

Natural gas has positioned itself as one of the alternative fuels to face the energy crisis and the reduction of greenhouse gases in the atmosphere. Therefore, operating natural gas sweetening plants within the regulations for obtaining a quality product is of major importance. In this process, high energy consumption is one of the main problems currently faced. This has motivated researchers to find more efficient and lower cost processes. In the present research, a process engineering study was carried out in the unitary absorption operation with the purpose of looking for alternatives to improve a currently operating plant. The main alternative proposed is the replacement of the packaged absorption equipment with a membrane contactor equipment. For this purpose, the modeling of the absorption processes is performed in order to implement optimization and control trajectories. A cost-benefit analysis was performed comparing 3 alternative scenarios: i) current plant operation, ii) operation with an optimized and controlled packed absorption process, and iii) operation with an optimized and controlled membrane contactor process. The results show that the performed simulations allow the theoretical substitution of the packed absorption column by a membrane contactor system with errors lower than 5% with respect to what was reported by the plant. The optimization and control strategy allowed finding improvements in the absorption processes reducing up to 80% of CO<sub>2</sub> and 70% of H<sub>2</sub>S in the natural gas stream. The control scheme based on modeling error compensation is suggested as a potential alternative to control the absorption processes. The theoretical substitution of the packed column for the membrane system represents a 44% and 27% reduction in costs and energy expenditure, respectively. This favors the development of frontier knowledge for the possible future implementation of this absorption technology at industrial level.

## AGRADECIMIENTOS

- Agradezco a Dios porque me permite finalizar esta etapa de mi vida, donde me ha llenado de bendiciones, me ha permitido crecer como persona y ser mejor cada día.
- Agradezco a la Dra. Jazael G. Moguel Castañeda quien ha sido una compañera única durante todo este proceso. Su amor y cariño me permiten continuar en el camino de la docencia y la investigación. Encuentro mi motivación en sus consejos, su compañía y en seguir estando juntos. Siempre tendrás mi cariño y admiración. También agradezco a su familia por su cariño, todos tienen un lugar especial en mi corazón.
- Agradezco al Dr. Eliseo Hernández Martínez quien ha sido mi mentor desde la licenciatura, siempre con una actitud positiva y con disposición para resolver cualquier duda o aconsejarme. Me complace decir que es un gran amigo y quiero expresar que, de no ser por su apoyo durante todos estos años yo no estaría donde me encuentro actualmente. Agradezco al grupo MAPAP y CAIPQyB por los seminarios, consejos, congresos y demás actividades.
- Agradezco al Dr. Miguel A. Gutiérrez Limón quien me tomó como su tesista y apoyó en el trascurso de este proyecto. Siempre estuvo al pendiente de cualquier necesidad que tuviera, me ayudó a resolver dudas y también me apoyo en el financiamiento de algunos congresos. Me es grato decir que todos sus consejos sirvieron para culminar el proyecto.
- Agradezco a mi familia, a mi tía abuela Rosaura quien siempre me ha apoyado con sus palabras de cariño y sus consejos, A mi mamá quien ha estado apoyándome en el cuidado de mi tía, lo cual es invaluable y a mi hermano pues también ha estado al pendiente de las necesidades de mi tía. Gracias por ser un apoyo, los quiero.
- Agradezco a mis amigos que siempre han estado ahí para apoyarme o aconsejarme, a Javier, Alejandro, Rolando, Juan, Adalberto, Ali, Fausto y todos aquellos que hicieron más llevadera esta etapa de mi vida, su amistad es invaluable.
- Agradezco a la Universidad Autónoma Metropolitana y a la Universidad Veracruzana Facultad de Ciencias Químicas-Xalapa, que me han brindado el espacio para el desarrollo de las actividades referentes al posgrado y me han brindado cobijo y trabajo.
- Agradezco a todos mis maestros del posgrado y revisores de este trabajo que sin duda alguna mejoraron su calidad y me brindaron sus conocimientos y a mis compañeros de generación por sus comentarios objetivos para impulsar este proyecto. Agradezco al CONAHCyT por la beca de doctorado asignada que fue un recurso indispensable.

## **DEDICATORIA**

*A Jazael por siempre estar conmigo ayudándome a cumplir mis metas, por estar siempre cuando necesito un consejo, un abrazo o que me escuchen, por ser la parte más importante en mi vida y permitirme estar a tu lado y crecer juntos.*

*A mi familia por ayudarme a crecer en mi desarrollo profesional y personal, por ayudarme con las responsabilidades que salen de mis posibilidades y por su cariño.*

---

# ÍNDICE

---

<i>CAPITULO I: Introducción</i> .....	13
1.1 Motivación general.....	15
1.2 Estado del arte .....	17
1.2.1 Métodos para la captura de CO <sub>2</sub> y H <sub>2</sub> S .....	19
1.2.2 Modelado y simulación de equipos de absorción.....	23
1.2.3 Control y optimización de equipos de absorción .....	26
1.3 Planteamiento del problema .....	31
1.4 Justificación.....	32
1.5 Hipótesis.....	32
1.6 Objetivos .....	33
1.6.1 Objetivo general .....	33
1.6.2 Objetivos específicos.....	33
1.7 Productos derivados de la investigación .....	33
<i>CAPITULO II: Caso de estudio: Planta de endulzamiento de gas natural</i> .....	35
2.1 Importancia del CO <sub>2</sub> y el H <sub>2</sub> S .....	35
2.1.1 Generación y producción de CO <sub>2</sub> y H <sub>2</sub> S.....	36
2.1.2 Medidas para reducir las emisiones de CO <sub>2</sub> y H <sub>2</sub> S .....	37
2.2 Proceso de endulzamiento de gas en operación .....	39
2.3 Proceso de absorción de gases .....	42
2.3.1 Columna de absorción por platos .....	46
2.3.2 Columna de absorción empacada.....	47
2.3.3 Contactor de membrana de fibra hueca.....	48
<i>CAPITULO III: Modelado y control de procesos</i> .....	52
3.1 Simulación de la planta de endulzamiento de gas natural.....	53
3.2 Modelado matemático de la columna de absorción empacada .....	54
3.3 Modelado matemático del HFMC.....	58
3.4 Control de la columna de absorción empacada.....	65
3.4.1 Esquema de control MEC en la columna empacada .....	66
3.4.2 Esquema de control NMPC en la columna empacada .....	68

3.5	Control del HFMC .....	70
3.5.1	Esquema de control MEC en HFMC .....	71
3.5.2	Esquema de control SMC en HFMC.....	72
3.6	Acoplamiento del HFMC a la simulación de la planta .....	73
<i>CAPITULO IV: Optimización y estimación de costos .....</i>		<i>75</i>
4.1	Técnicas de optimización de procesos .....	75
4.1.1	Programación lineal y no lineal.....	76
4.1.2	Optimización multiobjetivo.....	78
4.1.3	Algoritmo de optimización de punto interior .....	78
4.2	Optimización de la columna empacada.....	80
4.3	Optimización del HFMC.....	81
4.4	Análisis costo-beneficio .....	83
4.4.1	Identificación, cuantificación y valoración de costos .....	84
4.4.2	Identificación, cuantificación y valoración de beneficios .....	86
4.4.3	Estimación de inversión o costo real.....	87
4.5	Estimación costo-beneficio de la planta de endulzamiento .....	88
<i>CAPITULO V: Resultados y discusión.....</i>		<i>93</i>
5.1	Simulación de la planta de endulzamiento de gas.....	93
5.2	Simulación y validación de modelos matemáticos .....	99
5.2.1	Columna empacada para el endulzamiento de gas.....	99
5.2.2	HFMC para el endulzamiento de gas .....	104
5.3	Solución de los problemas de optimización propuestos.....	112
5.3.1	Condiciones óptimas de la columna de absorción empacada .....	113
5.3.2	Condiciones óptimas del HFMC para absorción.....	114
5.4	Estrategias de control en los procesos de absorción .....	115
5.4.1	Aplicación de esquemas de control en la columna empacada .....	116
5.4.2	Aplicación de esquemas de control en el HFMC .....	121
5.5	Alternativas en la simulación de la planta endulzadora .....	130
5.6	Cálculo costo-beneficio entre las alternativas de operación .....	133
<i>CAPÍTULO VI: Conclusiones y perspectivas.....</i>		<i>140</i>
<i>Referencias bibliográficas.....</i>		<i>143</i>

# ÍNDICE DE FIGURAS

1		
2	Figura 2. 1 Pronóstico del balance de emisiones de gases de efecto invernadero.....	37
3	Figura 2. 2 Publicaciones relacionadas con la captura de gases en la última década.....	38
4	Figura 2. 3. Diagrama de flujo del proceso de endulzamiento de gas.....	40
5	Figura 2. 4. Representación del proceso de absorción. ....	43
6	Figura 2. 5. Transferencia de masa en la interfaz gas-líquido.....	46
7	Figura 2. 6. Esquema de una columna de absorción por platos.....	47
8	Figura 2. 7. Esquema de una columna de absorción empacada. ....	48
9	Figura 2. 8. Esquema de un HFMC para absorción de gases. ....	49
10		
11	Figura 3. 1. Diagrama de flujo de la endulzadora de gas simplificado. ....	53
12	Figura 3. 2. Diagrama del proceso de absorción de CO <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> S en la columna empacada.....	58
13	Figura 3. 3. Diagrama del proceso de absorción de CO <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> S en el HFMC. ....	61
14		
15	Figura 5. 1. Diagrama de flujo de la planta endulzadora de gas natural. ....	95
16	Figura 5. 2. Balance de materia en la torre de absorción (V-1).....	95
17	Figura 5. 3. Balance de materia de la columna de regeneración (V-2). ....	96
18	Figura 5. 4. Perfiles de concentración de los gases ácidos a lo largo de la columna, a) fase gas y b) fase	
19	líquida.....	100
20	Figura 5. 5. Perfiles de concentración de los gases ácidos en el tiempo, a) CO <sub>2</sub> y b) H <sub>2</sub> S.....	101
21	Figura 5. 6. Dinámica espaciotemporal para la columna de absorción empacada, a) perfiles de	
22	concentración de CO <sub>2</sub> y b) de H <sub>2</sub> S en fase gaseosa; c) perfiles de concentración de CO <sub>2</sub> y d) de H <sub>2</sub> S en	
23	fase líquida (● mayor concentración, ● menor concentración).....	103
24	Figura 5. 7. Dinámica para la columna de absorción empacada a diferentes cambios de operación, a)	
25	longitud, b) diámetro, c) velocidad de gas y d) velocidad del líquido. ....	104
26	Figura 5. 8. Perfil de concentración de CO <sub>2</sub> del HFMC simulado en Matlab	
27	(● mayor concentración, ● menor concentración). ....	106
28	Figura 5. 9. Perfil de concentración de CO <sub>2</sub> del HFMC dinámico, a) salida del tubo y b) salida de la	
29	coraza. ....	107
30	Figura 5. 10. Representación de las secciones del HFMC en COMSOL, a) geometría y b) mallado....	108
31	Figura 5. 11. Perfiles de velocidad en la geometría del HFMC a diferentes tamaños de malla, a)	
32	extremadamente fina, b) extrafina, c) más fina, d) fina, e) normal y f) gruesa (● mayor velocidad, ●	
33	menor velocidad).....	108
34	Figura 5. 12. Representación del perfil de concentración de CO <sub>2</sub> en la geometría del HFMC,	
35	a) perfil 2D, b) perfil 3D (● mayor concentración, ● menor concentración).....	110

36	Figura 5. 13. Comparación del modelo matemático de HFMC, a) Simulación de la literatura, b)	
37	Simulación realizada en COMSOL y c) Simulación realizada en Matlab (● mayor concentración, ●	
38	menor concentración).....	110
39	Figura 5. 14 Comparación de perfiles de concentración locales en el eje axial, a) $r=0$ y b) $r=0.5$ .....	111
40	Figura 5. 15. Distribución espacial de la concentración para el HFMC, a) perfiles de $\text{CO}_2$ y b) $\text{H}_2\text{S}$ en	
41	tubo, membrana y sección de caparazón (● mayor concentración, ● menor concentración).....	112
42	Figura 5. 16. Perfiles de concentración óptimos de $\text{CO}_2$ y $\text{H}_2\text{S}$ en la columna empacada, a) fase gas, b)	
43	fase líquida. ....	114
44	Figura 5. 17. Perfiles de concentración óptimos de $\text{CO}_2$ y $\text{H}_2\text{S}$ en el HFMC, a) fase gas, b) fase líquida.	
45	.....	115
46	Figura 5. 18. Desempeño del controlador MEC, NMPC y PI convencional frente a cambios de	
47	referencia, a) Regulación de concentración, b) Entrada de control, c) Índice de desempeño. ..	117
48	Figura 5. 19. Desempeño del controlador MEC, NMPC y PI convencional frente a perturbaciones	
49	externas, a) Regulación de concentración, b) Entrada de control, c) Índice de desempeño.....	118
50	Figura 5. 20. Desempeño del controlador MEC, NMPC y PI convencional frente a incertidumbres de	
51	modelado, a) Regulación de concentración, b) Entrada de control, c) Índice de desempeño. ....	120
52	Figura 5. 21. Comportamiento de lazo abierto a un cambio gradual en la salida de la mezcla de gases	
53	HFMC, a) concentración de $\text{CO}_2$ y b) concentración de $\text{H}_2\text{S}$ .....	122
54	Figura 5. 22. Perfil del rendimiento del control para diferentes valores de ponderación a lazo cerrado, a)	
55	PI; b) MEC; c) SMC y d) comportamiento de la variable de control para 3 controladores con los	
56	conjuntos de parámetros de mejor rendimiento.....	123
57	Figura 5. 23. Rendimiento del controlador frente a perturbaciones externas, a) regulación de la	
58	concentración, b) entrada de control, c) índice de rendimiento del controlador. ....	124
59	Figura 5. 23. Rendimiento del controlador frente a perturbaciones externas, a) regulación de la	
60	concentración, b) entrada de control, c) índice de rendimiento del controlador. ....	125
61	Figura 5. 24. Rendimiento del controlador frente a las incertidumbres del modelo, a) regulación de la	
62	concentración, b) entrada de control, c) índice de rendimiento del controlador. ....	126
63	Figura 5. 25. Rendimiento del controlador frente a cambios en el punto de referencia, a) regulación de la	
64	concentración, b) entrada de control, c) índice de rendimiento del controlador. ....	127
65	Figura 5. 26. Tasa de eliminación de gas ácido a lazo cerrado para los controladores PI, MEC y SMC, a)	
66	porcentaje de $\text{CO}_2$ y b) porcentaje de $\text{H}_2\text{S}$ removido. ....	129
67	Figura 5. 27. Diagrama de flujo de la planta endulzadora de gas natural con un proceso de HFMC. ...	131
68	Figura 5. 28. Costos asociados a los diferentes escenarios de análisis, a)costos de materia prima y b)	
69	costos fijos y de operación. ....	135

70	Figura 5. 29. Costos y beneficios netos de los 3 escenarios para la mejora del proceso de gas natural.	136
71	Figura 5. 30. Estimación acumulada a 5 años posteriores de la inversión, a) costos totales, b) ganancias.	
72	.....	137
73	Figura 5. 31. Ahorros energéticos disponibles mediante el aprovechamiento de las utilidades, a) planta	
74	con HFMC óptima, b) planta con columna de absorción empacada óptima .....	139

75

76

## ÍNDICE DE TABLAS

77	Tabla 2. 1. Condiciones de operación de la columna del complejo procesador de gas.....	40
78	Tabla 2. 2. Corrientes de entrada y salida del proceso de absorción de la planta.....	41
79	Tabla 2. 3 Unidades de los coeficientes de transferencia de masa. ....	45
80		
81	Tabla 3. 1. Condiciones iniciales y de frontera para la columna de absorción empacada.....	57
82	Tabla 3. 2. Condiciones de operación del HFMC aplicadas en el caso de estudio. ....	62
83		
84	Tabla 4. 1. Matriz de clasificación de costo estimado para industrias de proceso. ....	87
85	Tabla 4. 2. Condiciones de los equipos en la planta de endulzamiento. ....	89
86	Tabla 4. 3. Datos sobre el coste de los equipos que deben utilizarse con la ecuación (4.27).....	90
87	Tabla 4. 4. Factores de presión para equipos de proceso. ....	90
88	Tabla 4. 5. Factores de corrección por tipo de material y para contantes de módulo desnudo. ....	91
89	Tabla 4. 6. Costo unitario de servicios auxiliares.....	91
90	Tabla 4. 7. Costo de materia prima y productos.....	92
91		
92	Tabla 5. 1. Componentes presentes en el gas natural. ....	94
93	Tabla 5. 2. Validación de la simulación de la torre de absorción frente a los datos de planta. ....	97
94	Tabla 5. 3. Comparación de la simulación de la torre de absorción en DWSIM frente a la realizada en	
95	Aspen Plus.....	97
96	Tabla 5. 4. Comparación de la simulación del proceso de endulzamiento de gas, datos experimentales	
97	frente a la simulación en Aspen. ....	98
98	Tabla 5. 5. Parámetros calculados para modelar la columna de absorción a escala industrial.....	100
99	Tabla 5. 6. Comparación de los resultados obtenidos entre Matlab y Aspen frente a los datos de planta.	
100	.....	102
101	Tabla 5. 7. Parámetros calculados del modelo de absorción en HFMC para el endulzamiento de gas..	105
102	Tabla 5. 8. Parámetros calculados para modelar la absorción en HFMC aplicados en el caso de estudio	
103	actual. ....	109
104	Tabla 5. 9. Parámetros óptimos calculados para el proceso de absorción en columna empacada. ....	113
105	Tabla 5. 10. Parámetros óptimos calculados para el proceso de absorción en HFMC.....	115

106	Tabla 5. 11. Diferentes desempeños de los esquemas de control implementados. ....	119
107	Tabla 5. 12. Comparación de la simulación del proceso de endulzamiento de gas con parámetros de	
108	planta frente a la simulación con el proceso de absorción empacada óptimo. ....	130
109	Tabla 5. 13. Comparación de la simulación del proceso de endulzamiento de gas con parámetros de	
110	planta frente a la simulación con el proceso de absorción de HFMC óptimo. ....	132
111	Tabla 5. 14. Comparación de costos de las diferentes alternativas de la simulación de la planta de	
112	endulzamiento obtenidos mediante Aspen Plus. ....	133
113	Tabla 5. 15. Comparación de costos calculados mediante el método de factores de las diferentes	
114	alternativas de la simulación de la planta de endulzamiento. ....	134
115	Tabla 5. 16. Comparación de costos totales calculados considerando la inflación y un horizonte de	
116	amortización a 15 años para las diferentes alternativas de la simulación de la planta de endulzamiento.	
117	.....	136
118	Tabla 5. 17. Comparación del margen de ganancia para un estudio de clase 4 para las diferentes	
119	alternativas de la simulación de la planta de endulzamiento. ....	138
120		
121		
122		
123		
124		
125		
126		
127		
128		
129		
130		
131		
132		

## NOMENCLATURA

133		
134		
135	$CO_2$	Dióxido de carbono
136	$H_2S$	Ácido sulfhídrico
137	$CH_4$	Metano
138	$C_2H_6$	Etano
139	$C_3H_8$	Propano
140	$N_2$	Nitrógeno
141	<i>MEA</i>	Monoetanolamina
142	<i>MDEA</i>	Metildietanolamina
143	<i>DEA</i>	Dietanolamina
144	<i>HFMC</i>	Contactador de membrana de fibra hueca
145	<i>PP</i>	Polipropileno
146	<i>PDMS</i>	Polidimetilsiloxano
147	<i>PTFE</i>	Politetrafluoroetileno
148	<i>PVDF</i>	Polivinilideno
149	<i>PS</i>	Polisulfona
150	<i>PES</i>	polietersulfona
151	<i>EDO</i>	Ecuaciones diferenciales ordinarias
152	<i>EDP</i>	Ecuaciones diferenciales parciales
153	<i>LPS</i>	Sistema de parámetros concentrados
154	<i>DPS</i>	Sistema de parámetros distribuidos
155		
156	<b>Modelado</b>	
157	$N_A$	Flux de masa
158	$D$	Coefficiente de difusión molecular
159	$C$	Concentración
160	$z$	Longitud axial
161	$\delta_D$	Espesor de la capa límite de difusión
162	$a$	Constante de proporcionalidad geométrica

163	$k_m$	Coefficiente de transferencia de masa
164	$p$	Presión parcial
165	$m$	Pendiente de equilibrio líquido-vapor
166	$K_G$	Coefficiente global de transferencia de masa
167	$He$	Constante de Henry
168	$F$	Flujo másico
169	$v$	Velocidad de flujo
170	$S$	Área de la sección transversal
171	$M$	Masa molecular
172	$\rho$	Densidad
173	$t$	Tiempo
174	$A_u$	Área de transferencia interfacial
175	$x$	Fracción de líquido
176	$y$	Fracción de vapor
177	$T$	Temperatura
178	$C_p$	Capacidad calorífica
179	$h$	Coefficiente de transferencia de calor interfacial
180	$\Delta H_R$	Calor de reacción
181	$k_{i-j}$	Constante de velocidad aparente de reacción para componentes $i$ y $j$
182	$C_{in}$	Concentración inicial
183	$r$	Longitud radial
184	$L$	Longitud axial total
185	$f$	Número de fibras
186	$\varepsilon$	Porosidad
187	$\tau$	Tortuosidad
188	$Re$	Número de Reynolds
189	$d$	Diámetro
190	$\mu$	Viscosidad dinámica
191	$\phi$	Fracción de volumen vacío

192	$Q$	Flujo volumétrico
193	$P$	Presión
194	$PM$	Peso molecular
195	$g$	Aceleración de la gravedad
196	$R$	Longitud radial total
197	$Pe$	Número de Peclet
198		
199	<b>Control</b>	
200	PID	Control proporcional integral derivativo
201	MEC	Compensación de error de modelado
202	MPC	Control predictivo basado en modelo
203	NMPC	Control predictivo no lineal basado en modelo
204	SMC	Control de modos deslizantes
205	$\tau$	Tiempo de respuesta
206	$K$	Ganancia
207	$K_p$	Constante proporcional
208	$K_I$	Constante integral
209	$K_D$	Constante derivativa
210	$u$	Variable de control
211	$e$	Error de regulación
212	$\eta$	Parámetros observados
213	$y$	Salida
214	$y_{ref}$	Referencia de salida
215	$\tau_c$	Parámetro de observabilidad de control MEC
216	$\tau_c$	Parámetro de controlabilidad de control MEC
217	$\tau_c$	Tiempo de residencia
218	$N$	Nodo en el eje axial, horizonte de predicción
219	$M$	Nodo en el eje radial
220	$u_{min}$	Límite mínimo de la variable de control

221	$u_{\max}$	Límite máximo de la variable de control
222	$U$	Secuencia de variables manipuladas
223	$\gamma_1, \gamma_2$	Parámetros de controlabilidad del control NMPC
224	$\delta, \lambda$	Parámetros de controlabilidad del control SMC
225		
226	<b>Optimización</b>	
227	$x$	VARIABLES DE ESTADO
228	$f$	Función objetivo
229	$g, h$	Funciones de restricción
230	$s$	VARIABLES DE HOLGURA
231	$v$	Coefficiente de proporcionalidad
232	$u$	VARIABLES DE DECISIÓN
233	$p$	Parámetros independientes
234		
235	<b>Costos</b>	
236	$ACB$	Análisis costo beneficio
237	$B$	Beneficios
238	$C$	Costos
239	$VAN$	Valor actual de ingresos totales
240	$VAC$	Valor actual de costos totales
241	$CT$	Costos totales
242	$CFI$	Costos fijos de inversión
243	$CO$	Costos de operación
244	$CDLB$	Costos dentro de los límites de batería
245	$CFLB$	Costos fuera de los límites de batería
246	$CIC$	Costos de ingeniería y construcción
247	$CC$	Costos por contingencias
248	$F$	Factor de Lang
249	$C_e$	Costo total de los equipos de la planta
250	$f$	Factores específicos de Lang

251	$N$	Número total de equipos de proceso
252	$C_{es}$	Costo específico por equipo
253	$a, b$	Coefficientes de costo específicos
254	$CMO$	Costos de mano de obra
255	$CSA$	Costos por servicios auxiliares
256	$CTE$	Costos por tratamiento de residuos
257	$CMP$	Costos por adquisición de materia prima
258	$N_s$	Etapas que incluyen manejo de sólidos
259	$N_n$	Etapas que no incluyen manejo de sólidos
260	$O_N$	Cantidad mínima de operadores por equipo
261	$S_m$	Salario de operador de procesos
262	$F_{TV}$	Flujo total de vapor utilizado en la planta
263	$C_{UV}$	Costo unitario de vapor
264	$F_{TW}$	Flujo total de agua de calentamiento
265	$C_{UW}$	Costo unitario de agua
266	$P_T$	Potencia de los equipos que ocupan energía eléctrica
267	$F_P$	Flujo de equipos que utilizan energía eléctrica
268	$C_{UE}$	Costo unitario de energía eléctrica
269	$m_p$	Masa total de producto generado
270	$M$	Número total de productos generados
271	$BA$	Beneficios económicos por ahorro o aprovechamiento de utilidades
272	$CE$	Rango de costos
273	$I$	Inflación
274	$K, C, B$	Parámetros de correlación para cálculo de costos
275	$F_p$	Factor de presión
276		
277	<b>Subíndices</b>	
278	$G$	Fase gas

279	<i>L</i>	Fase líquida
280	<i>A</i>	Componente <i>A</i>
281	<i>x</i>	Líquido
282	<i>y</i>	Vapor
283	<i>i</i>	Componente <i>i</i> , dominio <i>i</i>
284	<i>j</i>	componente <i>j</i> , dominio <i>j</i>
285	1	Sección 1
286	2	Sección 2
287	3	Sección 3
288	<i>tubo</i>	Sección de tubo en el HFMC
289	<i>mem</i>	Sección de la membrana en el HFMC
290	<i>cor</i>	Sección de la coraza en el HFMC

291

292

293

294

295

296

297

298

299

300

301

302

303

---

## *CAPITULO I: Introducción*

---

304  
305  
306 A nivel mundial, el gas natural representa una buena alternativa energética al satisfacer las  
307 necesidades de la industria a un costo económico favorable y con beneficio ecológico. El uso de  
308 gas natural en el sector eléctrico es fundamental para el avance de las fuentes renovables de  
309 energía, ya que, frente a la intermitencia de las energías eólica o solar, aporta certeza en la  
310 capacidad y velocidad de respuesta a costos competitivos, cuando las energías alternativas no  
311 están disponibles. Además, el gas natural es el único combustible fósil cuyo consumo relativo ha  
312 crecido en los últimos veinte años y es la tercera fuente primaria de energía con una contribución  
313 de 10.1 mil millones  $\text{m}^3/\text{día}$ , que representa 23.36% del total de fuentes de energía, sólo por  
314 debajo del petróleo y el carbón (Dudley, 2018). En ese sentido, la industria química y energética  
315 han experimentado cambios importantes en el desarrollo científico y tecnológico para la  
316 obtención de gas natural mediante procesos de absorción de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y ácido  
317 sulfhídrico ( $\text{H}_2\text{S}$ ). Por ello, la ingeniería de procesos es fundamental para el desarrollo de  
318 productos, bienes y servicios de mayor calidad, y satisfacer las demandas actuales de gas natural.  
319 La ingeniería de procesos engloba numerosos conocimientos sobre termodinámica, fenómenos  
320 de transporte y cinética química utilizados para la aplicación de técnicas de diseño, modelado,  
321 simulación, optimización y control de procesos (Bequette, 2003). Entonces, en el contexto del  
322 gas natural, el trabajo de un ingeniero de procesos está en la generación de conocimiento y su  
323 aplicación para desarrollar procesos industriales económicos, eficientes y amigables con el  
324 ambiente. Una de las estrategias para el estudio de equipos y plantas de procesamiento de gas es  
325 mediante la simulación y el modelado de procesos. Los modelos matemáticos son útiles en la  
326 investigación, el desarrollo de conocimiento de frontera, el diseño de procesos y la operación de  
327 plantas (Luyben, 1989). Derivada de esta herramienta se encuentra el control de procesos. El  
328 objetivo del control en las plantas de endulzamiento radica en el ajuste de una o más variables  
329 manipulables, con el fin de garantizar la convergencia de una o más variables hacia un valor de  
330 referencia previamente establecido. Para este caso, se busca que los procesos de absorción  
331 cumplan con los estándares de calidad que dictan las normas, las cuales sugieren que es necesario  
332 retirar en mayor medida el  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{S}$  de la corriente de gas. La complejidad y la inestabilidad  
333 de los sistemas de absorción requieren la implementación de estrategias de control robusto para

334 llevar a cabo una operación dentro de los límites definidos y obtener los resultados deseados en  
335 términos de concentraciones, rendimientos o pureza. Controlar los procesos involucrados en el  
336 endulzamiento puede ser complejo debido a las interacciones entre los componentes de la mezcla  
337 gaseosa, las no linealidades de los procesos, las fases involucradas, los fenómenos de transporte  
338 y las reacciones químicas. En ese sentido, la implementación de técnicas de control robustas es  
339 una necesidad actual. Para definir los parámetros de referencia en la aplicación del control de  
340 procesos es necesario conocer las características que permiten llegar al estado deseado de manera  
341 sencilla. Para ello, se utilizan herramientas de optimización que permitan determinar las  
342 condiciones operativas que mejoran la eficiencia de los procesos de absorción. La optimización  
343 es una disciplina que busca potenciar los procesos para obtener los mejores resultados dadas  
344 ciertas condiciones. Actualmente, existe ningún método de optimización que pueda resolver  
345 eficientemente cualquier problema, por lo que existen diversas alternativas (Candotti *et al.*,  
346 2014). En la ingeniería química las aplicaciones de la optimización son diversas, principalmente  
347 enfocadas en la maximización de conversiones y ganancias o la minimización de gasto energético  
348 y costos operativos, como en el caso del endulzamiento de gas. Los algoritmos para la  
349 optimización de procesos restringidos se aplican en funciones convexas o regulares por lo que,  
350 si el problema de optimización es más complejo, se generarán dificultades de convergencia.  
351 Muchos problemas de optimización para procesos de absorción no satisfacen las condiciones de  
352 convexidad por lo que es difícil verificar si son correctas. De modo que, en su mayoría, los  
353 modelos que incluyen ecuaciones de restricción no lineales basados en balances de materia,  
354 relaciones no lineales entre las propiedades físicas, ecuaciones de estado, etc, requieren de la  
355 aplicación de algoritmos de optimización no lineal (Edgar *et al.*, 2001). La aplicación de las  
356 técnicas de modelado, simulación, control y optimización en el proceso de absorción para el  
357 endulzamiento de gas permite determinar si es posible encontrar beneficios económicos,  
358 energéticos y del rendimiento de la planta. Para ello, es necesario aplicar estrategias novedosas  
359 que permitan resaltar los beneficios potenciales de migrar a otros procesos más eficientes.  
360 Aunque el proceso de endulzamiento de gas ha sido estudiado desde hace muchos años, las  
361 alternativas como el uso de contactores de membrana puede ser una contribución interesante para  
362 la sustitución de equipos con mejores características. Esto deja en evidencia un campo de  
363 aplicación, el cual puede ampliarse mediante la generación de conocimiento de frontera aplicado  
364 al endulzamiento de gas natural mediante procesos que incluyan la tecnología de membranas.

365

## 366 **1.1 Motivación general**

367 En los últimos años, el incremento acelerado de la población y la calidad de vida ha generado  
368 mayor demanda en productos, bienes y servicios necesarios para la sociedad. Con la finalidad de  
369 satisfacer esta demanda, la industria química y energética ha elevado su generación de residuos  
370 y subproductos que no son aprovechados, aumentando su consumo energético y perjudicando al  
371 medio ambiente (Dechezleprêtre y Sato, 2017). Debido a ello, las políticas mundiales actuales  
372 en materia ambiental solicitan a las industrias el uso de fuentes de energía alternativa, así como  
373 la captura, tratamiento y aprovechamiento de sus residuos. La búsqueda de fuentes de energía  
374 más amigables con el ambiente ha favorecido el desarrollo de conocimiento de frontera en la  
375 mejora de los procesos industriales. Si bien algunas grandes industrias han adoptado la  
376 integración de fuentes de energía renovables, la energía obtenida a partir de la ignición de  
377 combustibles fósiles y compuestos orgánicos es la tendencia más usada, misma que no será  
378 remplazada en el corto plazo (Manaf *et al.*, 2019). Entre las alternativas en el uso de energías  
379 menos dañinas al ambiente, el gas natural es un combustible que presenta ciertas ventajas sobre  
380 otras fuentes de energía como el carbón o el petróleo pues resulta versátil, abundante, limpio y  
381 económico (Mak *et al.*, 2015). El gas natural se ha posicionado como una potencial alternativa  
382 debido que al quemarse genera 50% menos emisiones de gases de efecto invernadero en  
383 comparación con otros combustibles fósiles (Gürsan y de Gooyert, 2020). Además, el gas natural  
384 presenta una mayor eficiencia en relación con otros hidrocarburos al ser empleado para  
385 producción de energía eléctrica (Nakicenovic *et al.*, 2000).

386 A nivel mundial, gas natural representa aproximadamente el 24% del consumo total de  
387 fuentes de energía primaria. Para que este gas pueda ser utilizado de forma comercial, debe pasar  
388 por diferentes etapas de procesamiento, iniciando por el endulzamiento, que consiste  
389 principalmente en la eliminación de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S de la composición de la corriente de gas natural.  
390 Si la separación del CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S no es adecuada se reduce del poder calorífico del gas y pueden  
391 presentarse problemas operativos como la reducción de la eficiencia, corrosión en tuberías,  
392 formación de espuma o ensuciamiento de los equipos (Mulukutla *et al.*, 2014; Porter *et al.*, 2015).  
393 La captura de estos gases implica un proceso de separación a gran escala, donde la operación  
394 más aceptada y aplicada a nivel industrial es la absorción química gas-líquido (Mangalapally *et*

395 *al.*, 2009). Específicamente, para retirar el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S se utilizan solventes afines como las  
396 aminas. Estos compuestos son utilizados debido a sus características particulares como ser  
397 solventes polares, presentar alta resistencia a la degradación térmica, bajo peso molecular y baja  
398 solubilidad en hidrocarburos (Huttenhuis *et al.*, 2007; Harris *et al.*, 2009; Jassim, 2016). Si bien  
399 el uso de aminas mejora la eficiencia de la absorción química en procesos de endulzamiento, se  
400 deben considerar algunas desventajas operativas como bajas cargas de alimentación, pérdidas de  
401 gas debido a los cambios de presión y altos requerimientos energéticos (Abkhiz y Heydari, 2014;  
402 Flo *et al.*, 2017; Ellaf, *et al.*, 2023). En este contexto, es imprescindible la implementación de  
403 acciones y la adaptación de nuevas tecnologías para mejorar la eficiencia del proceso de  
404 endulzamiento.

405 Una de las alternativas más atractivas que se encuentran en desarrollo para mejorar los  
406 procesos de absorción está basada en la integración de contactores de membrana de fibra hueca  
407 (HFMC, por sus siglas en inglés). Esta tecnología relativamente emergente ha ganado cada vez  
408 más aceptación en la comunidad científica gracias a que opera a condiciones moderadas (5-50  
409 °C y 1-4.5 atm) y económica junto a su alta eficiencia energética (Rezakazemi *et al.*, 2017; Nakao  
410 *et al.*, 2019; Sang y Luis, 2019; Xie *et al.*, 2019). En el área del endulzamiento de gas natural, se  
411 han desarrollado estudios donde se busca la integración de estos procesos con membranas para  
412 la absorción de gases ácidos (Hoff y Svendsen, 2013; Al-Marzouqi *et al.*, 2017; Imtiaz *et al.*,  
413 2023). A pesar de los avances tecnológicos que existen en la separación de gases ácidos usando  
414 HFMC, en la literatura existe una fuerte controversia respecto al costo de implementación de esta  
415 operación (Usman *et al.*, 2018; Awadallah y Venkatesh, 2019; Mansourizadeh *et al.*, 2022).  
416 Además, la incorporación de nuevas tecnologías a las plantas supone cambios importantes que  
417 requieren estudios específicos para garantizar la eficiencia, moderar el costo global y reducir el  
418 consumo energético. Específicamente, el modelado y la simulación de procesos son una  
419 alternativa de estudio que permite el ahorro de gastos experimentales, tiempos cortos en la  
420 obtención de resultados confiables y la posibilidad de plantear diferentes estrategias de  
421 optimización y control (Manaf *et al.*, 2016; Radzuan *et al.*, 2019).

422 Al respecto, se ha reportado la aplicación de algunas técnicas de optimización en procesos  
423 de absorción con membranas enfocadas en el aprovechamiento del solvente y la materia prima,  
424 la optimización de energía y costos, o la mejora en el rendimiento de absorción de gases ácidos  
425 (He *et al.*, 2020; Abejón *et al.*, 2022; Xia *et al.*, 2023). Sin embargo, estos trabajos no son

426 aplicados al endulzamiento, además, presentan limitaciones ya que se han enfocado únicamente  
427 en la absorción de CO<sub>2</sub>, en el estudio individual del proceso con membranas o desde un enfoque  
428 de optimización en el estado estable. Por otro lado, las técnicas de control solo se han aplicado  
429 en función de la respuesta del proceso y no se ha abordado en la literatura técnicas de control  
430 robusto basadas en modelo, lo cual representa limitaciones para la toma inmediata de decisiones  
431 (Faiz *et al.*, 2014; Jin *et al.*, 2017; Fougerit *et al.*, 2019). Lo anterior hace evidente un área de  
432 oportunidad para un estudio donde se consideren estrategias de optimización y control robustas  
433 que permitan resaltar los beneficios de la sustitución de un proceso de absorción convencional  
434 por un proceso con membranas integrado a la planta de endulzamiento de gas natural.

435

## 436 **1.2 Estado del arte**

437 En México, el gas natural representa una de las fuentes de energía más importantes, pues  
438 aproximadamente el 80% de la energía eléctrica generada mediante combustibles fósiles  
439 corresponde a este servicio, donde se estima que el gas natural seguirá siendo una de las  
440 principales fuentes para cubrir las necesidades energéticas de la industria (SENER, 2023). La  
441 composición principal del gas natural es 80% de metano (CH<sub>4</sub>), y 20% restante por etano (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>),  
442 propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) y algunos otros hidrocarburos de cadena larga (C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>), nitrógeno (N<sub>2</sub>),  
443 así como CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S considerados como gases ácidos. Para la utilización de este combustible a  
444 modo de cumplir la normatividad existente, debe reducirse a niveles bajos la concentración de  
445 gases ácidos en las corrientes que se mandan para aplicaciones de tratamiento secundario. En ese  
446 sentido, el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S deben ser eliminados, ya que además de ser tóxicos para la salud humana,  
447 disminuyen la calidad y desencadenan efectos corrosivos (Faramawy *et al.*, 2016). Entre los  
448 principales procesos de captura de estos gases ácidos se encuentra la absorción química, donde  
449 se pone al gas en contacto con un líquido donde el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S son solubles. La transferencia  
450 de masa es resultado de la diferencia de concentraciones que existe entre ambas fases. Lo anterior  
451 provoca que los gases ácidos se transporten desde el seno del gas hacia el seno del líquido. Los  
452 gases ácidos presentes en la fase gas se transfieren con el propósito de alcanzar el equilibrio por  
453 difusión molecular, difusión turbulenta y convección.

454 Específicamente, la absorción química basada en el uso de aminas ha sido ampliamente  
455 estudiada para remover el CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S proveniente de fuentes naturales y gases de combustión

456 (Coda *et al.*, 2006). La típica solución alcalina para la absorción química de CO<sub>2</sub> incluye  
457 monoetanolaminas (MEA), dietanolaminas (DEA), metildietanolaminas (MDEA), u otros  
458 componentes afines al CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S (Mokhatab *et al.*, 2015). El empleo de estos solventes lleva  
459 consigo a un proceso de absorción reactiva, que se caracteriza por poseer un alto calor de reacción  
460 para el CO<sub>2</sub> (1x10<sup>3</sup> KW), lo cual implica una cantidad significativa de energía para lograr su  
461 regeneración. Los equipos empleados en los procesos de absorción presentan diferentes diseños  
462 estructurales, pero entre los más utilizados, destacan las columnas de absorción de lecho  
463 empacado, debido a que cuentan con la ventaja de presentar menores costos ante problemas de  
464 corrosión, aumentos en el área efectiva de transferencia de masa y menores caídas de presión  
465 (Pashaei *et al.*, 2020). El procesamiento de los componentes involucrados considera una columna  
466 de absorción y una columna de desorción. Primero, la mezcla de gases se pone en contacto con  
467 el disolvente en la columna de absorción. De este modo, el gas sale libre de los componentes no  
468 deseados y por los fondos sale el disolvente enriquecido con los gases absorbidos. Esta corriente  
469 líquida enriquecida es alimentada a la columna de desorción para regenerar el solvente de manera  
470 que pueda reutilizarse. Su eficiencia, en términos de la eliminación y rendimiento económico,  
471 depende de la flexibilidad del proceso. De hecho, a nivel industrial la absorción empacada es la  
472 técnica más utilizada para el endulzamiento de gas.

473 Por ello, se han realizado estudios teóricos y experimentales para comprender, diseñar,  
474 controlar y optimizar el proceso en el endulzamiento de gas natural basado en la absorción  
475 química. Se estima que aproximadamente se pueden alcanzar eficiencias de remoción entre el 85  
476 al 95% (Bernhardsen y Knuutila, 2017). Respecto a su implementación, se han desarrollado  
477 numerosos estudios tanto a nivel planta piloto como a nivel industrial, encontrando importantes  
478 contribuciones para el diseño y la operación, así como la evaluación de los parámetros  
479 involucrados como las velocidades de flujo y la concentración a la entrada. (Faber *et al.*, 2011,  
480 Flo *et al.*, 2017). Se reporta que la absorción química tiene un costo de operabilidad rentable y la  
481 inversión para su aplicación es relativamente baja. Por otra parte, esta operación se ha estudiado  
482 mediante simulación computacional en diferentes softwares especializados permitiendo el  
483 análisis de las variables y corroborando lo encontrado con los desarrollos experimentales  
484 (Bandyopadhyay y Mandal 2004; Borhani *et al.*, 2016). Sin embargo, el alto consumo de energía  
485 causado por la absorción y regeneración es un cuello de botella, pues la implementación de  
486 procesos de purificación puede disminuir la eficiencia de una planta entre 10-20% dependiendo

487 de la fuente de gas (Goto *et al.*, 2013; Liu *et al.*, 2019). Específicamente, regeneración del  
488 solvente en el costo operacional de la planta es importante, pues el consumo energético global  
489 puede elevarse del 50 a 90% dependiendo de la cantidad del solvente utilizado (Luis y Van der  
490 Bruggen, 2013). Aunado a esto, puede ser necesario el pretratamiento de los gases antes de ser  
491 enviados a la torre de absorción debido a su contenido de humedad y la presencia de otro tipo de  
492 contaminantes como SO<sub>x</sub> y NO<sub>x</sub> (Porter *et al.*, 2015). Esta situación ha favorecido la generación  
493 de diferentes estudios enfocados en el desarrollo de nuevas tecnologías para la captura de  
494 componentes no deseados como el CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S. Entre las principales alternativas se encuentran la  
495 adsorción física, el uso de microalgas y el uso de membranas (Singh y Dhar, 2019).

496

### 497 **1.2.1 Métodos para la captura de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S**

498 A continuación, se abordará en breve los distintos métodos utilizados para la eliminación del CO<sub>2</sub>  
499 y H<sub>2</sub>S. Los procesos de adsorción se basan en importantes fuerzas intermoleculares entre los  
500 gases (incluido el CO<sub>2</sub>) y la superficie de los adsorbentes como carbón activado, zeolitas,  
501 estructuras orgánicas metálicas, entre otras (Gao *et al.*, 2017). La adsorción tiene una gran ventaja  
502 respecto a la facilidad de regeneración de los adsorbentes por medio de procesos térmicos o la  
503 regulación de presión. Sin embargo, presenta desventajas como la baja selectividad de los gases  
504 ácidos y baja capacidad en los adsorbentes disponibles, en comparación con otras tecnologías  
505 como la absorción (Ben-Mansour *et al.*, 2016). A pesar de que se han desarrollado numerosos  
506 estudios para la mejora de este proceso, se sigue investigando su posible aplicación en procesos  
507 industriales de gran volumen. Respecto al método criogénico se utilizan bajas temperaturas para  
508 asegurar la separación, condensación y purificación del CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S bajo una serie de pasos de  
509 enfriamiento (Brunetti *et al.*, 2010). Las principales desventajas de este proceso son las grandes  
510 cantidades de energía que se requieren para proporcionar refrigeración y solidificación de los  
511 gases. Aunado a esto, es necesaria la eliminación de la humedad antes del enfriamiento para  
512 evitar la obstrucción en las superficies del proceso por componentes solidificados (Berstad *et al.*,  
513 2013). Considerando los métodos biológicos que utilizan algas, bacterias o plantas, la biofijación  
514 del CO<sub>2</sub> a las microalgas ha ganado reciente interés como un proceso más eficiente que en las  
515 plantas terrestres (Razzak *et al.*, 2017). El proceso de captura con microalgas tiene como ventajas  
516 ser un método sostenible, utilizar la energía solar y coproducir ingredientes de alto valor  
517 agregado. Algunas limitaciones para su implementación son la necesidad de contar con una

518 fuente de nutrientes inorgánicos y la energía que requiere el cultivo, cosecha y secado de la  
519 biomasa. Aunado a esto, la baja solubilidad del CO<sub>2</sub> en el agua es otro problema que necesita ser  
520 atendido, sin contar las implicaciones tiene la presencia del H<sub>2</sub>S en el gas (Goli *et al.*, 2016).

521 Por otra parte, el uso de membranas selectivas para la captura de gases también ha sido  
522 estudiado, donde la transferencia de masa depende de la selectividad y la permeabilidad de la  
523 membrana. Algunas de las ventajas de esta operación son el incremento del área de contacto y  
524 mayor flexibilidad en la operabilidad del proceso (Ji *et al.*, 2019). Específicamente, la operación  
525 de este proceso puede no considerar un fluido de arrastre, donde la transferencia de masa es  
526 favorecida por la diferencia de velocidades de permeación del gas y depende del espesor y la  
527 presión diferencial de la membrana (Itel *et al.*, 2012). El proceso de separación por membranas  
528 sin compuesto de arrastre puede clasificarse en tres grupos según el mecanismo de separación:  
529 difusión simple, difusión compleja o facilitada y, las conductoras de iones (Koros y Mahajan,  
530 2000). En el campo de las tecnologías de membranas, las fabricadas con polímeros de mecanismo  
531 de difusión simple se han utilizado ampliamente para el endulzamiento de gases. Esto debido a  
532 su alta resistencia térmica y que los tamaños de poro permiten la selección de compuestos  
533 específicos como los gases ácidos (Wang *et al.*, 2013; Li *et al.*, 2018; Xu y Lin, 2019). La  
534 selectividad de la membrana depende de la solubilidad y difusividad de la molécula de gas en la  
535 matriz de la membrana. Para lograr el rendimiento deseado, se debe seleccionar adecuadamente  
536 el tipo de material de la membrana (Ahmad *et al.*, 2012). Al respecto, Scholes *et al.* (2014a)  
537 simuló 3 diseños para un proceso de captura de CO<sub>2</sub> por membrana a la salida de un horno.  
538 Sus resultados mostraron que las 3 propuestas podrían proporcionar un costo de captura de 74  
539 USD por tonelada de CO<sub>2</sub>, siendo competitivas frente a las tecnologías convencionales. Por su  
540 parte, Kim *et al.* (2018) fabricaron módulos de membranas compuestas de fibra hueca de  
541 polifluoruro de vinilideno para evaluar las características de separación. Los resultados muestran  
542 que su arreglo permite recuperar un 32% más de gases ácidos. Posteriormente, Xu *et al.* (2019)  
543 realizaron un análisis paramétrico con la finalidad de identificar el impacto de algunas variables  
544 como concentración de CO<sub>2</sub>, presión, y selectividad. Encontraron que para reducir a un costo  
545 mínimo el proceso, es deseable trabajar a presiones menores de 10 atm.

546 Si bien, la separación mediante membranas sin solventes presenta ciertas ventajas,  
547 algunas limitaciones importantes son el pretratamiento para la remoción de impurezas y la  
548 plastificación de la membrana por condiciones de operación exigentes. En contraste, en la

549 absorción por membranas utilizando líquidos de arrastre, los poros de la membrana se ponen en  
550 contacto con una fase líquida afín al soluto a remover, la cual promueve mayor superficie de  
551 contacto y limita la interacción entre las fases. Una tecnología agregada a este proceso es el uso  
552 membranas de fibra hueca para operaciones de absorción de gases. En el contactor, la membrana  
553 porosa actúa como soporte para proporcionar una superficie adicional para el contacto entre las  
554 dos fases y promover la transferencia de masa (Purwasasmita *et al.*, 2015). Además, los  
555 fenómenos de transporte tienen un papel muy importante pues esta operación implica sistemas  
556 multifásicos de gas/vapor y líquido con transferencia por convección y difusión. Se espera que  
557 la membrana proporcione un proceso de mayor contacto entre el gas y el disolvente, donde la  
558 selectividad está dominada por la membrana y el disolvente. Una de las principales ventajas del  
559 proceso HFMC es su área interfacial extremadamente alta que da pie a la intensificación del  
560 proceso para la reducción del tamaño del equipo (Drioli *et al.*, 2011). Otras ventajas son su alta  
561 flexibilidad operativa, modularidad y que se pueden evitar los problemas comunes de las  
562 columnas de absorción convencionales como la inundación, la espuma y la canalización (Cui &  
563 Demontigny, 2013). En ese sentido, se han realizado un gran número de estudios sobre la  
564 aplicación de los HFMC en la eliminación de compuestos ácidos de diversas corrientes de gas,  
565 mediante estudios a nivel laboratorio y planta piloto para la determinación de condiciones de  
566 operación, configuración y diseño. Tres de sus principales aplicaciones han sido la captura de  
567 carbono tras la combustión, en la purificación del biogás y la eliminación de los componentes  
568 ácidos del gas natural (Sreedhar *et al.*, 2017).

569 Uno de los pioneros en el estudio de HFMC es la organización holandesa para la  
570 investigación científica aplicada (TNO), que lleva mucho tiempo desarrollando estudios del uso  
571 de HFMC para la eliminación de CO<sub>2</sub> de los gases de combustión (Feron y Jansen, 1995). De  
572 igual forma, *Gas Technology Institute* (GTI) han desarrollado tecnología de HFMC (*Carbo-*  
573 *Lock™*) para la captura de contaminantes en los gases de combustión, obteniendo eficiencias de  
574 captura superiores al 90% (Arunabha *et al.*, 2013). Scholes *et al.* (2014b) realizaron ensayos en  
575 planta piloto con membranas porosas (polipropileno y politetrafluoroetileno) y no porosas  
576 (polidimetilsiloxano, PDMS) para la separación de CO<sub>2</sub> en corrientes de combustión. La  
577 membrana de PDMS tuvo el coeficiente de transferencia de masa global más bajo ( $1 \times 10^{-8}$  m<sup>2</sup>/s),  
578 que fue inferior al contactor de polipropileno en dos órdenes de magnitud tanto en las pruebas de  
579 rendimiento en laboratorio como en planta piloto. Posteriormente, Lee *et al.* (2019) propusieron

580 el uso de membranas para un proceso de captura de CO<sub>2</sub> enfocado a procesos de postcombustión  
581 industriales. Los resultados mostraron que a bajas temperaturas la membrana es capaz de remover  
582 hasta un 99% del CO<sub>2</sub>. Sin embargo, mencionaron que es necesario mejorar la rentabilidad de  
583 este proceso para su aplicación. Por otra parte, en el tratamiento de biogás, Shalygin *et al.* (2011)  
584 fabricaron un contactor a escala piloto basado en una membrana no porosa para la separación de  
585 componentes ácidos. Los resultados de sus pruebas sugieren que el control del flujo del  
586 absorbente es muy importante para hacer frente a la variación de composiciones y flujos de  
587 biogás. Por su parte, Park *et al.* (2017) realizaron esfuerzos considerables en el desarrollo de la  
588 tecnología de HFMC para la purificación del biogás proponiendo un contactor con configuración  
589 de desorción en cascada, y encontraron tasas de remoción del 80%. Maia *et al.* (2017) realizaron  
590 una prueba piloto de un HFMC para la eliminación de H<sub>2</sub>S y CO<sub>2</sub> del biogás utilizando una  
591 solución de Fe-EDTA. Sus resultados mostraron que la aplicación de esta tecnología es una buena  
592 alternativa para la eliminación de gases ácidos en corrientes generadas mediante procesos  
593 biológicos para la producción de hidrógeno.

594         Respecto a la implementación de los HFMC para el endulzamiento de gas, Herzog y Falk-  
595 Pedersen (2000) realizaron los primeros ensayos de esta tecnología a escala piloto para el  
596 tratamiento de gas natural con el funcionamiento más largo de 5,000 h en una terminal de  
597 Escocia. Utilizando DEA como absorbente, encontraron que se pueden alcanzar eficiencias  
598 cercanas al 85% de remoción. Realizaron un estudio experimental de un HFMC para la  
599 separación simultánea de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S. Para ello, se propusieron diferentes mezclas del solvente  
600 de arrastre entre ellas MDEA, DEA y MEA. Los resultados mostraron que la mezcla MDEA-  
601 MEA presentó menor humectación y una mayor eficiencia de separación respecto a las otras  
602 combinaciones. Rezakazemi *et al.* (2011) desarrollaron un estudio experimental y teórico de la  
603 absorción de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S en un HFMC para el endulzamiento de gas natural. Mediante el  
604 desarrollo de un modelo de CFD, los resultados mostraron que es posible predecir el rendimiento  
605 de la absorción de los gases ácidos. Posteriormente, Vericella *et al.* (2015) propusieron un  
606 enfoque novedoso de disolvente encapsulado en una fina membrana para la captura de gases  
607 ácidos. En este enfoque, se requieren menores dimensiones del contactor en comparación con el  
608 HFMC convencional, beneficiando la permeabilidad y la selectividad del sistema. Por otro lado,  
609 Al-Marzouqi *et al.* (2017) realizaron un estudio sobre la estabilidad operativa a largo plazo de  
610 las fibras huecas de PFA en la eliminación simultánea de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S. Consideraron una corriente

611 de gas a 50 bar cuya composición era similar a la del gas natural y el absorbente a 100 °C. Se  
612 mostraron algunas dificultades en la operación, pero permitieron la remoción de ambos  
613 compuestos en más del 80%. Siagian *et al.* (2018) desarrollaron un HFMC transversal sumergido  
614 para la absorción-desorción simultánea de CO<sub>2</sub> capturado de una corriente de gas natural. Sus  
615 resultados mostraron eficiencias del 80% y menor uso de solvente de arrastre en comparación  
616 con los procesos de absorción y desorción por separado. Dentro de los principales desafíos que  
617 enfrentan los HFMC en su aplicación industrial es que se ensucian, degradan y, aunque  
618 idealmente el proceso funciona en modo no húmedo en el que los poros de la membrana se llenan  
619 sólo con la fase gaseosa, esta puede humedecerse (Zhang *et al.*, 2015).

620

### 621 **1.2.2 Modelado y simulación de equipos de absorción**

622 En un esfuerzo por comparar las ventajas de las tecnologías de membranas frente a la absorción  
623 en columnas empacadas, se han desarrollado numerosos estudios experimentales y teóricos,  
624 destacando la diferencia de eficiencias, el costo de implementación/operación y su aplicación a  
625 nivel industrial. Por ejemplo, se ha reportado que los procesos de membrana pueden ser más  
626 eficientes a concentraciones altas de CO<sub>2</sub>, hasta el 12% de la composición del gas (Cui y  
627 deMontigny, 2013). No obstante, se pueden alcanzar mayores tasas de remoción con los procesos  
628 de absorción empacados, de hasta el 90%. Respecto a los costos relacionados a la absorción de  
629 gases, se conoce que las columnas empacadas presentan menor gasto de inversión (Tan *et al.*,  
630 2019), pero operativamente resultan costosos debido al requerimiento energéticos (Wu *et al.*,  
631 2020). Se estima que los procesos de absorción con membranas pueden presentar hasta el doble  
632 de la inversión requerida para la implementación de la tecnología a nivel industrial, pero  
633 operativamente resultan ser más competitivos presentando una reducción en los costos globales  
634 de al menos el 20% (Nakhjiri y Heydarinasab, 2019). En ese sentido, es evidente que la  
635 implementación de las tecnologías de absorción empacada ha sido ampliamente abordada a nivel  
636 planta piloto y a nivel industrial, donde regularmente se tratan corrientes con compuestos no  
637 deseados como en las plantas purificadoras de gas (Gaspár y Cormos, 2011; Madeddu *et al.*,  
638 2018). En el caso de la implementación de las tecnologías con membranas, se han llevado a cabo  
639 diversos esfuerzos a nivel planta piloto, pero su implementación a nivel industrial es aún escasa  
640 (Quek y Chachuat, 2021). La tecnología de los HFMC a nivel industrial fue desarrollada por  
641 *Kvaerner Process Systems* (KPS) junto con *W.L. Gore and Associates GmbH* (GORE), *SGL*

642 *Carbon Group* (SGL) y *Ottestad Breathing Systems* (OBS) para la eliminación de CO<sub>2</sub> de  
643 plataformas petrolíferas en Noruega (Zhao *et al.*, 2016). Respecto a su aplicación para el  
644 endulzamiento de gas, Rezakazemi *et al.* (2017) desarrollaron la integración de un HFMC a una  
645 planta industrial mediante el modelado, encontrando que es factible su aplicación; sin embargo,  
646 los costos de inversión aún se consideran elevados por lo que su aplicación se ha limitado.

647 Independientemente de la tecnología aplicada para la captura de gases ácidos, integrarla  
648 en una planta industrial supone cierto incremento en costos y complejidad pues involucran  
649 equipos que normalmente se estudian de forma individual (Li y Kwauk, 2003). Además, las  
650 características de los productos no dependen de una sola etapa, sino que también dependen de su  
651 postratamiento y del pretratamiento de la materia prima. Lo anterior ha generado gran interés en  
652 desarrollar estudios enfocados en el acoplamiento de procesos en plantas industriales como parte  
653 de la integración de ingeniería verde, con la finalidad de obtener productos de alta calidad. Dentro  
654 de las limitaciones encontradas en el acoplamiento de los procesos de captura a las plantas  
655 industriales es que existen numerosas variables que pueden brindar información global del  
656 rendimiento, principalmente las variables clave del proceso principal, las cuales permiten  
657 determinar la calidad, estabilidad y pureza de los productos (Kourti, 2005). A escala industrial,  
658 es común operar columnas de absorción continuas en estado estacionario para lograr la calidad  
659 deseada del producto. Para ello, es necesario considerar las características específicas del proceso  
660 como tiempos de respuesta prolongados, manejo de grandes volúmenes, reacciones químicas  
661 involucradas o respuestas no conocidas, dificultando la operación continua estable (López *et al.*,  
662 2017). Uno de los enfoques que permite el análisis de las diferentes variables del proceso es  
663 mediante el modelado y la simulación. En el caso de los procesos de absorción convencional ya  
664 han sido ampliamente estudiados y desarrollados tanto en software de simulación mediante  
665 algoritmos programados como simuladores modulares secuenciales (Erikoi, 2012; Li Zhang y  
666 Smith, 2016; De Riva, *et al.*, 2018). En el caso específico del endulzamiento de gas, Borhani *et*  
667 *al.* (2016) presentaron un modelo para la absorción reactiva de H<sub>2</sub>S y CO<sub>2</sub> utilizando MDEA  
668 como disolvente. Encontraron que la concentración de gas ácido a la salida de la columna  
669 aumenta de forma inversamente proporcional a la superficie específica de empaquetamiento y  
670 los coeficientes globales de transferencia de masa aumentan proporcionalmente al caudal de  
671 líquido. Karthigaiselvan y Panda (2021) desarrollaron un modelo dinámico de una columna de  
672 absorción de placas considerando el transporte difusivo. El modelo propuesto fue validado con

673 datos experimentales de una planta en operación. La evaluación del modelo mostró que la  
674 separación de gases ácidos se ve favorecida a altas presiones y bajas temperaturas.  
675 Recientemente, Ellaf *et al.* (2023) analizaron el rendimiento de una planta de endulzamiento  
676 considerando diferentes solventes. Mediante un análisis en Aspen Hysys, encontraron que una  
677 mezcla de sulfolano-MDEA mostró un ahorro energético del 20% respecto al caso base.

678 Por otro lado, también se han desarrollado contribuciones centradas en el modelado y  
679 simulación del proceso de absorción de membranas para predecir comportamientos, desarrollar  
680 análisis de sensibilidad y estudios dinámicos (Nakhjiri *et al.*, 2020; Vadillo *et al.*, 2021). Por  
681 ejemplo, Grainger y Hägg (2008) utilizaron datos de planta para la simulación de un proceso de  
682 ciclo combinado de gasificación integrada con captura de CO<sub>2</sub> mediante software de  
683 programación de algoritmos. Considerando los datos para una membrana de polivinilamina se  
684 logró una recuperación de CO<sub>2</sub> superior al 85% a una pureza del 95% vol. Se calculó que una  
685 planta modificada costaría 2.320 euros/kW, produciendo electricidad a un coste de 7.6 céntimos  
686 de euro/kWh y un coste de CO<sub>2</sub> de unos 40 euros/tonelada de CO<sub>2</sub>. Jordán *et al.* (2019) realizaron  
687 una investigación en la que evaluaron la integración de la captura de carbono postcombustión  
688 por absorción reactiva aplicando las características típicas de una planta de México modelada en  
689 Aspen Hysys. Los resultados muestran un aumento del 86% en el costo nivelado de electricidad  
690 con emisiones cercanas a cero. Recientemente, Ren *et al.* (2020) estudiaron el diseño y  
691 simulación de una central eléctrica típica de carbón de 550 MW utilizando Aspen Plus®  
692 incluyendo un sistema de membranas selectivas para la captura de gases. Al acoplar el uso de  
693 dos membranas una con afinidad al CO<sub>2</sub> y otra al N<sub>2</sub> es posible incrementar la separación de los  
694 gases, reduciendo el factor de costo. Respecto a su aplicación para el proceso de endulzamiento  
695 de gas, Rezakazemi *et al.* (2011) desarrollaron un modelo matemático 2D para estudiar el  
696 transporte simultáneo de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S a través de un HFMC utilizando MDEA, donde la simulación  
697 fue validada con datos experimentales. Los resultados indicaron que el HFMC es muy eficaz en  
698 la eliminación de trazas de H<sub>2</sub>S a altas velocidades de flujo gas/líquido. Posteriormente, Nakhjiri  
699 *et al.* (2020) desarrollaron una simulación numérica 2D para investigar la eliminación molecular  
700 simultánea de CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S del gas natural utilizando K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>. Sus resultados mostraron que el  
701 aumento de la porosidad de la membrana y de la longitud del módulo se tradujo en una mejora  
702 sustancial de la eliminación molecular de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S, mientras que el aumento de la tortuosidad  
703 de la membrana y de la velocidad del gas redujo significativamente la eliminación de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S.

704 Recientemente, Bakhshizade (2023) utilizó un modelo bidimensional para la simulación de la  
705 eliminación de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S de su mezcla con CH<sub>4</sub> en HFMC de polipropileno. El modelo se  
706 resolvió y simuló mediante dinámica de fluidos computacional (CFD) en el software COMSOL.  
707 Sus resultados mostraron que la eliminación simultánea de H<sub>2</sub>S y CO<sub>2</sub> reduce la eficiencia de  
708 eliminación de CO<sub>2</sub> en ~ 8 %.

709

### 710 **1.2.3 Control y optimización de equipos de absorción**

711 En conjunto con los esfuerzos orientados al desarrollo de modelos matemáticos que permitan  
712 representar las operaciones de separación de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S de corrientes de gas natural en columnas  
713 de absorción empacadas o en equipos de HFMC, también se ha buscado la mejora de las  
714 condiciones operacionales de estos procesos. Esto con la finalidad de que el gas libre de  
715 componentes ácidos cumpla con los estándares de calidad. De acuerdo con las normativas  
716 internacionales establecidas, el gas dulce debe tener una composición de CO<sub>2</sub> < 2% mol y de H<sub>2</sub>S  
717 < 4 ppm (Rao y Ponnusami, 2018). En México, la normativa de la calidad del gas dulce está  
718 establecida en la NOM-001-SECRE-2010 reportada por la SENER (2010). Una de las estrategias  
719 que permiten buscar mejoras y resaltar las ventajas operativas de los procesos es mediante el  
720 desarrollo de estudios enfocados a la optimización y el control de los equipos involucrados.  
721 Respecto al proceso de absorción empacado, se han desarrollado numerosos esfuerzos para  
722 obtener mejores condiciones de operación mediante estudios basados en la maximización de la  
723 absorción del soluto y reducción los gastos económicos y energéticos (Mores y Mussati, 2012;  
724 Hopkinson *et al.*, 2014; Chu *et al.*, 2016). Por ejemplo, Dashti *et al.* (2015) realizaron la  
725 optimización de un proceso de absorción empacada para un proceso de endulzamiento de gas.  
726 Los resultados de sus simulaciones mostraron que para alimentaciones con alto contenido de  
727 CO<sub>2</sub>, utilizar una mezcla de MDEA y MEA como solvente es recomendable y permite cumplir  
728 con los estándares de calidad. Sulaiman *et al.* (2018) realizaron la simulación y optimización de  
729 una unidad de endulzamiento de gas natural través de Aspen HYSYS. Concluyeron que es  
730 posible mejorar el porcentaje de eliminación de gases ácidos y disminuir la energía requerida de  
731 regeneración con la disminución del flujo de solvente. Recientemente, Zhu *et al.* (2021) llevaron  
732 a cabo la optimización de una unidad endulzadora a través del uso de un algoritmo evolutivo  
733 diferencial. Los resultados que obtuvieron muestran una reducción de costos operativos del  
734 6.53% y un incremento de 66.59% de las utilidades.

735 En procesos donde se utilizan membranas, también se han desarrollado algunas  
736 contribuciones enfocadas en maximizar la operabilidad del proceso, el aprovechamiento del  
737 solvente y minimizar la cantidad de CO<sub>2</sub> en las corrientes de gas (Sahraei y Ricardez-Sandoval,  
738 2014; Mechleri *et al.*, 2017). Por ejemplo, Hoorfar *et al.* (2018) desarrollaron una herramienta  
739 para la simulación de los procesos de separación de gases basados en membranas utilizando  
740 Aspen Hysys. Sus resultados sugirieron que la incorporación de varios procesos multietapa  
741 permiten que el costo del tratamiento puede reducirse, optimizando la distribución de la carga de  
742 separación. Yuan *et al.* (2019) realizaron una investigación de la captura de carbono basada en  
743 membranas de un ciclo combinado. Planteando un modelo de membranas en cascada resolvieron  
744 un problema de optimización que responde a los diferentes precios de la electricidad en función  
745 de los precios del CO<sub>2</sub>. Los resultados que reportaron muestran que el diseño óptimo (tamaño de  
746 los equipos) presenta un equilibrio entre el capital y los costes de explotación. He *et al.* (2020)  
747 diseñaron un proceso híbrido de membrana para la deshidratación y endulzamiento integrados  
748 de un gas natural. Los resultados que presentaron de la simulación indicaron que la presión  
749 óptima de permeado se encuentra entre 4-15 bares dependiendo de las etapas de purificación. Se  
750 concluye que es necesario el desarrollo de membranas avanzadas con una alta selectividad para  
751 promover su aplicación. Abejón *et al.* (2022) investigaron el potencial de membranas  
752 modificadas de polidimetilsiloxano para la separación de mezclas a partir de distintas fuentes,  
753 como el endulzamiento del gas natural. Mediante una optimización tecno-económica,  
754 identificaron que la vida útil efectiva de las membranas es un parámetro clave para el éxito de la  
755 aplicación de membranas innovadoras con el fin de evitar graves penalizaciones económicas.  
756 Recientemente, Zhu *et al.* (2022) realizaron una optimización de un proceso de  
757 absorción/desorción mediante simulaciones con Aspen Hysys y un algoritmo de optimización  
758 por enjambre de partículas en Matlab. Sus resultados muestran que el proceso óptimo puede  
759 aumentar la pureza de la corriente ácida del 69,28% al 72,32%, mientras que el consumo de  
760 energía se puede reducir en un ~7% y el beneficio económico global aumentar en un ~73%. Si  
761 bien, hay algunas aplicaciones de la optimización de procesos de HFMC.

762 De igual manera, es importante considerar que los procesos para el endulzamiento de gas  
763 están expuestos a frecuentes perturbaciones en la corriente de alimentación, lo que requiere la  
764 implementación sistemas de control avanzados para mantener una operación estable y asegurar  
765 la calidad del producto (Afkhamipour y Mofarahi, 2017). En particular, el control adecuado de

766 este proceso tiene gran importancia para garantizar una buena separación del soluto. La  
767 implementación de esquemas de control de columnas de absorción empacadas se ha abordado  
768 considerando controladores lineales y no lineales (Gutiérrez *et al.*, 2018; Patrón y Ricardez-  
769 Sandoval, 2020; Ilea *et al.*, 2021). El control lineal se basa en funciones de transferencia a partir  
770 de la respuesta del proceso escalonado, lo cual es fácil de implementar. Sin embargo, el  
771 rendimiento del control sólo está garantizado en una región de operación local (Wang *et al.*,  
772 2020; Maniraman *et al.*, 2022). Además, su aplicación a sistemas de parámetros distribuidos,  
773 como la columna de absorción empacada, es un reto importante debido a la presencia de no  
774 linealidades generadas por la compleja interacción entre los fenómenos de transporte y las  
775 reacciones químicas (Selvan y Panda 2018). Estas mismas ideas se han aplicado para los procesos  
776 de absorción con membrana, por ejemplo, Jin *et al.* (2017) implementaron un sistema de HFMC  
777 usando diferentes solventes para la separación simultánea de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S de una mezcla sintética.  
778 Los caudales de gas y líquido en su investigación se controlaron mediante la implementación de  
779 esquemas individuales de control clásico PI. Sus resultados demostraron que el cambio en el  
780 caudal del líquido tiene poco efecto sobre la absorción del H<sub>2</sub>S. Posteriormente, Aghajanian *et*  
781 *al.* (2022) desarrollaron el monitoreo y control lineal de un proceso de cristalización de carbonato  
782 de calcio integrado a un proceso de captura de carbono basado en HFMC. El enfoque propuesto  
783 puede considerarse una posible tecnología de postcombustión para la captura, utilización y  
784 secuestro de carbono. Si bien hay algunas aplicaciones de control lineal en procesos de HFMC,  
785 el enfoque del tratamiento de gas natural no ha sido abordado considerando estos equipos.

786 Algo importante a tomarse en cuenta respecto a la aplicación de esquemas de control  
787 basados en la respuesta del proceso en equipos de absorción, es que naturalmente estos procesos  
788 están expuestos a comportamientos no deseados e incluso inestabilidades del sistema, donde los  
789 controladores lineales presentan limitaciones cuando trabajan fuera de las regiones de  
790 sintonizado (Nir *et al.*, 2022). En ese sentido, los esquemas de control no lineal han demostrado  
791 un rendimiento superior para controlar dinámicas complejas y gran robustez frente a una amplia  
792 gama de condiciones de operación. Muchos algoritmos de control no lineal aplicados en procesos  
793 químicos se basan en modelos matemáticos para calcular las acciones de las variables de control,  
794 incluido el control de modo predictivo no lineal basado en modelos (Lee y Lee, 2014), el control  
795 de búsqueda de extremos (Lara-Cisneros *et al.*, 2017), los enfoques óptimos (Simorgh *et al.*,  
796 2019), el control de modo deslizante (Pundir y Singh, 2019) y los enfoques de análisis de datos

797 (Hassanpour *et al.*, 2022). Respecto a los equipos de absorción empacada, Moharir *et al.* (2018)  
798 implementaron diferentes variantes del control de modo predictivo para una planta con dos etapas  
799 de absorción-desorción empacada. Solo se consideraron el transporte convectivo para describir  
800 los fenómenos de transporte en las columnas, obteniendo un comportamiento fiable de la planta  
801 frente a perturbaciones en la corriente inicial de gas. Moghadasi *et al.* (2021) propusieron un  
802 control operacional basado en datos históricos de una planta de endulzamiento de gas natural  
803 para reducir el consumo energético. Utilizando una técnica de aprendizaje automático, realizaron  
804 una estimación de las variables controladas y de salida. Los resultados que obtuvieron mostraron  
805 valores de correlación del 98%, por lo que la estrategia implementada puede considerarse de alta  
806 precisión. En el análisis de procesos con membranas, la implementación de esquemas de control  
807 no lineal es muy limitada. Por ejemplo, Jin *et al.* (2011) desarrollaron un modelo para la  
808 separación del CO<sub>2</sub> de una fuente de gas sintética en un HFMC. Empleando la técnica de control  
809 predictivo concluyeron que su uso es efectivo para controlar la separación de gases.  
810 Considerando procesos de endulzamiento de gas natural, la implementación de controladores no  
811 lineales robustos en modelos de HFMC para la absorción de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S es un tópico que no ha  
812 sido previamente estudiado en la literatura.

813         Aunado a ello, muchas de las propuestas de control no lineal pueden tener un desarrollo  
814 matemático muy complicado, además de requerir una gran cantidad de datos para un rendimiento  
815 adecuado o depender de un conocimiento muy amplio del modelo matemático que representa las  
816 operaciones, por lo que su aplicación a nivel industrial es limitada (Murray-Smith y Johansen,  
817 2020). Es importante considerar que la aplicación de controladores basados en modelos en  
818 columnas de absorción empacadas o de HFMC depende de las no linealidades, la demanda  
819 computacional, la sensibilidad de los modelos a las variaciones, el tipo de ecuaciones con las que  
820 se representan (ODE, PDE) y el amplio conocimiento de los parámetros. Lo anterior puede  
821 traducirse en importantes incertidumbres de modelado (Shahid *et al.*, 2019; Hemmati y Rashidi,  
822 2019). Por ello, muchos diseños de control avanzado se basan en modelos simples que permiten  
823 representar adecuadamente los fenómenos físicos y se mejoran mediante la introducción de  
824 funciones de optimización u observadores de estado (Salvinder *et al.*, 2019). En ese sentido, se  
825 han realizado esfuerzos para el desarrollo de esquemas de control que sean fácil y simples de  
826 aplicar pero que cuenten con la información de los fenómenos físicos involucrados de los  
827 procesos a partir de los modelos matemáticos. El control por compensación de errores de

828 modelado (MEC, por sus siglas en inglés) es un controlador robusto y versátil que ha mostrado  
829 buenos resultados en el control de diferentes procesos (bio)químicos. Esto debido a su  
830 aplicabilidad a modelos lineales o no lineales con incertidumbres que son estimadas y  
831 compensadas para guiar la dinámica hacia el punto de referencia (Romero-Bustamante *et al.*,  
832 2017; Lara-Cisneros *et al.*, 2019; Rodríguez-Jara *et al.*, 2023). Esto gracias a la incorporación de  
833 un observador de estado en la formulación del controlador, lo que lo hace más versátil para  
834 cambios en los parámetros del modelado. Aunque ya se han aplicado algunas estrategias de  
835 control avanzadas a columnas de absorción convencionales, la implementación de controladores  
836 robustos y de fácil aplicación como el MEC no ha sido abordada en la literatura, específicamente  
837 en modelos de absorción empacada de HFMC para el endulzamiento de gas natural. Lo anterior  
838 resalta la aplicación de este controlador como un campo prometedor para la mejora de los  
839 procesos de absorción, donde el MEC puede ser una alternativa potencial por sus múltiples  
840 ventajas y su estructura de fácil aplicación.

841 Si bien existen numerosas propuestas para el estudio y la aplicación de los procesos de  
842 captura en el endulzamiento de gas en torres empacadas o con HFMC, su análisis acoplado a la  
843 planta industrial resulta importante para la determinación de condiciones operativas que  
844 disminuyan los costos de manera significativa y permitan su operación en condiciones favorables  
845 y estables. Por otro lado, la aplicación de las técnicas con membranas aún se encuentra en  
846 desarrollo, donde muchos de los estudios se basan en el análisis de las operaciones de forma  
847 independiente. Esto debido a que muchos de los softwares que trabajan de forma modular  
848 secuencial no cuentan con la paquetería especializada para este tipo de procesos, lo cual ha  
849 limitado en gran medida su estudio en plantas procesadoras. Además, son pocas las  
850 contribuciones que pueden encontrarse sobre la optimización de este proceso y la aplicación de  
851 estrategias de control no lineal, lo cual sugiere que aún existe la necesidad de buscar mejores  
852 condiciones operacionales que permitan regular las necesidades de las cantidades permitidas de  
853 CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S en la comercialización del gas dulce. Por lo que, un estudio donde se integren las  
854 diferentes contribuciones de la ingeniería de procesos como el modelado, simulación,  
855 optimización y control podría facilitar la implementación de técnicas novedosas para mejorar la  
856 operación y el rendimiento de plantas industriales de endulzamiento. Aunado a esto, se pueden  
857 realizar propuestas de mejora en procesos en operación mediante técnicas de optimización y  
858 control, así como se pueden resaltar los beneficios de las tecnologías alternativas como el uso de

859 HFMC, considerando los costos de operación e inversión. En ese sentido, en esta investigación  
860 se propone lo siguiente: i) Realizar el modelado y simulación de la columna de absorción  
861 empacada y por HFMC para la captura de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S, y en paralelo, el diseño, estudio y  
862 simulación de una planta de endulzamiento en operación como caso de estudio, ii) analizar las  
863 necesidades de la planta para buscar condiciones que permitan cumplir con los estándares de  
864 calidad mediante la minimización de gases ácidos en la corriente de gas dulce y la minimización  
865 de costos operativos, iii) aplicar una estrategia de control robusto MEC para la correcta operación  
866 de las alternativas de captura y de la planta global, iv) acoplar los procesos de captura  
867 optimizados y controlados en la simulación de la planta de endulzamiento, y v) evaluar el costo-  
868 beneficio del rendimiento de los dos tipos de procesos de captura de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S acoplados al  
869 caso de estudio, la absorción convencional y la absorción basada en HFMC.

870

### 871 **1.3 Planteamiento del problema**

872 La creciente demanda de gas natural ha generado interés por mejorar los procesos de  
873 endulzamiento para la producción y refinamiento del gas dulce. Si bien ya existen operaciones  
874 implementadas para la remoción de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S de la corriente de entrada como las columnas  
875 absorción empacadas, se requiere de análisis para su mejora pues resultan costosos o  
876 energéticamente demandantes. Una de las alternativas que ha mostrado un gran potencial es el  
877 uso de HFMC, sin embargo, aún hacen falta estudios para garantizar que existe una ventaja en el  
878 costo-beneficio de su implementación. En ese sentido, en este trabajo se propone un estudio de  
879 ingeniería de procesos en un equipo de absorción empacada y un HFMC acoplados a una planta  
880 de endulzamiento de gas natural para capturar gases ácidos. Como caso base, se consideran datos  
881 proporcionados por una planta endulzadora de gas natural actualmente en operación. Como  
882 objetivo principal se plantea reducir la cantidad de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S a la salida del proceso de absorción  
883 con la finalidad de alcanzar los estándares de calidad y buscando una mejora global del  
884 rendimiento de la planta y la reducción de su consumo energético. Se espera que la aplicación de  
885 la estrategia de optimización y control robusto permita resaltar significativamente los beneficios  
886 potenciales de la operación de captura usando HFMC. Mediante una evaluación costo-beneficio  
887 se compararon 3 escenarios: a) la operación actual de la planta, b) la operación de la planta con  
888 una columna empacada controlada y optimizada y c) la operación de la planta integrando un

889 HFMC controlado y optimizado. Lo anterior permitirá generar estrategias novedosas para  
890 extender esta investigación a otros casos de estudio en plantas industriales. Además, servirá como  
891 base para su implementación futura en una planta piloto.

892

## 893 **1.4 Justificación**

894 Entre las alternativas más prometedoras para reducir o aprovechar el gran volumen de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S  
895 en corrientes de gas natural se encuentra el proceso de absorción mediante HFMC. En la  
896 literatura, el enfoque de ingeniería de procesos para este equipo se ha realizado de forma limitada  
897 y con consideraciones importantes en el modelado. Lo anterior a dificultado su aplicación debido  
898 a que no se cuenta con los estudios suficientes que permitan hacer la valoración costo-beneficio  
899 sobre sus ventajas y desventajas. En ese sentido, el desarrollo de un estudio de ingeniería de  
900 procesos en este sistema acoplado a una planta de endulzamiento de gas permitirá el desarrollo  
901 de conocimiento de frontera que pudiera ser aplicado a futuro en la obtención de beneficios  
902 potenciales como mayor calidad de gas dulce, altas tasas de remoción de CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S y menor costo  
903 operacional. Además, esto permitiría el seguimiento y control del producto, lo cual está  
904 directamente relacionado a la posible detección de situaciones no deseadas, toma inmediata de  
905 decisiones y el aprovechamiento adecuado de los recursos, traduciéndose a futuro en notables  
906 beneficios económicos.

907

## 908 **1.5 Hipótesis**

909 La aplicación de la ingeniería de procesos en columnas de absorción empacadas y en HFMC de  
910 una planta de endulzamiento de gas natural permitirá generar una propuesta para reducir los  
911 costos de la planta en 20%, reducir el consumo energético en 30%, aumentar la cantidad de flujo  
912 de gas dulce en un 5% y reducir la cantidad de CO<sub>2</sub> Y H<sub>2</sub>S de la corriente de gas dulce en un  
913 50%. Además, mostrará que existen beneficios económicos potenciales si se sustituye la columna  
914 empacada por un equipo de HFMC para la absorción de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S.

915

## 916 **1.6 Objetivos**

917

### 918 **1.6.1 Objetivo general**

919 Desarrollar un estudio de ingeniería de procesos en los equipos de absorción empacada y con  
920 membranas de una planta de endulzamiento de gas natural para reducir costos y consumo  
921 energético y mejorar el desempeño y costo-beneficio.

### 922 **1.6.2 Objetivos específicos**

- 923 • Realizar la simulación y validación de una planta de endulzamiento de gas natural en  
924 operación y de los modelos matemáticos reportados que representen el proceso de absorción  
925 empacada y HFMC para la captura de CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S.
- 926 • Integrar una propuesta de optimización para encontrar parámetros de diseño, operación y  
927 control en equipos de absorción empacados y de HFMC, buscando la mayor separación de  
928 CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S de la corriente de gas dulce cumpliendo con las normativas ambientales.
- 929 • Implementar estrategias de control robusto en los equipos de absorción empacadas y HFMC  
930 que permitan su operación en las condiciones óptimas frente a perturbaciones de  
931 alimentación, cambios de referencia e incertidumbres de modelado.
- 932 • Proponer una simulación completa de la planta de endulzamiento de gas con procesos de  
933 absorción optimizados y controlados, principalmente el proceso HFMC, el cual no se  
934 encuentra disponible en los softwares de simulación de procesos químicos.
- 935 • Analizar el costo-beneficio y el rendimiento de dos propuestas de mejora de la planta, una  
936 con un proceso de absorción empacada y otra con un proceso de absorción HFMC  
937 controlados y optimizados frente a las condiciones actuales de la planta.

938

## 939 **1.7 Productos derivados de la investigación**

940 Publicaciones:

- 941 • Manuscrito en revisión “A modeling error compensation control approach for CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S  
942 absorption in a hollow-fiber membrane contactor”
- 943 • Artículo publicado “Robust model-based control of a packed absorption column for the  
944 natural gas sweetening process” DOI: 515/ijcre-2022-0112, noviembre, 2022

945 Trabajos en congreso:

- 946 • Presentación oral del trabajo “Integración de un módulo de contactor de membrana para el  
947 endulzamiento de gas natural mediante Aspen” en el marco del XI Simposio Nacional  
948 SNIQBA 2023.
- 949 • Presentación oral del trabajo “Optimización del proceso de absorción en un contactor de  
950 membrana para el endulzamiento de gas natural” en el XLIV Encuentro Nacional de la  
951 Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, AMIDIQ 2023.
- 952 • Presentación oral del trabajo “Control por compensación de error de modelado en una  
953 columna de absorción industrial para el endulzamiento de gas natural” en el marco del X  
954 Simposio Nacional SNIQBA 2022.
- 955 • Presentación oral del trabajo “Control óptimo de una columna de absorción de contactor de  
956 membrana para la captura de CO<sub>2</sub>” en el 4° Congreso Internacional de Energía, CIE 2021.
- 957 • Presentación oral del trabajo “Sintonizado óptimo en el control de una columna de absorción  
958 de CO<sub>2</sub> con contactor de membrana mediante el criterio del mínimo error” en el XLII  
959 Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería  
960 Química, AMIDIQ 2021.
- 961 • Presentación oral del trabajo “Control en una columna de absorción empacada para el  
962 endulzamiento de gas mediante compensación de error de modelado” en el XLII Encuentro  
963 Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química,  
964 AMIDIQ 2021.

965

966

967

968

969

---

970

## ***CAPITULO II: Caso de estudio: Planta de endulzamiento de gas natural***

---

971

972

973 En México, la producción de gas natural requiere diversas etapas como exploración,  
974 endulzamiento, fraccionamiento recuperación, transporte y comercialización. Específicamente,  
975 la fase de endulzamiento consiste en separar H<sub>2</sub>S y CO<sub>2</sub> de la corriente de gas natural proveniente  
976 de los campos de extracción. La separación del CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S de la mezcla gaseosa se realiza  
977 normalmente mediante absorción selectiva con una solución acuosa a base de una formulación  
978 de aminas, la cual circula en circuito cerrado para regenerarse y utilizarse nuevamente. En este  
979 capítulo se presenta el caso de estudio, que consiste en la presentación de una planta de  
980 endulzamiento de gas en operación. Para ello, se resalta la importancia del CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S, su  
981 impacto en la biosfera y el proceso de endulzamiento. Posteriormente, se detalla la planta de  
982 endulzamiento de gas a analizar y finalmente se describen los procesos de absorción para la  
983 obtención de gas dulce abordados en esta investigación.

984

### **2.1 Importancia del CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S**

986 El CO<sub>2</sub> es un gas incoloro e inodoro y clasificado como no tóxico por la Organización de las  
987 Naciones Unidas (CCSI, 2018). Se encuentra en forma natural en el aire en concentraciones que  
988 varían desde los 300 a los 550 ppm dependiendo del entorno rural o urbano. El CO<sub>2</sub> es asimilado  
989 por plantas, que lo devuelven en forma de oxígeno al ambiente por fotosíntesis. Su producción  
990 se ha visto acelerada por la combustión de carbón e hidrocarburos, la fermentación de líquidos y  
991 los procesos de respiración de los seres vivos. Su uso comercial es amplio, en industrias de  
992 procesamiento químico en el control de temperaturas de reactores, como agente de neutralización  
993 de efluentes alcalinos, como medio de purificación y secado de polímeros/fibras vegetales bajo  
994 condiciones supercríticas (Lu *et al.*, 2022). En particular, el H<sub>2</sub>S suele producirse de forma natural  
995 durante la descomposición de materiales orgánicos en sistemas sépticos o a través de ciertas  
996 actividades industriales como la perforación y el refinado de petróleo (Thripuranthaka *et al.*,  
997 2018). No obstante, es un compuesto nocivo, altamente inflamable, tóxico y corrosivo, exponerse

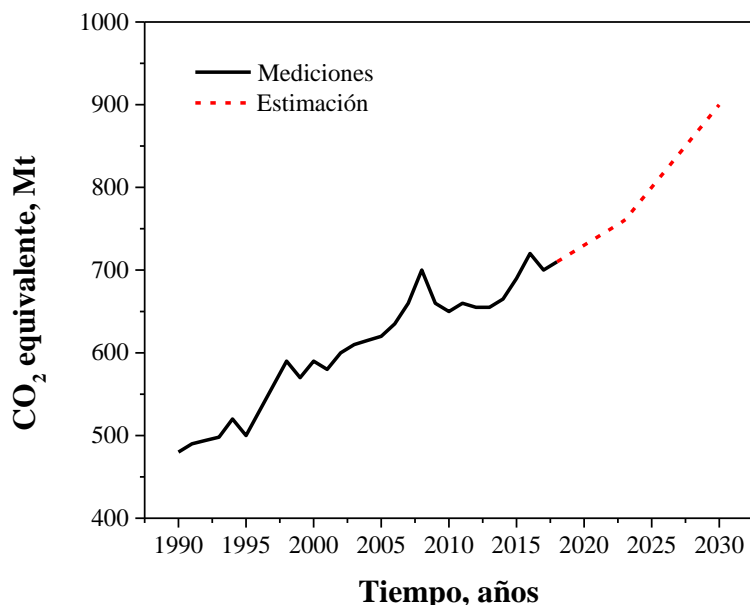
998 a poco menos de 100 ppm puede provocar graves problemas de salud o incluso la muerte de  
999 animales y seres humanos. El H<sub>2</sub>S puede hallarse en muchas industrias y aplicaciones, incluidas  
1000 la fabricación de hierro, plantas de procesamiento de alimentos, destilerías, rellenos sanitarios y  
1001 en la producción de energía nuclear (Powell *et al.*, 2018).

1002

### 1003 **2.1.1 Generación y producción de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S**

1004 El CO<sub>2</sub> puede ser un gas resultante de procesos tanto geoquímicos como biológicos, su presencia  
1005 en la atmósfera es fundamental para la regulación de la temperatura del planeta. Conjuntamente  
1006 existen dos procesos que regulan la concentración de CO<sub>2</sub>, el ciclo geoquímico de carbonato-  
1007 silicato, que lo regula a largo plazo y el ciclo geoquímico de CO<sub>2</sub> a corto plazo, que corresponde  
1008 al flujo de CO<sub>2</sub> entre los organismos vivos (Canadell *et al.*, 2007). El ciclo del CO<sub>2</sub> es el  
1009 movimiento de esta sustancia entre la tierra, la atmósfera y el océano, donde el punto de partida  
1010 puede establecerse en la etapa de la fotosíntesis. Posteriormente, los árboles y las plantas de los  
1011 bosques al descomponerse debido a actividades no forestales devuelven el CO<sub>2</sub> contenido a la  
1012 atmósfera en distintas escalas temporales. A esta etapa también se puede sumar la presencia de  
1013 incendios forestales y las erupciones volcánicas (Lacis *et al.*, 2010). Otra de las considerables  
1014 fuentes de liberación de CO<sub>2</sub> a la atmósfera es a través de la respiración, excreción y  
1015 descomposición de seres vivos. Dentro de las emisiones industriales de CO<sub>2</sub>, se considera el uso  
1016 de medios de transporte que utilizan derivados del petróleo como fuente de energía y las grandes  
1017 industrias o fábricas (Garrido *et al.*, 2020). Respecto al H<sub>2</sub>S, es uno de los componentes  
1018 principales en el ciclo natural del azufre, se genera en volcanes, manantiales de azufre, cuerpos  
1019 de aguas estancadas, emanaciones de grietas submarinas y pantanos. Por otra parte, también está  
1020 asociado con alcantarillas municipales, plantas de tratamiento de aguas residuales, en procesos  
1021 agrícolas y en operaciones relacionadas con la producción de madera y papel. Las fuentes  
1022 industriales de H<sub>2</sub>S incluyen a las refinerías de petróleo y plantas de gas natural. Sin embargo, si  
1023 este gas es liberado a la atmósfera en altas concentraciones reacciona con el vapor de agua, siendo  
1024 el precursor principal de la lluvia ácida. (Soriano *et al.* 2015). Su acción corrosiva afecta en gran  
1025 medida la economía de las industrias de procesos, ya que atender sus daños puede requerir de  
1026 mantenimiento ingenieril importante en estructuras y equipos expuestos al ambiente (Nakhjiri *et*  
1027 *al.*, 2020). Los cambios en el uso de la tierra, como la deforestación y la destrucción de la cubierta  
1028 vegetal han favorecido el incremento de las concentraciones de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S atmosférico debido a

1029 la reducción de la capacidad de fotosíntesis y a una mayor tasa de respiración por la degradación  
1030 de materia orgánica muerta. A pesar de los esfuerzos por enmendar este desmedido incremento  
1031 de los gases de efecto invernadero, la tendencia para todos los sectores tiende al alza según los  
1032 pronósticos de años próximos como se muestra en la Figura 2.1 (Mikhaylov *et al.*, 2020).

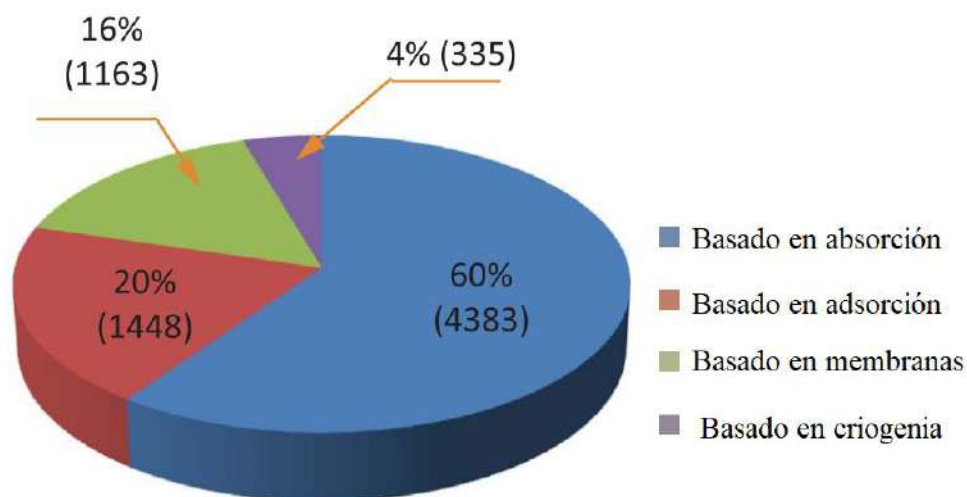


1033  
1034 Figura 2. 1 Pronóstico del balance de emisiones de gases de efecto invernadero.  
1035

### 1036 2.1.2 Medidas para reducir las emisiones de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S

1037 Desde 1990, y hasta 2024, las emisiones de CO<sub>2</sub> han incrementado sus cifras globales en más del  
1038 63%, de 20,511.1 a 33,621.5 Mt anuales. La industria energética encabeza la lista de los mayores  
1039 emisores, seguida por el sector del transporte, y la manufacturera en general. Referente al  
1040 aumento de las concentraciones del CO<sub>2</sub> que no han podido ser compensadas por los procesos de  
1041 regulación previamente mencionados, se estima que la quema de combustibles fósiles ha sido la  
1042 fuente más importante. Por otro lado, las emisiones del H<sub>2</sub>S, son responsables de los malos olores  
1043 y han sido reducidas de manera significativa durante los muestreos del año 2020, obteniendo una  
1044 reducción promedio anual de 48.9% de H<sub>2</sub>S (µg L<sup>-1</sup> ) v/v (López-Hernández *et al.*, 2022). En las  
1045 últimas décadas, el interés de la sociedad por reducir las emisiones de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S como una  
1046 medida para revertir los efectos adversos de su incremento en la atmósfera ha cobrado fuerza a  
1047 través de campañas y estrategias de mitigación de contaminantes. A nivel mundial se han

1048 redoblado esfuerzos por diversas asociaciones; la organización mundial de las naciones unidas  
1049 (ONU) con sus acuerdos de cumbre del clima de París pretende dar partida a la concientización  
1050 de la comunidad internacional y los ciudadanos sobre las medidas que se deben tomar,  
1051 estableciendo un marco global para evitar el cambio climático peligroso manteniendo los  
1052 incrementos de temperatura por debajo de los históricos de la última década. A nivel nacional,  
1053 la ley general de cambio climático, emitida en 2012 por el diario oficial de la federación tiene  
1054 como objetivo garantizar el derecho de un medio ambiente sano y establecer la congruencia de  
1055 facultades de la federación, entidades federativas y los municipios en la elaboración y aplicación  
1056 de políticas públicas para la adaptación al cambio climático, y la mitigación de emisiones de  
1057 gases y compuestos de efecto invernadero (SEMARNAT, 2012).



1058  
1059 Figura 2. 2 Publicaciones relacionadas con la captura de gases en la última década.  
1060

1061 Por otro lado, el tratamiento de las corrientes de gases resultantes de procesos industriales se ha  
1062 convertido en un tópico indispensable que atender en conjunto con el resto de las atenciones que  
1063 una actividad como esta requiere. Los vehículos de combustión interna en la actualidad cuentan  
1064 con convertidores catalíticos, constituidos por un soporte de metales capaces de hacer reaccionar  
1065 con los gases resultantes de la quema de combustible para disminuir su impacto al ambiente  
1066 apenas abandonan la cámara de combustión del motor. A escala industrial, estos problemas se  
1067 tratan a través del diseño de equipos de remoción selectiva de gases, cuyo principal objetivo es  
1068 capturar algunos de los componentes que integran una corriente gaseosa. Durante los últimos  
1069 años se ha realizado un notable esfuerzo por generar conocimiento y aplicarlo para la captura y  
1070 utilización de estos gases desde diferentes perspectivas, principalmente de 4 procesos principales,

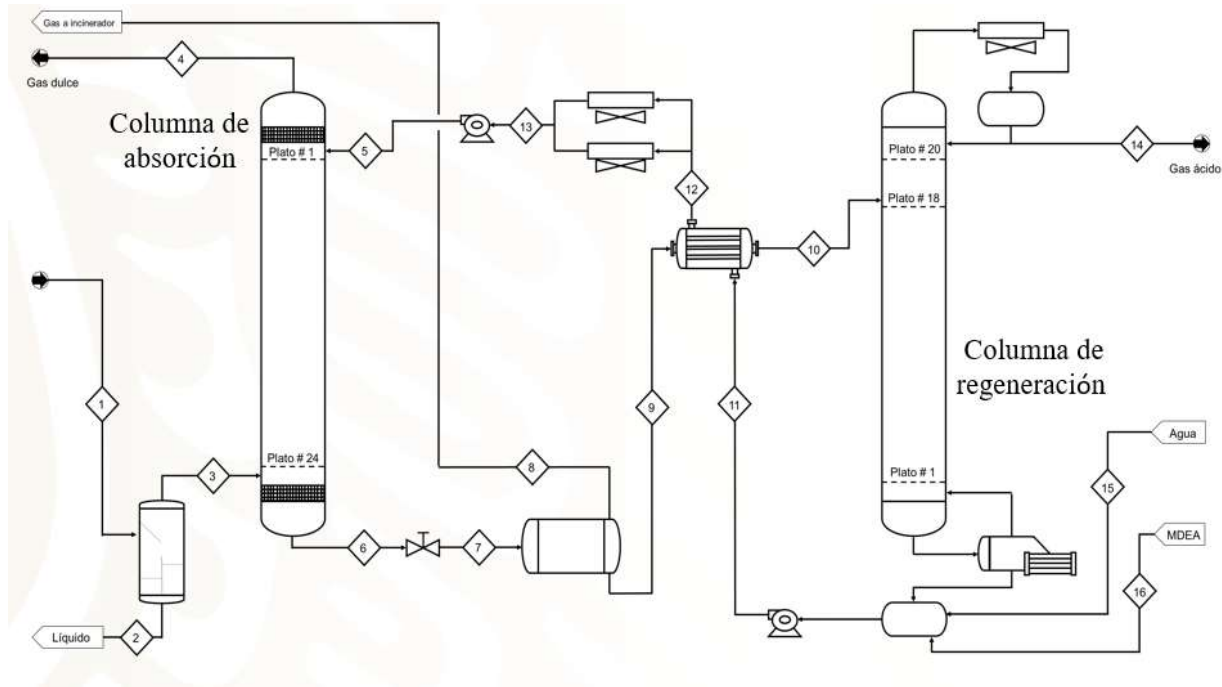
1071 la absorción la adsorción, el uso de membranas y la criogenia (Figura 2.2). A pesar de los  
1072 diferentes métodos que se han planteado para integrar procesos de captura en plantas industriales,  
1073 el uso de la absorción química es el más aplicado y con mayor investigación en su campo (Song  
1074 *et al.*, 2018). Por ello, se considera importante abundar en cómo puede mejorarse esta operación  
1075 desde la perspectiva económica, ambiental y operativa.

1076

## 1077 **2.2 Proceso de endulzamiento de gas en operación**

1078 La planta de endulzamiento de gas natural consta de varias unidades de operación,  
1079 principalmente de torres de absorción, torres de regeneración e intercambiadores de calor.  
1080 (Abdulrahman y Sebastine, 2013). En esta planta se obtienen recursos energéticos y materias  
1081 primas para la industria petroquímica, el diagrama de flujo de proceso de la planta se muestra en  
1082 la Figura 2.3. Tradicionalmente, el gas natural amargo ingresa a través de un separador primario  
1083 para eliminar cualquier líquido y sólido contenidos en la alimentación. Seguido a esto, la  
1084 corriente de proceso entra por la parte inferior de la torre de absorción y fluye hacia arriba a  
1085 través de la torre absorbidora a contracorriente con la solución de amina empleada. El gas dulce  
1086 sale por la parte superior de la torre de absorción para su posterior deshidratación y manejo en  
1087 una planta de procesamiento criogénico donde se obtienen productos como gas licuado a presión  
1088 ( $14 \text{ kg/cm}^2$ ), naftas y gas natural de uso comercial. Por otro lado, la corriente del solvente, la cual  
1089 absorbió los gases ácidos, sale por la parte inferior de la torre de absorción y se denomina amina  
1090 rica. Esta corriente pasa por una válvula reductora de presión, un tanque flash para liberar  
1091 hidrocarburos disueltos y un intercambiador de calor para entrar a la torre regeneradora con las  
1092 características deseadas. La corriente de amina rica entra a la torre regeneradora por la parte  
1093 superior y al llegar al rehervidor se liberan los gases ácidos junto con vapor de agua. Al  
1094 condensarse en la parte superior de la columna regeneradora, se separan los gases ácidos de la  
1095 solución de amina, los cuales se envían a una planta de recuperación de azufre. La amina  
1096 recuperada se envía a un intercambiador de calor para alcanzar las características necesarias para  
1097 ser recirculada a la torre de absorción (Sharifi y Amiri, 2017). El proceso de endulzamiento de  
1098 gas natural cuenta con diferentes variables de operación que tienen un rol importante en la  
1099 eliminación de gases ácidos y el consumo energético en el proceso. Entre los parámetros más

1100 relevantes se encuentran la temperatura, la presión, el flujo volumétrico, la concentración del  
 1101 solvente, entre otras.



1102

1103

1104

Figura 2. 3. Diagrama de flujo del proceso de endulzamiento de gas.

1105

1106

1107

1108

1109

1110

1111

Para el desarrollo de este proyecto de investigación se consideró una vinculación con el complejo procesador de gas en el estado de Veracruz, el cual es uno de los principales complejos de procesamiento de gas natural de hidrocarburos condensados de la región. La planta del caso de estudio procesa una corriente de gas ácido de 67,547.52 kg/h, a partir de la cual se obtiene el gas dulce que es enviado a una unidad criogénica.

Tabla 2. 1. Condiciones de operación de la columna del complejo procesador de gas.

Variable	Valor
Altura [m]	19.75
Diámetro [m]	4.52
Temperatura [°C]	46.85
Presión [kg/cm <sup>2</sup> ]	70
Flujo de entrada de gas [kmol/h]	3343.32
Flujo de entrada de líquido [kmol/h]	2094.22
Velocidad de entrada de gas [m/h]	63.19
Velocidad de entrada de líquido [m/h]	3.96

1112

1113 Por otro lado, los compuestos azufrados son enviados a una unidad recuperadora de azufre. La  
 1114 torre absorbedora consta de 24 etapas, por la parte inferior ingresa la alimentación de gas a 34  
 1115 °C, mientras que la corriente de solvente ingresa por la etapa superior a 46 °C con una fracción  
 1116 másica de 50% MDEA y 50% H<sub>2</sub>O. Para el caso de la torre regeneradora, consta de 20 etapas,  
 1117 tiene 15 m de altura, 1.7 m de diámetro y opera a una temperatura de 149 °C y a una presión de  
 1118 147.1 y 176.52 kPa en el condensador y rehervidor, respectivamente. Actualmente, el complejo  
 1119 tiene como meta maximizar la producción del complejo mediante reducción de costos de  
 1120 operación y gasto energético. Las características de diseño, las condiciones de operación y los  
 1121 flujos de entrada y salida de la columna de absorción utilizada en la planta endulzadora de gas se  
 1122 reportan en la Tabla 2.1. Se puede observar que se opera a baja temperatura (menor a 100 °C) y  
 1123 presión elevada (mayor a 50 atm), además se emplea MDEA como solvente para la separación  
 1124 del CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S del gas natural.

1125

1126

Tabla 2. 2. Corrientes de entrada y salida del proceso de absorción de la planta.

Composición	Entrada de gas natural ácido		Salida de gas dulce		Entrada de solución MDEA		Salida de solución MDEA	
	Flujo [kmol/h]	Fracción mol	Flujo [kmol/h]	Fracción mol	Flujo [kmol/h]	Fracción mol	Flujo [kmol/h]	Fracción mol
Metano	2,770.49	0.8287	2,768.57	0.8533	---	---	1.92	0.0009
Etano	221.95	0.0664	221.84	0.0684	---	---	0.12	0.0001
Propano	100.79	0.0301	100.76	0.0311	---	---	---	---
i-butano	17.69	0.0053	17.69	0.0055	---	---	---	---
n-butano	39.38	0.0118	39.38	0.0121	---	---	---	---
i-pentano	14.02	0.0042	14.02	0.0043	---	---	---	---
n-pentano	15.02	0.0045	15.02	0.0046	---	---	---	---
n-hexano	9.01	0.0027	9.01	0.0028	---	---	---	---
CO <sub>2</sub>	71.76	0.0215	18.71	0.0058	0.89	0.0004	53.95	0.0246
Agua	---	---	6.55	0.0020	1,822.19	0.8701	1,815.64	0.8279
H <sub>2</sub> S	50.15	0.0150	0.01	4e <sup>6</sup>	1.10	0.0005	51.24	0.0234
Nitrógeno	33.04	0.0099	33.03	0.0102	---	---	---	---
MDEA	---	---	---	---	270.05	0.1290	270.05	0.1231
<b>TOTAL</b>	<b>3,343.3</b>	<b>1</b>	<b>3,244.59</b>	<b>1</b>	<b>2094.23</b>	<b>1</b>	<b>2190.88</b>	<b>1</b>

1127 Las composiciones de las corrientes del proceso de absorción se muestran en la Tabla 2.2, donde  
 1128 el flujo de solución de MDEA se recircula. La salida de gas dulce tiene un porcentaje de CO<sub>2</sub> del

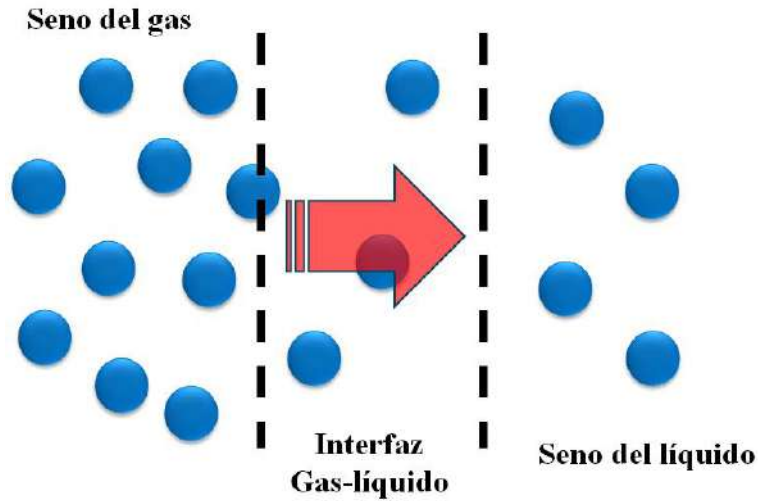
1129 0.58% en mol, mientras que el H<sub>2</sub>S se encuentra en 4 ppm. En ese sentido, se requiere que el  
1130 proceso se mantenga en una referencia que permita mantener la cantidad de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S dentro  
1131 de los estándares de calidad del gas dulce, CO<sub>2</sub> < 2% mol y H<sub>2</sub>S < 4 ppm (Rao y Ponnusami,  
1132 2018). Las corrientes de salida de la planta son como sigue: 3244.56 kg/h de gas dulce y 107.02  
1133 kg/h de gas ácido el cual contiene el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S.

### 1134 **2.3 Proceso de absorción de gases**

1135 La absorción de gases es una operación unitaria mediante la cual, los componentes solubles de  
1136 una mezcla son removidos selectivamente al ponerse en contacto con un líquido. Esta operación  
1137 requiere de la transferencia de uno o varios solutos gaseosos desde la corriente gaseosa hasta la  
1138 fase líquida (Figura 2.4). En ocasiones un soluto gaseoso absorbido se remueve del líquido  
1139 poniéndolo en contacto con un gas inerte; tal operación, recibe el nombre de desorción de gases  
1140 y en la mayoría de los casos, es utilizada en la regeneración de disolventes de absorción con el  
1141 fin de reintegrarlos al proceso. Los procesos de absorción/desorción son ampliamente utilizados  
1142 dentro del proceso de endulzamiento de gas, ya que resultan adecuados y más fáciles de operar  
1143 en comparación con otras metodologías. Otras aplicaciones industriales del proceso de absorción  
1144 consisten en la eliminación de SO<sub>2</sub> de corrientes de combustión mediante disoluciones acuosas  
1145 de NaOH, en la eliminación de óxidos de nitrógeno mediante disoluciones de agentes oxidantes  
1146 o en el lavado de amoníaco a partir de una mezcla de amoníaco y aire por medio de agua líquida  
1147 (Chu *et al.*, 2014). Este proceso se puede llevar de forma física cuando un gas se pone en contacto  
1148 con la superficie de un líquido no volátil, produciendo una transferencia de masa a través de la  
1149 interfase que las separa. Este proceso se encuentra controlado por la resistencia que opone cada  
1150 fase a la transferencia, produciendo una disolución del gas en el líquido hasta establecer un  
1151 equilibrio (Ozturk y Yilmaz, 2006). La fase líquida tiene que ser un disolvente selectivo afín al  
1152 componente gaseoso a separar. Este proceso posee una alta afinidad a los hidrocarburos pesados,  
1153 por lo que, si el gas a tratar tiene un alto contenido de compuestos pesados (e.g. aquellos de  
1154 mayor peso molecular que el propano) el uso de un disolvente físico puede implicar una pérdida  
1155 importante de la composición inicial del flujo de gas.

1156

1157



1158

Figura 2. 4. Representación del proceso de absorción.

1159

1160

La absorción seguida de reacción química en la fase líquida se emplea con frecuencia para lograr

1161

una mayor separación de un soluto de una mezcla gaseosa. La reacción en la fase líquida reduce

1162

la presión parcial de equilibrio del soluto sobre la disolución, dando lugar a un incremento del

1163

coeficiente de transferencia de materia (Onda *et al.*, 1968). Los procesos de absorción química

1164

son los métodos más ampliamente utilizados en la industria para separar CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S contenidos en

1165

corrientes de gas. Existen muchos procesos basados en la absorción química, de los cuales se

1166

consideran completamente desarrollados la absorción con aminas y con NH<sub>3</sub> (Yeh *et al.*, 2005).

1167

En los procesos de absorción con aminas, uno de los solventes más ampliamente utilizados, son

1168

las soluciones acuosas de MDEA. La MDEA, es una amina terciaria que se caracteriza por

1169

reaccionar lentamente con el CO<sub>2</sub> y de forma casi instantánea con el H<sub>2</sub>S, por lo que, su mejor

1170

aplicación es en la remoción selectiva del H<sub>2</sub>S cuando ambos gases están presentes. También

1171

presenta características que la hacen adecuada para el proceso de absorción como baja presión

1172

de vapor, bajo calor de reacción con gases ácidos, alta resistencia a la degradación térmica y

1173

química. El mecanismo de reacción entre MDEA y gases ácidos ha sido ampliamente descrito en

1174

la literatura. Por ejemplo, Huttenhuis *et al.* (2007) presentaron las siguientes reacciones

1175

consecutivas que ocurren con soluciones acuosas de MDEA en presencia de H<sub>2</sub>S y CO<sub>2</sub>:

1176

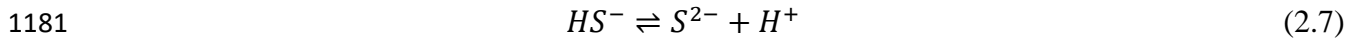
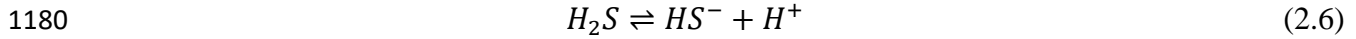
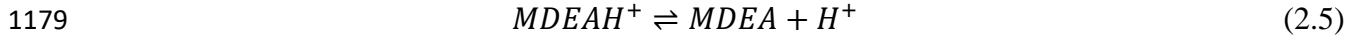


1177



1178

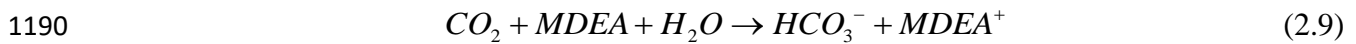




1182 En términos globales, la reacción química se puede representar con dos reacciones químicas. Por  
1183 un lado, se considera que el H<sub>2</sub>S reacciona casi instantáneamente con MDEA por transferencia  
1184 de protones de modo que la reacción química de esta especie es:



1186 Dado que la MDEA es una amina terciaria y no tiene un átomo de hidrógeno unido al nitrógeno,  
1187 la reacción del CO<sub>2</sub> puede ocurrir solo después de que el CO<sub>2</sub> se disuelva en el agua para formar  
1188 un ion bicarbonato. Luego, el ion bicarbonato sufre una reacción ácido-base con la amina para  
1189 producir la reacción general de CO<sub>2</sub> (Mak *et al.*, 2015):



1191 Las reacciones llevadas a cabo entre la MDEA y los gases ácidos se caracterizan por ser  
1192 reversibles, lo que permite la regeneración del solvente en columnas de desorción una vez que el  
1193 proceso es llevado a cabo. En los absorbedores continuos tradicionales, la transferencia de  
1194 materia tiene lugar por difusión y convección. La difusión molecular de masa puede definirse  
1195 como la transferencia (o desplazamiento) de moléculas individuales a través de un fluido por  
1196 medio de desplazamientos individuales y desordenados de las moléculas presentes en una  
1197 solución debido a una diferencia de concentraciones (Geankoplis, 1998). Si la concentración de  
1198 un compuesto en una solución es homogénea, no se presentará ningún movimiento por difusión;  
1199 si no hay uniformidad, la sustancia se moverá hasta alcanzar un equilibrio, momento en el cual  
1200 la transferencia de masa por difusión termina. El flux de masa, de una especie química A en la  
1201 dirección z, es proporcional al gradiente de concentración en esa dirección y se expresa mediante  
1202 la Primera ley de Fick:

1203 
$$N_A = -D_{AB} \frac{dC_A}{dz} \quad (2.10)$$

1204 donde  $C_A$ ,  $D_{AB}$  y  $z$  representan la concentración de la especie A, el coeficiente de difusión  
1205 molecular y el eje axial, respectivamente. La velocidad de difusión se puede aumentar  
1206 adelgazando la capa límite de difusión, para lograrlo se incrementa la velocidad del fluido hasta

1207 obtener una transferencia de masa turbulenta. El espesor de la capa límite de difusión puede  
 1208 calcularse a partir de la igualación del flux de masa por difusión y convección:

1209 
$$\delta_D = a \frac{D_{AB}}{k_m} \quad (2.11)$$

1210 donde  $k_m$  es el coeficiente de transferencia de masa y  $a$  es una constante de proporcionalidad  
 1211 que puede depender de factores geométricos o de condiciones del flujo (laminar o turbulento).  
 1212 La difusión turbulenta o de remolino, de forma aproximada, es mil veces superior a la difusión  
 1213 molecular laminar (Seader *et al.*, 2006). De la expresión anterior, la transferencia de masa por  
 1214 convección se lleva a cabo entre una superficie y un fluido en movimiento, en el que intervienen  
 1215 tanto la difusión de masa como el movimiento de la masa de fluido. Así, la transferencia de masa  
 1216 por convección se puede representar mediante diferentes teorías como de la película, de la  
 1217 penetración, o de convección-difusión. El flux de masa por convección también suele definirse  
 1218 en términos de fracciones mol en un líquido/gas o en términos de presiones parciales en el caso  
 1219 de gases. Por consiguiente, se puede definir el coeficiente de transferencia de masa de varias  
 1220 maneras:

1221 
$$N_A = k_m (C_A - C_\infty) = k_G (p_A - p_\infty) = k_y (y_A - y_\infty) \quad (2.12)$$

1222 
$$N_A = k_m (C_A - C_\infty) = k_L (p_A - p_\infty) = k_x (x_A - x_\infty) \quad (2.13)$$

1223 donde  $k_G$ ,  $k_L$ ,  $k_x$ , y  $k_y$  son los coeficientes de transferencia de masa local en la fase gas, la fase  
 1224 líquida, en función de la fracción de líquido, en función de la fracción de gas y en función de la  
 1225 concentración, respectivamente. Los parámetros  $p$ ,  $y$  y  $x$  son la presión parcial, la fracción de  
 1226 gas y la fracción de líquido, respectivamente. En la tabla 2.3, se muestran las unidades en las que  
 1227 pueden expresarse los coeficientes de transferencia de masa.

1228

1229

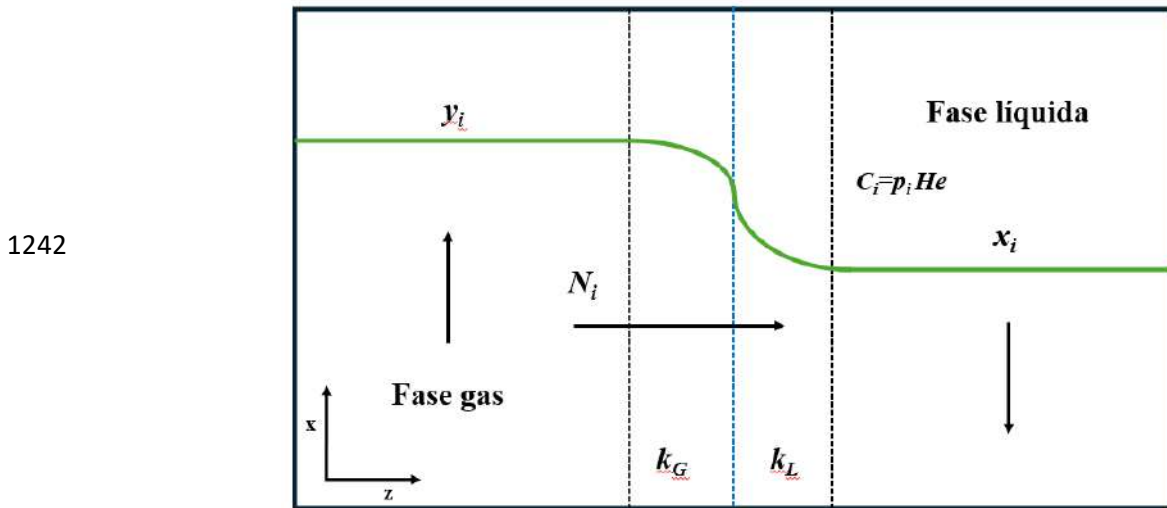
Tabla 2. 3 Unidades de los coeficientes de transferencia de masa.

<b>Coficiente de transferencia de masa</b>	<b>Unidades SI</b>	<b>Unidades Cgs</b>	<b>Unidades sistema inglés</b>
$k_m$	$m s^{-1}$	$cm s^{-1}$	$ft h^{-1}$
$k_x, k_y$	$\frac{kg mol}{s m^2}$	$\frac{g mol}{s cm^2}$	$\frac{lb mol}{h ft^2}$
$k_G, k_L$	$\frac{kg mol}{s m^2 atm}$	$\frac{g mol}{s cm^2 atm}$	$\frac{lb mol}{h ft^2 atm}$

1230  
 1231 Para la transferencia de masa entre dos fases gas-líquido se considera que en la interfase de  
 1232 contacto existe el equilibrio (Figura 2.5), y se suman las resistencias a la transferencia de masa  
 1233 en las dos fases para obtener una resistencia global, tal como se muestra en la ecuación (2.14):

1234 
$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{m}{k_L} \quad (2.14)$$

1235 donde el término de la izquierda es la resistencia global a la transferencia de masa y  $m$  la  
 1236 pendiente de la curva de equilibrio del sistema. Este proceso se lleva a cabo en equipos  
 1237 denominados columnas de absorción y tienen como principal propósito mejorar el contacto entre  
 1238 las fases líquida y gaseosa, permitiendo obtener un mejor rendimiento del proceso. Existen  
 1239 diferentes configuraciones de estos equipos siendo las más principales las columnas por platos y  
 1240 las columnas empacadas. Los equipos de contactor de membrana ya se han utilizado de forma  
 1241 experimental para el proceso de absorción, siendo una alternativa potencial.



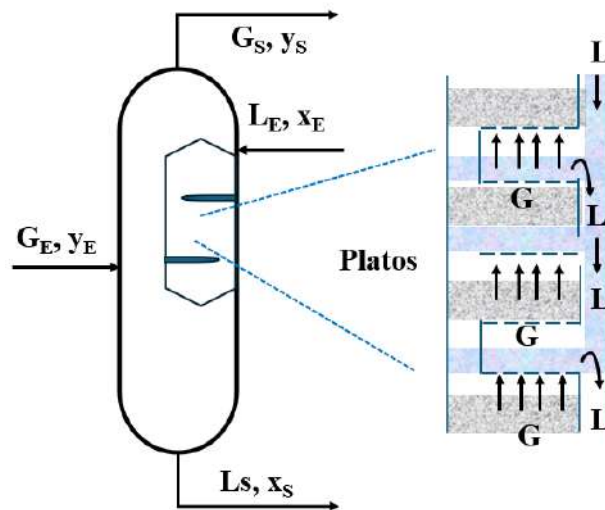
1243 Figura 2. 5. Transferencia de masa en la interfaz gas-líquido.

1244

1245 **2.3.1 Columna de absorción por platos**

1246 Las columnas de platos son equipos ampliamente utilizados dentro de las operaciones de  
 1247 absorción física y reactiva. Éstas consisten en una torre vertical que contiene una serie de platos  
 1248 o bandejas horizontales perforadas dentro de la columna. Estos platos están diseñados para  
 1249 facilitar el contacto entre dos fases de fluido: una fase gaseosa ascendente y una fase líquida  
 1250 descendente, donde en cada plato se alcanza el equilibrio (Figura 2.6). Los platos suelen estar  
 1251 hechos de láminas de metal como acero al carbón o acero inoxidable. Un plato teórico, o ideal,

1252 se define como aquél en que la composición promedio de todo el gas que abandona el plato está  
 1253 en equilibrio con la composición promedio de todo el líquido que abandona el plato. El número  
 1254 de etapas ideales que se necesitan para lograr determinado cambio en la composición del líquido  
 1255 o del gas, tanto para absorbedores como para regeneradores, puede determinarse gráficamente.  
 1256 Este tipo de columnas presentan ventajas como la fácil implementación de serpentines de  
 1257 enfriamiento en procesos con reacciones exotérmicas, mayor resistencia a fluctuaciones grandes  
 1258 de temperatura y una mayor facilidad en la realización de las operaciones de mantenimiento y  
 1259 limpieza. Sin embargo, para procesos de absorción donde los componentes del gas resultan ser  
 1260 ácidos y corrosivos, este tipo de columnas suelen ser más costosas.

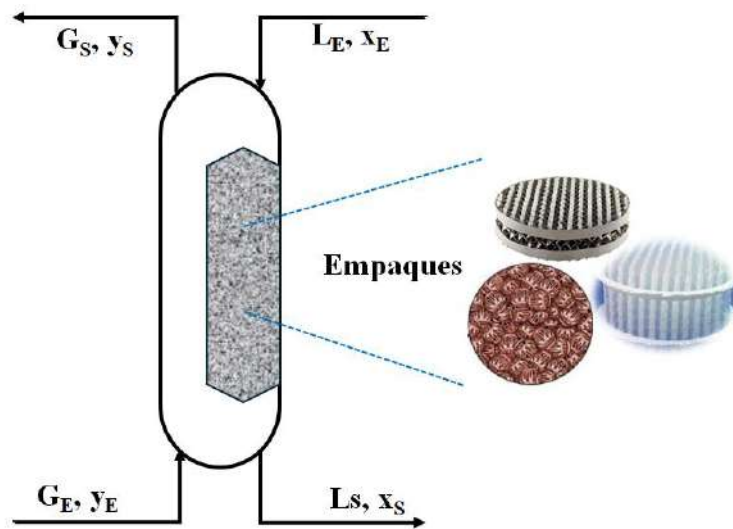


1261  
 1262 Figura 2. 6. Esquema de una columna de absorción por platos.  
 1263

1264 **2.3.2 Columna de absorción empacada**

1265 Las columnas empacadas se utilizan para el contacto continuo a contracorriente de un gas y un  
 1266 líquido en el proceso de absorción. Su principal característica es que las composiciones del  
 1267 líquido y del gas cambian continuamente con la altura del empaque. El equipo consiste en una  
 1268 columna cilíndrica o torre que se encuentra equipada con una entrada en la parte inferior, una  
 1269 entrada de líquido en la parte superior, salidas para el gas y el líquido por la parte superior e  
 1270 inferior, respectivamente (Figura 2.7). En su interior contiene una masa soportada de cuerpos  
 1271 sólidos inertes, que tienen la principal función de proporcionar una mayor área de contacto entre  
 1272 el gas y el líquido, y que suelen estar contruidos con materiales económicos tales como arcilla,  
 1273 porcelana, grafito, metal y plástico. Para llevar a cabo el proceso de separación en este tipo de  
 1274 columnas, el gas entra en el espacio de distribución que está debajo de la sección empacada,

1275 elevándose a través de las aberturas o intersticios del relleno, mientras se pone en contacto con  
1276 el solvente líquido que desciende y fluye a través de las mismas aberturas enriqueciéndose en  
1277 soluto a medida que desciende por la torre. Las columnas empacadas presentan ciertas ventajas  
1278 en comparación a las columnas de platos para la operación de absorción. Entre algunas ventajas,  
1279 presentan menores caídas de presión, una retención de líquido sustancialmente menor, un área  
1280 mayor de contacto gas-líquido y en el caso de operaciones en donde los componentes son ácidos,  
1281 presentan costos menores ante problemas de corrosión al poder utilizar empaques con la  
1282 capacidad de contrarrestar este efecto.



1283  
1284

Figura 2. 7. Esquema de una columna de absorción empacada.

1285

### 1286 2.3.3 Contactor de membrana de fibra hueca

1287 La separación de componentes no deseados en corrientes de gas a través de membranas forma  
1288 parte de las técnicas reportadas durante los últimos años en el campo de la separación de gases  
1289 (Zhang *et al.*, 2019; Razavi *et al.*, 2016; Rezakazemi *et al.*, 2012). Este método de absorción  
1290 relativamente novedoso combina las ventajas de la absorción química convencional y la  
1291 separación por medio de membranas, se lleva a cabo en pequeños dispositivos conocidos como  
1292 contactores. Dentro del equipo se tiene por separado las fases líquida y gaseosa mediante una  
1293 estructura porosa, mejorando la eficiencia de remoción del soluto de la fase gaseosa.

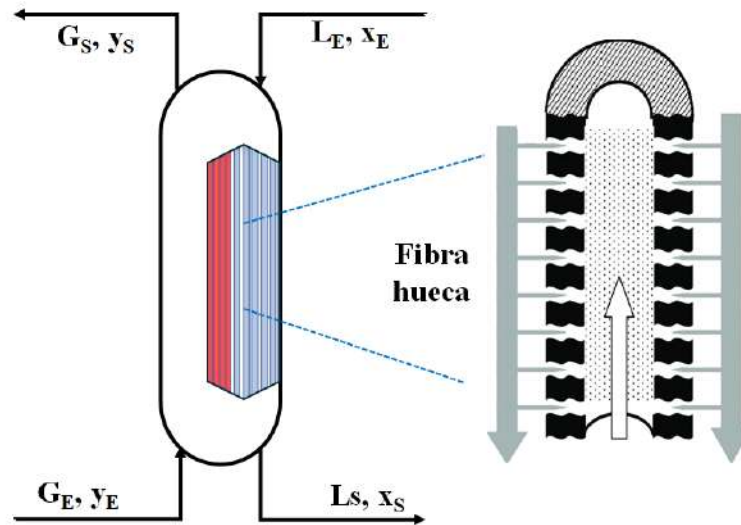


Figura 2. 8. Esquema de un HFMC para absorción de gases.

1294  
1295  
1296

1297 Su estructura permite dar solución a problemas comúnmente encontrados durante la operación  
1298 de las columnas convencionales, como lo son el espumamiento y las inundaciones de las etapas.  
1299 Físicamente, el HFMC puede describirse como un módulo cilíndrico, donde son almacenadas las  
1300 fibras huecas o membranas. Dependiendo del modelo de operación que se elija será el sentido  
1301 que adquirirán las fases que intervienen en la operación, una de ellas se encontrará al interior del  
1302 módulo, circulando por la superficie externa de las membranas, mientras que la otra fluirá  
1303 únicamente al interior de estas, normalmente la fase gas (Figura 2.8). Las membranas pueden  
1304 describirse como largas extensiones cilíndricas de diámetro uniforme, arregladas al interior del  
1305 módulo original, y cuya cantidad será descrita por la cantidad de fibras que se requiera en la  
1306 operación. Esta variable es de gran importancia ya que define la capacidad de almacenar un fluido  
1307 y promover el gradiente de concentración. Se desea que los poros de la membrana se llenen sólo  
1308 con la fase gaseosa, por lo que se utilizan membranas micro porosas hechas de polímeros con  
1309 alta hidrofobicidad como politetrafluoroetileno (PTFE), fluoruro de polivinilideno (PVDF),  
1310 polipropileno (PP), polisulfona (PS), polietersulfona (PES), poliamida (PI), entre otros (Bakeri  
1311 *et al.*, 2012). Algunas ventajas que un HFMC puede ofrecer sobre las columnas y otros equipos  
1312 convencionales de transferencia de masa son:

- 1313 • El área superficial disponible permanece sin perturbaciones frente a flujos variables pues  
1314 los fluidos son independientes.
- 1315 • No ocurre la formación de emulsiones pues no hay dispersión entre las fases.

- 1316 • No es necesaria una diferencia de densidades entre fluidos; los HFMC pueden aceptar  
1317 arreglos de densidades idénticas hacia cualquier orientación.
- 1318 • El escalamiento de la operación es más directo, pues la adición de módulos arreglados en  
1319 serie permite hacer un incremento lineal en la capacidad de operación.
- 1320 • El diseño modular permite operar el equipo con un amplio rango de capacidades,  
1321 adicionando o sustrayendo el número de módulos del equipo.
- 1322 • Los HFMC pueden utilizarse para incrementar la conversión frente a una condición  
1323 limitada de equilibrio químico.
- 1324 • El valor del área interfacial es conocido y permanece constante durante la operación del  
1325 equipo, lo cual hace posible predecir el desempeño de forma simple.
- 1326 • Las cifras de eficiencia son sustancialmente superiores, en comparación con el cálculo de  
1327 alturas de las unidades de transferencia (HTU).
- 1328 • La retención de solvente es mínima, atributo conveniente cuando se trabaja con solventes  
1329 costosos.
- 1330 • Un HFMC no posee partes móviles, cualidad que facilita su operación y disminuye  
1331 sustancialmente la posibilidad de fallos mecánicos durante su funcionamiento.

1332 Algunos de los obstáculos con los que se tiene que lidiar durante la operación de un HFMC es  
1333 que parte de las configuraciones que lo vuelven eficiente en algunos aspectos, pueden repercutir  
1334 en el desempeño de este. A continuación, se enumeran algunas de las razones por las que la  
1335 transición a los HFMC sigue siendo un reto:

- 1336 • La membrana es introducida como una resistencia adicional a la transferencia de masa,  
1337 ausente en las operaciones convencionales, pues actúa como una barrera de transporte.
- 1338 • Las membranas pueden ser obstruidas por contaminaciones y obstaculizar el transporte  
1339 de masa. A menudo esto puede ser atendido con el pretratamiento de las corrientes que  
1340 ingresan al equipo, o con el ajuste adecuado de variables como la presión.
- 1341 • Las membranas tienen un periodo de vida finito, por lo que es necesario considerar el  
1342 costo que representa reemplazarlas.
- 1343 • El uso de sustancias adhesivas para fijar los módulos de la membrana puede resultar en  
1344 un ataque directo al equipo por parte de sustancias orgánicas que intervienen en el  
1345 proceso, a menudo representadas por los solventes que se ingresan al equipo.

1346 • El número de etapas de equilibrio está limitado por las complicaciones en las caídas de  
1347 presión del equipo.

1348 Aunque estas limitaciones pueden considerarse decisivas para la implementación de estos  
1349 equipos de absorción a escala industrial, estas desventajas son equiparables por las múltiples  
1350 ventajas citadas previamente. Por esta razón, los HFMC son equipos atractivos tanto para el  
1351 sector académico/científico como para el sector industrial, pues el rango de aplicaciones que  
1352 puede tener es sumamente diverso y con el desarrollo de conocimiento de frontera estas  
1353 limitaciones pueden superarse (Shiravi *et al.*, 2023).

1354

1355

1356

1357

1358

1359

1360

1361

1362

1363

1364

1365

1366

1367

1368

1369

1370

1371

1372

1373  
1374  
1375  
1376  
1377  
1378  
1379  
1380  
1381  
1382  
1383  
1384  
1385  
1386  
1387  
1388  
1389  
1390  
1391  
1392  
1393  
1394  
1395  
1396  
1397  
1398  
1399  
1400  
1401

---

## ***CAPITULO III: Modelado y control de procesos***

---

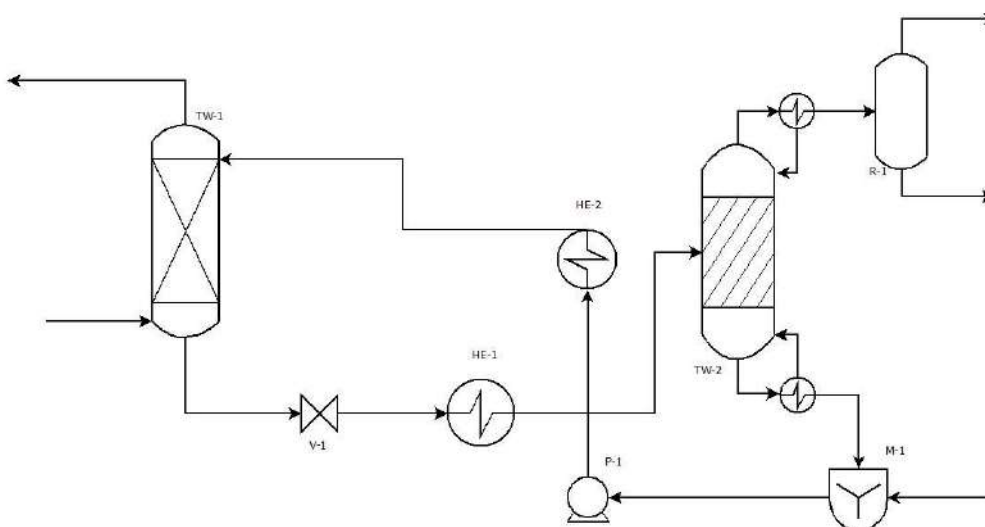
La estructura y el desarrollo de un modelo están íntimamente relacionados con su grado de sofisticación, el cual debe ser proporcional al alcance que tenga sus aplicaciones. Los modelos matemáticos se pueden clasificar dependiendo de la rigurosidad con la que representan los procesos o fenómenos y esto está directamente relacionado a su dificultad para su planteamiento y solución (Romagnoli y Palazoglu, 2005). De este modo se pueden encontrar modelos formulados por ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) o por ecuaciones diferenciales parciales (EDP), de parámetros concentrados (LPS) o de parámetros distribuidos (DPS). Estos modelos pueden ser complejos de resolver de forma analítica, por ello la simulación es una herramienta útil al permitir el ahorro de tiempo y recursos monetarios por diseños experimentales de laboratorio y evaluar condiciones operativas que pudieran ser peligrosas en la operación real y escenarios hipotéticos (Dobre y Marcano, 2007). Existen dos principales enfoques en los simuladores de procesos; el orientado a ecuaciones y el modular secuencial. La solución de estos modelos permite la predicción de los estados del proceso, además, permite la implementación de estrategias de optimización y control. La mayoría de las plantas de proceso operan en entornos cada vez más complejos, lo que da lugar a condiciones de funcionamiento fluctuantes o a variaciones en el material de alimentación del proceso (Remigio y Swartz, 2020). Por lo tanto, es necesario el desarrollo de nuevas y mejores estrategias de control para garantizar el correcto funcionamiento de los procesos. Aunque los esquemas de control basados en la respuesta del proceso son los más aceptados a nivel industrial, los controladores robustos presentan un rendimiento superior bajo dinámicas complejas y especificaciones de producto mejoradas (Romero-Bustamante *et al.*, 2017; Li *et al.*, 2019). En ese sentido, en este capítulo se aborda el modelado y la simulación aplicado al caso de estudio del endulzamiento de gas natural. Partiendo de la propuesta para simular la planta de estudio y los modelos matemáticos que representan las operaciones de absorción en columnas empacadas y de HFMC. Posteriormente, se plantea la teoría de control necesaria para abordar las estrategias en los equipos de absorción. Los esquemas de control que se han considerado en este trabajo son el PID debido a que es el esquema más

1402 utilizado a nivel industrial, el control MEC gracias a su capacidad de enfrentar las incertidumbres  
1403 de modelado, el control predictivo no lineal basado en modelo (NMPC, por sus siglas en inglés)  
1404 al ser el esquema no lineal más aplicado en diferentes procesos y el esquema de control de modos  
1405 deslizantes (SMC, por sus siglas en inglés) debido a su capacidad de hacer frente a las no  
1406 linealidades del sistema. Finalmente, se plantea la integración del proceso de HFMC a la  
1407 simulación completa de la planta de endulzamiento de gas.

1408

### 1409 3.1 Simulación de la planta de endulzamiento de gas natural

1410 Para realizar la simulación de la planta se considera como base el diagrama de flujo  
1411 proporcionado por el complejo procesador de gas, donde se consideran únicamente los equipos  
1412 más importantes de la planta. En la Figura 3.1 se muestra el diagrama de flujo simplificado y  
1413 adecuado para su simulación. La simulación presenta la torre de absorción (TW-1), la torre  
1414 regeneradora (TW-2), dos intercambiadores de calor (HE-1,2), una válvula (V-1), una bomba (P-  
1415 1), un mezclador (M-1) y un separador gas-líquido (R-1). Una de las estrategias más útiles para  
1416 la simulación de plantas es mediante software especializados en el análisis de procesos. Los  
1417 simuladores modular-secuencial se caracterizan por que cada unidad de proceso se representa  
1418 con un módulo en el que se incluye el modelo de operación y el algoritmo numérico utilizado  
1419 para el cálculo de los flujos de salida. Los módulos son totalmente independientes entre sí y el  
1420 flujo de información para el cálculo en la simulación.



1421

1422

Figura 3. 1. Diagrama de flujo de la endulzadora de gas simplificado.

1423  
1424 La ventaja de utilizar módulos es que cada sistema de ecuaciones se resuelve a través su propia  
1425 metodología (Chaves *et al.*, 2016). Los modelos matemáticos que describen al proceso junto con  
1426 los modelos termodinámicos, ecuaciones de estado y coeficientes de actividad ya se encuentran  
1427 programados en estos simuladores con los que se puede hacer la estimación de propiedades y el  
1428 equilibrio de fases. La estrategia de simulación modular-secuencial fracciona el modelo del  
1429 proceso completo en partes más pequeñas, calculadas de manera independiente, donde las  
1430 corrientes de salida son calculadas a partir de parámetros de diseño y de las corrientes de entrada.  
1431 Un ejemplo de este tipo de simuladores es los softwares Aspen, Pro-II, Chemcad, ProMax,  
1432 UniSim Design, entre otros. De entre los simuladores secuenciales comerciales más populares se  
1433 encuentra Aspen Plus, que ha sido desarrollado durante varias décadas y tiene numerosas  
1434 aplicaciones a nivel industrial. Cuenta con una gran variedad de modelos matemáticos para  
1435 diversos equipos de procesos químicos. Este software es empleado principalmente en la  
1436 simulación de plantas químicas en estado estacionario, siendo algunas de producción de  
1437 químicos, hidrocarburos, farmacéuticos, entre otros (Haydary, 2019). En ese sentido, la  
1438 simulación de la planta del caso de estudio se realizará mediante el software Aspen Plus.  
1439

### 1440 **3.2 Modelado matemático de la columna de absorción empacada**

1441 Se han desarrollado un gran número de modelos matemáticos para la predicción del  
1442 comportamiento del proceso de absorción para diferentes propósitos entre ellos el endulzamiento  
1443 de gas (Mores *et al.*, 2011; Manaf *et al.*, 2016; Machida *et al.*, 2019). Por ejemplo, Gáspár y  
1444 Cormos (2011) desarrollaron un modelo matemático para describir los fenómenos que ocurren  
1445 en la captura de CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S en una solución acuosa de MDEA en columnas de absorción  
1446 empacadas, donde proponen las siguientes suposiciones:

- 1447 • Régimen de flujo pistón y mezcla gaseosa ideal.
- 1448 • Parámetros del modelo constantes en la sección transversal radial de la columna.
- 1449 • No se considera transferencia de calor en la dirección axial con operación adiabática.
- 1450 • La solubilidad del CO<sub>2</sub> en la fase líquida se puede representar por la ley de Henry.
- 1451 • La reacción química tiene lugar sólo en la fase líquida.

1452 • La vaporización del líquido se condensa en la interfaz gas-líquido.

1453 Se emplean las EDP derivadas del balance de materia para describir la dependencia en el tiempo  
1454 y espacio del flujo, concentración y temperatura. El balance total de masa general en ambas fases  
1455 se presenta a continuación:

1456 
$$\frac{\partial F_L}{\partial t} = -v_L \frac{\partial F_L}{\partial z} \pm \frac{v_L S}{\rho_L} \sum (M_i x_i) \quad (3.1)$$

1457 
$$\frac{\partial F_G}{\partial t} = v_G \frac{\partial F_G}{\partial z} \pm \frac{v_G S}{\rho_G} \sum (M_i y_i) \quad (3.2)$$

1458 donde  $F_L$ ,  $F_G$ ,  $v_L$ ,  $v_G$ ,  $S$ ,  $\rho_L$ ,  $\rho_G$ ,  $M_i$ ,  $z$  y  $t$  son el flujo de la fase líquida, el flujo de la fase  
1459 gas, la velocidad de la fase líquida, la velocidad de la fase del gas, el área de la sección transversal,  
1460 la densidad de la fase líquida, la densidad de la fase gas, la masa molecular del componente  $i$ , la  
1461 longitud de la columna en el eje axial y el tiempo, respectivamente. El signo  $\pm$  muestra la  
1462 dirección de la transferencia de masa en la absorción. El balance de masa por componente para  
1463 la fase líquida y gaseosa son:

1464 
$$\frac{\partial C_{L,i}}{\partial t} = -v_L \frac{\partial C_{L,i}}{\partial z} \pm \sum_i (A_u x_i) \pm R \quad (3.3)$$

1465 
$$\frac{\partial C_{G,i}}{\partial t} = v_G \frac{\partial C_{G,i}}{\partial z} \pm \sum_i (A_u y_i) \quad (3.4)$$

1466 donde  $C$ ,  $A_u$  y  $R$  son la concentración del componente  $i$ , el área de transferencia de masa  
1467 interfacial y la velocidad de reacción, respectivamente. Las condiciones de frontera que delimitan  
1468 el sistema en ambas fases se describen mediante una consideración de igualdad de flux en la  
1469 entrada y una condición de no flux en la salida del proceso. El balance de energía para las fases  
1470 líquida y gaseosa son:

1471 
$$\frac{\partial T_L}{\partial t} = -v_L \frac{\partial T_L}{\partial z} + \frac{h A_u}{\rho_L C p_L} (T_G - T_L) - \frac{\bar{r} \Delta H_R}{\rho_L C p_L} \quad (3.5)$$

1472 
$$\frac{\partial T_G}{\partial t} = v_G \frac{\partial T_G}{\partial z} - \frac{h A_u}{\rho_G C p_G} (T_G - T_L) \quad (3.6)$$

1473 donde  $T_L$ ,  $T_G$ ,  $C p_L$ ,  $C p_G$ ,  $h$ , y  $\Delta H_R$  son la temperatura de la fase líquida, la temperatura de la  
1474 fase gas, la capacidad calorífica de la fase líquida, la capacidad calorífica de a fase gas, el  
1475 coeficiente de transferencia de calor interfacial y el calor de reacción, respectivamente. El

1476 segundo término en las ecuaciones (3.5) y (3.6) representa el intercambio de calor entre las dos  
 1477 fases debido a la diferencia de temperatura y el tercer término en la ecuación (3.5) el calor  
 1478 liberado/consumido de la reacción entre CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S y el solvente. Las condiciones de frontera  
 1479 definidas para el intercambio de energía son similares a las condiciones que definen las fronteras  
 1480 en los balances de masa. Para predecir el comportamiento dinámico de los perfiles de  
 1481 concentración en la columna de absorción empacada de la planta de endulzamiento, es necesario  
 1482 construir el modelo matemático basado en el conjunto de ecuaciones (3.1) – (3.4) derivadas de  
 1483 la ley de conservación de la masa acopladas a ecuaciones de tasa de transporte y relaciones de  
 1484 equilibrio apropiadas (Zhang *et al.*, 2020). El modelo de la columna de absorción empacada  
 1485 considerado en este estudio opera bajo los siguientes supuestos:

- 1486 1. El sistema se modela como distribuido axialmente y se asume que está bien mezclado en  
 1487 la dirección radial.
- 1488 2. No se considera el flujo turbulento dentro de la columna, por lo que se modela el efecto  
 1489 del transporte difusivo en la dirección axial.
- 1490 3. La caída de presión a lo largo de la columna se considera despreciable debido a que se  
 1491 encuentra por debajo de 0.25 mbar/m.
- 1492 4. Los cambios de fase se producen para el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S, los demás componentes del gas  
 1493 natural sólo existen en la fase gaseosa.
- 1494 5. Existe un equilibrio térmico entre las fases, la fase gaseosa es ideal.
- 1495 6. No hay acumulación en las películas de gas y líquido.
- 1496 7. Las fases líquida y gaseosa tienen una velocidad constante en el dominio axial para un  
 1497 caudal de entrada determinado.
- 1498 8. La reacción química tiene lugar únicamente en la fase líquida.

1499 Para realizar el modelado y la simulación de la columna de absorción se considera el sistema  
 1500 descrito en la Figura 3.2. Como base para el estudio se seleccionó un modelo matemático basado  
 1501 en los balances de masa por componentes en la fase líquida y la fase gas (Shafeeyan *et al.*, 2014).  
 1502 En ambos casos se considera transporte difusivo y convectivo y, únicamente en la fase líquida se  
 1503 lleva a cabo la reacción química. El balance de materia en la fase líquida está descrito como:

$$1504 \quad \frac{\partial C_{L,i}}{\partial t} = D_{L,i} \frac{\partial^2 C_{L,i}}{\partial z^2} + \bar{v}_L \frac{\partial C_{L,i}}{\partial z} + k_L (C_{G,i} - C_{L,i}) - R \quad (3.7)$$

1505 donde  $C_{L,i}$ ,  $D_{L,i}$ ,  $\bar{v}_L$  y  $R$  representa la concentración del componente  $i$  en la fase líquida (MEA,  
 1506 H<sub>2</sub>S, CO<sub>2</sub>), el coeficiente difusivo del componente  $i$  en la fase líquida, la velocidad promedio en  
 1507 la fase líquida y el termino reactivo, respectivamente. El balance de materia para la fase gas se  
 1508 describe como:

$$1509 \quad \frac{\partial C_{G,i}}{\partial t} = D_{G,i} \frac{\partial^2 C_{G,i}}{\partial z^2} - \bar{v}_G \frac{\partial C_{G,i}}{\partial z} - k_G (C_{G,i} - C_{L,i}) \quad (3.8)$$

1510 donde  $C_{G,i}$ ,  $D_{G,i}$  y  $\bar{v}_G$  son la concentración del componente  $i$  en el gas (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, hidrocarburos,  
 1511 etc.), el coeficiente difusivo del componente  $i$  en la fase gas y la velocidad promedio en la fase  
 1512 gas, respectivamente. Ambas ecuaciones con sus respectivas condiciones iniciales y de frontera.  
 1513 Para particularizar el problema, las ecuaciones diferenciales específicas que se utilizan para  
 1514 simular el proceso de absorción en una columna empacada dinámica consideran que los únicos  
 1515 componentes que interaccionan con el fluido con el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S. En ese sentido, el balance  
 1516 dinámico que representa el transporte de las especies  $i$  en la fase líquida se describe como:

$$1517 \quad \frac{\partial C_{L,i}}{\partial t} = D_{L,i} \frac{\partial^2 C_{L,i}}{\partial z^2} + \bar{v}_L \frac{\partial C_{L,i}}{\partial z} + k_{L,i} A_u (C_{G,i} - C_{L,i}) - k_{i-MDEA} C_{L,i} C_{MDEA} \quad i = CO_2, H_2S \quad (3.9)$$

1518 donde  $k_{i,MDEA}$  y  $C_{MDEA}$  la constante de velocidad de reacción aparente componente  $i$ -MDEA y la  
 1519 concentración de MDEA considerada constante, respectivamente. El balance de masa dinámico  
 1520 para la fase gas se describe como sigue:

$$1521 \quad \frac{\partial C_{G,i}}{\partial t} = D_{G,i} \frac{\partial^2 C_{G,i}}{\partial z^2} - \bar{v}_G \frac{\partial C_{G,i}}{\partial z} - k_{L,i} A_u (C_{G,i} - C_{L,i}) \quad i = CO_2, H_2S \quad (3.10)$$

1522 Las condiciones iniciales y de frontera para cada balance de materia se muestran en la Tabla 3.1.

1523

1524 Tabla 3. 1. Condiciones iniciales y de frontera para la columna de absorción empacada.

Variables independientes	Fase gas	Fase líquida
$t = 0$	$C_{G,i} = 0$	$C_{L,i} = 0$
$z = 1$	$C_{G,CO_2}(t) = Cin_{G,CO_2}; C_{G,H_2S}(t) = Cin_{G,H_2S}$	$\frac{C_{L,CO_2}(t)}{dz} = 0; \frac{C_{L,H_2S}(t)}{dz} = 0$
$z = L$	$\frac{C_{G,CO_2}(t)}{dz} = 0; \frac{C_{G,H_2S}(t)}{dz} = 0$	$C_{L,CO_2}(t) = Cin_{L,CO_2}; C_{L,H_2S}(t) = Cin_{L,H_2S}$

1525

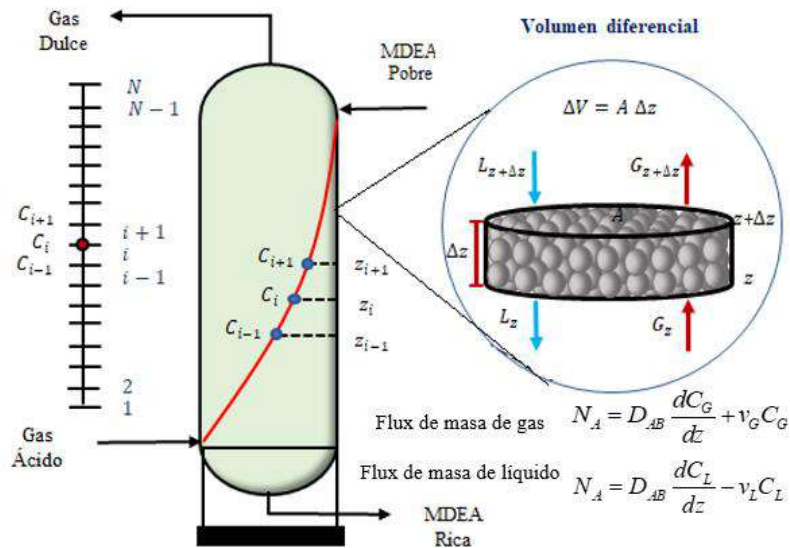
1526 El modelo de dos películas proporciona la tasa de transferencia de masa dentro del absorbedor  
 1527 para el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S. El modelo se establece como sigue:

1528 
$$\frac{1}{K_{G,i}} = \frac{1}{k_{L,i}} + \frac{m_i}{k_{G,i} E_{abs}} \quad i = CO_2, H_2S \quad (3.11)$$

1529 donde  $K_{G,i}$ ,  $k_{G,i}$ ,  $k_{L,i}$ ,  $m_i$  y  $E_{abs}$  son el coeficiente global de transferencia de masa para el  
 1530 componente  $i$ , el coeficiente de transferencia de masa local de  $i$  en la fase gas, el coeficiente de  
 1531 transferencia de masa local de  $i$  en la fase líquida, la pendiente de la curva de equilibrio que se  
 1532 puede expresar en términos de la constante de Henry para el componente  $i$  como  $m_i = H e_i^{-1}$  y el

1533 factor de mejora dado por  $E_{abs} = \sqrt{\frac{k_{CO_2-MDEA} C_{MDEA} D_{L,CO_2}}{k_{L,CO_2}}}$ , respectivamente. Para realizar la

1534 simulación numérica del modelo matemático se discretiza el operador diferencial espacial por  
 1535 diferencias finitas, obteniendo N nodos en la dirección axial. Para resolver las derivadas  
 1536 temporales se utiliza el método numérico de Runge-Kutta de cuarto orden con la paquetería *ode*  
 1537 en el software Matlab debido a que ofrece una buena exactitud para la resolución de ecuaciones  
 1538 y sistemas de ecuaciones diferenciales.



1539  
 1540 Figura 3. 2. Diagrama del proceso de absorción de  $CO_2/H_2S$  en la columna empacada.

1541

### 1542 3.3 Modelado matemático del HFMC

1543 Los HFMC son dispositivos que integran una membrana semipermeable que proporciona un área  
 1544 extra de contacto para las dos fases fluidas, favoreciendo la transferencia de masa de una especie

1545 desde una fase a otra en flujo cruzado. La separación utilizando membranas porosas está  
 1546 integrada con una operación de extracción o absorción que permite aprovechar las ventajas de  
 1547 ambas tecnologías (Vadillo *et al.*, 2020). Las aplicaciones más destacadas de los HFMC son la  
 1548 eliminación selectiva de metales, la recuperación de componentes orgánicos y la eliminación de  
 1549 gases ácidos en corrientes de hidrocarburos (Naim *et al.*, 2021; Markova *et al.*, 2021). En la  
 1550 absorción de CO<sub>2</sub> o H<sub>2</sub>S usando HFMC la membrana funciona como una separación, donde la  
 1551 selectividad es dominada por el disolvente utilizado (Siagian *et al.*, 2019). Para el modelado del  
 1552 proceso de absorción en un HFMC regularmente se recurre a un modelo matemático  
 1553 bidimensional en coordenadas cilíndricas para analizar el transporte del soluto a través de tres  
 1554 segmentos del contactor; un tubo interior por el que pasa el gas, una membrana de fibra hueca y  
 1555 la cáscara por la que pasa el líquido (Sohaib *et al.*, 2021). Para el desarrollo de los balances de  
 1556 materia se toman en consideración las particularidades físicas del equipo, por lo que se puede  
 1557 permitir la descripción de las ecuaciones principales para cada dominio del sistema. La ecuación  
 1558 de continuidad para la especie en cuestión durante la transferencia de masa en el sistema puede  
 1559 expresarse de la siguiente manera:

$$1560 \quad \frac{\partial C_{i,j}}{\partial t} = -\nabla \cdot N_{i,j} \quad (3.12)$$

1561 donde  $C_{i,j}$  y  $N_{i,j}$  son la concentración y el flux másico de la especie  $i$  a lo largo de la longitud  
 1562 del módulo y en el dominio específico  $j$ , respectivamente. La ley de Fick de difusión puede usarse  
 1563 para la determinación de los flux de la especie en cuestión de la forma tal que:

$$1564 \quad N_{i,j} = -D_{i,j} \nabla C_{i,j} + v_z C_{i,j} \quad (3.13)$$

1565 donde  $D_{i,j}$  y  $v_z$  son el coeficiente de difusión de la especie  $i$  y la velocidad axial a lo largo del  
 1566 módulo, respectivamente. Combinando las ecuaciones anteriores se obtiene el balance general  
 1567 de masa, que incluye las contribuciones del transporte convectivo y difusivo como:

$$1568 \quad \frac{\partial C_{i,j}}{\partial t} = D_{i,j} \nabla^2 \cdot C_{i,j} - \nabla V_z C_{i,j} \quad (3.14)$$

1569 los términos de la derecha representan el transporte difusivo y convectivo, respectivamente. De  
 1570 forma desarrollada, en la expresión global para cada fase se puede desprestigiar el transporte  
 1571 angular debido a que la contribución del transporte axial y radial son mucho más significativas.

1572 En ese sentido la ecuación anterior puede expresarse en coordenadas cilíndricas de la forma  
 1573 siguiente:

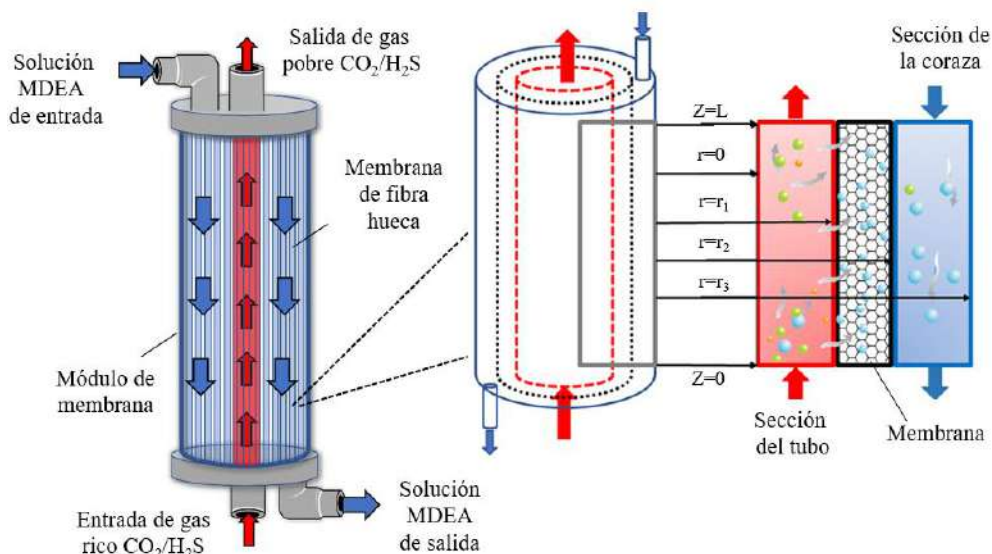
$$1574 \quad \frac{\partial C_{i,j}}{\partial t} = D_{i,j} \left[ \frac{\partial^2 C_{i,j}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i,j}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i,j}}{\partial z^2} \right] - V_z \frac{\partial C_{i,j}}{\partial z} \quad (3.15)$$

1575 donde  $r$  es la longitud del contactor en el eje radial. Esta expresión puede adaptarse para las  
 1576 condiciones de cada dominio, esto es: para la sección interior de los tubos la ecuación cuenta con  
 1577 la totalidad de sus términos, pues en el modelo se espera apreciar las consideraciones del  
 1578 transporte difusivo y el transporte convectivo únicamente sobre el eje axial del sistema. En el  
 1579 caso de la membrana, el transporte convectivo ya no es contemplado, ya que se asume que la  
 1580 velocidad en el interior de la membrana sobre el eje axial es despreciable. Por último, para el  
 1581 caso de la coraza la expresión se distingue únicamente de la fase gaseosa por la naturaleza del  
 1582 coeficiente de difusión, debido al cambio de fase, y el perfil de velocidad convectivo, por la  
 1583 geometría del sistema. Si existe reacción química entre el soluto transferido de la fase gaseosa y  
 1584 el solvente en la coraza, la ecuación (3.15) integra un nuevo termino de tal manera que la  
 1585 expresión queda como sigue:

$$1586 \quad \frac{\partial C_{i,j}}{\partial t} = D_{i,s} \left[ \frac{\partial^2 C_{i,j}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i,j}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i,j}}{\partial z^2} \right] - V_z \frac{\partial C_{i,j}}{\partial z} - R_i \quad (3.16)$$

1587 donde  $R_i$  representa la velocidad de reacción de la especie  $i$ . El diagrama general de un HFMC  
 1588 con un arreglo en contracorriente para una mezcla gaseosa rica en  $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{S}$  y una solución de  
 1589 MDEA como solvente se muestra en la Figura 3.3, donde las secciones que componen el  
 1590 contactor observando una sola fibra hueca consta de tres dominios de transferencia de masa: el  
 1591 tubo interior por el que entra la mezcla gaseosa en  $z=0$  con límites  $r=0$  a  $r=r_1$ , el soporte  
 1592 poroso con límites de  $r=r_1$  a  $r=r_2$  y la coraza por la que entra el solvente en  $z=L$  con límites  
 1593  $r=r_2$  a  $r=r_3$ . Para la simulación dinámica del HFMC adaptado al proceso de endulzamiento de  
 1594 gas se desarrolló un modelo matemático axisimétrico (que se puede analizar solo una parte del  
 1595 sistema, ya que se aplican automáticamente las condiciones de simetría) y bidimensional (2D)  
 1596 en coordenadas cilíndricas. Para el modo no humedecido en la membrana, la transferencia de  
 1597 masa se divide principalmente en tres etapas: la difusión de moléculas de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{S}$  a la interfaz  
 1598 membrana-gas, la difusión a través de los poros de la membrana hasta la interfaz líquido-  
 1599 membrana y la disolución de las moléculas de interés en el líquido absorbente. El modelo

1600 considera la transferencia de masa axial y radial, transporte convectivo en la membrana,  
1601 transporte convectivo-difusivo en el tubo/coraza y reacción química en la fase líquida.



1602  
1603  
1604

Figura 3. 3. Diagrama del proceso de absorción de CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S en el HFMC.

1605 Para la simulación, se consideró un módulo de contactor de membrana de polipropileno con las  
1606 mismas propiedades que los contactores de membrana Liqui-Cel™ con fibras huecas de  
1607 polipropileno (PP), la decisión se tomó debido a que son los equipos más aceptados a nivel planta  
1608 piloto y en la industria (Mora *et al.*, 2023; Lee *et al.*, 2023; Islam *et al.*, 2023). Los parámetros  
1609 geométricos del HFMC se indican en la Tabla 3.2, esta configuración favorece la absorción de  
1610 los componentes de interés (Hidalgo *et al.*, 2020; Park *et al.*, 2021; Morisato y Mahley, 2023).  
1611 El modelo de transporte de masa del proceso se basa en los siguientes supuestos:

- 1612 1. El gradiente angular de concentración se considera despreciable, entonces se aplica una  
1613 aproximación axisimétrica.
- 1614 2. La membrana se considera no humedecida y tiene un grosor y un tamaño de poro  
1615 uniformes.
- 1616 3. Configuración en contracorriente con régimen de flujo laminar y perfil de velocidad  
1617 completamente desarrollado dentro de los compartimentos del tubo y de la coraza.
- 1618 4. El sistema de absorción de gas por membrana se mantiene en condiciones isotérmicas y  
1619 existe equilibrio térmico entre las fases.
- 1620 5. Se emplea la ley de Henry para describir el equilibrio en la interfaz gas-líquido.
- 1621 6. La fase gaseosa se considera ideal y la reacción química sólo tiene lugar en la fase líquida.

1622 7. Se considera que el CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S son las únicas especies que pueden atravesar la interfase  
 1623 gas-líquido.

1624 8. La caída de presión a lo largo del contactor se considera despreciable.

1625

1626 Tabla 3. 2. Condiciones de operación del HFMC aplicadas en el caso de estudio.

Variable	Descripción	Valor
$r_1$	Radio interno del tubo	$9.1 \times 10^{-3}$ [m]
$r_2$	Radio externo de la membrana	$14.04 \times 10^{-3}$ [m]
$L$	Longitud total del módulo	2 [m]
$f$	Número de fibras	3600 [--]
$\varepsilon$	Porosidad	45 [%]
$\tau$	Tortuosidad	2.5 [--]
$S$	Área efectiva de la membrana	8.6 [m <sup>2</sup> ]
$T$	Temperatura	338.65 [K]

1627

1628 La ecuación de continuidad para cada sección de dominio se puede expresar como:

1629 
$$\frac{\partial C_{i,j}}{\partial t} = -\nabla C_{i,j} v_{z,j} - \nabla N_{i,j} + R_i \quad (3.17)$$

1630 donde  $N_{i,j}$  y  $R_i$  son el flux de masa de la especie  $i$  en la sección  $j$  y la tasa de reacción de la  
 1631 especie  $i$ , respectivamente. Los términos de lado derecho de la ecuación representan la  
 1632 convección, difusión y reacción. La ley de difusión de Fick es aplicable a través del medio poroso  
 1633 para la membrana. El transporte de la mezcla gaseosa se define mediante las ecuaciones  
 1634 diferenciales para las especies involucradas ( $i$ ) tal que:

1635 
$$\frac{\partial C_{i,tubo}}{\partial t} = D_{i,tubo} \left[ \frac{\partial^2 C_{i,tubo}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i,tubo}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i,tubo}}{\partial z^2} \right] - v_{z,tubo} \frac{\partial C_{i,tubo}}{\partial z} \quad i = CO_2, H_2S \quad (3.18)$$

1636 donde  $C_{i,tubo}$ ,  $D_{i,tubo}$ , y  $v_{z,tubo}$  son la concentración de la especie  $i$  en el lado del tubo, el coeficiente  
 1637 de difusión de la especie  $i$  en la fase gas y la velocidad del fluido en el tubo, respectivamente.  
 1638 Las condiciones de frontera de esta sección están dadas por:

1639 
$$z = 0, \quad C_{i,tubo} = C_{in_{i,tubo}} \quad (3.19)$$

1640 
$$r = 0, \quad \frac{\partial C_{i,tubo}}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetría}) \quad (3.20)$$

1641 
$$r = r_1, \quad C_{i,tubo} = C_{i,mem} \quad (3.21)$$

1642 donde  $C_{i,tubo}$  y  $C_{i,mem}$  es la concentración inicial de la especie  $i$  y la concentración de la especie  
 1643  $i$  en la membrana, respectivamente. Para la distribución de velocidad axial, se calculó el número  
 1644 de Reynolds para el gas natural a las condiciones de operación como  $Re_G = \frac{\rho_G v_G d}{\mu_G}$  donde  
 1645  $\rho_G = 0.7 \text{ kg/m}^3$ ,  $v_G = 63.19 \text{ m/h}$ ,  $d = 1.82e^{-2} \text{ m}$  y  $\mu_G = 1.1304e^{-3} \text{ kg/h}$  son la densidad, velocidad y  
 1646 viscosidad del gas y el diámetro interno del tubo, respectivamente. El valor obtenido de  
 1647  $Re_G = 712.1732$ , el cual tiene sentido si se considera que el diámetro del tubo central en el  
 1648 HFMC es suficientemente pequeño (Tabla 3.2). En ese sentido, se puede asumir un perfil de flujo  
 1649 laminar Newtoniano parabólico en el tubo tal que:

1650 
$$v_{z,tubo} = 2\bar{v}_G \left[ 1 - \left( \frac{r}{r_1} \right)^2 \right] \quad (3.22)$$

1651 donde  $\bar{v}_G$  y  $r_1$  representan la velocidad promedio de la mezcla gaseosa y el radio interno del tubo,  
 1652 respectivamente. Basándose en la consideración de no humectación, todos los poros de la  
 1653 membrana están completamente llenos de gas, por lo que el balance de masa que describe el  
 1654 transporte de las especies  $i$  en la membrana está definido por:

1655 
$$\frac{\partial C_{i,mem}}{\partial t} = D_{i,mem} \left[ \frac{\partial^2 C_{i,mem}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i,mem}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i,mem}}{\partial z^2} \right] \quad i = CO_2, H_2S \quad (3.23)$$

1656 donde  $D_{i,mem}$  es el coeficiente de difusión efectiva de la especie  $i$ . Los coeficientes de difusión en  
 1657 esta sección incluyen los efectos de la tortuosidad ( $\tau$ ) y la porosidad ( $\varepsilon$ ) de la membrana tal que

1658 
$$D_{i,mem} = \frac{\varepsilon}{\tau} D_{i,tubo}$$
. Las condiciones de frontera en la sección de la membrana están dadas como

1659 sigue:

1660 
$$r = r_1, \quad C_{i,mem} = C_{i,tubo} \quad (3.24)$$

1661 
$$r = r_2, \quad m_i C_{i,mem} = C_{i,cor} \quad (3.25)$$

1662 donde  $C_{i,cor}$  y  $m_i$  son la concentración de la especie  $i$  en la coraza y la solubilidad de la especie  $i$   
 1663 en la interfase gas-líquido en función de la constante de Henry, respectivamente. La transferencia  
 1664 de masa en la fase líquida se rige por el transporte convectivo-difusivo, donde la reacción química

1665 reversible entre las especies  $i$  y el solvente (MDEA) tiene lugar de forma simultánea. El balance  
 1666 de masa de las especies  $i$  en la fase líquida se describe como sigue:

$$1667 \quad \frac{\partial C_{i,cor}}{\partial t} = D_{i,cor} \left[ \frac{\partial^2 C_{i,cor}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i,cor}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i,cor}}{\partial z^2} \right] - v_{z,cor} \frac{\partial C_{i,cor}}{\partial z} - R_i \quad i = CO_2, H_2S \quad (3.26)$$

1668 donde  $D_{i,cor}$ ,  $v_{z,cor}$  y  $R_i$  son el coeficiente de difusión de la especie  $i$  en la fase líquida, la  
 1669 velocidad del fluido en la coraza y la tasa de reacción de la especie  $i$  que puede ser aproximada  
 1670 como  $R_i = k_{i,MDEA} [i][MDEA]$  donde  $k_{i,MDEA}$  es la constante de reacción para el  $CO_2$  y  $H_2S$   
 1671 (reacción de segundo orden). De acuerdo con la ecuación 2.7 del mecanismo de reacción entre  
 1672 la MDEA y los gases ácidos, se observa que la MDEA se ioniza adquiriendo un protón que  
 1673 posteriormente libera al superar el equilibrio, entonces la concentración del MDEA puede  
 1674 suponerse constante a lo largo del módulo. Las condiciones de frontera para el lado de la coraza  
 1675 están dadas por:

$$1676 \quad z = L, \quad C_{i,cor} = Cin_{i,cor} \quad (3.27)$$

$$1677 \quad r = r_2, \quad C_{i,cor} = m_i C_{i,mem} \quad (3.28)$$

$$1678 \quad r = r_3, \quad \frac{\partial C_{i,cor}}{\partial r} = 0 \quad (\text{no flux}) \quad (3.29)$$

1679 donde  $Cin_{i,cor}$  es la concentración inicial de las especies  $i$  en la coraza. El perfil de velocidad en  
 1680 la coraza esta expresado por el modelo de superficie libre de Happel (Al-Marzouqi *et al.*, 2008)  
 1681 tal que:

$$1682 \quad v_{z,cor} = 2\bar{v}_L \left[ 1 - \left( \frac{r_2}{r_3} \right)^2 \right] \left( \frac{(r/r_3)^2 - (r_2/r_3)^2 + 2 \ln(r_2/r)}{3 + (r_2/r_3)^4 - 4(r_2/r_3)^2 + 4 \ln(r_2/r_3)} \right) \quad (3.30)$$

1683 donde  $\bar{v}_L$ ,  $r_2$  y  $r_3$  representan la velocidad promedio del absorbente, el radio exterior de la  
 1684 membrana y el radio de la superficie libre, respectivamente. El radio efectivo hipotético de la  
 1685 coraza puede ser representado como  $r_3 = r_2 \sqrt{1/[1-\phi]}$  donde  $\phi$  representa la fracción de  
 1686 volumen vacío del HFMC (Razavi *et al.*, 2016). Para realizar la simulación numérica del modelo  
 1687 matemático se discretiza el operador diferencial espacial por diferencias finitas, obteniendo  $N$   
 1688 nodos en la dirección axial y  $M$  nodos en la dirección radial obteniendo una matriz espacial. Para  
 1689 resolver las derivadas temporales se utiliza el método numérico de Runge-Kutta de cuarto orden

1690 con la paquetería *ode* en el software Matlab debido a que ofrece una buena exactitud para la  
1691 resolución de ecuaciones y sistemas de ecuaciones diferenciales.

1692

### 1693 **3.4 Control de la columna de absorción empacada**

1694 El objetivo del control es reducir la concentración de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S a la salida de la columna de  
1695 absorción empacada en una referencia que permita cumplir con los estándares internacionales de  
1696 la cantidad del gas dulce, CO<sub>2</sub> < 2% mol y H<sub>2</sub>S < 4 ppm. Esto mediante la manipulación de  
1697 alguna de las variables de entrada del proceso como las velocidades o concentraciones de entrada  
1698 en las fases gas/líquido. Se aplican y comparan dos estrategias de control: un control PI clásico  
1699 sintonizado con las reglas del IMC y una propuesta de control no lineal basado en MEC. El  
1700 esquema de control lineal es propuesto debido a su fácil aplicación y gran aceptación, en contraste  
1701 el esquema de control robusto MEC es propuesto debido a su gran capacidad para estimar  
1702 incertidumbres de modelado. Aunado a esto, se considera comprar el esquema MEC con otro  
1703 esquema de control no lineal, para el proceso de absorción empacada frente a un control no lineal  
1704 de modo predictivo (NMPC) debido a que permite evaluar una secuencia óptima de entradas de  
1705 control. El controlador proporcional integral derivativo (PID) que es el esquema de lineal más  
1706 empleado a nivel industrial. Tiene tres acciones en conjunto que funcionan sistemáticamente para  
1707 alcanzar el objetivo del controlador que es alcanzar una referencia específica (Luyben, 1996). En  
1708 controlador PID es muy sensible a los cambios en el error y provee una corrección significativa  
1709 antes de que la magnitud del error se vuelva muy grande. El controlador suele ser eficiente y es  
1710 muy aplicable debido a que tiene pocos parámetros a especificar. La ecuación que representa la  
1711 ley de control PID es como sigue:

$$1712 \quad u(t) = \bar{u} + K_p e(t) + K_I \int_{t_c}^t e(t) dt + K_D \frac{de(t)}{dt} \quad (3.31)$$

1713 donde se muestra una relación de la entrada ( $u$ ) y una señal de error ( $e$ ) que permite alcanzar la  
1714 referencia específica. La primera acción es la proporcional (P), donde  $K_p$  es la ganancia  
1715 ajustable. La acción integral (I), es proporcional al tiempo que permanece la magnitud del error.  
1716 Esta contribución actúa integrando la desviación del error en el tiempo y sumándola a la acción  
1717 proporcional ( $K_p$ ). Por último, la acción derivativa (D) se manifiesta de forma proporcional a la

1718 velocidad en la que se acumula el error ( $K_D$ ). Cuando el tiempo de acción derivativa es muy  
 1719 grande, se puede presentar inestabilidad en el sistema, por lo que en sistemas químicos esta  
 1720 acción suele ser poco utilizada.

1721

### 1722 **3.4.1 Esquema de control MEC en la columna empacada**

1723 El control MEC posee una gran la capacidad de estimar los errores de modelado, reduciendo de  
 1724 manera gradual las diferencias entre los parámetros medidos u observados. Las entradas virtuales  
 1725 de control se desarrollan de una manera sencilla a tal grado que llegan a linealizarse, pues todos  
 1726 los parámetros inciertos son agrupados en un nuevo estado, incluyendo las partes no lineales del  
 1727 modelo (Slotine y Li, 1991). Para implementar el esquema MEC se parte de los modelos que  
 1728 representan al sistema, donde muchos de los parámetros pueden no ser completamente conocidos  
 1729 o no están a la mano. Un buen controlador debe ser capaz de responder y mantener la referencia  
 1730 estable a pesar de las incertidumbres del proceso. El desarrollo de las ideas de control MEC es  
 1731 presentado por Alvarez-Ramírez (1999), donde para un sistema cualquiera:

$$1732 \quad \frac{dy}{d\tau} = \alpha + \beta + \gamma + \delta u(t) \quad (3.32)$$

1733 la salida del sistema es  $y$  a un tiempo  $\tau$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  y  $\delta$  representan los parámetros del modelo y  
 1734  $u$  la variable de control. Al realizar una inversión del sistema despejando la variable de control  
 1735 y agrupando los parámetros del modelo en una nueva variable  $\eta$  se obtiene la siguiente  
 1736 expresión:

$$1737 \quad u = -g(\tau)^{-1}(\eta + \tau_c e) \quad (3.33)$$

1738 donde  $e = y - y_{ref}$  es el error de regulación y  $\tau_c$  es el parámetro del controlador. Para implementar  
 1739 la ley de control propuesta se requiere conocer los errores de modelado  $\eta$  mediante estimadores  
 1740 de estado; esto es, que  $\eta \approx \bar{\eta}$ . Introduciendo un observador de estados Luenberger se tiene:

$$1741 \quad \frac{d\eta}{d\tau} = \frac{1}{\tau_e}(\eta - \eta) = \frac{1}{\tau_e} \left( \frac{dy}{d\tau} - g(\tau)^{-1} - \eta \right) \quad (3.34)$$

1742 donde  $\tau_e$  es el parámetro de diseño del observador. Para integrar la observación de los estados  
 1743 se define una nueva variable que agrupa algunos términos:

$$1744 \quad W = \tau_e \eta - y \quad (3.35)$$

1745 Al derivar la expresión anterior y sustituir la entrada en función de  $u$  se puede obtener:

$$1746 \quad \frac{dW}{d\tau} = u\delta - \eta \quad (3.36)$$

1747 Resolviendo las ecuaciones (3.35) y (3.36) y sustituyendo el resultado en las ecuaciones (3.32) y  
 1748 (3.34) es posible obtener los estimados del error de modelado, con lo que completa el esquema  
 1749 de control. La ley de control de la ecuación (3.33) requiere de los parámetros de diseño  $\tau_c$  y  $\tau_e$   
 1750 los cuales se pueden asignar a partir del tiempo de residencia del proceso  $\tau_r$  de acuerdo con la  
 1751 regla de sintonizado de Alvarez-Ramírez (1999), donde se tiene que  $\tau_r > 0.5\tau_c > 0.5\tau_e$ , la cual  
 1752 es aplicable únicamente para procesos continuos. La implementación del controlador en la  
 1753 columna de absorción empacada considera que la representación del modelo de entrada-salida se  
 1754 ve afectada por no linealidades no modeladas. Basándose en el balance de masa de  $\text{CO}_2$  en la  
 1755 fase gaseosa en la parte superior de la columna (nodo  $N$ ) y discretizando el operador diferencial  
 1756 espacial, todos los términos inciertos del modelo pueden agruparse en un estado  $\eta(t)$  (i.e.,  
 1757 coeficientes de difusión, coeficientes globales de transferencia de masa, la constante de velocidad  
 1758 de reacción, entre otros), de forma que la ecuación (3.9) puede reescribirse como:

$$1759 \quad \frac{\partial C_{G,\text{CO}_2}^N}{\partial t} = u(t) \frac{\partial C_{G,\text{CO}_2}^N}{\Delta z} + \eta(t) \quad (3.37)$$

1760 donde  $u(t) = v_z$ . Los elementos que componen  $\eta(t)$  vienen dados como:

$$1761 \quad \eta(t) = D_{G,\text{CO}_2} \left( \frac{C_{G,\text{CO}_2}^{N+1} - 2C_{G,\text{CO}_2}^N + C_{G,\text{CO}_2}^{N-1}}{2\Delta z^2} \right) - v_z \frac{C_{G,\text{CO}_2}^{N+1}}{\Delta z} - k_{G,\text{CO}_2} A (C_{G,\text{CO}_2} - C_{L,\text{CO}_2}) \quad (3.38)$$

1762 Es posible forzar la dinámica de error para acercarse a cero con la dinámica de lazo cerrado,  
 1763 utilizando la siguiente ley de control de retroalimentación inversa:

$$1764 \quad u(t) = (\tau_c e - \eta(t)) \left( \frac{C_{G,\text{CO}_2}^N}{\Delta z} \right)^{-1} \quad (3.39)$$

1765 Donde  $\tau_c$  es un parámetro de control en lazo cerrado utilizado para regular la velocidad de  
 1766 convergencia a la referencia y  $e$  el error de regulación de concentración ( $e(t) = C_{g,\text{ref}} - C_{g,\text{CO}_2}^N$ ).

1767 Un observador de Luenberger de orden reducido de alta ganancia  $\bar{\eta}(t)$  para estimar las  
 1768 incertidumbres del modelo real  $\eta(t)$  de una manera que  $\bar{\eta}(t) \approx \eta(t)$  se describe como:

$$1769 \quad \frac{d\bar{\eta}}{dt} = \frac{1}{\tau_e} [\eta - \bar{\eta}] = \frac{1}{\tau_e} \left[ \tau_c e - u \left( \frac{C_{g,CO_2}^N}{\Delta z} \right) - \bar{\eta}(t) \right] \quad (3.40)$$

1770 donde  $\tau_e$  es el parámetro del estimador utilizado para modular la velocidad de estimación  
 1771 deseada para las incertidumbres del modelo. Tras sencillas manipulaciones algebraicas, el  
 1772 estimador puede escribirse como sigue:

$$1773 \quad \frac{dw}{dt} = -u(t) \frac{C_{g,CO_2}^N}{\Delta z} - \bar{\eta}(t) \quad (3.41)$$

1774 donde  $\bar{\eta}(t) = (w + C_{g,CO_2}^N) \tau_e^{-1}$ . El observador reducido de la ecuación (3.41) puede considerarse  
 1775 como un estimador de señal, donde la señal de error de modelado es un estado extendido del  
 1776 modelo nominal. El diseño de control tiene dos parámetros  $\tau_c$  y  $\tau_e$ , que se asignan siguiendo las  
 1777 directrices de sintonización reportadas en Alvarez-Ramírez *et al.*, (2002),  $\tau_e$  debe seleccionarse  
 1778 con un valor 2-5 veces menor que  $\tau_c$ .

1779

### 1780 3.4.2 Esquema de control NMPC en la columna empacada

1781 El control predictivo basado en modelo (MPC) es estrategia en la que la acción de control se  
 1782 obtiene resolviendo en cada instante de muestreo un problema de optimización dinámica de lazo  
 1783 abierto de horizonte finito. Utilizando el estado actual del proceso como estado inicial, solo el  
 1784 primer punto de control de esta secuencia se aplica al proceso. Primero, se construye un problema  
 1785 de control óptimo basado en el modelo y se traduce en un problema de optimización equivalente.  
 1786 Por esta razón el enfoque es conocido como predictivo, ya que el problema de control óptimo es  
 1787 formulado en un intervalo de tiempo conocido como horizonte de predicción. El resultado de la  
 1788 optimización es una secuencia óptima de futuros movimientos de control (Borrelli *et al.*, 2006).  
 1789 Varias formulaciones de los algoritmos MPC se han propuesto en la literatura. El algoritmo MPC  
 1790 más simple basado en el modelo de predicción lineal de tiempo discreto del proceso de lazo  
 1791 abierto se define como:

$$1792 \quad x(t+1) = Ax(t) + Bu(t) \quad (3.42)$$

1793 donde  $x(t) \in R^n$  es el vector de estado en el tiempo  $t$  y  $u(t) \in R^m$  es el vector de las variables  
 1794 manipuladas a determinar por el controlador. El problema de control en está dado por:

$$\begin{aligned}
 \min_U \quad & x_N' P x_N + \sum_{k=0}^{N-1} [x_k' Q x_k + u_k' R u_k] \\
 \text{s.t.} \quad & x_{k+1} = A x_k + B u_k, \quad k = 0, \dots, N-1 \\
 & x_0 = x(t) \\
 & u_{\min} \leq u_k \leq u_{\max}, \quad k = 0, \dots, N-1 \\
 & y_{\min} \leq C x_k \leq y_{\max}, \quad k = 1, \dots, N
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

1796 donde  $N$  es el horizonte de predicción,  $U$  es la secuencia de variables manipuladas para ser  
 1797 optimizadas,  $Q > 0$ ,  $R > 0$ ,  $P > 0$  son las matrices de peso de dimensiones apropiadas que definen  
 1798 el índice de rendimiento,  $u_{\max}/u_{\min} \in R^m$  son cotas superiores e inferiores de la variable de control  
 1799 y  $y_{\min}/y_{\max} \in R^p$ ,  $C \in R^{pm}$  definen las restricciones de las variables de estado. La modificación  
 1800 del algoritmo para considerar no linealidades en el modelo se conoce como control predictivo no  
 1801 lineal basado en modelo (NMPC). El NMPC es una estrategia de control avanzada que resuelve  
 1802 un problema de control en tiempo discreto muy similar como el algoritmo lineal (Vallerio *et al.*,  
 1803 2014). Basado en la predicción del comportamiento futuro de un proceso no lineal sobre un  
 1804 horizonte de predicción, el problema de control se define en el tiempo actual, sujeto a un modelo  
 1805 matemático del proceso. Para implementar el algoritmo NMPC, el modelo de columna de  
 1806 absorción se trabajó mediante un enfoque de discretización simultánea, que puede interpretarse  
 1807 como un problema de programación no lineal en cada paso temporal definido. La formulación  
 1808 del problema de control óptimo aplicado al modelo del contactor se define como sigue:

$$\begin{aligned}
 \min_{u_k} J = & \gamma_1 \sum_{i=0}^{\tilde{N}} \left\| C_{G,ref} - (C_{G,i}^N)_{k+i} \right\|^2 + \gamma_2 \sum_{i=0}^M \left\| \Delta u_{k+i} \right\|^2 \\
 \text{s.t.} \quad & C_{G,i}^{j+1} = C_{G,i}^j + \Delta t \left[ D_{G,i} \frac{d^2 C_{G,i}}{dz^2} - \bar{v}_G \frac{dC_{G,i}}{dz} - k_{G,i} A (C_{G,i} - C_{L,i}) \right] \\
 & C_{L,i}^{j+1} = C_{L,i}^j + \Delta t \left[ D_{L,i} \frac{d^2 C_{L,i}}{dz^2} + \bar{v}_L \frac{dC_{L,i}}{dz} + k_{L,i} A (C_{G,i} - C_{L,i}) - k_{i-MDEA} C_{L,i} C_{MDEA} \right] \\
 & 0 \leq (C_{G,CO_2}^N)_k \leq 80 \text{ [kmol / m}^3\text{]} \\
 & 0 \leq u_k \leq 100 \text{ [m / h]}
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

1810 donde  $j$  es el vector de concentraciones en el nodo  $N$ ,  $(C_{G,i}^N)_{k+i}$  es el valor estimado de la  
1811 concentración de CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S obtenido a partir del modelo de proceso no lineal,  $C_{G,ref}$  es la  
1812 referencia deseada,  $u_i$  denota la secuencia de la variable de control (velocidad de la fase gaseosa),  
1813  $\Delta u_{k+i}$  es el cambio de la variable de control en el instante  $k+i$ . y  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  son parámetros de  
1814 control entre los estados deseados y los movimientos de control. Los parámetros de control se  
1815 seleccionaron de acuerdo con Henson y Seborg (1997), donde se considera que  $\gamma_1$  puede elegirse  
1816 en el rango 1-10 y  $\gamma_2$  puede elegirse en el rango 1-100. Los valores finales de los parámetros  
1817 pueden obtenerse mediante un método de búsqueda fina. También se puede mencionar que el  
1818 modelo dinámico no lineal del sistema se discretiza para ser considerado dentro de las  
1819 restricciones. Se aplica un enfoque de discretización completa simultánea para implementar el  
1820 enfoque NMPC, que conduce a un problema de programación no lineal (NLP) y se resuelve  
1821 mediante el método de optimización de punto interior (Zavala *et al.*, 2008). Tanto los estados  
1822 como el perfil de control se discretizan y se propone su solución mediante el método de Euler  
1823 para cada intervalo de tiempo.

1824

### 1825 **3.5 Control del HFMC**

1826 El objetivo del control en esta operación nuevamente es reducir la concentración de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S  
1827 a la salida en una referencia que permita cumplir con los estándares internacionales de la cantidad  
1828 del gas dulce, CO<sub>2</sub> < 2% mol y H<sub>2</sub>S < 4 ppm. Esto mediante la manipulación de alguna de las  
1829 variables de entrada del proceso. Se aplican y comparan dos estrategias de control: un control PI  
1830 y un esquema de control MEC. Se considera comprar el esquema MEC como en el caso anterior  
1831 frente a un esquema de control no lineal. La estrategia de control NMPC no se aplica para el  
1832 proceso HFMC debido a que su formulación resulta compleja por la naturaleza del modelo. En  
1833 contraste, se selecciona un esquema de control de modos deslizantes (SMC) debido a su  
1834 capacidad para afrontar las no linealidades de modelado. Se consideran como supuestos que la  
1835 entrada de control  $u(t)$  está sujeta a límites físicos tal que  $u_{\min} \leq u(t) \leq u_{\max}$ , la medición de la  
1836 variable de salida  $y(t)$  se puede realizar continuamente sin retrasos significativos ya que existen

1837 dispositivos industriales para el monitoreo de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S. No obstante, se puede implementar un  
 1838 estimador de estado para obtener la medición de la salida deseada (Rodriguez-Jara *et al.*, 2021).

1839

### 1840 3.5.1 Esquema de control MEC en HFMC

1841 La implementación del controlador en el HFMC considera que la representación del modelo  
 1842 entrada-salida está afectada por no linealidades que pueden no ser consideradas en el modelo.

1843 Considerando el balance de masa para alguna de las especies *i* en alguna de las secciones *j* (tubo  
 1844 o coraza) para el nodo *N* de la longitud axial y discretizando el operador diferencial espacial, los  
 1845 términos que pueden ser considerados como inciertos se agrupan en un estado  $\eta(t)$  de tal forma  
 1846 que el balance de masa puede reescribirse como:

$$1847 \quad \frac{d\bar{C}_{i,j}^N}{dt} = u(t) \frac{\bar{C}_{i,j}^N}{\Delta z} + \eta(t) \quad (3.45)$$

1848 donde  $\bar{C}_{i,j}^N$  es el promedio de la concentración en el eje radial para el último nodo en el eje axial  
 1849 y  $u(t) = v_{z,j}$  (Cleland y Wilhelm, 1956). Por lo que  $\eta(t)$  se define como:

$$1850 \quad \eta(t) = D_{i,j} \left[ \frac{\bar{C}_{i,j}^{N+1} - 2\bar{C}_{i,j}^N + \bar{C}_{i,j}^{N-1}}{2\Delta r^2} + \frac{1}{r} \frac{\bar{C}_{i,j}^{N+1} - 2\bar{C}_{i,j}^{N-1}}{\Delta r} + \frac{\bar{C}_{i,j}^{N+1} - 2\bar{C}_{i,j}^N + \bar{C}_{i,j}^{N-1}}{2\Delta z^2} \right] - v_{z,j} \frac{\bar{C}_{i,j}^{N+1}}{\Delta z} + \beta \quad (3.46)$$

1851 Con la finalidad de forzar la dinámica para reducir la diferencia entre la concentración de salida  
 1852 y la referencia deseada se aplica una ley de control de retroalimentación por inversión tal que:

$$1853 \quad u(t) = \left[ \tau_c e(t) - \eta(t) \right] \left( \frac{\bar{C}_{i,j}^N}{\Delta z} \right)^{-1} \quad (3.47)$$

1854 donde  $\tau_c$  es una variable de control que permite regular la velocidad de convergencia y  
 1855  $e(t) = \bar{C}_{ref} - \bar{C}_{i,j}^N$  es el error de regulación. Con la finalidad de estimar las incertidumbres de

1856 modelado tal que  $\bar{\eta}(t) \approx \eta(t)$  se define un observador de alta ganancia de orden reducido

1857 Luenberger como:

$$1858 \quad \bar{\eta}(t) = \left( w + \bar{C}_{i,j}^N \right) \tau_e^{-1} \quad (3.48)$$

1859 donde  $\tau_e$  es un parámetro que permite modificar la velocidad en la que las incertidumbres son  
 1860 atenuadas. Realizando algunas manipulaciones algebraicas, el observador se define como:

1861 
$$\frac{dw}{dt} = -u \left( \frac{\bar{C}_{i,j}^N}{\Delta z} \right) - \bar{\eta}(t) \quad (3.49)$$

1862 donde  $\bar{\eta}(t) = (w + \bar{C}_{i,j}^N) \tau_e^{-1}$ . El observador de la ecuación (3.45) se utiliza como un estimador de  
 1863 la señal del error, el cual es un estado extendido del modelado.

1864

### 1865 **3.5.2 Esquema de control SMC en HFMC**

1866 El control de modo deslizante (SMC) es un método robusto para la regulación de dinámicas no  
 1867 lineales e incertidumbres propias del modelado. Cuenta con una fase de deslizamiento donde se

1868 propone una superficie  $s(t) = 0$  y  $\frac{ds(t)}{dt} = 0$  a lo largo de la cual la variable controlada alcanza

1869 el valor deseado. Para ello, se requiere de la fase de alcance donde una acción de control fuerza  
 1870 al estado controlado a permanecer en la superficie de deslizamiento cuando (Slotine y Li, 1991).

1871 Introduciendo la siguiente superficie de deslizamiento:

1872 
$$s(t) = \delta e(t) + \lambda \int_0^t \text{sign}[e(t)] dt \quad (3.50)$$

1873 donde  $\delta$  y  $\lambda$  son parámetros propios del controlador, se puede definir una ley de control basada  
 1874 en el modelo tal que:

1875 
$$u(t) = -g(x)^{-1} \left[ f(x) - \frac{dx}{dt} + \delta e(t) + \lambda \int_0^t \text{sign}[e(t)] dt \right] \quad (3.51)$$

1876 donde  $g(x)^{-1}$ ,  $f(x)$  y  $\frac{dx}{dt}$  componen al modelo matemático. La ley de control está compuesta

1877 por la realimentación de los términos del modelo ( $f(x)$ ) que por suposición pueden ser  
 1878 considerados inciertos. Para compensar estos términos se puede agregar un observador de orden

1879 reducido para obtener los valores estimados de las funciones de error de modelización. Para el  
 1880 control del HFMC mediante esta técnica nuevamente se parte del balance de masa y se considera

1881 que el error de regulación esta dado por  $e(t) = \bar{C}_{ref} - \bar{C}_{i,j}^N$ . Para ello, se requiere de una acción

1882 de control que fuerza al estado controlado a permanecer en la superficie de deslizamiento cuando

1883  $s(t) \neq 0$  Introduciendo la siguiente superficie de deslizamiento:

1884 
$$s(t) = \delta \bar{C}_{ref} - \bar{C}_{i,j}^N + \lambda \int_0^t \text{sign} \left[ \bar{C}_{ref} - \bar{C}_{i,j}^N \right] dt \quad (3.52)$$

1885 donde  $\delta$  y  $\lambda$  se sintonizan de acuerdo con las reglas reportado por Huang *et al.* (2008) donde  
 1886  $0 < \lambda < \delta < 1$ . En ese sentido, se puede definir una ley de control basada en el modelo tal que:

1887 
$$u(t) = \left( \frac{\bar{C}_{i,j}^N}{\Delta z} \right)^{-1} \left[ \delta \left( \bar{C}_{ref} - \bar{C}_{i,j}^N \right) - \eta + \lambda \int_0^t \text{sign} \left[ \bar{C}_{ref} - \bar{C}_{i,j}^N \right] dt \right] \quad (3.53)$$

1888 donde  $\eta$  son los términos agrupados del modelo matemático que pueden ser considerados como  
 1889 no conocidos. Para compensar estos términos se agrega un observador de orden reducido  
 1890  $\eta(t) \approx f(x)$ . De esta forma la ley de control se puede reescribir como:

1891 
$$u(t) = \left( \frac{\bar{C}_{i,j}^N}{\Delta z} \right)^{-1} \left[ \eta(t) + \delta e(t) + \lambda \int_0^t \text{sign} [e(t)] dt \right] \quad (3.54)$$

1892 donde  $\eta(t) = \gamma \left( w + \bar{C}_{i,j}^N \right)$ .

1893

### 1894 **3.6 Acoplamiento del HFMC a la simulación de la planta**

1895 La simulación de procesos mediante software comerciales es una herramienta útil para evaluar  
 1896 la configuración de una planta o de procesos individuales. Sin embargo, no todos los procesos se  
 1897 encuentran disponibles en las paqueterías de los simuladores, debido a que su descripción suele  
 1898 ser compleja o novedosa. En ese sentido, para fines de esta investigación es necesario incorporar  
 1899 el proceso de absorción HFMC en la simulación de la planta como alternativa. Debido a que  
 1900 Aspen-Plus no cuenta con este módulo, se debe seguir una metodología para incorporarlo a la  
 1901 simulación. Para ello, se puede realizar una conectividad entre el software de simulación modular  
 1902 con el software orientado a ecuaciones, comúnmente mediante un software de análisis de datos  
 1903 (Bartolome y Van Gerven, 2022). Los pasos por seguir son los siguientes:

- 1904 1. Conectividad: Se debe generar un enlace entre Aspen-Plus y el software Matlab donde se  
 1905 desarrolla el análisis del proceso de absorción HFMC. Para ello, se define en la  
 1906 simulación de Aspen un *User Model* donde se encuentra la columna de absorción  
 1907 empacada. Es necesario generar un libro en Excel donde se solicita y envía información.

- 1908 2. Solicitud de datos: Cuando la conectividad esta generada, se solicitarán los datos  
1909 requeridos de entrada, los cuales son generados mediante la simulación de Aspen que  
1910 involucra flujos, temperaturas, presiones etc. Estos datos se alimentan al algoritmo  
1911 generado en Matlab, para ello primero se exportan al libro de Excel.
- 1912 3. Solución del modelo: Una vez que los datos son almacenados en el libro, estos son  
1913 enviados al algoritmo de Matlab, donde se resuelve el modelo matemático del HFMC  
1914 optimizado y controlado. Cuando la simulación del proceso termina, los resultados deben  
1915 ser exportados.
- 1916 4. Envío de datos: Los datos obtenidos por el software Matlab, regresan a Excel como  
1917 entrada de datos para Aspen, con lo cual es posible cerrar la simulación y obtener los  
1918 resultados completos de la planta con la incorporación del proceso HFMC.

1919 Es importante señalar, que existen diferencias importantes en la incorporación del proceso de  
1920 absorción por HFMC, por ejemplo, la presión de entrada al contactor debe ser modificada  
1921 previamente, lo cual requiere de un equipo previo a la alimentación. Debido a ello, la simulación  
1922 requiere ser trabajada de forma independiente al caso donde se tiene el proceso de absorción  
1923 empacada incorporado a la planta de endulzamiento.

1924

1925

1926

1927

1928

1929

1930

1931

1932

---

## ***CAPITULO IV: Optimización y estimación de costos***

---

1933

1934

1935

Dentro de las consideraciones que se toman en cuenta para que una planta se encuentre operando de manera óptima se observa la calidad del producto final, operar bajo condiciones de operación estables, la cantidad de energía utilizada y los costos de operación e inversión. En las industrias de proceso, cuando se habla de costos de inversión o de operación en capital fijo se refiere al costo total de diseño, construcción e instalación de una planta, las modificaciones asociadas necesarias para preparar el sitio de la planta y el costo de materias primas u productos finales. Considerando la planta de endulzamiento de gas, es de vital importancia calcular los costos de las utilidades que en la mayoría de los casos incrementan sustancialmente los costos operativos. Para comparar diferentes escenarios de la operabilidad de la planta es necesario el cálculo de la inversión y los costos operacionales, con la finalidad de establecer que ruta de producción es la más rentable (Tikadar *et al.*, 2021). En este capítulo se examinan las estrategias de optimización adecuadas para la mejora de los procesos de absorción empleados en la planta de endulzamiento de gas natural, la columna empacada y la propuesta de un HFMC. Además, se aborda el cálculo de los costos de la planta de endulzamiento como una propuesta de análisis de costo beneficio. Finalmente, se realiza la propuesta la estimación de costo beneficio aplicado al caso de estudio.

1950

### **4.1 Técnicas de optimización de procesos**

1952

El planteamiento de un problema de optimización requiere de conocimientos de programación para el desarrollo y aplicación de algoritmos iterativos. Los componentes generales de un planteamiento de optimización son la función objetivo que se define como la necesidad de maximizar o minimizar una variable de un sistema en función de sus parámetros. Las variables de decisión que se define como las entradas manipulables o regulables, los parámetros del proceso que requieren ser conocidas para resolver el problema de optimización y las restricciones que son condiciones límites que restringen el problema de acuerdo con la física del proceso

1958

1959 (Biegler, 2003). La declaración estándar o canónica de una función de optimización se puede  
 1960 representar mediante la siguiente formulación:

$$\begin{aligned}
 & \min f(x, y) \\
 & \text{s.t. } \alpha h(x) = A \\
 & \quad \beta g(y) = B \\
 & \quad x, y \geq 0
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

1962 donde  $f(x, y)$  es la función objetivo, la cual suele estar relacionada a la reducción de costos,  
 1963 impacto ambiental y la mejora operativa. La resolución de los problemas de optimización se  
 1964 puede llevar a cabo mediante técnicas de programación lineal o no lineal. La programación lineal  
 1965 es una de las técnicas más utilizadas y efectivas para optimización, hace referencia a que la  
 1966 función objetivo y las restricciones deben ser términos lineales. Algunas de las aplicaciones  
 1967 representativas de la programación lineal la búsqueda de mejores utilidades, rendimientos y  
 1968 minimización de costos (Buzzi-Ferraris y Manenti, 2010). En contra parte, la programación no  
 1969 lineal es el conjunto de métodos para la optimización de una función objetivo sujeta restricciones  
 1970 en las cuales una o más variables presentan una estructura no lineal (Arora *et al.*, 1995). Debido  
 1971 a la naturaleza de los procesos químicos, los modelos matemáticos tienden a incorporar  
 1972 formulaciones no lineales, por lo cual las técnicas programación no lineal son las más adecuadas.

1973

#### 1974 4.1.1 Programación lineal y no lineal

1975 Un problema matemático de optimización restringido a una región factible que pertenece al  
 1976 conjunto de  $\mathbb{R}^n$  se considera un problema de programación lineal (LP), donde la función objetivo  
 1977 se puede definir de la siguiente manera:

$$1978 \quad c_1x_1 + c_2x_2 + c_3x_3 + \dots + c_nx_n \tag{4.2}$$

1979 para  $c_i \in \mathbb{R} \ i = 1 \dots n$  y su región factible es el conjunto de soluciones finitas de restricciones  
 1980 lineales de desigualdad e igualdad, de la forma que:

$$1981 \quad a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + a_{i3}x_3 + \dots + a_{in}x_n \leq b_i \quad i = 1, 2, 3, \dots, s \tag{4.3}$$

$$1982 \quad a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + a_{i3}x_3 + \dots + a_{in}x_n = b_i \quad i = s + 1, s + 2, s + 3, \dots, m \tag{4.4}$$

1983 El planteamiento de los problemas de optimización lineales permite el análisis de procesos que  
 1984 pueden ser descritos por ecuaciones sencillas, regularmente relacionada a el análisis de costos de

1985 producción o de materia prima que dependen de la cantidad de esta (Gondzio, 1996). Los cuatro  
1986 pasos básicos en el desarrollo de un modelo de LP son:

1987 1) Identificación y etiquetado de las variables de decisión que permiten encontrar el mínimo  
1988 de la función objetivo.

1989 2) Determinación de la expresión matemática para describir la función objetivo donde estén  
1990 involucradas de forma explícita las variables de decisión.

1991 3) Determinación de las expresiones matemáticas para describir las restricciones explícitas  
1992 e implícitas como ecuaciones de igualdad o desigualdad.

1993 Numerosas aplicaciones de programación matemática, incluidas la producción de bienes y  
1994 servicios, el consumo energético en una planta o la selección de rutas eficientes de transporte, se  
1995 pueden plantear de forma natural como programas lineales. Las suposiciones o aproximaciones  
1996 de la programación lineal también pueden conducir a representaciones apropiadas del problema  
1997 en el rango de variables de decisión que se consideren. Sin embargo, en otras ocasiones las no  
1998 linealidades expresadas en la formulación de las funciones objetivo o las restricciones son  
1999 cruciales para representar adecuadamente una aplicación como un programa matemático (Kuhn,  
2000 2013). Para hacer frente a esas no linealidades, se debe realizar una labor de pivoteo mediante  
2001 variaciones algebraicas. A menudo, los resultados de los procesos de optimización con funciones  
2002 no lineales están motivados por sus análogos lineales y son extensiones directas de los mismos.  
2003 El problema se denomina de programación no lineal (NLP) si la función objetivo es no lineal y/o  
2004 la región factible está determinada por restricciones no lineales. Así, el programa no lineal  
2005 general se expresa como:

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ & \text{s.t. } g(x) \leq b_1 \\ & \quad h(x) \geq b_2 \end{aligned} \tag{4.5}$$

2007 donde cada una de las funciones de restricción desde  $g$  y  $h$  son conocidas y concentran en su  
2008 definición términos no lineales. Por lo general, el contexto del problema sugiere una formulación  
2009 de igualdad o desigualdad (o una formulación con ambos tipos de restricciones).

2010

2011 **4.1.2 Optimización multiobjetivo**

2012 El problema de optimización multiobjetivo (MOP), también llamado optimización multicriterio,  
2013 multi resultado o problema de optimización vectorial puede definirse como la búsqueda de un  
2014 vector de variables de decisión que satisfaga las restricciones para optimizar una función  
2015 vectorial cuyos elementos representan las funciones objetivo. Estas funciones constituyen una  
2016 descripción matemática de los criterios de rendimiento que suelen estar en conflicto entre sí.  
2017 Entonces la optimización multiobjetivo permite encontrar una solución que dé valores de todas  
2018 las funciones objetivo que sean aceptables para la toma de decisiones.(Osyczka, 1985). El  
2019 problema general MOP puede definirse formalmente como:

$$\begin{aligned} & \min \bar{f}(x_1, x_2, x_3 \dots x_n) \\ & \text{s.t. } g_1(x_1, x_2, x_3 \dots x_n) \leq b_1 \\ & \quad \quad \quad \vdots \\ & \quad \quad \quad g_m(x_1, x_2, x_3 \dots x_n) \leq b_m \end{aligned} \tag{4.6}$$

2020

2021 donde  $\bar{f}$  representa un vector de funciones objetivo. Al contar con numerosas funciones  
2022 objetivo, la consideración de encontrar un solo óptimo cambia, ya que en los MOP se trata de  
2023 encontrar la mejor solución que intente satisfacer las diferentes funciones objetivo en lugar de  
2024 una solución única como en la optimización univariable.

2025

2026 **4.1.3 Algoritmo de optimización de punto interior**

2027 El método de punto interior para la minimización restringida consiste en resolver una secuencia  
2028 de problemas de minimización aproximada por partes (Biegler, 2008). El planteamiento del  
2029 problema de optimización general se puede expresar como:

$$\begin{aligned} & \min_x f(x) \\ & \text{s.t. } h(x) = 0 \\ & \quad \quad \quad g(x) \leq 0 \end{aligned} \tag{4.7}$$

2030

2031 donde el problema individual aproximado se define como:

$$\min_{x,s} f_u(x,s) = \min_{x,s} f(x) - \mu \sum_i \ln(s_i)$$

$$s.t. \quad s \geq 0$$

$$h(x) = 0$$

$$g(x) + s = 0$$

(4.8)

2032

2033 donde  $s_i$  son variables de holgura y su cantidad depende de la cantidad de restricciones de  
 2034 desigualdad  $g$ . Las variables de holgura están restringidas a ser positivas para mantener las  
 2035 iteraciones en el interior de la región factible. A medida que  $\mu$  se acerca a cero, el mínimo de  
 2036  $f_u(x,s)$  debe aproximarse al mínimo de  $f(x)$ . El término logarítmico añadido se denomina  
 2037 función de barrera, que restringe el problema de optimización (Byrd *et al.*, 2000). El problema  
 2038 aproximado de la ecuación (2.32) es una secuencia de problemas con restricciones de igualdad.  
 2039 Estos son más fáciles de resolver que el problema original de desigualdad restringida. Para  
 2040 resolver el problema aproximado, el algoritmo utiliza uno de los dos tipos principales de pasos  
 2041 en cada iteración:

- 2042 1. Un paso directo en  $(x, s)$  resolviendo las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) a  
 2043 través de una aproximación lineal, también se denomina paso Newton.
- 2044 2. Un paso CG (gradiente conjugado), utilizando una región de confianza.

2045 Por defecto, el algoritmo intenta primero dar un paso directo, si no es posible intenta un paso CG.  
 2046 En cada iteración el algoritmo decrementa una función de mérito, tal como:

$$f_\mu(x,s) + \nu \| (h(x), g(x) + s) \| \quad (4.9)$$

2048 donde el parámetro  $\nu$  permite mejorar la aproximación con el número de iteraciones para forzar  
 2049 la solución hacia la convergencia. Si un paso intentado no disminuye la función de mérito, el  
 2050 algoritmo rechaza el paso intentado e intenta un nuevo paso. Si la función objetivo o una función  
 2051 de restricción no lineal devuelve un valor complejo (e.g. infinito, imaginario) en una iteración  $x_j$ ,  
 2052 el algoritmo la rechaza. El rechazo tiene el mismo efecto que si la función de mérito no  
 2053 disminuyera lo suficiente, el algoritmo intenta un paso más corto.

2054

2055

## 2056 4.2 Optimización de la columna empacada

2057 Para poder definir un rendimiento adecuado del proceso de absorción ya sea empacado o por  
 2058 contactor de membrana es necesario encontrar los parámetros óptimos que permitan mejorar la  
 2059 separación del CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S de la mezcla de gas natural de entrada. En ese sentido, se propone la  
 2060 formulación de un problema de optimización para reducir la cantidad de ambos gases  
 2061 considerando que un valor de cero puede significar que no se esté llevando a cabo el proceso de  
 2062 absorción por lo que se establecen límites específicos (Martínez-Lomovskoi *et al.*, 2023). De  
 2063 modo que la formulación para abordar esta propuesta puede ser descrita como:

$$\begin{aligned}
 & \min G_{out} \\
 & s.a. \dot{x} = f(t, x, p, u), \quad \forall t \in [t_0, t] \\
 & x(t_0, p) = x_0(p) \\
 & x^l, u^l \leq x, u \leq x^u, u^u
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

2065 donde  $G_{out}$  es la cantidad de gases a minimizar en la salida del proceso,  $t$  el tiempo,  $x$  y  $\dot{x}$  las  
 2066 variables de estado y sus derivadas, respectivamente,  $p$  los parámetros independientes del  
 2067 tiempo y  $u$  las variables de decisión. Tanto los estados como las variables de decisión requieren  
 2068 de límites inferiores y superiores denominados restricciones implícitas, las cuales involucran  
 2069 condiciones de no negatividad y de valores superiores a 0 de acuerdo con la física del problema.  
 2070 Para la optimización de la columna de absorción empacada se considera el modelo matemático  
 2071 descrito en el capítulo 3 en las ecuaciones (3.9)-(3.10) como parte de las restricciones, donde se  
 2072 seleccionan 4 variables de decisión. Dos variables de diseño que son  $L, d$  y dos parámetros  
 2073 operativos,  $T, Q_L$ . Debido a la naturaleza del modelo y las necesidades de la planta la presión se  
 2074 mantiene constante en el equipo. La formulación del problema de optimización específico para  
 2075 la optimización de la columna de absorción empacada se representa como:

$$\begin{aligned}
 & \min FO = C_{G,i}^N \\
 & s.t. \frac{\partial C_{L,i}}{\partial t} = D_{L,i} \frac{\partial^2 C_{L,i}}{\partial z^2} - v_l \frac{\partial C_{L,i}}{\partial z} + \alpha(C_{G,i} - C_{L,i}) - kC_{L,i}C_{MDEA} \\
 & \frac{\partial C_{G,i}}{\partial t} = D_{G,i} \frac{\partial^2 C_{G,i}}{\partial z^2} + v_g \frac{\partial C_{G,i}}{\partial z} + \alpha(C_{G,i} - C_{L,i}) \\
 & 30 \leq Q_L \leq 95 \text{ m}^3 / \text{hr} \\
 & 300 \leq T \leq 400 \text{ K} \\
 & 0.5 \leq d \leq 2.5 \text{ m} \\
 & 10 \leq L \leq 30 \text{ m}
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

2077 donde  $i$  representan los componentes de interés ( $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{S}$ ),  $C_{G,i}^N$  la concentración de los gases  
2078 ácidos a la salida del proceso (último nodo en la dirección axial). Se establecieron los límites  
2079 para las variables de decisión en función de la estabilidad del proceso, al caudal del solvente se  
2080 asignó un rango de valores  $\pm 50\%$  del valor original. Para la temperatura se estableció un rango  
2081 mínimo cercano a  $25\text{ }^\circ\text{C}$  (condiciones estándar) y un máximo de  $200\text{ }^\circ\text{C}$ , esto debido a que a  
2082 mayor temperatura es posible que la fase líquida se volatilice y genere una modificación en las  
2083 consideraciones fundamentales de la operación. Para la longitud y el diámetro de la torre se  
2084 establecieron límites del  $\pm 50\%$ , para dar oportunidad al algoritmo de optimización de buscar  
2085 condiciones que favorezcan el proceso de absorción. Para la solución del problema de  
2086 optimización planteado se utilizó el algoritmo de punto interior mediante la paquetería *fmincon*  
2087 en el software Matlab.

2088

### 2089 **4.3 Optimización del HFMC**

2090 En el caso de la formulación del problema de optimización para el proceso de HFMC, se tomaron  
2091 en cuenta 5 variables de decisión, tres variables de diseño que son la longitud del módulo, la  
2092 longitud radial del contactor, el número de fibras internas ( $f$ ) y dos parámetros operativos, la  
2093 temperatura ( $T$ ) y el flujo molar del solvente ( $Q_L$ ). Para los límites de estas variables, la  
2094 temperatura y el flujo de solvente conservaron los valores definidos para la optimización de la  
2095 columna empacada. Por otro lado, el HFMC tiene dimensiones muy distintas a las de la columna,  
2096 entonces se establecieron límites de  $\pm 50\%$  del valor original para la longitud y el radio. Para el  
2097 caso del número de fibras, debido a que el diseño comercial no es tan flexible, solo se definió un  
2098 rango de  $\pm 100$  fibras considerando las alternativas para los módulos ya fabricados. De este modo,  
2099 la función objetivo sigue conservándose como la minimización de la concentración de gases  
2100 ácidos en la corriente de salida del equipo. La formulación involucra como restricciones la  
2101 solución del modelo dinámico del HFMC descrito en el capítulo 3 en las ecuaciones (3.18)-  
2102 (3.30), el cual es discretizado mediante diferencias finitas. De modo que el problema de  
2103 optimización puede ser expresado como:

$$\begin{aligned}
& \min \quad FO = \bar{C}_{i,tubo}^N \\
& s.t. \quad \frac{\partial C_{i,cor}}{\partial t} = D_{i,s} \left[ \frac{\partial^2 C_{i,cor}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i,cor}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i,cor}}{\partial z^2} \right] - v_{z,cor} \frac{\partial C_{i,cor}}{\partial z} - R_i \\
& \quad \frac{\partial C_{i,mem}}{\partial t} = D_{i,mem} \left[ \frac{\partial^2 C_{i,mem}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i,mem}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i,mem}}{\partial z^2} \right] \\
2104 \quad & \quad \frac{\partial C_{i,tubo}}{\partial t} = D_{i,tubo} \left[ \frac{\partial^2 C_{i,tubo}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i,tubo}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i,tubo}}{\partial z^2} \right] - v_{z,tubo} \frac{\partial C_{i,tubo}}{\partial z} \quad (4.12) \\
& \quad 30 \leq Q_L \leq 95 \text{ m}^3 / h \\
& \quad 300 \leq T \leq 400 \text{ K} \\
& \quad 0.01 \leq r \leq 0.03 \text{ m} \\
& \quad 1 \leq L \leq 3 \text{ m} \\
& \quad 3500 \leq f \leq 3700
\end{aligned}$$

2105 donde  $i$  representa la especie de interés ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ),  $\bar{C}_{i,tubo}^N$  la concentración de los gases ácidos a  
2106 la salida del proceso que sería un promedio del eje radial en el último nodo del eje axial. Cabe  
2107 señalar que la solución del problema de optimización para este caso resulta más complejo debido  
2108 al tipo de sistema de ecuaciones diferenciales parciales que debe resolverse. Para la solución del  
2109 problema de optimización planteado se utilizó el algoritmo de punto interior mediante la  
2110 paquetería *fmincon* en el software Matlab. Con la finalidad de robustecer la estrategia de  
2111 optimización del proceso se agrega una nueva función objetivo, la cual se describe en función  
2112 del esquema de control definido, donde la función objetivo se describe como la diferencia de la  
2113 concentración de los gases frente a su referencia, las restricciones están sujetas a la ley de control  
2114 basada en modelo y las variables de decisión son los parámetros propios del controlador. Por  
2115 ejemplo, la formación del problema de optimización de los parámetros de control para los  
2116 esquemas de control basados en modelo puede escribirse como:

$$\begin{aligned}
& \min \quad FO = Error \\
& s.t. \quad \dot{x} = f(t, x, p), \quad \forall t \in [t_0, t] \\
2117 \quad & \quad u(t) = (\tau_\alpha e + \eta \tau_\beta^{-1}) g^{-1} \quad (4.13) \\
& \quad -50 \leq \tau_\alpha, \tau_\beta \leq 50
\end{aligned}$$

2118 donde  $\dot{x}$ ,  $u(t)$ ,  $\tau_\alpha$  y  $\tau_\beta$  son los respectivos balances de materia, la ley de control y los  
2119 parámetros de control que dependen del esquema implementado, respectivamente. Se fijó como

2120 límites valores arbitrarios que permitan la búsqueda de los parámetros óptimos. En el caso de la  
2121 implementación de la optimización para los diferentes esquemas de control utilizados se sustituye  
2122 la ley de control específica dentro de las restricciones del problema.

#### 2123 **4.4 Análisis costo-beneficio**

2124 El análisis costo beneficio (ACB) es una herramienta de soporte que consiste en la cuantificación  
2125 de los costos y beneficios asociados a la implementación de un proyecto o política para el inversor  
2126 y/o la sociedad a lo largo de un período de tiempo (Boardman *et al.*, 2020). También conocido  
2127 como índice neto de rentabilidad, el objetivo del ACB es identificar si el proyecto evaluado  
2128 genera una asignación de recursos más eficiente en relación con una alternativa y puede realizarse  
2129 desde una perspectiva privada o social. Desde la perspectiva privada se busca determinar la  
2130 conveniencia de llevar adelante una inversión, según el punto de vista del inversor o accionista.  
2131 La evaluación social se realiza respecto a criterios de bienestar de la sociedad y permite informar  
2132 si la ejecución del proyecto generará o no mejoras. Los costos y beneficios considerados en el  
2133 análisis deben ser atribuibles al proyecto y se deben considerar los costos y beneficios directos,  
2134 indirectos e intangibles, así como algunas externalidades propias del proyecto. Dentro de esta  
2135 consideración de proyecto se encuentra el análisis de plantas industriales, donde el ACB es  
2136 aplicable cuando se busca alguna incorporación de tecnología a la planta o la mejora de los  
2137 procesos existentes. El fundamento básico del ACB es la comparación de los beneficios y los  
2138 costos, si los beneficios son mayores que los costos entonces será recomendable llevar a cabo la  
2139 mejora de la planta, por el contrario, si los costos son mayores que los beneficios entonces no  
2140 será conveniente realizar un cambio (Zerbe y Bellas, 2015). El valor de costo-beneficio se puede  
2141 obtener mediante la siguiente expresión:

$$2142 \quad \frac{B}{C} = \frac{VAN}{VAC} \quad (4.14)$$

2143 donde  $B$  se consideran los beneficios,  $C$  los costos,  $VAN$  es el valor actual de ingresos totales  
2144 netos o beneficios totales y  $VAC$  es el valor actual de costos de inversión o costos totales.

2145

#### 2146 **4.4.1 Identificación, cuantificación y valoración de costos**

2147 Los costos que se deben considerar para el ACB en una planta incluyen costos directos,  
2148 indirectos, intangibles y externos. Los costos directos reflejan la utilización de insumos  
2149 necesarios para la ejecución y operación de la planta como la materia prima. Esta valoración debe  
2150 considerar precios sociales, es decir, no distorsionados por impuestos o subsidios. Los costos  
2151 indirectos son los que están relacionados con el uso de servicios para la planta. Los costos  
2152 intangibles son para los cuales no existe necesariamente un mercado que permita valorarlos. Pese  
2153 a que no influyen en el cálculo de rentabilidad, es importante identificarlos. Los costos externos  
2154 son afectaciones a mercados diferentes al relacionado con la planta (Drury, 2013). De acuerdo  
2155 con lo anterior, para conocer la conveniencia del proyecto se calculan indicadores de rentabilidad  
2156 para estimar los costos. Los costos totales de una planta están dados por los costos fijos de  
2157 inversión ( $CFI$ ) más los costos de operación ( $CO$ ) por la siguiente ecuación:

$$2158 \quad CT = CFI + CO \quad (4.15)$$

2159 De acuerdo con el método de factores propuesto por Lang (1947), los costos fijos de inversión  
2160 pueden estimarse como la suma de los costos dentro de los límites de batería ( $CDLB$ ), más los  
2161 costos fuera de los límites de batería ( $CFLB$ ), más los costos de ingeniería y construcción ( $CIC$ )  
2162 y los costos de contingencias ( $CC$ ) dado como:

$$2163 \quad CFI = CDLB + CFLB + CIC + CC \quad (4.16)$$

2164 donde los costos dentro de los límites de batería se pueden calcular en función de un factor de  
2165 instalación que depende de la materia que se esté tratando. La ecuación propuesta es como sigue:

$$2166 \quad CDLB = FC_e \quad (4.17)$$

2167 donde el valor de  $F = [3.1, 4.74 \text{ o } 3.63]$  para plantas que procesan sólidos, fluidos o fluidos-  
2168 sólidos, respectivamente. Debido a que el método de factores propuesto es muy antiguo,  
2169 Wijoseno (2023) propuso una modificación del valor en un rango de  $F = [3 - 5.33]$  para para  
2170 plantas procesadoras de fluidos. Para fines prácticos se propone utilizar un valor promedio de  $F$   
2171  $= 4.165$ . Por otra parte,  $C_e$  representa el costo total de los equipos de la planta los cuales pueden  
2172 ser estimados mediante la ecuación (4.18) que considera los costos en función de ciertos  
2173 materiales usados para la construcción:

$$2174 \quad C_e = \left[ (1 + f_p) f_m + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l) \right] \sum_{i=1}^N C_{es,i} \quad (4.18)$$

2175 donde  $f_p$ ,  $f_m$ ,  $f_{er}$ ,  $f_{el}$ ,  $f_i$ ,  $f_c$ ,  $f_s$ ,  $f_l$  y  $N$  son el factor de instalación de tuberías, el factor de  
 2176 costo de material de tuberías, el factor de instalación de equipos, el factor de instalación de  
 2177 componentes eléctricos, el factor de instalación de instrumentación y control, el factor de costo  
 2178 de obra de ingeniería civil, el factor de costo de estructuras y edificios, el factor de costo de  
 2179 recubrimientos, aislamiento y pinturas y el número total de equipos, respectivamente. El valor  
 2180 de  $f_m$  puede variar dependiendo de la aleación usada para las tuberías que van de valores de 1 a  
 2181 1.7. En el caso de los demás factores pueden ser definidos mediante un estimado de la materia  
 2182 que se trata en la planta, ya sea fluido, sólido o fluido-sólido. El costo específico de cada equipo  
 2183 que compone la planta se puede obtener mediante la siguiente ecuación:

$$2184 \quad C_{es} = a + bS^n \quad (4.19)$$

2185 Donde  $a$  y  $b$  son coeficientes de costo dependiendo del equipo,  $S$  el tamaño del equipo a unidades  
 2186 específicas y  $n$  un exponente relacionado al tipo de operación. Los coeficientes para los diferentes  
 2187 tipos de proceso se encuentran reportados en la literatura (Wain, 2014). Los costos fuera de los  
 2188 límites de batería se pueden estimar como  $CFLB = F\alpha(CDLB)$ , los costos de ingeniería y  
 2189 construcción como  $CLC = F\beta(CDLB + CFLB)$  y los costos de contingencias como  
 2190  $CC = F\gamma(CDLB + CFLB)$  Los factores  $F_i$  también dependen del tipo de materia tratada en el  
 2191 proceso. Por otro lado, los  $CO$  son aquellos que se requieren para operar la planta a largo plazo,  
 2192 se incluyen principalmente costos de mano de obra ( $CMO$ ), costos por usar servicios auxiliares  
 2193 ( $CSA$ ), costos para el tratamiento de residuos ( $CTE$ ) y costos por la adquisición de materia  
 2194 prima ( $CMP$ ). La ecuación que permite establecer la relación de los  $CO$  está basada en el  
 2195 método de factores de Lang:

$$2196 \quad CO = 0.208CFI + 2.73CMO + 1.23(CSA + CTE + CMP) \quad (4.20)$$

2197 Este cálculo está basado en las reglas heurísticas reportadas El cálculo de  $CMO$  considera el  
 2198 número de etapas que incluyen manejo de sólidos ( $N_s$ ), el número de etapas que no incluyen  
 2199 sólidos ( $N_n$ ), el número total de operadores mínimo por equipo ( $O_N = 4.5$ ) y una media del  
 2200 salario de los operadores de procesos ( $S_m$ ) y se escribe como:

$$2201 \quad CMO = O_N S_m (6.29 + 31.7N_s^2 + 0.23N_n)^{0.5} \quad (4.21)$$

2202 Por otro lado, el costo de los servicios auxiliares se calcula mediante la siguiente expresión:

2203 
$$CSA = F_{TV}Cu_v + F_{TW}Cu_w + P_T F_P Cu_E \quad (4.22)$$

2204 donde  $F_{TV}$ ,  $C_{UV}$ ,  $F_{TW}$ ,  $C_{UW}$ ,  $P_T$ ,  $F_P$  y  $C_{UE}$  representan el flujo total de vapor utilizado en la  
2205 planta, el costo unitario del vapor que depende del país, el flujo total de agua de calentamiento o  
2206 enfriamiento, el costo unitario del agua que depende del país, la potencia de todos los equipos  
2207 que utilizan energía eléctrica, los flujos de los equipos que usan energía eléctrica y el costo  
2208 unitario de la energía eléctrica que depende del país, respectivamente. El costo total del  
2209 tratamiento de efluentes se puede obtener como  $CTE = 0.03m_E$  donde  $m_E$  es la masa total de

2210 efluentes y el costo total de la materia prima como  $CMP = \sum_{j=1}^M Cu_j$  donde  $M$  es el número total  
2211 de materias primas compradas (Stuart y El-Halwagi, 2012).

2212

#### 2213 **4.4.2 Identificación, cuantificación y valoración de beneficios**

2214 Los beneficios esperados durante el horizonte de evaluación en la mejora de la planta son los  
2215 beneficios directos, indirectos, intangibles y externos. Los beneficios directos son aquellos que  
2216 se obtienen durante la etapa de operación y que propician ahorros en el proceso de producción e  
2217 incrementos en el consumo del producto. Los beneficios indirectos son los que se reflejan en el  
2218 mercado y que se relacionan con el producto, ya sea incrementando su consumo o liberando  
2219 recursos mediante ahorros en sus procesos de producción. Los beneficios intangibles no están  
2220 relacionados con la parte económica, por lo que no suelen ser cuantificables. Los beneficios  
2221 externos están relacionados a una mejor posición del producto en el mercado, lo cual no se refleja  
2222 directamente como una consecuencia de la mejora de la planta pero que si puede aportar en la  
2223 factibilidad de la propuesta de mejora. El costo total del producto o los productos generados en  
2224 la planta se puede calcular en función del precio unitario como:

2225 
$$CP = m_p \sum_{j=1}^M Cu_j \quad (4.23)$$

2226 donde  $M$  es el número total de productos generados y  $m_p$  es la masa total de producto generado.

2227 Es importante señalar que los cálculos se deben realizar por año y los precios unitarios de los  
2228 productos dependerán si son sólidos o líquidos. Para calcular los beneficios derivados del ahorro

2229 de recursos es necesario realizar la comparación entre ambas propuestas, la planta convencional  
 2230 y la planta con la mejora. A fin de cuantificar esta contribución se obtiene la siguiente expresión:

2231 
$$BA = C_a - C_n \quad (4.24)$$

2232 donde *BA* corresponde al rubro por beneficios económicos por ahorro o aprovechamiento de  
 2233 utilidades en la planta.

2234

2235 **4.4.3 Estimación de inversión o costo real**

2236 Para considerar el valor real de los costos de inversión y operación primero se debe identificar el  
 2237 grado de confiabilidad que tiene el estimado. Esta estimación permitirá conocer la cantidad de  
 2238 dinero que se requerirá para construir o modificar la planta. Específicamente, existen 5 tipos de  
 2239 estimados que se utilizan dependiendo del detalle de los estudios y cálculos, la cual se encuentra  
 2240 reportada por Dysert y Christesen (2016).

2241

2242

Tabla 4. 1. Matriz de clasificación de costo estimado para industrias de proceso.

Clase de estimado	Nivel de definición de proyecto (%)	Propósito del estimado	Metodología	Margen de precisión previsto a variación (%)
5	0 – 2	Escalamiento conceptual	Cálculo de capacidad mediante analogías	L: -20 – -50 H: +30 – +100
4	1 – 15	Ingeniería básica: factibilidad	Cálculo de costos mediante factores o modelos	L: -15 – -30 H: +20 – +50
3	10 – 40	Ingeniería de detalle: Control presupuestario	Cálculo de costos unitarios semi detallados	L: -10 – -20 H: +10 – +30
2	30 – 75	Instrumentación y control: oferta y licitación	Cálculo de costos unitarios detallados	L: -5 – -15 H: +5 – +20
1	65 – 100	Construcción y compras: comprobación de presupuesto	Cálculos globales detallados	L: -3 – -10 H: +3 – +15

2243

2244 En la tabla 4.1 se muestra el nivel de precisión que puede tener la propuesta de mejora, su  
 2245 propósito, la metodología requerida y los márgenes de precisión que pueden tener los cálculos,  
 2246 el cual contempla un límite inferior y uno superior. Para calcular el rango del costo es necesario  
 2247 aplicar la siguiente ecuación:

2248 
$$CE_{\pm} = CT (1 \pm Ri R_j i) \quad (4.25)$$

2249 Donde *i* depende del rango positivo o negativo que se esté considerando y *j* depende de la clase  
 2250 de estimado que se esté empleando para la mejora de la planta. En la práctica un estudio de

2251 ingeniería básica es suficiente para la determinación de la viabilidad de un proyecto, pues  
2252 contempla el conocimiento necesario de todos los equipos necesarios, su dimensión y costos de  
2253 construcción. Aunque el estudio de clase 1 es el más completo, conocer todos los detalles  
2254 definitivos, cotizaciones o tipos de inversión resulta complejo y es poco utilizado en una etapa  
2255 temprana de una propuesta para la mejora de una planta. Por ello, para un estudio en una fase  
2256 inicial que cuente con suficiente información para un estimado general se considera el estudio de  
2257 clase 4. Si bien se puede considerar que las aproximaciones reportadas en la literatura son  
2258 confiables es necesario considerar los datos de la actualidad. Para actualizar los costos totales de  
2259 inversión a valores que se manejan actualmente en el mercado que permitan hacer estimaciones  
2260 confiables, es necesario considerar un factor de inflación mediante los índices anuales reportados  
2261 y se calcula de acuerdo con la siguiente ecuación:

2262 
$$Inv_2 = Inv_1 \left( \frac{I_2}{I_1} \right) \quad (4.26)$$

2263 donde el subíndice 2 indica la inversión y el índice actualizado respecto a una reportada en años  
2264 pasados (subíndice 1). Considerando estos cálculos es posible generar una estimación confiable  
2265 de cuánto dinero es necesario invertir y cuanto se puede obtener de ganancias o beneficios  
2266 (Mignard, 2014). Con ello se puede obtener el índice costo-beneficio que indicará si la  
2267 modificación o la propuesta de mejora presenta buena rentabilidad. Si el valor del índice costo-  
2268 beneficio es mayor que 1, significa que la propuesta es rentable y presenta ventajas respecto a  
2269 otra propuesta o una situación actual de la planta. Es importante señalar que la inversión inicial  
2270 de la propuesta se puede amortizar en un horizonte de tiempo entre 5 y 25 años, por lo que el  
2271 valor de inversión calculado se puede dividir en los años en los que se considera la amortización.  
2272 Entre menor sea el tiempo de amortización mayor será la inversión necesaria en cada año  
2273 (Pratschner *et al.*, 2023).

#### 2274 **4.5 Estimación costo-beneficio de la planta de endulzamiento**

2275 Para realizar el análisis de costos es necesario contemplar los equipos utilizados en la planta y  
2276 sus características de diseño, esto para poder hacer el estimado de los costos que requeriría su  
2277 mejora o implementación según sea el caso. En la tabla 4.2 se muestran algunas las características  
2278 de los equipos que posee la planta de endulzamiento. Hay que considerar que el costo de los

2279 HFMC comerciales Liqui-Cel™ con fibras huecas de polipropileno (PP) está en  
 2280 aproximadamente 1,000 USD.

2281

2282 Tabla 4. 2. Condiciones de los equipos en la planta de endulzamiento.

Equipo	Material	Presión [bar]	Área [m <sup>2</sup> ]	Flujo [m <sup>3</sup> /h]	Otros
<b>Columna de absorción (1)</b>	Acero inoxidable	70	90	1233.11	Empaque: PALL metal 1.5 in C. térmica: -8.64e8 kJ/h
<b>Bomba centrífuga (3)</b>	Acero inoxidable	63.24 2.97 67.47	-----	45.15 28494.2 63.63	C. térmica: -6.11e8 kJ/h C. térmica: -8.88e8 kJ/h C. térmica: -9.61e8 kJ/h
<b>Intercambiador de calor de tubo y coraza (2)</b>	Acero inoxidable	5.3 2.97	2.27 4.57	360.81 14908.2	C. térmica: -6.11e8 kJ/h C. térmica: -8.83e8 kJ/h U=0.85 kJ/K cm <sup>2</sup> s
<b>Enfriador (2)</b>	Acero inoxidable	2.97 2.97	7.69 7.69	63.63 63.63	C. térmica: -4.74e8 kJ/h C. térmica: -4.74e8 kJ/h U=0.85 kJ/K cm <sup>2</sup> s
<b>Columna de desorción (1)</b>	Acero inoxidable	1.47	85	727.426	Empaque: PALL metal 1.5 in C. térmica: -8.64e8 kJ/h
<b>Separador gas-líquido (1)</b>	Acero inoxidable	1.47	11.08	3335.95	C. térmica: -3.06e7 kJ/h
<b>Separador (2)</b>	Acero inoxidable	2.97 67.47	-----	63.79 63.79	C. térmica: -9.61e8 kJ/h C. térmica: -9.47e8 kJ/h
<b>Mezclador (2)</b>	Acero inoxidable	1.47 2.97	-----	28494.2 63.63	C. térmica: -9.61e8 kJ/h C. térmica: -8.88e8 kJ/h

2283

2284 Para el cálculo del costo de cada equipo se utiliza la ecuación descrita por Turton *et al.* (2008)  
 2285 donde todos los datos sobre el coste de adquisición de equipos se obtuvieron por la *Chemical*  
 2286 *Engineering Plant Cost Index* en 2001 con un valor promedio para el factor correctivo por  
 2287 inflación de 397. Los datos del coste de adquisición del equipo, a presión de funcionamiento  
 2288 ambiente y utilizando acero al carbono se consideran en la siguiente ecuación:

2289 
$$\log_{10} C_e = K_1 + K_2 \log_{10}(A) + K_3 [\log_{10}(A)]^2 \quad (4.27)$$

2290 donde A es el parámetro de capacidad o tamaño del equipo. Los datos de  $K_1$ ,  $K_2$  y  $K_3$ , junto con  
 2291 los valores máximos y mínimos utilizados en la correlación para los equipos presentes en la  
 2292 planta figuran en la tabla 4.3.

2293

2294

2295

2296

2297

2298

Tabla 4. 3. Datos sobre el coste de los equipos que deben utilizarse con la ecuación (4.27).

Equipo	$K_1$	$K_2$	$K_3$	Unidades de capacidad	Tamaño mínimo	Tamaño máximo
Columna de absorción y desorción	3.49	0.45	0.11	Volumen [m <sup>3</sup> ]	0.3	520
Bomba centrífuga	3.39	0.05	0.15	Potencia de eje [kW]	1	300
Intercambiador de calor de tubo y coraza	2.77	0.73	0.08	Área [m <sup>2</sup> ]	10	100
Enfriador	2.08	0.90	-0.02	Servicio térmico [kW]	650	10,750
Empaque para torres	2.45	0.97	0.01	Volumen [m <sup>3</sup> ]	0.03	628
Separadores y mezcladores	3.85	0.70	-0.03	Potencia [kW]	5	150

2299

2300 Debido a que los costes de los equipos aumentan con el incremento de la presión de  
 2301 funcionamiento, se utilizan factores de presión para contabilizar estos cambios. El factor de  
 2302 presión para recipientes de proceso horizontales y verticales (presurizados) de diámetro  $D$  (m) y  
 2303 que funcionan a una presión de  $P$  (bar) se basa en el código ASME para el diseño de recipientes  
 2304 a presión entre 5 y 70 bar (Guthrie, 1974). Considerando una tensión máxima admisible para el  
 2305 acero al carbono,  $S= 944$  bar, una eficiencia de la soldadura,  $E=0.9$  bar, un espesor mínimo  
 2306 admisible del recipiente de 0,0063 m (1/4 de pulgada), y una tolerancia a la corrosión,  
 2307  $CA=0,00315$  m (1/8 de pulgada) se tiene la siguiente expresión:

$$2308 \quad F_p = \left( \frac{1}{0.0063} \right) \left( \frac{(P+1)D}{2[850 - 0.6(P+1)]} + 0.00315 \right) \quad (4.28)$$

2309 El factor de presión para el resto de los equipos viene dado por la siguiente expresión:

$$2310 \quad \log_{10} F_p = C_1 + C_2 \log_{10}(P) + C_3 [\log_{10}(P)]^2 \quad (4.29)$$

2311 donde los factores de presión son siempre superiores a la unidad. Los valores de las constantes  
 2312 de la ecuación (3.40) para los diferentes equipos se encuentran en la tabla 4.4.

2313

2314

Tabla 4. 4. Factores de presión para equipos de proceso.

Equipo	$C_1$	$C_2$	$C_3$	Rango de presión [bar]
Bomba centrífuga	-0.3935	0.3957	-0.0023	10<P<100
Intercambiador de calor de tubo y coraza	0.0388	-0.1127	0.0818	5<P<140
Enfriador	-0.0163	0.0569	-0.0088	2<P<200

2315

2316 Como se señaló anteriormente, los costes de los equipos cambian en función del material de  
 2317 construcción. Los factores de material ( $F_M$ ) para los diferentes tipos de equipos de la planta se

2318 encuentran de acuerdo con el número de identificación en la Tabla 4.5. Los factores del módulo  
 2319 desnudo ( $F_{BM}$ ) para para intercambiadores de calor, recipientes de proceso y bombas vienen  
 2320 dados por la siguiente ecuación:

$$2321 \quad F_{BM} = B_1 + B_2 F_M F_P \quad (4.30)$$

2322 Con la corrección de presión y material se puede calcular el costo final de cada uno de los equipos  
 2323 de la planta como  $C_{ec} = C_e F_{BM}$ . Los costos totales de los equipos se pueden pesar utilizando el  
 2324 factor de inflación que para el año 2023 tiene un valor de 714.

2325

2326 Tabla 4. 5. Factores de corrección por tipo de material y para contantes de módulo desnudo.

Equipo	Número de identificación	$B_1$	$B_2$	$F_M$	Material de construcción
Columna de absorción y desorción	20	2.25	1.82	3	Acero inoxidable
Bomba centrífuga	39	1.89	1.35	2	Acero inoxidable
Intercambiador de calor de tubo y coraza	5	1.74	1.55	3.8	Acero inoxidable
Enfriador	5	1.74	1.55	3.8	Acero inoxidable
Separadores y mezcladores	20	1.49	1.52	3	Acero inoxidable
Empaques	66	---	---	7	Acero inoxidable

2327

2328 Otro factor importante para considerar es el precio unitario por costo de servicios, los cuales  
 2329 dependen de cada país. En la Tabla 4.6 se encuentran reportados los precios unitarios para  
 2330 México en el año 2023 por los servicios que utiliza la planta endulzadora.

2331

2332 Tabla 4. 6. Costo unitario de servicios auxiliares.

Servicio	Costo unitario [USD]	Unidades	Referencia
Electricidad	0.148	kW	Ellaf <i>et al.</i> (2023)
Agua de enfriamiento	15.43	m <sup>3</sup>	CONAGUA (2022)
Vapor de calentamiento	0.0061	kg	Ellaf <i>et al.</i> (2023)

2333

2334 Así mismo, es necesario conocer los costos de la materia prima y del producto final que es  
 2335 vendido para su consumo. En la Tabla 4.7 se muestran los costos actuales de los compuestos  
 2336 utilizados y obtenidos de la planta endulzadora.

2337

2338

2339

Tabla 4. 7. Costo de materia prima y productos.

<b>Servicio</b>	<b>Costo unitario [USD]</b>	<b>Unidades</b>	<b>Referencia</b>
<b>MDEA</b>	4.7	kg	Cavaignac <i>et al.</i> (2021)
<b>Agua de proceso</b>	15.43	m <sup>3</sup>	CONAGUA (2022)
<b>Gas húmedo dulce</b>	0.95	kg	Mazumder y Xu (2020)
<b>Gas amargo</b>	0.22	kg	Zahid <i>et al.</i> (2020)

2340

2341 Para analizar si es redituable la inversión que se debe realizar para la aplicación de las nuevas  
2342 tecnologías se puede estimar un tiempo de amortización que es un período de tiempo en el que  
2343 los recursos generados por la empresa cubren los desembolsos iniciales y sucesivos. Se puede  
2344 calcular dividiendo el gasto de inversión entre los años considerados para la amortización.

2345

2346

2347

2348

2349

2350

2351

2352

2353

2354

2355

2356

2357

2358

2359

2360

2361

2362

2363

---

## ***CAPITULO V: Resultados y discusión***

---

2364

2365

2366 En este capítulo se presentan los resultados obtenidos y su discusión, partiendo de la réplica y  
2367 comparación de la simulación de la planta de endulzamiento de gas natural a partir de softwares  
2368 especializados como Aspen Plus, DWSIM. Al paralelo, se aborda la validación de las  
2369 simulaciones numéricas frente a los datos de planta, para dar confiabilidad a las simulaciones  
2370 numéricas, estas se comparan con softwares como MATLAB y COMSOL a partir de los modelos  
2371 matemáticos de los procesos de absorción en columnas empacadas y por HFMC. Posteriormente,  
2372 se presenta la solución de los problemas de optimización planteados en la columna empacada y  
2373 el HFMC con la finalidad de identificar las condiciones y referencias necesarias para la  
2374 implementación de los esquemas de control propuestos. Se realiza el acoplamiento de la  
2375 simulación de la planta con el equipo de HFMC presentando las alternativas a comparar mediante  
2376 el cálculo de costo-beneficio, siendo las alternativas las siguientes: i) caso de la planta en  
2377 operación actual, ii) caso de la planta con una columna empacada optimizada y controlada y iii)  
2378 caso de la planta con un HFMC controlado y optimizado sustituyendo a la columna empacada.

2379

### **2380 5.1 Simulación de la planta de endulzamiento de gas**

2381 La planta de tratamiento de gas natural está compuesta de 3 procesos principales, el  
2382 endulzamiento del gas, la recuperación de azufre y el proceso criogénico del gas dulce. La entrada  
2383 a la planta se realiza en la endulzadora de gas, la cual está encargada de recibir el gas que tiene  
2384 en su composición moléculas de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S. Específicamente, la planta endulzadora de gas  
2385 natural procesa corrientes de gas ácido provenientes de pozos y yacimientos de la cuenca del  
2386 estado del Veracruz, el gas ácido ingresado para su endulzamiento posee la composición  
2387 mostrada en la Tabla 5.1. La planta de endulzamiento está compuesta por numerosos equipos  
2388 donde los procesos principales son la torre absorbidora y la regeneradora. El diagrama de flujo  
2389 la planta endulzadora generado en el software Aspen Plus se muestra en la Figura 5.1. Para la  
2390 simulación completa de la planta de endulzamiento se consideraron las condiciones de operación  
2391 reportadas en el diagrama proporcionado por los ingenieros de la planta. Se tienen en total 14  
2392 operaciones contando equipos auxiliares como válvulas y bombas. En la columna de absorción

2393 (V-1) de la plantase utiliza como solvente una solución H<sub>2</sub>O-MDEA con una composición de 0.5  
2394 que favorece la transferencia de masa del soluto en la fase gas a la fase líquida.

2395

2396

Tabla 5. 1. Componentes presentes en el gas natural.

<b>Componente</b>	<b>Formula</b>	<b>% molar</b>
<b>Metano</b>	CH <sub>4</sub>	82.87
<b>Etano</b>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	6.64
<b>Propano</b>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	3.01
<b>Isobutano</b>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0.053
<b>N-Butano</b>	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	1.18
<b>Isopentano</b>	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	0.042
<b>N-Pentano</b>	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	0.045
<b>N-Hexano</b>	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	0.027
<b>Nitrógeno</b>	N <sub>2</sub>	0.099
<b>Dióxido de carbono</b>	CO <sub>2</sub>	2.15
<b>Ácido sulfhídrico</b>	H <sub>2</sub> S	1.50

2397

2398 Una vez que la corriente de MDEA-pobre entra a la torre de absorción, sale como MDEA-rica  
2399 en los gases ácidos y es dirigida a la regeneradora (V-2) para recuperar la mayor cantidad de  
2400 solvente y así recircularlo a la torre de absorción. Como productos de esta planta se obtiene el  
2401 gas húmedo dulce y el gas ácido. La simulación en estado estacionario de la planta endulzadora  
2402 de gas natural se realizó en Aspen Plus V10, con el cual se empleó el paquete termodinámico y  
2403 de propiedades (*Acid gas chemical solvent*), propio y diseñado por los desarrolladores del  
2404 software, que es específicamente empleado para este tipo de procesos con aminas ya que se  
2405 incluye el conjunto de reacciones que tienen lugar en el proceso. En la Figura 5.2 se muestra el  
2406 balance de la torre de absorción, donde por la zona inferior ingresa la alimentación de gas ácido  
2407 a una temperatura de 34° C mientras que la corriente de MDEA-pobre ingresa por la zona  
2408 superior a una temperatura de 46 °C. La columna de absorción opera a una presión de 70 kg/cm<sup>2</sup>.  
2409 Se puede observar que los balances se cumplen adecuadamente para cada compuesto presente en  
2410 la torre de absorción.

2411

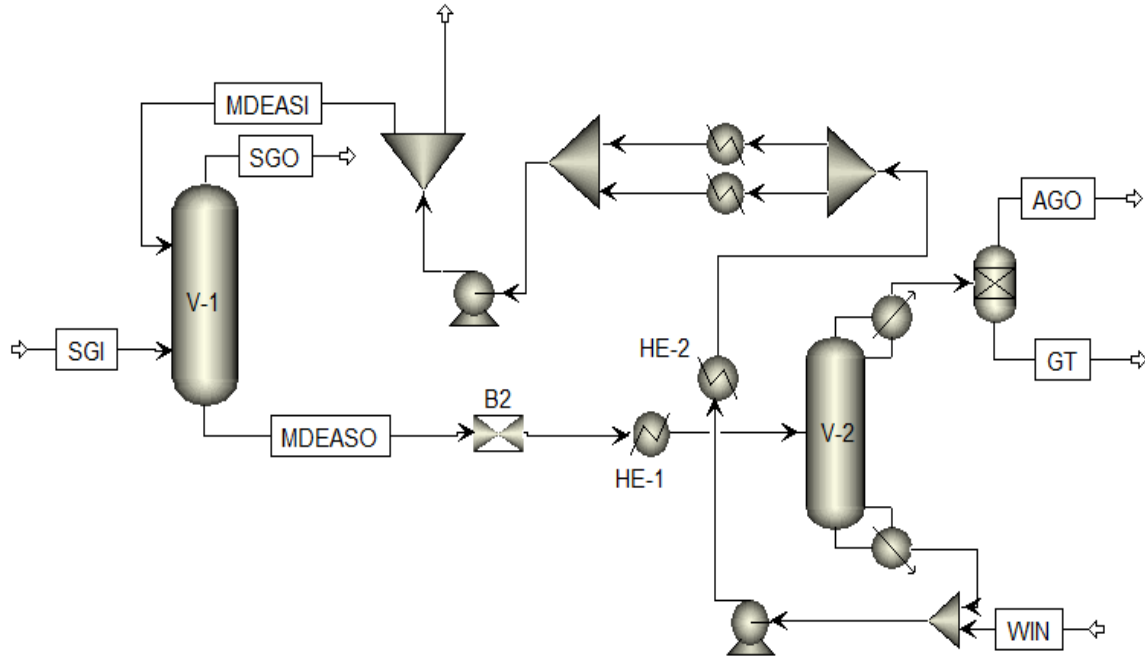


Figura 5. 1. Diagrama de flujo de la planta endulzadora de gas natural.

2412  
 2413  
 2414  
 2415 Posteriormente, la amina rica pasa a través de un intercambiador de calor (E-1) para darle las  
 2416 condiciones específicas antes de ingresar a la regeneradora. Posteriormente, la MDEA-rica se  
 2417 alimenta a la columna de desorción (V-2), la cual opera a presiones de 1.5 y 1.8 kg/cm<sup>2</sup> en el  
 2418 condensador y rehervidor, respectivamente. El balance de materia de la torre regeneradora se  
 2419 muestra en la Figura 5.3 el cual se cumple adecuadamente para todos los compuestos presentes  
 2420 en las diferentes corrientes.

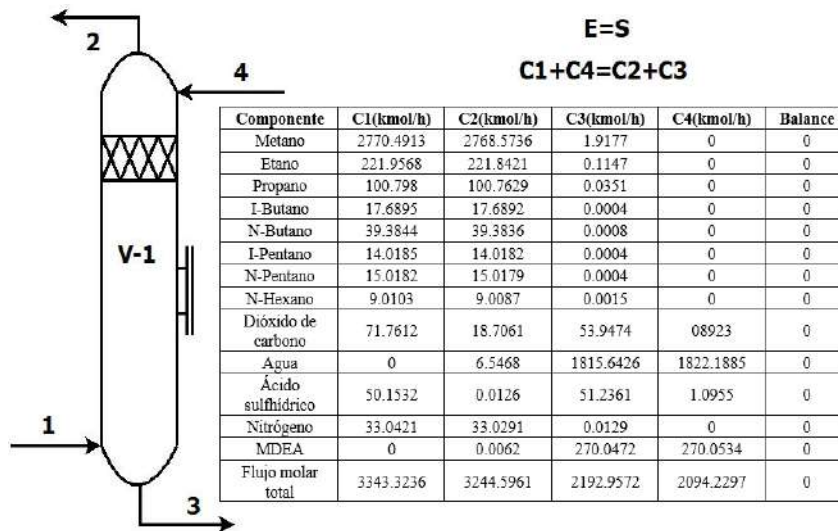
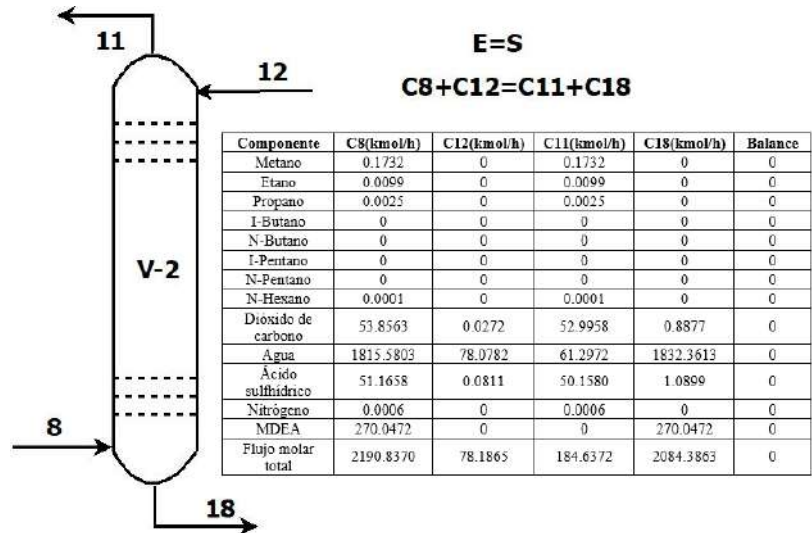


Figura 5. 2. Balance de materia en la torre de absorción (V-1).

2423 Específicamente, para la torre de absorción, se realizó una simulación individual para comparar  
 2424 los datos reportados por la planta y así validar la simulación. Calculando el error relativo entre  
 2425 las corrientes de proceso, los resultados se muestran en la Tabla 5.2, donde se observa que no  
 2426 hay diferencias significativas entre lo reportado por la planta y lo reportado por la simulación  
 2427 realizada en Aspen, pues son menores al 5%. Lo anterior significa que puede considerarse como  
 2428 valida la simulación de la columna de absorción empacada.



2429  
 2430 Figura 5. 3. Balance de materia de la columna de regeneración (V-2).

2431  
 2432 Así mismo, se realizó la simulación del proceso de absorción empacada en el software libre  
 2433 DWSIM, con la finalidad de presentar alternativas de bajo costo para el análisis del sistema. En  
 2434 la Tabla 5.3 se muestra la comparación de las composiciones a la salida del gas dulce utilizando  
 2435 el software Aspen y el software DWSIM. Se puede apreciar que, si bien existen diferencias entre  
 2436 ambos softwares de procesos, la aproximación que tiene en la mayoría de los componentes es  
 2437 muy cercana. Únicamente se reporta esta corriente porque fue la que mostró errores menores al  
 2438 5%, en el caso de la corriente de gas dulce y la simulación de la planta completa si existieron  
 2439 diferencias significativas. Dentro de las condiciones que pueden mejorar la comparación entre  
 2440 ambos softwares se encuentra la necesidad de contar con un paquete especializado de aminas que  
 2441 cuente con las reacciones que se llevan a cabo, pues para este caso esta tarea se realizó  
 2442 introduciendo las reacciones, lo cual dificulta en gran medida la simulación pues no todos los  
 2443 componentes estaban definidos en el software.

2444  
 2445

2446

Tabla 5. 2. Validación de la simulación de la torre de absorción frente a los datos de planta.

Componente	Fracción mol en la corriente de gas dulce		Error relativo [%]	Fracción mol en la corriente de MDEA-rica		Error relativo [%]
	Planta	Aspen		Planta	Aspen	
Metano	0.8533	0.8571	0.4453	0.0009	0.0010	0.0100
Etano	0.0684	0.0671	0.1395	0.0000	0.0003	0.0299
Propano	0.0311	0.0510	2.0538	0.0000	0.0002	0.0199
I-Butano	0.0055	0.0116	0.6133	0.0000	0.0001	0.0099
N-Butano	0.0121	0.0051	0.7085	0.0000	0.0006	0.0599
I-Pentano	0.0043	0.0040	0.0301	0.0000	0.0005	0.0499
N-Pentano	0.0046	0.0042	0.0401	0.0000	0.0007	0.0699
N-Hexano	0.0028	0.0024	0.0401	0.0000	0.0005	0.0499
CO <sub>2</sub>	0.0058	0.0066	0.0804	0.0246	0.0215	0.3178
Agua	0.0020	0.0009	0.1102	0.8279	0.8254	0.3019
H <sub>2</sub> S	4 ppm	4 ppm	0.0000	0.0234	0.0231	0.0307
Nitrógeno	0.0102	0.0098	0.0400	0.0006	0.0007	0.0100
MDEA	0.0062	0.0010	0.5232	0.1231	0.1099	1.5053
Flujo molar total [kmol/h]	3244.60	3196.95	1.4685	2192.96	2196.34	0.1541

2447

2448 Posteriormente, se compararon las corrientes de salida de la planta obtenidas por la simulación  
2449 completa de la endulzadora frente a los datos proporcionados por la planta.

2450

2451 Tabla 5. 3. Comparación de la simulación de la torre de absorción en DWSIM frente a la realizada en Aspen Plus.

Componente (Gas dulce)	Fracción mol		Error relativo [%]
	DWSIM	Aspen	
Metano	0.8290	0.8533	2.9312
Etano	0.0662	0.0683	0.2248
Propano	0.0301	0.0310	0.0927
I-Butano	0.0053	0.0055	0.0201
N-Butano	0.0118	0.0121	0.0303
I-Pentano	0.0042	0.0041	0.0100
N-Pentano	0.0045	0.0044	0.0100
N-Hexano	0.0027	0.0025	0.0200
Dióxido de carbono	0.0206	0.0051	1.5826
Agua	0.0035	0.0035	0.0000
Ácido sulfhídrico	0.0120	0.0003	1.1842
Nitrógeno	0.0099	0.0102	0.0302
MDEA	0.0000	0.0001	0.010

2452 De acuerdo con lo reportado en la Tabla 5.4, se puede apreciar que se tienen diferencias que no  
 2453 son significativas en las fracciones de los compuestos presentes en 3 corrientes, gas dulce, de  
 2454 MDEA-rica que arrastra los compuestos ácidos y la corriente de salida de la planta de gas ácido.  
 2455 Los errores relativos obtenidos son menores al 5%. Considerando a los compuestos de interés el  
 2456 CO<sub>2</sub> y el H<sub>2</sub>S, se muestra que las fracciones mol comparadas pueden considerarse iguales. De  
 2457 acuerdo con los resultados obtenidos, se puede decir que la simulación de la planta endulzadora  
 2458 de gas realizada en Aspen Plus se encuentra validada frente a los datos de planta y permite  
 2459 representar de forma fehaciente la operación completa de la planta de acuerdo con los datos  
 2460 brindados. Los equipos presentan resultados muy similares respecto a las condiciones de  
 2461 operación y en las corrientes de proceso, por lo que la simulación representa correctamente el  
 2462 endulzamiento de gas natural.

2463

2464 Tabla 5. 4. Comparación de la simulación del proceso de endulzamiento de gas, datos experimentales frente a la  
 2465 simulación en Aspen.

Componente	Fracción mol de gas dulce			Fracción mol de MDEA-rica			Fracción mol de gas ácido		
	Planta	Aspen	Error relativo [%]	Planta	Aspen	Error relativo [%]	Planta	Aspen	Error relativo [%]
<b>Metano</b>	0.8533	0.8533	0.0000	0.0009	0.0014	0.0500	0.0018	0.0025	0.0701
<b>Etano</b>	0.0684	0.0683	0.0107	0.0000	0.0002	0.0200	0.0001	0.0000	0.0100
<b>Propano</b>	0.0311	0.0310	0.0103	0.0000	0.0001	0.0100	0.0002	0.0000	0.0200
<b>I-Butano</b>	0.0121	0.0121	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>N-Butano</b>	0.0055	0.0055	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>I-Pentano</b>	0.0043	0.0041	0.0200	0.0000	0.0002	0.0200	0.0000	0.0000	0.0000
<b>N-Pentano</b>	0.0046	0.0044	0.0200	0.0000	0.0011	0.1100	0.0000	0.0000	0.0000
<b>N-Hexano</b>	0.0028	0.0025	0.0300	0.0000	0.0065	0.6500	0.0001	0.0006	0.0500
<b>CO<sub>2</sub></b>	0.0058	0.0051	0.0704	0.0246	0.0189	0.5843	0.4768	0.4739	0.5542
<b>Agua</b>	0.0020	0.0035	0.1503	0.8279	0.8318	0.4710	0.0354	0.0348	0.0622
<b>H<sub>2</sub>S</b>	4 ppm	4 ppm	0.0000	0.0234	0.0234	0.0000	0.4859	0.4894	0.6808
<b>Nitrógeno</b>	0.0102	0.0102	0.0000	0.0006	0.0072	0.6603	0.0006	0.0016	0.1000
<b>MDEA</b>	0.0062	0.0001	0.6138	0.1231	0.1240	0.1026	0.0000	0.0000	0.0000
<b>Flujo molar total [kmol/h]</b>	3244.60	3196.95	1.4685	2192.96	2196.34	0.1541	78.1865	78.7121	0.6722

2466

2467

2468

## 2469 **5.2 Simulación y validación de modelos matemáticos**

2470 Para realizar la simulación de los modelos matemáticos propuestos se empleó el software Matlab,  
2471 donde las ecuaciones de cada proceso son programadas en algoritmos propios. La simulación  
2472 considera la parte dinámica de los procesos y los operadores espaciales son discretizados  
2473 mediante diferencias finitas. Las simulaciones de Matlab son comparadas con su software  
2474 comercial para dar confiabilidad a los algoritmos generados en Matlab. En el caso de la columna  
2475 de absorción empacada se propone utilizar el software Aspen-Plus debido a sus múltiples  
2476 aplicaciones en el análisis de plantas de procesos y tener módulos bien definidos para el estudio  
2477 de absorción de gases. Para comparar el proceso de HFMC se propone el uso de COMSOL pues  
2478 tiene solucionadores robustos para problemas de difusión-convección, flujo de fluidos e  
2479 interacciones químicas, tanto en régimen estacionario como transitorio. Ambos softwares son  
2480 reconocidos por ser simuladores de gran aplicabilidad en el área de la ingeniería química. Para  
2481 validar las simulaciones de ambos procesos de absorción se propone su comparación frente a los  
2482 datos operativos proporcionados por la planta endulzadora en operación

2483

### 2484 **5.2.1 Columna empacada para el endulzamiento de gas**

2485 Para realizar la simulación numérica del modelo matemático, se realiza la discretización del  
2486 operador diferencial espacial por diferencias finitas, obteniendo  $N$  nodos en la dirección axial.  
2487 Los parámetros calculados son los coeficientes de difusión de ambas fases para los compuestos  
2488 de interés ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ), los coeficientes globales de transferencia de masa, el área de transferencia  
2489 efectiva y las constantes de velocidad de reacción aparente. Lo anterior permite validar el modelo  
2490 frente a los datos proporcionados por la planta. En ese sentido se realizó una simulación en  
2491 Matlab de las ecuaciones (3.9) y (3.10) como solvente MDEA/ $\text{H}_2\text{O}$ . Las condiciones de  
2492 operación en la entrada de gas son  $34\text{ }^\circ\text{C}$  y  $94.85\text{ kgf/cm}^2$  con una corriente de entrada de gas  
2493 natural de concentración  $70.902$  y  $49.4665\text{ kmol/m}^3$  de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{S}$ , respectivamente. Para la  
2494 entrada de la fase líquida las condiciones de operación son  $46.5\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $69.5\text{ kgf/cm}^2$ ,  $0.83\text{ kmol/m}^3$   
2495 de  $\text{CO}_2$  y  $0\text{ kmol/m}^3$  de  $\text{H}_2\text{S}$ . Se tiene que la concentración de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{S}$  en la salida de la fase  
2496 gaseosa debe ser de  $18.55$  y  $1.25\text{ kmol/m}^3$ , respectivamente.

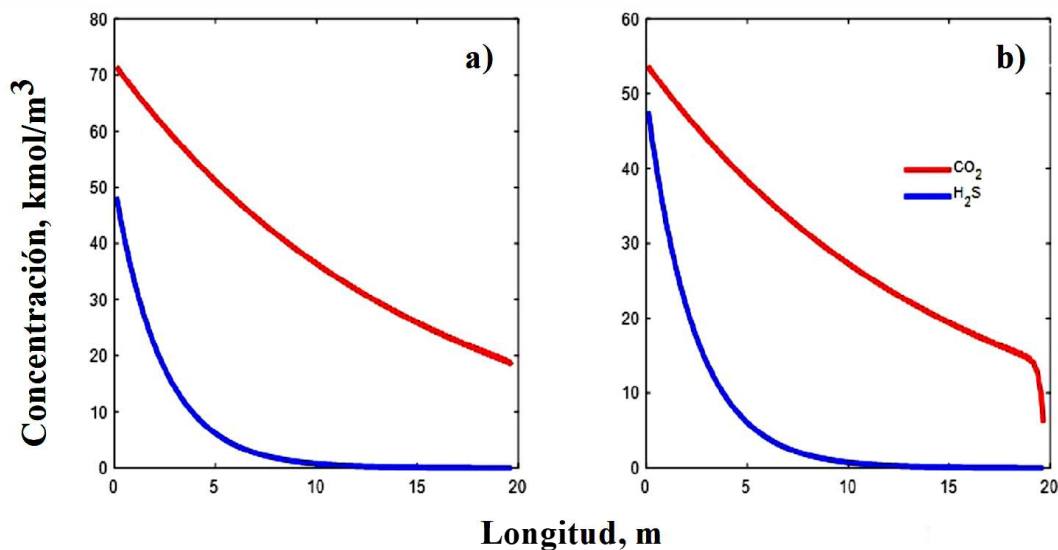
2497

Tabla 5. 5. Parámetros calculados para modelar la columna de absorción a escala industrial.

Parámetro	Correlación	Fuente	Valor
$D_{G,CO_2}$	$D_i = \frac{0.00143T^{1.75}}{\sqrt{PM_i} \left[ \left( \sum v_i \right)^{1/3} \right]}$	Fuller y Giddings (1965)	8.5716e-3 [m <sup>2</sup> /h]
$D_{G,H_2S}$			6.5844e-3 [m <sup>2</sup> /h]
$D_{L,CO_2}$	$D_i = \sum D_i \eta_i^{0.8}$	Perkins y Geankoplis (1969)	1.5174e-5 [m <sup>2</sup> /h]
$D_{L,H_2S}$			2.293e-5 [m <sup>2</sup> /h]
$k_{G,CO_2}$	$k_{g,i} = \left( \frac{5.32D_{G,i}}{a_p d_p^2} \right) \left( \frac{\rho_G U_G}{\mu_G a_p} \right)^{0.7} \left( \frac{\mu_G}{\rho_G D_{G,i}} \right)^{1/3}$	Onda <i>et al.</i> (1968)	0.1713 [m/h]
$k_{G,H_2S}$			19.7734 [m/h]
A	$A = 1 - \exp \left[ -1.45 \left( \frac{\sigma_G}{\sigma_L} \right)^{0.75} \left( \frac{\rho_L U_L}{\mu_L a} \right)^{0.1} \left( \frac{a U_L^2}{g} \right)^{-0.05} \left( \frac{\rho_L U_L^2}{a \sigma_L} \right)^{0.2} \right]$	Onda <i>et al.</i> (1968)	100.47 [m <sup>2</sup> ]
$\bar{v}_G$	$v_i = \frac{4F_i}{\pi d^2}$	Rocha <i>et al.</i> (1993)	63.19 [m/h]
$\bar{v}_L$			3.96 [m/h]
$k_{CO_2,MDEA}$	$k_{i-MDEA} = k_{rxn} \left( -\frac{5080}{T} \right)$	Saha <i>et al.</i> (1995)	0.0286 [m <sup>3</sup> /Kmol h]
$k_{H_2S,MDEA}$			0.1322 [m <sup>3</sup> /Kmol h]

2499

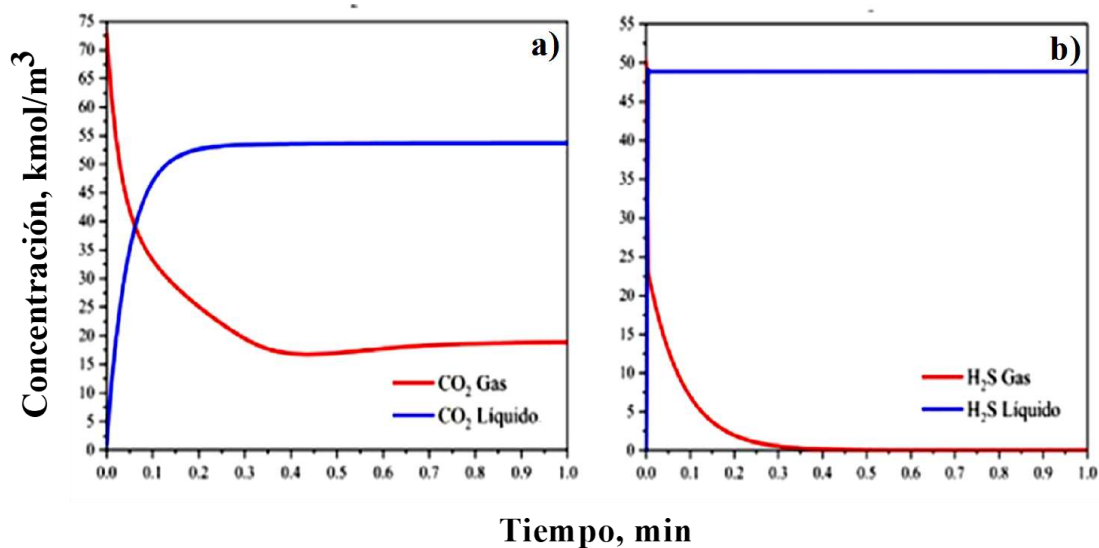
2500 La Tabla 5.5 muestra los valores de los parámetros obtenidos a partir de las correlaciones  
 2501 reportadas en la literatura. El modelo considera que la fase líquida entra en contracorriente con  
 2502 la fase gas de tal forma que a la altura  $L=0$  m se encuentra la entrada de la fase gaseosa y a la  
 2503 altura  $L=19$  m se encuentra la entrada del solvente.



2504

2505 Figura 5. 4. Perfiles de concentración de los gases ácidos a lo largo de la columna, a) fase gas y b) fase líquida.

2506 En la Figura 5.4 se muestran los perfiles de concentración de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S para ambas fases, donde  
 2507 se observa cómo va disminuyendo su concentración en la fase gas conforme atraviesa la columna  
 2508 debido a que se está absorbiendo en la fase líquida. En el caso de la fase líquida, se presentan  
 2509 cambios de concentración importantes en la entrada ( $L=19$  m) debido a que se encuentra en  
 2510 contacto directo con la fase gas para el instante inmediato cuando  $t > 0$ . Por otro lado, en la Figura  
 2511 5.5 se muestran los perfiles de concentración de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S obtenidos a partir de la simulación  
 2512 en la salida del proceso (último nodo) en ambas fases con las condiciones utilizadas en la columna  
 2513 de absorción de la planta endulzadora. En el tiempo  $t=0$  la columna se considera totalmente vacía  
 2514 y aproximadamente a los 40 min se alcanza el estado estacionario, lo cual se asemeja a lo  
 2515 reportado por Marx-Schubach y Schmitz (2018). La comparación de las simulaciones con los  
 2516 datos proporcionados por el complejo procesador de gas se muestra en la Tabla 5.6, donde se  
 2517 observa que los valores obtenidos son cercanos a los reportados por el complejo procesador de  
 2518 gas. Los porcentajes de error reportados son menores al 5% en las salidas del proceso para las  
 2519 simulaciones de Matlab y Aspen por lo que se puede considerar que las simulaciones se  
 2520 encuentran validadas con los datos de planta y el modelo es adecuado para representar la columna  
 2521 de absorción a escala industrial.



2522  
 2523 **Figura 5. 5.** Perfiles de concentración de los gases ácidos en el tiempo, a) CO<sub>2</sub> y b) H<sub>2</sub>S.  
 2524  
 2525 La Figura 5.6 se muestra los perfiles de concentración dinámicos para cada fase y especie. Donde  
 2526 claramente se observa la presencia de mínimos y máximos para las concentraciones de CO<sub>2</sub> y

2527 H<sub>2</sub>S, de acuerdo con la entrada y salida de ambas fases. Para la fase líquida se observa que a  
 2528 tiempos cortos existe un cambio de la concentración, el cual es atribuido a las condiciones  
 2529 iniciales del modelo, mismas que están definidas por la recirculación del solvente MDEA de la  
 2530 torre regeneradora. En ese sentido, a tiempos cortos se presenta una onda que indica la presencia  
 2531 de los componentes ácidos en la corriente de MDEA.

2532

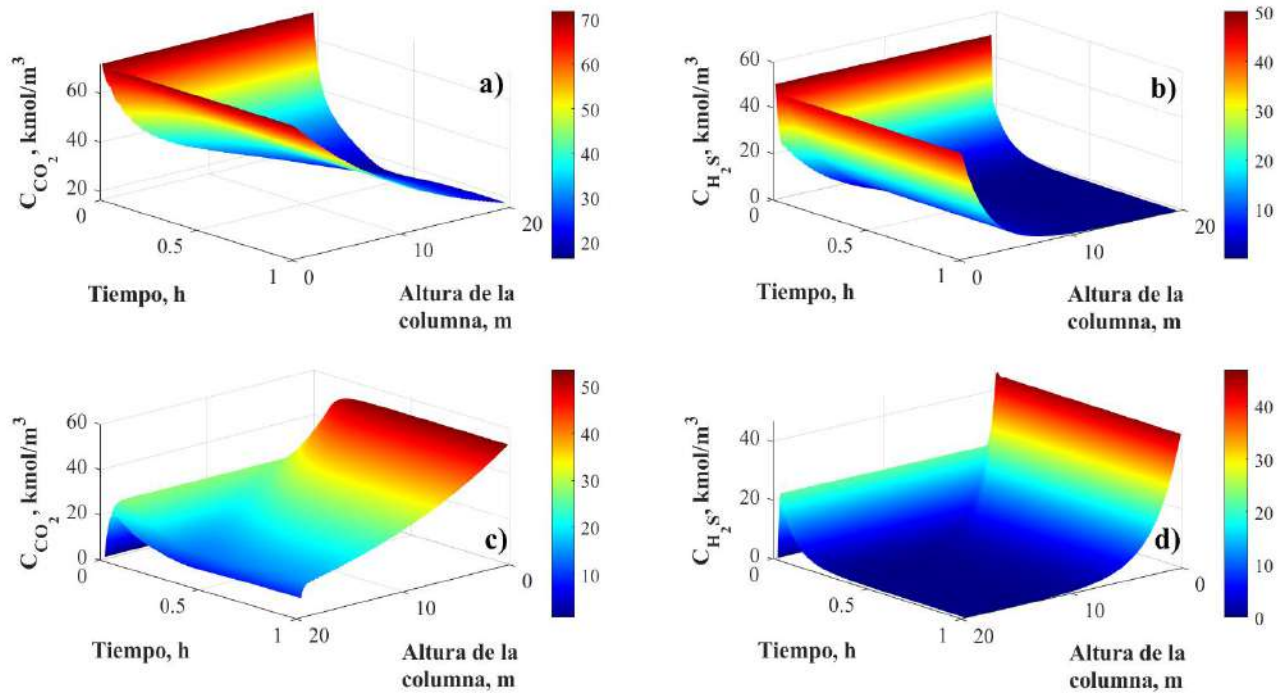
2533 Tabla 5. 6. Comparación de los resultados obtenidos entre Matlab y Aspen frente a los datos de planta.

Componente	Matlab	Error relativo [%]	Aspen-Plus	Error relativo [%]	Planta
Concentración de CO <sub>2</sub> en fase gas a la salida [kmol/m <sup>3</sup> ]	18.2632	1.5460	18.7062	0.8420	18.55
Concentración de H <sub>2</sub> S en fase gas a la salida [kmol/m <sup>3</sup> ]	0.012	0.0000	0.012	0.0000	0.012
Concentración de CO <sub>2</sub> en fase líquida a la salida [kmol/m <sup>3</sup> ]	53.7168	1.3827	54.435	0.0642	54.47
Concentración de H <sub>2</sub> S en fase líquida a la salida [kmol/m <sup>3</sup> ]	47.621	1.3649	50.0236	3.6115	48.28

2534

2535 Una vez que se ha verificado que el modelo puede representar la operación de la planta real, es  
 2536 necesario analizar su comportamiento frente a distintos escenarios, con el propósito de corroborar  
 2537 que la respuesta del modelo sigue la tendencia esperada. Por ello, se realizó un análisis de  
 2538 sensibilidad paramétrico a partir del cual se realizan variaciones de las distintas condiciones de  
 2539 entrada del proceso en un tiempo determinado. Se decidió observar la concentración de CO<sub>2</sub>  
 2540 debido a que su presencia en la mezcla es significativamente mayor que la del H<sub>2</sub>S. En primer  
 2541 lugar, se analiza la variación de la altura del lecho empacado debido a que es una de las variables  
 2542 de diseño más importantes dentro de la absorción en columnas. Por ello, se proponen variaciones  
 2543 en los valores de  $L$  considerando un error del  $\pm 10\%$ , este error puede derivarse de errores por  
 2544 medición y  $\pm 30\%$  que considera si la longitud de área empacada se encuentra comprometida.  
 2545 En la Figura 5.7a Se observan los perfiles correspondientes a los cambios realizados sobre el  
 2546 valor de  $L$  y la línea que hace referencia a la concentración en el primer estado estacionario. El  
 2547 comportamiento mostrado, deja claro que un aumento en la altura del lecho empacado da como  
 2548 resultado concentraciones menores de CO<sub>2</sub> a la salida del proceso, y viceversa. Este  
 2549 comportamiento es posible debido a que un aumento en la altura del lecho trae como  
 2550 consecuencia un incremento en el área efectiva de transferencia de masa, disponiéndose, por lo  
 2551 tanto, de un área más extensa, donde el gas y el líquido entran en contacto.

2552



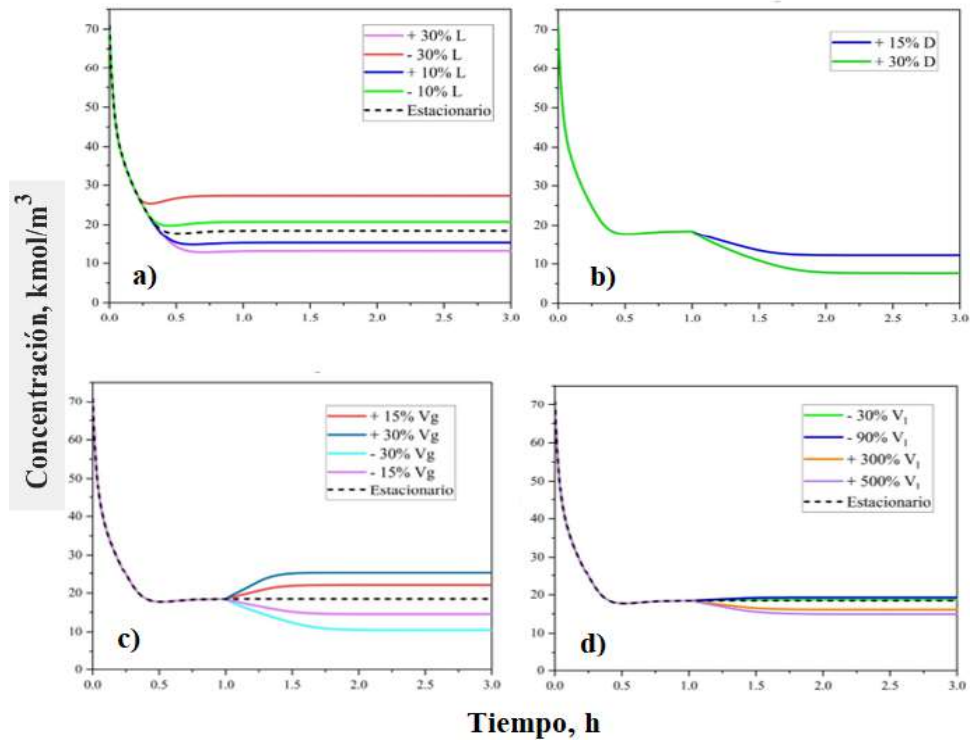
2553  
2554  
2555  
2556  
2557

Figura 5. 6. Dinámica espaciotemporal para la columna de absorción empacada, a) perfiles de concentración de  $\text{CO}_2$  y b) de  $\text{H}_2\text{S}$  en fase gaseosa; c) perfiles de concentración de  $\text{CO}_2$  y d) de  $\text{H}_2\text{S}$  en fase líquida (● mayor concentración, ● menor concentración).

2558  
2559  
2560  
2561  
2562  
2563  
2564  
2565  
2566  
2567  
2568  
2569  
2570  
2571

En la Figura 5.7b se lleva a cabo el análisis frente a cambios en el diámetro de la columna donde se proponen variaciones de  $\pm 15\%$  y  $\pm 30\%$ . En este caso, se decidió incrementar la variación menor en 5% para que el efecto pudiera ser visible. En general se puede observar que un aumento en el valor del diámetro da como resultado concentraciones menores a la salida, mientras que una disminución resulta en concentraciones mayores a la salida de la fase gas. Este comportamiento puede ser justificado si se toma considera que el tiempo de contacto entre ambas fases aumenta y mejora la eficiencia de separación. En la Figura 5.7c se muestran las variaciones en las velocidades del gas en  $\pm 15\%$  y  $\pm 30\%$ . Se puede observar que los cambios en la velocidad del gas tienen una mayor incidencia en la respuesta de modelo en comparación con los cambios realizados a la velocidad del líquido. Esto se debe a que se puede disminuir el tiempo de contacto entre las fases, reduciendo la efectividad del proceso de transferencia donde claramente se observa que el proceso de transferencia de masa en la fase gas es la dominante. La Figura 5.7d muestra la variación de la velocidad de la fase líquida. Debido a que cambios del  $\pm 15\%$  y  $\pm 30\%$  no eran apreciables se propuso incrementar estos rangos. La variación respecto a la fase gas es

2572 de un orden de magnitud superior, indicando que el modelo es poco sensible al cambio de esta  
 2573 variable. No obstante, esto se puede atribuir a que la velocidad de la fase gas es más grande en  
 2574 un orden de magnitud que la velocidad de la fase líquida.  
 2575



2576  
 2577 Figura 5. 7. Dinámica para la columna de absorción empacquetada a diferentes cambios de operación, a) longitud,  
 2578 b) diámetro, c) velocidad de gas y d) velocidad del líquido.  
 2579

### 2580 5.2.2 HFMC para el endulzamiento de gas

2581 Como base para el estudio de la absorción considerando el uso de membranas se seleccionó un  
 2582 modelo de un contactor, donde los balances de masa están divididos en 3 zonas: el tubo interior,  
 2583 por donde pasará el gas rico en CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S; la membrana, que es considerada seca, como la  
 2584 interfaz entre ambas fases y; la coraza, por la cual entrará el solvente en contracorriente. En el  
 2585 tubo interior se considera transporte difusivo y convectivo, en la membrana transporte difusivo  
 2586 y en el tubo exterior (coraza) transporte difusivo, convectivo y reacción química. Es importante  
 2587 señalar que el modelo considera dos coordenadas espaciales por lo que su simulación en estado  
 2588 estacionario se puede representar mediante un gráfico de colores, mientras que el estado  
 2589 dinámico puede ser observado mediante una secuencia de imágenes donde se tendrá un gráfico  
 2590 de colores para cada tiempo en el cual se llevará a cabo la simulación del proceso. La Tabla 5.7  
 2591 muestra los valores de los parámetros obtenidos de las correlaciones reportadas en la literatura.

Tabla 5. 7. Parámetros calculados del modelo de absorción en HFMC para el endulzamiento de gas.

Parámetro	Correlación	Fuente	Valor
$D_{CO_2,tubo}$	$D_{i,tubo} = \frac{0.01013T^{1.75} \left(\sum (1/M_i)\right)^{0.5}}{P \left[\left(\sum v_i\right)^{1/3}\right]^2}$	Dai <i>et al.</i> (2016)	2.978e-1 [m <sup>2</sup> /h]
$D_{H_2S,tubo}$			9.978e-1 [m <sup>2</sup> /h]
$D_{i,cor}$	$D_{CO_2,cor} = 1.256 \times 10^{-1} \exp\left(-\frac{2119}{T}\right)$	Versteeg and Van Swaaij (1988)	7.859e-1 [m <sup>2</sup> /h]
	$D_{H_2S,cor} = 9.86 \times 10^{-3} \exp\left(-\frac{1714}{T}\right)$	Tian <i>et al.</i> (2020)	4.99e-2 [m <sup>2</sup> /h]
$\bar{v}_i$	$\bar{v}_G = \frac{Q_G}{n\pi r_1^2}$	Agrahari <i>et al.</i> (2012)	1.7102 [m/h]
	$\bar{v}_L = \frac{Q_L}{n\pi r_3^2}$		0.1065 [m/h]
$\varphi$	$\varphi = 1 - \frac{nr_2^2}{R^2}$	Zang <i>et al.</i> (2014)	0.4 [--]
$\alpha_i$	$\alpha_{CO_2} = 0.391/T$		0.0012 [1/K]
	$\alpha_{H_2S} = 0.35884/T$		0.0011 [1/K]
$He_i$	$He_{CO_2} = \frac{\exp(-2044/T)}{3.54e^{-7}} \times 10^{\alpha_{CO_2}}$	Eslami <i>et al.</i> (2011)	1.0312e <sup>4</sup> [Pa m <sup>3</sup> /kmol]
	$He_{H_2S} = \frac{\exp(-2194/T)}{3.54e^{-7}} \times 10^{\alpha_{H_2S}}$		1.0312e <sup>4</sup> [Pa m <sup>3</sup> /kmol]
$k_{i,MDEA}$	$k_{CO_2-MDEA} = 1.9e^4 \left(-\frac{5080}{T}\right)$	Saha <i>et al.</i> (1995)	5.8e-3 [m <sup>3</sup> /Kmol h]
	$k_{CO_2-MDEA} = 2.1e^3 \left(-\frac{5080}{T}\right)$		6.4192e-4 [m <sup>3</sup> /Kmol h]

2594 A pesar de que se pretende adecuar la simulación al caso de estudio particular, en primera  
2595 instancia se optó por replicar un modelo del cual ya están definidos los parámetros difusivos,  
2596 velocidades de flujo, etc., con la finalidad de obtener una simulación correcta que permita  
2597 representar de manera correcta el fenómeno de absorción mediante un HFMC. En ese sentido, se  
2598 realizó la simulación del modelo dinámico del HFMC (ecuaciones (3.18) - (3.30)) en el software  
2599 Matlab, utilizando los parámetros reportados en Al-Marzouqi *et al.* (2008) donde se tiene una  
2600 entrada de gas rica en CO<sub>2</sub> y como solvente se utiliza MDEA/H<sub>2</sub>O. Para poder comparar la  
2601 simulación con los resultados de la literatura las ecuaciones (3.18), (3.23) y (3.26) se  
2602 adimensionalizaron quedando de la siguiente forma:

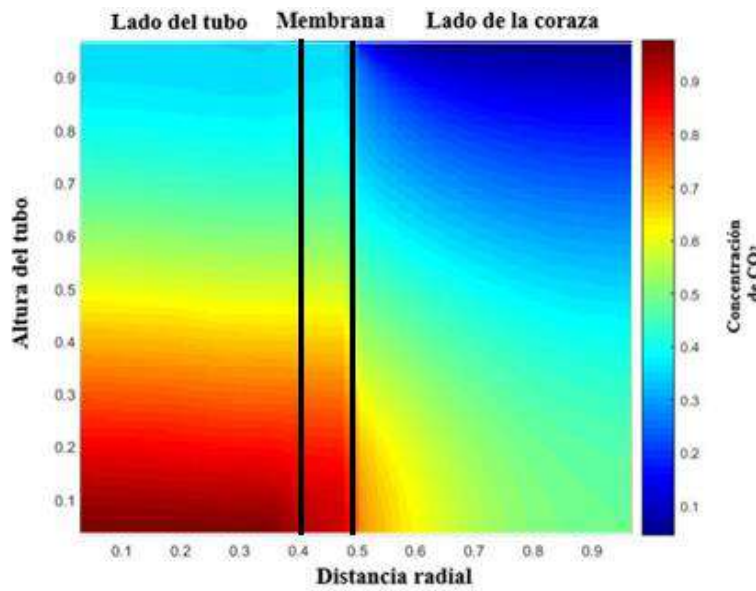
2603 
$$\frac{\partial \zeta_{i,cor}}{\partial \tau} = \frac{L^2}{R^2 Pe_{i,cor}} \left[ \frac{\partial^2 \zeta_{i,cor}}{\partial \gamma^2} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \zeta_{i,cor}}{\partial \gamma} + \frac{R^2}{L^2} \frac{\partial^2 \zeta_{i,cor}}{\partial \zeta^2} \right] - \alpha \frac{\partial \zeta_{i,cor}}{\partial \zeta} \quad (5.1)$$

2604 
$$\frac{\partial \zeta_{i,mem}}{\partial \tau} = \frac{L^2}{R^2 Pe_{i,mem}} \left[ \frac{\partial^2 \zeta_{i,mem}}{\partial \gamma^2} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \zeta_{i,mem}}{\partial \gamma} + \frac{R^2}{L^2} \frac{\partial^2 \zeta_{i,mem}}{\partial \zeta^2} \right] \quad (5.2)$$

2605 
$$\frac{\partial \zeta_{i,tubo}}{\partial \tau} = \frac{L^2}{R^2 Pe_{i,tubo}} \left[ \frac{\partial^2 \zeta_{i,tubo}}{\partial \gamma^2} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \zeta_{i,tubo}}{\partial \gamma} + \frac{R^2}{L^2} \frac{\partial^2 \zeta_{i,tubo}}{\partial \zeta^2} \right] - \beta \frac{\partial \zeta_{i,tubo}}{\partial \zeta} \quad (5.3)$$

2606 donde  $\tau$ ,  $\zeta_i$ ,  $Pe_i$ ,  $\gamma$ ,  $\zeta$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  son el tiempo adimensional, la concentración adimensional,  
 2607 el número de Peclet para cada especie  $i$ , la longitud radial adimensional, la longitud axial  
 2608 adimensional, el perfil de velocidad adimensional en la coraza y el perfil de velocidad  
 2609 adimensional en el tubo, respectivamente.

2610



2611

2612

Figura 5. 8. Perfil de concentración de CO<sub>2</sub> del HFMC simulado en Matlab

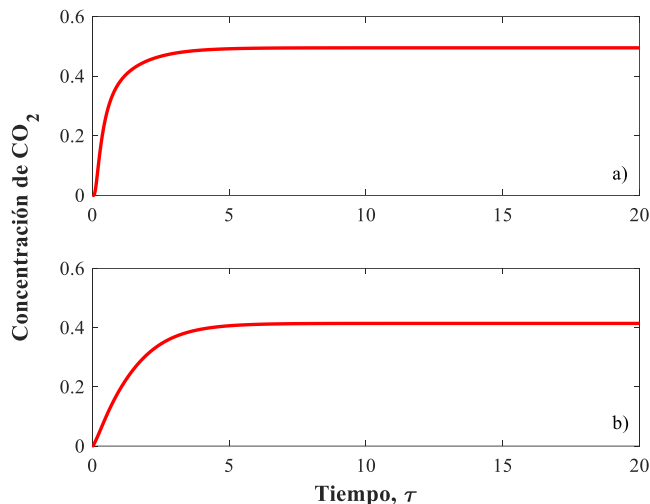
2613

(● mayor concentración, ● menor concentración).

2614

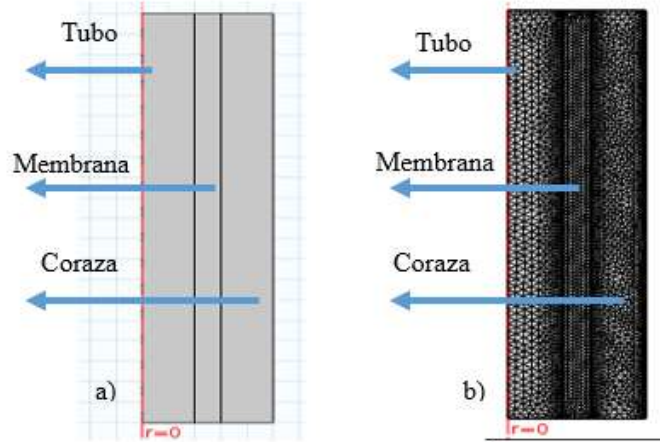
2615 En la Figura 5.8 se muestra el perfil de concentración de CO<sub>2</sub> en estado estacionario para las tres  
 2616 secciones del modelo que se encuentran acopladas. En el lado del tubo, (izquierda) el gas entra  
 2617 por la parte inferior con una concentración de entrada  $C_{in} = 1$ , transportándose a lo largo del eje  
 2618 axial y difundiéndose en la zona de la membrana (centro). Posteriormente, se absorbe en la fase  
 2619 líquida del lado de la coraza (derecha), donde la entrada del líquido se realiza por la parte  
 2620 superior. En la interfaz entre la membrana y la coraza se puede observar un pequeño desfase,

2621 consecuencia de la condición de equilibrio entre las dos fases del sistema. Posteriormente, se  
2622 realizó la simulación dinámica del HFMC, misma que es de utilidad para realizar los estudios de  
2623 optimización y control.



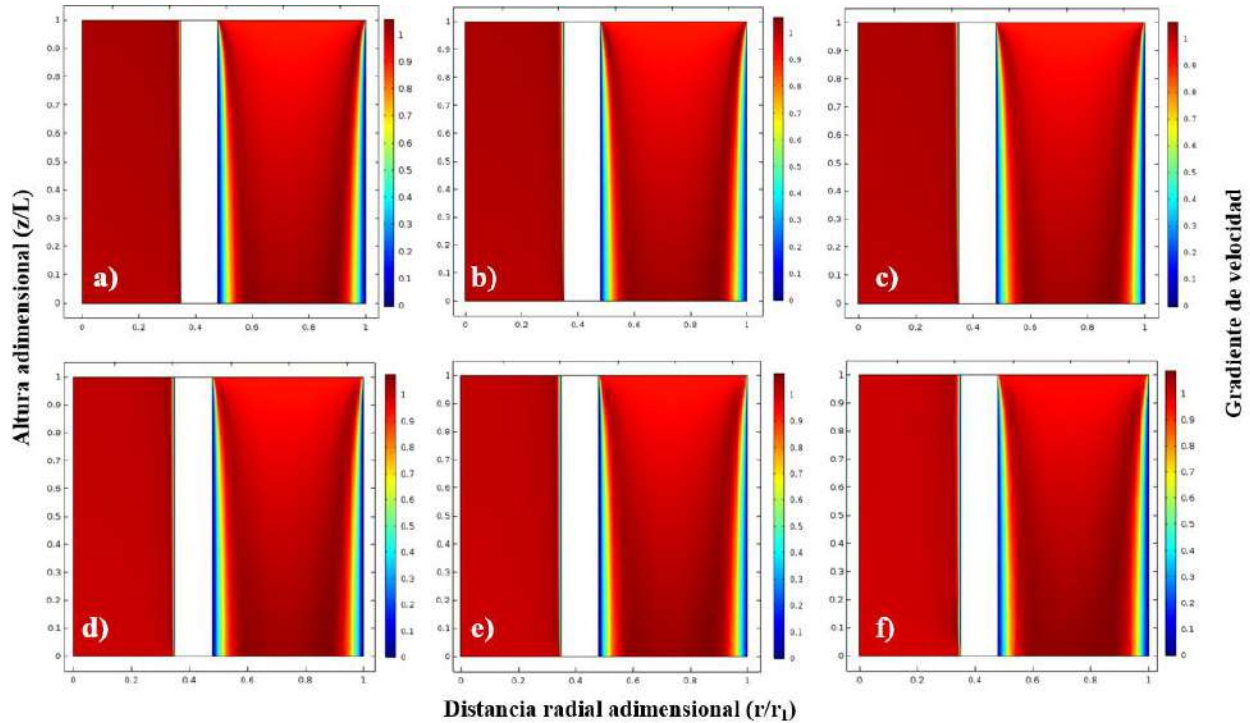
2624  
2625 Figura 5. 9. Perfil de concentración de CO<sub>2</sub> del HFMC dinámico, a) salida del tubo y b) salida de la coraza.  
2626

2627 En la Figura 5.9 se muestra la dinámica de la concentración de CO<sub>2</sub> a la salida del tubo (fase gas)  
2628 y a la salida de la coraza (fase líquida). Se observa como al tiempo  $\tau = 0$  el contactor se encuentra  
2629 completamente vacío y conforme transcurre el tiempo se alcanza el estado estacionario  
2630 aproximadamente en 15 unidades de tiempo. Se puede apreciar que a la salida del tubo la  
2631 concentración de CO<sub>2</sub> es del 50% respecto a la entrada, lo que significa que la mitad del CO<sub>2</sub> fue  
2632 transferido al solvente. Ambos perfiles son el resultado de un promedio en el eje radial a la salida  
2633 de cada sección, tanto en la parte estacionaria como la dinámica se logra reproducir la simulación  
2634 correctamente. Para contrastar los resultados del modelado del HFMC mediante Matlab y darle  
2635 confiabilidad a la simulación se realizó la misma simulación del proceso mediante el software  
2636 COMSOL de forma adimensional. Lo primero a desarrollar fue la geometría, la cual se realizó  
2637 uniendo la sección del tubo, la sección de la membrana y la sección de la coraza para poder  
2638 definir las características en cada zona.



2639  
2640 Figura 5. 10. Representación de las secciones del HFMC en COMSOL, a) geometría y b) mallado.

2641  
2642 En la Figura 5.10a se muestra la construcción de la geometría. Para fines de la simulación solo  
2643 se agregó el perfil de concentración del CO<sub>2</sub> y hacer la comparación con la literatura. En la  
2644 sección del tubo y la coraza se agregó en la simulación el transporte de especies diluidas y el  
2645 perfil de velocidad de acuerdo con las características específicas de cada sección. Para la zona  
2646 de la membrana se agregó como física del modelo el transporte de especies en medios porosos.



2647  
2648 Figura 5. 11. Perfiles de velocidad en la geometría del HFMC a diferentes tamaños de malla, a) extremadamente  
2649 fina, b) extrafina, c) más fina, d) fina, e) normal y f) gruesa (● mayor velocidad, ● menor velocidad).

2650 En la Figura 5.10b se muestra el mallado de las 3 secciones que componen el modelo, el cual es  
 2651 dominado por la física definida de cada sección, donde en las fronteras se observa mayor  
 2652 densidad de malla, excepto en la primera frontera del lado del tubo debido a que existe una  
 2653 condición de simetría en la frontera. Es importante mencionar que se realizó un análisis de  
 2654 independencia de malla, observando las diferentes configuraciones que proporciona el software:  
 2655 Extremadamente fina, extrafina, más fina, fina, normal, gruesa, más gruesa, extra gruesa y  
 2656 extremadamente gruesa. En la Figura 5.11 se pueden apreciar los perfiles de velocidad de  
 2657 transferencia de masa del CO<sub>2</sub> para seis mallas distintas donde se muestra el perfil de velocidad  
 2658 en las secciones del tubo y la coraza del modelo del HFMC. Por el lado del tubo se observa la  
 2659 mitad del perfil de acuerdo con la definición de la física por simetría, en la parte de la membrana  
 2660 no se tiene un perfil de velocidad debido a que no existe contribución del transporte convectivo  
 2661 y en el lado de la coraza se observa el perfil de velocidad completo. Como se puede observar,  
 2662 conforme se va haciendo gruesa la malla el efecto se ve reflejado directamente en la capa límite.  
 2663 Esta variación deja de ser apreciable a partir de la malla fina.

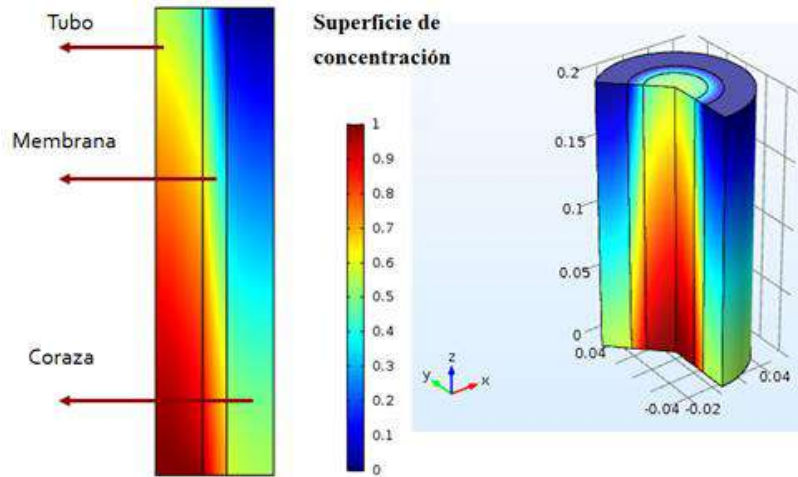
2664

2665 Tabla 5. 8. Parámetros calculados para modelar la absorción en HFMC aplicados en el caso de estudio actual.

<b>Tipo de mallado</b>	<b>Elementos de dominio</b>	<b>Elementos de contorno</b>	<b>Variación en los perfiles de velocidad locales [%]</b>
Extremadamente fina	27,165	733	----
Extrafina	18,332	678	0
Más fina	6,946	374	1
Fina	2,401	203	5
Normal	1,320	168	10
Gruesa	1,037	133	20
Más gruesa	543	93	30
Extra gruesa	407	84	45
Extremadamente gruesa	207	59	60

2666

2667 En la Tabla 5.8, tomando como base la malla extremadamente fina, se muestra que con una  
 2668 simulación de malla fina se puede tener una variación del 5% del perfil de velocidad, lo que  
 2669 significa que con cualquier malla más gruesa la solución se vuelve menos precisa. En ese sentido,  
 2670 se seleccionó la malla fina para la simulación esto con la finalidad de reducir el tiempo de  
 2671 cómputo. Al resolver la simulación se obtuvieron los perfiles de velocidad y concentración.



2672

2673

2674

Figura 5. 12. Representación del perfil de concentración de  $\text{CO}_2$  en la geometría del HFMC, a) perfil 2D, b) perfil 3D (● mayor concentración, ● menor concentración).

2675

2676

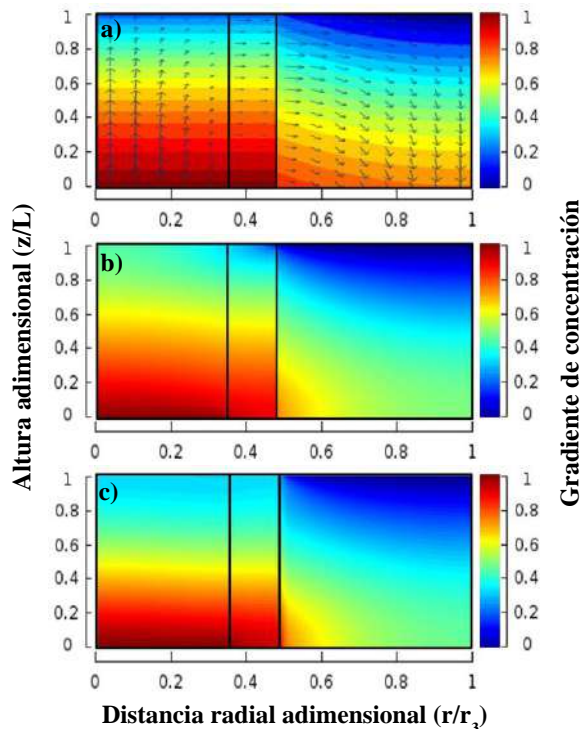
2677

2678

2679

2680

Por otro lado, en la Figura 5.12 se tiene el perfil de concentración, donde se aprecia que el  $\text{CO}_2$  se difunde desde el tubo pasando por la membrana y después en la coraza. Se observa que en la frontera que existe entre la sección de la membrana y la sección de la coraza se tiene la contribución del equilibrio pues existe un pequeño desfase. De forma general se observa que el modelo consigue representar adecuadamente la física del proceso de absorción.



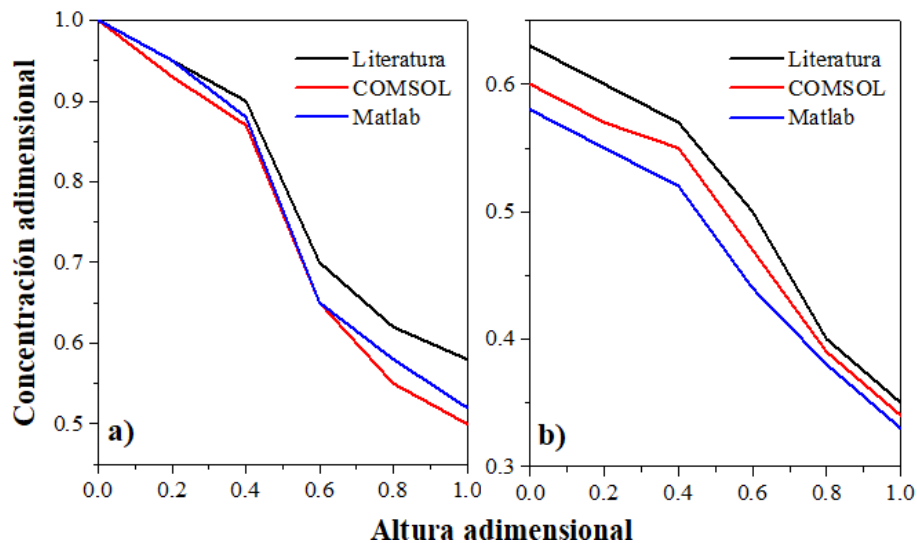
2681

2682

2683

Figura 5. 13. Comparación del modelo matemático de HFMC, a) Simulación de la literatura, b) Simulación realizada en COMSOL y c) Simulación realizada en Matlab (● mayor concentración, ● menor concentración).

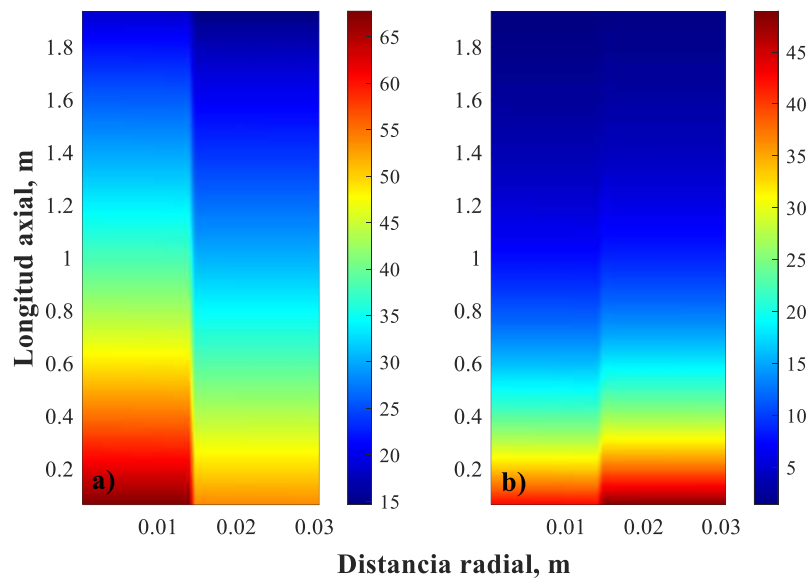
2684 En ese sentido, se agruparon los resultados de la simulación en Matlab, la simulación en  
 2685 COMSOL y lo reportado en Al-Marzouqi *et al.* (2008). En la Figura 5.13 se muestra la  
 2686 comparación de los perfiles de concentración donde se puede observar de forma evidente que el  
 2687 perfil obtenido en COMSOL tiene una buena correspondencia a lo reportado en la literatura. Por  
 2688 otro lado, el modelado del contactor realizado en Matlab también muestra una aproximación  
 2689 adecuada comparado con el perfil obtenido mediante COMSOL. Debido a lo anterior se puede  
 2690 asegurar que la simulación del contactor mediante Matlab representa correctamente el transporte  
 2691 de CO<sub>2</sub> que existe desde la parte del tubo hasta su presencia en la coraza. Se observa también que  
 2692 el salto existente entre la fase gas y la fase líquida es representada de forma adecuada por el modelo.



2693  
 2694 Figura 5. 14 Comparación de perfiles de concentración locales en el eje axial, a)  $r=0$  y b)  $r=0.5$ .

2695  
 2696 Para una comparación más objetiva, se generaron los perfiles de concentración en el eje axial  
 2697 para dos diferentes distancias radiales. La Figura 5.14 muestra las diferencias entre lo reportado  
 2698 en la literatura, la simulación de COMSOL y la simulación de Matlab para  $r=0$  y  $r=0.5$ . Se puede  
 2699 apreciar que los perfiles tienen buena correspondencia, pues las tendencias son similares. Al sacar  
 2700 un promedio del error entre los diferentes perfiles se pueden obtener errores menores al 5%. De  
 2701 tal forma que las simulaciones logran representar lo reportado por la literatura, teniendo mejor  
 2702 aproximación el software COMSOL para  $r>0.5$  y mejor aproximación con Matlab para  $r<0.5$ .  
 2703 Una vez corroborado el modelo se realizó la simulación del HFMC con los datos reportados en  
 2704 la Tabla 5.7. En la Figura 5.15 se muestran los perfiles de concentración espaciales de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S  
 2705 en el estado estacionario para las 3 secciones del proceso a un tiempo de operación de 3 h. La

2706 mezcla de gases fluye desde el lado del contactor donde  $z=0$  mientras que el disolvente fluye  
2707 desde el otro lado ( $z=L$ ) donde se supone que la concentración de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{S}$  es mínima. A medida  
2708 que el gas fluye por el lado del tubo la concentración de ambos compuestos se desplaza a la  
2709 membrana debido a la diferencia de concentraciones, posteriormente, son absorbidos por el  
2710 disolvente en movimiento del lado de la coraza. Los resultados arrojados por la simulación  
2711 presentan variaciones menores al 5% respecto a los datos de la planta por lo que se puede decir  
2712 que el modelo fue adecuado para representar las mismas condiciones que la columna empacada  
2713 del complejo procesador de gas.



2714  
2715 Figura 5. 15. Distribución espacial de la concentración para el HFMC, a) perfiles de  $\text{CO}_2$  y b)  $\text{H}_2\text{S}$  en tubo,  
2716 membrana y sección de caparazón (● mayor concentración, ● menor concentración).

2717

### 2718 5.3 Solución de los problemas de optimización propuestos

2719 Para la propuesta de la optimización de los procesos de absorción se seleccionó como objetivo  
2720 reducir la cantidad de  $\text{CO}_2$  en la salida de gas dulce de la planta. Respecto al  $\text{H}_2\text{S}$  presente, debido  
2721 a que es el componente en menor proporción se espera que la variación de los parámetros en la  
2722 búsqueda de los valores óptimos permita a su vez su reducción en la salida. Aunado a esto, se  
2723 busca que la mayor cantidad de gases ácidos salgan en la salida de la fase líquida. Como variables  
2724 de decisión se seleccionaron los parámetros de diseño de los procesos como el radio y la longitud  
2725 de los equipos. Además, se seleccionaron variables operativas importantes como la temperatura

2726 y el flujo del solvente. La optimización de los procesos de absorción también fue llevada a cabo  
2727 en Matlab mediante el algoritmo de punto interior, el cual ya se encuentra dentro de las  
2728 paqueterías, la función *fmincon*.

2729

### 2730 **5.3.1 Condiciones óptimas de la columna de absorción empacada**

2731 Al realizar la optimización de la columna de absorción empacada se encontraron los resultados  
2732 mostrados en la Tabla 5.9, donde se observa que la mayoría de los parámetros incrementaron su  
2733 valor, salvo el flujo de la fase líquida. Lo encontrado por el método de optimización tiene sentido,  
2734 pues al sugerir un equipo más grande el tiempo de contacto entre las fases se incrementa y se  
2735 reduce la cantidad de gases ácidos presentes en el gas natural. Así mismo, que el flujo de MDEA-  
2736 H<sub>2</sub>O haya disminuido favorece en la reducción del gasto energético de la planta debido a que  
2737 gran parte de este gasto se realiza en la torre regeneradora del solvente.

2738

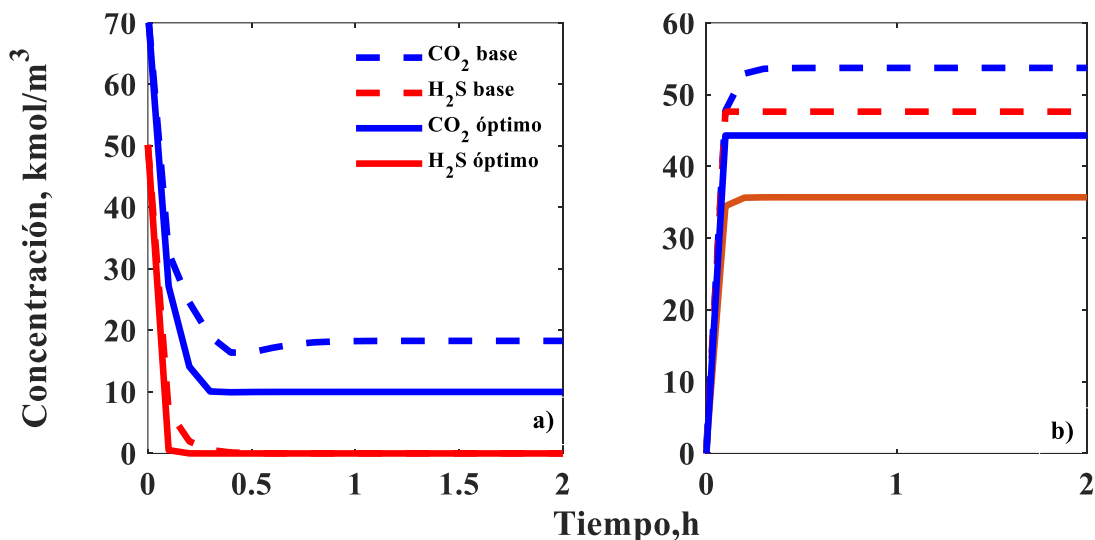
2739 Tabla 5. 9. Parámetros óptimos calculados para el proceso de absorción en columna empacada.

Variable	Planta	Óptimo
Temperatura [K]	338.65	365.99
Fujo del solvente [m <sup>3</sup> /h]	63.15	55.42
Diámetro de la columna [m]	1.52	2.72
Longitud del área de empaque [m]	19.753	32.7
Concentración de CO <sub>2</sub> a la salida [kmol/m <sup>3</sup> ]	18.7	10

2740

2741 En la Figura 5.16 se muestran los perfiles de concentración de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S con los parámetros de  
2742 planta frente a los obtenidos con los parámetros óptimos. En la Figura 5.16a se observa una  
2743 disminución de la concentración de gases en la fase gas, en el caso del CO<sub>2</sub> pasa de 18.7 a 10  
2744 kmol/m<sup>3</sup>, lo cual representa una disminución del 53% aproximadamente. La cantidad de H<sub>2</sub>S  
2745 también disminuyó de 0.012 a 8.33x10<sup>-7</sup> kmol/m<sup>3</sup>, lo cual representa prácticamente que ya no hay  
2746 presencia de este compuesto a la salida de la fase gas. En el caso de la fase líquida, también  
2747 disminuye la presencia de ambos componentes, esto tiene sentido debido a que existe menor flujo  
2748 del líquido lo que genera una disminución en la cantidad de gases que se pueden absorber, no  
2749 obstante, se recupera una buena cantidad de ambos y solo disminuye su concentración en 20  
2750 kmol/m<sup>3</sup> aproximadamente. En este caso, debido a que la aplicación de la estrategia de  
2751 optimización es particular, no es posible realizar una comparación con la literatura, no obstante,

2752 la modificación de las concentraciones de salida presenta una buena correspondencia con el  
2753 análisis paramétrico mostrado en la Figura 5.7.



2754  
2755 Figura 5. 16. Perfiles de concentración óptimos de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S en la columna empacada, a) fase gas, b) fase líquida.

2756

### 2757 5.3.2 Condiciones óptimas del HFMC para absorción

2758 De igual manera se realizó la optimización del proceso de absorción HFMC, para este proceso  
2759 se agregó una variable de decisión más que fue el número de fibras internas del equipo. Los  
2760 resultados se reportan en la Tabla 5.10, donde se presentan dos configuraciones de valores  
2761 óptimos, la primera donde se obtienen concentraciones a la salida del proceso de 4.5 kmol/m<sup>3</sup> y  
2762 una segunda que fue obtenida para realizar una comparación justa con el proceso de absorción  
2763 empacada óptimo. Evidentemente el haber encontrado una configuración que permite mejorar la  
2764 operación puede ser una alternativa interesante de analizar. Se puede observar que los parámetros  
2765 encontrados en general son cercanos a los proporcionados por la planta. Específicamente, los  
2766 parámetros de diseño son los que presentan mayor variación, lo cual tiene sentido debido a que  
2767 un equipo más grande permite mejorar la interacción de sus componentes. A diferencia del  
2768 proceso de absorción empacado, el flujo de la fase líquida no resulta ser un parámetro  
2769 significativo, lo cual puede atribuirse a que el transporte de masa es dominado por la fase gas y  
2770 su interacción con la membrana. También se puede observar que el número de fibras internas  
2771 tampoco varió demasiado, lo que significa que es posible mantener el diseño propuesto por las  
2772 compañías comerciales, lo cual facilita el cálculo de su costo.

2773

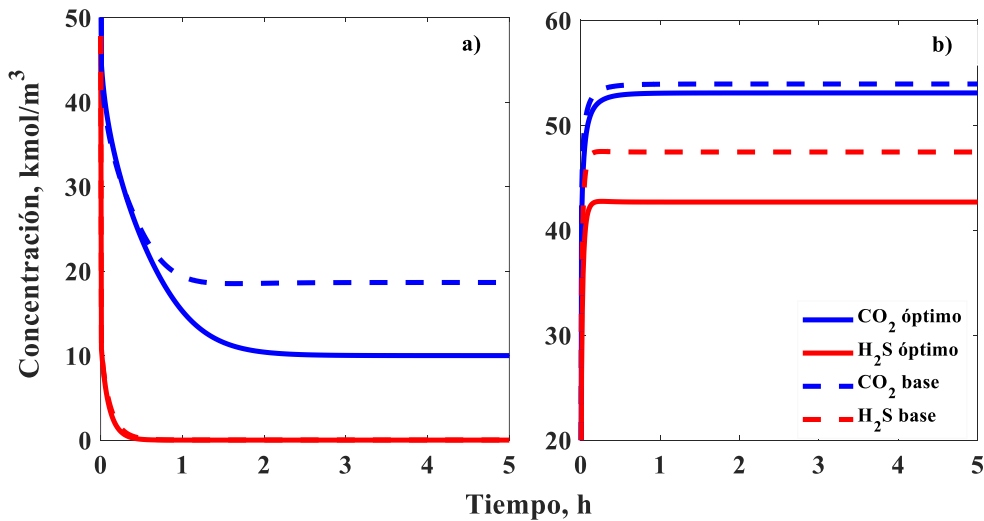
Tabla 5. 10. Parámetros óptimos calculados para el proceso de absorción en HFMC.

Variable	Planta	Óptimo	Óptimo a comparar
Temperatura [K]	338.65	357.06	343.61
Fujo del solvente [m <sup>3</sup> /h]	63.15	61.33	53.26
Radio del contactor [m]	0.031	0.051	0.05
Longitud del contactor [m]	2	3.35	2.61
Número de fibras internas	3600	3600.04	3600.03
Concentración de CO <sub>2</sub> a la salida [kmol/m <sup>3</sup> ]	18.7	4.5	10

2774

2775 En la Figura 5.17 se muestra la comparación de los perfiles de concentración óptimos frente a  
 2776 los perfiles obtenidos con los parámetros de planta. A diferencia del proceso de absorción  
 2777 empacada, se observa una menor disminución de los componentes ácidos en la fase líquida, lo  
 2778 cual puede favorecer a la obtención de productos dentro de la planta. De igual forma que en la  
 2779 optimización del proceso de absorción empacada se observa una disminución de la concentración  
 2780 de gases en la fase gas, principalmente de la cantidad de H<sub>2</sub>S que disminuyó prácticamente a 0.

2781



2782

2783 Figura 5. 17. Perfiles de concentración óptimos de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S en el HFMC, a) fase gas, b) fase líquida.

2784

## 2785 5.4 Estrategias de control en los procesos de absorción

2786 A continuación, se presenta el rendimiento en lazo cerrado de los controladores basados en  
 2787 modelos propuestos, que se comparan con un esquema de control PI clásico. Se evaluaron los

2788 controladores teniendo en cuenta cambios en la referencia y perturbaciones en las condiciones  
2789 de alimentación. La robustez de los controladores propuestos se analiza incluyendo  
2790 incertidumbres en los parámetros del modelo nominal. El rendimiento de los esquemas de control  
2791 se cuantifica y compara utilizando como índice la integral del error de regulación al cuadrado  
2792 entre la referencia deseada y la composición de medida tal que:

$$2793 \quad E^2 = \int_0^t (y_{ref} - y(t))^2 dt \quad (5.4)$$

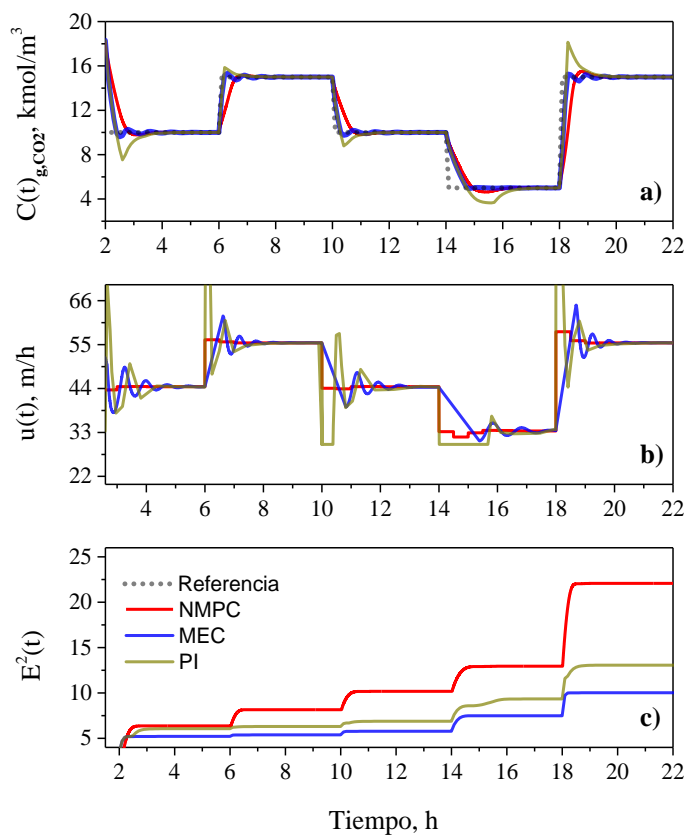
2794 Debido a la baja presencia de H<sub>2</sub>S en la corriente de gas de entrada se considera para la  
2795 implementación de los esquemas de control reducir la cantidad de CO<sub>2</sub> presente en la corriente  
2796 de gas natural en un 50% a la salida del proceso, esto de acuerdo con lo encontrado mediante el  
2797 método de optimización del proceso. Con ello, se espera a su vez reducir la cantidad de H<sub>2</sub>S al  
2798 mínimo pues ambos compuestos se encuentran en una única corriente. Para la selección de  
2799 parámetros de sintonizado se puede hacer uso de métodos de optimización, tomando como base  
2800 las reglas reportadas en la literatura y proponer una vecindad cercana para la búsqueda.

2801

#### 2802 **5.4.1 Aplicación de esquemas de control en la columna empacada**

2803 Para el proceso de absorción en la columna empacada, de acuerdo con el análisis de sensibilidad  
2804 realizado en la Sección 5.2.1 se eligió la velocidad de la fase gas como variable de control. Para  
2805 el control de este proceso se propone la aplicación y comparación de un control NMPC y MEC  
2806 frente al controlador PI para regular la salida de CO<sub>2</sub>. Los parámetros de control para cada uno  
2807 de los esquemas se seleccionaron basados en las reglas reportadas por la literatura y  
2808 posteriormente fueron optimizadas para la mejora de la respuesta. En el caso del control MEC,  
2809 el cálculo de los parámetros  $\tau_c$  y  $\tau_e$  se basaron en las reglas de sintonizado reportadas por  
2810 Alvarez-Ramírez *et al.* (2002), donde los parámetros óptimos encontrados fueron  $\tau_c=10$  y  
2811  $\tau_e=0.6$ . Los valores de ponderación nominales  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  se seleccionaron de acuerdo con Henson  
2812 y Seborg (1997), donde los parámetros óptimos encontrados fueron  $\gamma_1=5.5$  y  $\gamma_2=99$ . Los  
2813 parámetros de control PI se ajustaron según lo indicado por Skogestad (2003), de forma que  
2814  $K_p = 153.983$  y  $\tau_I = 0.3747$ . Cabe señalar que también se intentó encontrar parámetros óptimos  
2815 con este controlador, pero la respuesta que mostraba generaba respuestas oscilatorias, por lo que  
2816 se consideró utilizar los parámetros sintonizados. Para la implementación de los controladores,

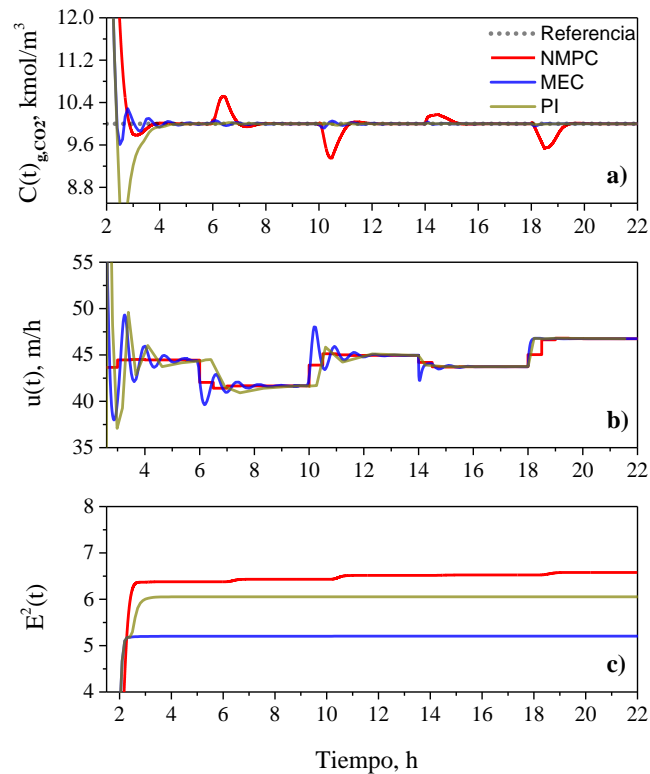
2817 las dos primeras horas de funcionamiento del proceso se llevan a cabo en lazo abierto, donde se  
 2818 alcanza el estado estacionario. Posteriormente, se introduce la acción del controlador que  
 2819 conduce la variable de salida a la referencia ( $y_{ref}$ ). Finalmente, para evaluar la robustez de los  
 2820 controladores propuestos, se proponen cambios de referencia y perturbaciones externas. Para  
 2821 regular el proceso frente a cambios en el valor nominal, los controladores se evaluaron frente a  
 2822 cuatro cambios de referencia  $y_{ref}=[15, 10, 5, 15]$  kmol/m<sup>3</sup> en  $t = [6, 10, 14, 18]$  h,  
 2823 respectivamente.



2824  
 2825 Figura 5. 18. Desempeño del controlador MEC, NMPC y PI convencional frente a cambios de referencia,  
 2826 a) Regulación de concentración, b) Entrada de control, c) Índice de desempeño.  
 2827

2828 La Figura 5.18 muestra el rendimiento de los controladores PI, MEC y NMPC, observándose que  
 2829 todos los esquemas de control alcanzan el punto de referencia. Se observa que la respuesta del  
 2830 controlador PI muestra un rendimiento inferior al obtenido con los controladores basados en  
 2831 modelo. El controlador NMPC muestra el mejor rendimiento, lo que puede atribuirse al valor del  
 2832 horizonte de control empleado (0,5 h). Un valor menor del horizonte de control acelera la

2833 respuesta del controlador y un horizonte de predicción suficientemente significativo mejora el  
 2834 rendimiento en lazo cerrado (Zhao *et al.*, 2018). Sin embargo, el tiempo de cómputo aumenta  
 2835 proporcionalmente a la longitud del horizonte de predicción y es inversamente proporcional a la  
 2836 longitud del horizonte de control. Esto sugiere que la velocidad con la que se midan las variables  
 2837 de estado tendrá un fuerte impacto en la respuesta del controlador NMPC. La Figura 5.18b  
 2838 muestra que el controlador NMPC exhibe una secuencia más suave en la variable de control. Esto  
 2839 se debe a que la secuencia de la variable de control se actualiza cada vez que se resuelve el  
 2840 problema de optimización, por lo que la variable de control ( $u$ ) exhibe una variación menor y, en  
 2841 consecuencia, proporciona estabilidad al sistema con un rebasamiento mínimo (Tabla 5.11). Esto  
 2842 sugiere que el control NMPC tiene una ventaja importante en la gestión del mecanismo del  
 2843 actuador físico. A pesar de ello, la respuesta suave del controlador NMPC resulta en un  
 2844 rendimiento inferior comparado con los controladores MEC y PI (Figura 5.18c).



2845  
 2846 Figura 5. 19. Desempeño del controlador MEC, NMPC y PI convencional frente a perturbaciones externas,  
 2847 a) Regulación de concentración, b) Entrada de control, c) Índice de desempeño.

2848  
 2849 La robustez de los esquemas de control también se evalúa incorporando una secuencia de  
 2850 perturbaciones externas de alimentación:  $\pm 15\%$  de concentración de  $\text{CO}_2$  de alimentación en el

2851 gas ácido, -40 % de velocidad de la fase líquida y +10 % de concentración de MDEA de  
 2852 alimentación en la solución de amina pobre en  $t=[6, 10, 14, 18]$  h, respectivamente. La Figura  
 2853 5.19 muestra el rendimiento de los controladores sometidos a las perturbaciones propuestas. En  
 2854 la Figura 5.19a se observa que todos los controladores consiguen llevar el sistema al punto de  
 2855 referencia deseado. El enfoque MEC muestra una acción de control más rápida para regular la  
 2856 concentración de CO<sub>2</sub> en el gas dulce, pero presenta una respuesta subamortiguada con un  
 2857 sobreimpulso mayor que el control NMPC (Tabla 5.11). Esto se debe a que el controlador MEC  
 2858 no tiene restricciones en la dinámica de la variable de control, como el control NMPC. Asimismo,  
 2859 debe considerarse que los términos estimados por el esquema MEC incluyen términos  
 2860 dependientes del tiempo que contribuyen a una respuesta de control más compleja (Christofides  
 2861 y El-Farra, 2005). El comportamiento del sistema frente a perturbaciones indica que el  
 2862 controlador MEC es más robusto para asegurar que la calidad del producto final no se vea  
 2863 afectada.

2864

2865

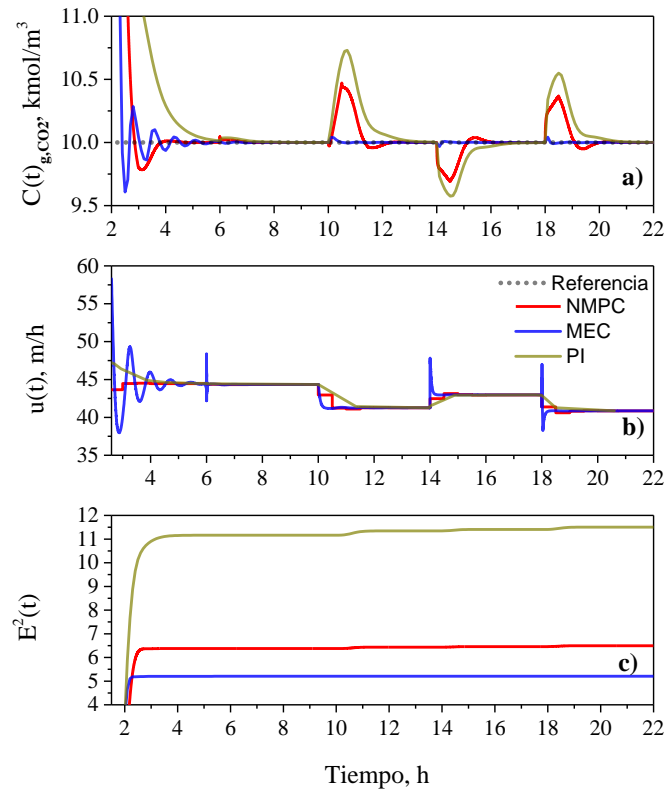
Tabla 5. 11. Diferentes desempeños de los esquemas de control implementados.

Propuesta de control	Entrada de control		Cambios de referencia		Perturbaciones		Incertidumbres	
	Máx. sobresalto (%)	Tiempo de asentamiento (h)	Máx. sobresalto (%)	Tiempo de asentamiento (h)	Máx. sobresalto (%)	Tiempo de asentamiento (h)	Máx. sobresalto (%)	Tiempo de asentamiento (h)
NMPC	2.2	1.24	1.3	1	8	0.9	4.5	1
MEC	3.9	0.88	3	0.5	0.5	0.1	0.5	0.2
PI	24.8	1.55	12	1.1	0.7	0.7	7.5	1.5

2866

2867 Esto está directamente relacionado con las variaciones que presenta el gas de entrada al proceso  
 2868 de endulzamiento, ya que, al provenir de una fuente natural, su concentración siempre presentará  
 2869 variaciones en el gas amargo de entrada a la columna de absorción. La Figura 5.19b muestra la  
 2870 secuencia de la variable de control, donde se observa que los cambios en esta variable son suaves  
 2871 para ambos controladores. Nótese que la variable de control nunca alcanza los valores de  
 2872 saturación en todos los casos ( $u_{\min}=10$ ,  $u_{\max}=70$  m/s). Para el controlador PI, se observa un  
 2873 retardo en la respuesta de la variable de control, que impide que alcance el valor de referencia.  
 2874 A efectos prácticos, esperaríamos realizar un número mínimo de acciones correctoras, por lo que  
 2875 el controlador MEC muestra un mejor rendimiento. Esto se corrobora en la Figura 5.19c donde  
 2876 se observa que el error acumulado para el controlador MEC es menor debido a que la dinámica

2877 del proceso se sitúa principalmente en la concentración de referencia a un tiempo de  
2878 establecimiento menor (Tabla 5.11).



2879

2880 Figura 5. 20. Desempeño del controlador MEC, NMPC y PI convencional frente a incertidumbres de modelado,  
2881 a) Regulación de concentración, b) Entrada de control, c) Índice de desempeño.

2882

2883 Para evaluar el rendimiento de los controladores frente a las incertidumbres de modelado, se  
2884 introdujeron cambios en los parámetros del modelo. Las incertidumbres son las siguientes:  
2885 +100% de coeficiente de difusión de  $CO_2$  en la fase gaseosa (considerando el orden de magnitud),  
2886 -10% de constante de velocidad de reacción, +20% de coeficiente global de transferencia de masa  
2887 de  $CO_2$  y -20% de área de transferencia efectiva en  $t=[6, 10, 14, 18]$  h, respectivamente. La Figura  
2888 5.20 muestra que ambos controladores basados en el modelo pueden mantener la concentración  
2889 de salida de gas en el valor de referencia a pesar de las incertidumbres en los valores de los  
2890 parámetros del modelo. Lo anterior confirma que, aunque ambas propuestas de control están  
2891 basadas en modelo, su estructura permite considerar la posibilidad de no representar  
2892 completamente el sistema. Esto significa que ambos controladores pueden ser una alternativa  
2893 adecuada para el control del proceso de absorción, ya que usualmente en la industria no existe

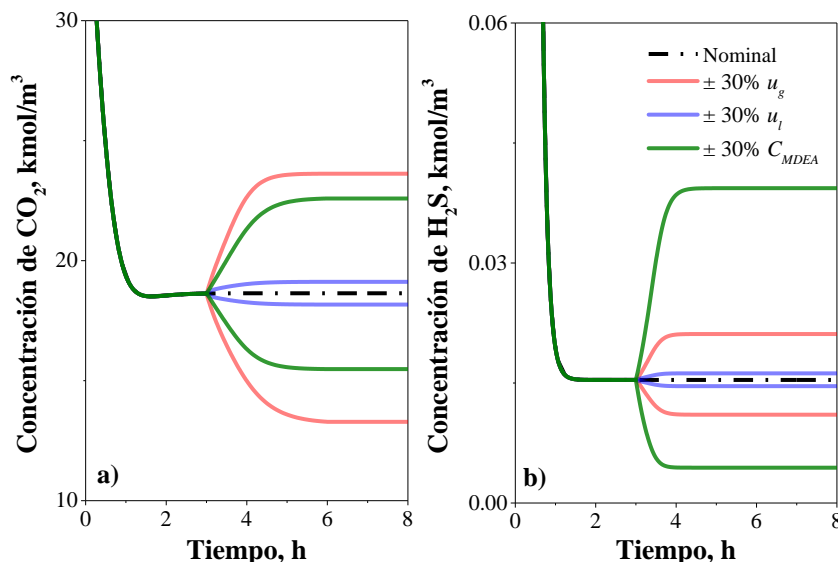
2894 un modelo específico para cada proceso de la planta. En este caso, se observa un rendimiento  
2895 superior del controlador MEC, atribuido a su característica de estimación de incertidumbres. La  
2896 Figura 5.20b muestra un comportamiento más suave de la variable de control en el controlador  
2897 NMPC, mientras que se observan efectos de oscilación en la respuesta de control MEC. Esto  
2898 sugiere que la aplicación del controlador NMPC es recomendable para procesos en los que  
2899 existan actuadores sensibles, lo que lo hace útil para sistemas con grandes volúmenes de carga o  
2900 procesos con tiempos de respuesta mayores a 5 h. Asimismo, se observa en la Figura 5.20c que,  
2901 a pesar de las incertidumbres, el error de control acumulado se mantiene en el mismo orden de  
2902 magnitud. El controlador PI presenta un mayor error acumulado mostrando dificultades para  
2903 alcanzar la referencia cuando el proceso está expuesto a cambios en la operación y/o  
2904 perturbaciones externas. Mientras que para el controlador MEC se observa un menor error  
2905 acumulado, y menores valores de sobreimpulso máximo y tiempo de establecimiento en  
2906 comparación con las otras propuestas de control, por lo que se sugiere su implementación en  
2907 procesos con mayores exigencias en las características del producto.

2908

#### 2909 **5.4.2 Aplicación de esquemas de control en el HFMC**

2910 Durante las primeras tres horas la operación del proceso en el HFMC se lleva a cabo a lazo abierto  
2911 para alcanzar el estado estacionario. Subsecuentemente se introduce la acción de control que  
2912 conduce la variable de salida al punto de referencia ( $y_{ref}$ ). La Figura 5.21 muestra el efecto sobre  
2913 las concentraciones de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S en t=3 h de un cambio de escalón de  $\pm 30\%$  para 3 variables de  
2914 control propuestas en lazo abierto: la velocidad media del flujo de gas, la velocidad media de la  
2915 solución y la concentración de MDEA. Se puede observar que, aunque la concentración de  
2916 MDEA muestra una respuesta significativa, en la práctica sería complicado realizar  
2917 modificaciones de esta concentración en un proceso acoplado a planta, como es el proceso de  
2918 endulzamiento de gas natural. Además, aumentar la concentración de MDEA para favorecer el  
2919 proceso de absorción de gas ácido incrementaría los gastos de materia prima y los costes de  
2920 regeneración (Mirfendereski y Mohammadi, 2017). Por otro lado, la variable con menor  
2921 respuesta es la velocidad media de la fase líquida, lo que contrasta ampliamente con los informes  
2922 de la literatura para columnas de adsorción empacadas o de placas donde se propone la  
2923 modificación del flujo de la solución (Salvinder *et al.*, 2019). Esto puede atribuirse a que en la  
2924 HFMC en la zona de la membrana cercana a la interfase gas-líquido el proceso de difusión

2925 domina el transporte de masa, el cual está directamente influenciado por el transporte convectivo  
 2926 en la fase gaseosa (Wang *et al.*, 2017). Asimismo, la literatura sugiere la implementación de  
 2927 controladores de flujo másico en fase gaseosa en procesos experimentales a nivel de planta piloto,  
 2928 con el fin de mantener una operación estable en la HFMC (McLeod *et al.*, 2016; Sethunga *et al.*,  
 2929 2018; Vadillo *et al.*, 2022). De esta manera, la velocidad en fase gaseosa fue elegida la variable  
 2930 de control más adecuada debido a su respuesta y utilidad.

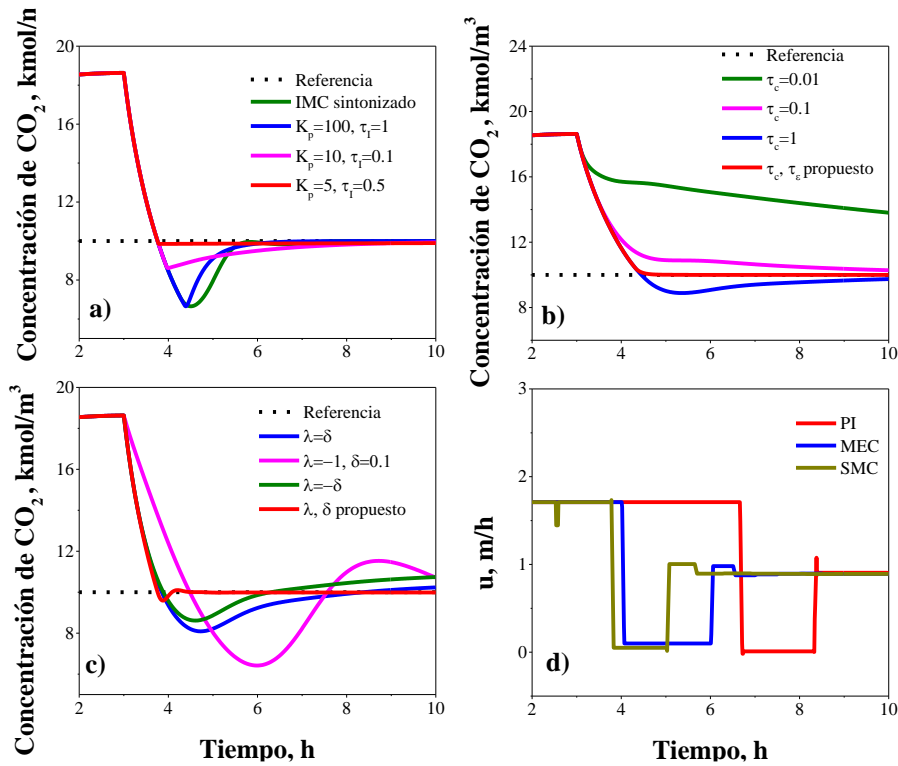


2931  
 2932  
 2933  
 2934

Figura 5. 21. Comportamiento de lazo abierto a un cambio gradual en la salida de la mezcla de gases HFMC,  
 a) concentración de CO<sub>2</sub> y b) concentración de H<sub>2</sub>S.

2935 Para definir los parámetros de control, se consideraron como base las siguientes reglas de ajuste:  
 2936 para el controlador PI utilizando la respuesta del proceso; las reglas reportadas por Alvarez-  
 2937 Ramírez *et al.* (2002) para el controlador MEC; y para el controlador SMC según Huang *et al.*  
 2938 (2008). El punto de referencia se definió como  $y_{ref}=10$  kmol/m<sup>3</sup> de CO<sub>2</sub> en el flujo de gas en la  
 2939 parte superior de la HFMC de acuerdo con lo encontrado con el método de optimización. La  
 2940 Figura 5.22 muestra la respuesta de los esquemas de control PI, MEC y SMC con la variación de  
 2941 los parámetros de control. Para el control PI, la Figura 5.22a muestra que es posible mejorar la  
 2942 respuesta del controlador sintonizado proponiendo valores para  $K_p$  y  $\tau_I$ . Sin embargo, la  
 2943 respuesta de la variable de control presenta un retardo significativo y alcanza el límite inferior  
 2944 para la respuesta, una desventaja importante en la aplicación del proceso (Figura 5.22d). Por lo  
 2945 tanto, se sugiere utilizar los parámetros sintonizados  $K_p=0.5295$  and  $\tau_I=0.6528$ . para

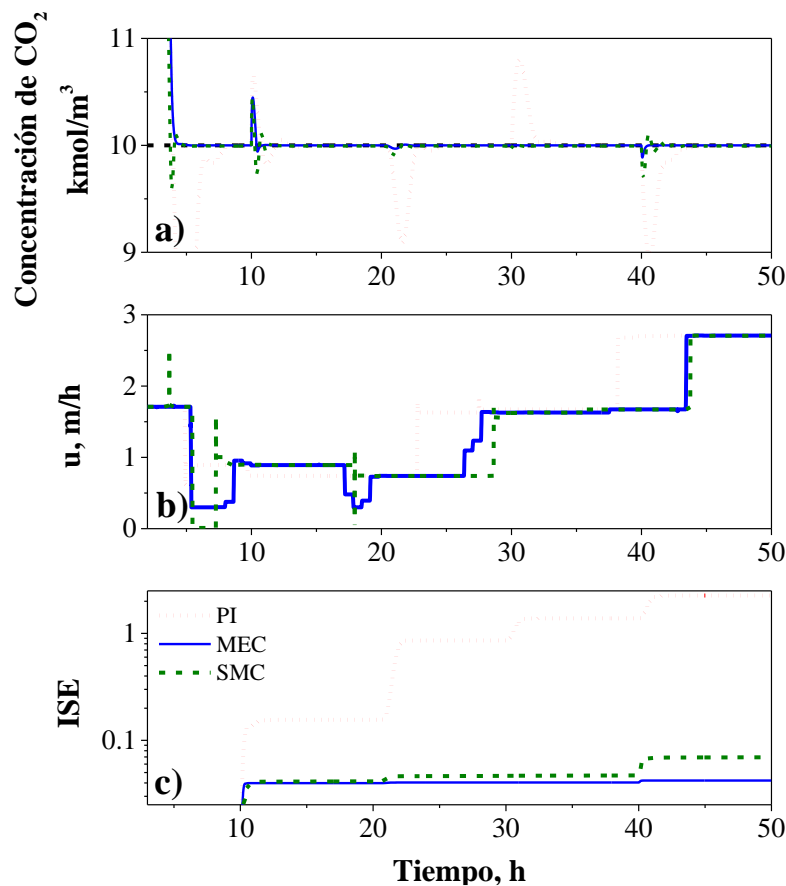
2946 comparación. Para el control MEC se encontró que a valores bajos de  $\tau_e=10$  el controlador no  
 2947 alcanza la referencia. Ajustando el valor de  $\tau_e$ , se realizó una variación de órdenes de magnitud  
 2948 en el parámetro  $\tau_c$ , donde a valores cercanos a  $\tau_c=10$  la respuesta del controlador mejora, por lo  
 2949 que se realizó la búsqueda de los valores considerando estas características (Figura 5.22b). En  
 2950 ese sentido, se realizó un barrido de los parámetros de control, donde se puede observar que a  
 2951 valores que presentan una variación con respecto a las reglas de sintonizado puede alcanzar la  
 2952 referencia deseada. Implementando el método de optimización en la búsqueda de los parámetros  
 2953 de control se encontró que a valores  $\tau_c = 6$ ,  $\tau_e = 0.007$  se tiene una buena respuesta en la variable  
 2954 de control (Figura 5.22d). Lo anterior puede atribuirse a la naturaleza compleja del proceso, el  
 2955 cual presenta respuestas inversas y retardadas a las variaciones del controlador y tiempos de  
 2956 respuesta prolongados (Chien *et al.*, 2002).



2957  
 2958 Figura 5. 22. Perfil del rendimiento del control para diferentes valores de ponderación a lazo cerrado, a) PI; b)  
 2959 MEC; c) SMC y d) comportamiento de la variable de control para 3 controladores con los conjuntos de parámetros  
 2960 de mejor rendimiento.  
 2961

2962 Por otro lado, para el control SMC, la combinación de los diferentes valores de  $\delta$  y  $\lambda$  no parece  
 2963 tener un comportamiento específico sobre el desempeño del controlador (Figura 5.22c). Sin  
 2964 embargo, se observa que cuanto más cerca están los valores, se presenta un mejor desempeño del

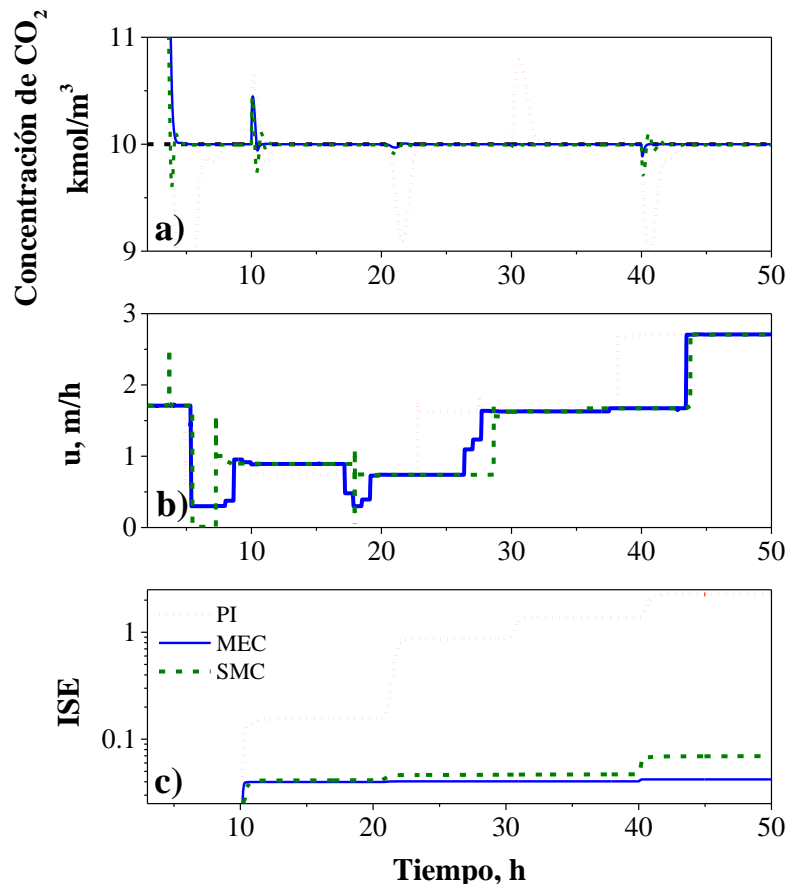
2965 controlador. Los parámetros encontrados con mejor rendimiento mediante el método de  
 2966 optimización son  $\delta=0.765$  y  $\lambda=0.8$ . En el caso del parámetro de ponderación  $\gamma$ , su valor óptimo  
 2967 es 150. Cabe destacar que las estrategias de control SMC implican una gran complejidad en la  
 2968 sintonización de altas frecuencias de conmutación a la salida del sistema, tal y como reporta  
 2969 Rodríguez-Jara *et al.* (2023). Debe tenerse en cuenta que, dependiendo del diseño del esquema  
 2970 SMC, pueden producirse efectos de oscilación y altas frecuencias de conmutación en la salida  
 2971 del sistema, lo que dificulta su aplicación práctica.



2972  
 2973 Figura 5. 23. Rendimiento del controlador frente a perturbaciones externas, a) regulación de la concentración,  
 2974 b) entrada de control, c) índice de rendimiento del controlador.

2975  
 2976 Para evaluar el rendimiento de los controladores aplicados, se calculó la relación de error de  
 2977 regulación al cuadrado entre la concentración de CO<sub>2</sub> medida y el valor de referencia. Para  
 2978 evaluar la robustez de los esquemas, se aplican perturbaciones en la alimentación, cambios en el  
 2979 punto de referencia e incertidumbres en el modelado. La Figura 5.23 muestra el rendimiento del  
 2980 controlador frente a cuatro perturbaciones de la alimentación siguientes: aumento de la

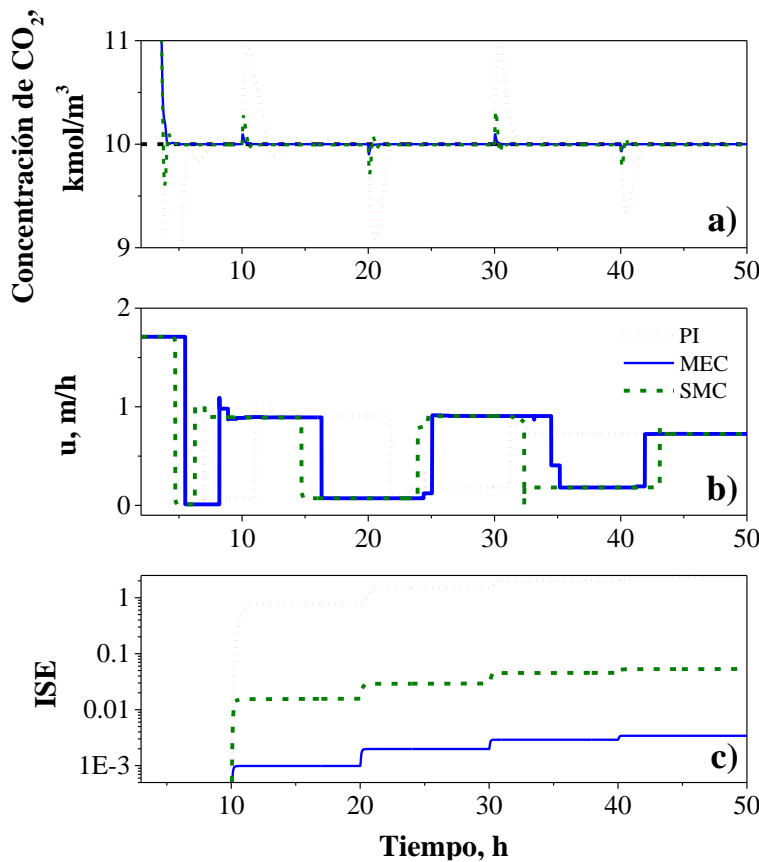
2981 concentración de  $\text{CO}_2$  en la fase líquida a  $9 \text{ kmol/m}^3$ , disminución de la concentración de  $\text{CO}_2$  en  
 2982 la mezcla de gases a  $35 \text{ kmol/m}^3$ , aumento de la velocidad media en la fase líquida a  $0.9 \text{ m/h}$  y  
 2983 aumento de la concentración de MDEA a  $6,500 \text{ kmol/m}^3$  en los tiempos  $t = [10, 20, 30, 40] \text{ h}$ ,  
 2984 respectivamente. La Figura 5.23a muestra que la aplicación de los 3 controladores permite  
 2985 regular la concentración de  $\text{CO}_2$  hasta el punto de referencia deseado.



2986  
 2987 Figura 5. 24. Rendimiento del controlador frente a perturbaciones externas, a) regulación de la concentración,  
 2988 b) entrada de control, c) índice de rendimiento del controlador.

2989  
 2990 Para los controladores basados en modelos se observan claramente mejores respuestas frente a  
 2991 las perturbaciones propuestas, que era el comportamiento esperado en base a la configuración de  
 2992 los controladores para la estimación de dinámicas complejas o no modeladas (Piceno-Díaz *et al.*,  
 2993 2020). Cabe destacar que la referencia especificada permite una disminución significativa de la  
 2994 cantidad de  $\text{H}_2\text{S}$  a la salida del sistema, cayendo a valores inferiores a  $0.005 \text{ kmol/m}^3$ . En la  
 2995 Figura 5.23b, observando el comportamiento de la variable de control, se puede encontrar que  
 2996 hay una mayor demanda por el SMC, lo que puede ser atribuido a la calidad del diseño del control

2997 que permite estabilizar el sistema rápidamente, generando respuestas rápidas de mayores  
 2998 ganancias (Wang *et al.*, 2020). Por otro lado, el controlador MEC tiene un comportamiento más  
 2999 suave con cambios escalonados en el requerimiento del controlador, lo que favorece la  
 3000 estabilidad física del proceso y disminuye las variaciones del régimen de flujo (Zhang *et al.*,  
 3001 2015). Observando el desempeño del controlador en la Figura 5.23c, los controladores robustos  
 3002 presentan una mejora significativa en el seguimiento de la referencia a pesar de las perturbaciones  
 3003 a las que fue expuesto el sistema, lo que demuestra que es posible mantener el proceso HFMC  
 3004 en un estado deseable durante el tiempo de operación.

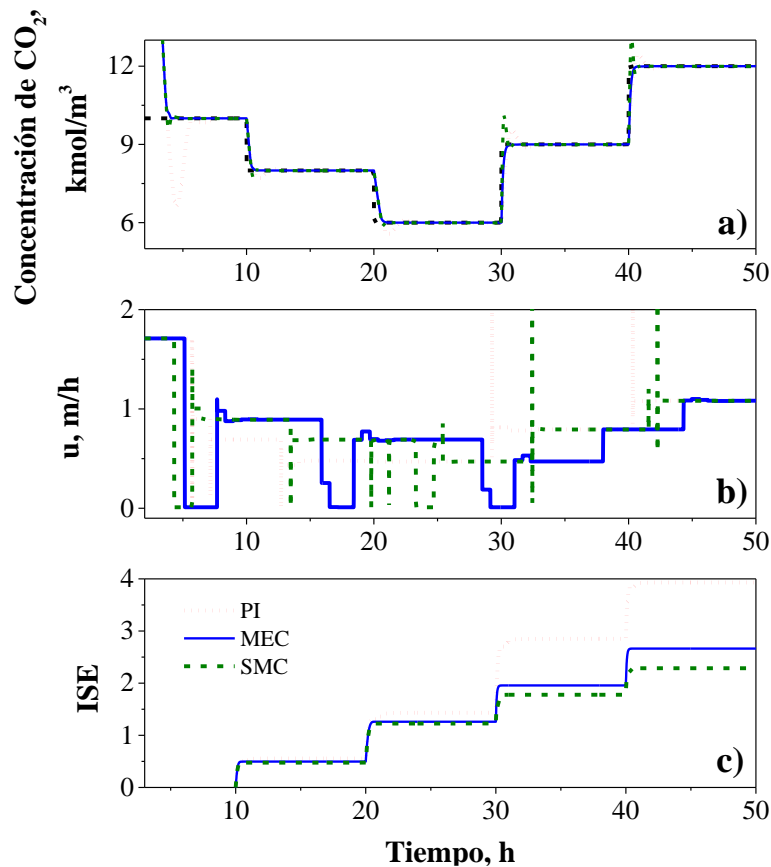


3005  
 3006  
 3007  
 3008

Figura 5. 25. Rendimiento del controlador frente a las incertidumbres del modelo, a) regulación de la concentración, b) entrada de control, c) índice de rendimiento del controlador.

3009 Posteriormente, los controladores se evaluaron frente a 4 incertidumbres de modelado  
 3010 considerando: la constante cinética de reacción entre CO<sub>2</sub> y MDEA, el coeficiente de transporte  
 3011 difusivo para las fases líquida y gaseosa (CO<sub>2</sub>) y el coeficiente de difusividad efectiva para el  
 3012 transporte en el interior de la membrana porosa. Las variaciones son las siguientes -70%  $k_L$  , -  
 3013 70%  $D_{CO_2,cor}$  , -80%  $D_{CO_2,tubo}$  y +80%  $D_{CO_2,mem}$  agregadas a los tiempos  $t = [10, 20, 30, 40]h$  ,

3014 respectivamente. La figura 5.24a muestra un menor rendimiento del controlador PI, debido a que  
 3015 su diseño no contempla la capacidad de estimar incertidumbres de modelado, lo que representa  
 3016 una deficiencia importante a nivel industrial, donde el desconocimiento de los parámetros  
 3017 involucrados en los sistemas es un hecho común. De hecho, el proceso escalado suele presentar  
 3018 importantes incertidumbres en las constantes de velocidad, parámetros de transporte y cinéticos,  
 3019 por lo que la aplicabilidad de los esquemas de control no lineal propuestos se ve favorecida por  
 3020 el diseño robusto (Rodríguez Vera y Ricardez-Sandoval, 2022). Como se puede observar en la  
 3021 Figura 5.24b, el requerimiento de los controladores basados en modelo es similar, presentando  
 3022 el mismo orden de magnitud con una respuesta suave ante el cambio de la velocidad de entrada  
 3023 del flujo de gas. Cabe destacar que el controlador MEC es más sensible a las incertidumbres para  
 3024 valores pequeños de  $\tau_e$ , lo que podría generar inestabilidad y disminuir la robustez del  
 3025 controlador en sistemas distribuidos (Monroy-Loperena y Alvarez-Ramirez, 2000).



3026

3027

3028

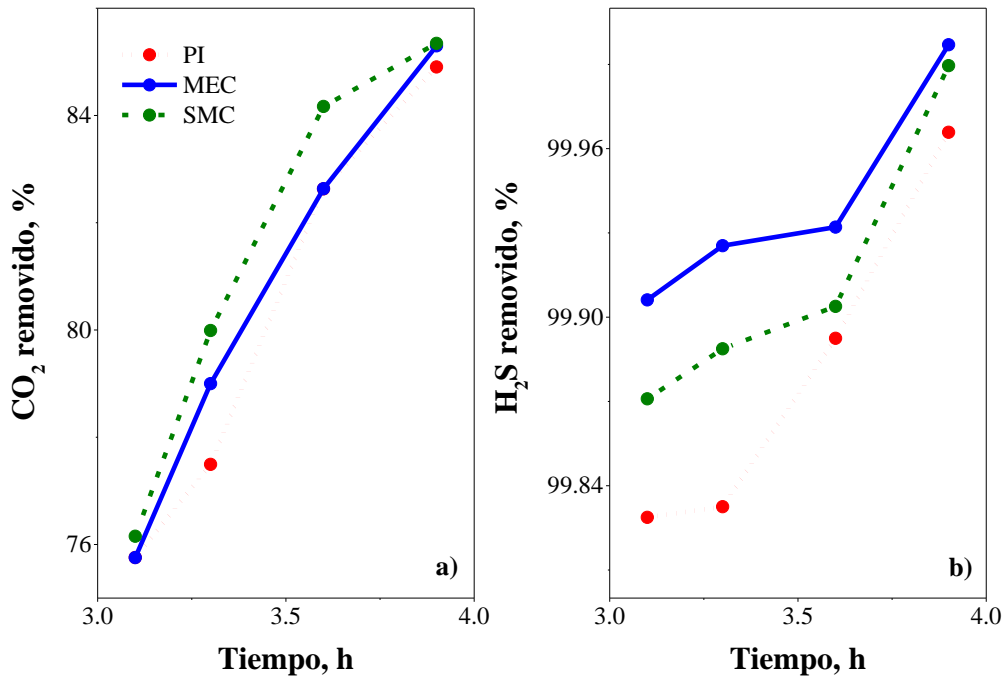
3029

Figura 5. 26. Rendimiento del controlador frente a cambios en el punto de referencia, a) regulación de la concentración, b) entrada de control, c) índice de rendimiento del controlador.

3030 A pesar de ello, el comportamiento de la variable de control muestra un comportamiento más  
3031 suave en comparación con otros controladores, lo que puede atribuirse al gran tiempo de  
3032 residencia en este sistema (orden de magnitud en horas) y que permite una realimentación  
3033 adecuada para reducir el impacto de perturbaciones e incertidumbres (Puebla *et al.*, 2013). Lo  
3034 mismo puede observarse en el error acumulado, donde los controladores basados en modelos  
3035 presentan dos órdenes de magnitud de error menor (Figura 5.24c). Los controladores se evaluaron  
3036 frente a 4 cambios en el valor de referencia, introducidos en  $t = [10, 20, 30, 40]h$  para valores  
3037 de  $y_{ref} = [8, 6, 9, 12] kmol / m^3$ , respectivamente. La Figura 5.25a muestra las siguientes  
3038 secuencias de entradas de control: (i) una concentración de referencia inferior ( $8 kmol/m^3$ )  
3039 requiere una ligera reducción del caudal de gas para aumentar el tiempo de residencia, lo que  
3040 permite un aumento de la cantidad de soluto transportado desde el gas a granel a la membrana y,  
3041 posteriormente, a la fase líquida. (ii) Una concentración superior a la referencia inicial ( $12$   
3042  $kmol/m^3$ ) requiere un aumento del caudal, disminuyendo la posibilidad de transporte de  
3043 moléculas de  $CO_2$  y  $H_2S$ . (iii) La concentración más baja posible ( $6 kmol/m^3$ ) requiere una  
3044 disminución muy agresiva de la entrada de control para alcanzar la referencia (valores cercanos  
3045 a 0), lo que puede no ser favorable si se tiene en cuenta que puede no producirse transporte de  
3046 masa (Houlker *et al.*, 2021). La Figura 5.25b muestra que la variable de control es más exigente  
3047 para el control SMC, lo que puede dar lugar a una gestión inadecuada del actuador. Además, la  
3048 gestión de caudales más elevados en el sistema puede causar serios problemas operacionales  
3049 como la formación de espuma o el ensuciamiento del equipo (Porter *et al.*, 2015). En ese sentido,  
3050 para el manejo de un rango de requerimientos en la salida del proceso, el control MEC presenta  
3051 mayor robustez. Lo mismo se puede corroborar con el error acumulado donde los controladores  
3052 SMC y MEC presentan buena capacidad para alcanzar las diferentes referencias solicitadas  
3053 (Figura 5.25c). En base a los resultados se propuso calcular el porcentaje de gases ácidos  
3054 eliminados, para ello, hay que tener en cuenta que la fracción de concentración en la interfase  
3055 membrana-líquido es equivalente a la del lado del tubo, ya que la resistencia a la difusión de  $CO_2$   
3056 y  $H_2S$  en la superficie y en la membrana es pequeña comparada con la resistencia a la difusión  
3057 en el tubo. Por lo tanto, considerando la concentración media en  $r$  en  $z=L$  se puede calcular el  
3058 porcentaje de eliminación de  $CO_2$  y  $H_2S$  a partir de la siguiente ecuación:

3059 
$$\% \text{ remoción} = 100 \frac{(Q_i C_i)_{in} - (Q_i C_i)_{out}}{(Q_i C_i)_{in}} = 100 \left( 1 - \frac{C_{i,out}}{C_{i,in}} \right) \quad i = CO_2, H_2S \quad (5.5)$$

3060 donde  $Q$  y  $C$  son el caudal volumétrico y la concentración, respectivamente. Dado que los  
 3061 componentes ácidos están en muy baja proporción en la corriente de entrada de gas natural, el  
 3062 cambio en el caudal volumétrico puede suponerse despreciable, por lo que es posible aproximar  
 3063 la cantidad de  $CO_2$  y  $H_2S$  eliminada considerando cada estrategia de control.



3064  
 3065 **Figura 5. 27. Tasa de eliminación de gas ácido a lazo cerrado para los controladores PI, MEC y SMC, a)**  
 3066 **porcentaje de CO<sub>2</sub> y b) porcentaje de H<sub>2</sub>S removido.**

3067 La Figura 5.26 muestra el porcentaje de  $CO_2$  y  $H_2S$  absorbido en la primera hora a lazo cerrado.  
 3068 Se observa que el controlador de acción más rápida es el SMC que permite eliminar más del 80%  
 3069 del  $CO_2$  de la mezcla de gases en menos de 30 min. Asimismo, se observa que en el control MEC  
 3070 la cantidad de gas eliminado por unidad de tiempo puede aproximarse a una línea recta, por lo  
 3071 que se considera el controlador con el comportamiento más estable (Figura 5.26a). Para el  $H_2S$ ,  
 3072 la Figura 5.26b muestra que las 3 estrategias de control son capaces de remover prácticamente la  
 3073 totalidad del  $H_2S$  presente en la salida del gas, donde el control MEC exhibe una respuesta más  
 3074 rápida. Esto nos permite determinar que los controladores robustos son más eficientes para  
 3075 alcanzar los requerimientos internacionales de pureza en menor tiempo.

3076

3077 **5.5 Alternativas en la simulación de la planta endulzadora**

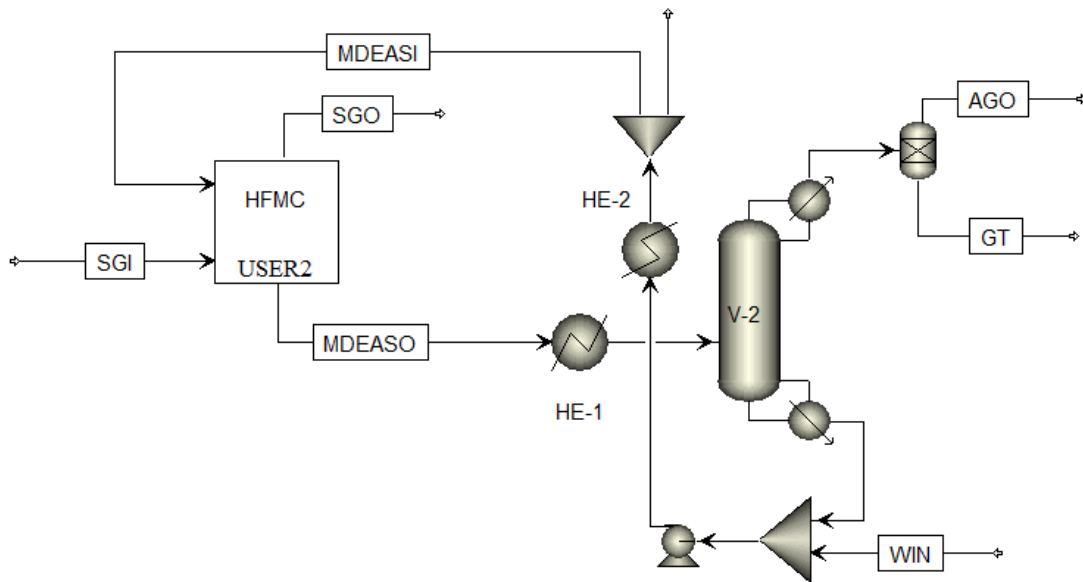
3078 De acuerdo con las estrategias de optimización y control implementadas se verificó que es posible  
 3079 la mejora del proceso de absorción empacada o su alternativa mediante un proceso de HFMC,  
 3080 donde es posible comparar 3 escenarios: a) la planta actual en operación, b) la planta con una  
 3081 columna de absorción empacada optimizada y controlada y c) la sustitución de la columna de  
 3082 absorción por un proceso de HFMC controlado y optimizado. En ese sentido, se realizó una nueva  
 3083 simulación de la planta de endulzamiento de gas considerando los parámetros óptimos de  
 3084 operación de absorción empacada.

3085  
 3086 Tabla 5. 12. Comparación de la simulación del proceso de endulzamiento de gas con parámetros de planta frente a  
 3087 la simulación con el proceso de absorción empacada óptimo.

Componente	Fracción mol de gas dulce		Fracción mol de MDEA-rica		Fracción mol de gas ácido	
	Simulación planta	Simulación óptima	Simulación planta	Simulación óptima	Simulación planta	Simulación óptima
Metano	0.8533	0.8619	0.0014	0.0083	0.0025	0.0000
Etano	0.0683	0.0675	0.0002	0.0014	0.0000	0.0000
Propano	0.0310	0.0304	0.0001	0.0009	0.0000	0.0000
I-Butano	0.0121	0.0119	0.0000	0.0003	0.0000	0.0000
N-Butano	0.0055	0.0053	0.0000	0.0001	0.0000	0.0000
I-Pentano	0.0041	0.0042	0.0002	0.0001	0.0000	0.0000
N-Pentano	0.0044	0.0045	0.0011	0.0001	0.0000	0.0000
N-Hexano	0.0025	0.0027	0.0065	0.0001	0.0006	0.0000
CO <sub>2</sub>	0.0051	0.0009	0.0189	0.0145	0.4739	0.4822
Agua	0.0035	0.0009	0.8318	0.8489	0.0348	0.0000
H <sub>2</sub> S	4 ppm	1.26 ppm	0.0234	0.0185	0.4894	0.4987
Nitrógeno	0.0102	0.0097	0.0072	0.0005	0.0016	0.0189
MDEA	0.0001	0.0000	0.1240	0.1580	0.0000	0.0000
Flujo molar total [kmol/h]	3196.95	3220.94	2196.34	2091.36	78.7121	88.0282

3088  
 3089 En la Tabla 5.12 se muestran los resultados de las corrientes principales de proceso. Se puede  
 3090 observar que en la corriente de gas dulce la cantidad de CO<sub>2</sub> se redujo en más del 50%, mientras  
 3091 que el H<sub>2</sub>S paso de 4 a 1.26 ppm. Esto sugiere que con la mejora del proceso de absorción  
 3092 empacada se puede alcanzar los estándares de calidad y estar en un rango favorable de acuerdo  
 3093 con la norma. Por otro lado, aumento la cantidad de flujo principalmente de metano, lo que

3094 significa que la corriente tiene mayor pureza y el producto es de mayor calidad. Respecto a la  
 3095 corriente que sale del proceso de absorción (MDEA-rica) se puede observar que las fracciones  
 3096 de los gases ácidos aumento mientras que la fracción de MDEA se redujo, esto debido a que al  
 3097 aumentar las dimensiones del equipo se incrementa el tiempo de residencia mejorando la  
 3098 interacción de los componentes reactivos (Houlker *et al.*, 2021). En el caso de la corriente de gas  
 3099 ácido se puede apreciar que lar fracciones de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S incrementaron, así como el flujo total.  
 3100 Esto también se atribuye a la mejora del proceso de absorción pues con la disminución de su  
 3101 presencia en el gas natural es posible recuperar mayor cantidad de gas ácido. Posteriormente, se  
 3102 realizó el acoplamiento del proceso de HFMC a la planta de endulzamiento de gas sustituyendo  
 3103 la columna empacada. En la figura 5.27 se muestra el diagrama de la simulación realizado en el  
 3104 software Aspen Plus. Como se puede apreciar se integró el proceso de HFMC mediante un  
 3105 módulo de interfaz de usuario. Para esta simulación se redujo la presión del flujo de entrada  
 3106 considerando las características del contactor, el cual debe operar a un límite máximo permisible  
 3107 de 5 bar (Luqmani *et al.*, 2023). Los cambios propuestos para la operación del HFMC modifican  
 3108 algunas características de operación de la planta. Principalmente, se eliminaron algunos equipos  
 3109 de tratamiento térmico y aumento de presión, pues ya no es necesario acondicionar las corrientes  
 3110 de proceso para la retroalimentación de la corriente de MDEA/H<sub>2</sub>O entre la operación del HFMC  
 3111 y la columna de desorción.



3112  
 3113  
 3114

Figura 5. 28. Diagrama de flujo de la planta endulzadora de gas natural con un proceso de HFMC.

3115 Por ello, se comparan nuevamente las corrientes principales con los datos de planta, las cuales se  
 3116 reportan en la Tabla 5.13. Se puede observar que en la corriente de gas dulce ya no existe  
 3117 presencia del solvente debido a que ya no hay contacto directo entre las fases. Se observa un  
 3118 incremento en las fracciones de los hidrocarburos y una disminución sustancial de los gases  
 3119 ácidos, además, un mejor aprovechamiento del recurso utilizando el HFMC óptimo frente a la  
 3120 columna de absorción empacada óptima. Respecto a la corriente de MDEA-rica presenta mayor  
 3121 pureza de hidrocarburos frente a lo reportado por la planta y lo obtenido con la torre empacada.  
 3122 Además, la corriente total incrementó en 90 kmol/h respecto al proceso empacado. Esto  
 3123 representa una ventaja mayor debido a que no solo la corriente se presenta más pura, también se  
 3124 tiene mayor flujo de gases ácidos derivados de la operación mejorada del HFMC.

3125 Tabla 5. 13. Comparación de la simulación del proceso de endulzamiento de gas con parámetros de planta frente a  
 3126 la simulación con el proceso de absorción de HFMC óptimo.

Componente	Fracción mol de gas dulce		Fracción mol de MDEA-rica		Fracción mol de gas ácido	
	Simulación planta	Simulación óptima	Simulación planta	Simulación óptima	Simulación planta	Simulación óptima
<b>Metano</b>	0.8533	0.8573	0.0014	0.0000	0.0025	0.0000
<b>Etano</b>	0.0683	0.0687	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
<b>Propano</b>	0.0310	0.0312	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
<b>I-Butano</b>	0.0121	0.0122	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>N-Butano</b>	0.0055	0.0055	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
<b>I-Pentano</b>	0.0041	0.0043	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000
<b>N-Pentano</b>	0.0044	0.0046	0.0011	0.0000	0.0000	0.0000
<b>N-Hexano</b>	0.0025	0.0028	0.0065	0.0000	0.0006	0.0000
<b>CO<sub>2</sub></b>	0.0051	0.0003	0.0189	0.0242	0.4739	0.5629
<b>Agua</b>	0.0035	0.0000	0.8318	0.8332	0.0348	0.0000
<b>H<sub>2</sub>S</b>	4 ppm	1.04 ppm	0.0234	0.0195	0.4894	0.4370
<b>Nitrógeno</b>	0.0102	0.0102	0.0072	0.0000	0.0016	0.0000
<b>MDEA</b>	0.0001	0.0000	0.1240	0.1234	0.0000	0.0000
<b>Flujo molar total [kmol/h]</b>	3196.95	3231.41	2196.34	2188	78.7121	94.2944

3127

3128 Finalmente, respecto a la corriente de gas ácido se observa un incremento en la fracción de CO<sub>2</sub>,  
 3129 misma que está presente en mayor medida en la corriente de gas natural. Esto sugiere un  
 3130 incremento en la corriente final de los gases ácidos traduciéndose en mayor venta por el  
 3131 tratamiento de estos gases. Respecto al proceso de absorción empacada óptimo, también existe  
 3132 una mejora de la calidad del producto final. En ese sentido, respecto al manejo de las corrientes

3133 y su pureza la opción que permite la mejor calidad y la mayor cantidad de producto es la planta  
 3134 que integra el proceso de HFMC. Esto es, se obtiene una mejora con la sustitución del HFMC  
 3135 del 2% en la cantidad de gas dulce obtenido y del 20% en la cantidad de gas ácido separado.

## 3136 **5.6 Cálculo costo-beneficio entre las alternativas de operación**

3137 Para corroborar los beneficios obtenidos mediante la operación con el sistema de membranas se  
 3138 requiere realizar el análisis costo-beneficio de su implementación a la planta endulzadora de gas.  
 3139 Para ello, como primer acercamiento se calculó el costo de capital y de utilidades mediante el  
 3140 software Aspen Plus. Los resultados de las 3 simulaciones (planta, con columna empacada  
 3141 óptima y con HFMC óptimo) se muestra en la Tabla 5.14. Para el cálculo del costo del equipo se  
 3142 consideró el precio actual de un HFMC comercial (24,300 USD por unidad) con características  
 3143 similares a la simulación y se sumó a los costos calculados por el software (Martín-Hernández  
 3144 *et al.*, 2022). Para cubrir la demanda total del complejo procesador de gas se requieren 200  
 3145 equipos en paralelo de características similares a los equipos comerciales. De acuerdo con lo  
 3146 encontrado con el software, la simulación de la planta con el proceso de absorción empacada  
 3147 óptima requiere un mayor coste de capital que la simulación de la planta que opera actualmente.  
 3148 Esto se puede atribuir a que los parámetros de diseño óptimos incrementaron el tamaño del  
 3149 equipo de absorción aumentando los costos de instalación. No obstante, los costos de operación  
 3150 disminuyeron lo que se puede traducir como beneficios a tiempos prolongados.

3151

3152 Tabla 5. 14. Comparación de costos de las diferentes alternativas de la simulación de la planta de endulzamiento  
 3153 obtenidos mediante Aspen Plus.

Costos obtenidos en Aspen	Simulación de planta en operación	Simulación de planta con absorción empacada óptima	Simulación de planta con HFMC óptimo
<b>Costo total de inversión [USD]</b>	5,664,710	6,257,830	5,143,490
<b>Costo total de operación [USD/año]</b>	3,773,180	3,621,060	2,372,440
<b>Costo total de los servicios auxiliares [USD/año]</b>	2,290,720	2,113,860	1,321,750
<b>Costo de equipos [USD]</b>	534,000	781,600	4,860,289
<b>Costo total de instalación [USD]</b>	1,646,800	2,013,600	941,600

3154

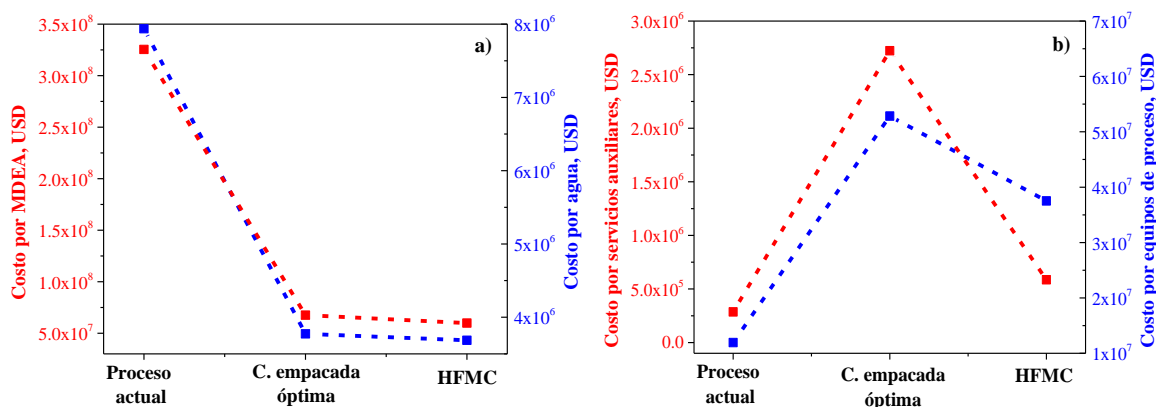
3155 La simulación de la planta con el proceso de absorción por HFMC óptimo muestra una  
 3156 disminución en el costo total de inversión y servicios auxiliares e instalación respecto a lo

3157 obtenido por la simulación de la planta actual, lo cual podría ser un indicativo de que puede ser  
 3158 una buena alternativa. Por otro lado, el costo de los equipos incrementó sustancialmente. Por  
 3159 ello, para tener mayor certeza en los costos y calcular un margen de ganancia neto se realizó  
 3160 nuevamente el cálculo de los costos mediante las ecuaciones descritas en la sección 4.4 con los  
 3161 valores unitarios y especificaciones de material de la sección 4.5. En la Tabla 5.15 se describe  
 3162 detalladamente los costos calculados de la planta actual frente a las alternativas propuestas de  
 3163 acuerdo con el método de factores de Lang. Analizando el costo de la materia prima se puede  
 3164 apreciar que el diseño actual de la planta es exigente en el consumo del solvente para la absorción,  
 3165 mientras que las alternativas presentan un mejor manejo y aprovechamiento de los recursos  
 3166 (Figura 5.28a). Esto se puede atribuir a que los parámetros óptimos de diseño y operación de los  
 3167 procesos de absorción mejoran su eficiencia. Además, se puede observar que en las alternativas  
 3168 planteadas se requieren menos servicios para la operación adecuada de la planta. Por otro lado,  
 3169 al calcular los costos, es notable que la adquisición de los equipos propuestos por los nuevos  
 3170 diseños es más costosa que el que se tiene actualmente, pero si se considera que estos equipos ya  
 3171 están instalados los costos por adquisición para la planta actual se consideran nulos (Figura  
 3172 5.28b). Respecto a la columna de absorción empacada óptima, los parámetros encontrados  
 3173 sugieren un mayor volumen lo que incremento sustancialmente el costo de la columna.

3174  
 3175 Tabla 5. 15. Comparación de costos calculados mediante el método de factores de las diferentes alternativas de la  
 3176 simulación de la planta de endulzamiento.

<b>Costos calculados [USD/año]</b>	<b>Simulación de planta en operación</b>	<b>Simulación de planta con absorción empacada óptima</b>	<b>Simulación de planta con HFMC óptimo</b>
<b>Materia prima</b>			
<b>MDEA</b>	345,567,288	49,406,400	43,230,600
<b>Agua de proceso</b>	7,654,985	4,027,971	3,919,837
<b>Costos de operación</b>			
<b>Servicios auxiliares</b>	2,290,720	2,113,860	1,321,750
<b>Mano de obra</b>	740,000	740,000	700,000
<b>Costos fijos de inversión</b>			
<b>Equipos de proceso</b>	17,476,978	64,641,929	23,279,858
<b>Dentro de límites de batería</b>	72,791,614	269,233,632	96,960,610
<b>Fuera de límites de batería</b>	21,837,484	80,770,090	29,088,183
<b>Diseño e ingeniería</b>	28,388,729	105,001,117	37,814,638
<b>Contingencias</b>	9,462,910	35,000,372	12,604,879

3177 Para la planta con el proceso de HFMC debido a que se requiere una numerosa cantidad de  
 3178 equipos para satisfacer la demanda los precios se elevaron por encima del valor que tendría la  
 3179 adquisición de los equipos actualmente instalados en planta, a pesar de que el diseño de la planta  
 3180 sugirió presidir de algunos de los equipos que se utilizaban para modificar las características de  
 3181 las corrientes de proceso. Debido a que los costos dentro y fuera de los límites de batería, los  
 3182 costos de diseño e ingeniería y los costos por contingencias dependen de los equipos que  
 3183 componen la planta se ve un incremento de estos costos en las propuestas. Donde existe menor  
 3184 diferencia entre la propuesta que contiene un proceso de absorción por HFMC con los costos de  
 3185 inversión actuales de la planta. No obstante, se puede observar que el aprovechamiento de los  
 3186 recursos es un factor crucial para la rentabilidad de las propuestas, mismas que son más  
 3187 significativas que los costos fijos de inversión, pues se pueden apreciar ahorros de más de 200  
 3188 MM USD.



3189  
 3190 Figura 5. 29. Costos asociados a los diferentes escenarios de análisis, a)costos de materia prima y b) costos fijos y  
 3191 de operación.  
 3192

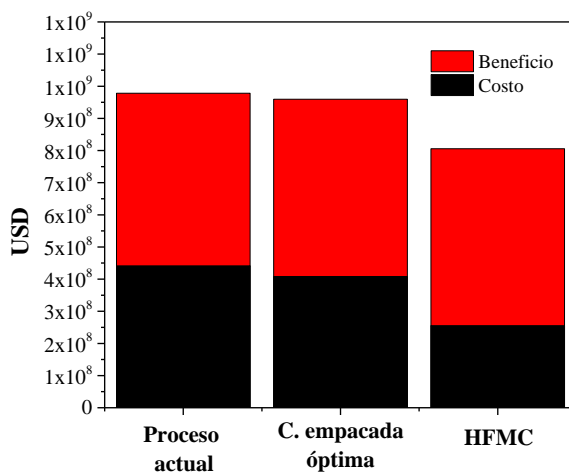
3193 Para calcular el costo total de la planta y las diferentes alternativas planteadas en esta  
 3194 investigación se propone un tiempo de amortización a 15 años para recuperar costos fijos de  
 3195 inversión. Se calcula el costo de venta de los productos de la planta para obtener el margen de  
 3196 ganancia. En la Tabla 5.16 se presentan los costos netos calculados que involucran a la inversión,  
 3197 operación con inflación y amortización y se muestran los beneficios que consideran las ganancias  
 3198 por la venta de los productos y los ahorros generados. En la Figura 5.29 se observa la  
 3199 comparación de costo-beneficio de los 3 escenarios: a) proceso actual, b) con una columna de  
 3200 absorción optimizada y controlada y c) sustituyendo la columna empacada con el HFMC.

3201

3202 Tabla 5. 16. Comparación de costos totales calculados considerando la inflación y un horizonte de amortización a  
 3203 15 años para las diferentes alternativas de la simulación de la planta de endulzamiento.

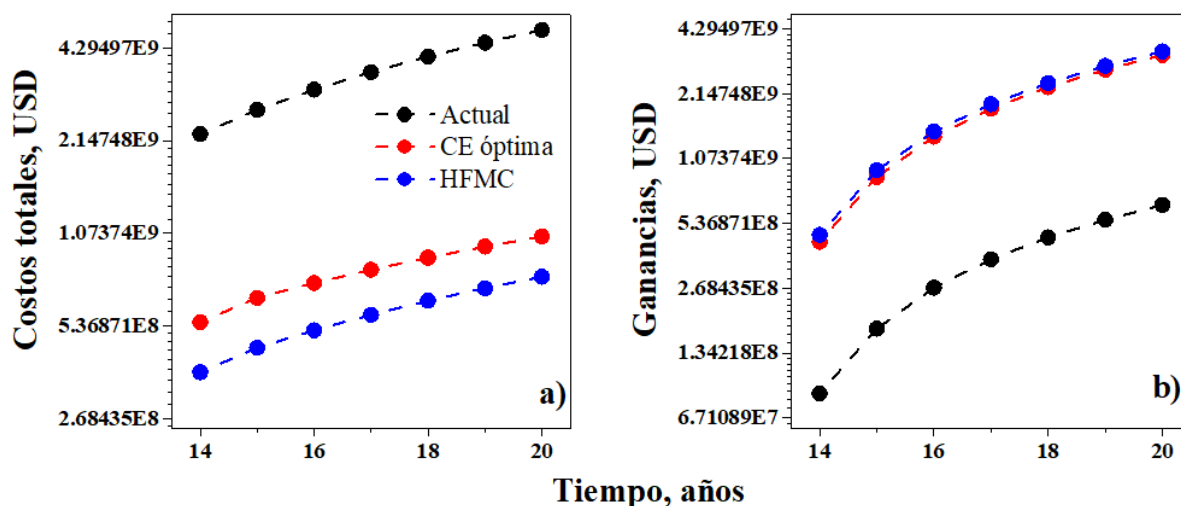
Costos calculados [USD/año]	Simulación de planta en operación	Simulación de planta con absorción empacada óptima	Simulación de planta con HFMC óptimo
<b>Costos netos</b>			
<b>Inversión con inflación</b>	-----	297,796,390	179,274,190
<b>Operativos con inflación</b>	441,167,458	77,247,300	64,017,726
<b>Inversión amortizada</b>	-----	33,186,426	11,951,613
<b>Costos totales</b>	441,167,458	408,230,116	255,243,529
<b>Beneficios netos</b>			
<b>Costo de gas húmedo dulce</b>	529,165,055	537,047,654	535,857,608
<b>Costo de gas amargo</b>	7,918,812	7,195,727	7,830,122
<b>Ahorros</b>	-----	7,159,513	6,603,863
<b>Beneficios totales</b>	537,083,867	551,402,894	550,291,593

3204  
 3205 Sumando los costos y beneficios cuantificables de cada escenario se puede diferenciar de color  
 3206 rojo los beneficios y de color negro los costos. Se observa que los costos operativos por el manejo  
 3207 de mayores volúmenes de materia prima elevan sustancialmente los costos de la planta actual,  
 3208 esto se ve reflejado en los costos totales donde se observa un menor costo en el proceso que  
 3209 presenta el proceso de absorción por HFMC. Respecto a los beneficios obtenidos por la venta del  
 3210 producto, se puede observar que las corrientes de las alternativas propuestas tienen mayor  
 3211 volumen y por lo tanto mayor beneficio.



3212  
 3213 Figura 5. 30. Costos y beneficios netos de los 3 escenarios para la mejora del proceso de gas natural.

3214 Entre las alternativas propuestas, se tiene mayores beneficios con la planta que presenta la  
 3215 columna de absorción empacada, sin embargo, sus costos de inversión y operación son más  
 3216 elevados que en la propuesta con el proceso HFMC. Esto hace evidente que el proceso integrando  
 3217 la nueva tecnología puede ser más redituable. En la Figura 5.30 se muestra una estimación de los  
 3218 costos y las ganancias acumuladas de la planta y las diferentes propuestas en un escenario a 5  
 3219 años posteriores de cubrir la inversión fija de los equipos. Como se puede observar, los costos de  
 3220 la planta actual se encuentran casi en un orden de magnitud mayor a los reportados por las  
 3221 alternativas propuestas. De ellas, la que integra el proceso de absorción con la tecnología de  
 3222 HFMC refleja menores costos a la planta (Figura 5.30a). Por otro lado, respecto a las ganancias  
 3223 acumuladas, en la Figura 5.30b se muestra que las ganancias actuales de la planta en un escenario  
 3224 a futuro son menores de las que se podrían obtener si se optara por realizar la mejora de la planta.  
 3225 Respecto a la comparación entre ambas propuestas, las ganancias son muy similares, aunque la  
 3226 planta con el proceso de HFMC muestra valores superiores. Lo anterior permite resaltar los  
 3227 beneficios que se pueden obtener con la mejora de la planta a largo plazo. Cabe señalar que es  
 3228 necesario considerar que el estudio de tipo 4 requiere de la cuantificación de un margen debido  
 3229 a que no se contabiliza en su totalidad las necesidades específicas de las operaciones  
 3230 involucradas. En ese sentido, se calculó el margen de ganancia para este tipo de estimado  
 3231 considerando los parámetros reportados en la Tabla 5.17.



3232  
 3233 Figura 5. 31. Estimación acumulada a 5 años posteriores de la inversión, a) costos totales, b) ganancias.  
 3234

3235 En la Tabla 5.17 se muestra que actualmente la planta presenta un margen de ganancia global de  
 3236 86.9 – 130.4 millones de dólares anuales que comparado con las alternativas propuestas queda

3237 fuera incluso del margen de ganancia inferior menor. Lo anterior sugiere que si pueden obtenerse  
 3238 beneficios económicos sustanciosos con cualquiera de las dos alternativas. La diferencia entre  
 3239 los márgenes de ganancia de las propuestas abordadas en esta investigación es de 23.7 – 50.8  
 3240 millones de dólares anuales, lo que significa que la mejora de la planta mediante la integración  
 3241 del proceso HFMC es la mejor alternativa. Finalmente, el cálculo del valor costo-beneficio para  
 3242 las diferentes alternativas es 1.2174, 1.3507 y 2.1559, que corresponden a la planta actual, la  
 3243 planta que integra el proceso de absorción óptimo y la planta que integra el proceso de HFMC.  
 3244 Lo anterior indica que, en definitiva, la alternativa mediante el cambio del proceso de absorción  
 3245 actual con proceso propuesto óptimo de HFMC presenta mayores beneficios y se puede  
 3246 considerar rentable para su aplicación. De los costos y ahorros generados por las alternativas  
 3247 propuestas en esta investigación, de acuerdo con los resultados se tiene que la alternativa de  
 3248 optimizar el proceso de absorción empacado puede traer una reducción de costos globales del  
 3249 10% aproximadamente. Por otra parte, la sustitución del equipo de absorción empacado por una  
 3250 tecnología de HFMC muestra una reducción de costos del 44%, del cual es posible que aún falte  
 3251 tomar en cuenta algunas consideraciones respecto al manejo de las membranas. Considerando un  
 3252 error del 20% en los cálculos obtenidos se puede decir que la alternativa podría reducir en un  
 3253 35% los costos actuales de la planta.

3254

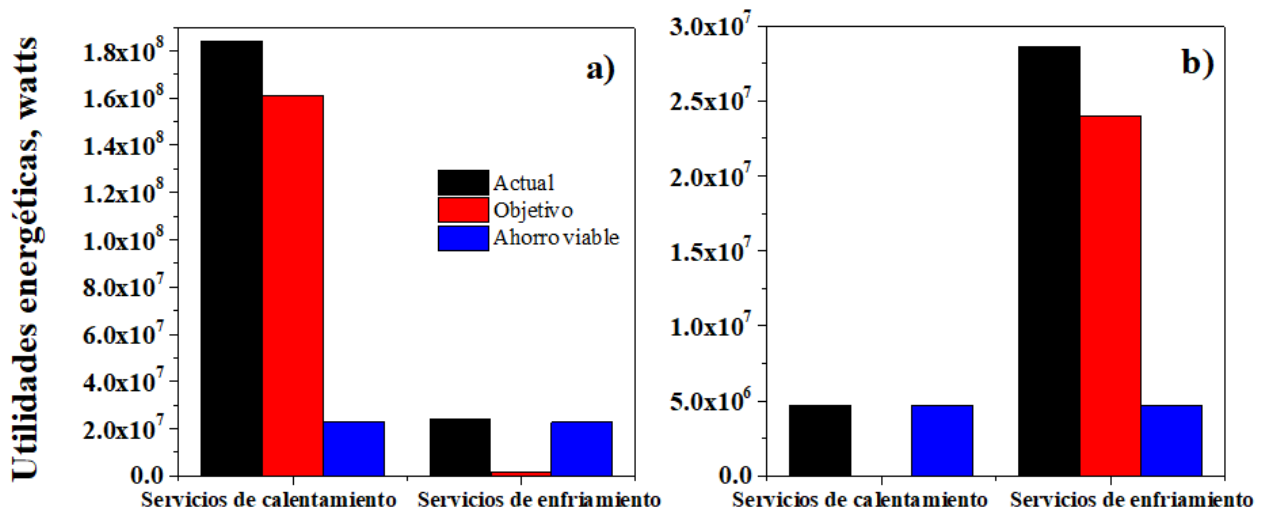
3255 Tabla 5. 17. Comparación del margen de ganancia para un estudio de clase 4 para las diferentes alternativas de la  
 3256 simulación de la planta de endulzamiento.

Costos calculados [USD/año]	Simulación de planta en operación	Simulación de planta con absorción empacada óptima	Simulación de planta con HFMC óptimo
<b>Costos netos</b>			
<b>Valor base</b>	86,943,929	433,809,654	467,718,392
<b>Límite inferior menor</b>	60,860,751	303,666,758	327,402,874
<b>Límite inferior mayor</b>	73,902,340	368,738,206	397,560,633
<b>Límite superior menor</b>	104,332,715	520,571,585	561,262,070
<b>Límite superior mayor</b>	130,415,894	650,714,481	701,577,588

3257

3258 Con la finalidad de aportar información relevante de la energía requerida para operar la planta y  
 3259 sus diferentes alternativas se generó un gráfico en Aspen-Plus que permite analizar las  
 3260 posibilidades de un ahorro energético mediante el aprovechamiento de las utilidades. En la Figura  
 3261 5.31 se muestra que es posible generar un ahorro en las utilidades si se propone una integración

3262 energética en los equipos de la planta. En el caso de la planta que integra el HFMC, se pueden  
 3263 reducir las utilidades de calentamiento en un 12.37% y las utilidades de enfriamiento en un  
 3264 93.86%. Eso significa que es posible reducir el gasto energético en un 27% de acuerdo con lo  
 3265 arrojado por el software. Por otro lado, en la planta con el proceso de absorción óptimo es posible  
 3266 reducir las utilidades de calentamiento en un 98% y las utilidades de enfriamiento en un 16.29%.  
 3267 Esto significaría la reducción del gasto energético en un 29%. Lo anterior sugiere que es posible  
 3268 incrementar la relación costo-beneficio de las propuestas planteadas, lo cual permite asegurar  
 3269 que la implementación de estrategias de optimización y control en el proceso de absorción de  
 3270 CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S mejora significativamente el aprovechamiento de los recursos, la disminución en el  
 3271 uso de servicios auxiliares y el incremento en las ganancias netas.



3272  
 3273 Figura 5. 32. Ahorros energéticos disponibles mediante el aprovechamiento de las utilidades, a) planta con HFMC  
 3274 óptima, b) planta con columna de absorción empacada óptima  
 3275

3276  
 3277  
 3278  
 3279  
 3280

---

## *CAPÍTULO VI: Conclusiones y perspectivas*

---

3281

3282

3283

3284 En este trabajo se presentó un estudio de ingeniería de procesos en equipos de absorción  
3285 empacados y de HFMC para la captura de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S de una planta industrial de procesamiento  
3286 de gas natural en operación. Esto con la finalidad de identificar puntos de mejora donde la  
3287 relación costo-beneficio sea mayor. Este caso de estudio fue seleccionado debido a su  
3288 importancia en el desarrollo de fuentes de energía más eficientes y amigables con el ambiente,  
3289 donde la teoría de optimización y control robusta no ha sido abordada en la literatura desde el  
3290 punto de vista de la influencia de los procesos en los productos finales de la planta.

3291

### **Conclusiones:**

3292 La propuesta es desarrollada planteando dos escenarios distintos a la operación actual de la planta,  
3293 integrando una columna de absorción empacada óptima y al paralelo integrando un proceso de  
3294 absorción HFMC óptimo. Algunos aspectos que resaltar de la investigación son los siguientes:  
3295

- 3296 • Los modelos tomados de la literatura presentaron buenas aproximaciones para los casos  
3297 particulares de absorción, donde se facilitó la búsqueda de parámetros cinéticos y de  
3298 transporte mediante la comparación con softwares especializados. Las aproximaciones  
3299 encontradas frente a los datos de planta son menores o iguales al 5%, validando así la  
3300 simulación de la planta de endulzamiento y los modelos de los procesos de absorción.
- 3301 • Para el análisis de esta planta en particular, se encontró que, en los procesos de absorción,  
3302 la transferencia de masa es dominada por el proceso convectivo en la fase gas. Esto se  
3303 atribuye a las condiciones de alimentación, pues la velocidad de la fase gas es superior a  
3304 la velocidad de la fase líquida para los procesos de absorción empacado y de HFMC.
- 3305 • La búsqueda de los valores óptimos de diseño, operación y control de forma simultánea,  
3306 para reducir el CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S de la corriente de gas natural, mediante el método de punto  
3307 interior no lineal, permitió acoplar los balances de materia de los equipos como  
3308 restricciones, facilitando la identificación de límites físicos en las variables de decisión.

- 3309
- 3310
- 3311
- 3312
- 3313
- 3314
- 3315
- 3316
- 3317
- 3318
- 3319
- 3320
- 3321
- 3322
- 3323
- 3324
- 3325
- 3326
- 3327
- 3328
- 3329
- 3330
- 3331
- 3332
- 3333
- 3334
- 3335
- 3336
- 3337
- 3338
- Los parámetros de diseño encontrados mediante la estrategia de optimización para la columna empacada son  $T = 366$  K,  $Q_L = 55.42$  m<sup>3</sup>/ h,  $d = 2.72$  m,  $L = 32.7$  m, reduciendo en 82.4% el CO<sub>2</sub> y en 68.5% el H<sub>2</sub>S. Para el proceso de HFMC los parámetros óptimos encontrados son  $T = 343.6$  K,  $Q_L = 53.26$  m<sup>3</sup>/ h,  $r = 0.05$  m,  $L = 2.61$  m y  $f = 3600$ , reduciendo en 94% el CO<sub>2</sub> y en 74% el H<sub>2</sub>S.
  - En general, los esquemas de control basados en modelo permitieron regular la concentración de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S a una referencia de 10 kmol/m<sup>3</sup> de CO<sub>2</sub> y  $1 \times 10^{-7}$  kmol/m<sup>3</sup> de H<sub>2</sub>S frente a cambios de referencia, perturbaciones externas e incertidumbres del modelo. Por lo tanto, las propuestas de control son alternativas adecuadas para controlar la absorción en el endulzamiento de gas natural.
  - Se sugiere la aplicación del control MEC para el control de ambos procesos de absorción en base a sus características que permiten una fácil implementación y sintonizado con un alto grado de robustez. La comparación frente los esquemas de control PI, NMPC y SMC demuestran que el esquema de control propuesto es una buena alternativa para sistemas de purificación y reacción con respuestas menores a 5 h.
  - La estrategia de acoplamiento de softwares permitió integrar la simulación del HFMC a la planta de endulzamiento de gas. Es importante señalar que el acoplamiento conlleva la solución, optimización y control de los modelos de absorción. Esta metodología puede ser extendida para el estudio de diferentes procesos novedosos y de gran importancia para la disminución de contaminantes en la industria química.
  - De acuerdo con los resultados obtenidos, las alternativas propuestas a la operación actual de la planta presentan mayores beneficios, donde la sustitución de la columna empacada por el sistema de HFMC representa una reducción del 44% y el 27% en costos y gasto energético, respectivamente.
  - Se demuestra que la mejora del proceso de absorción repercute de manera significativa en el aprovechamiento de los reactivos y la obtención de productos de valor agregado. Por lo que la relación costo-beneficio se favorece y se puede recuperar la inversión por la adquisición y mantenimiento de los equipos óptimos en menos de 15 años.

3339 **Perspectivas:**

3340 A pesar de los resultados obtenidos en la investigación, siempre es importante señalar que se  
3341 pueden atender ciertos escenarios no contemplados en el trabajo. Para continuar con el desarrollo  
3342 de esta investigación se propone el planteamiento de los siguientes enfoques:

- 3343 • Mejorar la rigurosidad de la investigación mediante un modelo que involucre el efecto de  
3344 la temperatura en el rendimiento del proceso de HFMC. Esto con la finalidad proponer  
3345 nuevos límites de diseño para la formulación de las funciones objetivo en la optimización  
3346 de la operación.
- 3347 • Robustecer el planteamiento de optimización en los procesos de absorción considerando  
3348 una variable dentro de la función objetivo que esté relacionada con los costos de los  
3349 equipos. Esto permitiría obtener rangos de diseño que mejoren directamente la relación  
3350 costo-beneficio de la planta.
- 3351 • Mejorar la descripción del análisis de costos considerando algunos conceptos como el  
3352 IVA, el ISR o IEPS que permitan una mayor aproximación del costo-beneficio en las  
3353 propuestas de mejora a la planta de endulzamiento de gas natural.
- 3354 • Proponer un diseño de control robusto MEC que este basado en la respuesta de los  
3355 procesos de absorción mediante el análisis de sus funciones de transferencia. Esta  
3356 aplicación podría mejorar los diseños de los esquemas propuestos, facilitando su  
3357 aplicación y reduciendo el costo computacional.
- 3358 • Buscar la implementación de las técnicas de control basadas en modelo en equipos a nivel  
3359 laboratorio y planta piloto. Lo anterior permitiría estudios más profundos para el análisis  
3360 de las respuestas del proceso y la validación de propuestas para el sintonizado.
- 3361 • Extender las ideas planteadas en esta investigación a otras plantas de procesamiento de  
3362 gases para la captura y aprovechamiento de CO<sub>2</sub>. Esto con la finalidad de contribuir en la  
3363 generación de conocimiento de frontera para la futura implementación de procesos y  
3364 plantas más eficientes.
- 3365 • De implementarse alguna de las propuestas planteadas en esta investigación, puede  
3366 incrementarse la producción de la planta de endulzamiento, así como el ahorro de recursos  
3367 y la obtención de beneficios económicos sustanciosos, beneficiando al posicionamiento  
3368 del gas natural como una mejor alternativa para la producción de energía.

- 3371 1. Abdulrahman, R., & Sebastine, I. (2013). Natural gas sweetening process simulation and optimization: A case  
3372 study of Khurmala field in Iraqi Kurdistan region. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 14, 116-  
3373 120.
- 3374 2. Abejón, R., Casado-Coterillo, C., & Garea, A. (2022). Techno-economic optimization of multistage membrane  
3375 processes with innovative hollow fiber modules for the production of high-purity CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> from different  
3376 sources. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 61(23), 8149-8165.
- 3377 3. Abkhiz, V., & Heydari, I. (2014). Comparison of amine solutions performance for gas sweetening. *Asia-Pacific*  
3378 *Journal of Chemical Engineering*, 9(5), 656-662.
- 3379 4. Afkhamipour, M., & Mofarahi, M. (2017). Review on the mass transfer performance of CO<sub>2</sub> absorption by  
3380 amine-based solvents in low-and high-pressure absorption packed columns. *RSC advances*, 7(29), 17857-  
3381 17872.
- 3382 5. Aghajanian, S., Ruuskanen, V., Nieminen, H., Laari, A., Honkanen, M., & Koironen, T. (2022). Real-time  
3383 monitoring and insights into process control of micron-sized calcium carbonate crystallization by an in-line  
3384 digital microscope camera. *Chemical Engineering Research and Design*, 177, 778-788.
- 3385 6. Agrahari, G. K., Shukla, S. K., Verma, N., & Bhattacharya, P. K. (2012). Model prediction and experimental  
3386 studies on the removal of dissolved NH<sub>3</sub> from water applying hollow fiber membrane contactor. *Journal of*  
3387 *Membrane Science*, 390, 164-174.
- 3388 7. Ahmad, F., Lau, K. K., Shariff, A. M., & Murshid, G. (2012). Process simulation and optimal design of  
3389 membrane separation system for CO<sub>2</sub> capture from natural gas. *Computers & Chemical Engineering*, 36, 119-  
3390 128.
- 3391 8. Al-Marzouqi, M. H., El-Naas, M. H., Marzouk, S. A., Al-Zarooni, M. A., Abdullatif, N., & Faiz, R. (2008).  
3392 Modeling of CO<sub>2</sub> absorption in membrane contactors. *Separation and Purification Technology*, 59(3), 286-  
3393 293.
- 3394 9. Al-Marzouqi, M. H., Marzouk, S. A., & Abdullatif, N. (2017). High pressure removal of acid gases using  
3395 hollow fiber membrane contactors: Further characterization and long-term operational stability. *Journal of*  
3396 *Natural Gas Science and Engineering*, 37, 192-198.
- 3397 10. Alvarez-Ramírez, J. (1999). Adaptive control of feedback linearizable systems: a modelling error  
3398 compensation approach. *International Journal of Robust and Nonlinear Control: IFAC-Affiliated Journal*,  
3399 9(6), 361-377.
- 3400 11. Alvarez-Ramírez, J., Alvarez, J., & Morales, A. (2002). An adaptive cascade control for a class of chemical  
3401 reactors. *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing*, 16(10), 681-701.
- 3402 12. Arora, J. S., Huang, M. W., & Hsieh, C. C. (1994). Methods for optimization of nonlinear problems with  
3403 discrete variables: a review. *Structural optimization*, 8, 69-85.
- 3404 13. Arunabha, B., Ajay, M., S James, Z., & Howard S, M. (2013). Economic Evaluation of the UCSRP-HP Process  
3405 in IGCC Applications. *International Journal of Clean Coal and Energy*, 2013.
- 3406 14. Awadallah, M. A., and Venkatesh, B. (2019). Energy storage in distribution system planning and operation:  
3407 current status and outstanding challenges. *Canadian Journal of Electrical and Computer Engineering*, 42(1),  
3408 10-19.
- 3409 15. Bakeri, G., Matsuura, T., Ismail, A. F., & Rana, D. (2012). A novel surface modified polyetherimide hollow  
3410 fiber membrane for gas-liquid contacting processes. *Separation and purification technology*, 89, 160-170.
- 3411 16. Bakhshizade, M. (2023). Modeling and simulation of natural gas sweetening process by methyldiethanolamine  
3412 (MDEA) absorbent in the hollow fiber membrane contactor using COMSOL software. *Iranian Chemical*  
3413 *Engineering Journal*.
- 3414 17. Bandyopadhyay, S. S., & Mandal, B. P. (2004). Simultaneous Absorption of Carbon Dioxide and Hydrogen  
3415 Sulfide into Aqueous Solutions of Diethanolamine. *In Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering*

- 3416 congress program and abstracts Asian Pacific Confederation of Chemical Engineers congress program and  
 3417 abstracts (pp. 185-185). The Society of Chemical Engineers, Japan.
- 3418 18. Bartolome, P. S., & Van Gerven, T. (2022). A comparative study on Aspen Hysys interconnection  
 3419 methodologies. *Computers & Chemical Engineering*, 162, 107785.
- 3420 19. Ben-Mansour, R., Habib, M. A., Bamidele, O. E., Basha, M., Qasem, N. A. A., Peedikakkal, A., and Ali, M.  
 3421 (2016). Carbon capture by physical adsorption: materials, experimental investigations and numerical modeling  
 3422 and simulations—a review. *Applied Energy*, 161, 225-255.
- 3423 20. Bequette, B. W. (2003). Process control: modeling, design, and simulation. *Prentice Hall Professional*.
- 3424 21. Bernhardsen, I. M., & Knuutila, H. K. (2017). A review of potential amine solvents for CO<sub>2</sub> absorption process:  
 3425 Absorption capacity, cyclic capacity and pKa. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 61, 27-48.
- 3426 22. Berstad, D., Anantharaman, R., & Nekså, P. (2013). Low-temperature CO<sub>2</sub> capture technologies—Applications  
 3427 and potential. *International Journal of Refrigeration*, 36(5), 1403-1416.
- 3428 23. Biegler, L. T. (2003). Optimization of Chemical Processes. American Institute of Chemical Engineers. *AIChE*  
 3429 *Journal*, 49(1), 286.
- 3430 24. Boardman, A. E., Greenberg, D. H., Vining, A. R., & Weimer, D. L. (2020). Efficiency without apology:  
 3431 consideration of the marginal excess tax burden and distributional impacts in benefit–cost analysis. *Journal of*  
 3432 *Benefit-Cost Analysis*, 11(3), 457-478.
- 3433 25. Borhani, T. N. G., Afkhamipour, M., Azarpour, A., Akbari, V., Emadi, S. H., & Manan, Z. A. (2016). Modeling  
 3434 study on CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S simultaneous removal using MDEA solution. *Journal of industrial and engineering*  
 3435 *chemistry*, 34, 344-355.
- 3436 26. Borrelli, F., Bemporad, A., Fodor, M., & Hrovat, D. (2006). An MPC/hybrid system approach to traction  
 3437 control. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 14(3), 541-552.
- 3438 27. Brunetti, A., Scura, F., Barbieri, G., & Drioli, E. (2010). Membrane technologies for CO<sub>2</sub> separation. *Journal*  
 3439 *of Membrane Science*, 359(1-2), 115-125.
- 3440 28. Bui, M., Gunawan, I., Verheyen, V., Feron, P., & Meuleman, E. (2016). Flexible operation of CSIRO's post-  
 3441 combustion CO<sub>2</sub> capture pilot plant at the AGL Loy Yang power station. *International Journal of Greenhouse*  
 3442 *Gas Control*, 48, 188-203.
- 3443 29. Buzzi-Ferraris, G., & Manenti, F. (2010). Fundamentals and linear algebra for the chemical engineer: Solving  
 3444 numerical problems. *John Wiley & Sons*.
- 3445 30. Byrd, R. H., Gilbert, J. C., & Nocedal, J. (2000). A trust region method based on interior point techniques for  
 3446 nonlinear programming. *Mathematical programming*, 89, 149-185.
- 3447 31. Canadell, J. G., Le Quééré, C., Raupach, M. R., Field, C. B., Buitenhuis, E. T., Ciais, P., & Marland, G. (2007).  
 3448 Contributions to accelerating atmospheric CO<sub>2</sub> growth from economic activity, carbon intensity, and efficiency  
 3449 of natural sinks. *Proceedings of the national academy of sciences*, 104(47), 18866-18870.
- 3450 32. Candotti, K., Mavares, D., & Velásquez, R. (2014). Comparación de métodos metaheurísticos de optimización:  
 3451 recocido simulado, algoritmos genéticos y búsqueda del cuco. *Universidad, Ciencia y Tecnología*, 18(71), 004-  
 3452 010.
- 3453 33. Cavaignac, R. S., Ferreira, N. L., & Guardani, R. (2021). Techno-economic and environmental process  
 3454 evaluation of biogas upgrading via amine scrubbing. *Renewable Energy*, 171, 868-880.
- 3455 34. CCSI (2018). The Global Status of CCS. *Global CCS Institute*.
- 3456 35. Chaves, I. D. G., López, J. R. G., Zapata, J. L. G., Robayo, A. L., & Niño, G. R. (2016). Process analysis and  
 3457 simulation in chemical engineering. *Cham: Springer*.
- 3458 36. Chien, I. L., Peng, S. C., & Liu, J. H. (2002). Simple control method for integrating processes with long  
 3459 deadtime. *Journal of Process Control*, 12(3), 391-404.
- 3460 37. Christofides, P. D., & El-Farra, N. (2005). Control of nonlinear and hybrid process systems: Designs for  
 3461 uncertainty, constraints and time-delays (Vol. 324). *Springer Science & Business Media*.
- 3462 38. Chu, F., Yang, L., Du, X., & Yang, Y. (2016). CO<sub>2</sub> capture using MEA (monoethanolamine) aqueous solution  
 3463 in coal-fired power plants: Modeling and optimization of the absorbing columns. *Energy*, 109, 495-505.

- 3464 39. Chu, G. W., Luo, Y., Shan, C. Y., Zou, H. K., Xiang, Y., Shao, L., & Chen, J. F. (2014). Absorption of SO<sub>2</sub>  
3465 with ammonia-based solution in a cocurrent rotating packed bed. *Industrial & Engineering Chemistry*  
3466 *Research*, 53(40), 15731-15737.
- 3467 40. Cleland, F. A., & Wilhelm, R. H. (1956). Diffusion and reaction in viscous-flow tubular reactor. *AIChE*  
3468 *Journal*, 2(4), 489-497.
- 3469 41. Coda, F. E., Pujol, R. O., & Alarcón, J. A. S. (2006). Planta para la recuperación del dióxido de carbono de los  
3470 gases de combustión. *Técnica industrial*, (261), 34-41.
- 3471 42. CONAGUA. (2022). Consulta a la Base de Datos del Registro Público de Derechos de Agua (REPDa).
- 3472 43. Cui, Z., and deMontigny, D. (2013). Part 7: A review of CO<sub>2</sub> capture using hollow fiber membrane  
3473 contactors. *Carbon Management*, 4(1), 69-89.
- 3474 44. Dai, Z., Usman, M., Hillestad, M., & Deng, L. (2016). Modelling of a tubular membrane contactor for pre-  
3475 combustion CO<sub>2</sub> capture using ionic liquids: Influence of the membrane configuration, absorbent properties  
3476 and operation parameters. *Green Energy & Environment*, 1(3), 266-275.
- 3477 45. Dashti, S. S., Shariati, A., & Khosravi, M. R. (2015). Sensitivity analysis for selection of an optimum amine  
3478 gas sweetening process with minimum cost requirement. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 10,  
3479 709-715.
- 3480 46. De Riva, J., Ferro, V., Moya, C., Stadtherr, M. A., Brennecke, J. F., & Palomar, J. (2018). Aspen Plus supported  
3481 analysis of the post-combustion CO<sub>2</sub> capture by chemical absorption using the [P2228][CNPyr] and  
3482 [P66614][CNPyr] AHA Ionic Liquids. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 78, 94-102.
- 3483 47. Dechezleprêtre, A., & Sato, M. (2017). The impacts of environmental regulations on competitiveness. *Review*  
3484 *of Environmental Economics and Policy*, 11(2), 183-206.
- 3485 48. Dobre, T. G., & Marcano, J. G. S. (2007). Chemical engineering: Modeling, simulation and similitude. *John*  
3486 *Wiley & Sons*.
- 3487 49. Drioli, E., Stankiewicz, A. I., & Macedonio, F. (2011). Membrane engineering in process intensification—An  
3488 overview. *Journal of Membrane Science*, 380(1-2), 1-8.
- 3489 50. Drury, C. M. (2013). Management and cost accounting. *Springer*.
- 3490 51. Dudley, B. (2018). BP statistical review of world energy. *BP Statistical Review*, London, UK.
- 3491 52. Dysert, L. R., & Christesen, P. (2016). AACE International Recommended Practice No. 18R-97. Cost Estimate  
3492 Classification System—As applied in engineering, procurement, and construction for the process industries-*TCM*  
3493 *Framework*.
- 3494 53. Edgar, T. F., Himmelblau, D. M., & Lasdon, L. S. (2001). Optimization of chemical processes. *Mc-Grall-Hill*.
- 3495 54. Ellaf, A., Taqvi, S. A. A., Zaeem, D., Siddiqui, F. U. H., Kazmi, B., Idris, A., Mushab, M. S. S. (2023). Energy,  
3496 exergy, economic, environment, exergo-environment based assessment of amine-based hybrid solvents for  
3497 natural gas sweetening. *Chemosphere*, 313, 137426.
- 3498 55. Erikoi, L. (2012). Comparison of Aspen HYSYS and Aspen Plus simulation of CO<sub>2</sub> absorption into MEA from  
3499 atmospheric gas. *Energy Procedia*, 23, 360-369.
- 3500 56. Eslami, S., Mousavi, S. M., Danesh, S., & Banazadeh, H. (2011). Modeling and simulation of CO<sub>2</sub> removal  
3501 from power plant flue gas by PG solution in a hollow fiber membrane contactor. *Advances in Engineering*  
3502 *Software*, 42(8), 612-620.
- 3503 57. Faber, R., Köpcke, M., Biede, O., Knudsen, J. N., & Andersen, J. (2011). Open-loop step responses for the  
3504 MEA post-combustion capture process: Experimental results from the Esbjerg pilot plant. *Energy Procedia*, 4,  
3505 1427-1434.
- 3506 58. Faiz, R., Li, K., & Al-Marzouqi, M. (2014). H<sub>2</sub>S absorption at high pressure using hollow fibre membrane  
3507 contactors. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 83, 33-42.
- 3508 59. Faramawy, S., Zaki, T., & Sakr, A. E. (2016). Natural gas origin, composition, and processing: A review.  
3509 *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 34, 34-54.
- 3510 60. Feron, P. H. M., & Jansen, A. E. (1995). Capture of carbon dioxide using membrane gas absorption and reuse  
3511 in the horticultural industry. *Energy conversion and management*, 36(6-9), 411-414.
- 3512 61. Flø, N. E., Faramarzi, L., de Cazenove, T., Hvidsten, O. A., Morken, A. K., Hamborg, E. S., & Fostås, B. F.  
3513 (2017). Results from MEA degradation and reclaiming processes at the CO<sub>2</sub> Technology Centre  
3514 Mongstad. *Energy Procedia*, 114, 1307-1324.

- 3515 62. Fougerit, V., Pozzobon, V., Pareau, D., Théoleyre, M. A., & Stambouli, M. (2019). Experimental and  
3516 numerical investigation binary mixture mass transfer in a gas-Liquid membrane contactor. *Journal of*  
3517 *membrane science*, 572, 1-11.
- 3518 63. Fuller, E. N., & Giddings, J. C. (1965). A comparison of methods for predicting gaseous diffusion coefficients.  
3519 *Journal of Chromatographic Science*, 3(7), 222-227.
- 3520 64. Gao, W., Zhou, T., Gao, Y., Louis, B., O'Hare, D., & Wang, Q. (2017). Molten salts-modified MgO-based  
3521 adsorbents for intermediate-temperature CO<sub>2</sub> capture: A review. *Journal of energy chemistry*, 26(5), 830-838.
- 3522 65. Garrido, E., Gonzalez, C., & Orcos, R. (2020). ISO 14001 and CO<sub>2</sub> emissions: An analysis of the contingent  
3523 role of country features. *Business Strategy and the Environment*, 29(2), 698-710.
- 3524 66. Gáspár, J., & Cormoş, A. M. (2011). Dynamic modeling and validation of absorber and desorber columns for  
3525 post-combustion CO<sub>2</sub> capture. *Computers & Chemical Engineering*, 35(10), 2044-2052.
- 3526 67. Geankoplis, C. J. (1998). Transport processes of multiple unitary operations. México: CECOSA.
- 3527 68. Goli, A., Shamiri, A., Talaiekhozani, A., Eshtiaghi, N., Aghamohammadi, N., & Aroua, M. K. (2016). An  
3528 overview of biological processes and their potential for CO<sub>2</sub> capture. *Journal of environmental*  
3529 *management*, 183, 41-58.
- 3530 69. Gondzio, J. (1996). Multiple centrality corrections in a primal-dual method for linear  
3531 programming. *Computational optimization and applications*, 6(2), 137-156.
- 3532 70. Goto, K., Yogo, K., & Higashii, T. (2013). A review of efficiency penalty in a coal-fired power plant with post-  
3533 combustion CO<sub>2</sub> capture. *Applied Energy*, 111, 710-720.
- 3534 71. Grainger, D., & Hägg, M. B. (2008). Techno-economic evaluation of a PVAm CO<sub>2</sub>-selective membrane in an  
3535 IGCC power plant with CO<sub>2</sub> capture. *Fuel*, 87(1), 14-24.
- 3536 72. Gürsan, C., & de Gooyert, V. (2020). The systemic impact of a transition fuel: Does natural gas help or hinder  
3537 the energy transition?. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 138, 110552.
- 3538 73. Guthrie, K. M. (1974). Process plant estimating, evaluation, and control. Craftsman Book Company of  
3539 America. *ISO 690*.
- 3540 74. Gutierrez, J. P., Tarifa, E. E., & Erdmann, E. (2018). Steady-state energy optimization and transition  
3541 assessment in a process of CO<sub>2</sub> absorption from natural gas. *Energy*, 159, 1016-1023.
- 3542 75. Harris, F., Kurnia, K. A., Mutalib, M. I. A., & Thanapalan, M. (2009). Solubilities of carbon dioxide and  
3543 densities of aqueous sodium glycinate solutions before and after CO<sub>2</sub> absorption. *Journal of Chemical &*  
3544 *Engineering Data*, 54(1), 144-147.
- 3545 76. Hassanpour, H., Corbett, B., & Mhaskar, P. (2022). Artificial neural network based model predictive control:  
3546 Implementing achievable set-points. *AIChE Journal*, 68(1), e17436.
- 3547 77. Haydary, J. (2019). Chemical process design and simulation: Aspen Plus and Aspen Hysys applications. *John*  
3548 *Wiley & Sons*.
- 3549 78. He, X., Kumakiri, I., & Hillestad, M. (2020). Conceptual process design and simulation of membrane systems  
3550 for integrated natural gas dehydration and sweetening. *Separation and Purification Technology*, 247, 116993.
- 3551 79. Hemmati, A., & Rashidi, H. (2019). Mass transfer investigation and operational sensitivity analysis of amine-  
3552 based industrial CO<sub>2</sub> capture plant. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 27(3), 534-543.
- 3553 80. Henson, M. A., & Seborg, D. E. (1997). Nonlinear process control (pp. 5-8). Upper Saddle River, New Jersey:  
3554 *Prentice Hall PTR*.
- 3555 81. Herzog, H., & Falk-Pedersen, O. (2000). The Kvaerner membrane contactor: lessons from a case study in how  
3556 to reduce capture costs. In *Fifth International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies*, Cairns,  
3557 Australia, August.
- 3558 82. Hidalgo, D., Sanz-Bedate, S., Martín-Marroquín, J. M., Castro, J., & Antolín, G. (2020). Selective separation  
3559 of CH<sub>4</sub> and CO<sub>2</sub> using membrane contactors. *Renewable Energy*, 150, 935-942.
- 3560 83. Hoff, K. A., & Svendsen, H. F. (2013). CO<sub>2</sub> absorption with membrane contactors vs. packed absorbers-  
3561 Challenges and opportunities in post combustion capture and natural gas sweetening. *Energy Procedia*, 37,  
3562 952-960.
- 3563 84. Hoorfar, M., Alcheikhhamdon, Y., & Chen, B. (2018). A novel tool for the modeling, simulation and costing  
3564 of membrane-based gas separation processes using Aspen HYSYS: Optimization of the CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> separation  
3565 process. *Computers and Chemical Engineering*, 117, 11-24.

- 3566 85. Hopkinson, D., Luebke, D., Li, Z., & Chen, S. (2014). Solvent optimization of conventional absorption  
3567 processes for CO<sub>2</sub> capture from postcombustion flue gases. *Industrial & Engineering Chemistry*  
3568 *Research*, 53(17), 7149-7156.
- 3569 86. Houlker, S., Davey, C. J., Allemand, A., Brookes, A., Moore, A., Vale, P., ... & McAdam, E. J. (2021).  
3570 Reconciliation of gas to liquid mass transfer in parallel and transverse flow (cross-flow) hollow fiber membrane  
3571 contactors (HFMC) for CO<sub>2</sub> absorption. *Separation Science and Technology*, 56(1), 129-140.
- 3572 87. Huang, Y. J., Kuo, T. C., & Chang, S. H. (2008). Adaptive sliding-mode control for nonlinear systems with  
3573 uncertain parameters. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B (Cybernetics)*, 38(2), 534-  
3574 539.
- 3575 88. Huttenhuis, P. J. G., Agrawal, N. J., Hogendoorn, J. A., & Versteeg, G. F. (2007). Gas solubility of H<sub>2</sub>S and  
3576 CO<sub>2</sub> in aqueous solutions of N-methyldiethanolamine. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 55(1-  
3577 2), 122-134.
- 3578 89. Ilea, F., Cristea, V. M., & Cormos, A. M. (2021). Control of the CO<sub>2</sub> Capture Using the Absorption and  
3579 Stripping System for Improved Performance. *Chemical Engineering Transactions*, 88, 259-264.
- 3580 90. Imtiaz, A., Othman, M. H. D., Jilani, A., Khan, I. U., Kamaludin, R., Ayub, M., & Puteh, M. H. (2023). A  
3581 critical review in recent progress of hollow fiber membrane contactors for efficient CO<sub>2</sub> separations.  
3582 *Chemosphere*, 325, 138300.
- 3583 91. Islam, S. Z., Arifuzzaman, M., Rother, G., Bocharova, V., Sacci, R. L., Jakowski, J., & Sholl, D. S. (2023). A  
3584 Membrane Contactor Enabling Energy-Efficient CO<sub>2</sub> Capture from Point Sources with Deep Eutectic  
3585 Solvents. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 62(10), 4455-4465.
- 3586 92. Itef, F., Al-Samir, S., Öberg, F., Chami, M., Kumar, M., Supuran, C. T. & Endeward, V. (2012). CO<sub>2</sub>  
3587 permeability of cell membranes is regulated by membrane cholesterol and protein gas channels. *The FASEB*  
3588 *Journal*, 26(12), 5182-5191.
- 3589 93. Jassim, M. S. (2016). Sensitivity analyses and optimization of a gas sweetening plant for hydrogen sulfide and  
3590 carbon dioxide capture using methyldiethanolamine solutions. *Journal of Natural Gas Science and*  
3591 *Engineering*, 36, 175-183.
- 3592 94. Ji, Y., Zhang, M., Guan, K., Zhao, J., Liu, G., & Jin, W. (2019). High-Performance CO<sub>2</sub> Capture through  
3593 Polymer-Based Ultrathin Membranes. *Advanced Functional Materials*, 29(33), 1900735.
- 3594 95. Jin, H. G., Han, S. H., Lee, Y. M., & Yeo, Y. K. (2011). Modeling and control of CO<sub>2</sub> separation process with  
3595 hollow fiber membrane modules. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 28(1), 41-48.
- 3596 96. Jin, P., Huang, C., Shen, Y., Zhan, X., Hu, X., Wang, L., & Wang, L. (2017). Simultaneous separation of H<sub>2</sub>S  
3597 and CO<sub>2</sub> from biogas by gas-liquid membrane contactor using single and mixed absorbents. *Energy &*  
3598 *Fuels*, 31(10), 11117-11126.
- 3599 97. Jordán, P. S., Eduardo, A. M. J., Zdzislaw, M. C., Martín, Z. G. A., Liborio, H. P., Antonio, F. Z. J., & Román,  
3600 D. G. M. (2019). Techno-economic analysis of solar-assisted post-combustion carbon capture to a pilot  
3601 cogeneration system in Mexico. *Energy*, 167, 1107-1119.
- 3602 98. Karthigaiselvan, K., & Panda, R. C. (2021). Dynamic modeling and solubility studies of sour gases during  
3603 sweetening process of natural gas. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 95, 104087.
- 3604 99. Kim, S., Hou, J., Wang, Y., Ou, R., Simon, G. P., Seong, J. G., & Wang, H. (2018). Highly permeable thermally  
3605 rearranged polymer composite membranes with a graphene oxide scaffold for gas separation. *Journal of*  
3606 *Materials Chemistry A*, 6(17), 7668-7674.
- 3607 100. Koros, W. J., & Mahajan, R. (2000). Pushing the limits on possibilities for large scale gas separation: which  
3608 strategies. *Journal of Membrane Science*, 175(2), 181-196.
- 3609 101. Kourti, T. (2005). Application of latent variable methods to process control and multivariate statistical process  
3610 control in industry. *International Journal of adaptive control and signal processing*, 19(4), 213-246.
- 3611 102. Kuhn, H. W. (2013). Nonlinear programming: a historical view. In *Traces and emergence of nonlinear*  
3612 *programming* (pp. 393-414). *Basel: Springer Basel*.
- 3613 103. Lacis, A. A., Schmidt, G. A., Rind, D., & Ruedy, R. A. (2010). Atmospheric CO<sub>2</sub>: Principal control knob  
3614 governing Earth's temperature. *Science*, 330(6002), 356-359.
- 3615 104. Lang, H. J. (1947). Cost relationships in preliminary cost estimation. *Chem. Eng*, 54(117121), 27.

- 3616 105.Lara-Cisneros, G., Dochain, D., & Alvarez-Ramírez, J. (2019). Model based extremum-seeking controller via  
3617 modelling-error compensation approach. *Journal of Process Control*, 80, 193-201.
- 3618 106.Lara-Cisneros, G., Femat, R., & Dochain, D. (2017). Robust sliding mode-based extremum-seeking controller  
3619 for reaction systems via uncertainty estimation approach. *International Journal of Robust and Nonlinear*  
3620 *Control*, 27(16), 3218-3235.
- 3621 107.Lee, J. H., & Lee, J. M. (2014). Progress and challenges in control of chemical processes. *Annual review of*  
3622 *chemical and biomolecular engineering*, 5, 383-404.
- 3623 108.Lee, S., Yun, S., & Kim, J. K. (2019). Development of novel sub-ambient membrane systems for energy-  
3624 efficient post-combustion CO<sub>2</sub> capture. *Applied energy*, 238, 1060-1073.
- 3625 109.Lee, Y., Park, Y. J., Lee, J., & Bae, T. H. (2023). Recent advances and emerging applications of membrane  
3626 contactors. *Chemical Engineering Journal*, 461, 141948.
- 3627 110.Li, B. H., Zhang, N., & Smith, R. (2016). Simulation and analysis of CO<sub>2</sub> capture process with aqueous  
3628 monoethanolamine solution. *Applied Energy*, 161, 707-717.
- 3629 111.Li, J., & Kwauk, M. (2003). Exploring complex systems in chemical engineering—the multi-scale  
3630 methodology. *Chemical Engineering Science*, 58(3-6), 521-535.
- 3631 112.Li, L., Wong-Ng, W., Huang, K., & Cook, L. P. (2018). Materials and Processes for CO<sub>2</sub> Capture, Conversion,  
3632 and Sequestration. *John Wiley & Sons*.
- 3633 113.Li, Y., Jiang, Y., & Xu, C. (2019). Robust control of partially heat-integrated pressure-swing distillation for  
3634 separating binary maximum-boiling azeotropes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(6), 2296-  
3635 2309.
- 3636 114.Liu, F., Fang, M., Dong, W., Wang, T., Xia, Z., Wang, Q., & Luo, Z. (2019). Carbon dioxide absorption in  
3637 aqueous alkanolamine blends for biphasic solvents screening and evaluation. *Applied energy*, 233, 468-477.
- 3638 115.López, R. A., Camacho, B. R., Neria-González, M. I., Rangel, E., Santos, O., & Pérez, P. A. L. (2017). State  
3639 estimation based on nonlinear observer for hydrogen production in a photocatalytic anaerobic bioreactor.  
3640 *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 15(5).
- 3641 116.López-Hernández, I., Ortega-Morales, N. B., Ortiz-Díaz, S. A., Flores-Hernandez, E. A., Pérez-García, L. A.,  
3642 & Medrano-Santillana, M. (2022). Reducción de ácido sulfhídrico mediante recirculación de efluentes en  
3643 lagunas de estabilización con microalgas. *Revista mexicana de ciencias agrícolas*, 13(1), 29-40.
- 3644 117.Lu, X., Pang, Z., Fu, Y., & O'Neill, Z. (2022). Advances in research and applications of CO<sub>2</sub>-based demand-  
3645 controlled ventilation in commercial buildings: A critical review of control strategies and performance  
3646 evaluation. *Building and Environment*, 223, 109455.
- 3647 118.Luis, P., & Van der Bruggen, B. (2013). The role of membranes in post-combustion CO<sub>2</sub> capture. *Greenhouse*  
3648 *Gases: Science and Technology*, 3(5), 318-337.
- 3649 119.Luqmani, B., Brookes, A., Moore, A., Vale, P., Pidou, M., & McAdam, E. J. (2023). The role of solvent  
3650 temperature and gas pressure on CO<sub>2</sub> mass transfer during biogas upgrading within porous and dense-skin  
3651 hollow fibre membrane contactors. *Journal of Membrane Science*, 685, 121967.
- 3652 120.Luyben, W. L. (1989). Process modeling, simulation and control for chemical engineers. *McGraw-Hill Higher*  
3653 *Education*.
- 3654 121.Luyben, W. L. (1996). Tuning proportional– integral– derivative controllers for integrator/deadtime processes.  
3655 *Industrial & engineering chemistry research*, 35(10), 3480-3483.
- 3656 122.Machida, H., Ando, R., Esaki, T., Yamaguchi, T., & Norinaga, K. (2019). Modelling of CO<sub>2</sub> solubility in phase  
3657 separation solvent composed of amine/ether/water system for CO<sub>2</sub> capture. *Journal of Molecular Liquids*, 292,  
3658 111411.
- 3659 123.Madeddu, C., Errico, M., & Baratti, R. (2018). Process analysis for the carbon dioxide chemical absorption–  
3660 regeneration system. *Applied energy*, 215, 532-542.
- 3661 124.Maia, D. C. S., Niklevicz, R. R., Arioli, R., Frare, L. M., Arroyo, P. A., Gimenes, M. L., & Pereira, N. C.  
3662 (2017). Removal of H<sub>2</sub>S and CO<sub>2</sub> from biogas in bench scale and the pilot scale using a regenerable Fe-EDTA  
3663 solution. *Renewable energy*, 109, 188-194.
- 3664 125.Mak, J. Y., Mokhatab, S., & Poe, W. A. (2015). Basic concepts of natural gas processing. *Handbook of Natural*  
3665 *Gas Transmission and Processing (Third Edition)*, 123-135.

- 3666 126. Manaf, N. A., Cousins, A., Feron, P., & Abbas, A. (2016). Dynamic modelling, identification and preliminary  
3667 control analysis of an amine-based post-combustion CO<sub>2</sub> capture pilot plant. *Journal of Cleaner Production*,  
3668 113, 635-653.
- 3669 127. Manaf, N. A., Qadir, A., & Abbas, A. (2019). Efficient energy management of CO<sub>2</sub> capture plant using control-  
3670 based optimization approach under plant and market uncertainties. *Journal of Process Control*, 74, 2-12.
- 3671 128. Mangalapally, H. P., Notz, R., Hoch, S., Asprión, N., Sieder, G., Garcia, H., & Hasse, H. (2009). Pilot plant  
3672 experimental studies of post combustion CO<sub>2</sub> capture by reactive absorption with MEA and new  
3673 solvents. *Energy Procedia*, 1(1), 963-970
- 3674 129. Maniraman, P., Dharmalingam, K., & Manickam, C. (2022). Improved sequential autotuning of PI controllers  
3675 for industrial-scale polymerization (ISP) reactor. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*.
- 3676 130. Mansourizadeh, A., Rezaei, I., Lau, W. J., Seah, M. Q., & Ismail, A. F. (2022). A review on recent progress in  
3677 environmental applications of membrane contactor technology. *Journal of Environmental Chemical*  
3678 *Engineering*, 10(3), 107631.
- 3679 131. Markova, S. Y., Pelzer, M., Shalygin, M. G., Vad, T., Gries, T., & Teplyakov, V. V. (2021). Gas separating  
3680 hollow fibres from Poly (4-methyl-1-pentene): A new development. *Separation and Purification*  
3681 *Technology*, 278, 119534.
- 3682 132. Martínez-Lomovskoi, A., Romero-García, A. G., Sánchez-Ramírez, E., & Segovia-Hernández, J. G. (2023).  
3683 Design and multi-objective optimization of a CO<sub>2</sub> capture plant using deep eutectic solvents. *Chemical*  
3684 *Engineering Research and Design*, 192, 570-581.
- 3685 133. Martín-Hernández, E., Montero-Rueda, C., Ruiz-Mercadoc, G. J., Vaneeckhaute, C., & Martina, M. (2022).  
3686 Supplementary Information Multi-scale techno-economic assessment of nitrogen recovery systems for  
3687 livestock operations. *Department of Chemical Engineering*, University of Salamanca, Plza. Caídos 1-5, 37008  
3688 Salamanca, Spain.
- 3689 134. Marx-Schubach, T., & Schmitz, G. (2018). Dynamic simulation and investigation of the startup process of a  
3690 postcombustion-capture plant. *Industrial & engineering chemistry research*, 57(49), 16751-16762.
- 3691 135. Mazumder, M., & Xu, Q. (2020). Modeling and Optimization for a Comprehensive Gas Processing Plant with  
3692 Sensitivity Analysis and Economic Evaluation. *Chemical Engineering & Technology*, 43(11), 2198-2207.
- 3693 136. McLeod, A., Jefferson, B., & McAdam, E. J. (2016). Toward gas-phase controlled mass transfer in micro-  
3694 porous membrane contactors for recovery and concentration of dissolved methane in the gas phase. *Journal of*  
3695 *Membrane Science*, 510, 466-471.
- 3696 137. Mechleri, E., Lawal, A., Ramos, A., Davison, J., & Mac Dowell, N. (2017). Process control strategies for  
3697 flexible operation of post-combustion CO<sub>2</sub> capture plants. *International Journal of Greenhouse Gas*  
3698 *Control*, 57, 14-25.
- 3699 138. Mignard, D. (2014). Correlating the chemical engineering plant cost index with macro-economic indicators.  
3700 *Chemical Engineering Research and Design*, 92(2), 285-294.
- 3701 139. Mikhaylov, A., Moiseev, N., Aleshin, K., & Burkhardt, T. (2020). Global climate change and greenhouse  
3702 effect. *Entrepreneurship and Sustainability Issues*, 7(4), 2897.
- 3703 140. Mirfendereski, M., & Mohammadi, T. (2017). Investigation of H<sub>2</sub>S and CO<sub>2</sub> removal from gas streams using  
3704 hollow fiber membrane gas-liquid contactors. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*, 31(2), 139-  
3705 144.
- 3706 141. Mofarahi, M., Khojasteh, Y., Khaledi, H., & Farahnak, A. (2008). Design of CO<sub>2</sub> absorption plant for recovery  
3707 of CO<sub>2</sub> from flue gases of gas turbine. *Energy*, 33(8), 1311-1319.
- 3708 142. Moghadasi, M., Ozgoli, H. A., & Farhani, F. (2021). A machine learning-based operational control framework  
3709 for reducing energy consumption of an amine-based gas sweetening process. *International Journal of Energy*  
3710 *Research*, 45(1), 1055-1068.
- 3711 143. Moharir, M., Pourkargar, D. B., Almansoori, A., & Daoutidis, P. (2018). Distributed model predictive control  
3712 of an amine gas sweetening plant. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 57(39), 13103-13115.
- 3713 144. Mokhatab, S., Poe, W. A., & Mak, J. Y. (2015). Handbook of Natural Gas Transmission and Processing.  
3714 Principles and Practices (3 ed.). USA: Gulf Professional Publishing.
- 3715 145. Monroy-Loperena, R., & Alvarez-Ramirez, J. (2000). Output-feedback control of reactive batch distillation  
3716 columns. *Industrial & engineering chemistry research*, 39(2), 378-386.

- 3717 146.Mora, E. C., de Oliveira Paranhos, A. G., de Aquino, S. F., & de Lemos Chernicharo, C. A. (2023). Use of  
3718 hollow fibre membrane contactors to remove dissolved gases from effluents of UASB reactors treating sewage  
3719 after its conditioning with dynamic membrane filtration. *Journal of Water Process Engineering*, 53, 103593.  
3720 147.Mores, P., Scenna, N., & Mussati, S. (2012). A rate based model of a packed column for CO<sub>2</sub> absorption using  
3721 aqueous monoethanolamine solution. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 6, 21-36.  
3722 148.Morisato, A., & Mahley, E. (2023). Hydrogen sulfide permeation and hydrocarbon separation properties in  
3723 cellulose triacetate hollow fiber membrane for high hydrogen sulfide contained natural gas sweetening  
3724 applications. *Journal of Membrane Science*, 681, 121734.  
3725 149.Mulukutla, T., Obuskovic, G., & Sirkar, K. K. (2014). Novel scrubbing system for post-combustion CO<sub>2</sub>  
3726 capture and recovery: Experimental studies. *Journal of membrane science*, 471, 16-26.  
3727 150.Murray-Smith, R., & Johansen, T. (2020). Multiple model approaches to nonlinear modelling and control. *CRC*  
3728 *press*.  
3729 151.Naim, R., Pei Sean, G., Nasir, Z., Mokhtar, N. M., & Safiah Muhammad, N. A. (2021). Recent Progress and  
3730 Challenges in Hollow Fiber Membranes for Wastewater Treatment and Resource  
3731 Recovery. *Membranes*, 11(11), 839.  
3732 152.Nakao, S. I., Yogo, K., Goto, K., Kai, T., & Yamada, H. (2019). Advanced CO<sub>2</sub> Capture Technologies:  
3733 Absorption, Adsorption, and Membrane Separation Methods. *Springer*.  
3734 153.Nakhjiri, A. T., & Heydarinasab, A. (2019). Computational simulation and theoretical modeling of CO<sub>2</sub>  
3735 separation using EDA, PZEA and PS absorbents inside the hollow fiber membrane contactor. *Journal of*  
3736 *Industrial and Engineering Chemistry*, 78, 106-115.  
3737 154.Nakhjiri, A. T., Heydarinasab, A., Bakhtiari, O., & Mohammadi, T. (2020). Numerical simulation of CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>S  
3738 simultaneous removal from natural gas using potassium carbonate aqueous solution in hollow fiber membrane  
3739 contactor. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 8(5), 104130.  
3740 155.Nakicenovic, N., Gritsevskiy, A., Gluber, A., & Riahi, K. (2000). Global natural gas perspectives. International  
3741 Gas Union & International Institute for Applied System Analysis.  
3742 156.Nir, O., Oren, Y., Atsbha, M. W., Chandra, A., Geller, Y., Chaudhary, M., ... & Zevenhoven, R. (2022).  
3743 Reactive transport in membrane separation modeling: A perspective. *Chemical Engineering Research and*  
3744 *Design*, 188, 342-353.  
3745 157.Onda, K., Takeuchi, H., & Okumoto, Y. (1968). Mass transfer coefficients between gas and liquid phases in  
3746 packed columns. *Journal of chemical engineering of Japan*, 1(1), 56-62.  
3747 158.Osyczka, A. (1985). Multicriteria optimization for engineering design. In Design optimization (pp. 193-227).  
3748 *Academic Press*.  
3749 159.Ozturk, B., & Yilmaz, D. (2006). Absorptive removal of volatile organic compounds from flue gas streams.  
3750 *Process Safety and Environmental Protection*, 84(5), 391-398.  
3751 160.Park, H. S., Kang, D., Kang, J. H., Kim, K., Kim, J., & Song, H. (2021). Selective sulfur dioxide absorption  
3752 from simulated flue gas using various aqueous alkali solutions in a polypropylene hollow fiber membrane  
3753 contactor: removal efficiency and use of sulfur dioxide. *International Journal of Environmental Research and*  
3754 *Public Health*, 18(2), 597.  
3755 161.Park, J. H., Anburajan, P., Kumar, G., Park, H. D., & Kim, S. H. (2017). Biohydrogen production integrated  
3756 with an external dynamic membrane: A novel approach. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(45),  
3757 27543-27549.  
3758 162.Pashaei, H., Ghaemi, A., Nasiri, M., & Karami, B. (2020). Experimental modeling and optimization of CO<sub>2</sub>  
3759 absorption into piperazine solutions using RSM-CCD methodology. *ACS omega*, 5(15), 8432-8448.  
3760 163.Patron, G. D., & Ricardez-Sandoval, L. (2020). A robust nonlinear model predictive controller for a post-  
3761 combustion CO<sub>2</sub> capture absorber unit. *Fuel*, 265, 116932.  
3762 164.Perkins, L. R., & Geankoplis, C. J. (1969). Molecular diffusion in a ternary liquid system with the diffusing  
3763 component dilute. *Chemical Engineering Science*, 24(7), 1035-1042.  
3764 165.Piceno-Díaz, E. R., Ricardez-Sandoval, L. A., Gutierrez-Limon, M. A., Méndez-Acosta, H. O., & Puebla, H.  
3765 (2020). Robust nonlinear model predictive control for two-stage anaerobic digesters. *Industrial & Engineering*  
3766 *Chemistry Research*, 59(52), 22559-22572.

- 3767 166.Porter, R. T., Fairweather, M., Pourkashanian, M., & Woolley, R. M. (2015). The range and level of impurities  
3768 in CO<sub>2</sub> streams from different carbon capture sources. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 36,  
3769 161-174.
- 3770 167.Powell, C. R., Dillon, K. M., & Matson, J. B. (2018). A review of hydrogen sulfide (H<sub>2</sub>S) donors: Chemistry  
3771 and potential therapeutic applications. *Biochemical pharmacology*, 149, 110-123.
- 3772 168.Pratschner, S., Radosits, F., Ajanovic, A., & Winter, F. (2023). Techno-economic assessment of a power-to-  
3773 green methanol plant. *Journal of CO<sub>2</sub> Utilization*, 75, 102563.
- 3774 169.Puebla, H., Hernandez-Martinez, E., Hernandez-Suarez, R., Ramirez-Muñoz, J., & Alvarez-Ramirez, J. (2013).  
3775 A simple feedback control approach for output modulation of spatiotemporal patterns in a class of tubular  
3776 reactors. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(49), 17517-17528.
- 3777 170.Pundir, A. S., & Singh, K. (2019). Chattering Free Sliding Mode Control with Observer Based Adaptive Radial  
3778 Basis Function Neural Network for Temperature Tracking in a Fixed Bed Reactor. *International Journal of*  
3779 *Chemical Reactor Engineering*, 17(10).
- 3780 171.Purwasasmita, M., Nabu, E. B. P., Khoiruddin, K., & Wenten, I. G. (2015). Non dispersive chemical  
3781 deacidification of crude palm oil in hollow fiber membrane contactor. *Journal of Engineering and*  
3782 *Technological Sciences*, 47(4), 426-446.
- 3783 172.Quek, V. C., Shah, N., & Chachuat, B. (2021). Plant-wide assessment of high-pressure membrane contactors  
3784 in natural gas sweetening–Part II: Process analysis. *Separation and Purification Technology*, 258, 117938.
- 3785 173.Radzuan, M. A., Syarina, N. A., Rosdi, W. W., Hussin, A. H., & Adnan, M. F. (2019). Sustainable optimization  
3786 of natural gas sweetening using A process simulation approach and sustainability evaluator. *Materials Today:*  
3787 *Proceedings*, 19, 1628-1637.
- 3788 174.Rao, K. N., & Ponnusami, A. B. (2018). Simulation studies on natural gas sweetening using piperazine  
3789 amine. *Petroleum & Coal*, 60(4).
- 3790 175.Razavi, S. M. R., Shirazian, S., & Nazemian, M. (2016). Numerical simulation of CO<sub>2</sub> separation from gas  
3791 mixtures in membrane modules: Effect of chemical absorbent. *Arabian Journal of Chemistry*, 9(1), 62-71.
- 3792 176.Razzak, S. A., Ali, S. A. M., Hossain, M. M., and deLasa, H. (2017). Biological CO<sub>2</sub> fixation with production  
3793 of microalgae in wastewater—a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 76, 379-390.
- 3794 177.Remigio, J. E., & Swartz, C. L. (2020). Production scheduling in dynamic real-time optimization with closed-  
3795 loop prediction. *Journal of Process Control*, 89, 95-107.
- 3796 178.Rezakazemi, M., Heydari, I., & Zhang, Z. (2017). Hybrid systems: Combining membrane and absorption  
3797 technologies leads to more efficient acid gases (CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S) removal from natural gas. *Journal of CO<sub>2</sub>*  
3798 *utilization*, 18, 362-369.
- 3799 179.Rezakazemi, M., Niazi, Z., Mirfendereski, M., Shirazian, S., Mohammadi, T., & Pak, A. (2011). CFD  
3800 simulation of natural gas sweetening in a gas–liquid hollow-fiber membrane contactor. *Chemical Engineering*  
3801 *Journal*, 168(3), 1217-1226.
- 3802 180.Rezakazemi, M., Shirazian, S., & Ashrafizadeh, S. N. (2012). Simulation of ammonia removal from industrial  
3803 wastewater streams by means of a hollow-fiber membrane contactor. *Desalination*, 285, 383-392.
- 3804 181.Rocha, J. A., Bravo, J. L., & Fair, J. R. (1993). Distillation columns containing structured packings: a  
3805 comprehensive model for their performance. 1. Hydraulic models. *Industrial & engineering chemistry*  
3806 *research*, 32(4), 641-651.
- 3807 182.Rodríguez Vera, H. U., & Ricardez-Sandoval, L. A. (2022). Integration of scheduling and control for chemical  
3808 batch plants under stochastic uncertainty: A back-off approach. *Industrial & Engineering Chemistry*  
3809 *Research*, 61(12), 4363-4378.
- 3810 183.Rodríguez-Jara, M., Flores-Mejía, H., Velasco-Pérez, A., & Puebla, H. (2021). Robust control framework  
3811 based on input-output models enhanced with uncertainty estimation. *Studies Inform. Cont*, 30, 99-108.
- 3812 184.Rodríguez-Jara, M., Ramírez-Castelan, C. E., Samano-Perfecto, Q., Ricardez-Sandoval, L. A., & Puebla, H.  
3813 (2023). Robust control designs for microalgae cultivation in continuous photobioreactors. *International*  
3814 *Journal of Chemical Reactor Engineering*, 21(4), 521-535.
- 3815 185.Rodríguez-Jara, M., Velasco-Pérez, A., Vian, J., Viguera-Carmona, S. E., & Puebla, H. (2023). Robust  
3816 Control Based on Modeling Error Compensation of Microalgae Anaerobic Digestion. *Fermentation*, 9(1), 34.

- 3817 186. Romagnoli, J. A., & Palazoglu, A. (2005). Introduction to process control. *CRC press*.
- 3818 187. Romero-Bustamante, J. A., Moguel-Castañeda, J. G., Puebla, H., & Hernandez-Martinez, E. (2017). Robust  
3819 cascade control for chemical reactors: An approach based on modelling error compensation. *International*  
3820 *Journal of Chemical Reactor Engineering*, 15(6).
- 3821 188. Saha, A. K., Bandyopadhyay, S. S., & Biswas, A. K. (1995). Kinetics of absorption of CO<sub>2</sub> into aqueous  
3822 solutions of 2-amino-2-methyl-1-propanol. *Chemical Engineering Science*, 50(22), 3587-3598.
- 3823 189. Sahraei, M. H., & Ricardez-Sandoval, L. A. (2014). Controllability and optimal scheduling of a CO<sub>2</sub> capture  
3824 plant using model predictive control. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 30, 58-71.
- 3825 190. Salvinder, K. M. S., Zabiri, H., Taqvi, S. A., Ramasamy, M., Isa, F., Rozali, N. E. M., & Shariff, A. M. (2019).  
3826 An overview on control strategies for CO<sub>2</sub> capture using absorption/stripping system. *Chemical Engineering*  
3827 *Research and Design*, 147, 319-337.
- 3828 191. Sang Sefidi, V., and Luis, P. (2019). Advanced amino acid-based technologies for CO<sub>2</sub> capture: a  
3829 review. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(44), 20181-20194.
- 3830 192. Scholes, C. A., Ho, M. T., Aguiar, A. A., Wiley, D. E., Stevens, G. W., & Kentish, S. E. (2014a). Membrane  
3831 gas separation processes for CO<sub>2</sub> capture from cement kiln flue gas. *International Journal of Greenhouse Gas*  
3832 *Control*, 24, 78-86.
- 3833 193. Scholes, C. A., Qader, A., Stevens, G. W., & Kentish, S. E. (2014b). Membrane gas-solvent contactor pilot  
3834 plant trials of CO<sub>2</sub> absorption from flue gas. *Separation Science and Technology*, 49(16), 2449-2458.
- 3835 194. Seader, J. D., Henley, E. J., & Roper, D. K. (2006). Separation process principles.
- 3836 195. Selvan, K. K., & Panda, R. C. (2018). Mathematical modeling, parametric estimation, and operational control  
3837 for natural gas sweetening processes. *ChemBioEng Reviews*, 5(1), 57-74.
- 3838 196. SEMARNAT (2012). Ley general de cambio climático. In *Diario Oficial de la Federación. H. Congreso de la*  
3839 *Unión* (Vol. 10, p. 44).
- 3840 197. SENER (2010). NORMA Oficial Mexicana NOM-001-SECRE-2010, *Especificaciones del gas natural*.
- 3841 198. SENER (2023). Actividades del sector hidrocarburos en territorio nacional. *Prontuario estadístico 2023*.
- 3842 199. Sethunga, G. S. M. D. P., Rongwong, W., Wang, R., & Bae, T. H. (2018). Optimization of hydrophobic  
3843 modification parameters of microporous polyvinylidene fluoride hollow-fiber membrane for biogas recovery  
3844 from anaerobic membrane bioreactor effluent. *Journal of Membrane Science*, 548, 510-518.
- 3845 200. Shafeeyan, M. S., Daud, W. M. A. W., & Shamiri, A. (2014). A review of mathematical modeling of fixed-  
3846 bed columns for carbon dioxide adsorption. *Chemical engineering research and design*, 92(5), 961-988.
- 3847 201. Shahid, M. Z., Maulud, A. S., Bustam, M. A., Suleman, H., Halim, H. N. A., & Shariff, A. M. (2019). Rate-  
3848 based modeling for packed absorption column of the MEA-CO<sub>2</sub>-water system at high-pressure and High-CO<sub>2</sub>  
3849 loading conditions. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(27), 12235-12246.
- 3850 202. Shalygin, M. G., Yakovlev, A. V., Khotimskii, V. S., Gasanova, L. G., & Teplyakov, V. V. (2011). Membrane  
3851 contactors for biogas conditioning. *Petroleum Chemistry*, 51, 601-609.
- 3852 203. Sharifi, A., & Amiri, E. O. (2017). Effect of the tower type on the gas sweetening process. *Oil & Gas Science*  
3853 *and Technology-Revue d'IFP Energies nouvelles*, 72(4), 24.
- 3854 204. Shiravi, A., Maleh, M. S., Raisi, A., & Sillanpää, M. (2023). Hollow fiber membrane contactor for CO<sub>2</sub>  
3855 capture: A review of recent progress on membrane materials, operational challenges, scale-up and economics.  
3856 *Carbon Capture Science & Technology*, 100160.
- 3857 205. Siagian, U. W. R., Rahmawati, Y., Khoiruddin, K., Hakim, A. N., & Wenten, I. G. (2018). Transversal  
3858 Submerged Membrane Contactor for Simultaneous Absorption and Desorption of CO<sub>2</sub> During Natural Gas  
3859 Sweetening Process. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (Vol. 395, No. 1, p.  
3860 012013). IOP Publishing.
- 3861 206. Siagian, U. W., Raksajati, A., Himma, N. F., Khoiruddin, K., & Wenten, I. G. (2019). Membrane-based carbon  
3862 capture technologies: Membrane gas separation vs. membrane contactor. *Journal of Natural Gas Science and*  
3863 *Engineering*, 67, 172-195.
- 3864 207. Simorgh, A., Razminia, A., & Machado, J. T. (2019). Optimal control of nonlinear fed-batch process using  
3865 direct transcription method. *Computers & Chemical Engineering*, 130, 106561.

- 3866 208. Singh, J., & Dhar, D. W. (2019). Overview of carbon capture technology: microalgal biorefinery concept and  
3867 state-of-the-art. *Frontiers in Marine Science*, 6, 29.
- 3868 209. Skogestad, S. (2003). Simple analytic rules for model reduction and PID controller tuning. *Journal of process*  
3869 *control*, 13(4), 291-309.
- 3870 210. Slotine, J. J. E., & Li, W. (1991). Applied nonlinear control (Vol. 199, No. 1, p. 705). *Englewood Cliffs, NJ:*  
3871 *Prentice Hall*.
- 3872 211. Sohaib, Q., Muhammad, A., Younas, M., Rezakazemi, M., Druon-Bocquet, S., & Sanchez-Marcano, J. (2021).  
3873 Rigorous non-isothermal modeling approach for mass and energy transport during CO<sub>2</sub> absorption into  
3874 aqueous solution of amino acid ionic liquids in hollow fiber membrane contactors. *Separation and Purification*  
3875 *Technology*, 254, 117644.
- 3876 212. Song, C., Liu, Q., Ji, N., Deng, S., Zhao, J., Li, Y., & Li, H. (2018). Alternative pathways for efficient CO<sub>2</sub>  
3877 capture by hybrid processes—A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82, 215-231.
- 3878 213. Soriano, A. N., Adornado, A. P., Pajinag, A. A., Acosta, D. J. F., Averion, N. M., Leron, G. M., & Bungay, V.  
3879 C. (2015). Multicriterial analysis of simulated process of post-combustion capture of pure H<sub>2</sub>S and mixtures  
3880 of H<sub>2</sub>S and CO<sub>2</sub> using single and blended aqueous alkanolamines. *ASEAN Journal of Chemical Engineering*,  
3881 15(1), 72-92.
- 3882 214. Sreedhar, I., Vaidhiswaran, R., Kamani, B. M., & Venugopal, A. (2017). Process and engineering trends in  
3883 membrane based carbon capture. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 68, 659-684.
- 3884 215. Stuart, P. R., & El-Halwagi, M. M. (2012). Integrated biorefineries: design, analysis, and optimization. *CRC*  
3885 *press*.
- 3886 216. Sulaiman, M. M., Matloub, F. K., & Shareef, Z. N. (2018). Simulation and Optimization of Natural Gas  
3887 Sweetening Process: A Case Study of Ng Sweetening Unit Designed by Chen Group in The Gulf of Mexico. *AIP*  
3888 *Conference Proceedings* 2030, (pp. 1-9).
- 3889 217. Tan, X., Li, H., Guo, J., Gu, B., & Zeng, Y. (2019). Energy-saving and emission-reduction technology selection  
3890 and CO<sub>2</sub> emission reduction potential of China's iron and steel industry under energy substitution  
3891 policy. *Journal of Cleaner Production*, 222, 823-834.
- 3892 218. Thirupuranthaka, M., Sharma, N., Das, T., Varhade, S., Badadhe, S. S., Thotiyal, M., & Ogale, S. (2018). A  
3893 combined experimental and computational study of gas sensing by Cu<sub>3</sub>SnS<sub>4</sub> nanoparticulate film: high  
3894 selectivity, stability, and reversibility for room temperature H<sub>2</sub>S sensing. *Advanced Materials Interfaces*, 5,  
3895 1701492.
- 3896 219. Tian, X., Wang, L., Zhang, P., & Fu, D. (2020). Surface thermodynamics, viscosity, activation energy of N-  
3897 methyl diethanolamine aqueous solutions promoted by tetramethylammonium arginate. *Entropy*, 22(12), 1337.
- 3898 220. Tikadar, D., Gujarathi, A. M., & Guria, C. (2021). Safety, economics, environment and energy based criteria  
3899 towards multi-objective optimization of natural gas sweetening process: an industrial case study. *Journal of*  
3900 *Natural Gas Science and Engineering*, 95, 104207.
- 3901 221. Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., & Shaeiwitz, J. A. (2008). Analysis, synthesis and design of chemical  
3902 processes. *Pearson Education*.
- 3903 222. Usman, M., Hillestad, M., & Deng, L. (2018). Assessment of a membrane contactor process for pre-combustion  
3904 CO<sub>2</sub> capture by modelling and integrated process simulation. *International Journal of Greenhouse Gas*  
3905 *Control*, 71, 95-103.
- 3906 223. Vadillo, J. M., Díaz-Sainz, G., Gómez-Coma, L., Garea, A., & Irabien, A. (2022). Chemical and physical ionic  
3907 liquids in CO<sub>2</sub> capture system using membrane vacuum regeneration. *Membranes*, 12(8), 785.
- 3908 224. Vadillo, J. M., Gomez-Coma, L., Garea, A., & Irabien, A. (2020). Hollow fiber membrane contactors in CO<sub>2</sub>  
3909 desorption: A review. *Energy & Fuels*, 35(1), 111-136.
- 3910 225. Vadillo, J. M., Hospital-Benito, D., Moya, C., Gomez-Coma, L., Palomar, J., Garea, A., & Irabien, A. (2021).  
3911 Modelling and simulation of hollow fiber membrane vacuum regeneration for CO<sub>2</sub> desorption processes using  
3912 ionic liquids. *Separation and Purification Technology*, 277, 119465.
- 3913 226. Vallerio, M., Van Impe, J., & Logist, F. (2014). Tuning of NMPC controllers via multi-objective  
3914 optimisation. *Computers & Chemical Engineering*, 61, 38-50.

- 3915 227. Vericella, J. J., Baker, S. E., Stolaroff, J. K., Duoss, E. B., Hardin IV, J. O., Lewicki, J., ... & Aines, R. D.  
3916 (2015). Encapsulated liquid sorbents for carbon dioxide capture. *Nature communications*, 6(1), 6124.
- 3917 228. Versteeg, G. F., & Van Swaaij, W. P. (1988). Solubility and diffusivity of acid gases (carbon dioxide, nitrous  
3918 oxide) in aqueous alkanolamine solutions. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 33(1), 29-34.
- 3919 229. Wain, Y. A. (2014). Updating the lang factor and testing its accuracy, reliability and precision as a stochastic  
3920 cost estimating method. *PM World Journal*, 3(10).
- 3921 230. Wang, C. Y., Mercer, E., Kamranvand, F., Williams, L., Kolios, A., Parker, A., ... & McAdam, E. J. (2017).  
3922 Tube-side mass transfer for hollow fibre membrane contactors operated in the low Graetz range. *Journal of*  
3923 *Membrane Science*, 523, 235-246.
- 3924 231. Wang, H., Wang, Z., Zhou, Q., Liang, J., Yin, Y., Su, W., & Wang, G. (2020). Optimization and sliding mode  
3925 control of dividing-wall column. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 59(45), 20102-20111.
- 3926 232. Wang, P., Chen, Z., Liao, L., Wan, J., & Wu, S. (2020). A multiple-model based internal model control method  
3927 for power control of small, pressurized water reactors. *Energy*, 210, 118527.
- 3928 233. Wang, Z., Fang, M., Pan, Y., Yan, S., & Luo, Z. (2013). Amine-based absorbents selection for CO<sub>2</sub> membrane  
3929 vacuum regeneration technology by combined absorption-desorption analysis. *Chemical Engineering*  
3930 *Science*, 93, 238-249.
- 3931 234. Wijoseno, T. (2023). Modifying The Lang Factor using Process Plant Project Data Cost in PERTAMINA for  
3932 more Precision, Valid, & Reliable AACE Class 4 Estimation Purpose in Indonesia; *PM World Journal*, Vol.  
3933 XII, Issue VI, June.
- 3934 235. Wu, X., Wang, M., Liao, P., Shen, J., & Li, Y. (2020). Solvent-based post-combustion CO<sub>2</sub> capture for power  
3935 plants: A critical review and perspective on dynamic modelling, system identification, process control and  
3936 flexible operation. *Applied Energy*, 257, 113941.
- 3937 236. Xia, J., Zhang, Z., Wang, L., Wang, F., Miao, H., Zhang, H., & Yuan, J. (2023). Performance evaluation and  
3938 optimization of hollow fiber membrane contactors for carbon dioxide absorption: A comparative study of  
3939 ammonia, ethanolamine, and diethanolamine solvents. *Journal of Environmental Chemical*  
3940 *Engineering*, 11(6), 111354.
- 3941 237. Xie, K., Fu, Q., Qiao, G. G., & Webley, P. A. (2019). Recent progress on fabrication methods of polymeric  
3942 thin film gas separation membranes for CO<sub>2</sub> capture. *Journal of membrane science*, 572, 38-60.
- 3943 238. Xu, J., Wang, Z., Qiao, Z., Wu, H., Dong, S., Zhao, S., & Wang, J. (2019). Post-combustion CO<sub>2</sub> capture with  
3944 membrane process: Practical membrane performance and appropriate pressure. *Journal of Membrane*  
3945 *Science*, 581, 195-213.
- 3946 239. Yeh, J. T., Resnik, K. P., Rygle, K., & Pennline, H. W. (2005). Semi-batch absorption and regeneration studies  
3947 for CO<sub>2</sub> capture by aqueous ammonia. *Fuel Processing Technology*, 86(14-15), 1533-1546.
- 3948 240. Yuan, M., Teichgraeber, H., Wilcox, J., & Brandt, A. R. (2019). Design and operations optimization of  
3949 membrane-based flexible carbon capture. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 84, 154-163.
- 3950 241. Zahid, U., Sakheta, A., & Lee, C. J. (2020). Techno-economic analysis of acid gas removal from associated  
3951 and non-associated sour gas using amine blend. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 98, 103078.
- 3952 242. Zavala, V. M., Laird, C. D., & Biegler, L. T. (2008). Interior-point decomposition approaches for parallel  
3953 solution of large-scale nonlinear parameter estimation problems. *Chemical Engineering Science*, 63(19), 4834-  
3954 4845.
- 3955 243. Zerbe, R. O., & Scott, T. (2015). A primer for understanding benefit-cost analysis. *Washington DC*.
- 3956 244. Zhang, L., Qu, R., Sha, Y., Wang, X., & Yang, L. (2015). Membrane gas absorption for CO<sub>2</sub> capture from flue  
3957 gas containing fine particles and gaseous contaminants. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 33,  
3958 10-17.
- 3959 245. Zhang, P., Xu, R., Li, H., Gao, H., & Liang, Z. (2019). Mass transfer performance for CO<sub>2</sub> absorption into  
3960 aqueous blended DMEA/MEA solution with optimized molar ratio in a hollow fiber membrane contactor.  
3961 *Separation and Purification Technology*, 211, 628-636.
- 3962 246. Zhang, W., Luo, J., Ding, L., & Jaffrin, M. Y. (2015). A review on flux decline control strategies in pressure-  
3963 driven membrane processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 54(11), 2843-2861.

- 3964 247.Zhang, Z., Borhani, T. N., & Olabi, A. G. (2020). Status and perspective of CO<sub>2</sub> absorption process. *Energy*,  
3965 205, 118057.
- 3966 248.Zhang, Z., Yan, Y., Zhang, L., & Ju, S. (2014). Numerical simulation and analysis of CO<sub>2</sub> removal in a  
3967 polypropylene hollow fiber membrane contactor. *International Journal of Chemical Engineering*, 2014(1),  
3968 256840.
- 3969 249.Zhao, S., Feron, P. H., Deng, L., Favre, E., Chabanon, E., Yan, S. & Qi, H. (2016). Status and progress of  
3970 membrane contactors in post-combustion carbon capture: A state-of-the-art review of new developments.  
3971 *Journal of membrane science*, 511, 180-206.
- 3972 250.Zhao, S., Maxim, A., Liu, S., De Keyser, R., & Ionescu, C. (2018). Effect of control horizon in model predictive  
3973 control for steam/water loop in large-scale ships. *Processes*, 6(12), 265.
- 3974 251.Zhu, W., Ye, H., Yang, Y., Zou, X., & Dong, H. (2022). Simulation-based optimization of a multiple gas feed  
3975 sweetening process. *ACS omega*, 7(3), 2690-2705.
- 3976 252.Zhu, W., Ye, H., Zou, X., Yang, Y., & Dong, H. (2021). Analysis and optimization for chemical absorption of  
3977 H<sub>2</sub>S/CO<sub>2</sub> system: Applied in a multiple gas feeds sweetening process. *Separation and Purification*  
3978 *Technology*, 276, 1-1.