



Máster Universitario en Ingeniería Industrial

2025/2026

PROYECTO FIN DE MÁSTER

**Modelado y simulación del proceso de
producción de dimetil éter a partir de
gas de síntesis**

Autora: Rocío Fernández Maestre

Directores: Manuel Antonio Díaz Pérez
Carlos Ortiz Domínguez

Sevilla, julio 2026

Índice

Resumen.....	4
Abstract	5
1. Introducción y justificación.....	6
1.1. Contexto energético actual.....	6
1.2. El dimetil éter como combustible alternativo	7
1.3. Producción de dimetil éter a partir de gas de síntesis	10
1.3.1. Selección del gas de síntesis como corriente de alimentación	10
1.3.2. Naturaleza y características del syngas	10
1.3.3. Rutas de producción de DME.....	11
1.4. Estado del arte en modelado y simulación de procesos de DME	13
1.4.1. Herramientas y enfoques de modelado.....	13
1.4.2. Principales líneas de investigación.....	14
1.5. Necesidad de validación y análisis de sensibilidad.....	15
1.6. Marco del proyecto de investigación	15
1.6.1. Contexto del proyecto europeo.....	15
1.6.2. Relación del trabajo con líneas de investigación actuales	16
1.6.3. Relevancia científica y tecnológica	16
1.7. Justificación del trabajo	17
2. Objetivos	17
3. Modelado del sistema.....	18
3.1. Modelo cinético	18
3.2. Modelo matemático del reactor	25
3.3. Modelo de la planta completa.....	27
3.3.1. Caso base	28
3.3.2. Caso mejorado	29
3.4. Purificación del dimetil éter.....	36
3.4.1. Destilación fraccionada convencional e intensificada.....	36
3.4.2. Absorción física de DME	37
3.4.3. Absorción química de CO ₂	38
3.4.4. Separación mediante membranas selectivas.....	39
3.4.5. Selección de la alternativa de purificación	40
4. Resultados	44
4.1. Resultados de la validación del modelo.....	44
4.1.1. Validación del modelo	44
4.1.2. Indicadores globales de rendimiento	45
4.1.3. Consistencia interna del modelo.....	46
4.1.4. Análisis de las discrepancias residuales	47

4.1.5.	Validación final del modelo.....	47
4.2.	Resultados de la simulación de la planta completa.....	48
4.2.1.	Resultados del caso base	48
4.2.2.	Resultados del caso mejorado	50
5.	Análisis de sensibilidad.....	55
5.1.	Análisis de sensibilidad del proceso de producción de DME	55
5.1.1.	Sensibilidad de la producción de DME	56
5.1.2.	Sensibilidad de la fracción molar de DME.....	57
5.1.3.	Sensibilidad de la merma de DME	58
5.2.	Análisis de sensibilidad de la separación del DME	59
5.2.1.	Análisis de sensibilidad respecto a la temperatura de salida de E3	59
5.2.2.	Análisis de sensibilidad respecto a la temperatura de condensación de T1.....	62
5.2.3.	Análisis de sensibilidad respecto a la presión de cabeza de T1	65
6.	Conclusiones	68
7.	Anexos.....	71
8.	Bibliografía	100

Resumen

El dimetil éter (DME) es una alternativa de interés en el contexto de la transición energética por sus buenas propiedades de combustión, elevado número de cetano, baja formación de partículas y posibilidad de obtenerse a partir de gas de síntesis renovable. En este Trabajo Fin de Máster se modela y simula la producción directa de DME a partir de syngas mediante AVEVA Process Simulation.

El reactor se describe mediante una cinética Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW), basada en las formulaciones de Nie et al. y Shim et al., considerando la síntesis de metanol a partir de CO y CO₂, la deshidratación de metanol a DME y la reacción de desplazamiento de gas de agua. Para mejorar la coherencia termodinámica del modelo, las constantes de equilibrio se calcularon a partir de datos NIST/Shomate.

El modelo del reactor fue validado frente a Luu et al. (2016), mediante un caso de velocidad espacial asumida y otro calibrado, reproduciendo adecuadamente la fracción molar de DME y la conversión de CO de referencia. Además, la comparación con un modelo independiente en Python de un reactor PFR mostró desviaciones reducidas respecto a AVEVA.

Posteriormente, se simuló la planta completa, incluyendo compresión, acondicionamiento térmico, reactor, separación gas-líquido, reciclado, purgas y purificación final. El modelo mejorado, con etapas adicionales de separación, lavado con agua, expansión, flashes y destilación, permitió obtener una corriente final de 4831,1 kg/h con una fracción molar de DME del 77,45 %.

Finalmente, el análisis de sensibilidad identificó las variables más influyentes del proceso, destacando la temperatura del reactor, la temperatura de salida de E3, la condensación de T1 y la presión de cabeza de T1.

Palabras clave: dimetil éter, syngas, síntesis directa, AVEVA Process Simulation, cinética LHHW, reactor PFR, purificación, análisis de sensibilidad.

Abstract

Dimethyl ether (DME) is an attractive alternative in the context of the energy transition due to its good combustion properties, high cetane number, low particulate matter formation and potential production from renewable synthesis gas. This Master's Thesis models and simulates the direct production of DME from syngas using AVEVA Process Simulation.

The reactor is described using Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW) kinetics, based on the formulations proposed by Nie et al. and Shim et al., considering methanol synthesis from CO and CO₂, methanol dehydration to DME and the water-gas shift reaction. To improve the thermodynamic consistency of the model, the equilibrium constants were calculated using NIST/Shomate data.

The reactor model was validated against the results reported by Luu et al. (2016), considering both an assumed space velocity case and a calibrated case, adequately reproducing the reference DME mole fraction and CO conversion. In addition, comparison with an independent Python model of a PFR reactor showed small deviations with respect to AVEVA.

Subsequently, the complete plant was simulated, including compression, thermal conditioning, reactor, gas-liquid separation, recycle, purge streams and final purification. The improved model, incorporating additional separation stages, water washing, expansion, flash units and distillation, produced a final stream of 4831.1 kg/h with a DME mole fraction of 77.45%.

Finally, the sensitivity analysis identified the most influential process variables, highlighting the reactor temperature, the outlet temperature of E3, the condensation temperature of T1 and the top pressure of T1.

Keywords: dimethyl ether, DME, syngas, direct synthesis, AVEVA Process Simulation, LHHW kinetics, PFR reactor, NIST/Shomate, purification, sensitivity analysis.

1. Introducción y justificación

1.1. Contexto energético actual

El sistema energético actual se encuentra en un proceso de transformación profunda debido a la necesidad de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, limitar el impacto ambiental de la actividad humana y disminuir la dependencia de recursos fósiles. El aumento de la temperatura media global, asociado a la acumulación de gases de efecto invernadero en la atmósfera, ha intensificado fenómenos climáticos extremos, la pérdida de biodiversidad y la presión sobre los sistemas naturales y socioeconómicos. Según el Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático, la temperatura media del planeta ya ha aumentado aproximadamente 1,5 °C respecto a los niveles preindustriales, lo que evidencia la urgencia de aplicar medidas de mitigación eficaces (Masson-Delmotte, 2020; Al-Breiki y Bicer, 2025).

En este contexto, la producción y el consumo de energía constituyen uno de los ejes centrales de la transición climática, ya que gran parte de las emisiones globales de CO₂ proceden de la combustión de carbón, petróleo y gas natural para la generación eléctrica, el transporte, la industria y la producción de calor. Por ello, la descarbonización del sistema energético requiere sustituir progresivamente los combustibles fósiles por fuentes renovables y tecnologías de baja emisión, pero también desarrollar soluciones que permitan almacenar, transportar y utilizar la energía de forma eficiente (Al-Breiki y Bicer, 2025; IEA, 2025).

Esta necesidad ha sido reconocida en distintos marcos internacionales. El objetivo número 7 de la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible establece como metas garantizar el acceso a una energía asequible, fiable, sostenible y moderna, así como incrementar de forma significativa la proporción de energías renovables en el consumo energético global (Organización de las Naciones Unidas, 2015). Del mismo modo, el Acuerdo de París fija el compromiso de limitar el aumento de la temperatura media global por debajo de 2 °C respecto a los niveles preindustriales, procurando además restringirlo a 1,5 °C (Naciones Unidas, 2015).

En el ámbito europeo, la Directiva 2009/28/CE inició un marco común para promover el uso de energía procedente de fuentes renovables, posteriormente reforzado por la Directiva (UE) 2018/2001, que elevó la ambición climática y energética de la Unión Europea para 2030 (Parlamento Europeo, 2009; Parlamento Europeo, 2018). En España, estos compromisos se han trasladado al marco normativo nacional mediante la ratificación del Acuerdo de París, publicada en el Boletín Oficial del Estado en febrero de 2017, y la Ley 7/2021, de cambio climático y transición energética. Esta ley establece que, para 2030, al menos el 42 % de la energía final consumida deberá proceder de fuentes renovables y que, como mínimo, el 74 % de la generación eléctrica deberá tener origen renovable (Instrumento de ratificación del Acuerdo de París, 2017; Ministerio de la Presidencia, 2021).

No obstante, la integración masiva de energías renovables plantea retos técnicos relevantes. Fuentes como la solar y la eólica presentan una producción variable, dependiente de las condiciones meteorológicas y no siempre coincidente con la demanda energética. Por ello, la transición energética no puede basarse únicamente en aumentar la

capacidad renovable instalada, sino que requiere también tecnologías de almacenamiento, transporte y conversión energética capaces de garantizar la estabilidad, flexibilidad y continuidad del suministro (Al-Breiki y Bicer, 2025).

En este escenario adquieren especial importancia los vectores energéticos sostenibles y los combustibles alternativos. Estos permiten almacenar energía renovable en forma química, facilitar su transporte y/o emplearla en sectores donde la electrificación directa resulta más compleja, como el transporte pesado, la industria intensiva en energía o determinados procesos químicos. Entre estas alternativas se encuentran el hidrógeno, el amoníaco, el metanol, los biocombustibles, los combustibles sintéticos y el dimetil éter, todos ellos con distinto grado de madurez tecnológica y diferentes ventajas en términos de almacenamiento, distribución y uso final (Al-Breiki y Bicer, 2025).

El desarrollo de nuevos combustibles responde tanto a una necesidad ambiental como a un reto tecnológico e industrial. En este contexto, la conversión de materias primas renovables o corrientes como el gas de síntesis (syngas) en productos de mayor valor añadido, como el dimetil éter, se presenta como uno de los puntos clave para lograr la descarbonización del sistema energético. Es por tanto crítico el desarrollo de análisis pormenorizados de la producción de este tipo de químicos mediante simulación para evaluar su viabilidad real y optimizar su proceso de producción.

1.2. El dimetil éter como combustible alternativo

El dimetil éter (CH_3OCH_3) (Figura 1) constituye el compuesto más sencillo dentro de la familia de los éteres. En condiciones normales de presión y temperatura se encuentra en estado gaseoso; sin embargo, puede condensarse con facilidad aplicando presiones relativamente bajas, en torno a 5–6 bar, suponiendo una ventaja significativa desde el punto de vista operativo (Misono, 2013; De Oliveira et al., 2014). Esta propiedad permite su manipulación como líquido en múltiples aplicaciones, facilitando su almacenamiento y transporte. De hecho, su comportamiento es análogo al de los gases licuados del petróleo (GLP), lo que hace posible aprovechar infraestructuras de distribución ya implantadas y, por ello, reducir los costes asociados a su nueva implementación (Misono, 2013; Uchida et al., 2000).

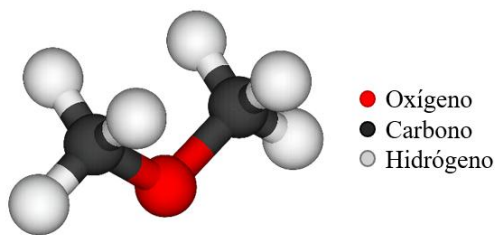


Figura 1: Representación molecular del DME (Al-Breiki y Bicer, 2025)

Desde la perspectiva de seguridad, el dimetil éter (DME) presenta características especialmente favorables. Es un gas incoloro que no presenta toxicidad ni efectos carcinogénicos, y además no forma compuestos peroxídicos explosivos. En caso de liberación, su rápida degradación en la atmósfera limita su impacto ambiental (Olah et al., 2009; Arcoumanis et al., 2008). Su almacenamiento en condiciones presurizadas se considera seguro, siempre que se empleen materiales adecuados, como polímeros tipo teflón, debido a su incompatibilidad con ciertos elastómeros. Asimismo, su olor dulce

característico a concentraciones elevadas facilita la detección de fugas sin necesidad de añadir agentes odorantes, lo que contribuye a reforzar su seguridad en el manejo y operación (Semelsberger et al., 2006).

El DME presenta un conjunto de propiedades que explican su interés como combustible alternativo, especialmente en motores de encendido por compresión. Su elevado número de cetano, definido como un indicador de la capacidad de autoignición de un combustible, se sitúa normalmente por encima de 55, superando al del diésel convencional, que suele encontrarse entre 40 y 55, lo que favorece un menor retraso de ignición y una combustión más eficiente (Park y Lee, 2013; Mondal y Yadav, 2019). Además, al tratarse de una molécula oxigenada y sin enlaces C–C, su combustión reduce de forma muy significativa la formación de partículas carbonosas y elimina las emisiones de SO_x, al no contener azufre (Arcoumanis et al., 2008; Styring et al., 2021). También se han descrito reducciones importantes de NO_x frente al diésel, asociadas a sus características de combustión y a su elevado calor latente de vaporización (Semelsberger et al., 2006; Park y Lee, 2013). Estas propiedades han hecho que el DME se considere especialmente atractivo para aplicaciones en transporte pesado, un sector donde la electrificación directa presenta mayores dificultades.

Junto a su uso como combustible, el DME posee una notable versatilidad industrial (Figura 2). Puede emplearse como sustituto parcial del GLP en aplicaciones domésticas, en mezclas de hasta el 20 % en masa sin modificaciones relevantes en los equipos, así como en calderas, quemadores y motores (Gogate, 2018). También se utiliza como propelente en aerosoles y refrigerante, sustituyendo a compuestos clorofluorocarbonados, y como materia prima para obtener productos químicos como acetato de metilo, sulfato de dietilo u olefinas (Gogate, 2018; Bakare et al., 2018). Esta última aplicación resulta especialmente interesante desde la perspectiva de la química sostenible, ya que el DME renovable podría actuar como plataforma intermedia para obtener productos petroquímicos de menor huella de carbono.

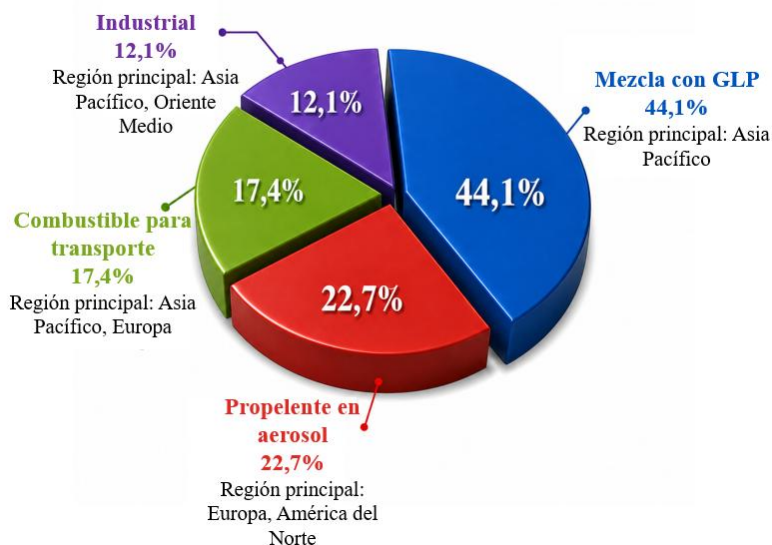


Figura 2: Distribución del uso global del DME (Dataintelo, 2026; elaboración propia)

Desde el punto de vista de mercado, la mayor parte del DME producido actualmente sigue siendo de origen fósil, principalmente a partir de metanol obtenido de gas de síntesis procedente de gas natural o carbón (Figura 3).

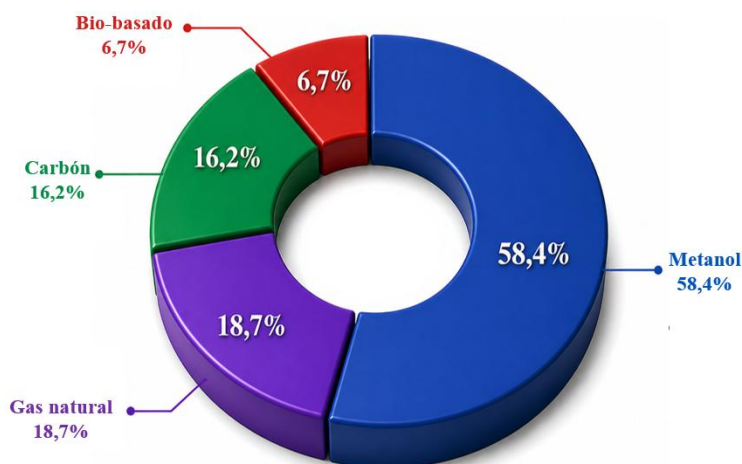


Figura 3: Estructura del mercado del DME en función de las materias primas de producción (Dataintelo, 2026, elaboración propia)

A escala global, la producción anual de DME se sitúa en el orden de varios millones de toneladas, habiendo pasado de aproximadamente 5 Mt en 2016 a valores cercanos a 10 Mt en la actualidad, con una capacidad industrial concentrada principalmente en Asia (Fleisch et al., 2012). Este crecimiento viene acompañado de una expansión del mercado, que alcanzó en torno a 5.000–6.000 millones de dólares en 2020 y presenta previsiones de crecimiento sostenido en los próximos años, impulsado principalmente por su uso como sustituto del GLP y del diésel (Figura 4) (DataIntelto, 2021). No obstante, la posibilidad de producirlo a partir de fuentes renovables, como biomasa, biogás o metanol verde, ha favorecido el desarrollo de nuevas instalaciones a menor escala. En este sentido, destacan proyectos como la planta piloto BioDME en Suecia o la planta comercial de Oberon Fuels en California, con capacidades del orden de decenas de miles de toneladas anuales, lo que evidencia el creciente interés en su producción sostenible (Hansen et al., 2014; Oberon Fuels, 2021).

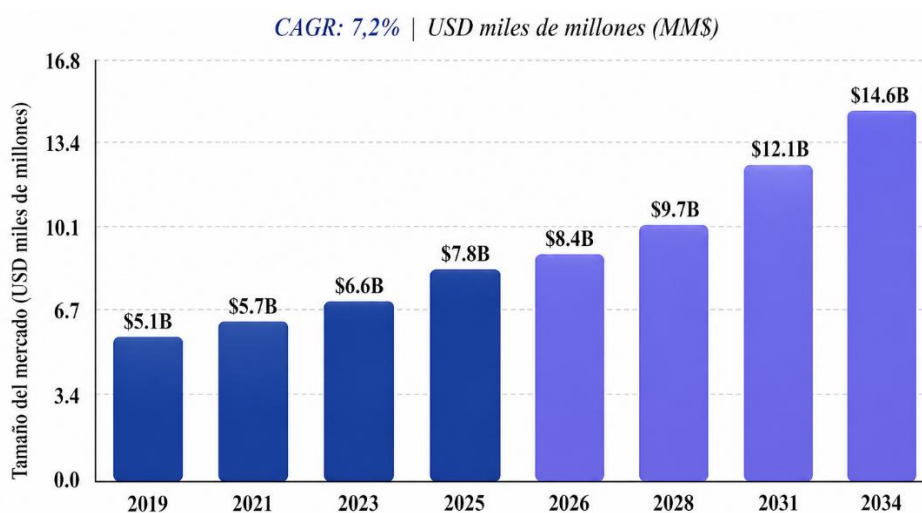


Figura 4: Tamaño y pronóstico del mercado global del DME (Dataintelo, 2026)

Por ello, el interés del DME no se limita a sus prestaciones como combustible, sino que reside en su capacidad para conectar la valorización de residuos, la producción de combustibles alternativos y la transición hacia una industria química menos dependiente de recursos fósiles.

1.3. Producción de dimetil éter a partir de gas de síntesis

1.3.1. Selección del gas de síntesis como corriente de alimentación

En el desarrollo de rutas para la producción de combustibles alternativos pueden considerarse diversas materias primas, como gas natural, fracciones petrolíferas, biomasa, biogás o corrientes ricas en CO₂. Sin embargo, frente a estas opciones específicas, el gas de síntesis (syngas) destaca como una alternativa especialmente versátil, al actuar como una plataforma intermedia capaz de integrar múltiples fuentes de carbono en un único esquema de proceso. Se trata de una materia prima consolidada a nivel industrial desde el siglo XIX, inicialmente utilizada para suministro energético y posteriormente evolucionada hacia un intermedio clave en la producción de combustibles líquidos, productos químicos y energía (Lopes, 2019).

Esta capacidad de transformación resulta especialmente relevante en el contexto actual, ya que a partir del syngas pueden obtenerse compuestos de alto valor añadido como metanol, dimetil éter, combustibles sintéticos o hidrógeno. Además, puede generarse mediante múltiples tecnologías, como reformado de metano, oxidación parcial o gasificación de carbón, biomasa o residuos, lo que permite adaptar el proceso a diferentes recursos disponibles, incluyendo fuentes renovables (Lopes, 2019). Por otra parte, su composición puede ajustarse mediante etapas de acondicionamiento para optimizar la relación H₂/CO/CO₂, lo que influye directamente en la eficiencia de conversión y la selectividad del proceso. Por todo ello, el syngas se posiciona como la opción más adecuada para el estudio de procesos de síntesis de combustibles, especialmente en el contexto de simulación y optimización (Millán Ordóñez, 2023).

1.3.2. Naturaleza y características del syngas

El syngas es una mezcla gaseosa compuesta principalmente por hidrógeno (H₂) y monóxido de carbono (CO), acompañados en menor proporción por dióxido de carbono (CO₂), vapor de agua, metano (CH₄) e inertes. Su composición depende tanto de la materia prima como de la tecnología empleada en su producción (Lopes, 2019; Millán Ordóñez, 2023). Se obtiene habitualmente mediante procesos termoquímicos como el reformado de hidrocarburos (reforma con vapor, oxidación parcial o reformado autotérmico) o la gasificación de carbón, biomasa y residuos.

Desde el punto de vista funcional, el syngas actúa como una plataforma de síntesis capaz de transformarse, mediante distintas rutas catalíticas, en una amplia variedad de productos de valor añadido. Su principal ventaja radica en la posibilidad de ajustar su composición para adaptarla a los requerimientos de cada proceso, lo que permite optimizar tanto la conversión como la selectividad hacia los productos deseados (Millán Ordóñez, 2023).

1.3.3. Rutas de producción de DME

A nivel industrial, la producción de DME a partir de syngas puede realizarse mediante dos rutas principales: la síntesis indirecta en dos etapas y la síntesis directa en una sola etapa (Figura 5) (Lopes, 2019; Peinado Cebrián, 2022; Ordóñez, 2023).

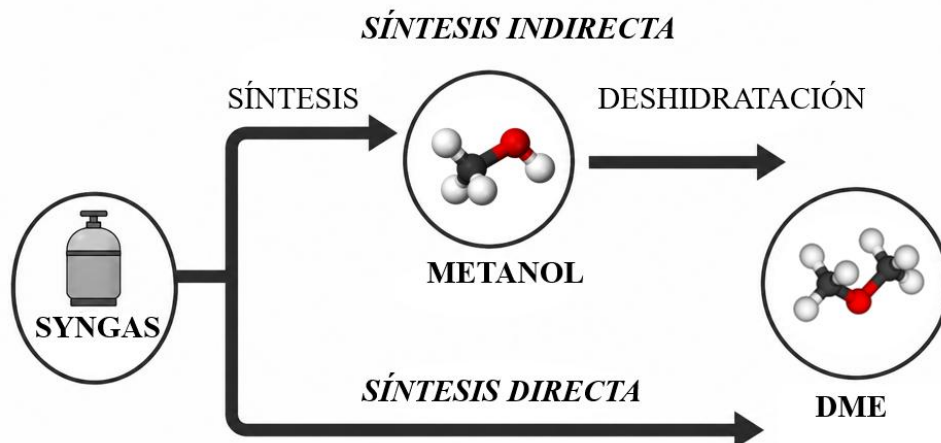
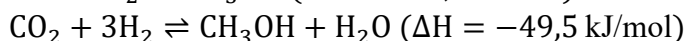
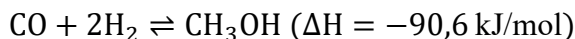


Figura 5: Esquema de las rutas de producción de DME a partir de syngas (Elaboración propia)

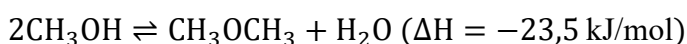
1.3.3.1. Síntesis indirecta

La síntesis indirecta (Figura 6) constituye la ruta industrial más consolidada y se basa en la producción intermedia de metanol, seguida de su deshidratación en una etapa posterior. En una primera fase, el gas de síntesis se convierte en metanol mediante reacciones de hidrogenación del CO y del CO₂:



Estas reacciones tienen lugar sobre catalizadores tipo Cu/ZnO/Al₂O₃ (CZA), operando típicamente en el rango de 220 – 280 °C y a presiones elevadas (5 – 10 MPa), condiciones que permiten maximizar la actividad catalítica manteniendo la estabilidad del sistema (Peinado Cebrián, 2022). Sin embargo, la síntesis de metanol está limitada termodinámicamente, lo que se traduce en conversiones por paso relativamente bajas (15 – 25 %) y la necesidad de implementar sistemas de recirculación de gases no reaccionados.

En una segunda etapa, el metanol obtenido se somete a deshidratación catalítica sobre sólidos ácidos, como γ-Al₂O₃ o zeolitas, dando lugar a DME según la reacción:



Esta reacción se lleva a cabo generalmente entre 200 y 360 °C y presiones moderadas, siendo también de carácter exotérmico. La necesidad de purificar previamente el metanol, así como la posterior separación de productos (DME, agua y metanol no reaccionado), introduce una elevada complejidad en el proceso, incrementando tanto los costes energéticos como de inversión.

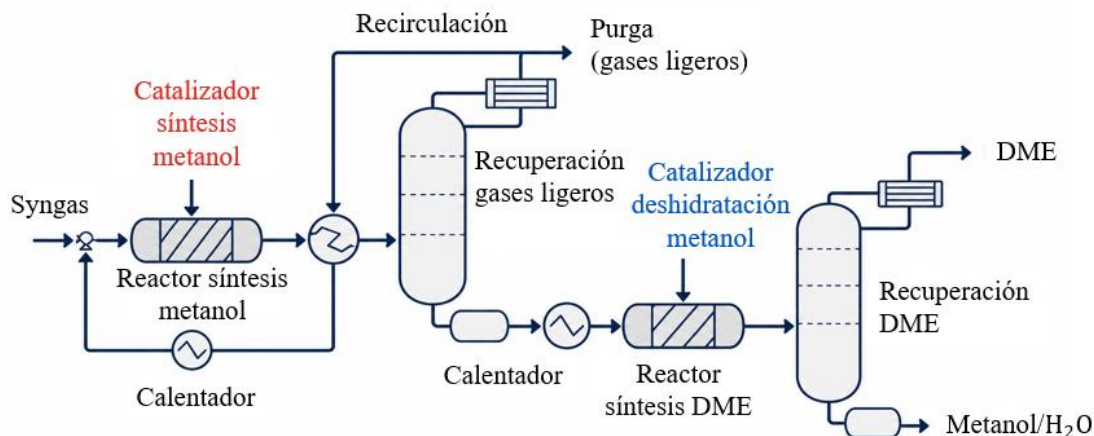
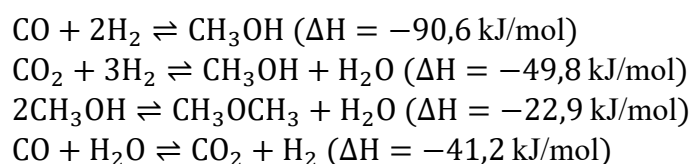


Figura 6: Diagrama simplificado del proceso indirecto de producción de DME (Ordóñez, 2023)

1.3.3.2. Síntesis directa

La síntesis directa de DME (Figura 7) representa una alternativa más reciente basada en la integración de las etapas de formación de metanol y su deshidratación en un único reactor. En este caso, el gas de síntesis se transforma directamente en DME mediante un conjunto de reacciones simultáneas:



El proceso requiere el uso de catalizadores bifuncionales que integren una fase activa para la síntesis de metanol (habitualmente $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$) y una fase ácida para su deshidratación ($\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ o zeolitas). Esta configuración permite que el metanol formado se consuma de manera inmediata, desplazando el equilibrio químico y aumentando la conversión global del carbono.

Desde el punto de vista operativo, la síntesis directa presenta ventajas significativas, como la simplificación del esquema de proceso, la eliminación de etapas intermedias de purificación y la reducción de los requerimientos energéticos. Además, resulta especialmente eficiente cuando se emplean gases de síntesis con alto contenido en CO_2 , como los derivados de biomasa o procesos de captura de carbono (Peinado Cebrián, 2022).

No obstante, esta integración también implica ciertos desafíos técnicos, entre los que destacan la elevada formación de agua, que puede provocar la desactivación de los catalizadores y la mayor complejidad en la separación de los productos, debido a la presencia simultánea de DME, metanol, CO_2 y gases no reaccionados.

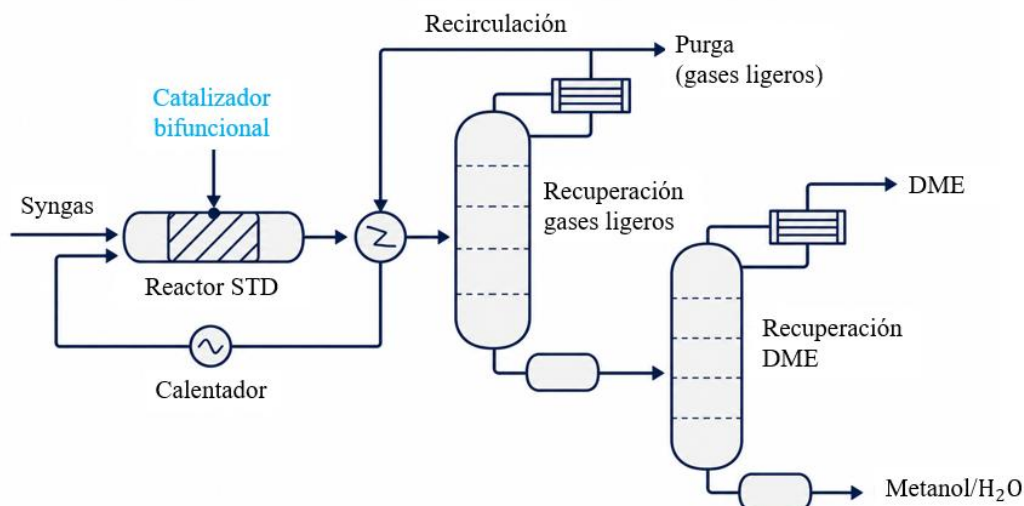


Figura 7: Diagrama simplificado del proceso directo de producción de DME (Newman, 2006)

1.4. Estado del arte en modelado y simulación de procesos de DME

El modelado y la simulación de procesos para la producción de DME han adquirido un papel central en el desarrollo de rutas sostenibles de combustibles alternativos, permitiendo analizar, optimizar y escalar procesos complejos antes de su implementación industrial. En este contexto, la literatura muestra una evolución desde modelos simplificados basados en equilibrio hacia simulaciones rigurosas que integran cinética, termodinámica y evaluación económica.

1.4.1. Herramientas y enfoques de modelado

La mayor parte de la literatura se ha desarrollado en entornos Aspen¹. En este sentido, Kumar et al. (2025) emplean Aspen Plus para simular la conversión de biogás en DME mediante un esquema que integra reformado autotérmico (ATR) y síntesis directa, incorporando análisis de sensibilidad sobre variables operativas clave como temperatura, presión y composición del syngas, con el objetivo de optimizar la producción y el dimensionamiento de equipos. Por su parte, Lopes (2019) desarrolla una simulación rigurosa en Aspen HYSYS® para la producción de DME a partir de gas de síntesis derivado de vinaza, incluyendo un modelado completo del proceso (reacción, separación y purificación) junto con su evaluación económica, alcanzando elevados niveles de pureza y eficiencia.

Más recientemente, el modelado se ha extendido hacia la optimización energética, incorporando herramientas como Aspen Energy Analyzer (AEA), que permiten diseñar redes de intercambio de calor y reducir costes operativos y emisiones, como se muestra en Lopes et al. (2024).

En paralelo, herramientas como AVEVA Process Simulation® (APS) han ido ganando relevancia en el ámbito industrial, especialmente en entornos donde se requiere una mayor flexibilidad en la definición de modelos cinéticos y su integración con sistemas de

¹ <https://www.aspentech.com/en>

operación y gemelos digitales. A diferencia de los entornos Aspen, APS permite una implementación más directa de submodelos cinéticos definidos por el usuario (por ejemplo, mediante velocidades de reacción explícitas), lo que resulta especialmente útil en procesos complejos como la síntesis directa de DME, donde el correcto planteamiento de las ecuaciones cinéticas es crítico para el cierre del modelo del reactor. No obstante, su aplicación en estudios académicos sigue siendo limitada, lo que pone de manifiesto una brecha entre herramientas industriales avanzadas y su explotación en la literatura científica.

Desde el punto de vista metodológico, los modelos actuales se apoyan en:

- Modelos termodinámicos avanzados (frecuentemente NRTL-RK) para describir sistemas no ideales.
- Modelos cinéticos tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW), especialmente en procesos catalíticos heterogéneos.
- Representación detallada de operaciones unitarias (reactores, columnas de separación, compresores e intercambiadores).

1.4.2. Principales líneas de investigación

En el ámbito del modelado y simulación de procesos de producción de DME, la literatura ha estado históricamente dominada por estudios basados en la síntesis indirecta. Este enfoque ha sido ampliamente estudiado debido a su menor complejidad de modelado y a la disponibilidad de datos cinéticos y termodinámicos consolidados. Además, se apoya en tecnologías industriales maduras y bien establecidas, lo que ha favorecido su adopción en numerosos trabajos de simulación y diseño de procesos (Arcoumanis et al., 2007).

Sin embargo, en los últimos años se observa un cambio claro en la tendencia de investigación hacia la síntesis directa de DME. Este enfoque integra en un único reactor la síntesis de metanol, la reacción *water-gas shift* y la deshidratación de metanol, lo que permite superar limitaciones termodinámicas asociadas a la síntesis de metanol y aumentar la conversión global del gas de síntesis. Tal y como se recoge en la literatura reciente, la conversión continua de metanol a DME desplaza el equilibrio de las reacciones de síntesis, favoreciendo mayores rendimientos y una mejor eficiencia del proceso.

Este cambio de tendencia también está motivado por la necesidad de desarrollar procesos más intensificados y eficientes, especialmente en el contexto de producción de DME a partir de fuentes renovables o residuales. En este sentido, trabajos recientes como los de Kumar et al. (2025) o Lopes (2019) se centran en la simulación de procesos de síntesis directa, incorporando modelos cinéticos avanzados y análisis de sensibilidad para optimizar las condiciones de operación.

No obstante, la síntesis directa presenta una mayor complejidad desde el punto de vista del modelado, ya que requiere describir sistemas altamente acoplados y exotérmicos, con múltiples reacciones simultáneas y fuerte dependencia de la cinética y de las condiciones de operación. Por ello, aunque actualmente representa la línea de investigación más activa y prometedora, su desarrollo está más ligado a estudios recientes y aún presenta mayores incertidumbres en comparación con la ruta indirecta.

De forma complementaria, se observa un creciente interés en el uso de materias primas alternativas, como biogás, biomasa o corrientes ricas en CO₂, lo que introduce nuevas variables en la simulación debido a la variabilidad en la composición del syngas. Asimismo, existe una tendencia hacia la integración de análisis técnico, energético y económico dentro de los modelos de simulación, permitiendo evaluar la viabilidad del proceso de forma más realista y alineada con las necesidades industriales.

1.5. Necesidad de validación y análisis de sensibilidad

La validación de modelos de simulación es una etapa esencial para garantizar la fiabilidad de los resultados obtenidos. Dado que los modelos constituyen una aproximación matemática del proceso, su utilidad depende de su capacidad para reproducir datos experimentales o resultados de referencia. Un modelo validado permite predecir el comportamiento del sistema bajo diferentes condiciones operativas, reduciendo la necesidad de experimentación directa y facilitando el análisis de múltiples escenarios de forma rápida y económica.

En procesos como la síntesis de DME, esta validación resulta especialmente crítica debido a la complejidad del sistema, caracterizado por múltiples reacciones acopladas y una fuerte dependencia de las condiciones de operación.

Entre las variables críticas del proceso destacan la temperatura, la presión, la composición del syngas (relación H₂/CO/CO₂), el tiempo de residencia y las condiciones del catalizador, todas ellas con una influencia significativa en la conversión y selectividad del proceso.

En este contexto, el análisis de sensibilidad desempeña un papel clave en el diseño y optimización, ya que permite evaluar el impacto de estas variables sobre el rendimiento del sistema. Su aplicación facilita la identificación de condiciones óptimas de operación, el estudio de la robustez del proceso frente a perturbaciones y la detección de parámetros críticos, siendo especialmente relevante en sistemas con materias primas variables como biogás o residuos.

1.6. Marco del proyecto de investigación

1.6.1. Contexto del proyecto europeo

El presente trabajo se enmarca en el contexto del proyecto europeo METHCESFUEL (Renewable Methanol-Based Synthetic Multifuel Production), proyecto financiado dentro del programa Horizon Europe y en el que participa la Universidad Loyola Andalucía. El proyecto está orientado al desarrollo de tecnologías avanzadas para la producción de combustibles sintéticos renovables. Este proyecto aborda uno de los principales retos energéticos actuales: la transición hacia sistemas energéticos descarbonizados, seguros y sostenibles.

El enfoque del proyecto se basa en la integración de captura de CO₂, hidrógeno verde y almacenamiento termoquímico de energía, con el objetivo de producir combustibles sintéticos como metanol, metano y DME a partir de fuentes renovables. En particular, el DME se plantea como un combustible clave por su capacidad de sustituir directamente a combustibles fósiles en transporte, generación eléctrica e industria, utilizando infraestructuras existentes.

El sistema propuesto se estructura en tres etapas principales: (i) producción de metanol a partir de CO_2 e hidrógeno, (ii) conversión de metanol a gas de síntesis, y (iii) transformación de este en combustibles finales como DME y metano, integrando además estrategias de recuperación térmica para mejorar la eficiencia global del proceso. Este enfoque permite avanzar hacia sistemas energéticos más flexibles, capaces de integrar energías renovables intermitentes como solar y eólica.

Asimismo, el proyecto se alinea con iniciativas estratégicas europeas como REPowerEU, contribuyendo a la reducción de la dependencia de combustibles fósiles y al fortalecimiento de la autonomía energética de la Unión Europea.

1.6.2. Relación del trabajo con líneas de investigación actuales

El desarrollo de este trabajo se sitúa dentro de varias de las principales líneas de investigación actuales en ingeniería de procesos y energía:

- Power-to-X (PtX): conversión de electricidad renovable en combustibles sintéticos mediante hidrógeno verde y captura de CO_2 .
- Síntesis de combustibles renovables: especialmente metanol y DME como vectores energéticos sostenibles.
- Modelado y simulación de procesos complejos: integración de cinética, termodinámica y operaciones unitarias en entornos digitales.
- Optimización energética y almacenamiento termoquímico: mejora de la eficiencia global del sistema mediante recuperación de calor y almacenamiento de energía.
- Digitalización de procesos industriales: uso de modelos avanzados y gemelos digitales para diseño, operación y optimización.

En este contexto, el proyecto METHCESFUEL incorpora explícitamente el uso de modelado multiescala y optimización digital del proceso, lo que lo sitúa en la frontera del estado del arte en simulación de sistemas energéticos complejos.

El presente TFM se alinea directamente con estas líneas, centrándose en el modelado y simulación del proceso de síntesis de DME a partir de gas de síntesis, contribuyendo a la comprensión y optimización de una de las etapas clave del sistema. En particular, el uso de herramientas avanzadas de simulación permite analizar el comportamiento del reactor, evaluar condiciones de operación y estudiar la integración del proceso dentro del sistema global.

1.6.3. Relevancia científica y tecnológica

Desde el punto de vista científico, el estudio del proceso de síntesis de DME presenta un elevado interés debido a la complejidad de los fenómenos implicados, que incluyen múltiples reacciones acopladas, comportamiento no ideal de mezclas y fuerte interacción entre cinética y transferencia de calor. El desarrollo de modelos fiables y validados permite avanzar en la comprensión de estos sistemas y mejorar su predicción bajo distintas condiciones operativas.

Desde el punto de vista tecnológico, el DME se posiciona como un combustible estratégico en la transición energética, gracias a su alto número de cetano, baja emisión

de contaminantes y compatibilidad con infraestructuras existentes. Su producción a partir de fuentes renovables permite reducir significativamente las emisiones de gases de efecto invernadero y avanzar hacia sistemas energéticos neutros en carbono.

Además, la integración de procesos de producción de DME dentro de esquemas más amplios de combustibles sintéticos, como el propuesto en METHCESFUEL, representa una vía prometedora para el almacenamiento de energía renovable y la descarbonización de sectores difíciles de electrificar.

En este contexto, el desarrollo de herramientas de simulación avanzadas y su aplicación a estos procesos resulta clave para reducir incertidumbres, optimizar diseños y acelerar la transferencia de estas tecnologías desde el laboratorio hasta su implementación industrial.

1.7. Justificación del trabajo

El desarrollo de modelos de simulación en procesos de producción de DME es fundamental para el análisis y optimización de sistemas complejos en el contexto de la transición energética. Sin embargo, la utilidad de estos modelos no depende únicamente de su capacidad de cálculo, sino de su fiabilidad y robustez, lo que hace imprescindible su validación y evaluación frente a variaciones en las condiciones de operación.

El problema concreto que se aborda en este trabajo es la limitada evaluación de la validez y sensibilidad de los modelos de simulación aplicados a la síntesis de DME, especialmente en lo relativo a su capacidad para representar el comportamiento del proceso bajo diferentes escenarios operativos.

A partir de la revisión del estado del arte, se identifica una brecha en la literatura asociada a la escasa atención prestada a la validación de modelos y al análisis de sensibilidad en simulaciones de procesos completos. La mayoría de los estudios se centran en la obtención de resultados en condiciones concretas, sin evaluar en profundidad la consistencia del modelo ni su respuesta ante cambios en variables críticas como la temperatura, la presión o la composición del gas de síntesis.

En este contexto, el enfoque adoptado en este trabajo se centra en la validación del modelo de simulación del proceso de síntesis de DME, evaluando su capacidad para reproducir comportamientos coherentes y físicamente consistentes. Para ello, se incorpora un análisis de sensibilidad que permite estudiar la influencia de las principales variables operativas sobre los resultados del modelo, identificar los parámetros más relevantes y analizar su estabilidad. Este enfoque contribuye a mejorar la confianza en los resultados obtenidos y a reforzar la aplicabilidad del modelo en el análisis y optimización de procesos reales.

2. Objetivos

El objetivo principal del presente Trabajo Fin de Máster es el desarrollo, validación y aplicación de un modelo de simulación del proceso de síntesis directa de dimetil éter a partir de gas de síntesis, mediante herramientas avanzadas de simulación de procesos, con el fin de analizar su comportamiento, evaluar su aplicabilidad en un contexto industrial y estudiar su respuesta frente a variaciones en las condiciones de operación.

Para alcanzar este objetivo general, se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Implementar un modelo cinético representativo de la síntesis directa de dimetil éter, basado en modelos de referencia de la literatura, en el entorno de simulación AVEVA Process Simulation.
- Validar el modelo del reactor mediante la comparación con datos bibliográficos, empleando un procedimiento de calibración basado en el ajuste iterativo de la velocidad espacial del gas, con el fin de reproducir las condiciones del caso de referencia.
- Analizar el comportamiento del reactor en términos de conversión de reactivos y distribución de productos, asegurando la coherencia física y termodinámica del modelo.
- Desarrollar la simulación completa del proceso, incluyendo las principales unidades de operación necesarias para el acondicionamiento, separación y purificación del producto, configurando un esquema representativo de planta industrial.
- Diseñar conceptualmente la planta de proceso mediante la integración de las distintas unidades de operación, evaluando la interacción entre equipos y su impacto en el rendimiento global del sistema.
- Realizar un análisis de sensibilidad del proceso, evaluando la influencia de variables operativas clave como la temperatura, la presión, la relación de alimentación y la velocidad espacial del gas, con el fin de identificar tendencias de comportamiento, condiciones óptimas de operación y limitaciones del sistema.
- Interpretar los resultados del análisis de sensibilidad para comprender la respuesta del proceso ante variaciones en las condiciones de operación, apoyando la toma de decisiones en el diseño y operación del sistema.
- Aplicar criterios de ingeniería de procesos para el análisis y la interpretación de los resultados obtenidos, incluyendo la verificación del comportamiento del sistema y la identificación de posibles limitaciones del modelo.
- Planificar y desarrollar el proyecto de forma estructurada, siguiendo las fases propias de un proyecto de investigación en ingeniería, incluyendo la organización del trabajo, el seguimiento del progreso y la adaptación de las decisiones en función de los resultados obtenidos.
- Integrar el trabajo en el contexto de un proyecto de investigación, participando en el análisis de resultados y en la toma de decisiones orientadas al desarrollo del modelo y su aplicación, en línea con las competencias de gestión de la I+D+i.

3. Modelado del sistema

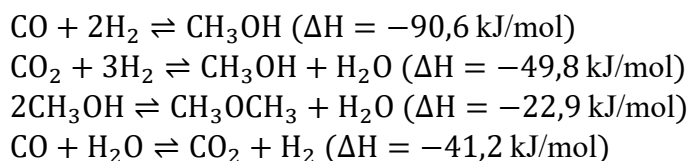
3.1. Modelo cinético

La validación del modelo del reactor de síntesis de dimetil éter constituye una etapa fundamental dentro del desarrollo del presente trabajo, ya que permite comprobar la capacidad del modelo implementado en AVEVA Process Simulation para reproducir el

comportamiento real del sistema bajo condiciones representativas de operación. Con el objetivo de garantizar que los escenarios simulados estén respaldados por una base científica sólida, se adopta como referencia un modelo cinético procedente de la literatura, concretamente el propuesto por Shim y colaboradores (2009), ampliamente utilizado en la simulación de la síntesis directa de DME. Dicho trabajo desarrolla un modelo de síntesis directa de DME a partir de gas de síntesis procedente de carbón mediante un reactor implementado en Aspen Plus, empleando expresiones cinéticas tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW) y la ecuación de estado Soave-Redlich-Kwong (SRK).

A partir de dicho artículo, se definen los parámetros necesarios para la simulación en AVEVA Process Simulation, incluyendo los componentes que intervienen en el proceso, las condiciones de operación del reactor y la composición de la alimentación. El sistema considerado está constituido por una mezcla de gas de síntesis compuesta por CO, CO₂, H₂ y N₂, incorporando además las especies generadas durante la reacción, como metanol, agua y dimetil éter, de forma que el modelo represente de manera coherente el conjunto de reacciones implicadas. Las condiciones de operación se fijan en 243 °C y 50 bar, asumiendo funcionamiento isoterma, en concordancia con el caso de referencia seleccionado.

El modelo del reactor se basa en la implementación de un esquema cinético de tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW), tomando como referencia el modelo cinético intrínseco propuesto por Nie et al. (2005) y posteriormente adaptado a simulación de proceso por Shim et al. (2009). Nie et al. (2005) estudiaron la síntesis directa de DME a partir de gas de síntesis sobre un catalizador bifuncional compuesto por una función de síntesis de metanol y una función ácida de deshidratación, en un intervalo de operación de 3–7 MPa y 220–260 °C. Por su parte, Shim et al. (2009) implementaron dicho enfoque cinético en Aspen Plus para simular la síntesis de DME a partir de gas de síntesis procedente de carbón, utilizando la ecuación de estado SRK y contrastando el modelo con datos experimentales de una planta piloto de gasificación de carbón de 3 t/día. El sistema de reacción implementado en AVEVA contempla cuatro reacciones reversibles acopladas que describen el proceso global:



La Figura 8 muestra el modelo desarrollado en AVEVA Process Simulation para la síntesis directa de dimetil éter, incluyendo la corriente de alimentación de gas de síntesis (SRC1), el reactor tubular (R1), auxiliares (compresores e intercambiadores) y las corrientes de salida utilizadas durante la validación del modelo.

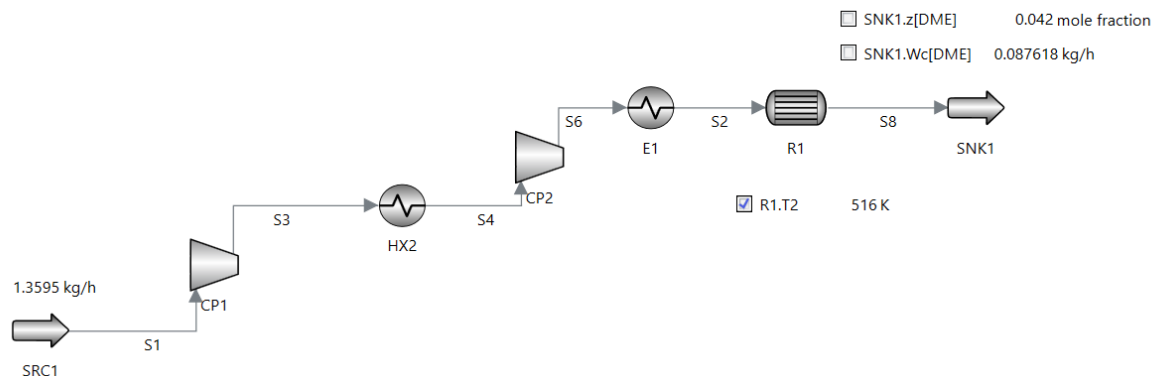


Figura 8: Diagrama de flujo del modelo de síntesis directa de DME implementado en AVEVA Process Simulation. La figura se muestra en mayor tamaño en la Figura 25 del Anexo.

Estas reacciones se modelan mediante expresiones cinéticas de tipo LHHW en las que la velocidad de reacción se define como una función de la presión parcial de los reactivos, un término de reversibilidad que introduce el equilibrio químico y un término de adsorción que representa la ocupación de la superficie catalítica. En el modelo implementado en AVEVA, esta formulación se expresa directamente en términos de velocidades de reacción, siendo la forma general:

$$r_i = \frac{k_i \cdot \Pi f_{reactivos} \cdot rev_i}{Den_i}$$

Donde r_i es la velocidad de la reacción i , k_i es la constante cinética de la reacción, f_i representa la fugacidad del componente j , rev_i es el término de reversibilidad y Den_i corresponde al término de adsorción característico de cada reacción.

En el modelo implementado en AVEVA no se emplean presiones parciales directamente, sino fugacidades. Estas se calculan según la siguiente expresión:

$$f_i = \phi_i \cdot y_i \cdot P$$

donde f_j es la fugacidad del componente j , ϕ_j es su coeficiente de fugacidad, y_j es su fracción molar en fase gas y P es la presión total del sistema. Los coeficientes de fugacidad se calculan mediante el modelo termodinámico SRK-Huron-Vidal empleado en la simulación.

El término de reversibilidad se define a partir del grado de aproximación al equilibrio:

$$\beta_i = \frac{\prod f_{\text{productos}}^{\alpha_{ij}}}{K_{eq,i} \cdot \prod f_{\text{reactivos}}}$$

donde β_i representa la proximidad de la reacción i al equilibrio, α_{ij} es el exponente cinético de la especie i en la reacción j , $K_{eq,i}$ es la constante de equilibrio de dicha reacción y los productos de fugacidades corresponden a las especies que intervienen en cada reacción.

En AVEVA, este término se implementa como:

$$rev_i = \max(0, 1 - \beta_i)$$

Cabe destacar que la formulación implementada no coincide exactamente con la expresión algebraica original propuesta por Shim et al. (2009), sino que corresponde a una reformulación equivalente en términos de factores de reversibilidad del tipo $(1 - \beta_i)$, lo que permite una implementación numéricamente más estable en el entorno de simulación, limitando la reacción a la dirección termodinámicamente permitida hacia los productos. De este modo, cuando la reacción se aproxima al equilibrio, el término $1 - \beta_i$ disminuye, reduciendo la velocidad de reacción. Si las condiciones favoreciesen la reacción inversa, la función $\max(0, 1 - \beta_i)$ evita que aparezcan velocidades negativas en el modelo.

Las constantes de equilibrio de las reacciones consideradas en el modelo ($K_{eq,i}$) se obtuvieron a partir de la variación de energía libre de Gibbs estándar de reacción, $\Delta G^\circ(T)$. Este procedimiento permite calcular cada constante de equilibrio en función de la temperatura a partir de datos termodinámicos fundamentales de las especies implicadas, usando datos termodinámicos fundamentales del NIST WebBook.

La relación general utilizada para el cálculo de la constante de equilibrio fue:

$$K_{eq,i}(T) = \exp\left(\frac{-\Delta G^\circ(T)}{RT}\right)$$

Donde $K_{eq}(T)$ es la constante de equilibrio a la temperatura (T), (R) es la constante universal de los gases y (T) es la temperatura absoluta. La energía libre de Gibbs estándar de reacción se calculó mediante la siguiente expresión:

$$\Delta G^\circ(T) = \Delta H^\circ(T) - T \cdot \Delta S^\circ(T)$$

En esta expresión, $\Delta H^\circ(T)$ y $\Delta S^\circ(T)$ corresponden, respectivamente, a la entalpía y entropía estándar de reacción corregidas a la temperatura de operación. Para ello, se partió de los valores estándar a 298,15 K y se corrigieron mediante las capacidades caloríficas de las especies participantes:

$$\Delta H^\circ(T) = \Delta H^\circ(298,15) + \sum_i v_i \int_{298,15}^T C_{p,i}(T) dT$$

$$\Delta S^\circ(T) = \Delta S^\circ(298,15) + \sum_i v_i \int_{298,15}^T \frac{C_{p,i}(T)}{T} dT$$

donde v_i representa el coeficiente estequiométrico de cada especie, siendo positivo para los productos y negativo para los reactivos. Las capacidades caloríficas $C_{p,i}(T)$ se calcularon, para cada especie, mediante los polinomios de Shomate disponibles en NIST WebBook:

$$C_{p,i}(T) = A_i + B_i t + C_i t^2 + D_i t^3 + \frac{E_i}{t^2}$$

siendo:

$$t = \frac{T}{1000}$$

Este enfoque garantiza una mayor coherencia termodinámica que el uso de expresiones polinómicas simplificadas, ya que cada constante queda asociada directamente a la variación de energía libre de Gibbs de la reacción correspondiente.

En el modelo se considera que las constantes K_{eq} son adimensionales, tomando como estado estándar una presión de referencia $P^0 = 1$ bar. Por tanto, la expresión de equilibrio puede formularse en términos de fugacidades como:

$$K_p = \prod_j \left(\frac{f_j}{P^0} \right)^{\nu_j}$$

Cuando las fugacidades se expresan en bar y el estado estándar es $P^0 = 1$ bar, la expresión anterior puede escribirse de forma simplificada como:

$$K_p = \prod_j f_j^{\nu_j}$$

Esta metodología permite obtener valores de $K_{p,i}(T)$ consistentes con la estequiometría de cada reacción y con la formulación termodinámica empleada en la simulación.

En la Tabla 1 se recogen los datos termodinámicos empleados para el cálculo de las constantes de equilibrio de las reacciones consideradas en el modelo cinético del reactor. En ella se observa que el cálculo de $K_{p,i}(T)$ se basa en propiedades termodinámicas estándar de cada especie, concretamente la entalpía estándar de formación, la entropía estándar y la capacidad calorífica en función de la temperatura, expresada mediante los polinomios de Shomate.

Tabla 1: Datos termodinámicos y método de cálculo de las constantes de equilibrio

Dato termodinámico	Descripción / fuente	Valores o expresión
$\Delta H_f^\circ(298)$ [kJ/mol]	Entalpías estándar de formación (NIST WebBook, fase gas)	CO: -110,5 CO ₂ : -393,5 H ₂ : 0 CH ₃ OH: -200,9 DME: -184,1 H ₂ O: -241,8
$S^\circ(298)$ [J/(mol·K)]	Entropías estándar (NIST WebBook, fase gas)	CO: 197,7 CO ₂ : 213,8 H ₂ : 130,7 CH ₃ OH: 239,8 DME: 266,4 H ₂ O: 188,8
$C_p(T)$	Polinomios Shomate (NIST WebBook por especie)	$C_p = A + Bt + Ct^2 + Dt^3 + E/t^2$ con $t = T/1000$ [J/(mol·K)]
$K_p(T)$ a 516 K	Valores calculados	$K_{eq1}=2,55 \times 10^{-3}$ $K_{eq2}=2,50 \times 10^{-5}$ $K_{eq3}=13,82$ $K_{eq4}=101,98$

Como verificación adicional, los valores obtenidos se compararon con datos bibliográficos disponibles. Para la reacción de síntesis de metanol a partir de CO, Graaf et al. (1986) reportan un valor de $K_{p1} = 2,18 \cdot 10^{-3}$ a 516 K, mientras que el valor calculado en este trabajo fue $K_{eq1} = 2,55 \cdot 10^{-3}$. La relación entre ambos valores es de 1,17, lo que se considera aceptable teniendo en cuenta las diferencias asociadas a la fuente de datos termodinámicos, el estado estándar adoptado y la formulación empleada.

Además, se comprobó la consistencia interna entre las constantes de equilibrio. En particular, la reacción R2 puede expresarse como combinación de las reacciones R1 y R4, de forma que se cumple aproximadamente:

$$K_{p2} \approx K_{p1} / K_{p4}$$

En las expresiones cinéticas de tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson, los coeficientes de adsorción representan la afinidad de cada especie química por los centros activos del catalizador. Estos parámetros permiten cuantificar la contribución de cada componente a la ocupación de la superficie catalítica y, por tanto, influyen directamente en el término inhibidor de las velocidades de reacción.

En el modelo empleado, K_{CO} , K_{CO_2} y K_{H_2} son los coeficientes de adsorción de CO, CO₂ y H₂, respectivamente. Estos coeficientes se combinan con las fugacidades de las especies gaseosas para construir los términos de adsorción.

Las constantes cinéticas se calculan mediante la ecuación de Arrhenius:

$$k_i = A_i \exp\left(\frac{E_i}{RT}\right)$$

donde los parámetros A_i y E_i se han tomado directamente del modelo modificado de Shim et al., garantizando la coherencia con el modelo de referencia utilizado en la validación.

La dependencia con la temperatura de los coeficientes de adsorción se expresa mediante una relación de tipo Arrhenius:

$$K_i = A_i \cdot \exp\left(\frac{E_i}{RT}\right)$$

donde A_i es el factor preexponencial, E_i es el parámetro energético introducido en el modelo, R es la constante universal de los gases y T es la temperatura absoluta. En esta formulación, los valores de E_i se introducen con el signo indicado en la Tabla 1 de parámetros, por lo que las constantes cinéticas aparecen con valores negativos en dicho término.

Los parámetros utilizados en el modelo corresponden al conjunto cinético modificado de Shim et al. (2009), empleado en la validación del reactor ilustrados en la Tabla 2:

Tabla 2: Parámetros usados en el modelo

Parámetro	A _i	E _i (J·mol ⁻¹)
k₁	7.380 (mol·kg ⁻¹ ·s ⁻¹ ·bar ⁻³)	-58.464
k₂	5.059 (mol·kg ⁻¹ ·s ⁻¹ ·bar ⁻³)	-67.509
k₃	1.062 (mol·kg ⁻¹ ·s ⁻¹ ·bar ⁻³)	-43.473
k₄	7,3976 (mol·kg ⁻¹ ·s ⁻¹ ·bar ⁻³)	-10.808
K_{CO}	3,917·10 ⁻⁶ bar ⁻¹	-49.884
K_{CO2}	1,858·10 ⁻⁶ bar ⁻¹	-53.795
K_{H2}	0,6716 bar ⁻¹	-6.476
K_{CH3OH}	7,928·10 ⁻⁴ bar ⁻¹	- 48.221

De forma específica, las velocidades de reacción utilizadas en el modelo son las siguientes.

Para la síntesis de metanol a partir de CO:

$$r_{CO} = \frac{k_1 \cdot f_{CO} \cdot f_{H_2}^2 \cdot rev_1}{(1 + K_{CO}f_{CO} + K_{CO_2}f_{CO_2} + K_{H_2}f_{H_2})^3}$$

$$\beta_1 = \frac{f_{CH_3OH}}{K_{eq,1} \cdot f_{CO} \cdot f_{H_2}^2}$$

$$rev_1 = \max(0, 1 - \beta_1)$$

Para la síntesis de metanol a partir de CO₂:

$$r_{CO_2} = \frac{k_2 \cdot f_{CO_2} \cdot f_{H_2}^3 \cdot rev_2}{(1 + K_{CO}f_{CO} + K_{CO_2}f_{CO_2} + K_{H_2}f_{H_2})^4}$$

$$\beta_2 = \frac{f_{CH_3OH} \cdot f_{H_2O}}{K_{eq,2} \cdot f_{CO_2} \cdot f_{H_2}^3}$$

$$rev_2 = \max(0, 1 - \beta_2)$$

Para la deshidratación de metanol a dimetil éter:

$$r_{DME} = \frac{k_3 \cdot f_{CH_3OH} \cdot rev_3}{(1 + \sqrt{K_{CH_3OH}f_{CH_3OH}})^2}$$

$$\beta_3 = \frac{f_{DME} \cdot f_{H_2O}}{K_{eq,3} \cdot f_{CH_3OH}^3}$$

$$rev_3 = \max(0, 1 - \beta_3)$$

Para la reacción water-gas shift:

$$r_{WGS} = \frac{k_4 \cdot f_{H_2O} \cdot rev_4}{1 + K_{CO}f_{CO} + K_{CO_2}f_{CO_2} + \sqrt{K_{H_2}}f_{H_2}}$$

$$\beta_4 = \frac{f_{CO_2} \cdot f_{H_2}}{K_{eq,4} \cdot f_{CO} \cdot f_{H_2O}}$$

$$rev_4 = \max(0, 1 - \beta_4)$$

A partir de las expresiones cinéticas anteriores, los términos de adsorción se construyen en función de las fugacidades de las especies que compiten por los centros activos del catalizador. Para las reacciones de síntesis de metanol a partir de CO, síntesis de metanol a partir de CO₂ y reacción *water-gas shift*, se define un denominador común:

$$base_D = 1 + K_{CO}f_{CO} + K_{CO_2}f_{CO_2} + K_{H_2}f_{H_2}$$

A partir de este término común se construyen los denominadores específicos de cada reacción:

$$Den_1 = base_D^3$$

$$Den_2 = base_D^4$$

$$Den_4 = base_D$$

Para la reacción de deshidratación de metanol, el término de adsorción adopta una forma específica dependiente del metanol:

$$Den_3 = (1 + \sqrt{K_{MeOH}f_{MeOH}})^2$$

donde K_{MeOH} es el coeficiente de adsorción del metanol y f_{MeOH} su fugacidad.

3.2. Modelo matemático del reactor

El reactor se modela como un reactor tubular catalítico en régimen estacionario. Las principales hipótesis realizadas son:

- Régimen estacionario: se considera que el reactor opera en estado estacionario, con caudal de alimentación constante, de acuerdo con la hipótesis empleada por Shim et al. (2009).
- Comportamiento de flujo pistón: el reactor se representa como un reactor tubular tipo PFR, suponiendo ausencia de mezcla axial significativa. Esta aproximación permite describir la variación de la composición a lo largo del reactor.
- Reactor catalítico de lecho fijo: aunque el reactor se implementa como un PFR en el entorno de simulación, se interpreta como un reactor catalítico de lecho fijo, ya que el medio reaccionante se encuentra en fase gaseosa y las reacciones tienen lugar sobre un catalizador sólido.
- Sistema heterogéneo gas-sólido: se considera una mezcla gaseosa reaccionante en contacto con un catalizador sólido bifuncional, responsable tanto de la síntesis de metanol como de la deshidratación de metanol a DME.
- Catalizador homogéneamente distribuido: se asume que el catalizador presenta una distribución uniforme en el lecho, con una fracción de huecos constante. No se consideran canalizaciones, zonas muertas ni variaciones locales en la carga catalítica.

- Reacciones en fase vapor: las reacciones se definen en fase gas, empleando fugacidades en lugar de presiones parciales ideales para tener en cuenta el comportamiento no ideal de la mezcla a presión elevada.
- Cinética LHHW: las velocidades de reacción se describen mediante expresiones de Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson, incorporando términos cinéticos, términos de adsorción y términos de reversibilidad asociados al equilibrio químico.
- Reacciones reversibles acopladas: el modelo contempla las reacciones principales de la síntesis directa de DME: síntesis de metanol a partir de CO, síntesis de metanol a partir de CO₂, deshidratación de metanol y reacción water-gas shift.
- Propiedades termodinámicas mediante ecuación de estado: las propiedades de la mezcla se calculan mediante una ecuación de estado adecuada para sistemas gaseosos a presión elevada, siguiendo el planteamiento de los modelos de referencia.
- Ausencia de desactivación catalítica: se desprecia la pérdida de actividad del catalizador durante la simulación. En particular, no se considera el envenenamiento catalítico por H₂S, de acuerdo con la hipótesis adoptada por Shim et al. (2009).
- Ausencia de reacciones secundarias: únicamente se consideran las reacciones principales incluidas en el modelo cinético. No se contemplan rutas secundarias de formación de hidrocarburos, olefinas u otros subproductos.

La evolución del caudal molar de cada componente a lo largo del lecho catalítico se describe mediante el balance molar diferencial respecto a la masa de catalizador:

$$\frac{dF_i}{dW} = \sum_{j=1}^4 v_{ij} r_j$$

donde F_i es el caudal molar del componente i , W es la masa de catalizador, v_{ij} es el coeficiente estequiométrico del componente i en la reacción j , y r_j es la velocidad de la reacción j . Los coeficientes estequiométricos son negativos para los reactivos y positivos para los productos.

La matriz estequiométrica de las reacciones consideradas queda definida de la siguiente forma (Tabla 3):

Tabla 3: Matriz estequiométrica de las reacciones

	R1	R2	R3	R4
CO	-1	0	0	-1
CO₂	0	-1	0	+1
H₂	-2	-3	0	+1
H₂O	0	+1	+1	-1
CH₃OH	+1	+1	-2	0
DME	0	0	+1	0

Por tanto, las velocidades de reacción se combinan con los coeficientes estequiométricos para calcular la formación o consumo neto de cada especie a lo largo del reactor. De forma explícita:

$$\begin{aligned}\frac{dF_{CO}}{dW} &= -r_1 - r_4 \\ \frac{dF_{CO_2}}{dW} &= -r_2 + r_4 \\ \frac{dF_{H_2}}{dW} &= -2r_1 - 3r_2 + r_4 \\ \frac{dF_{H_2O}}{dW} &= r_2 + r_3 - r_4 \\ \frac{dF_{CH_3OH}}{dW} &= r_1 + r_2 - 2r_3 \\ \frac{dF_{DME}}{dW} &= r_3\end{aligned}$$

De esta forma, el modelo permite calcular la variación de la composición de la corriente gaseosa a lo largo del lecho catalítico y obtener la composición de salida del reactor. A partir de dicha composición se evalúan las principales variables de validación del modelo, como la conversión de CO, la conversión de H₂, el rendimiento a DME y la fracción molar de DME en la corriente de salida.

Una vez implementado el modelo con las condiciones de entrada reportadas en la literatura, se procede a su validación. Sin embargo, el artículo de referencia no proporciona el caudal de alimentación al reactor, lo que impide definir directamente la velocidad espacial del gas (GHSV). Por este motivo, se adopta un procedimiento de calibración basado en un ajuste iterativo externo, en el cual se varía el valor de GHSV mediante la modificación del caudal de entrada hasta reproducir las composiciones de salida reportadas en el estudio de referencia. Este procedimiento consiste en ejecutar múltiples simulaciones manteniendo constantes el resto de variables del sistema, hasta encontrar un punto de operación en el que las variables clave del proceso, como la fracción molar de dimetil éter y la conversión de monóxido de carbono, coincidan con los valores bibliográficos.

La calidad del ajuste se evalúa mediante indicadores de rendimiento basados en balances de materia, como la conversión de monóxido de carbono, definida como:

$$X_{CO} = \frac{F_{CO,in} - F_{CO,out}}{F_{CO,in}} \cdot 100$$

así como mediante la comparación de las fracciones molares de salida de los principales componentes. La validación se considera satisfactoria cuando el modelo reproduce de forma coherente tanto las tendencias como los valores característicos del sistema, dentro de márgenes de error aceptables.

Los resultados obtenidos se muestran en la sección 4.1.

3.3. Modelo de la planta completa

Una vez validado el modelo cinético del reactor, se desarrolló la simulación de la planta completa de producción de dimetil éter mediante síntesis directa a partir de gas de síntesis. El objetivo de esta etapa fue representar de forma integrada no solo la conversión química de los reactivos, sino también las operaciones de acondicionamiento, separación, reciclado y purificación necesarias para obtener una corriente final rica en DME.

La síntesis directa de DME no puede analizarse únicamente a partir del rendimiento del reactor. La corriente de salida contiene DME junto con CO₂, agua, metanol y gases no convertidos, por lo que la viabilidad del proceso depende en gran medida de la recuperación del producto y de su separación respecto a los compuestos ligeros, especialmente el CO₂. Por este motivo, la simulación de la planta completa se planteó como una herramienta para identificar los principales cuellos de botella del proceso y evaluar posibles mejoras en la sección de purificación.

El esquema general empleado se basó en configuraciones de plantas de DME descritas en la literatura, donde el proceso suele incluir compresión del syngas, reacción catalítica, separación gas-líquido, reciclado de gases no convertidos, purga de inertes y etapas de absorción, flash y destilación para recuperar y purificar el DME producido (Lopes et al., 2024; Karagoz, 2014, Fedeli et al., 2024). En este trabajo, dicha estructura se adaptó al entorno de simulación de AVEVA Process Simulation, empleando un reactor tubular flujo pistón (PFR) de lecho fijo y una sección de separación progresivamente modificada a partir de los resultados obtenidos para conseguir la corriente más pura posible de DME con una merma de producto moderada.

En primer lugar, se implementó un modelo base con una única columna de destilación, con el objetivo de representar el comportamiento global del proceso y estudiar la integración del reactor dentro de una planta completa. Posteriormente, a partir de las limitaciones propias de esta configuración simplificada y tomando como referencia esquemas descritos en la bibliografía, se desarrolló un modelo mejorado con una sección de separación más completa.

3.3.1. Caso base

La primera configuración desarrollada corresponde al modelo base de la planta de síntesis directa de DME. Este modelo incluye las principales etapas necesarias para representar el proceso completo: alimentación de gas de síntesis, compresión, precalentamiento, reacción catalítica, enfriamiento de la corriente de salida, separación gas-líquido, reciclado de gases no convertidos, purga de inertes y una etapa de destilación para la recuperación del producto (Fedeli et al., 2024).

La alimentación fresca de gas de síntesis se introduce inicialmente a baja presión y se comprime hasta las condiciones de operación del reactor mediante dos etapas de compresión con enfriamiento intermedio. Esta configuración se adoptó porque resulta más representativa que una compresión directa en una sola etapa, ya que permite reducir el incremento de temperatura asociado al proceso de compresión y aproximar el modelo a esquemas de acondicionamiento empleados en simulaciones de plantas de DME a partir de syngas (Lopes et al., 2019; Fedeli et al., 2024).

Tras la compresión, la corriente fresca se mezcla con la corriente de reciclado procedente de la sección de separación. De esta forma, se reproduce el funcionamiento habitual de un lazo de reacción, en el que los gases no convertidos se recirculan hacia el reactor con el fin de aumentar el aprovechamiento global de los reactivos. La incorporación de reciclado y purga es habitual en procesos basados en gas de síntesis, debido a la necesidad de mejorar la conversión global y evitar la acumulación de especies inertes como CH₄ y N₂ (Azizi et al., 2014; Karagoz, 2014).

La corriente resultante se precalienta mediante intercambio térmico con la corriente caliente de salida del reactor. Esta estrategia permite recuperar parte del calor sensible de los productos y reducir la demanda energética externa del proceso, siendo una solución habitual en configuraciones de simulación orientadas a mejorar la integración energética de la planta (Fedeli et al., 2024).

El reactor constituye el núcleo de la planta, ya que en ella tienen lugar las reacciones asociadas a la síntesis directa de DME a partir de gas de síntesis. La corriente de salida del reactor contiene una mezcla formada por DME, metanol, agua, CO₂ y gases no convertidos, por lo que requiere una etapa posterior de separación (Azizi et al., 2014; Lopes et al., 2019).

En el modelo base, la corriente de salida del reactor se enfría y se envía a una unidad de separación gas-líquido. La fase gaseosa, formada principalmente por reactivos no convertidos e inertes, se divide entre una corriente de reciclado y una corriente de purga. La purga es necesaria para evitar la acumulación progresiva de especies poco reactivas dentro del lazo de reacción. Por otro lado, la fase líquida, enriquecida en DME y compuestos oxigenados, se envía a una única columna de destilación para iniciar la recuperación del producto. La Figura 9 muestra el esquema general del modelo base implementado en AVEVA Process Simulation.

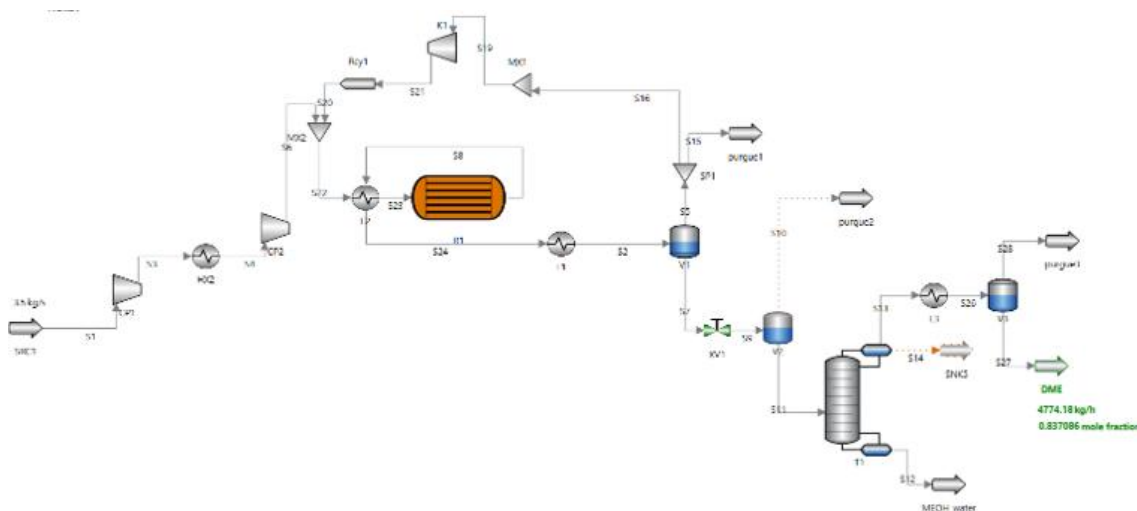


Figura 9: Modelo base de la planta de síntesis directa de DME implementado en AVEVA Process Simulation. La figura se muestra en mayor tamaño en la Figura 26 del Anexo.

3.3.2. Caso mejorado

A partir del caso base se desarrolló una segunda configuración de planta con una sección de separación y purificación más elaborada. Esta modificación se planteó con el objetivo de representar de forma más realista el tratamiento de la corriente de salida del reactor, tomando como referencia configuraciones descritas en la bibliografía para procesos de producción de DME a partir de gas de síntesis (Lopes et al., 2019; Fedeli et al., 2024).

En el modelo mejorado se mantuvo la estructura principal del proceso: alimentación de syngas, compresión, integración térmica, reactor PFR, enfriamiento, separación gas-líquido, reciclado y purga. La principal diferencia se introdujo en la sección de separación posterior al reactor, donde se incorporaron nuevas operaciones unitarias para mejorar la gestión de los compuestos ligeros y la purificación final del producto.

Esta modificación se plantea a partir de las limitaciones observadas en el caso anterior, en el que una fracción significativa del DME producido no se recuperaba en la corriente final de producto, sino que se perdía junto con la corriente rica en metanol. Esta pérdida reducía el rendimiento global del proceso y evidenciaba que la separación DME/MeOH no era suficientemente eficaz en el modelo base. Por ello, el caso optimizado busca incrementar la recuperación de DME y reducir su arrastre con el metanol, mejorando así la pureza de la corriente final y la eficiencia global de la etapa de purificación.

En esta configuración, la corriente procedente de la separación inicial se dirige hacia una etapa adicional de separación en la que se introduce una corriente de agua. Esta etapa permite representar una operación de contacto/separación orientada a modificar la distribución de los compuestos presentes en la mezcla y favorecer la separación posterior del DME respecto a los gases ligeros. La incorporación de agua como agente de separación se basa en configuraciones descritas en procesos de producción de DME, donde se emplean etapas de absorción o lavado para favorecer la retirada de compuestos ligeros antes de la purificación final (Lopes et al., 2019; Fedeli et al., 2024).

Además, se incorporaron válvulas de expansión, unidades flash intermedias, corrientes de purga y una corriente de fuel gas, con el fin de representar de forma más completa el tratamiento de las fracciones gaseosas no recicladas. Este tipo de operaciones permite separar parcialmente gases ligeros, recuperar fracciones condensables y gestionar las corrientes no aprovechables dentro del proceso, de acuerdo con esquemas de simulación previamente descritos en la literatura (Karagoz, 2014; Fedeli et al., 2024).

La corriente líquida obtenida tras esta sección se envía posteriormente a una columna de destilación final, donde se lleva a cabo la separación entre DME, metanol y agua. De este modo, el modelo mejorado no considera la recuperación del DME como una única etapa aislada, sino como una secuencia de operaciones de separación, más próxima a las configuraciones propuestas en estudios previos (Lopes et al., 2019; Karagoz, 2014).

La Figura 10 muestra el esquema general del modelo mejorado implementado en AVEVA Process Simulation.

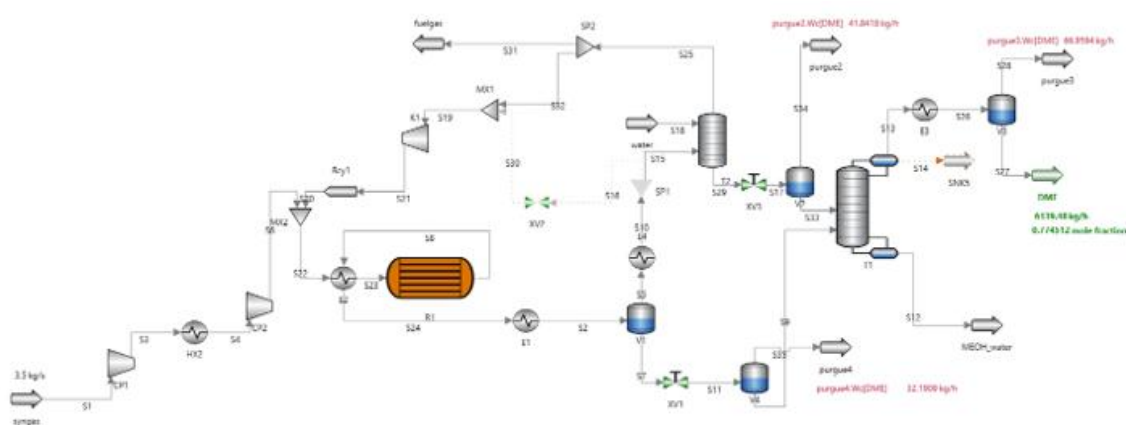


Figura 10: Modelo mejorado de la planta de síntesis directa de DME implementado en AVEVA Process Simulation. La figura se muestra en mayor tamaño en la Figura 27 del Anexo.

3.3.2.1. Corriente de alimentación

La alimentación fresca considerada en el modelo se definió con un caudal másico de 3,5 kg/s, una temperatura de 20 °C y una presión inicial de 2 bar. El caudal se empleó como base de cálculo para el escalado de la simulación, mientras que la temperatura y presión iniciales representan una corriente de gas de síntesis previa a su acondicionamiento mediante compresión y precalentamiento. La composición molar utilizada se muestra en la Tabla 4:

Tabla 4: Composición molar de la corriente de entrada

Componente	Fracción molar
H₂	0,56
CO	0,32
CH₄	0,07
CO₂	0,03
H₂O	0,01
N₂	0,01
DME	0
Metanol	0

Esta composición representa un syngas rico en H₂ y CO, con presencia minoritaria de CO₂, CH₄, H₂O e inertes. La relación H₂/CO de la alimentación es aproximadamente 1,75, valor próximo a los rangos empleados habitualmente en estudios de síntesis de combustibles oxigenados a partir de gas de síntesis. La presencia mayoritaria de H₂ y CO responde a que ambos constituyen los reactivos principales de la ruta directa, mientras que el CO₂, aunque minoritario en la alimentación, resulta fundamental porque participa en los equilibrios del sistema y aparece como contaminante relevante en el producto final. (Lopes, 2019; Azizi et al., 2014; Peinado Cebrián, 2022).

La inclusión de CH₄ y N₂ permite representar la presencia de compuestos inertes o poco reactivos habituales en corrientes reales de syngas. Estos componentes no participan de forma significativa en la síntesis de DME, pero son importantes a escala de planta porque tienden a acumularse en el lazo de reciclado. Por ello, su presencia justifica la incorporación de una corriente de purga para evitar la dilución progresiva de los reactivos principales. Finalmente, la presencia de una pequeña fracción de agua permite representar una alimentación no completamente seca y resulta coherente con la existencia de equilibrios asociados a la reacción water-gas shift y a la deshidratación de metanol.

3.3.2.2. Acondicionamiento de la alimentación, compresión y mezcla con reciclado

La primera etapa del modelo mejorado corresponde al acondicionamiento de la corriente fresca de gas de síntesis antes de su entrada al reactor. Los equipos principales incluidos en esta sección son los compresores CP1 y CP2, el intercambiador de enfriamiento intermedio E1 y el mezclador MX2 en el que la alimentación fresca se combina con la corriente de reciclado.

La alimentación fresca de syngas se introduce inicialmente a 2 bar y 20 °C. Estas condiciones representan una corriente de entrada previa a su acondicionamiento, por lo que es necesario elevar la presión hasta el intervalo de operación del reactor. Para ello, se emplea una compresión en dos etapas, de acuerdo con configuraciones habituales descritas en la bibliografía para procesos de síntesis de DME y metanol a partir de gas de síntesis (Lopes, 2019).

En la primera etapa, el compresor CP1 incrementa la presión de la corriente fresca. Posteriormente, el intercambiador E1 permite reducir la temperatura alcanzada tras la compresión, actuando como enfriador intermedio. A continuación, el compresor CP2 completa la elevación de presión hasta alcanzar una presión próxima a 50 bar, adecuada para la entrada al sistema de reacción.

La compresión en dos etapas se adopta como una representación más realista que una única compresión directa desde baja presión hasta presión de reacción. Esta configuración permite limitar el incremento de temperatura asociado a la compresión y mejorar la eficiencia energética mediante enfriamiento intermedio.

La decisión de trabajar a presión elevada se justifica porque la síntesis de metanol y la síntesis directa de DME están favorecidas por el aumento de presión, al tratarse de sistemas en los que la formación de productos implica, de forma global, una disminución del número de moles gaseosos. Además, la literatura recoge condiciones habituales de operación para la síntesis de metanol y DME en rangos de presión elevados, aproximadamente entre 50 y 100 bar, y temperaturas del orden de 220–280 °C para catalizadores basados en Cu/ZnO/Al₂O₃ y fases ácidas (Peinado Cebrián, 2022; Azizi et al., 2014).

Tras la compresión, la alimentación fresca se mezcla con la corriente de reciclado de gases no convertidos. De este modo se genera la corriente real de entrada al reactor, que contiene tanto syngas fresco como especies recirculadas procedentes de las etapas de separación posteriores (Fedeli et al., 2024).

3.3.2.3. Precalentamiento de la alimentación al reactor

La etapa de precalentamiento está formada principalmente por el intercambiador de calor HX1, encargado de recuperar energía térmica de la corriente caliente de salida del reactor para elevar la temperatura de la corriente comprimida de alimentación.

Antes de la entrada al reactor, la corriente comprimida se precalentó mediante intercambio térmico con la corriente caliente de salida del reactor. Esta estrategia permite recuperar parte del calor sensible de los productos y reducir la demanda energética externa del proceso (Fedeli et al., 2024).

En el modelo, la alimentación al reactor alcanzó una temperatura próxima a 240 °C antes de entrar en el PFR, mientras que el reactor operó isotérmicamente a 260 °C. Esta configuración permite aproximar la corriente de alimentación al intervalo térmico de la síntesis directa de DME y, al mismo tiempo, representar un control térmico del reactor.

3.3.2.4. Reactor de síntesis directa de DME

La etapa de reacción está constituida por el reactor tubular de flujo pistón R1, correspondiente al modelo PFR previamente validado en el apartado anterior. Esta unidad

constituye el núcleo del proceso, ya que en ella tiene lugar la conversión del gas de síntesis en metanol, agua y dimetil éter mediante el esquema cinético LHHW implementado en AVEVA Process Simulation.

El reactor empleado en la simulación de la planta corresponde al modelo PFR previamente validado. Por este motivo, en este apartado no se vuelven a definir sus parámetros cinéticos ni sus condiciones internas de operación, ya que estos aspectos fueron establecidos y justificados durante la etapa de validación del modelo.

En la planta completa, el reactor se incorpora como la unidad central del proceso, recibiendo la corriente acondicionada de gas de síntesis procedente de la etapa de compresión, mezcla con reciclado e intercambio térmico. De este modo, el objetivo del presente apartado no es volver a analizar el comportamiento del reactor de forma aislada, sino explicar cómo se integra dentro del flowsheet global de producción de DME.

La corriente de alimentación al reactor se ajusta mediante las unidades previas de acondicionamiento para aproximarse a las condiciones empleadas en la validación. En concreto, la alimentación fresca se comprime hasta una presión próxima a la requerida por el modelo de reacción y posteriormente se precalienta mediante intercambio térmico con la corriente caliente de salida del reactor. Esta estrategia permite conectar el modelo cinético validado con una configuración de planta completa, manteniendo coherencia entre la etapa de reacción y el resto de operaciones unitarias.

En el modelo de AVEVA, el lecho catalítico se definió mediante los parámetros geométricos y físicos indicados en la Tabla 5. Estos valores permiten representar un reactor multitubular de lecho fijo, configuración habitual en reacciones gaseosas catalíticas y empleada en estudios de síntesis directa de DME por su capacidad para alojar el catalizador en tubos de pequeño diámetro, facilitar el control térmico y limitar los gradientes internos del reactor (Nie et al., 2005; Hu et al., 2008; Fedeli et al., 2024).

Tabla 5: Parámetros del lecho catalítico empleados en el reactor

Parámetro	Valor
Número de tubos	28.000
Longitud de los tubos	5 m
Diámetro interno de los tubos	22,5 mm
Porosidad del lecho ₂	0,4
Densidad del catalizador	1.380 kg/m ³
Temperatura de operación	260°C
Caída de presión	100 kPa

3.3.2.5. Enfriamiento y primera separación gas-líquido

Tras la salida del reactor, la corriente de productos se enfría y se somete a una primera separación bifásica. Los equipos principales de esta etapa son el intercambiador de enfriamiento posterior al reactor, el separador V1 y la válvula de expansión XV1.

La corriente de salida del reactor contiene una mezcla de DME, metanol, agua, CO₂ y gases no convertidos, principalmente H₂, CO, CH₄ y N₂. Antes de su envío a las unidades de separación, esta corriente se enfría con el objetivo de favorecer la condensación parcial de los compuestos oxigenados y facilitar la separación entre fase gaseosa y fase líquida.

El separador V1 realiza la primera división gas-líquido tras el enfriamiento de la corriente procedente del reactor. La fase gaseosa, rica en gases ligeros no convertidos, se dirige hacia la sección de tratamiento, reciclado y purga. La fase líquida, enriquecida en DME, metanol y agua, continúa hacia una etapa de expansión mediante la válvula XV1 y posterior separación adicional.

3.3.2.6. Separación de gases ligeros, reciclado y purga

La sección de tratamiento de gases ligeros está formada por unidades de separación y acondicionamiento que permiten recuperar parte de los reactivos no convertidos y retirar una fracción de purga. Entre los equipos principales se incluyen la columna T2, la válvula de expansión XV3, el separador V2 y las corrientes de reciclado y purga asociadas.

La columna T2 se configuró con 12 etapas teóricas y dos alimentaciones situadas en las etapas 1 y 12. Esta unidad opera a una presión de cabeza de 4800 kPa y con una pérdida de carga total de 20 kPa. Su función dentro del modelo es actuar como una etapa previa de separación/contacto, favoreciendo el tratamiento de la corriente procedente de la separación inicial resultado del separador bifásico V1 (apartado 3.3.2.8) antes de su envío a la purificación final.

A diferencia de una columna de destilación convencional, T2 no se configuró con condensador ni rehervidor. Esta decisión resulta adecuada porque su objetivo no es obtener directamente una corriente final purificada de DME, sino modificar la distribución de los componentes entre fases y facilitar la separación de gases ligeros, CO₂ y compuestos condensables en las etapas posteriores. Al operar a presión elevada, T2 permite mantener una mayor fracción de componentes condensables en fase líquida, reduciendo la carga de la columna final y mejorando la lógica global de separación del proceso.

Tras T2, la corriente se expande mediante XV3 y se introduce en el separador V2, que realiza una separación tipo flash. En esta unidad se retira una fase vapor como purga, mientras que la fase líquida continúa hacia la columna de destilación final T1.

La existencia de una corriente de purga es necesaria para evitar la acumulación de inertes y gases ligeros en el lazo de reciclado. No obstante, esta purga debe controlarse cuidadosamente, ya que también puede arrastrar una fracción de DME, reduciendo el rendimiento global del proceso.

3.3.2.7. Purificación final del DME

La purificación final del producto se lleva a cabo principalmente en la columna de destilación T1, apoyada por separadores bifásicos posteriores, especialmente V3, y por las unidades de enfriamiento asociadas. Esta sección tiene como objetivo concentrar el DME en la corriente final de producto y reducir su pérdida en corrientes secundarias, especialmente aquellas ricas en metanol.

La columna T1 se configuró como columna de destilación final. Esta unidad dispone de 20 etapas teóricas, condensador interno y rehervidor interno. Las alimentaciones se introducen en las etapas 5 y 15, permitiendo tratar corrientes de distinta composición dentro de la misma columna. La columna opera con una presión de cabeza de 900 kPa, una pérdida de carga total de 50 kPa, una temperatura de condensador de 40 °C y una relación de reflujo de 2,5.

La función de T1 es llevar a cabo la purificación principal del DME. Debido a su mayor volatilidad frente a metanol y agua, el DME tiende a concentrarse en la corriente de cabeza, mientras que los compuestos menos volátiles se desplazan preferentemente hacia el fondo. En esta unidad sí resulta necesario incorporar condensador, rehervidor y reflujo, ya que se busca establecer una separación vapor-líquido más definida y obtener una corriente de producto en cabeza enriquecida en DME.

La incorporación de esta sección de purificación responde a una de las principales limitaciones observadas en el caso anterior, donde una fracción significativa del DME producido se perdía junto con la corriente rica en metanol. Por tanto, el modelo optimizado no solo busca aumentar la pureza final del producto, sino también reducir el arrastre de DME hacia corrientes secundarias, mejorando la recuperación global del proceso.

Tras la destilación final, el separador V3 actúa como etapa de separación posterior, permitiendo obtener una corriente líquida rica en DME y retirar una fase vapor residual mediante purga. Esta operación contribuye a estabilizar la corriente final de producto y a reducir la presencia de compuestos ligeros no deseados.

La destilación constituye una operación habitual en la etapa final de purificación de DME dentro de configuraciones de planta descritas en la bibliografía (Karagoz, 2014; Lopes et al., 2019; Fedeli et al., 2024).

3.3.2.8. Separadores bifásicos

El modelo incorpora cuatro separadores bifásicos vapor-líquido, denominadas V1, V2, V3 y V4. Su función es dividir determinadas corrientes en una fase gaseosa, rica en compuestos ligeros, y una fase líquida, enriquecida en DME, metanol o agua según el punto del proceso. Este tipo de separación es habitual en plantas de síntesis de DME, donde la corriente posterior al reactor contiene gases no convertidos, CO₂, DME y compuestos oxigenados, por lo que se requieren etapas sucesivas de enfriamiento, expansión, flash y destilación para recuperar el producto (Lopes et al., 2019; Karagoz, 2014; Fedeli et al., 2024).

V1 realiza la primera separación gas-líquido tras el enfriamiento de la corriente de salida del reactor. La fase gaseosa se dirige hacia tratamiento posterior y reciclado, mientras que la fase líquida continúa hacia una etapa de expansión y separación adicional.

V4 recibe la corriente líquida procedente de V1 después de su expansión en XV1. Esta operación permite liberar gases ligeros disueltos antes de alimentar la columna T1, reduciendo la carga gaseosa de la destilación final.

V2 se sitúa después de la columna T2 y de la expansión en XV3. Su función es realizar una separación tipo flash, eliminando una fase vapor como purga y enviando la fase líquida hacia T1.

Finalmente, V3 actúa como separador final tras un enfriamiento previo, permitiendo obtener una corriente líquida rica en DME y retirar una fase vapor residual mediante purga.

En conjunto, V1–V4 permiten acondicionar las corrientes antes y después de las columnas, retirando gases ligeros y recuperando fases líquidas útiles para la purificación del DME. Este tipo de separación es habitual en plantas de síntesis de DME, donde la corriente posterior al reactor contiene gases no convertidos, CO₂, DME y compuestos oxigenados, por lo que se requieren etapas sucesivas de enfriamiento, expansión, flash y destilación para recuperar el producto (Lopes et al., 2019; Karagoz, 2014; Fedeli et al., 2024).

3.4. Purificación del dimetil éter

A partir de la revisión de la literatura científica e industrial, se han seleccionado y estructurado cuatro enfoques metodológicos reportados para la separación del sistema CO₂/DME: destilación fraccionada convencional e intensificada, absorción física de DME, absorción química de CO₂ y separación mediante membranas selectivas.

La inclusión de estas alternativas responde a la dificultad específica de separar CO₂ y DME en corrientes procedentes de la síntesis directa, donde ambos compuestos pueden aparecer junto con metanol, agua y gases no reaccionados. Dikić et al. (2023) atribuyen esta dificultad a la elevada afinidad entre CO₂ y DME y a la proximidad de sus curvas de equilibrio vapor-líquido, especialmente en el intervalo de presiones de interés para el proceso. Además, la especificación de producto recogida en la norma ISO 16861:2015 para DME combustible exige contenidos elevados de DME y límites muy bajos de CO₂, lo que convierte esta etapa en un punto crítico de la sección de purificación (Dikić et al., 2023).

3.4.1. Destilación fraccionada convencional e intensificada

La destilación fraccionada constituye una de las tecnologías de referencia para la purificación de DME, debido a su madurez operativa y a su disponibilidad en simuladores comerciales. En los procesos de síntesis directa, el efluente del reactor está formado por una mezcla multicomponente que incluye DME, CO₂, CH₃OH, H₂O y gases incondensables como H₂, CO, CO₂ o CH₄. Esta composición obliga a diseñar una sección de separación capaz de retirar primero los gases ligeros y, posteriormente, reducir el contenido en CO₂ y otros compuestos oxigenados hasta alcanzar la especificación del producto final.

Muñoz González (2018) analiza la separación de DME en un proceso de síntesis directa mediante Aspen, empleando operaciones de separación tipo flash y columnas de destilación. En su estudio, una única columna no permite alcanzar una pureza molar de DME del 99,99%, por lo que se plantea un tren de dos columnas y se realizan análisis de sensibilidad sobre variables como el número de etapas, la etapa de alimentación, la presión, la relación de reflujo y la relación destilado/alimentación. En la primera columna se obtiene una corriente de fondo con una fracción molar de DME próxima al 97,4%, que posteriormente debe alimentarse a una segunda columna para aumentar la pureza del producto (Muñoz González, 2018). Estos resultados muestran que la destilación

convencional puede requerir configuraciones multietapa y condiciones de operación exigentes cuando se persiguen purezas elevadas de DME.

Como alternativa de intensificación, Dikić et al. (2023) proponen la destilación mejorada por arrastre, o *stripping enhanced distillation* (SED), para la separación CO₂/DME en rutas de síntesis directa de DME a partir de corrientes ricas en CO₂. Esta configuración integra la separación fraccionada y el stripping en una misma columna mediante la introducción de un gas ligero en contracorriente.

Los autores analizan esta alternativa en dos esquemas de producción de DME: SEDMES y DIDR. El término SEDMES procede de *Sorption Enhanced DME Synthesis* y hace referencia a una ruta de síntesis de DME intensificada por adsorción, en la que se elimina agua *in situ* mediante un sólido adsorbente para desplazar el equilibrio hacia la formación de DME y aumentar la conversión de CO₂ e H₂. Por su parte, DIDR hace referencia a la síntesis directa de DME integrada con reformado seco o tri-reformado, donde el metano y el CO₂ se transforman previamente en gas de síntesis, que posteriormente se convierte directamente en DME dentro del proceso integrado.

En el caso de SEDMES, Dikić et al. (2023) evalúan el uso de H₂ como gas de stripping, mientras que en el caso DIDR emplean CH₄. En ambos casos, se aprovechan gases presentes en el propio proceso, evitando la introducción de un agente externo de separación. Desde el punto de vista de simulación, los autores estudian presiones de 15, 20, 30 y 50 bar, número de etapas, relación de reflujo y caudal de gas de stripping, utilizando como criterios de comparación el consumo energético, las pérdidas de DME, la pureza del producto y el contenido residual de CO₂.

En el caso DIDR evaluado por Dikić et al. (2023), la comparación entre destilación convencional y *stripping enhanced distillation* muestra una reducción de la relación de reflujo de 0,97 a 0,68 al introducir 3,16 kmol/h de CH₄ como gas de stripping, manteniendo un contenido de CO₂ en el producto de 0,1 % en peso, una pureza de DME superior al 99 % en peso y pérdidas de DME inferiores al 1 % en peso. En ese mismo caso, el consumo energético total disminuye de 522 a 427 kWh, lo que proporciona un rango de referencia para contrastar el efecto de la intensificación sobre la carga energética de la separación. Por tanto, en la metodología del presente trabajo, la destilación convencional e intensificada se considera una línea de comparación basada en el estudio de variables operativas como presión, número de etapas, relación de reflujo, caudal de stripping y recuperación de DME, sin asumir previamente cuál de las configuraciones resulta más favorable.

3.4.2. Absorción física de DME

La absorción física se basa en la transferencia preferente del DME desde una corriente gaseosa o bifásica hacia un disolvente líquido, manteniendo al CO₂ y a los gases incondensables mayoritariamente en la fase gaseosa. Tras la etapa de absorción, la corriente líquida rica en DME puede regenerarse mediante descompresión, flash, stripping o destilación, recuperándose una corriente enriquecida en DME y permitiendo la recirculación del disolvente.

Los disolventes con mayor respaldo bibliográfico e industrial para este sistema son el metanol, el agua y las mezclas agua/metanol. Peng et al. (2002) describe un proceso de

separación para la producción directa de DME en el que una mezcla física de metanol y DME actúa como disolvente de lavado para retirar DME y CO₂ de una corriente de gas de síntesis no convertido. En ese esquema, la corriente gaseosa empobrecida en DME se recicla al reactor, mientras que la corriente líquida procedente del absorbedor se envía a etapas posteriores de separación para recuperar DME y separar CO₂. De forma complementaria, Zubrin et al. (2018) plantea configuraciones absorber/stripper con agua o mezclas agua/metanol, indicando que la adición de metanol puede aumentar la solubilidad del DME en el disolvente. En una de las configuraciones descritas, se menciona una fracción molar de metanol del 30% en el disolvente y una temperatura de scrubber de 20 °C, lo que permite establecer una ventana inicial de operación para el análisis conceptual de esta alternativa (Zubrin et al. 2018).

Desde el punto de vista operativo, esta tecnología queda condicionada por la relación entre solubilidad, presión y temperatura. La absorción física se favorece generalmente a presiones elevadas y temperaturas moderadas o bajas, ya que estas condiciones aumentan la carga de DME en el disolvente. Sin embargo, una disminución excesiva de temperatura incrementa la demanda de refrigeración, mientras que un aumento de presión puede elevar el consumo de compresión. Por ello, el análisis metodológico debe contemplar variables como temperatura del absorbedor, presión de operación, caudal de disolvente, composición agua/metanol, recuperación de DME en la corriente líquida y energía necesaria para la regeneración del solvente.

El modelado de esta alternativa presenta una alta dependencia del método termodinámico seleccionado. Dikić et al. (2023) emplean la ecuación de estado Predictive Soave-Redlich-Kwong (PSRK) para representar el equilibrio vapor-líquido del sistema DME/CO₂ en condiciones de separación. Por otra parte, las configuraciones de absorción con agua y metanol pueden requerir modelos de coeficiente de actividad, como NRTL, para describir con mayor detalle la no idealidad de la fase líquida DME/CO₂/CH₃OH/H₂O. Zubrin et al. (2018) menciona explícitamente el uso de parámetros NRTL en el planteamiento de su sistema absorber/stripper. En consecuencia, la simulación de esta alternativa debe incorporar una comparación termodinámica entre modelos disponibles, evaluando su influencia sobre la recuperación de DME, la composición de la corriente gaseosa de salida y la carga de regeneración del disolvente.

3.4.3. Absorción química de CO₂

La absorción química de CO₂ plantea la eliminación selectiva de este componente mediante reacciones reversibles ácido-base en fase líquida, empleando disoluciones acuosas de alcanolaminas. Entre los disolventes más utilizados en captura de CO₂ se encuentran la monoetanolamina, habitualmente en concentraciones del 15–30% en peso, y formulaciones basadas en metildietanolamina activada o mezclas con piperazina. En esta configuración, la corriente que contiene DME y CO₂ se alimenta a un absorbedor en contracorriente con la disolución de amina. El CO₂ se transfiere y reacciona en la fase líquida, mientras que la corriente gaseosa de cabeza queda empobrecida en CO₂. La amina rica se envía posteriormente a una columna de regeneración, normalmente operada a baja presión, donde el CO₂ se libera mediante aporte térmico en el rehervidor.

La principal ventaja metodológica de esta alternativa es la disponibilidad de datos bibliográficos procedentes de procesos de captura de carbono. Guo et al. (2018) desarrollan una simulación y optimización de un proceso de captura de CO₂ con MEA

acuosa, empleando una configuración absorbedor-regenerador y evaluando modificaciones orientadas a reducir la demanda energética. Orangi et al. (2022) comparan MEA pura con mezclas MEA/PZ y MDEA/MEA en un proceso de captura postcombustión con 85% de captura de CO₂. En su caso base, con MEA al 30% en peso, reportan una demanda de regeneración de 3,77 GJ/tCO₂, mientras que las mezclas MEA/PZ y MDEA/MEA reducen dicha demanda en un 4,9% y 7,5%, respectivamente (Orangi et al., 2022). Estos valores proporcionan una referencia cuantitativa para estimar el orden de magnitud del consumo térmico asociado a la retirada de CO₂.

No obstante, la extrapolación de estos datos al sistema DME/CO₂ requiere considerar diferencias importantes respecto a las corrientes típicas de captura postcombustión. En este caso, el DME no es un gas inerte, sino el producto de interés, por lo que deben evaluarse fenómenos de coabsorción física, solubilización en la fase líquida, arrastre mecánico y pérdidas en la corriente rica de amina. Además, la presencia de metanol y agua puede modificar tanto la transferencia de materia como la estimación de propiedades físicas del sistema. Por ello, desde el punto de vista metodológico, el análisis de esta opción debe formularse mediante balances de materia y energía acoplados al absorbedor y al regenerador, incluyendo la eficiencia de captura de CO₂, la pérdida de DME en el disolvente, el consumo térmico del rehervidor y la posible necesidad de etapas de lavado o recuperación de compuestos orgánicos en la corriente gaseosa de cabeza.

Cuando el simulador lo permita, la absorción química debe representarse mediante modelos rate-based, ya que estos describen de forma más rigurosa la transferencia de materia con reacción química en comparación con modelos de equilibrio. En caso de no disponer de datos cinéticos específicos para todas las especies presentes, el análisis puede formularse mediante un enfoque simplificado de equilibrio o mediante especificaciones de captura, siempre indicando las hipótesis adoptadas y contrastando el consumo de regeneración con rangos bibliográficos de 3,0–4,5 MJ/kgCO₂ capturado reportados para procesos con aminas.

3.4.4. Separación mediante membranas selectivas

La separación por membranas se presenta en la literatura como una alternativa de intensificación energética que evita el uso directo de disolventes y reduce la dependencia de aportes térmicos asociados a cambios de fase. Su fundamento se basa en el modelo de solución-difusión, donde el flujo de cada especie a través de la membrana depende de su permeabilidad, del espesor de la capa selectiva y de la diferencia de fugacidad o presión parcial entre el lado de alimentación y el lado de permeado.

Para la purificación de mezclas DME/CO₂, el planteamiento más habitual consistiría en seleccionar membranas con elevada permeabilidad hacia CO₂, de forma que este componente atravesase preferentemente la membrana y el DME permanezca concentrado en la corriente de rechazo. Este criterio se apoya en la diferencia de tamaño molecular entre ambos compuestos, ya que el diámetro cinético del CO₂ se sitúa alrededor de 0,33 nm, mientras que el DME presenta un tamaño molecular mayor. No obstante, en mezclas reales la separación no depende únicamente del tamaño, sino también de la solubilidad de cada componente en la matriz polimérica, de la presión parcial, de la temperatura y de los fenómenos de competencia entre especies.

Zubrin et al. (2018) menciona las membranas de separación de gases como una de las posibles alternativas para recuperar DME, junto con la separación criogénica, los absorbentes sólidos y los sistemas absorber/stripper. Sin embargo, la aplicación rigurosa de membranas al sistema DME/CO₂ requiere disponer de datos de permeabilidad y selectividad en presencia de CO₂, DME, metanol, agua y gases ligeros. Además, en membranas poliméricas vítreas, la presencia de CO₂ a alta presión parcial puede inducir plastificación, mientras que trazas de agua o metanol pueden modificar la sorción y el transporte en la capa selectiva. Por tanto, el análisis conceptual de esta alternativa debe considerar selectividades reales o factores de separación corregidos respecto a mezclas multicomponente, y no únicamente selectividades ideales obtenidas a partir de gases puros.

Desde el punto de vista metodológico, una primera aproximación de simulación podría formularse mediante un separador de membrana ideal o semiempírico, definiendo la selectividad CO₂/DME, la recuperación objetivo de CO₂ en el permeado, la presión del permeado y la pérdida admisible de DME. Esta aproximación permitiría comparar de forma preliminar la reducción de CO₂ frente al coste de compresión o vacío necesario para mantener la fuerza impulsora. En una evaluación más rigurosa, debería emplearse la ecuación de flujo basada en permeabilidad y diferencia de fugacidades, incorporando datos experimentales de permeancia y selectividad para el material seleccionado.

3.4.5. Selección de la alternativa de purificación

Para seleccionar la alternativa de mejora más adecuada para la etapa de purificación del DME, se elaboró una matriz de decisión comparando cuatro opciones: destilación fraccionada convencional e intensificada, absorción física de DME, absorción química de CO₂ y separación mediante membranas selectivas. Esta comparación se plantea a partir de las alternativas descritas previamente en la metodología, donde se revisaron distintas estrategias reportadas en la bibliografía para abordar la separación entre DME y CO₂.

La puntuación asignada a cada alternativa se estableció en una escala de 1 a 10, donde los valores próximos a 10 representan un comportamiento más favorable respecto al criterio evaluado y los valores próximos a 1 indican una situación menos favorable. La valoración se basa en una comparación técnica preliminar apoyada en la bibliografía revisada, en la naturaleza de la mezcla a separar y en la coherencia de cada alternativa con el esquema de proceso desarrollado.

Los criterios considerados fueron: eficacia de purificación, madurez tecnológica, complejidad operativa y consumo energético.

- Eficacia de purificación:

Este criterio valora la capacidad esperada de cada alternativa para aumentar la pureza final del DME, ya sea mediante la separación directa del DME o mediante la eliminación de impurezas relevantes, especialmente CO₂, gases ligeros, metanol y agua. Por tanto, se considera que una alternativa que elimine eficazmente CO₂ también contribuye directamente a la purificación del DME, siempre que dicha separación permita reducir la fracción de CO₂ en la corriente de producto o minimizar su presencia en etapas posteriores.

En este criterio, la absorción química de CO₂ recibe una puntuación elevada, ya que permite retirar selectivamente CO₂ mediante disoluciones químicas, como aminas, y puede mejorar de forma significativa la calidad de la corriente rica en DME cuando el CO₂ constituye una de las principales impurezas. La destilación fraccionada convencional e intensificada también obtiene una puntuación alta, ya que permite separar progresivamente DME, CO₂, metanol, agua y gases ligeros mediante etapas de equilibrio líquido-vapor. La absorción física de DME se valora positivamente por su posible utilidad para recuperar DME de corrientes gaseosas, aunque su eficacia depende del disolvente seleccionado. La separación mediante membranas se puntúa algo más bajo porque su rendimiento depende de la selectividad y permeabilidad de la membrana para la mezcla concreta DME/CO₂/gases ligeros.

Por su importancia en el objetivo principal del trabajo, se le asignó un factor de ponderación de 0,40.

- Madurez tecnológica:

Este criterio evalúa el grado de desarrollo, aplicación industrial y disponibilidad de información técnica de cada alternativa. Se otorgan puntuaciones altas a las tecnologías consolidadas, con amplia aplicación en procesos químicos y mayor disponibilidad de datos de diseño. Se asignan puntuaciones más bajas a las alternativas menos implantadas industrialmente en sistemas de purificación de DME o cuya aplicación se encuentra más asociada a desarrollos recientes o estudios específicos.

La destilación fraccionada obtiene una puntuación alta por tratarse de una operación de separación convencional, ampliamente empleada en la industria química y directamente relacionada con esquemas de purificación de mezclas líquidas y gaseosas condensables. La absorción química de CO₂ también presenta una elevada madurez tecnológica, especialmente en procesos de captura de CO₂ mediante aminas. La absorción física de DME presenta una madurez intermedia, ya que puede resultar viable, pero depende de la elección del disolvente y de datos de equilibrio específicos. La separación mediante membranas selectivas recibe una puntuación menor, al considerarse una opción con interés creciente, pero menos consolidada para esta separación concreta.

A este criterio se le asignó un factor de ponderación de 0,25.

- Complejidad operativa:

Este criterio considera el número de equipos adicionales necesarios, la dificultad de control, la necesidad de regeneración de disolventes, la incorporación de corrientes auxiliares y el grado de modificación del esquema base. Se asignan puntuaciones altas a las alternativas que pueden integrarse con menor modificación del proceso y con menor número de variables operativas adicionales. Se asignan puntuaciones bajas a las opciones que requieren unidades auxiliares, regeneración, control de disolventes o parámetros específicos más complejos.

La destilación fraccionada convencional e intensificada obtiene una puntuación favorable porque puede plantearse como una ampliación del sistema de separación ya considerado en el modelo, mediante una columna adicional o mediante una configuración más intensiva de la separación. La absorción física de DME presenta mayor complejidad, ya que requiere incorporar un absorbedor, seleccionar un disolvente y añadir una etapa

posterior de recuperación o regeneración del DME absorbido. La absorción química de CO₂ se considera más compleja porque implica una etapa de absorción, una etapa de regeneración térmica, circulación de disolvente, control de la carga de CO₂ y posible integración energética del regenerador. La separación por membranas tiene una complejidad intermedia: aunque el equipo puede ser conceptualmente sencillo, requiere definir selectividades, permeabilidades, recuperación por etapa y posibles configuraciones multietapa.

A este criterio se le asignó un factor de ponderación de 0,20.

- Consumo energético:

Este criterio valora el incremento esperado de requerimientos térmicos o eléctricos asociado a cada alternativa. Se asignan puntuaciones altas a las opciones con menor demanda energética adicional y puntuaciones bajas a aquellas que requieren aportes térmicos importantes, refrigeración intensa, compresión o regeneración de disolventes.

La separación mediante membranas obtiene una puntuación alta en este criterio, ya que no se basa en rehervidores o condensadores y puede presentar menor consumo térmico que las separaciones convencionales. La destilación fraccionada recibe una puntuación intermedia, debido a que requiere aporte térmico en el rehervidor y retirada de calor en el condensador, aunque se trata de un consumo esperado y cuantificable dentro del proceso. La absorción física de DME también se valora de forma intermedia, ya que puede requerir regeneración o recuperación posterior del DME absorbido. La absorción química de CO₂ recibe una puntuación más baja debido al consumo térmico asociado a la regeneración del disolvente.

A este criterio se le asignó un factor de ponderación de 0,15.

La puntuación total (PT) para cada alternativa se calculó mediante la ecuación:

$$PT = 0,40 \cdot (\text{Eficacia}) + 0,25 \cdot (\text{Madurez}) + 0,20 \cdot (\text{Complejidad}) + 0,15 \cdot (\text{Energía})$$

Aplicando la metodología de selección descrita anteriormente, se obtuvo la matriz de decisión mostrada en la Tabla 6. Los resultados permiten comparar de forma conjunta el interés técnico y operativo de cada alternativa de purificación.

Tabla 6: Matriz de decisión para la selección de la alternativa de purificación de DME

Alternativa	Eficacia de purificación	Madurez tecnológica	Complejidad operativa	Consumo energético	Total
Factor de ponderación	0,4	0,25	0,2	0,15	—
Destilación fraccionada convencional e intensificada	8	9	7	6	7,75
Absorción física de DME	8	6	5	6	6,65
Absorción química de CO₂	9	8	4	4	6,9
Separación mediante membranas selectivas	7	5	6	8	6,45

De acuerdo con la matriz de decisión, la alternativa con mayor puntuación es la destilación fraccionada convencional e intensificada, con una valoración total de 7,75. Esta opción presenta un equilibrio favorable entre eficacia de purificación, madurez tecnológica, complejidad operativa y consumo energético. Además, resulta coherente con la metodología seguida en el modelo, ya que permite evolucionar el esquema de separación mediante operaciones unitarias convencionales, sin introducir hipótesis adicionales asociadas a disolventes, reacciones de absorción química o parámetros específicos de membranas.

La absorción química de CO₂ obtiene una puntuación de 6,90. Esta alternativa presenta una elevada eficacia para retirar CO₂ y, por tanto, puede contribuir de forma directa a la purificación del DME cuando el CO₂ representa una impureza relevante de la corriente final. Sin embargo, su menor valoración global se debe a la mayor complejidad operativa y energética asociada al sistema de absorción-regeneración, no a una falta de capacidad de purificación. La necesidad de incorporar un absorbedor, un regenerador, una corriente de disolvente y un aporte térmico adicional aumenta el grado de modificación del proceso respecto al esquema base.

La absorción física de DME alcanza una puntuación de 6,65. Esta alternativa podría ser útil para recuperar DME de corrientes gaseosas, especialmente en corrientes de purga, pero su implementación depende de la selección de un disolvente adecuado y de la disponibilidad de datos de equilibrio fiables. Esta incertidumbre reduce su idoneidad como primera opción de mejora.

Por último, la separación mediante membranas selectivas obtiene una puntuación de 6,45. Aunque presenta un consumo energético potencialmente menor, su eficacia depende de la selectividad y permeabilidad de la membrana para la mezcla concreta del proceso.

Además, su menor madurez tecnológica para esta aplicación específica limita su selección como alternativa principal.

En consecuencia, la alternativa seleccionada para la mejora del proceso es la destilación fraccionada convencional e intensificada. Esta opción permite mejorar la recuperación y pureza del DME mediante una estrategia técnicamente robusta, coherente con la metodología desarrollada y compatible con el esquema de separación ya planteado en el modelo. No obstante, la absorción química de CO₂ se reconoce como una alternativa técnicamente sólida para la eliminación de CO₂, por lo que podría considerarse como una línea futura de mejora si se pretende profundizar específicamente en la reducción de CO₂ mediante sistemas de absorción-regeneración.

4. Resultados

4.1. Resultados de la validación del modelo

La validación del modelo implementado en AVEVA Process Simulation se llevó a cabo mediante la comparación de los resultados simulados con el caso de referencia reportado por Luu et al. (2016), quienes analizaron diferentes rutas de producción de DME y evaluaron el comportamiento del proceso bajo distintas composiciones de gas de síntesis. Esta referencia resulta adecuada para la validación, ya que estudia la síntesis directa de DME mediante simulación de proceso y compara indicadores como la conversión de CO, la composición de salida y el rendimiento del sistema. Para reproducir dicho caso en AVEVA, se utilizó como base el modelo cinético LHHW modificado de Shim et al. (2009). La validación se realizó bajo dos condiciones de velocidad espacial del gas (GHSV): un primer caso asumido de 1500 h⁻¹ y un segundo caso calibrado de 379 h⁻¹, obtenido mediante ajuste iterativo del caudal de alimentación hasta reproducir de forma más aproximada las composiciones de salida descritas en la bibliografía. De este modo, la comparación permitió evaluar la capacidad del modelo implementado para representar de forma coherente el comportamiento del reactor bajo condiciones de operación comparables.

El procedimiento de ajuste permitió identificar que el valor inicialmente asumido de GHSV = 1500 h⁻¹ no reproducía adecuadamente el comportamiento del sistema, especialmente en términos de producción de dimetil éter y conversión de CO. Como consecuencia, se realizó una calibración iterativa externa variando el caudal de entrada al reactor hasta alcanzar una concordancia satisfactoria entre los resultados simulados y los datos bibliográficos. El valor finalmente obtenido, GHSV = 379 h⁻¹, permitió reproducir con elevada precisión las principales variables objetivo del proceso.

4.1.1. Validación del modelo

La Tabla 7 recoge la comparación entre las fracciones molares de salida reportadas por Luu et al. y las obtenidas mediante el modelo implementado en AVEVA para ambos valores de GHSV.

Tabla 7: Comparación de las fracciones molares de salida entre Luu et al. (2016) y el modelo AVEVA bajo dos condiciones de GHSV.

Componente	Luu (2016)	AVEVA GHSV 1500	AVEVA GHSV 379	Error relativo medio GHSV 1500	Error relativo medio GHSV 379	
CO	0,3140	0,3430	0,3150	9%	0%	OK
CO₂	0,1370	0,1100	0,1360	20%	1%	OK
H₂	0,0260	0,0750	0,0360	188%	38%	!
MeOH	0,0080	0,0075	0,0024	6%	70%	!
DME	0,0420	0,0222	0,0420	47%	0%	OK
H₂O	0,0010	0,0005	0,0002	48%	80%	!
N₂	0,4720	0,4410	0,4690	7%	1%	OK

Los resultados muestran que, para el caso calibrado de 379 h^{-1} , el modelo reproduce de forma precisa las fracciones molares de CO, CO₂, DME y N₂, obteniéndose errores relativos medios inferiores al 5 % en la mayoría de los casos. En particular, la fracción molar de dimetil éter alcanza un valor de 0,042, coincidiendo exactamente con el valor reportado en el estudio de referencia. Asimismo, la composición de CO₂ presenta un error relativo cercano al 1 %, mientras que el CO muestra prácticamente coincidencia total con los datos bibliográficos.

Por el contrario, el caso con $\text{GHSV} = 1500 \text{ h}^{-1}$ presenta desviaciones significativamente mayores, especialmente en la producción de DME y en la conversión global del sistema, evidenciando que dicho tiempo de residencia resulta insuficiente para reproducir el equilibrio de reacción descrito por Luu et al.

Las principales discrepancias observadas en el modelo calibrado aparecen asociadas al hidrógeno y al metanol. En el caso del H₂, el modelo predice una fracción molar ligeramente superior a la bibliográfica, con un error relativo aproximado del 38 %. Esta desviación se atribuye principalmente a diferencias termodinámicas derivadas del modelo de ecuación de estado empleado. Mientras que el modelo de referencia utiliza el paquete SRK integrado en Aspen Plus, el modelo desarrollado en AVEVA emplea SRK-Huron-Vidal, introduciendo diferencias en el cálculo de fugacidades y constantes de equilibrio bajo condiciones de alta presión.

En el caso del metanol, la discrepancia resulta más acusada, observándose una subestimación de su fracción molar de salida respecto al valor bibliográfico. Este comportamiento indica que, bajo las condiciones calibradas, el modelo favorece en mayor medida la reacción de deshidratación de metanol hacia dimetil éter, provocando un consumo más elevado de metanol intermedio.

4.1.2. Indicadores globales de rendimiento

Con el objetivo de evaluar la capacidad predictiva global del modelo, se analizaron distintos indicadores de rendimiento del reactor, incluyendo la conversión de CO, la conversión de H₂ y el rendimiento a DME, recogidos en la Tabla 8.

Tabla 8: Indicadores principales de rendimiento: comparación entre Luu et al. (2016) y el modelo AVEVA bajo dos condiciones de GHSV.

Indicador	Luu (2016)	AVEVA GHSV 1500	AVEVA GHSV 379	Error relativo medio GHSV 1500	Error relativo medio GHSV 379
X_{CO} (%)	16,9	9,2	16,7	46%	1%
X_{H_2} (%)	81,7	47,2	74,8	42%	8%
Y_{DME} (%)	18,3	9,7	19,6	47%	7%

La conversión de CO obtenida con el modelo calibrado fue del 16,7 % (GHSV = 379 h^{-1}), frente al 16,9 % reportado por Luu et al., lo que supone un error relativo cercano al 1 %. Del mismo modo, el rendimiento a DME alcanzó un valor del 19,6 %, muy próximo al 18,3 % bibliográfico. Estos resultados confirman que el modelo implementado es capaz de reproducir adecuadamente el comportamiento global del reactor y la producción de dimetil éter bajo las condiciones de operación consideradas.

En contraste, el caso con GHSV = 1500 h^{-1} presenta desviaciones significativamente superiores, con errores próximos al 45–50 % tanto en conversión de CO como en rendimiento a DME. Este comportamiento refuerza la necesidad del procedimiento de calibración iterativa realizado durante la validación.

4.1.3. Consistencia interna del modelo

Además de la comparación con los datos bibliográficos de Luu et al. (2016), se llevó a cabo una verificación de la consistencia interna del modelo mediante su comparación con una implementación independiente del reactor en Python. El código empleado para esta validación se incluye en la Tabla 12 de los Anexos. Para ello, se desarrolló un modelo unidimensional de reactor tubular de flujo pistón, en el que las ecuaciones diferenciales del PFR se resolvieron numéricamente mediante el método Radau, empleando la ecuación de estado de Peng-Robinson para el cálculo de fugacidades. Esta implementación se comparó con el submodelo cinético desarrollado en AVEVA Process Simulation, bajo las mismas condiciones de alimentación, temperatura, presión y velocidad espacial.

El objetivo de esta validación cruzada fue comprobar que las expresiones cinéticas de tipo LHHW habían sido implementadas correctamente en AVEVA, de forma independiente al entorno de simulación comercial. En ambos modelos se consideraron las cuatro reacciones reversibles de síntesis directa de DME: síntesis de metanol a partir de CO, síntesis de metanol a partir de CO_2 , deshidratación de metanol a DME y reacción de desplazamiento de gas de agua. Las constantes de equilibrio se calcularon a partir de datos termodinámicos NIST/Shomate, sustituyendo las correlaciones polinómicas empíricas empleadas originalmente en la formulación de Shim et al.

Los resultados obtenidos en la Tabla 9 mostraron diferencias inferiores al 5 % entre AVEVA y el modelo Python para las composiciones de salida, lo que confirma la coherencia entre ambas implementaciones.

Tabla 9: Comparación interna entre AVEVA Process Simulation y el modelo Python PFR

Componente	AVEVA (GHSV = 1500 h ⁻¹)	Python PFR, PR-EoS
CO	0,343	0,34305
CO ₂	0,11	0,1094
H ₂	0,075	0,07505
MeOH	0,0075	0,0078
DME	0,0222	0,0219
H ₂ O	0,0005	0,00053
N ₂	0,0441	0,0423

Esta validación cruzada permitió comprobar especialmente la correcta implementación de:

- Los exponentes de dependencia respecto al hidrógeno en las expresiones cinéticas.
- Los términos de adsorción presentes en los denominadores LHHW.
- El uso de constantes de equilibrio calculadas mediante datos termodinámicos NIST/Shomate.
- La formulación reversible basada en factores del tipo $(1 - \beta_i)$.

4.1.4. Análisis de las discrepancias residuales

Las diferencias residuales observadas entre el modelo desarrollado y el caso bibliográfico pueden atribuirse principalmente a tres factores.

En primer lugar, existen diferencias termodinámicas asociadas a la ecuación de estado empleada en cada simulador. Estas diferencias afectan al cálculo de fugacidades y constantes de equilibrio, especialmente bajo condiciones de elevada presión.

En segundo lugar, el artículo de referencia no proporciona el caudal de alimentación al reactor, impidiendo conocer directamente el valor real de GHSV utilizado en la simulación original. Por ello, fue necesario realizar una calibración externa basada en ajuste iterativo.

Finalmente, los parámetros cinéticos utilizados por Shim et al. (2009) fueron originalmente ajustados utilizando el entorno termodinámico interno de Aspen Plus y correlaciones empíricas específicas para las constantes de equilibrio. La sustitución de dichas correlaciones por constantes obtenidas mediante datos termodinámicos NIST mejora la coherencia termodinámica del modelo, especialmente para la reacción WGS, aunque introduce pequeñas inconsistencias respecto al ajuste cinético original.

4.1.5. Validación final del modelo

Considerando los resultados obtenidos, puede concluirse que el modelo implementado en AVEVA Process Simulation reproduce de forma satisfactoria el comportamiento del reactor de síntesis directa de dimetil éter bajo las condiciones de referencia seleccionadas. La elevada concordancia obtenida para las variables principales del proceso, especialmente la producción de DME y la conversión de CO, valida el uso del modelo

para posteriores estudios de sensibilidad y análisis paramétricos relacionados con temperatura, presión, relación H_2/CO y velocidad espacial del gas.

4.2. Resultados de la simulación de la planta completa

4.2.1. Resultados del caso base

En primer lugar, se evaluó el modelo base, configurado con una única columna de separación. Este modelo permitió obtener una primera aproximación al comportamiento global del proceso de síntesis directa de dimetil éter a partir de gas de síntesis, así como identificar las principales limitaciones asociadas al sistema de separación y reciclado.

La corriente de entrada al reactor presentó un caudal molar total de 1,0485 kmol/s, con una fracción molar de CO de 0,1161 y una fracción molar de DME de 0,0351. A la salida del reactor, el caudal molar total disminuyó hasta 0,9060 kmol/s, mientras que la fracción molar de CO se redujo hasta 0,0423 y la fracción molar de DME aumentó hasta 0,0728. A partir de estos valores, el flujo molar de CO pasó de 0,1218 kmol/s a 0,0383 kmol/s, lo que supone un consumo de 0,0835 kmol/s y una conversión de CO del 68,5 %. Por su parte, el flujo molar de DME aumentó de 0,0368 kmol/s a 0,0660 kmol/s, dando lugar a una producción neta de DME de 0,0292 kmol/s.

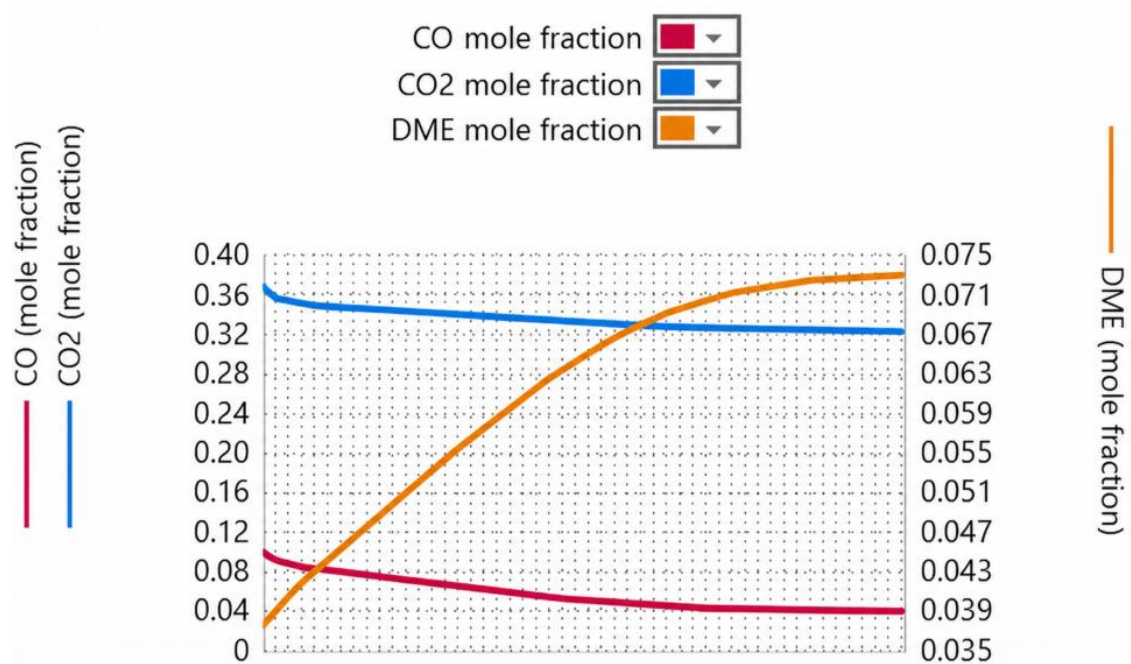


Figura 11: Perfil de fracción molar de H_2 , CO_2 y DME a lo largo del reactor en el modelo base

Este comportamiento queda reflejado en la Figura 11, donde se observa una disminución progresiva de la fracción molar de CO a lo largo del reactor, junto con un aumento de la fracción molar de DME. Sin embargo, la propia figura muestra que la corriente de entrada al reactor ya contiene una fracción molar de DME cercana a 0,035. Este aspecto resulta importante, ya que indica que parte del producto formado no se separa eficazmente en la etapa posterior y permanece en el circuito de reciclado. Por tanto, el valor elevado de DME a la salida del reactor no representa únicamente la formación de producto dentro del reactor, sino también la acumulación de DME recirculado desde etapas posteriores del proceso.

Esta recirculación de producto limita la interpretación directa del comportamiento del reactor. Aunque el modelo base muestra una producción neta de DME significativa, parte del caudal alimentado está ocupado por producto en lugar de por reactivos útiles, por lo que la corriente de entrada no es óptima desde el punto de vista reactivo. En consecuencia, la mayor fracción molar de DME a la salida no implica necesariamente una mayor eficiencia global del proceso, sino que evidencia una separación insuficiente aguas abajo del reactor.

La conversión de CO obtenida en el modelo base fue del 68,5 %, valor que resulta inferior a los datos cinéticos mostrados por Scognamiglio et al. (2024) para la síntesis directa de DME, donde se reportan conversiones de CO del 97,42 % a 220 °C, 92,82 % a 250 °C y 83,58 % a 280 °C. Esta comparación permite situar el modelo base por debajo de los resultados alcanzados en condiciones cinéticas más favorables, especialmente si se considera que el propio trabajo identifica las bajas temperaturas y la presión elevada como condiciones ventajosas para maximizar la conversión de CO y el rendimiento a DME. Además, aplicando la definición de rendimiento empleada por Scognamiglio et al. (2024), basada en la relación entre el flujo molar de DME a la salida del reactor y el flujo molar de CO_x alimentado, el modelo base presenta un DME yield aparente del 22,34 %. Sin embargo, este valor debe interpretarse con cautela, ya que la alimentación al reactor ya contiene DME recirculado. Si se considera únicamente la producción neta de DME dentro del reactor, el rendimiento neto disminuye hasta el 9,87 %, por debajo de los rendimientos de DME de 19,14 %, 15,81 % y 12,72 % reportados por Scognamiglio et al. (2024) para 220, 250 y 280 °C respectivamente. Por tanto, aunque la fracción molar de DME obtenida por cola sea relativamente elevada, con un valor de 0,8371, este resultado no refleja por sí solo una recuperación eficiente del producto.

La principal limitación del modelo base se observa en la purga, que presenta una fracción molar de DME de 0,2997 junto con una fracción molar de CO₂ de 0,5111. Esto indica que una parte relevante del DME producido abandona el sistema en una corriente no deseada, mezclada principalmente con CO₂, en lugar de concentrarse en la corriente final de producto. En consecuencia, el problema no es únicamente alcanzar una determinada fracción molar de DME en la corriente de salida, sino evitar la pérdida de producto en la purga y mejorar la recuperación global. Este comportamiento es coherente con la dificultad descrita en la bibliografía para la separación DME/CO₂. Dikić et al. (2023) señalan que la separación entre CO₂ y DME constituye una etapa especialmente compleja debido a la elevada afinidad entre ambos compuestos y a la proximidad de sus equilibrios líquido-vapor.

Asimismo, diferentes esquemas de proceso para la producción de DME incorporan más de una etapa de separación, absorción o destilación para retirar CO₂, metanol, agua y gases no reaccionados antes de obtener una corriente de DME de elevada pureza y recuperación. En este sentido, Lopes et al. (2018) y Han et al. (2009) muestran que las configuraciones de separación más desarrolladas permiten alcanzar purezas de DME próximas o superiores al 99 %.

Por tanto, el análisis del modelo base demuestra que una única columna no resulta suficiente para recuperar adecuadamente el DME generado: parte del producto se recircula hacia el reactor y otra parte se pierde en la purga. Como resultado, se justifica

la incorporación de una segunda columna de separación, orientada a reducir la pérdida de DME, mejorar la separación DME/CO₂ y aumentar la eficiencia global del proceso.

Los balances de materia y energía de la planta completa se muestran en las Tablas 13 - 17 en el Anexo.

4.2.2. Resultados del caso mejorado

En el modelo mejorado con dos columnas, el perfil composicional del reactor mostrado en la Figura 12 confirma una mejora clara respecto al modelo base. La corriente de entrada al reactor presenta una fracción molar de DME prácticamente nula, cercana a 0,00054, lo que indica que la incorporación de una segunda columna permite retirar de forma más eficaz el producto formado y evita su recirculación hacia el reactor. A lo largo del reactor se observa un aumento progresivo de la fracción molar de DME hasta alcanzar aproximadamente 0,0605 a la salida, valor que, a diferencia del modelo base, puede atribuirse casi exclusivamente a la formación de producto dentro del propio reactor.

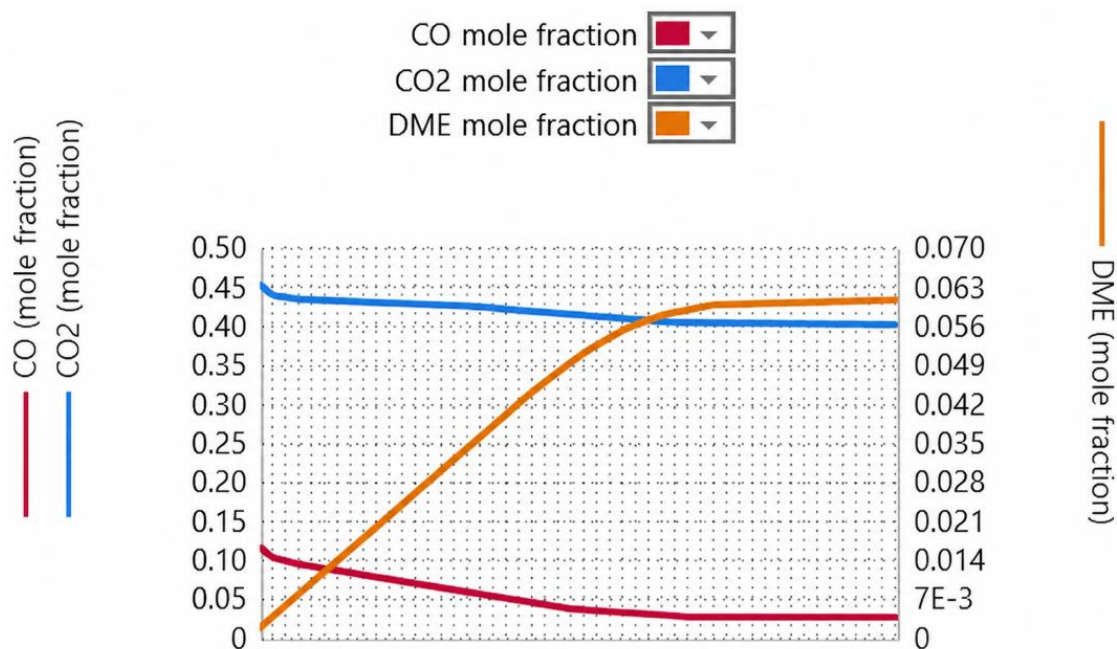


Figura 12: Perfil de fracción molar de H₂, CO₂ y DME a lo largo del reactor en el modelo mejorado

De forma simultánea, la Figura 12 muestra una disminución acusada de la fracción molar de CO, desde valores próximos a 0,15 en la entrada hasta aproximadamente 0,03 en la salida. Este descenso refleja el consumo efectivo de CO durante la reacción y se corresponde con una conversión del 84,9 %, superior a la obtenida en el modelo base con una columna. Aunque el caudal total alimentado al reactor es menor que en el primer modelo, el consumo absoluto de CO es prácticamente equivalente, pasando de 0,0988 kmol/s a 0,0149 kmol/s. Esto supone un consumo de 0,0839 kmol/s de CO, frente a los 0,0835 kmol/s en el caso base, pero con una alimentación más limpia y con menor cantidad de producto recirculado. Por tanto, el modelo base aprovecha mejor el CO disponible.

A partir de estos datos, la conversión de CO aumenta hasta el 84,9 %, frente al 68,5 % obtenido en el modelo base. Este valor supone una mejora clara del comportamiento del reactor y se aproxima más a los resultados cinéticos descritos por Scognamiglio et al.

(2024). Por tanto, la conversión obtenida en el modelo mejorado se sitúa muy próxima al valor reportado a 280 °C.

No obstante, aunque el comportamiento del reactor mejora de forma significativa, el análisis de las corrientes de salida muestra que la purificación final todavía no está resuelta. La corriente final presenta una fracción molar global de DME de 0,7545, y una fracción molar de DME en fase líquida de 0,7745. El CO₂ continúa siendo la principal impureza, con una fracción molar global de 0,2249 y una fracción molar líquida de 0,2070. Por tanto, la corriente se encuentra enriquecida en DME, pero aún contiene una proporción elevada de CO₂. Además, la purga 3 mantiene una fracción molar de DME de 0,2630 junto con una fracción molar de CO₂ de 0,6636, lo que indica que parte del DME sigue abandonando el sistema asociado a una corriente rica en CO₂. Aunque esta pérdida es menor que en el modelo base, donde la purga contenía una fracción molar de DME de 0,2997, sigue siendo un punto crítico del proceso y limita la recuperación global del producto.

Este resultado es coherente con la bibliografía, que identifica la separación DME/CO₂ como una de las etapas más complejas en la purificación de DME. Dikić et al. (2023) señalan que la separación de mezclas CO₂-DME mediante destilación convencional resulta problemática y proponen la destilación mejorada por stripping como alternativa para reducir el consumo energético y minimizar pérdidas de producto. De forma similar, los esquemas de separación propuestos para procesos de síntesis directa de DME suelen incluir más de una etapa de separación, lavado o destilación para retirar gases no reaccionados, CO₂, metanol y agua antes de obtener una corriente de DME purificada.

En conjunto, el modelo base puede considerarse una mejora clara respecto al modelo base. La Figura 10 evidencia que el reactor parte de una alimentación prácticamente libre de DME, consume una mayor proporción del CO disponible y genera DME de forma más representativa dentro del propio reactor. La conversión de CO aumenta hasta el 84,9 % y el DME yield neto alcanza el 17,15 %, situándose dentro del intervalo reportado por Scognamiglio et al. (2024). Además, la entrada de DME al reactor se reduce prácticamente a cero, lo que confirma que la segunda columna cumple una función importante al disminuir la recirculación de producto y mejorar la alimentación al reactor. Sin embargo, la corriente final sigue estando limitada por la presencia de CO₂ y por la pérdida de DME en la purga 3. Por tanto, este modelo no debe interpretarse como una configuración final completamente optimizada, sino como un modelo base adecuado a partir del cual analizar alternativas adicionales de purificación. En concreto, los resultados justifican estudiar tecnologías específicas para la separación DME/CO₂.

4.2.2.1. Balances de materia y energía

Los balances de materia y energía de la planta completa se muestran en las Tablas 18 - 23 en el Anexo. Una vez resuelto el modelo, se obtuvieron los balances de masa y energía de la planta, seleccionándose las corrientes más representativas del proceso, es decir, aquellas que permiten interpretar el comportamiento global de la planta: alimentación fresca de gas de síntesis (S1), corriente comprimida (S6), entrada al reactor (S23), salida del reactor (S8), salida del reactor enfriada (S24), fracción gaseosa tras la separación inicial (S5), fracción líquida enriquecida en DME (S7), corriente de reciclado al reactor (S21), purga (S31), corriente de agua de lavado (S18), corriente

acuosa de salida (S33), corriente enriquecida en DME previa al enfriamiento final (S13) y producto final enriquecido en DME (S27).

La Tabla 10 recoge las corrientes principales del proceso, mientras que la Tabla 11 resume los consumos eléctricos y térmicos de los equipos más relevantes.

Tabla 10: Balance de masa de las corrientes principales del modelo mejorado (Figura 10) de producción de DME.

Corriente	W (kg/s)	F (kmol/s)	T (°C)	P (bar)	z CO ₂	z H ₂ O	z CO	z CH ₄	z H ₂	z DME	z MeOH
S1	3,50	0,27	20	2	0,03	0,01	0,32	0,07	0,56	0	0
S6	3,5	0,27	267,1	50	0,03	0,01	0,32	0,07	0,56	0	0
S23	9,27	0,64	240,3	49,9	0,12	0,005	0,16	0,19	0,50	0	0
S8	9,27	0,50	260	48,9	0,18	0,035	0,03	0,24	0,40	0,061	0,016
S24	9,27	0,50	142,2	48,8	0,18	0,035	0,03	0,24	0,40	0,061	0,016
S5	7,44	0,45	-19,9	48,7	0,19	0	0,033	0,27	0,45	0,024	0,0001
S7	1,83	0,054	-20	48,7	0,14	0,33	0,001	0,014	0,001	0,37	0,15
S21	5,77	0,37	40,3	50	0,19	0,002	0,034	0,28	0,46	0	0
S31	1,02	0,065	36	48	0,19	0,002	0,034	0,28	0,46	0	0
S18	21,29	1,18	35	48,7	0	1	0	0	0	0	0
S33	21,85	1,19	39,7	8	0,002	0,99	0	0	0	0,008	0
S13	1,77	0,039	40	8,9	0,23	0	0	0,004	0	0,76	0,015
S27	1,71	0,038	0	8,85	0,21	0	0,004	0,002	0	0,78	0,016

A partir del balance de masa se observa que la alimentación fresca (S1) está constituida principalmente por H₂ y CO, con fracciones molares de 0,56 y 0,32, respectivamente. Tras la compresión, la corriente (S6) mantiene la misma composición, pero alcanza una presión de 50 bar, adecuada para su posterior alimentación al reactor. La corriente real de entrada al reactor (S23) presenta un caudal másico superior, 9,273 kg/s, debido a la mezcla de la alimentación fresca con la corriente de reciclado. Esta recirculación modifica la composición de entrada, reduciendo la fracción molar de CO hasta 0,155 e incrementando la presencia de CO₂, CH₄ e H₂ procedentes de las corrientes no convertidas.

La comparación entre la entrada y la salida del reactor permite evaluar el comportamiento de la etapa reactiva. En la corriente de salida del reactor (S8), la fracción molar de CO disminuye hasta 0,030, mientras que la fracción molar de DME aumenta hasta 0,061 y aparece metanol con una fracción molar de 0,0158. Estos resultados indican que el reactor reproduce la conversión del gas de síntesis hacia productos oxigenados, principalmente DME, metanol y agua. Posteriormente, la corriente enfriada (S24) mantiene la misma composición que la salida del reactor, pero a menor temperatura, lo que favorece la separación posterior de fases.

La separación gas-líquido permite diferenciar una fase gaseosa (S5), rica en H₂, CH₄, CO₂ y CO, de una fase líquida (S7) enriquecida en DME, metanol y agua. Esta última alcanza una fracción molar de DME de 0,369, muy superior a la obtenida directamente a la salida del reactor, lo que confirma la eficacia de la etapa de enfriamiento y separación para concentrar los compuestos condensables. La corriente gaseosa se divide entre reciclado (S21) y purga/fuel gas (S31). El reciclado permite recuperar parte de los reactivos no

convertidos, especialmente H_2 , mientras que la purga evita la acumulación de compuestos ligeros e inertes, como CH_4 y N_2 , en el lazo de recirculación.

En concreto, la corriente S7, tras el separador V1, se somete posteriormente a una etapa de expansión y separación física adicional. Esta operación permite reducir la presión de la corriente y liberar parte de los gases ligeros que permanecen disueltos en la fase líquida, mejorando así el acondicionamiento previo a la destilación final.

Como resultado de esta etapa se obtiene la corriente S9, que constituye una de las corrientes con mayor carga de DME del proceso antes de la purificación final. Esta corriente se dirige hacia la columna de destilación T1, donde se introduce en un plato inferior al de la corriente S33. Esta disposición resulta coherente desde el punto de vista de separación, ya que S9 procede de una fase líquida rica en compuestos condensables, mientras que S33 presenta una composición diferente y se alimenta en una zona superior de la columna.

De este modo, la expansión y separación intermedia de S7 cumple una doble función: por un lado, elimina parte de los compuestos ligeros que podrían dificultar la operación de la columna; por otro, permite alimentar a T1 con una corriente líquida enriquecida en DME, metanol y agua. Por tanto, S9 actúa como una corriente clave de alimentación a la destilación final, ya que concentra una parte importante del DME recuperado aguas abajo del reactor y contribuye directamente a la obtención de la corriente final S13.

La corriente S31 presenta un caudal molar de 0,0651 kmol/s y está compuesta principalmente por H_2 , CH_4 y CO_2 , con fracciones molares de 0,4630, 0,2745 y 0,1855 respectivamente. En menor proporción contiene N_2 y CO , con fracciones molares de 0,0405 y 0,0341. La fracción molar de DME en esta corriente es muy reducida, con una fracción molar de 0,00093, mientras que el metanol es prácticamente nulo. Por tanto, aunque la purga representa una salida necesaria para evitar la acumulación de gases ligeros e inertes, la pérdida de DME asociada a esta corriente concreta es poco significativa.

La corriente de agua de lavado (S18) se introduce como agente de separación en la sección posterior, generando una corriente acuosa de salida (S33) compuesta mayoritariamente por agua, aunque con una pequeña fracción de DME. Este resultado muestra que el lavado contribuye a modificar la distribución de los componentes, pero también puede provocar cierto arrastre de producto hacia la fase acuosa. Finalmente, la corriente enriquecida en DME previa al enfriamiento final (S13) alcanza una fracción molar de DME de 0,755, y el producto final (S27) llega hasta 0,775, con un caudal másico de 1,705 kg/s. Sin embargo, la presencia de CO_2 en la corriente final, con una fracción molar de 0,207, indica que la eliminación de este compuesto sigue siendo una de las principales limitaciones del esquema de separación planteado. En conjunto, los resultados muestran que el modelo base permite concentrar progresivamente el DME y recuperar gases no convertidos mediante reciclado, aunque la purificación final del producto y la gestión de las pérdidas en purgas y corrientes acuosas constituyen los puntos más críticos para una futura optimización del proceso.

La Tabla 11 muestra el balance de energía de los equipos principales del modelo base. En este caso se han seleccionado los equipos con consumo eléctrico o térmico relevante, incluyendo compresores, intercambiadores de calor, reactor y columna de destilación

final. Los valores positivos de carga térmica se interpretan como aporte de calor al sistema, mientras que los valores negativos corresponden a retirada de calor.

En concreto, los equipos considerados son los compresores principales de la planta (CP1 y CP2), el compresor de reciclado (K1), los intercambiadores de calor o enfriadores asociados al acondicionamiento térmico de las corrientes (HX2, E2, E1 y E3), el reactor PFR (R1) y la columna de destilación final (T1). Esta selección permite evaluar los principales requerimientos energéticos del proceso, evitando incluir equipos auxiliares sin consumo directo significativo, como mezcladores, divisores o separadores flash con duty nulo.

Tabla 11: Balance de energía de los principales equipos del modelo base de producción de DME

Equipo	Potencia eléctrica (kW)	Potencia térmica (kW)	Interpretación
CP1	1667,99	—	Consumo eléctrico
CP2	1853,6	—	Consumo eléctrico
K1	51,49	—	Consumo eléctrico
HX2	—	-1470,98	Retirada de calor
E2	—	2454,82	Aporte térmico
R1	—	-7608,78	Retirada de calor del reactor
E1	—	-4732,64	Retirada de calor
T1, condensador	—	-2526,01	Condensador
T1, rehervidor	—	16297,23	Rehervidor
E3	—	-792,51	Retirada de calor

A partir del balance de energía se observa que los principales consumos eléctricos corresponden a las etapas de compresión. El compresor CP1 presenta una potencia eléctrica de 1667,99 kW, mientras que CP2 requiere 1853,60 kW. A estos consumos se suma el compresor de reciclado K1, con una potencia de 51,49 kW. En conjunto, la potencia eléctrica total asociada a la compresión asciende a 3573,08 kW. Este resultado pone de manifiesto la importancia energética de operar el proceso a presión elevada, ya que la alimentación fresca debe comprimirse desde condiciones iniciales de baja presión hasta el entorno de operación del reactor, próximo a 50 bar. Además, la presencia de reciclado implica un consumo adicional, aunque menor, para reincorporar los gases no convertidos al lazo de reacción.

En cuanto al acondicionamiento térmico de las corrientes, el equipo E2 presenta un duty positivo de 2454,82 kJ/s, por lo que actúa como unidad de aporte térmico. Su función es elevar la temperatura de la corriente de alimentación al reactor hasta unas condiciones adecuadas para la síntesis directa de DME. Por el contrario, el intercambiador HX2 presenta un duty negativo de -1470,98 kJ/s, indicando retirada de calor. Este comportamiento está asociado al enfriamiento intermedio o recuperación térmica dentro del proceso, contribuyendo al acondicionamiento de las corrientes antes de su entrada a las unidades posteriores.

El reactor R1 presenta un duty térmico de -7608,78 kJ/s, lo que indica una retirada significativa de calor. Este resultado es coherente con el carácter globalmente exotérmico de las reacciones implicadas en la síntesis directa de DME a partir de gas de síntesis. La magnitud de este duty evidencia la necesidad de controlar térmicamente el reactor para mantener condiciones de operación estables y evitar incrementos excesivos de temperatura que podrían afectar al equilibrio, a la selectividad del proceso y al comportamiento del catalizador.

Tras el reactor, el equipo E1 actúa como enfriador de la corriente de salida, con un duty de -4732,64 kJ/s. Esta retirada de calor permite disminuir la temperatura de la mezcla de reacción antes de la separación gas-líquido, favoreciendo la condensación parcial de los compuestos oxigenados, especialmente DME, metanol y agua. De forma similar, el equipo E3 presenta un duty negativo de -792,51 kJ/s, asociado al enfriamiento final de la corriente de producto antes de la última separación. Aunque su carga térmica es menor que la de E1, contribuye al acondicionamiento final de la corriente enriquecida en DME.

La columna de destilación final T1 es el equipo con mayor demanda térmica del proceso. Su condensador presenta un duty de -2526,01 kJ/s, correspondiente a la retirada de calor en cabeza, mientras que el rehervidor requiere un aporte de 16297,23 kJ/s. Esta elevada demanda térmica está asociada a la separación final entre DME, metanol y agua. El aporte de calor en el rehervidor permite generar el vapor necesario para la separación, mientras que la retirada de calor en el condensador permite condensar parcialmente la corriente de cabeza y establecer el reflujo de la columna. Por tanto, T1 constituye uno de los principales puntos de consumo energético del modelo base.

5. Análisis de sensibilidad

5.1. Análisis de sensibilidad del proceso de producción de DME

En este apartado se analiza el efecto de la temperatura del reactor R1 sobre el proceso de producción de DME, manteniendo constantes el resto de condiciones del proceso. El intervalo estudiado fue de 240 a 300 °C, tomando como referencia el punto actual de operación, 260 °C. Este rango se considera representativo para la síntesis directa de DME sobre catalizadores bifuncionales CuO-ZnO-Al₂O₃, evitando temperaturas superiores a los 300 °C que podrían favorecer fenómenos de desactivación catalítica, como la sinterización o la deposición de coque, según lo descrito por Abu-Dahrieh et al. (2012).

Para evaluar el comportamiento del sistema se consideraron tres variables principales: la producción másica de DME, la fracción molar de DME en la corriente producto y la merma de DME en las purgas.

5.1.1. Sensibilidad de la producción de DME

En este apartado se estudió la producción másica del DME. Este parámetro permite evaluar la cantidad real de DME recuperada en la corriente final.

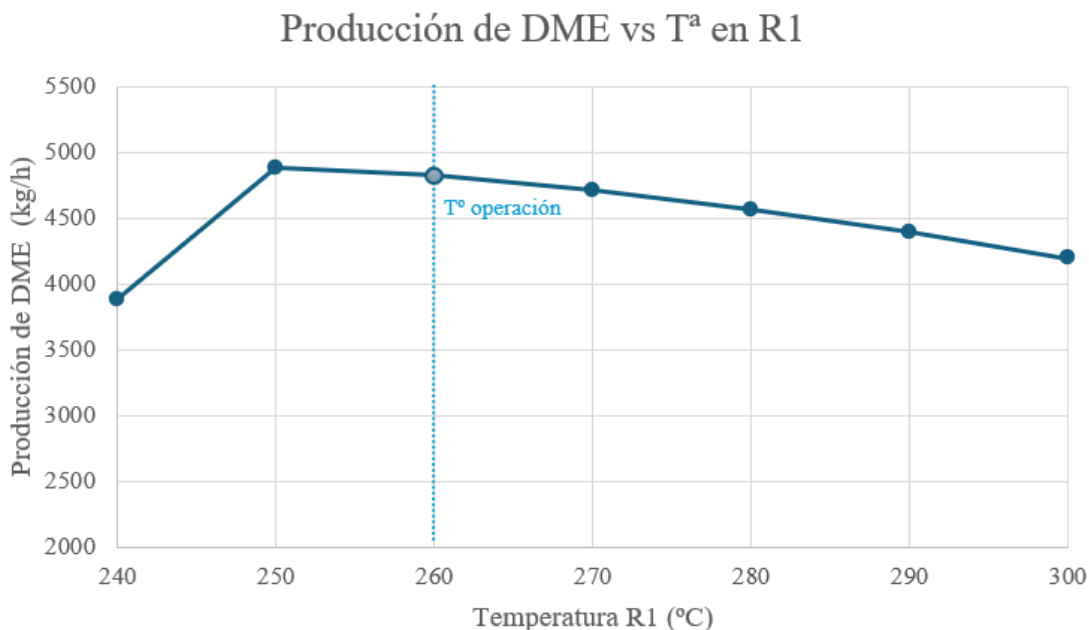
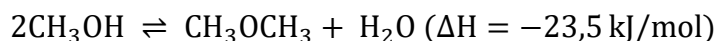
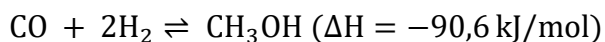


Figura 13: Producción másica de DME (kg/h) en la corriente "DME" en función de la temperatura del reactor R1.

Como se observa en la Figura 13, la producción de DME aumenta al pasar de 240 °C a 250 °C, alcanzando un máximo de aproximadamente 4882 kg/h. Este incremento inicial puede explicarse por el efecto cinético de la temperatura: a temperaturas más bajas, las reacciones implicadas en la síntesis directa de DME avanzan con menor velocidad y el reactor no aprovecha completamente el volumen catalítico disponible. Al aumentar la temperatura, se acelera la velocidad de reacción y se favorece la formación de DME durante el tiempo de residencia disponible.

Sin embargo, a partir de 250 °C la producción disminuye progresivamente hasta alcanzar aproximadamente 4195 kg/h a 300 °C. Este descenso se debe al compromiso entre cinética y equilibrio químico. La síntesis directa de DME incluye reacciones exotérmicas, como la síntesis de metanol y la deshidratación de metanol a DME:



Según el principio de Le Châtelier, en una reacción exotérmica el aumento de temperatura desplaza el equilibrio hacia los reactivos, reduciendo la conversión máxima alcanzable. Por tanto, aunque la cinética sigue siendo más rápida a temperaturas elevadas, la termodinámica empieza a limitar la formación neta de DME.

En consecuencia, el máximo de producción observado a 250 °C representa un punto de compromiso entre ambos efectos: por debajo de esta temperatura predomina la limitación cinética, mientras que por encima comienza a imponerse la penalización termodinámica asociada al carácter exotérmico del sistema. Este resultado confirma que la temperatura

óptima no debe seleccionarse únicamente a partir de la fracción másica de DME, sino considerando también la producción recuperada, la merma en purgas y la estabilidad del catalizador.

5.1.2. Sensibilidad de la fracción molar de DME

En segundo lugar, se estudió la influencia de la temperatura de operación del reactor R1 sobre la fracción molar de DME obtenida. Este parámetro representa la proporción en masa de DME respecto al caudal total de la corriente, por lo que permite evaluar el grado de enriquecimiento del producto, aunque no la cantidad absoluta de DME recuperada.

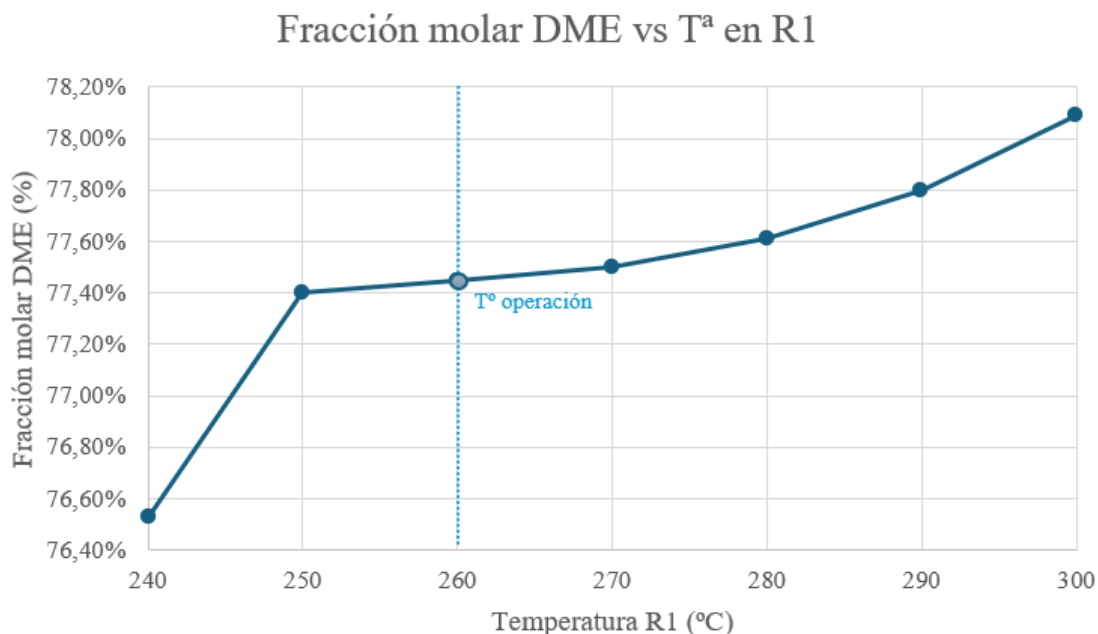
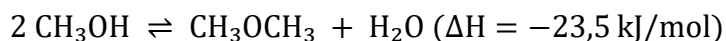


Figura 14: Fracción molar de DME en la corriente producto "DME" en función de la temperatura del reactor R1

Como se observa en la Figura 14, el aumento de temperatura provoca un incremento progresivo de la fracción másica de DME, que pasa de 76,53 % a 240 °C hasta 78,09 % a 300 °C. Aunque la variación total es moderada, la tendencia indica que la corriente final se enriquece ligeramente en DME al aumentar la temperatura del reactor.

Este comportamiento puede explicarse, en primer lugar, por cambios en la distribución de productos generados en el reactor. A temperaturas más elevadas, la deshidratación del metanol formado hacia DME puede verse favorecida cinéticamente:



De este modo, puede reducirse la proporción relativa de metanol residual en la mezcla intermedia y aumentar la presencia relativa de DME, facilitando posteriormente su recuperación en la corriente final.

Además, a partir de temperaturas superiores a 250 °C, la producción másica total de DME disminuye, lo que indica que también se modifica el caudal de productos condensables que llega al tren de separación. Esta menor carga, junto con una composición de entrada diferente, puede favorecer una separación ligeramente más eficaz de los componentes no

deseados, como agua, metanol, CO₂ o gases no reaccionados. Como resultado, la corriente final puede presentar una fracción másica de DME algo mayor, aunque la cantidad absoluta de DME recuperada sea menor.

Por tanto, el aumento de la fracción másica con la temperatura se interpreta como el resultado combinado de una mayor conversión relativa de intermedios hacia DME y de una entrada al sistema de separación más favorable para el enriquecimiento del producto. No obstante, la mejora es limitada, ya que entre 240 y 300 °C la fracción másica solo aumenta 1,56 puntos porcentuales, por lo que el efecto de la temperatura sobre la pureza final es moderado.

5.1.3. Sensibilidad de la merma de DME

En este apartado, se analizó el efecto de la temperatura del reactor R1 sobre la merma de DME en el proceso, la cual, se define como la fracción de dimetil éter que no se recupera en la corriente final de producto y que se pierde a través de las corrientes de purga del sistema.

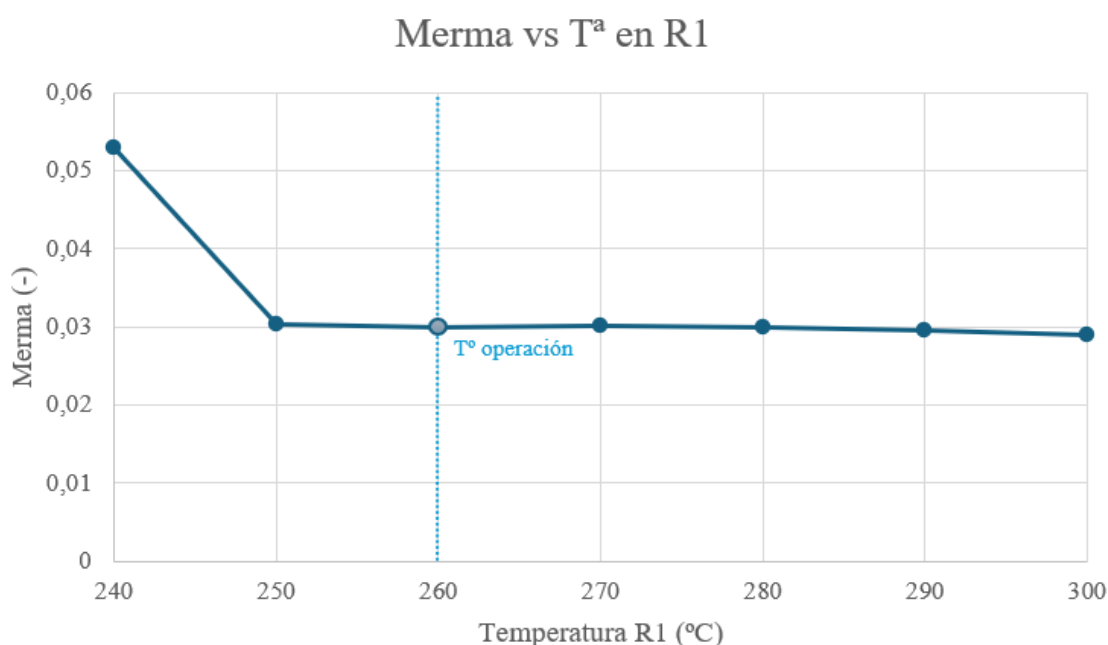


Figura 15: Merma en función de la temperatura del reactor R1.

Como se observa en la Figura 15, la merma disminuye de forma significativa al aumentar la temperatura desde 240 °C hasta 250 °C, pasando de 5,29 % a 3,03 %. Esta reducción coincide con la mejora inicial en la formación de DME, lo que sugiere que a 240 °C el sistema se encuentra más limitado por la cinética de reacción. Al aumentar la temperatura, las velocidades de reacción se incrementan y se favorece una mayor conversión dentro del volumen disponible del reactor.

A partir de 250 °C, la merma se estabiliza en valores próximos al 3 %, disminuyendo solo ligeramente hasta 2,89 % a 300 °C. Este comportamiento puede explicarse por el equilibrio de fases en las etapas posteriores de separación. La merma se produce principalmente en corrientes gaseosas de purga o separación, por lo que depende de la volatilidad del DME y de la distribución vapor-líquido de las corrientes. Una vez que la composición generada en el reactor apenas varía, como ocurre entre 250 y 270 °C, la

cantidad de DME arrastrada en las purgas también tiende a mantenerse prácticamente constante.

Además, al aumentar la temperatura también pueden modificarse las reacciones secundarias del sistema, especialmente la reacción de desplazamiento de gas de agua:



Un mayor contenido de CO_2 en las corrientes posteriores puede incrementar el caudal de gases no condensables enviados a purga. Este gas puede arrastrar una cierta cantidad de DME por equilibrio de fases, compensando parcialmente el beneficio asociado a una mayor formación de producto. Por ello, aunque la temperatura aumenta de 250 a 300 °C, la merma solo disminuye de forma ligera. En consecuencia, la merma constituye un indicador útil para evaluar la eficiencia de recuperación del DM.

5.2. Análisis de sensibilidad de la separación del DME

5.2.1. Análisis de sensibilidad respecto a la temperatura de salida de E3

5.2.1.1. Sensibilidad de la producción de DME

En este apartado se analiza el efecto de la temperatura de salida del intercambiador E3 sobre la producción másica de DME recuperada en la corriente final de producto. Este equipo se encuentra aguas abajo de la columna T1 y antes del separador V3, por lo que su temperatura condiciona el equilibrio vapor-líquido de la corriente que entra al separador final. Por tanto, esta variable no afecta directamente a la formación química de DME en el reactor, sino a su recuperación en la etapa final de purificación.

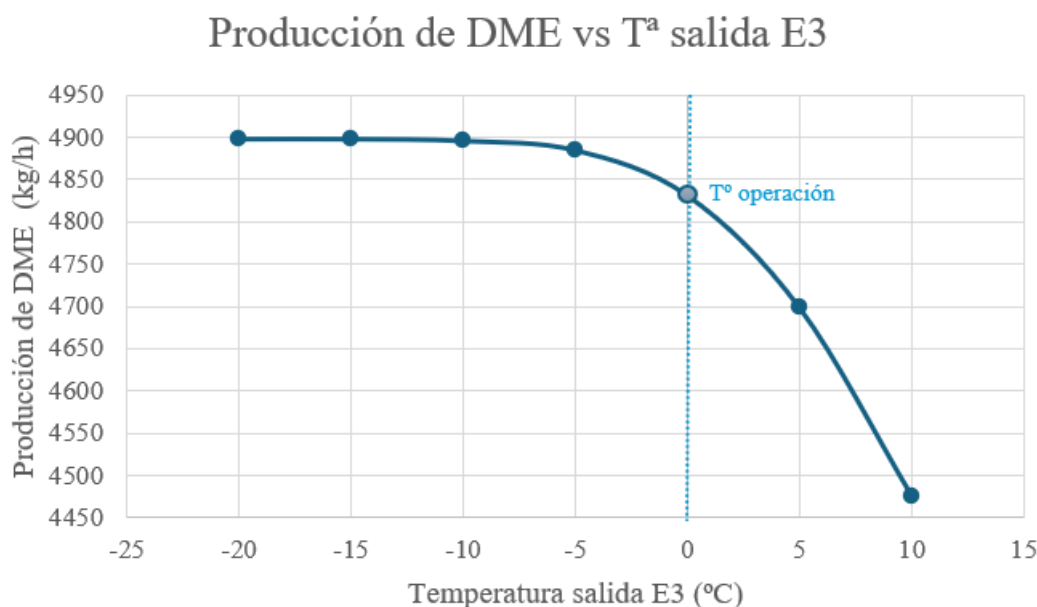


Figura 16: Producción másica de DME en función de la temperatura de salida de E3

Como se observa en la Figura 16, la producción de DME es máxima a temperaturas negativas de E3, alcanzando aproximadamente 4898 kg/h entre -20 y -15 °C. En esta zona, la baja temperatura favorece la condensación del DME y, por tanto, su recuperación en la corriente líquida de producto. El hecho de que la producción sea prácticamente idéntica entre -20 y -15 °C indica que, en ese intervalo, el sistema se encuentra próximo

a un límite de recuperación y que enfriar por debajo de $-15\text{ }^{\circ}\text{C}$ apenas aporta mejora adicional.

A medida que aumenta la temperatura de salida de E3, la producción de DME disminuye progresivamente. A $0\text{ }^{\circ}\text{C}$, correspondiente al punto actual de operación, se recuperan $4831,1\text{ kg/h}$, mientras que a $10\text{ }^{\circ}\text{C}$ la producción desciende hasta $4475,5\text{ kg/h}$. Esta reducción se debe a que, al aumentar la temperatura, una mayor fracción de DME permanece en fase vapor y se arrastra hacia la corriente de purga del separador V3, aumentando la merma del proceso.

5.2.1.2. Sensibilidad de la fracción molar de DME

En este apartado se analiza el efecto de la temperatura de salida del intercambiador E3 sobre la fracción molar de DME en la corriente final de producto. E3 se sitúa antes del separador final V3, por lo que su temperatura modifica el equilibrio vapor-líquido de la corriente procedente de T1 y, en consecuencia, la composición de la fase líquida recuperada como producto.

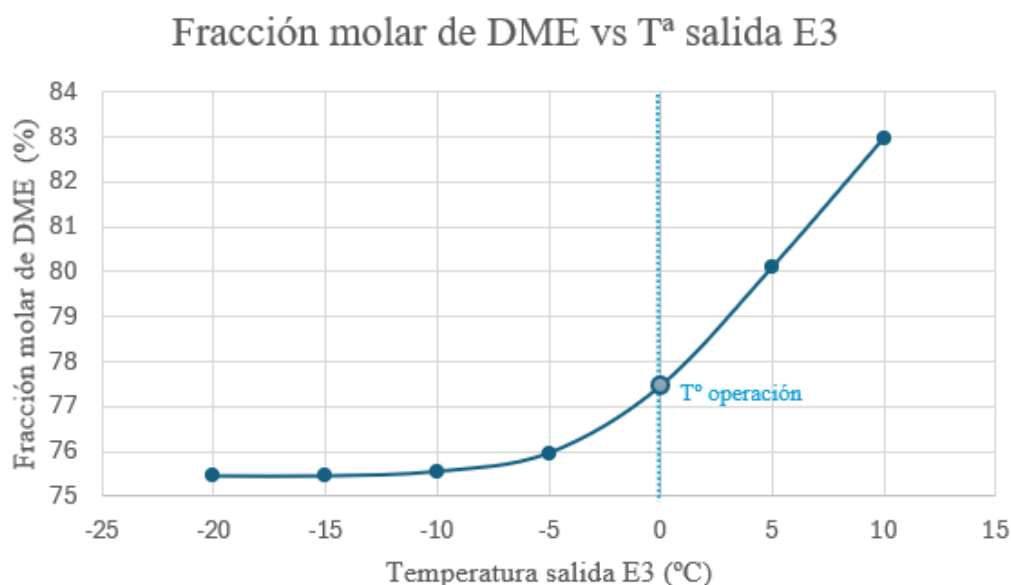


Figura 17: Fracción molar de DME en la corriente producto final en función de la temperatura de salida de E3.

Como se observa en la Figura 17, la fracción molar de DME aumenta progresivamente al incrementar la temperatura de salida de E3. A temperaturas bajas, entre -20 y $-15\text{ }^{\circ}\text{C}$, la fracción molar se mantiene prácticamente constante en torno a $0,7545$. En esta zona, el enfriamiento intenso favorece la condensación de DME, pero también puede arrastrar hacia la fase líquida otros componentes presentes en la corriente, como CO_2 , metanol, agua o gases parcialmente solubilizados, reduciendo así la fracción molar relativa de DME.

A medida que aumenta la temperatura, la corriente líquida final se enriquece en DME, alcanzando $0,7745$ a $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $0,8296$ a $10\text{ }^{\circ}\text{C}$. Este comportamiento puede explicarse porque, a temperaturas más elevadas, parte de los componentes más volátiles o no deseados permanecen preferentemente en fase vapor y se separan en V3, mientras que la fase líquida recuperada presenta una mayor proporción relativa de DME.

Por tanto, desde el punto de vista de composición, temperaturas más altas en E3 favorecen una corriente producto más enriquecida en DME. No obstante, este resultado debe interpretarse junto con la producción másica recuperada, ya que una mayor fracción molar no implica necesariamente una mayor cantidad total de DME en el producto.

5.2.1.3. Sensibilidad de la merma de DME

En este apartado se analiza el efecto de la temperatura de salida del intercambiador E3 sobre la merma de DME en el proceso de separación. En este caso, la merma se define como la fracción de DME que no se recupera en la corriente final de producto y que se pierde a través de las corrientes de purga del sistema.

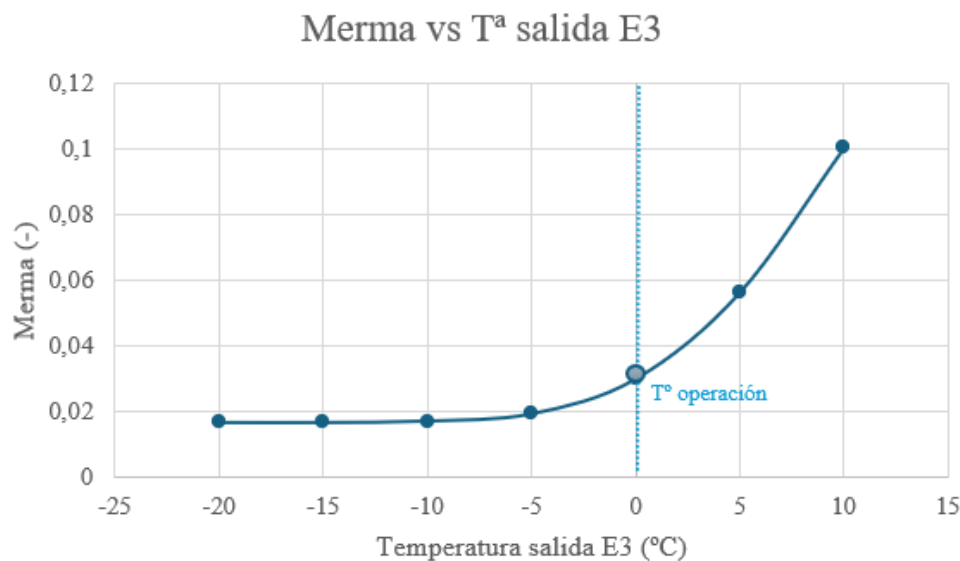


Figura 18: Merma de DME en función de la temperatura de salida de E3.

Como se observa en la Figura 18, la merma aumenta de forma muy marcada al incrementar la temperatura de salida de E3. A temperaturas bajas, entre -20 y -15 °C, la merma se mantiene prácticamente constante en torno a 1,67 %, lo que indica que la mayor parte del DME se condensa y se recupera en la corriente líquida de producto. Este comportamiento coincide con la producción máxima observada en ese mismo intervalo, próxima a 4898 kg/h.

A partir de -10 °C, la merma comienza a aumentar ligeramente, y este incremento se vuelve mucho más acusado por encima de 0 °C. En el punto actual de operación, 0 °C, la merma es de 3,00 %, mientras que al aumentar la temperatura hasta 10 °C alcanza aproximadamente 10,05 %. Este aumento se debe a que, al operar E3 a mayor temperatura, disminuye la condensación del DME y una fracción creciente del producto permanece en fase vapor, siendo arrastrada hacia la corriente de purga del separador V3.

Este resultado muestra claramente el compromiso existente entre pureza y recuperación. Al aumentar la temperatura de E3, la corriente líquida final puede presentar una mayor fracción molar de DME, ya que se separan más componentes volátiles hacia la fase vapor. Sin embargo, esta mejora de composición se consigue a costa de perder una mayor cantidad absoluta de DME en la purga. Por ello, una mayor pureza no implica necesariamente una operación más eficiente.

En consecuencia, desde el punto de vista de recuperación de producto, las temperaturas más favorables de E3 se sitúan en el intervalo -20 a -10 °C, donde la merma es mínima y la producción de DME se mantiene próxima a su valor máximo. No obstante, la selección final de la temperatura debe considerar también el coste energético asociado a una refrigeración más intensa y la composición final del producto obtenido.

5.2.2. Análisis de sensibilidad respecto a la temperatura de condensación de T1

En este apartado se analiza la influencia de la temperatura de condensación de la columna T1 sobre la separación DME/CO₂ y sobre la recuperación final de DME. Esta variable es especialmente relevante porque modifica el equilibrio vapor-líquido en la zona de cabeza de la columna y, por tanto, condiciona la composición de la corriente que posteriormente pasa por las etapas finales de enfriamiento y separación. La separación entre DME y CO₂ resulta compleja porque ambos compuestos pueden encontrarse asociados a la fracción ligera del proceso, y su distribución depende fuertemente de la temperatura, la presión y la solubilidad del CO₂ en la fase rica en DME.

Desde el punto de vista termodinámico, el DME presenta un punto de ebullición normal próximo a -25 °C, y una temperatura crítica cercana a 128 °C, mientras que el CO₂ tiene una temperatura crítica de aproximadamente 31 °C y una presión crítica próxima a $73,8$ bar. Esto explica que, en el intervalo de condensación estudiado, la separación no pueda interpretarse como una condensación simple de componentes puros, sino como un equilibrio de mezcla donde la volatilidad relativa, la solubilidad y la composición de la corriente desempeñan un papel importante.

5.2.2.1. Sensibilidad de la producción de DME

La producción másica de DME permite evaluar la cantidad real de producto recuperado en la corriente final. A diferencia de la fracción molar, este parámetro no mide la pureza, sino los kg/h de DME efectivamente obtenidos tras la sección de separación. Por ello, es un indicador directo de recuperación de producto.

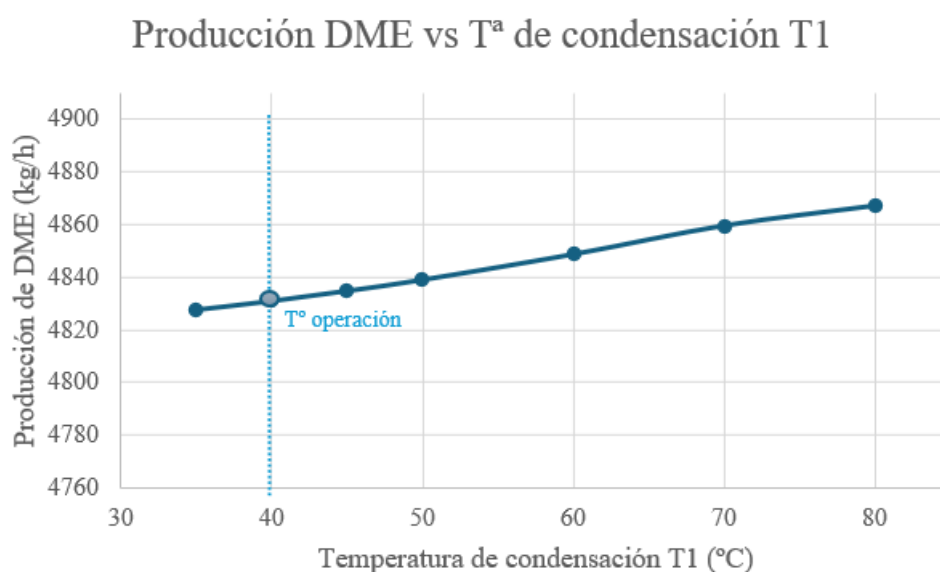


Figura 19: Producción másica de DME en función de la temperatura de condensación de T1.

Como se observa en la Figura 19, la producción másica de DME aumenta ligeramente al incrementar la temperatura de condensación de T1. A 35 °C se recuperan 4827,8 kg/h, mientras que a 80 °C se alcanzan 4866,9 kg/h. Sin embargo, la variación total es reducida, de aproximadamente 39,1 kg/h, lo que equivale a menos del 1 % respecto al valor inicial. Por tanto, la temperatura de condensación de T1 tiene un efecto limitado sobre la cantidad absoluta de DME recuperada.

Este comportamiento es coherente con la función de T1 dentro del proceso: la columna no genera DME, sino que redistribuye los componentes procedentes de las etapas anteriores. La formación de DME queda determinada principalmente por el reactor, mientras que la columna afecta a su reparto entre las corrientes de cabeza, fondo y etapas posteriores de separación. La bibliografía de procesos de producción de DME también plantea el análisis de estas unidades a partir de balances de materia y energía, ya que la etapa de purificación condiciona la recuperación final y el coste energético del proceso, pero no la generación química del producto.

El ligero aumento de la producción con la temperatura de condensación puede interpretarse como una menor pérdida de DME en las corrientes de purga. Al operar con una condensación menos intensa en T1, se modifica la distribución de la corriente superior y una mayor cantidad de DME termina recuperándose aguas abajo. No obstante, esta mejora en producción es pequeña y debe analizarse junto con la pureza, ya que el aumento de DME recuperado viene acompañado de una disminución importante de la fracción molar de DME en el producto final, como se verá en los apartados posteriores.

5.2.2.2. Sensibilidad de la fracción molar de DME

La fracción molar de DME permite evaluar la calidad del producto final. En este caso, resulta especialmente importante porque el objetivo de la sección de separación no es únicamente recuperar DME, sino obtener una corriente lo más enriquecida posible en este compuesto, minimizando la presencia de CO₂ y otras impurezas.

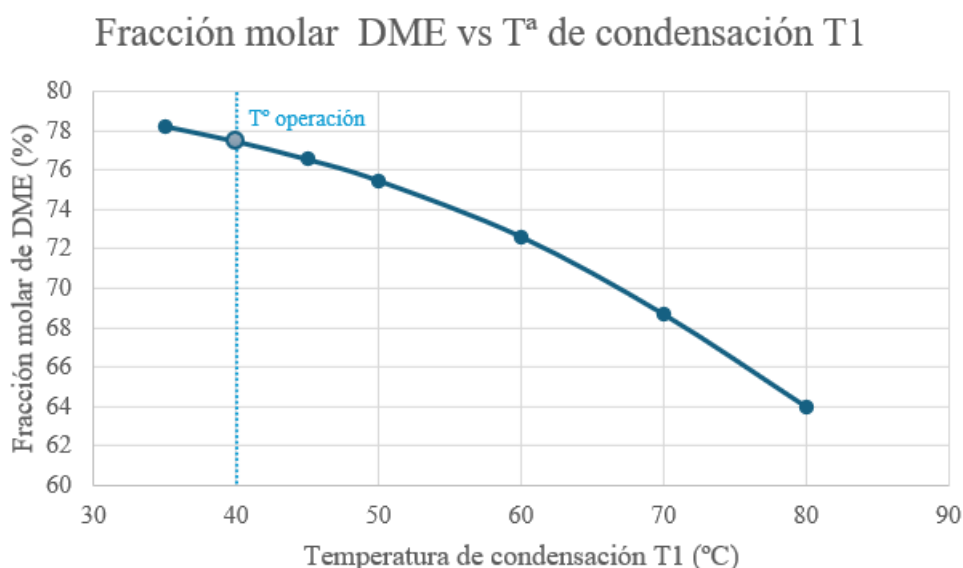


Figura 20: Fracción molar de DME en la corriente final en función de la temperatura de condensación de T1.

Los resultados de la Figura 20 muestran una tendencia clara: al aumentar la temperatura de condensación de T1, la fracción molar de DME disminuye de forma progresiva. A 35 °C, la corriente final alcanza una fracción molar de DME de 78,22 %, mientras que a 80 °C desciende hasta 63,95 %. Esta caída de más de 14 puntos porcentuales indica que la temperatura de condensación sí tiene un efecto muy significativo sobre la pureza del producto.

Desde el punto de vista técnico, una temperatura de condensación más baja favorece una separación más selectiva en la columna, al aumentar la condensación interna y mejorar el contacto líquido-vapor en la zona superior. Esto permite obtener una corriente final más enriquecida en DME. En cambio, al aumentar la temperatura de condensación, la separación se vuelve menos exigente y una mayor proporción de componentes no deseados puede acompañar al DME hacia la corriente final. En sistemas DME/CO₂, este efecto es especialmente relevante porque la separación depende de un equilibrio de mezcla no ideal, y la bibliografía señala que la presencia de CO₂ en corrientes ricas en DME exige estrategias de purificación específicas para reducir pérdidas y mejorar la eficiencia de separación.

Por tanto, aunque a temperaturas de condensación elevadas se recupera ligeramente más DME en términos absolutos, la corriente producto se diluye de forma notable. Este resultado confirma que maximizar la producción másica no equivale necesariamente a maximizar la calidad del producto. Para un proceso de purificación, la fracción molar de DME debe considerarse una variable prioritaria, especialmente si se busca una corriente final con mayor valor comercial o adecuada para etapas posteriores.

5.2.2.3. Sensibilidad de la merma de DME

La merma de DME se utiliza como indicador de la eficiencia de recuperación del producto. En este trabajo se define como la fracción de DME que no se recupera en la corriente final y que se pierde a través de las corrientes de purga consideradas en la sección de separación.

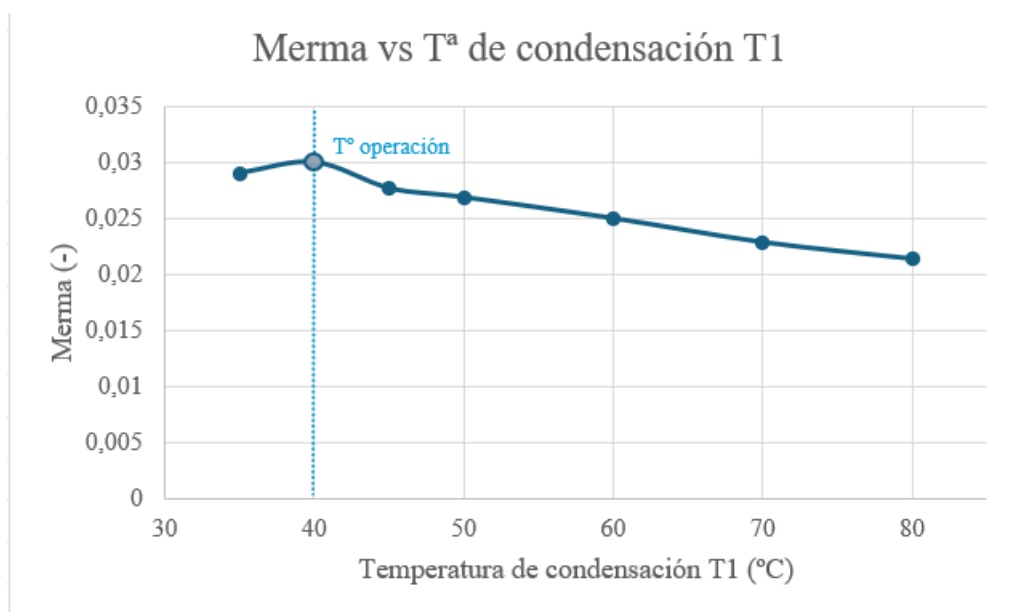


Figura 21: Merma de DME en función de la temperatura de condensación de T1.

Los resultados de la Figura 21 muestran que la merma disminuye al aumentar la temperatura de condensación de T1. A 35 °C, la merma es de 0,029, equivalente a 2,90 %, mientras que a 80 °C se reduce hasta 0,021, es decir, 2,13 %. Esta tendencia indica que, al aumentar la temperatura de condensación, una menor proporción del DME total se pierde en las purgas y una mayor cantidad termina recuperándose en la corriente final.

La explicación está relacionada con la redistribución de fases y composiciones en la columna y en las unidades posteriores. Al operar con temperaturas de condensación más elevadas, el sistema recupera ligeramente más DME y reduce las pérdidas asociadas a las purgas. Sin embargo, esta reducción de merma no implica necesariamente una mejora global del proceso, ya que se produce simultáneamente una caída importante de la fracción molar de DME. La bibliografía sobre purificación DME/CO₂ señala precisamente este tipo de compromiso entre minimización de pérdidas de producto, consumo energético y calidad de separación, motivo por el cual se han propuesto esquemas alternativos como la destilación con stripping para mejorar la separación sin penalizar excesivamente la recuperación.

En consecuencia, las temperaturas altas de condensación, como 70–80 °C, son favorables desde el punto de vista de la merma, pero no desde el punto de vista de pureza. Por el contrario, temperaturas más bajas, especialmente 35–45 °C, permiten obtener una corriente más enriquecida en DME, aunque con una pérdida ligeramente superior. Esta diferencia de merma es relativamente pequeña en comparación con la pérdida de pureza observada al aumentar la temperatura.

5.2.3. Análisis de sensibilidad respecto a la presión de cabeza de T1

En este apartado se analiza la influencia de la presión de cabeza de la columna T1 sobre la separación DME/CO₂ y sobre la recuperación final de DME. Esta variable es relevante porque la presión de operación de una columna de destilación modifica el equilibrio vapor-líquido, la volatilidad relativa de los componentes y la composición de las corrientes de cabeza y fondo.

Además, la presión de operación es una variable clásica de diseño en columnas de destilación, ya que afecta a la volatilidad relativa, a las temperaturas internas de la columna y a las necesidades energéticas del condensador y del rehedidor.

5.2.3.1. Sensibilidad de la producción de DME

La producción másica de DME permite evaluar la cantidad real de producto recuperado en la corriente final. En este caso, la presión de cabeza de T1 no modifica la formación química de DME, ya que esta tiene lugar aguas arriba en el reactor, sino que afecta a la forma en la que el DME se distribuye entre la corriente producto y las corrientes de purga dentro del sistema de separación.

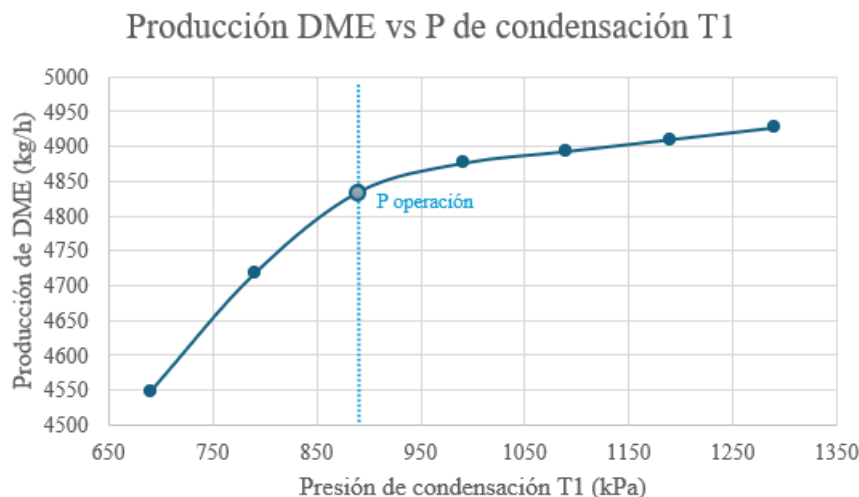


Figura 22: Producción másica de DME en función de la presión de cabeza de T1

Como se observa en la Figura 22, la producción de DME aumenta de forma progresiva al incrementar la presión de cabeza de T1. A 690 kPa se recuperan 4547,0 kg/h, mientras que a 1090 kPa se alcanzan 4893,4 kg/h. Considerando también los valores extrapolados, la producción llegaría hasta 4927,6 kg/h a 1290 kPa. Por tanto, el aumento de presión favorece la recuperación másica de DME en la corriente final.

Este comportamiento puede explicarse por el efecto de la presión sobre el equilibrio vapor-líquido. Al aumentar la presión, se favorece la permanencia de una mayor cantidad de DME en la fase condensada o recuperable, reduciendo su arrastre en las corrientes gaseosas de purga. En procesos de producción de DME, la etapa de purificación suele combinar enfriamiento, separación flash y destilación para recuperar DME y retirar CO₂, gases no reaccionados y metanol, por lo que las condiciones de presión tienen un papel directo sobre la distribución de fases.

No obstante, la mejora de producción no es uniforme en todo el intervalo. El mayor incremento se observa al pasar de 690 a 890 kPa, donde la producción aumenta de forma significativa. A partir de 990 kPa, la pendiente se suaviza y los aumentos adicionales son más moderados. Esto indica que, una vez alcanzada una presión suficientemente elevada, el sistema se aproxima a una zona de menor sensibilidad, donde seguir aumentando la presión aporta una mejora cada vez más limitada en la producción recuperada.

5.2.3.2. Sensibilidad de la fracción molar de DME

La fracción molar de DME se emplea como indicador de la calidad de la corriente producto. A diferencia de la producción másica, que indica cuántos kg/h de DME se recuperan, la fracción molar permite evaluar el grado de enriquecimiento del producto y la presencia relativa de impurezas, especialmente CO₂.

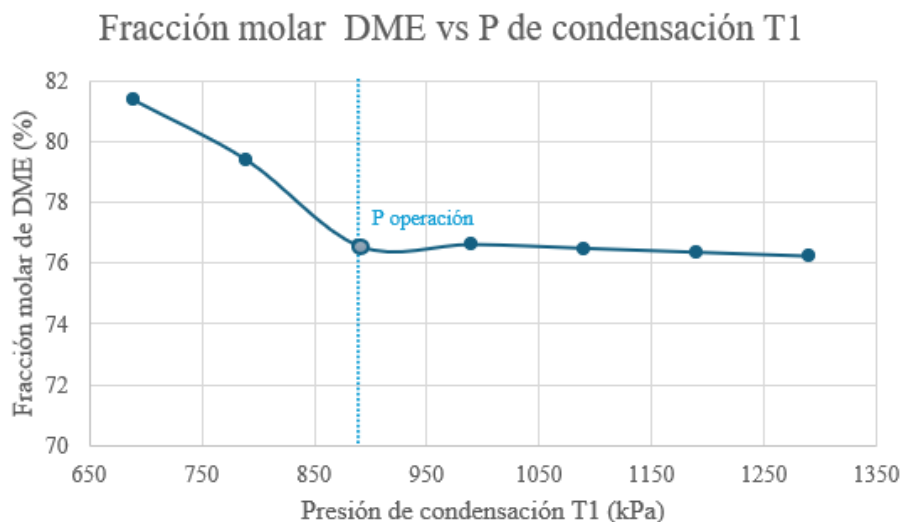


Figura 23: Fracción molar de DME en la corriente producto en función de la presión de cabeza de T1

Los resultados de la Figura 23 muestran que la fracción molar de DME disminuye al aumentar la presión de cabeza de T1. A 690 kPa, la corriente final presenta una fracción molar de DME de 81,36 %, mientras que a 1090 kPa disminuye hasta 76,47 %. En los valores extrapolados, la fracción molar seguiría bajando ligeramente hasta 76,21 % a 1290 kPa.

Este resultado indica que las presiones más bajas favorecen una corriente más enriquecida en DME, aunque con menor recuperación másica. Técnicamente, esto puede interpretarse como una separación más selectiva: a menor presión, la diferencia de comportamiento entre componentes puede favorecer una mayor pureza relativa en el producto, aunque parte del DME se pierda en las corrientes de purga. En columnas de destilación, la presión afecta directamente a la volatilidad relativa y, por tanto, a la facilidad de separación entre componentes.

Por el contrario, al aumentar la presión se recupera más DME en términos absolutos, pero la corriente producto queda ligeramente más diluida. Esto sugiere que el aumento de presión favorece la recuperación global de material, pero también puede incrementar el arrastre o la co-recuperación de otros componentes junto con el DME, reduciendo su fracción molar en la corriente final.

Este comportamiento es coherente con la dificultad de la separación DME/CO₂. La bibliografía indica que la proximidad de las curvas de equilibrio y la afinidad entre ambos compuestos hacen que la purificación requiera un ajuste cuidadoso de las condiciones de operación. Por ello, no basta con maximizar la presión para recuperar más DME; también debe evaluarse si la pureza final obtenida sigue siendo aceptable.

5.2.3.3. Sensibilidad de la merma de DME

La merma de DME permite cuantificar la fracción de producto que no se recupera en la corriente final y que se pierde a través de las purgas del sistema. En este análisis se mantiene la definición empleada en los apartados anteriores.

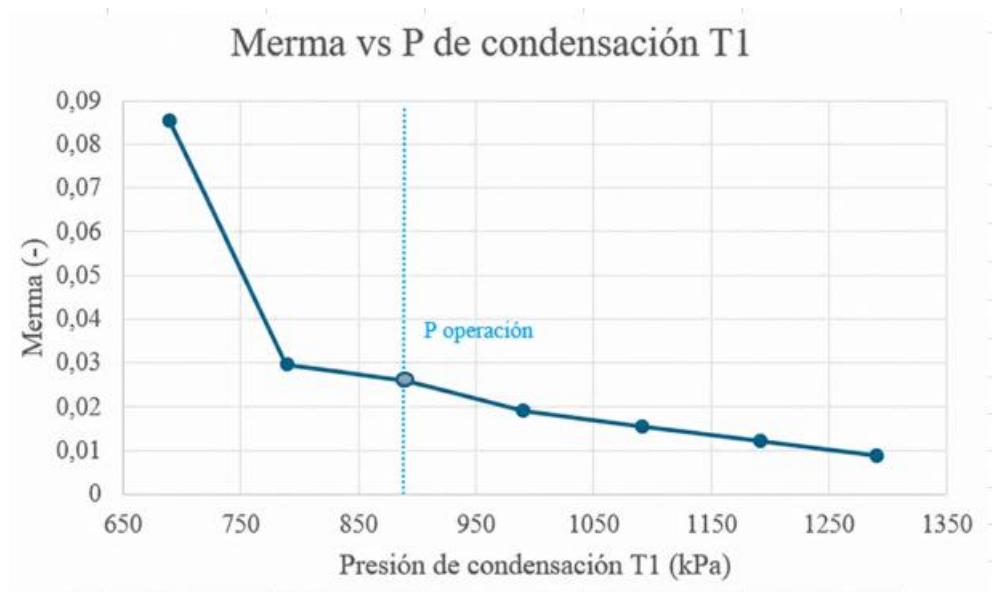


Figura 24: Merma de DME en función de la presión de cabeza de T1

Los resultados de la Figura 24 muestran una disminución clara de la merma al aumentar la presión de cabeza de T1. A 690 kPa, la merma alcanza 0,085569, es decir, aproximadamente 8,56 %. Al aumentar la presión hasta 1090 kPa, la merma desciende a 0,015792, equivalente a 1,58 %. Si se consideran los valores extrapolados, la merma podría disminuir hasta 0,008902, es decir, 0,89 %, a 1290 kPa.

Esta tendencia indica que el aumento de presión favorece la recuperación de DME y reduce su pérdida en las corrientes de purga. Desde el punto de vista de operación, esto es positivo, ya que implica un mejor aprovechamiento del DME formado aguas arriba. Sin embargo, esta mejora en recuperación se produce simultáneamente con una ligera disminución de la fracción molar de DME, por lo que no debe interpretarse de forma aislada.

El descenso más acusado de la merma se observa entre 690 y 990 kPa, intervalo en el que la presión tiene un efecto muy marcado sobre la recuperación. A presiones superiores, la merma continúa disminuyendo, pero de forma más gradual. Esto sugiere que el sistema empieza a aproximarse a una zona de rendimiento decreciente: aumentar más la presión sigue reduciendo pérdidas, pero cada incremento adicional aporta una mejora menor.

6. Conclusiones

Una vez finalizado el modelado y simulación del proceso de producción de dimetil éter a partir de gas de síntesis, se establecen las principales conclusiones obtenidas. El trabajo ha permitido desarrollar un modelo completo en AVEVA Process Simulation, integrando la etapa de reacción, el acondicionamiento de la alimentación, la separación, recirculación, purga y purificación final del producto.

La implementación del modelo del reactor ha requerido representar un sistema reactivo complejo, formado por varias reacciones reversibles acopladas: síntesis de metanol a partir de CO y CO₂, deshidratación de metanol y reacción de desplazamiento de gas de agua. Para ello se empleó un modelo cinético LHHW basado en Nie y Shim, incorporando

términos de fugacidad, adsorción y reversibilidad, lo que hizo necesario revisar cuidadosamente la bibliografía y sus fuentes originales. Además, el uso de constantes de equilibrio calculadas mediante datos NIST/Shomate mejoró la consistencia termodinámica del modelo, especialmente en la reacción WGS. La validación frente a Luu et al. confirmó que, con el caso calibrado de velocidad espacial, el modelo reproduce adecuadamente la fracción molar de DME y la conversión de CO, mientras que las discrepancias en H₂, metanol y agua se atribuyen a diferencias termodinámicas, falta de datos exactos de alimentación y ausencia de reajuste cinético específico.

En cuanto al diseño de la planta completa, el caso base permitió representar una primera configuración con compresión, calentamiento, reacción, enfriamiento, separación, recirculación y purga. Sin embargo, esta configuración evidenció limitaciones importantes en la recuperación del producto, especialmente por la presencia simultánea de DME, CO₂, metanol, agua y gases no reaccionados. La separación de estos compuestos resultó ser una de las partes más delicadas del proceso, tanto por el equilibrio de la mezcla como por la necesidad de compatibilizar pureza, recuperación y estabilidad de la simulación.

A partir de estas limitaciones, se planteó una configuración mejorada que incorpora lavado con agua, expansión, unidades flash y una columna de destilación final. Esta modificación permitió obtener una corriente final enriquecida en DME y representar de forma más realista la purificación del producto. En el caso de operación analizado, se alcanzó una producción aproximada de 4831 kg/h de DME y una fracción molar de 77,45 %. Estos resultados muestran que la estrategia de separación seleccionada mejora la recuperación del producto, aunque la presencia de CO₂ continúa siendo una de las principales limitaciones para alcanzar purezas superiores.

En relación con las alternativas de purificación, la destilación fraccionada convencional e intensificada se considera la opción más adecuada para continuar el desarrollo del modelo. Esta alternativa se integra de forma directa con el esquema ya implementado, permite mejorar la recuperación y pureza del DME y presenta menor incertidumbre de diseño que otras opciones. No obstante, la absorción química de CO₂ queda identificada como una línea futura de interés, especialmente si el objetivo pasa a ser la reducción específica del contenido de CO₂ en la corriente final.

El análisis de sensibilidad permitió identificar las variables de operación más influyentes sobre la producción, composición y merma de DME. En el reactor, la temperatura mostró un comportamiento marcado por el compromiso entre cinética y equilibrio químico: la producción aumentó inicialmente al elevar la temperatura, alcanzando un máximo en torno a 250 °C, pero disminuyó a temperaturas superiores debido al carácter exotérmico de las reacciones principales. Este resultado confirma que no resulta conveniente aumentar indefinidamente la temperatura del reactor, ya que una mayor velocidad de reacción no implica necesariamente una mayor formación neta de DME.

En la sección de separación, las variables analizadas confirmaron que la recuperación y la pureza no siempre evolucionan en el mismo sentido. La disminución de la temperatura de salida de E3 favoreció la condensación y recuperación del producto, mientras que temperaturas más elevadas aumentaron la fracción molar de DME a costa de una mayor pérdida en purgas. Del mismo modo, la temperatura de condensación de T1 mostró que

operar a temperaturas moderadas, aproximadamente entre 35 y 45 °C, permite mantener una fracción molar elevada sin penalizar de forma significativa la producción. Por su parte, el aumento de la presión de cabeza de T1 redujo la merma e incrementó la cantidad de DME recuperada, aunque con una ligera disminución de la pureza, situándose el intervalo 890–990 kPa como una zona de operación equilibrada.

Estos resultados ponen de manifiesto que producción, composición y merma deben analizarse siempre de forma conjunta. Una condición de operación puede mejorar la fracción molar de DME y, al mismo tiempo, reducir la cantidad absoluta de producto recuperado, o bien disminuir la merma a costa de una corriente final menos enriquecida. Por tanto, la optimización del proceso no puede basarse en una única variable, sino en un compromiso entre recuperación, pureza, pérdidas en purgas y consumo energético.

En conjunto, se concluye que la producción directa de DME a partir de syngas es técnicamente viable desde el punto de vista de simulación, pero su rendimiento global depende fuertemente de la integración entre reacción y separación. El reactor determina la cantidad de DME formada, mientras que la sección de purificación condiciona la cantidad realmente recuperada y la calidad de la corriente final. Por ello, la separación DME/CO₂ constituye uno de los principales puntos críticos del proceso y debe considerarse prioritaria en futuras mejoras.

El modelo desarrollado constituye una base sólida para analizar el proceso e identificar tendencias coherentes ante variaciones de temperatura y presión. No obstante, los resultados deben interpretarse dentro del alcance propio de una simulación. La precisión cuantitativa final dependerá de la disponibilidad de datos experimentales específicos del catalizador, del reajuste de los parámetros cinéticos y de una descripción termodinámica más detallada de la mezcla DME/CO₂. En este sentido, el modelo no debe entenderse como un diseño industrial definitivo, sino como una herramienta de análisis y toma de decisiones para orientar fases posteriores de optimización.

Como líneas futuras, se propone profundizar en alternativas avanzadas de purificación, especialmente destilación intensificada con stripping, absorción selectiva o esquemas híbridos orientados a mejorar la separación DME/CO₂. También sería recomendable ampliar el análisis de sensibilidad a variables adicionales del reactor, como presión, relación H₂/CO, velocidad espacial y composición del syngas, e incorporar una evaluación energética, económica y ambiental más completa. Desde el punto de vista de viabilidad futura, el proceso presenta un potencial técnico prometedor, siempre que se optimicen la purificación, el consumo energético y la recuperación del producto. De este modo, el modelo desarrollado puede servir como punto de partida para estudios posteriores de escalado, optimización y evaluación técnico-económica de la producción sostenible de dimetil éter a partir de gas de síntesis.

7. Anexos

Tabla 12: Código implementado en Python

```

"""
validacion_pfr_pr_dme.py

Verificación independiente del reactor tubular PFR de síntesis directa de DME.
El script reproduce el esquema descrito en el informe de validación:
- Reactor PFR 1D isoterma.
- Ecuación de estado Peng-Robinson para coeficientes de fugacidad.
- Cinética LHHW tipo Nie/Shim para síntesis directa de DME.
- Integración numérica con solve_ivp(method='Radau').
- Comparación con resultados exportados de AVEVA o con los valores del informe.

Uso recomendado:
1) Exportar desde AVEVA las fracciones molares de salida del reactor validado.
2) Sustituir/añadir esos valores en AVEVA_REFERENCE.
3) Ejecutar este script y revisar el error relativo medio (MRE).

Nota: los parámetros cinéticos y expresiones se han transcrito del submodelo AVEVA
DME_Kinetics_direct del archivo .simx validado. Si se modifica el submodelo en AVEVA,
deben actualizarse aquí las mismas expresiones.
"""

1 from __future__ import annotations
2
3 import numpy as np
4 import pandas as pd
5 from scipy.integrate import solve_ivp
6
7 R = 8.314462618 # J/mol/K
8
9 COMPONENTS = ["CO", "CO2", "H2", "H2O", "METHANOL", "DME", "N2"]
10 IDX = {c: i for i, c in enumerate(COMPONENTS)}
11
12 # Propiedades críticas para Peng-Robinson: Tc [K], Pc [bar], omega [-]
13 PR_PROPS = pd.DataFrame(
14     {
15         "Tc": [132.86, 304.1282, 33.145, 647.096, 512.6, 400.1, 126.2],
16         "Pc_bar": [34.99, 73.773, 12.964, 220.64, 80.97, 53.7, 33.98],
17         "omega": [0.048, 0.22394, -0.219, 0.344, 0.559, 0.199, 0.0372],
18     },
19     index=COMPONENTS,
20 )
21
22 # Estequiometría: filas = componentes; columnas = R1, R2, R3, R4
23 # R1: CO + 2H2 <=> MeOH
24 # R2: CO2 + 3H2 <=> MeOH + H2O
25 # R3: 2MeOH <=> DME + H2O
26 # R4: CO + H2O <=> CO2 + H2
27 NU = np.array(
28     [
29         [-1, 0, 0, -1], # CO
30         [0, -1, 0, 1], # CO2
31         [-2, -3, 0, 1], # H2
32         [0, 1, 1, -1], # H2O
33         [1, 1, -2, 0], # METHANOL
34         [0, 0, 1, 0], # DME
35         [0, 0, 0, 0], # N2
36     ],
37     dtype=float,
38 )
39
40 # Referencias del informe de validación para comprobar tablas y MRE.
41 LUU_REFERENCE = {
42     "CO": 0.3140,
43     "CO2": 0.1370,
44     "H2": 0.0260,
45     "H2O": 0.0010,
46     "METHANOL": 0.0080,
47     "DME": 0.0420,
48     "N2": 0.4720,
49 }
50
51 AVEVA_REFERENCE = {
52     "GHSV_1500": {
53         "CO": 0.3430,

```

```

54     "CO2": 0.1100,
55     "H2": 0.0750,
56     "H2O": 0.0005,
57     "METHANOL": 0.0075,
58     "DME": 0.0222,
59     "N2": 0.4410,
60 },
61 "GHSV_379": {
62     "CO": 0.3150,
63     "CO2": 0.1360,
64     "H2": 0.0360,
65     "H2O": 0.0002,
66     "METHANOL": 0.0024,
67     "DME": 0.0420,
68     "N2": 0.4690,
69 },
70 }
71
72
73 def pr_fugacity_coefficients(T: float, P_bar: float, y: np.ndarray) -> np.ndarray:
74     """
75     Calcula coeficientes de fugacidad de mezcla vapor con Peng-Robinson.
76
77     Ecuación de estado:
78      $P = RT/(V-b) - a*\alpha/[V(V+b)+b(V-b)]$ 
79
80     Se emplean reglas de mezcla clásicas con  $k_{ij} = 0$ .
81     """
82     y = np.asarray(y, dtype=float)
83     y = np.clip(y, 1e-30, None)
84     y = y / y.sum()
85
86     Tc = PR_PROPS["Tc"].values
87     Pc = PR_PROPS["Pc_bar"].values * 1e5 # bar -> Pa
88     omega = PR_PROPS["omega"].values
89     P = P_bar * 1e5 # bar -> Pa
90
91     # Parámetros puros de Peng-Robinson
92     kappa = 0.37464 + 1.54226 * omega - 0.26992 * omega**2
93     alpha = (1.0 + kappa * (1.0 - np.sqrt(T / Tc))) ** 2
94     a_i = 0.45724 * R**2 * Tc**2 / Pc * alpha
95     b_i = 0.07780 * R * Tc / Pc
96
97     # Reglas de mezcla clásicas. Sin parámetros binarios:  $k_{ij} = 0$ .
98     a_ij = np.sqrt(np.outer(a_i, a_i))
99     a_m = float(y @ a_ij @ y)
100    b_m = float(y @ b_i)
101
102    A = a_m * P / (R**2 * T**2)
103    B = b_m * P / (R * T)
104
105    # Cúbica de Peng-Robinson en Z:
106    #  $Z^3 - (1-B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0$ 
107    coeff = [
108        1.0,
109        -(1.0 - B),
110        A - 3.0 * B**2 - 2.0 * B,
111        -(A * B - B**2 - B**3),
112    ]
113    roots = np.roots(coeff)
114    real_roots = np.real(roots[np.isclose(np.imag(roots), 0.0, atol=1e-10)])
115
116    if len(real_roots) == 0:
117        raise RuntimeError("No se ha encontrado raíz real para Z en Peng-Robinson.")
118
119    Z = np.max(real_roots) # raíz vapor
120
121    sqrt2 = np.sqrt(2.0)
122    sum_a_ij = a_ij @ y
123    log_term = np.log((Z + (1.0 + sqrt2) * B) / (Z + (1.0 - sqrt2) * B))
124
125    ln_phi = (
126        b_i / b_m * (Z - 1.0)
127        - np.log(Z - B)
128        - A / (2.0 * sqrt2 * B)
129        * (2.0 * sum_a_ij / a_m - b_i / b_m)
130        * log_term
131    )
132

```

```

133     return np.exp(ln_phi)
134
135
136 def kinetic_rates_lhwh(T: float, P_bar: float, z: np.ndarray, use_pr: bool = True) ->
np.ndarray:
137     """
138     Velocidades LHHW de las cuatro reacciones.
139
140     Nota:
141     - Las fugacidades se expresan en bar.
142     - Las constantes de equilibrio se incluyen como correlaciones del submodelo validado.
143       Si se desea una versión estrictamente NIST/Shomate, habría que recalcular Keq desde
144       Cp, H y S de cada especie.
145     """
146     z = np.asarray(z, dtype=float)
147     z = np.clip(z, 1e-30, None)
148     z = z / z.sum()
149
150     phi = pr_fugacity_coefficients(T, P_bar, z) if use_pr else np.ones_like(z)
151     f = {c: phi[IDX[c]] * z[IDX[c]] * P_bar for c in COMPONENTS} # fugacidad [bar]
152     eps = 1e-30
153
154     # Constantes cinéticas transcritas del submodelo AVEVA DME_Kinetics_direct.
155     k1 = 7380.0 * np.exp(-58464.0 / (R * T))
156     k2 = 5059.0 * np.exp(-67509.0 / (R * T))
157     k3 = 1062.0 * np.exp(-43473.0 / (R * T))
158     k4 = 7.3976 * np.exp(-10808.0 / (R * T))
159
160     # Términos de adsorción
161     K_CO = 3.917e-6 * np.exp(49884.0 / (R * T))
162     K_CO2 = 1.858e-6 * np.exp(53795.0 / (R * T))
163     K_H2 = 0.6716 * np.exp(-6476.0 / (R * T))
164     K_MeOH = 7.928e-4 * np.exp(48221.0 / (R * T))
165
166     base_D = 1.0 + K_CO * f["CO"] + K_CO2 * f["CO2"] + K_H2 * f["H2"]
167     den_1 = base_D**3 + eps
168     den_2 = base_D**4 + eps
169     den_3 = (1.0 + np.sqrt(K_MeOH * f["METHANOL"] + eps)) ** 2 + eps
170     den_4 = 1.0 + K_CO * f["CO"] + K_CO2 * f["CO2"] + np.sqrt(K_H2 * f["H2"] + eps)
171
172     # Constantes de equilibrio del submodelo validado.
173     Keq1 = np.exp(
174         4213.0 / T
175         - 5.752 * np.log(T)
176         - 1.707e-3 * T
177         + 2.682e-6 * T**2
178         - 7.232e-10 * T**3
179         + 17.6
180     )
181     Keq2 = Keq1
182     Keq3 = np.exp(
183         4019.0 / T
184         + 3.707 * np.log(T)
185         - 2.783e-3 * T
186         + 3.8e-7 * T**2
187         - 6.561e4 / T**3
188         - 26.64
189     )
190     Keq4 = np.exp(
191         2167.0 / T
192         - 0.2258 * np.log(T)
193         - 1.037e-3 * T
194         - 2.331e-7 * T**2
195         - 1.2777
196     )
197
198     # Factores de reversibilidad beta_i
199     beta1 = f["METHANOL"] / (Keq1 * (f["CO"] * f["H2"] ** 2 + eps))
200     beta2 = (f["METHANOL"] * f["H2O"]) / (Keq2 * (f["CO2"] * f["H2"] ** 3 + eps))
201     beta3 = (f["DME"] * f["H2O"]) / (Keq3 * (f["METHANOL"] ** 2 + eps))
202     beta4 = (f["CO2"] * f["H2"]) / (Keq4 * (f["CO"] * f["H2O"] + eps))
203
204     r1 = k1 * f["CO"] * f["H2"] ** 2 * (1.0 - beta1) / den_1
205     r2 = k2 * f["CO2"] * f["H2"] ** 3 * (1.0 - beta2) / den_2
206     r3 = k3 * f["METHANOL"] * (1.0 - beta3) / den_3
207     r4 = k4 * f["H2O"] * (1.0 - beta4) / den_4
208
209     # Factor de escala heredado del submodelo validado.
210     return np.array([r1, r2, r3, r4]) / 1000.0

```

```

211
212
213 def feed_from_ghsv(ghsv_h: float, T_stp: float = 273.15, P_stp: float = 101325.0) ->
np.ndarray:
214     """Convierte GHSV [h-1] a caudales molares de entrada [mol/s]."""
215     Nt = 10
216     D = 0.020 # m
217     L = 1.0 # m
218
219     V_bed = Nt * np.pi * (D / 2.0) ** 2 * L
220     Q_stp = ghsv_h * V_bed / 3600.0
221     F_total = P_stp * Q_stp / (R * T_stp)
222
223     z0 = np.array([0.378, 0.080, 0.142, 1e-12, 0.0, 0.0, 0.400], dtype=float)
224     z0 = z0 / z0.sum()
225     return F_total * z0
226
227
228 def simulate_pfr(
229     ghsv_h: float,
230     T: float = 516.0,
231     P_bar: float = 50.0,
232     use_pr: bool = True,
233     rate_factor: float = 1.0,
234 ) -> dict:
235     """Resuelve el reactor PFR isoterma 1D."""
236     Nt = 10
237     D = 0.020
238     L = 1.0
239     eps_bed = 0.45
240     rho_cat = 1380.0
241
242     V_bed = Nt * np.pi * (D / 2.0) ** 2 * L
243     W_cat = (1.0 - eps_bed) * rho_cat * V_bed # kg catalizador
244
245     F0 = feed_from_ghsv(ghsv_h)
246
247     def rhs(W: float, F: np.ndarray) -> np.ndarray:
248         F = np.clip(F, 1e-30, None)
249         z = F / F.sum()
250         r = kinetic_rates_lhhw(T, P_bar, z, use_pr=use_pr)
251         return rate_factor * (NU @ r)
252
253     sol = solve_ivp(
254         rhs,
255         (0.0, W_cat),
256         F0,
257         method="Radau",
258         rtol=1e-8,
259         atol=1e-12,
260     )
261
262     if not sol.success:
263         raise RuntimeError(sol.message)
264
265     F_out = np.clip(sol.y[:, -1], 0.0, None)
266     z_out = F_out / F_out.sum()
267
268     F_in = F0
269     X_CO = (F_in[IDX["CO"]] - F_out[IDX["CO"]]) / F_in[IDX["CO"]] * 100.0
270     X_H2 = (F_in[IDX["H2"]] - F_out[IDX["H2"]]) / F_in[IDX["H2"]] * 100.0
271     Y_DME = F_out[IDX["DME"]] / F_in[IDX["CO"]] * 100.0
272
273     result = {
274         "GHSV": ghsv_h,
275         "X_CO_%": X_CO,
276         "X_H2_%": X_H2,
277         "Y_DME_%": Y_DME,
278     }
279     result.update({c: z_out[IDX[c]] for c in COMPONENTS})
280     return result
281
282
283 def compare_to_reference(reference: dict, prediction: dict, label: str) -> pd.DataFrame:
284     """Tabla de comparación con error relativo por componente."""
285     rows = []
286     for c in COMPONENTS:
287         ref = reference[c]
288         pred = prediction[c]

```

```

289     mre = abs(pred - ref) / max(abs(ref), 1e-12) * 100.0
290     rows.append({"component": c, "reference": ref, "label": pred, "MRE_%": mre})
291     return pd.DataFrame(rows)
292
293
294 def compare_report_tables() -> pd.DataFrame:
295     """Comprobación directa de las tablas AVEVA vs Luu recogidas en el informe."""
296     rows = []
297     for case, data in AVEVA_REFERENCE.items():
298         for comp in COMPONENTS:
299             ref = LUU_REFERENCE[comp]
300             pred = data[comp]
301             mre = abs(pred - ref) / max(abs(ref), 1e-12) * 100.0
302             rows.append(
303                 {
304                     "case": case,
305                     "component": comp,
306                     "Luu_2016": ref,
307                     "AVEVA": pred,
308                     "MRE_%": mre,
309                 }
310             )
311     return pd.DataFrame(rows)
312
313
314 def compare_python_to_aveva(ghsv_h: float, case_name: str) -> pd.DataFrame:
315     """Ejecuta Python PR-PFR y compara las fracciones molares frente a AVEVA."""
316     py_result = simulate_pfr(ghsv_h=ghsv_h, T=516.0, P_bar=50.0, use_pr=True)
317     aveva_result = AVEVA_REFERENCE[case_name]
318
319     rows = []
320     for comp in COMPONENTS:
321         aveva = aveva_result[comp]
322         py = py_result[comp]
323         mre = abs(py - aveva) / max(abs(aveva), 1e-12) * 100.0
324         rows.append(
325             {
326                 "component": comp,
327                 "AVEVA": aveva,
328                 "Python_PR_PFR": py,
329                 "MRE_%": mre,
330             }
331         )
332
333     df = pd.DataFrame(rows)
334     df.loc[len(df)] = {
335         "component": "Media global",
336         "AVEVA": np.nan,
337         "Python_PR_PFR": np.nan,
338         "MRE_%": df["MRE_%"].mean(),
339     }
340     return df
341
342
343 if __name__ == "__main__":
344     print("=== Comparación AVEVA vs Luu et al. incluida en el informe ===")
345     print(compare_report_tables().to_string(index=False))
346
347     print("\n=== Ejecución del PFR Python independiente ===")
348     for ghsv in [1500.0, 379.0]:
349         result = simulate_pfr(ghsv_h=ghsv, T=516.0, P_bar=50.0, use_pr=True)
350         print(f"\nPython PR-PFR · GHSV={ghsv:.0f} h-1")
351         for c in COMPONENTS:
352             print(f"  z_{c:8s} = {result[c]:.6f}")
353             print(f"  X_CO    = {result['X_CO_%']:.3f} %")
354             print(f"  X_H2    = {result['X_H2_%']:.3f} %")
355             print(f"  Y_DME   = {result['Y_DME_%']:.3f} %")
356
357     print("\n=== Comparación Python PR-PFR vs AVEVA · GHSV=1500 h-1 ===")
358     print(compare_python_to_aveva(1500.0, "GHSV_1500").to_string(index=False))
359
360     print("\n=== Comparación Python PR-PFR vs AVEVA · GHSV=379 h-1 ===")
361     print(compare_python_to_aveva(379.0, "GHSV_379").to_string(index=False))

```


Tabla 13: Balance de masa caso base

Parámetro	Unidades	S1	S3	S4	S6	S22	S23	S8	S24	S2	S5	S15	S16
Fase		Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	-	Fluido	Fluido	Fluido
W	kg/s	3,50	3,50	3,50	3,50	18,79	18,79	18,79	18,79	-	16,44	1,15	15,29
F	kmol/s	0,27	0,27	0,27	0,27	1,05	1,05	0,91	0,91	0,91	0,84	0,06	0,78
Q	m3/s	3,28	1,12	0,73	0,25	0,58	0,91	0,83	0,53	-	0,37	0,03	0,34
FH	kJ/s	-14802	-13134	-14605	-12751	-107330	-100156	-107547	-114721	-	-101760	-7123	-94636
T	K	293,15	496,33	318,15	540,22	332,54	513,09	533,15	357,26	-	273,15	273,15	273,15
P	kPa	200	1000	980	5000	5000	4990	4890	4880	4870	4870	4870	4870
VF	Fracción Molar	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,99	-	1,00	1,00	1,00
LF	Fracción Molar	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	-	0,00	0,00	0,00
z[CO2]	Fracción Molar	0,03	0,03	0,03	0,03	0,17	0,17	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21
z[H2O]	Fracción Molar	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,02	0,02	0,02	0,00	0,00	0,00
z[CO]	Fracción Molar	0,32	0,32	0,32	0,32	0,12	0,12	0,04	0,04	0,04	0,05	0,05	0,05
z[METANO]	Fracción Molar	0,07	0,07	0,07	0,07	0,24	0,24	0,28	0,28	0,28	0,30	0,30	0,30
z[H2]	Fracción Molar	0,56	0,56	0,56	0,56	0,40	0,40	0,32	0,32	0,32	0,35	0,35	0,35
z[DME]	Fracción Molar	0,00	0,00	0,00	0,00	0,04	0,04	0,07	0,07	0,07	0,05	0,05	0,05
z[METANOL]	Fracción Molar	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00
z[NITROGENO]	Fracción Molar	0,01	0,01	0,01	0,01	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,05	0,05	0,05
H	kJ/kmol	-54962	-48769	-54231	-47348	-102364	-95522	-118702	-126619	-131665	-121455	-121455	-121455
MW	kg/kmol	13,00	13,00	13,00	13,00	17,92	17,92	20,73	20,73	-	19,62	19,62	19,62
rho	kg/m3	1,07	3,13	4,80	14,16	32,61	20,60	22,60	35,19	-	44,96	44,96	44,96

Tabla 14: Continuación del balance de masa caso base

Parámetro	Unidades	S19	S21	S20	S7	S9	S11	S12	S13	S26	S27	S28
Fase		Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido
W	kg/s	15,29	15,29	15,29	2,35	2,35	2,35	0,76	1,59	1,59	1,33	0,26
F	kmol/s	0,78	0,78	0,78	0,07	0,07	0,07	0,03	0,04	0,04	0,03	0,01
Q	m3/s	0,34	0,33	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	0,10	0,02	0,00	0,02
FH	kJ/s	-94636	-94578	-94578	-17533	-17533	-17533	-8331	-8065	-8674	-6888	-1785
T	K	273,15	275,53	275,53	273,15	273,15	273,15	421,24	303,15	273,15	273,15	273,15
P	kPa	4870	5000	5000	4870	4860	4860	940	840	830	830	830
VF	Fracción Molar	1,00	1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,18	0,00	1,00
LF	Fracción Molar	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,82	1,00	0,00
z[CO2]	Fracción Molar	0,21	0,21	0,21	0,11	0,11	0,11	0,00	0,22	0,22	0,15	0,51
z[H2O]	Fracción Molar	0,00	0,00	0,00	0,29	0,29	0,29	0,61	0,00	0,00	0,00	0,00
z[CO]	Fracción Molar	0,05	0,05	0,05	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01
z[METANO]	Fracción Molar	0,30	0,30	0,30	0,02	0,02	0,02	0,00	0,03	0,03	0,01	0,15
z[H2]	Fracción Molar	0,35	0,35	0,35	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,02
z[DME]	Fracción Molar	0,05	0,05	0,05	0,39	0,39	0,39	0,00	0,74	0,74	0,84	0,30
z[METANOL]	Fracción Molar	0,00	0,00	0,00	0,19	0,19	0,19	0,39	0,00	0,00	0,00	0,00
z[NITROGENO]	Fracción Molar	0,05	0,05	0,05	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01
H	kJ/kmol	-121455	-121380	-121380	-257115	-257115	-257118	-256884	-225609	-242645	-236311	-270623
MW	kg/kmol	19,62	19,62	19,62	34,45	34,45	34,45	23,53	44,36	44,36	45,50	39,35
rho	kg/m3	44,96	45,70	45,70	758,41	758,26	758,41	751,76	16,50	85,28	717,48	15,50

Tabla 15: Balance de energía del caso base CP1, CP2 y K1

Parámetro	Unidades	CP1	CP2	K1
W	kg/s	3,5	3,5	15,29
F	kmol/s	0,27	0,27	0,78
Q	m³/s	3,28	0,73	0,34
P1	kPa	200	980	4870
P2	kPa	1000	5000	5000
DP	kPa	800	4020	130
Pr	—	5	5,1	1,03
Head	kJ/kg	381,25	423,68	2,86
HeadPol	kJ/kg	397,56	441,87	2,87
T1	K	293,15	318,15	273,15
T2	K	496,33	540,22	275,53
eta	fracción	0,8	0,8	0,75
etaPol	fracción	0,83	0,83	0,75
Power	kW	1667,99	1853,6	58,38
Power_Loss	kW	0	0	0
PowerLoss	kW	0	0	0
ShaftPower	kW	1667,99	1853,6	58,38
Speed	rpm	3600	3600	3600
MW	kg/kmol	13	13	19,62
CpCv	—	1,39	1,38	1,27
T	K	293,15	318,15	273,15
a	m/s	510,53	531,43	370,9

Tabla 16: Balance de energía del caso base HX2, E1, E2, E3

Parámetro	Unidades	HX2	E1	E2	E3
Duty	kJ/s	-1470,98	-4571,90	7173,72	-609,02
Tti	K	496,33	357,26	332,54	303,15
Tto	K	318,15	273,15	513,09	273,15
VFto	fracción molar	1,01	0,92	1,71	0,18
Wt	kg/s	3,50	18,79	18,79	1,59
DPt	kPa	20,00	10,00	10,00	10,00
DTtito	K	-178,18	-84,11	180,55	-30,00
taut	s	14,16	1,15	0,71	16,05
TubeSide.W	kg/s	3,50	18,79	18,79	1,59
TubeSide.Wref	kg/s	3,50	18,79	18,79	1,59
TubeSide.DP	kPa	20,00	10,00	10,00	10,00
TubeSide.Wrefh	kg/s	1,00	1,00	1,00	1,00
TubeSide.href	kW/m ² ·K	0,03	0,03	0,03	0,03
TubeSide.hexp	—	0,80	0,80	0,80	0,80
TubeSide.h	kW/m ² ·K	0,08	0,31	0,31	0,04
TubeSide.rholo	kg/m ³	973,59	758,41	561,81	717,48

Tabla 17: Balance de energía del caso base T1

Etap	Comp.	T1 T (K)	T1 x	T1 y	T1 z
1	CO ₂	330,1	0,007	0,088	0,06
1	H ₂ O	330,1	0,001	0	0
1	CO	330,1	0	0,001	0,001
1	CH ₄	330,1	0	0,01	0,007
1	H ₂	330,1	0	0,001	0,001
1	DME	330,1	0,52	0,842	0,731
1	MeOH	330,1	0,473	0,058	0,2
1	N ₂	330,1	0	0	0
2	CO ₂	365,9	0,003	0,081	0,053
2	H ₂ O	365,9	0,002	0	0,001
2	CO	365,9	0	0,001	0,001
2	CH ₄	365,9	0	0,012	0,008
2	H ₂	365,9	0	0,001	0,001
2	DME	365,9	0,164	0,597	0,441
2	MeOH	365,9	0,831	0,307	0,496
2	N ₂	365,9	0	0,001	0
3	CO ₂	380,96	0,003	0,086	0,055
3	H ₂ O	380,96	0,004	0,001	0,002
3	CO	380,96	0	0,001	0,001
3	CH ₄	380,96	0	0,013	0,008
3	H ₂	380,96	0	0,001	0,001
3	DME	380,96	0,078	0,385	0,269
3	MeOH	380,96	0,915	0,512	0,664
3	N ₂	380,96	0	0,001	0
4	CO ₂	384,13	0,003	0,086	0,055

4	H ₂ O	384,13	0,007	0,002	0,004
4	CO	384,13	0	0,001	0,001
4	CH ₄	384,13	0	0,013	0,008
4	H ₂	384,13	0	0,001	0,001
4	DME	384,13	0,064	0,334	0,232
4	MeOH	384,13	0,926	0,561	0,7
4	N ₂	384,13	0	0,001	0
5	CO ₂	384,87	0,003	0,086	0,055
5	H ₂ O	384,87	0,013	0,004	0,008
5	CO	384,87	0	0,001	0,001
5	CH ₄	384,87	0	0,013	0,008
5	H ₂	384,87	0	0,001	0,001
5	DME	384,87	0,062	0,326	0,226
5	MeOH	384,87	0,922	0,568	0,702
5	N ₂	384,87	0	0,001	0
6	CO ₂	385,27	0,003	0,086	0,055
6	H ₂ O	385,27	0,023	0,008	0,014
6	CO	385,27	0	0,001	0,001
6	CH ₄	385,27	0	0,013	0,008
6	H ₂	385,27	0	0,001	0,001
6	DME	385,27	0,062	0,325	0,225
6	MeOH	385,27	0,912	0,565	0,697
6	N ₂	385,27	0	0,001	0
7	CO ₂	385,75	0,003	0,086	0,055
7	H ₂ O	385,75	0,042	0,014	0,025
7	CO	385,75	0	0,001	0,001
7	CH ₄	385,75	0	0,013	0,008
7	H ₂	385,75	0	0,001	0,001

7	DME	385,75	0,061	0,325	0,225
7	MeOH	385,75	0,894	0,559	0,686
7	N ₂	385,75	0	0,001	0
8	CO ₂	386,48	0,003	0,087	0,055
8	H ₂ O	386,48	0,076	0,026	0,045
8	CO	386,48	0	0,001	0,001
8	CH ₄	386,48	0	0,013	0,008
8	H ₂	386,48	0	0,001	0,001
8	DME	386,48	0,06	0,325	0,225
8	MeOH	386,48	0,862	0,547	0,665
8	N ₂	386,48	0	0,001	0
9	CO ₂	387,73	0,002	0,087	0,055
9	H ₂ O	387,73	0,14	0,046	0,081
9	CO	387,73	0	0,001	0,001
9	CH ₄	387,73	0	0,013	0,008
9	H ₂	387,73	0	0,001	0,001
9	DME	387,73	0,057	0,326	0,225
9	MeOH	387,73	0,801	0,525	0,628
9	N ₂	387,73	0	0,001	0
10	CO ₂	390,08	0,002	0,088	0,038
10	H ₂ O	390,08	0,261	0,084	0,186
10	CO	390,08	0	0,001	0,001
10	CH ₄	390,08	0	0,013	0,006
10	H ₂	390,08	0	0,001	0,001
10	DME	390,08	0,05	0,327	0,167
10	MeOH	390,08	0,688	0,485	0,602
10	N ₂	390,08	0	0,001	0
11	CO ₂	407,73	0	0,003	0,001

11	H ₂ O	407,73	0,264	0,138	0,211
11	CO	407,73	0	0	0
11	CH ₄	407,73	0	0	0
11	H ₂	407,73	0	0	0
11	DME	407,73	0,008	0,067	0,033
11	MeOH	407,73	0,728	0,792	0,755
11	N ₂	407,73	0	0	0
12	CO ₂	410,21	0	0	0
12	H ₂ O	410,21	0,265	0,147	0,214
12	CO	410,21	0	0	0
12	CH ₄	410,21	0	0	0
12	H ₂	410,21	0	0	0
12	DME	410,21	0,001	0,01	0,005
12	MeOH	410,21	0,734	0,843	0,78
12	N ₂	410,21	0	0	0
13	CO ₂	410,72	0	0	0
13	H ₂ O	410,72	0,265	0,148	0,215
13	CO	410,72	0	0	0
13	CH ₄	410,72	0	0	0
13	H ₂	410,72	0	0	0
13	DME	410,72	0	0,002	0,001
13	MeOH	410,72	0,735	0,85	0,784
13	N ₂	410,72	0	0	0
14	CO ₂	410,95	0	0	0
14	H ₂ O	410,95	0,266	0,149	0,216
14	CO	410,95	0	0	0
14	CH ₄	410,95	0	0	0
14	H ₂	410,95	0	0	0

14	DME	410,95	0	0	0
14	MeOH	410,95	0,735	0,851	0,784
14	N ₂	410,95	0	0	0
15	CO ₂	411,15	0	0	0
15	H ₂ O	411,15	0,267	0,149	0,216
15	CO	411,15	0	0	0
15	CH ₄	411,15	0	0	0
15	H ₂	411,15	0	0	0
15	DME	411,15	0	0	0
15	MeOH	411,15	0,733	0,851	0,784
15	N ₂	411,15	0	0	0
16	CO ₂	411,38	0	0	0
16	H ₂ O	411,38	0,269	0,151	0,219
16	CO	411,38	0	0	0
16	CH ₄	411,38	0	0	0
16	H ₂	411,38	0	0	0
16	DME	411,38	0	0	0
16	MeOH	411,38	0,731	0,849	0,782
16	N ₂	411,38	0	0	0
17	CO ₂	411,68	0	0	0
17	H ₂ O	411,68	0,275	0,154	0,223
17	CO	411,68	0	0	0
17	CH ₄	411,68	0	0	0
17	H ₂	411,68	0	0	0
17	DME	411,68	0	0	0
17	MeOH	411,68	0,725	0,846	0,776
17	N ₂	411,68	0	0	0
18	CO ₂	412,16	0	0	0

18	H ₂ O	412,16	0,29	0,162	0,235
18	CO	412,16	0	0	0
18	CH ₄	412,16	0	0	0
18	H ₂	412,16	0	0	0
18	DME	412,16	0	0	0
18	MeOH	412,16	0,71	0,838	0,765
18	N ₂	412,16	0	0	0
19	CO ₂	413,12	0	0	0
19	H ₂ O	413,12	0,326	0,182	0,264
19	CO	413,12	0	0	0
19	CH ₄	413,12	0	0	0
19	H ₂	413,12	0	0	0
19	DME	413,12	0	0	0
19	MeOH	413,12	0,674	0,818	0,736
19	N ₂	413,12	0	0	0
20	CO ₂	415,3	0	0	0
20	H ₂ O	415,3	0,413	0,229	0,334
20	CO	415,3	0	0	0
20	CH ₄	415,3	0	0	0
20	H ₂	415,3	0	0	0
20	DME	415,3	0	0	0
20	MeOH	415,3	0,587	0,771	0,666
20	N ₂	415,3	0	0	0

Tabla 18: Balance de masa caso mejorado

Parámetro	Unidades	S1	S3	S6	S22	S23	S8	S24	S2	S5	S10	S15
Fase		Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	-	Fluido	Fluido	Fluido
W	kg/s	3,50	3,50	3,50	9,27	9,27	9,27	9,27	-	7,44	7,44	7,44
F	kmol/s	0,27	0,27	0,27	0,64	0,64	0,50	0,50	0,50	0,45	0,45	0,45
Q	m ³ /s	3,28	1,12	0,25	0,43	0,56	0,46	0,36	-	0,18	0,23	0,23
FH	kJ/s	-14802	-13134	-12752	-48724	-46269	-53878	-56333	-	-46705	-45810	-45810
T	K	293,15	496,33	540,22	402,30	513,49	533,15	415,38	-	253,22	308,15	308,15
P	kPa	200	1000	5000	5000	4990	4890	4880	4870	4870	4860	4860
VFm	Fracción másica	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	-	1,00	1,00	1,00
LFm	Fracción másica	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	0,00	0,00	0,00
Wc[CO2]	kg/s	0,36	0,36	0,36	3,37	3,37	4,06	4,06	-	3,73	3,73	3,73
Wc[H2O]	kg/s	0,05	0,05	0,05	0,06	0,06	0,31	0,31	-	0,00	0,00	0,00
Wc[CO]	kg/s	2,41	2,41	2,41	2,77	2,77	0,42	0,42	-	0,42	0,42	0,42
Wc[METANO]	kg/s	0,30	0,30	0,30	1,93	1,93	1,93	1,93	-	1,91	1,91	1,91
Wc[H2]	kg/s	0,30	0,30	0,30	0,65	0,65	0,41	0,41	-	0,41	0,41	0,41
Wc[DME]	kg/s	0,00	0,00	0,00	0,02	0,02	1,40	1,40	-	0,49	0,49	0,49
Wc[METANOL]	kg/s	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,25	0,25	-	0,00	0,00	0,00
Wc[NITROGENO]	kg/s	0,08	0,08	0,08	0,49	0,49	0,49	0,49	-	0,49	0,49	0,49
H	kJ/kmol	-54963	-48769	-47348	-76372	-72524	-107339	-112229	-121658	-104204	-102205	-102205
MW	kg/kmol	13,00	13,00	13,00	14,54	14,54	18,48	18,48	-	16,60	16,60	16,60
rho	kg/m ³	1,07	3,13	14,16	21,34	16,65	20,12	26,12	-	40,55	31,95	31,95

Tabla 19: Continuación del balance de masa caso mejorado

Parámetro	Unidades	S18	S25	S31	S32	S19	S21	S20	S7	S11	S35	S9
Fase		Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido
W	kg/s	21,29	6,79	1,02	5,77	5,77	5,77	5,77	1,83	1,83	0,08	1,75
F	kmol/s	1,18	0,43	0,07	0,37	0,37	0,37	0,37	0,05	0,05	0,00	0,05
Q	m3/s	0,02	0,23	0,03	0,20	0,20	0,19	0,19	0,00	0,01	0,01	0,00
FH	kJ/s	-336915	-42381	-6357	-36024	-36024	-35972	-35972	-14360	-14360	-663	-13697
T	K	308,15	309,17	309,17	309,17	309,17	313,50	313,50	253,15	250,60	250,60	250,60
P	kPa	4870	4800	4800	4800	4800	5000	5000	4870	900	900	900
VFm	Fracción másica	0,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,05	1,00	0,00
LFm	Fracción másica	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,95	0,00	1,00
Wc[CO2]	kg/s	0,00	3,54	0,53	3,01	3,01	3,01	3,01	0,34	0,34	0,06	0,27
Wc[H2O]	kg/s	21,29	0,01	0,00	0,01	0,01	0,01	0,01	0,31	0,31	0,00	0,31
Wc[CO]	kg/s	0,00	0,41	0,06	0,35	0,35	0,35	0,35	0,00	0,00	0,00	0,00
Wc[METANO]	kg/s	0,00	1,91	0,29	1,62	1,62	1,62	1,62	0,01	0,01	0,01	0,00
Wc[H2]	kg/s	0,00	0,40	0,06	0,34	0,34	0,34	0,34	0,00	0,00	0,00	0,00
Wc[DME]	kg/s	0,00	0,02	0,00	0,02	0,02	0,02	0,02	0,91	0,91	0,01	0,90
Wc[METANOL]	kg/s	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,25	0,25	0,00	0,25
Wc[NITROGENO]	kg/s	0,00	0,49	0,07	0,42	0,42	0,42	0,42	0,00	0,00	0,00	0,00
H	kJ/kmol	-285053	-97714	- 97714	-97714	-97714	-97574	-97574	-267252	-267252	-277486	-266776
MW	kg/kmol	18,02	15,66	15,66	15,66	15,66	15,66	15,66	34,11	34,11	35,53	34,04
rho	kg/m3	983,18	29,47	29,47	29,47	29,47	30,23	30,23	786,29	248,14	16,41	790,83

Tabla 20: Continuación del balance de masa caso mejorado

Parámetro	Unidades	S29	S17	S34	S33	S12	S13	S26	S28	S27
Fase		Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido	Fluido
W	kg/s	21,94	21,94	0,09	21,85	21,83	1,77	1,77	0,07	1,71
F	kmol/s	1,20	1,20	0,00	1,19	1,21	0,04	0,04	0,00	0,04
Q	m ³ /s	0,02	0,03	0,01	0,02	0,03	0,10	0,01	0,00	0,00
FH	kJ/s	-340343	-340343	-705	-339638	-330527	-9034	-9826	-484	-9342
T	K	312,32	312,90	312,90	312,90	449,41	313,15	273,15	273,15	273,15
P	kPa	4820	800	800	800	940	890	885	885	885
VFm	Fracción másica	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	1,00	0,04	1,00	0,00
LFm	Fracción másica	1,00	1,00	0,00	1,00	1,00	0,00	0,96	0,00	1,00
Wc[CO₂]	kg/s	0,18	0,18	0,07	0,11	0,00	0,39	0,39	0,04	0,34
Wc[H₂O]	kg/s	21,28	21,28	0,00	21,28	21,59	0,00	0,00	0,00	0,00
Wc[CO]	kg/s	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Wc[METANO]	kg/s	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Wc[H₂]	kg/s	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Wc[DME]	kg/s	0,47	0,47	0,01	0,46	0,00	1,36	1,36	0,02	1,34
Wc[METANOL]	kg/s	0,00	0,00	0,00	0,00	0,23	0,02	0,02	0,00	0,02
Wc[NITROGENO]	kg/s	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H	kJ/kmol	-284467	-284467	-271517	-284495	-274066	-230779	-251025	-315573	-248390
MW	kg/kmol	18,34	18,34	34,26	18,30	18,10	45,23	45,23	42,35	45,34
rho	kg/m ³	966,57	711,66	10,80	967,14	842,24	17,30	297,05	17,97	727,87

Tabla 21: Balance de energía del caso mejorado CP1, CP2 y K1

Parámetro	Unidades	CP1	CP2	K1
F	kmol/s	0,27	0,27	0,37
Q	m3/s	3,28	0,73	0,20
P1	kPa	200,00	980,00	4800,00
P2	kPa	1000,00	5000,00	5000,00
DP	kPa	800,00	4020,00	200,00
Pr		5,00	5,10	1,04
Head	kJ/kg	381,25	423,68	6,69
HeadPol	kJ/kg	397,56	441,87	6,70
T1	K	293,15	318,15	309,17
T2	K	496,33	540,22	313,50
eta	fraction	0,80	0,80	0,75
etaPol	fraction	0,83	0,83	0,75
Power	kW	1667,99	1853,60	51,49
Power_Loss	kW	0,00	0,00	0,00
PowerLoss	kW	0,00	0,00	0,00
ShaftPower	kW	1667,99	1853,60	51,49
Speed	rpm	3600,00	3600,00	3600,00
MW	kg/kmol	13,00	13,00	15,66
CpCv		1,39	1,38	1,31
T	K	293,15	318,15	309,17
a	m/s	510,53	531,43	462,24

Tabla 22: Balance de energía del caso mejorado HX2, E1, E2, E3 y E4

Parámetro	Unidades	HX2	E1	E2	E3	E4
Duty	kJ/s	-1470,98	-4732,64	2454,82	-792,51	-895,839
Tti	K	496,33	415,38	402,30	313,15	253,21
Tto	K	318,15	253,15	513,49	273,15	308,15
VFto	mole fraction	1,01	0,89	1,76	0,04	1,46
Wt	kg/s	3,50	9,27	9,27	1,77	7,44
DPt	kPa	20,00	10,00	10,00	5,00	10
DTtito	K	-178,18	-162,23	111,19	-40,00	54,93
taut	s	14,16	2,05	1,02	44,39	2,43
TubeSide.W	kg/s	3,50	9,27	9,27	1,77	7,44
TubeSide.Wref	kg/s	3,50	9,27	9,27	1,77	7,44
TubeSide.DP	kPa	20,00	10,00	10,00	5,00	10
TubeSide.Wrefh	kg/s	1,00	1,00	1,00	1,00	1
TubeSide.href	kW/m2-K	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
TubeSide.hexp		0,80	0,80	0,80	0,80	0,8
TubeSide.h	kW/m2-K	0,08	0,18	0,18	0,05	0,14
TubeSide.rholo	kg/m3	973,59	786,29	503,26	727,87	578,06

Tabla 23: Balance de energía del caso mejorado T1 y T2

Etapa	Comp.	T2 T (K)	T2 x	T2 y	T2 z	T1 T (K)	T1 x	T1 y	T1 z
1	CO ₂	309,170	0,003	0,186	0,052	353,330	0,004	0,085	0,056
1	H ₂ O	309,170	0,996	0,002	0,730	353,330	0,017	0,002	0,007
1	CO	309,170	0,000	0,034	0,009	353,330	0,000	0,000	0,000
1	CH ₄	309,170	0,000	0,275	0,074	353,330	0,000	0,001	0,001
1	H ₂	309,170	0,000	0,463	0,124	353,330	0,000	0,000	0,000
1	DME	309,170	0,000	0,001	0,001	353,330	0,285	0,741	0,578
1	MeOH	309,170	0,000	0,000	0,000	353,330	0,693	0,170	0,358
1	N ₂	309,170	0,000	0,041	0,011	353,330	0,000	0,000	0,000
2	CO ₂	309,490	0,004	0,192	0,055	380,990	0,003	0,079	0,050
2	H ₂ O	309,490	0,995	0,002	0,727	380,990	0,039	0,011	0,022
2	CO	309,490	0,000	0,034	0,009	380,990	0,000	0,000	0,000
2	CH ₄	309,490	0,000	0,272	0,074	380,990	0,000	0,001	0,001
2	H ₂	309,490	0,000	0,458	0,124	380,990	0,000	0,000	0,000
2	DME	309,490	0,001	0,002	0,001	380,990	0,096	0,444	0,310
2	MeOH	309,490	0,000	0,000	0,000	380,990	0,862	0,464	0,618
2	N ₂	309,490	0,000	0,040	0,011	380,990	0,000	0,000	0,000
3	CO ₂	309,820	0,004	0,192	0,055	388,600	0,002	0,080	0,050
3	H ₂ O	309,820	0,995	0,002	0,726	388,600	0,072	0,025	0,044
3	CO	309,820	0,000	0,034	0,009	388,600	0,000	0,000	0,000
3	CH ₄	309,820	0,000	0,271	0,073	388,600	0,000	0,001	0,001
3	H ₂	309,820	0,000	0,458	0,124	388,600	0,000	0,000	0,000
3	DME	309,820	0,002	0,003	0,002	388,600	0,060	0,326	0,222
3	MeOH	309,820	0,000	0,000	0,000	388,600	0,865	0,567	0,684
3	N ₂	309,820	0,000	0,040	0,011	388,600	0,000	0,000	0,000
4	CO ₂	310,190	0,004	0,192	0,054	390,890	0,002	0,081	0,050

4	H ₂ O	310,190	0,994	0,002	0,726	390,890	0,131	0,047	0,080
4	CO	310,190	0,000	0,034	0,009	390,890	0,000	0,000	0,000
4	CH ₄	310,190	0,000	0,271	0,073	390,890	0,000	0,002	0,001
4	H ₂	310,190	0,000	0,457	0,124	390,890	0,000	0,000	0,000
4	DME	310,190	0,002	0,005	0,003	390,890	0,052	0,304	0,206
4	MeOH	310,190	0,000	0,000	0,000	390,890	0,815	0,566	0,663
4	N ₂	310,190	0,000	0,040	0,011	390,890	0,000	0,000	0,000
5	CO ₂	310,590	0,004	0,192	0,054	393,130	0,002	0,081	0,039
5	H ₂ O	310,590	0,993	0,002	0,725	393,130	0,240	0,085	0,168
5	CO	310,590	0,000	0,034	0,009	393,130	0,000	0,000	0,000
5	CH ₄	310,590	0,000	0,270	0,073	393,130	0,000	0,002	0,001
5	H ₂	310,590	0,000	0,456	0,124	393,130	0,000	0,000	0,000
5	DME	310,590	0,003	0,007	0,004	393,130	0,046	0,302	0,164
5	MeOH	310,590	0,000	0,000	0,000	393,130	0,712	0,531	0,629
5	N ₂	310,590	0,000	0,040	0,011	393,130	0,000	0,000	0,000
6	CO ₂	311,010	0,004	0,191	0,054	404,240	0,001	0,024	0,012
6	H ₂ O	311,010	0,992	0,002	0,724	404,240	0,243	0,116	0,183
6	CO	311,010	0,000	0,034	0,009	404,240	0,000	0,000	0,000
6	CH ₄	311,010	0,000	0,270	0,073	404,240	0,000	0,000	0,000
6	H ₂	311,010	0,000	0,455	0,124	404,240	0,000	0,000	0,000
6	DME	311,010	0,004	0,008	0,005	404,240	0,017	0,136	0,073
6	MeOH	311,010	0,000	0,000	0,000	404,240	0,740	0,724	0,732
6	N ₂	311,010	0,000	0,040	0,011	404,240	0,000	0,000	0,000
7	CO ₂	311,440	0,003	0,191	0,054	405,800	0,000	0,022	0,011
7	H ₂ O	311,440	0,992	0,002	0,724	405,800	0,244	0,121	0,186
7	CO	311,440	0,000	0,034	0,009	405,800	0,000	0,000	0,000
7	CH ₄	311,440	0,000	0,269	0,073	405,800	0,000	0,000	0,000
7	H ₂	311,440	0,000	0,454	0,123	405,800	0,000	0,000	0,000

7	DME	311,440	0,004	0,010	0,006	405,800	0,013	0,103	0,055
7	MeOH	311,440	0,000	0,000	0,000	405,800	0,743	0,754	0,748
7	N ₂	311,440	0,000	0,040	0,011	405,800	0,000	0,000	0,000
8	CO ₂	311,870	0,003	0,191	0,054	406,130	0,000	0,022	0,011
8	H ₂ O	311,870	0,991	0,002	0,723	406,130	0,247	0,123	0,188
8	CO	311,870	0,000	0,033	0,009	406,130	0,000	0,000	0,000
8	CH ₄	311,870	0,000	0,269	0,073	406,130	0,000	0,000	0,000
8	H ₂	311,870	0,000	0,453	0,123	406,130	0,000	0,000	0,000
8	DME	311,870	0,005	0,013	0,007	406,130	0,012	0,097	0,053
8	MeOH	311,870	0,000	0,000	0,000	406,130	0,741	0,757	0,749
8	N ₂	311,870	0,000	0,040	0,011	406,130	0,000	0,000	0,000
9	CO ₂	312,290	0,003	0,190	0,054	406,340	0,000	0,022	0,011
9	H ₂ O	312,290	0,990	0,002	0,722	406,340	0,253	0,126	0,192
9	CO	312,290	0,000	0,033	0,009	406,340	0,000	0,000	0,000
9	CH ₄	312,290	0,000	0,268	0,073	406,340	0,000	0,000	0,000
9	H ₂	312,290	0,000	0,452	0,123	406,340	0,000	0,000	0,000
9	DME	312,290	0,006	0,015	0,008	406,340	0,012	0,097	0,052
9	MeOH	312,290	0,000	0,000	0,000	406,340	0,735	0,755	0,745
9	N ₂	312,290	0,000	0,040	0,011	406,340	0,000	0,000	0,000
10	CO ₂	312,670	0,003	0,190	0,054	406,680	0,000	0,022	0,011
10	H ₂ O	312,670	0,989	0,002	0,721	406,680	0,266	0,132	0,202
10	CO	312,670	0,000	0,033	0,009	406,680	0,000	0,000	0,000
10	CH ₄	312,670	0,000	0,268	0,073	406,680	0,000	0,000	0,000
10	H ₂	312,670	0,000	0,452	0,123	406,680	0,000	0,000	0,000
10	DME	312,670	0,007	0,017	0,009	406,680	0,012	0,096	0,052
10	MeOH	312,670	0,000	0,000	0,000	406,680	0,723	0,749	0,735
10	N ₂	312,670	0,000	0,040	0,011	406,680	0,000	0,000	0,000
11	CO ₂	312,900	0,003	0,189	0,054	407,340	0,000	0,022	0,011

11	H ₂ O	312,900	0,989	0,002	0,720	407,340	0,294	0,146	0,223
11	CO	312,900	0,000	0,033	0,009	407,340	0,000	0,000	0,000
11	CH ₄	312,900	0,000	0,267	0,073	407,340	0,000	0,000	0,000
11	H ₂	312,900	0,000	0,451	0,123	407,340	0,000	0,000	0,000
11	DME	312,900	0,007	0,019	0,011	407,340	0,011	0,097	0,052
11	MeOH	312,900	0,000	0,000	0,000	407,340	0,694	0,735	0,714
11	N ₂	312,900	0,000	0,039	0,011	407,340	0,000	0,000	0,000
12	CO ₂	312,320	0,004	0,189	0,054	408,820	0,000	0,023	0,011
12	H ₂ O	312,320	0,987	0,002	0,719	408,820	0,360	0,177	0,272
12	CO	312,320	0,000	0,033	0,009	408,820	0,000	0,000	0,000
12	CH ₄	312,320	0,000	0,267	0,073	408,820	0,000	0,000	0,000
12	H ₂	312,320	0,000	0,450	0,123	408,820	0,000	0,000	0,000
12	DME	312,320	0,009	0,021	0,012	408,820	0,010	0,097	0,052
12	MeOH	312,320	0,000	0,000	0,000	408,820	0,630	0,704	0,665
12	N ₂	312,320	0,000	0,039	0,011	408,820	0,000	0,000	0,000
13	CO ₂	—	—	—	—	412,330	0,000	0,023	0,011
13	H ₂ O	—	—	—	—	412,330	0,503	0,247	0,379
13	CO	—	—	—	—	412,330	0,000	0,000	0,000
13	CH ₄	—	—	—	—	412,330	0,000	0,000	0,000
13	H ₂	—	—	—	—	412,330	0,000	0,000	0,000
13	DME	—	—	—	—	412,330	0,008	0,097	0,051
13	MeOH	—	—	—	—	412,330	0,489	0,633	0,559
13	N ₂	—	—	—	—	412,330	0,000	0,000	0,000
14	CO ₂	—	—	—	—	420,780	0,000	0,024	0,012
14	H ₂ O	—	—	—	—	420,780	0,752	0,402	0,582
14	CO	—	—	—	—	420,780	0,000	0,000	0,000
14	CH ₄	—	—	—	—	420,780	0,000	0,000	0,000
14	H ₂	—	—	—	—	420,780	0,000	0,000	0,000

14	DME	—	—	—	—	420,780	0,003	0,097	0,049
14	MeOH	—	—	—	—	420,780	0,244	0,477	0,358
14	N ₂	—	—	—	—	420,780	0,000	0,000	0,000
15	CO ₂	—	—	—	—	434,930	0,000	0,025	0,002
15	H ₂ O	—	—	—	—	434,930	0,942	0,674	0,925
15	CO	—	—	—	—	434,930	0,000	0,000	0,000
15	CH ₄	—	—	—	—	434,930	0,000	0,000	0,000
15	H ₂	—	—	—	—	434,930	0,000	0,000	0,000
15	DME	—	—	—	—	434,930	0,001	0,098	0,007
15	MeOH	—	—	—	—	434,930	0,057	0,203	0,066
15	N ₂	—	—	—	—	434,930	0,000	0,000	0,000
16	CO ₂	—	—	—	—	441,400	0,000	0,000	0,000
16	H ₂ O	—	—	—	—	441,400	0,950	0,789	0,917
16	CO	—	—	—	—	441,400	0,000	0,000	0,000
16	CH ₄	—	—	—	—	441,400	0,000	0,000	0,000
16	H ₂	—	—	—	—	441,400	0,000	0,000	0,000
16	DME	—	—	—	—	441,400	0,000	0,004	0,001
16	MeOH	—	—	—	—	441,400	0,050	0,207	0,082
16	N ₂	—	—	—	—	441,400	0,000	0,000	0,000
17	CO ₂	—	—	—	—	443,020	0,000	0,000	0,000
17	H ₂ O	—	—	—	—	443,020	0,959	0,825	0,931
17	CO	—	—	—	—	443,020	0,000	0,000	0,000
17	CH ₄	—	—	—	—	443,020	0,000	0,000	0,000
17	H ₂	—	—	—	—	443,020	0,000	0,000	0,000
17	DME	—	—	—	—	443,020	0,000	0,000	0,000
17	MeOH	—	—	—	—	443,020	0,041	0,175	0,069
17	N ₂	—	—	—	—	443,020	0,000	0,000	0,000
18	CO ₂	—	—	—	—	444,610	0,000	0,000	0,000

18	H ₂ O	—	—	—	—	444,610	0,970	0,863	0,947
18	CO	—	—	—	—	444,610	0,000	0,000	0,000
18	CH ₄	—	—	—	—	444,610	0,000	0,000	0,000
18	H ₂	—	—	—	—	444,610	0,000	0,000	0,000
18	DME	—	—	—	—	444,610	0,000	0,000	0,000
18	MeOH	—	—	—	—	444,610	0,030	0,137	0,053
18	N ₂	—	—	—	—	444,610	0,000	0,000	0,000
19	CO ₂	—	—	—	—	446,220	0,000	0,000	0,000
19	H ₂ O	—	—	—	—	446,220	0,979	0,902	0,963
19	CO	—	—	—	—	446,220	0,000	0,000	0,000
19	CH ₄	—	—	—	—	446,220	0,000	0,000	0,000
19	H ₂	—	—	—	—	446,220	0,000	0,000	0,000
19	DME	—	—	—	—	446,220	0,000	0,000	0,000
19	MeOH	—	—	—	—	446,220	0,021	0,098	0,037
19	N ₂	—	—	—	—	446,220	0,000	0,000	0,000
20	CO ₂	—	—	—	—	447,700	0,000	0,000	0,000
20	H ₂ O	—	—	—	—	447,700	0,987	0,938	0,977
20	CO	—	—	—	—	447,700	0,000	0,000	0,000
20	CH ₄	—	—	—	—	447,700	0,000	0,000	0,000
20	H ₂	—	—	—	—	447,700	0,000	0,000	0,000
20	DME	—	—	—	—	447,700	0,000	0,000	0,000
20	MeOH	—	—	—	—	447,700	0,013	0,062	0,023
20	N ₂	—	—	—	—	447,700	0,000	0,000	0,000

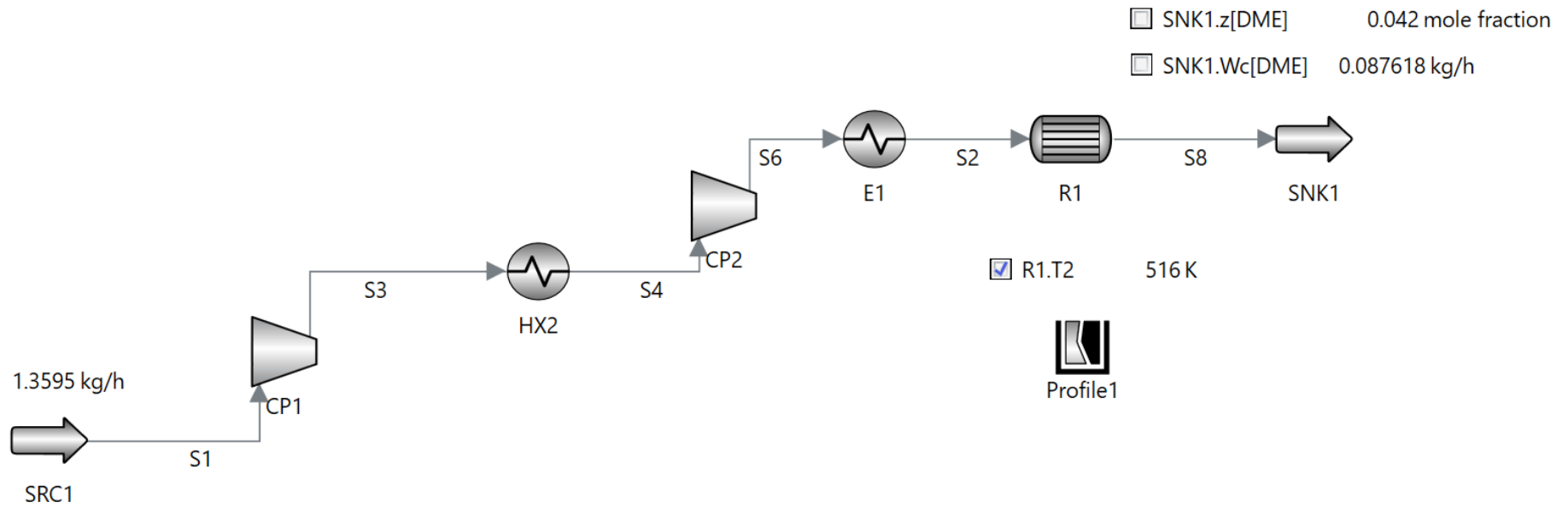


Figura 25: Diagrama de flujo del modelo de síntesis directa de DME implementado en AVEVA Process Simulation.

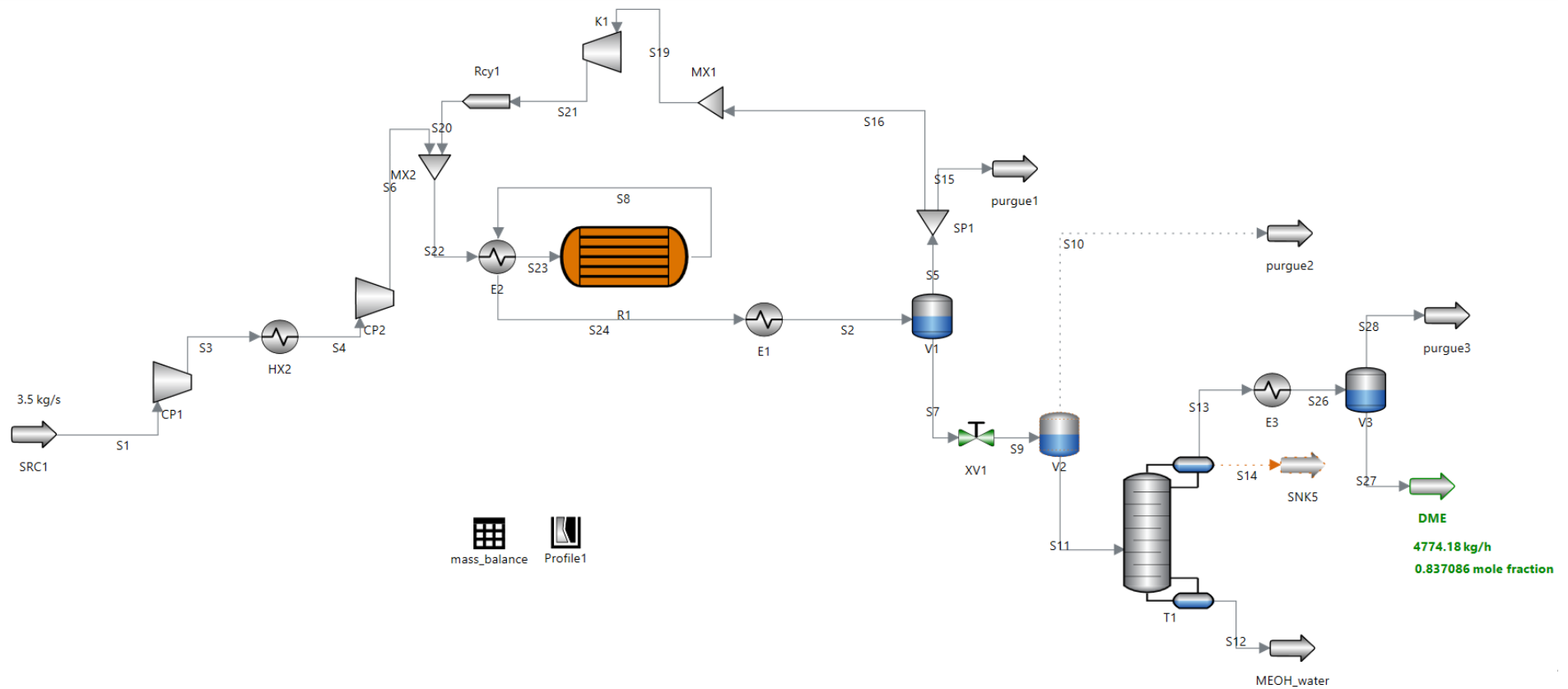


Figura 26: Modelo base de la planta de síntesis directa de DME implementado en AVEVA Process Simulation

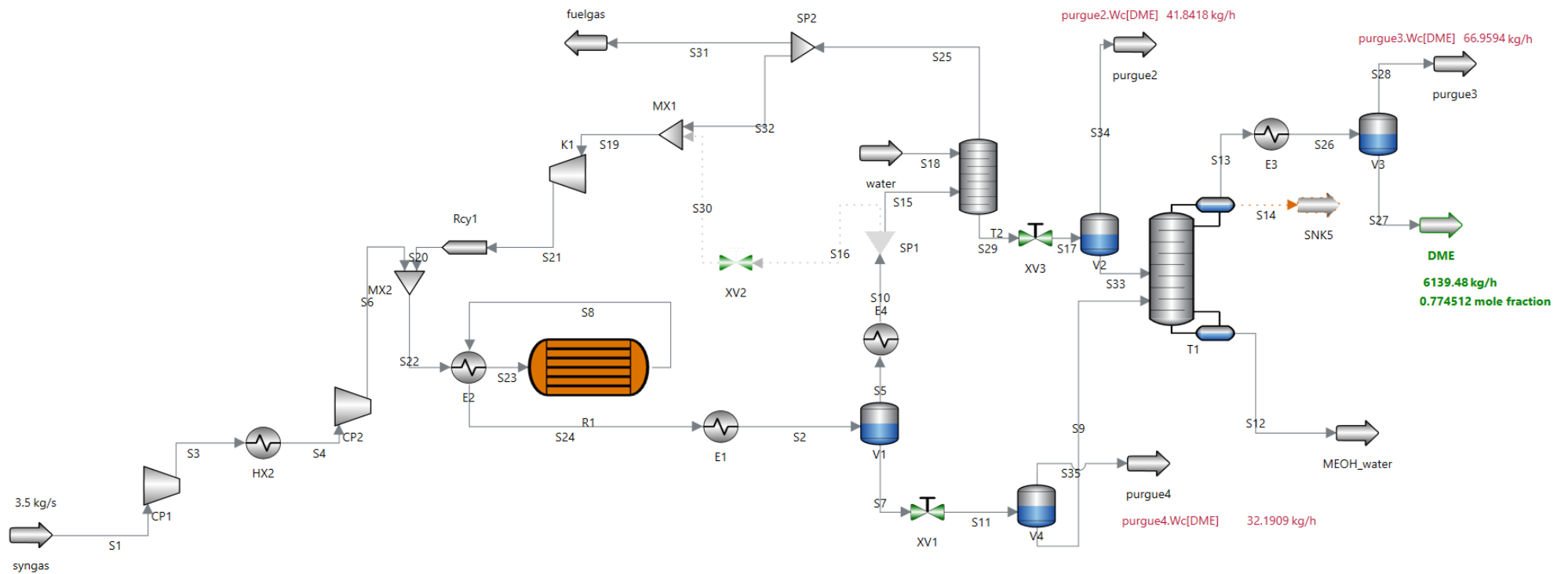


Figura 27: Modelo mejorado de la planta de síntesis directa de DME implementado en AVEVA Process Simulation

8. Bibliografía

- Abu-Dahrieh, J., Rooney, D., Goguet, A., & Saih, Y. (2012). Activity and deactivation studies for direct dimethyl ether synthesis using CuO–ZnO–Al₂O₃ with NH₄ZSM-5, HZSM-5 or γ -Al₂O₃. *Chemical Engineering Journal*, 203, 201-211. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.07.011>
- Al-Breiki, M., Bicer, Y. (2025). Dimethyl Ether. In: *Sustainable Energy Carriers for Energy Storage and Transport*. Green Energy and Technology. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-91615-1_6
- Arcoumanis, C., Bae, C., Crookes, R., & Kinoshita, E. (2007). The potential of di-methyl ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines: A review. *Fuel*, 87(7), 1014-1030. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.06.007>
- Bakare, I. A., Muraza, O., Sanhoob, M. A., Miyake, K., Hirota, Y., Yamani, Z. H., & Nishiyama, N. (2017). Dimethyl ether-to-olefins over aluminum rich ZSM-5: The role of Ca and La as modifiers. *Fuel*, 211, 18-26. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.08.117>
- Cebrián, C. P. (2022). Estudio y optimización de procesos catalíticos de síntesis de metanol y dimetiléter a partir de gas de síntesis procedente de biomasa (Doctoral dissertation, Universidad Autónoma de Madrid). Recuperado de <https://hdl.handle.net/10486/705259>
- Dataintelo, Sharma, R., & Dataintelo. (2026, 23 marzo). Dimethyl Ether Market Research Report 2034. Dataintelo. Recuperado de https://dataintelo.com/report/dimethyl-ether-market-report?utm_source=chatgpt.com
- De Oliveira, M., Rodrigues-Filho, U. P., & Schneider, J. (2014). Thermal Transformations and Proton Species in 12-Phosphotungstic Acid Hexahydrate Studied by 1H and 31P Solid-State Nuclear Magnetic Resonance. *The Journal Of Physical Chemistry C*, 118(22), 11573-11583. <https://doi.org/10.1021/jp501887x>
- Dikić, V., Zubeir, L., Sarić, M., & Boon, J. (2023). Stripping enhanced distillation—A novel application in renewable CO₂ to dimethyl ether production and purification. *Separations*, 10(7), 403. <https://doi.org/10.3390/separations10070403>
- Ermiş, S. (2022). Dimethyl ether production from synthesis gas with bifunctional catalyst mixtures (Master's thesis, Middle East Technical University (Turkey)). <https://hdl.handle.net/11511/99522>
- Fedeli, M., Negri, F., Bornazzini, A., Montastruc, L., Manenti, F., & Kiss, A. A. (2024). Process design and downstream optimization of the direct synthesis route for cleaner production of dimethyl ether from biogas. *Journal Of Cleaner Production*, 443, 141060. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.141060>
- Fleisch, T., Basu, A., & Sills, R. (2012). Introduction and advancement of a new clean global fuel: The status of DME developments in China and beyond. *Journal Of Natural Gas Science And Engineering*, 9, 94-107. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2012.05.012>

- Gogate, M. R. (2018). The direct, one-step process for synthesis of dimethyl ether from syngas. III. DME as a chemical feedstock. *Petroleum Science And Technology*, 36(8), 562-568. <https://doi.org/10.1080/10916466.2018.1428630>
- Guo, L., Ding, Y., Li, X., Zhu, X., Liao, Q., & Yuan, S. (2018). Simulation and optimization study on aqueous mea-based co₂ capture process. *Chemical Engineering Transactions*, 70, 751-756. <https://doi.org/10.3303/CET1870126>
- Han, Y., Zhang, H., Ying, W., & Fang, D. (2009). Modeling and Simulation of Production Process on Dimethyl Ether Synthesized from Coal-based Syngas by One-step Method. *Chinese Journal Of Chemical Engineering*, 17(1), 108-112. [https://doi.org/10.1016/s1004-9541\(09\)60041-0](https://doi.org/10.1016/s1004-9541(09)60041-0)
- Hansen, K. F., Nielsen, L., Hansen, J. B., Mikkelsen, S., Landälv, H., Ristola, T., & Vielwerth, K. (2000). Demonstration of a DME (Dimethyl Ether) Fuelled City Bus. *SAE Technical Papers On CD-ROM/SAE Technical Paper Series*, 1. <https://doi.org/10.4271/2000-01-2005>
- Instrumento de ratificación del Acuerdo de París. (2017). Boletín Oficial del Estado, núm. 28, pp. 7703–7727. Recuperado de <https://www.boe.es/eli/es/ai/2015/12/12/1>
- International Energy Agency (IEA). (2025). World Energy Outlook 2025. Recuperado de <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2025>
- Karagoz, S. (2014). Process design, simulation and integration of dimethyl ether (DME) production from shale gas by direct and indirect methods (Doctoral dissertation). <https://hdl.handle.net/1969.1/153529>
- Lopes, G. D. F. (2019). Simulação da produção de dimetil éter a partir de gás de síntese para uma indústria sucroalcooleira. Recuperado de <http://repositorio.uem.br:8080/jspui/handle/1/7135>
- Masson-Delmotte, V., Pörtner, H. O., Skea, J., Slade, R., Ferrat, M., Neogi, S., ... & Malley, J. (2020). El cambio climático y la tierra: informe especial del IPCC sobre el cambio climático, la desertificación, la degradación de las tierras, la gestión sostenible de las tierras, la seguridad alimentaria y los flujos de gases de efecto invernadero en los ecosistemas terrestres: resumen para responsables de políticas. Recuperado de <https://bibliotecasemiarios.ufv.br/jspui/handle/123456789/337>
- Millán, E., Mota, N., Guil-López, R., Pawelec, B., Fierro, J. L. G., & Navarro, R. M. (2020). Direct Synthesis of Dimethyl Ether from Syngas on Bifunctional Hybrid Catalysts Based on Supported H₃PW₁₂O₄₀ and Cu-ZnO(Al): Effect of Heteropolyacid Loading on Hybrid Structure and Catalytic Activity. *Catalysts*, 10(9), 1071. <https://doi.org/10.3390/catal10091071>
- Ministerio de la Presidencia. (2021). Ley 7/2021, de 20 de mayo, de cambio climático y transición energética. Boletín Oficial del Estado, pp. 26798–26800. Recuperado de <https://www.boe.es/eli/es/l/2021/05/20/7/con>
- Misono, M. (2013). Catalysis of heteropoly compounds (polyoxometalates). In *Studies in Surface Science and Catalysis* (Vol. 176, pp. 97-155). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-53833-8.00004-1>

- Mondal, U., & Yadav, G. D. (2019). Perspective of dimethyl ether as fuel: Part I. Catalysis. Journal Of CO2 Utilization, 32, 299-320. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2019.02.003>
- Muñoz González, C. (2018). Análisis y diseño del proceso de obtención del Dimetiléter por vía directa. <https://orcid.org/0000-0001-6745-0960>
- Naciones Unidas. (2015). United Nations Framework Convention on Climate Change: Paris Agreement. Recuperado de <https://www.un.org/es/climatechange/paris-agreement>
- Oberon Fuels feedstock opportunities. (s. f.). Oberon Fuels. Recuperado de <https://www.oberonfuels.com/es/feedstock-opportunities>
- Olah, G. A., Goeppert, A., & Prakash, G. K. S. (2008). Chemical Recycling of Carbon Dioxide to Methanol and Dimethyl Ether: From Greenhouse Gas to Renewable, Environmentally Carbon Neutral Fuels and Synthetic Hydrocarbons. The Journal Of Organic Chemistry, 74(2), 487-498. <https://doi.org/10.1021/jo801260f>
- Olah, G. A., Goeppert, A., & Prakash, G. K. S. (2008b). Chemical Recycling of Carbon Dioxide to Methanol and Dimethyl Ether: From Greenhouse Gas to Renewable, Environmentally Carbon Neutral Fuels and Synthetic Hydrocarbons. The Journal Of Organic Chemistry, 74(2), 487-498. <https://doi.org/10.1021/jo801260f>
- Orangi, S., Aromada, S. A., Razi, N., & Øi, L. E. (2022). Simulation and economic analysis of MEA+ PZ and MDEA+ MEA blends in post-combustion CO2 capture plant. Scandinavian Simulation Society, 317-324. <https://doi.org/10.3384/ecp21185317>
- Ordóñez, E. M. (2023). Estructura y actividad de catalizadores bifuncionales basados en Cu/ZnO-Al2O3 y heteropoliácido soportado para la síntesis directa de DME (Doctoral dissertation, Universidad Autónoma de Madrid). Recuperado de <http://hdl.handle.net/10486/713032>
- Organización de las Naciones Unidas. (2015). Transforming our world: The 2030 Agenda for Sustainable Development. Recuperado de <https://sdgs.un.org/publications/transforming-our-world-2030-agenda-sustainable-development-17981>
- Park, S. H., & Lee, C. S. (2012). Combustion performance and emission reduction characteristics of automotive DME engine system. Progress In Energy And Combustion Science, 39(1), 147-168. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2012.10.002>
- Parlamento Europeo. (2018). Directive (EU) 2018/2001 of the European Parliament and of the Council on the promotion of the use of energy from renewable sources. Off. J. Eur. Union, 2018, 82-209. Recuperado de <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/es/ALL/?uri=CELEX%3A32018L2001>
- Peng, X. D., Diamond, B. W., Tsao, T. C. R., & Bhatt, B. L. (2002). U.S. Patent No. 6,458,856. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
- Scognamiglio, S., Ciccone, B., Ruoppolo, G., & Landi, G. (2024). Design and simulation of methanol and dimethyl ether (DME) production from Biomass-derived syngas. Chemical Engineering Transactions, 109, 277-282. <https://doi.org/10.3303/CET24109047>

Semelsberger, T. A., Borup, R. L., & Greene, H. L. (2005). Dimethyl ether (DME) as an alternative fuel. *Journal Of Power Sources*, 156(2), 497-511. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2005.05.082>

Shim, H. M., Lee, S. J., Yoo, Y. D., Yun, Y. S., & Kim, H. T. (2009). Simulation of DME synthesis from coal syngas by kinetics model. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 26(3), 641-648. <https://doi.org/10.1007/s11814-009-0107-9>

Styring, P., Dowson, G. R. M., & Tozer, I. O. (2021). Synthetic Fuels Based on Dimethyl Ether as a Future Non-Fossil Fuel for Road Transport From Sustainable Feedstocks. *Frontiers In Energy Research*, 9. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2021.663331>

Uchida, S., Inumaru, K., & Misono, M. (2000). States and dynamic behavior of protons and water molecules in H3PW12O40 pseudoliquid phase analyzed by solid-state MAS NMR. *The Journal of Physical Chemistry B*, 104(34), 8108-8115. <https://doi.org/10.1021/jp000508o>

Union, E. (2009). Directive 2009/28/EC of the European Parliament and of the Council of 23 April 2009 on the promotion of the use of energy from renewable sources and amending and subsequently repealing Directives 2001/77/EC and 2003/30/EC. *Official Journal of the European Union*, 5, 2009.

Zubrin, R. M., Nizamov, B., Henshaw, T. L., Kortan, A. M., Siebarth, J., Apke, C., & Berggren, M. (2018). U.S. Patent No. 9,856,197. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.