

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Química

Purificación de hidrógeno mediante un sistema PSA

Autor: Raúl R. Casavázquez Zamora

Tutor: Francisco Javier Gutiérrez Ortiz

Dpto. Ingeniería Química y Ambiental

Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Sevilla, 2020





Trabajo Fin de Grado  
Grado en Ingeniería Química

# **Purificación de hidrógeno mediante un sistema PSA**

Autor:

Raúl R. Casalvázquez Zamora.

Tutor:

Prof. Dr. Francisco Javier Gutiérrez Ortiz

Profesor Titular de Universidad

Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental

Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Universidad de Sevilla

Sevilla, 2020



Trabajo Fin de Grado: Purificación de hidrógeno mediante un sistema PSA

Autor: Raúl R. Casalvázquez Zamora

Tutor: Francisco Javier Gutiérrez Ortiz

El tribunal nombrado para juzgar el Proyecto arriba indicado, compuesto por los siguientes miembros:

Presidente:

Vocales:

Secretario:

Acuerdan otorgarle la calificación de:

Sevilla, 2020

El Secretario del Tribunal



*“Siamo tutti mortali  
fino al primo bacio e  
al secondo bicchiere  
di vino”*

**Eduardo H. Galeano**



# AGRADECIMIENTOS

---

En primer, agradecer a aquello que pusieron su tiempo y dedicación a nuestro servicio para formarnos como futuros Ingenieros Químicos; a los profesores. A todos y cada uno de ellos, a los de la Universidad de Sevilla y la Università di Bologna, porque de cada uno me llevo un pedacito de su conocimiento. Con especial mención a Francisco Javier, cuya tutorización, guía y aportaciones técnicas tienen han sido fundamentales en el resultado final de este trabajo, invirtiéndolo una gran cantidad de trabajo y tiempo.

A mis compañeros de camino en esta aventura de cuatro años. Desde el primero al último, con los que he compartido momentos de felicidad y agobio durante largos días. En especial a Javi, Valentina y Pablo. Gracias por prestarme vuestro conocimiento, sacrificio y compañía.

Al Erasmus, bendita palabra. Marcado por una pandemia, me ha enseñado más de lo que imaginaba. Gracias por cada rincón de Europa al que me llevaste, cada experiencia que me hizo crecer y cada persona que conocí. En especial, a ellos, a los que se convirtieron en mi familia y que no hace falta que los nombre porque saben quienes son. Gracias a esos momentos con los que la palabra INOLVIDABLE en mayúscula se queda pequeña para describir los sentimientos que despierta con solo recordarlos. Sin ello, este TFG tendría otra esencia.

A mis amigos y familiares. Gracias por confiar en mí en todo momento durante esta larga travesía. Perdón por el tiempo que os he robado y no he podido disfrutar con vosotros.

A mis abuelos, mi primo y mi amigo, que allá donde estén, estoy seguro que han puesto toda su fuerza, ánimo y apoyo en mí en todas las facetas de la vida, incluyendo la académica. Os tengo muy presente.

Me reservo estas últimas líneas para lo más importante que tengo en esta vida: mi padre, mi madre y mi hermana. Ellos son mi familia, mi casa, mi apoyo constante y mi motor. Porque sin su ayuda interminable, sus sacrificios, la alegría que me brindan diariamente y el eterno amor que recibo de ellos hubiese sido todo mucho más difícil. Gracias por permitirme avanzar y cumplir sueños al darme todo sin pedir nada a cambio. Estaré eternamente endeudado con vosotros. Este título os pertenece y es tan mío como vuestro. Os quiero.



# RESUMEN

---

En el presente TFG se ha realizado el estudio y análisis del funcionamiento de un sistema PSA. La finalidad es purificar el hidrógeno presente en una corriente de gas de síntesis proveniente de un proceso de reformado de metano con vapor, usando gas natural como materia prima.

En primer lugar, se ha realizado un estudio del estado del arte relativo a la importancia del hidrógeno, incluyendo aspectos como características fisicoquímicas, su transporte y almacenamiento, sus principales aplicaciones y los diferentes métodos que existen para su producción y para su purificación, centrandó la atención en el sistema PSA. De él, se han detallado el principio físico que utiliza, los principales materiales adsorbentes, las características del sistema y las diferentes etapas que sigue el ciclo.

Por otro lado, se ha llevado a cabo la descripción de la planta de purificación de  $H_2$  en la que se encuentra el conjunto de lechos. Para ello, se ha definido la corriente a purificar y explicado el método de producción (reformado de metano con vapor). A continuación, se ha descrito el funcionamiento del sistema con más profundidad, y se ha realizado una memoria de cálculo relativa al diseño de los equipos y dispositivos del sistema descrito, partiendo de un balance de materia y energía de la planta.



# ABSTRACT

---

In this TFG the study and analysis of the operation of a PSA system has been carried out. The aim is to purify the hydrogen present in a syngas stream from a steam methane reforming process fed by natural gas

First, a study of the state of the art regarding the importance of hydrogen has been performed, including aspects such as physicochemical characteristics, transport and storage, main applications and the different current methods for production and purification, focusing on the PSA system. For this the physical principle, main sorbents, characteristics of the system and the different stages of the cycle have been detailed.

Likewise, a H<sub>2</sub> purification plant with a set of beds has been described, defining the stream to be purified and explaining the production method (steam reforming of methane). Next, the operation of the system has been further described, and the design of the equipment and devices has been properly made, starting from a material and energy balance of the plant.



# ÍNDICE

---

<b>Agradecimientos</b> .....	<b>i</b>
<b>Resumen</b> .....	<b>iii</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>v</b>
<b>Índice</b> .....	<b>vii</b>
<b>Índice de Tablas</b> .....	<b>ix</b>
<b>Índice de Figuras</b> .....	<b>xi</b>
<b>1 Objetivos y alcance</b> .....	<b>1</b>
<b>2 Introducción</b> .....	<b>3</b>
2.1 <i>CARACTERÍSTICAS DEL HIDRÓGENO</i> .....	3
2.2 <i>TRANSPORTE Y ALMACENAMIENTO</i> .....	5
2.3 <i>APLICACIONES DEL HIDRÓGENO</i> .....	7
2.4 <i>MÉTODOS DE PRODUCCIÓN</i> .....	10
2.5 <i>MÉTODOS DE PURIFICACIÓN</i> .....	13
2.6 <i>EL SISTEMA PSA</i> .....	16
<b>3 Memoria descriptiva</b> .....	<b>21</b>
3.1 <i>PLANTA DONDE SE INTEGRA EL PROCESO DE PURIFICACIÓN DE H<sub>2</sub></i> .....	21
3.2 <i>DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE PURIFICACIÓN DE H<sub>2</sub></i> .....	24
3.3 <i>DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS</i> .....	29
3.3.1 <i>INTERCAMBIADORES DE CALOR</i> .....	29
3.3.2 <i>SEPARADOR LÍQUIDO-GAS</i> .....	32
3.3.3 <i>LECHOS DE ADSORCIÓN DE VAPOR DE AGUA</i> .....	34
3.3.4 <i>SISTEMA PSA</i> .....	34
3.3.4.1 <i>COLUMNAS DE ADSORCIÓN DEL SISTEMA PSA</i> .....	34
3.3.4.2 <i>VÁLVULAS</i> .....	38
<b>4 Memoria de cálculo</b> .....	<b>42</b>
4.1 <i>BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA</i> .....	42
4.2 <i>DISEÑO DE EQUIPOS</i> .....	50
4.2.1 <i>TREN DE INTERCAMBIADORES DE CALOR</i> .....	50
4.2.2 <i>SEPARADOR LÍQUIDO-GAS</i> .....	69
4.2.3 <i>ADSORBEDOR DE SILICA GEL</i> .....	72
4.2.4 <i>ADSORBEDORES DEL SISTEMA PSA</i> .....	80

<b>5</b>	<b>Referencias .....</b>	<b>85</b>
	<b>Anexo I: Curva de ruptura del adsorbedor de silica gel .....</b>	<b>93</b>
	<b>Anexo II: Curva de ruptura de los adsorbedores del sistema PSA .....</b>	<b>94</b>
5.1	<i>Carbón activo .....</i>	<i>94</i>
5.2	<i>Zeolita 5A.....</i>	<i>95</i>
	<b>Anexo III: Tablas de Tecnología Energética (18/19, GIQ-US) .....</b>	<b>96</b>

# ÍNDICE DE TABLAS

---

Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas del hidrógeno .....	4
Tabla 2. Valores de difusividad [3]. .....	4
Tabla 3. Comparación de la energía aportada por unidad de masa. ....	5
Tabla 4. Comparación de los distintos procedimientos [35]......	14
Tabla 5. Diferente composición del gas natural según su lugar de extracción [46]. .....	21
Tabla 6. Composición de la corriente de gas de síntesis a la entrada de la etapa de purificación. ....	25
Tabla 7. Especificaciones del intercambiador 1. ....	30
Tabla 8. Especificaciones del intercambiador 2 .....	31
Tabla 9. Especificaciones del intercambiador 3 .....	32
Tabla 10. Características de la corriente de entrada. ....	33
Tabla 11. Valores de las corrientes de entrada y salida al separador líquido-gas. ....	45
Tabla 12. Balance de materia. ....	48
Tabla 13. Propiedades de la corriente de proceso en el intercambiador 1 .....	52
Tabla 14. Propiedades de la corriente de proceso en el intercambiador 2 .....	52
Tabla 15. Propiedades de la corriente de proceso en el intercambiador 3 .....	53
Tabla 16. Propiedades de la corriente de servicio en el intercambiador 1.....	56
Tabla 17. Propiedades de la corriente de servicio en el intercambiador 2.....	56
Tabla 18. Propiedades de la corriente de servicio en el intercambiador 3.....	57
Tabla 19. Resultados del cálculo del coeficiente de película interno para el intercambiador 1. .	62
Tabla 20. Valores del título de vapor en el intercambiador 2.....	65
Tabla 21. Valores del título de vapor en el intercambiador 3.....	65
Tabla 22. Resultados del cálculo del coeficiente de película interno para el intercambiador 2 ..	65
Tabla 23. Resultados del cálculo del coeficiente de película interno para el intercambiador 3 ..	65
Tabla 24. Resultados del cálculo del coeficiente de película externo para el intercambiador 1 .	67
Tabla 25. Resultados del cálculo del coeficiente de película externo para el intercambiador 2 .	68
Tabla 26. Resultados del cálculo del coeficiente de película externo para el intercambiador 3 .	68
Tabla 27. Resultados del cálculo del área y el coeficiente global de transferencia de calor para el intercambiador 1 .....	68

Tabla 28. Resultados del cálculo del área y el coeficiente global de transferencia de calor para el intercambiador 2.....	69
Tabla 29. Resultados del cálculo del área y el coeficiente global de transferencia de calor para el intercambiador 3.....	69
Tabla 30. Características de la corriente de entrada al separador.....	69
Tabla 31. Resultado del diseño del separador líquido-gas .....	72
Tabla 32. Condiciones de operaciones del estudio experimental.....	73
Tabla 33. Condiciones de operaciones del caso industrial .....	73
Tabla 34. Comparativa de los valores de composición del gas experimental y el industrial .....	73
Tabla 35. Datos experimentales .....	74
Tabla 36. Resultados del diseño de la columna de silica gel.....	80
Tabla 37. Diámetro y longitud del lecho industrial.....	80
Tabla 38. Condiciones de operaciones del estudio experimental.....	81
Tabla 39. Condiciones de operaciones del caso industrial .....	81
Tabla 40. Datos experimentales .....	81
Tabla 41. Resultados del diseño del lecho de AC .....	83
Tabla 42. Resultados del diseño del lecho de Z5A.....	83
Tabla 43. Diámetro y longitud de los lechos industriales .....	84

# ÍNDICE DE FIGURAS

---

Figura 1. Materias primas utilizadas para la producción de H <sub>2</sub> .....	11
Figura 2. Esquema de una planta PSA [43].....	19
Figura 3. Planta PSA industrial [44]. ....	19
Figura 4. Diagrama de flujo básico de un proceso de reformado por vapor [46]. ....	22
Figura 5. Diagrama de flujo de proceso de la unidad de purificación. ....	28
Figura 6. Intercambiador de calor.....	29
Figura 7. Separador vertical líquido-gas [52].....	33
Figura 8. Relación entre la recuperación, la pureza y el número de columnas [54]. ....	35
Figura 9. Secuencia del sistema PSA [54]. ....	36
Figura 10. Diagrama p-t del ciclo que sigue una columna [54].....	37
Figura 11. Válvula Fisher 8580 con actuador 2052.....	39
Figura 12. Válvula de control Fisher GX de 3 vías con actuador. ....	40
Figura 13. Válvula Anderson Greenwood serie 60 Tipo 63B.....	41
Figura 14. Simplificación esquemática del proceso de purificación de H <sub>2</sub> .....	42
Figura 15. Diagrama de un intercambiador .....	59
Figura 16. Curva de ruptura experimental del proceso de adsorción.....	78
Figura 17. Curva de ruptura experimental del proceso de regeneración.....	78
Figura 18. Curva de ruptura para el carbón activo (AC) .....	82
Figura 19. Curva de ruptura la zeolita 5A (Z5A) .....	82



# 1 OBJETIVOS Y ALCANCE

---

El objetivo principal de este proyecto es el diseño de un sistema PSA para la purificación de hidrógeno contenido en una mezcla gaseosa procedente de una planta de steam reforming de gas natural.

En el alcance del TFG, se incluye el diseño de la ingeniería básica de una planta a tal efecto, incluyendo los equipos principales y auxiliares necesarios. Para ello, se han adoptado una serie de hipótesis de cálculo y simplificaciones. Asimismo, hay una introducción sobre el hidrógeno.

Con relación al proceso de purificación, se realizará el diseño de los equipos más importantes: el tren de intercambiadores de calor, el separador líquido-gas, el adsorbedor de silica gel y los adsorbedores que conforman el sistema PSA. Se ha omitido el diseño las válvulas, datos sobre la descripción de las tuberías y de equipos de almacenamiento.

La parte relativa al control e instrumentación de la planta, la ingeniería de detalle, las hojas de datos, así como las medidas, presupuestos y análisis económico quedan fuera del alcance del trabajo.



# 2 INTRODUCCIÓN

---

El hidrógeno puro es un gas que, debido a su baja densidad, apenas se encuentra en la atmósfera terrestre. Al ser uno de los compuestos químicos más utilizados y demandados en la industria química y no poder extraerse directamente de la naturaleza, se han desarrollado procesos para su obtención por bastantes empresas. En función de las necesidades de pureza requeridas para un determinado uso, pueden usarse distintos métodos de purificación una vez producido. Uno de ellos es el sistema PSA, objeto de estudio de este TFG y que se detallará más adelante.

Con respecto a su uso, está muy presente en una gran variedad de procesos. Puede actuar como compuesto intermedio para la obtención de otros productos importantes en la industria y de gran uso, como amoníaco o metanol. Puede ser usado como combustible, que al tener como gas de combustión vapor de agua, es más limpio y daña menos al medio ambiente, además de disponer de un elevado poder calorífico. Por último, una aplicación muy importante que está en desarrollo y que puede hacer que en el futuro el  $H_2$  juegue un papel fundamental en la transición energética es su uso como vector energético.

## 2.1 CARACTERÍSTICAS DEL HIDRÓGENO

El hidrógeno es un gas inodoro, incoloro, insípido e inocuo, con lo cual su inhalación no supone un riesgo para la salud humana.

A continuación, en la Tabla 1 se recogen algunas de las propiedades más importantes de este gas [1, 2].

Estas propiedades son importantes para la utilización, almacenamiento y transporte del hidrógeno.

Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas del hidrógeno

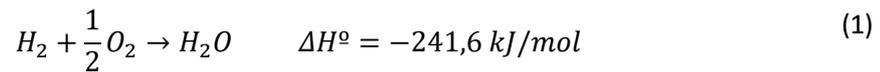
Propiedades	Valor
Punto de fusión (°C)	-259,1
Punto de ebullición (°C)	-252,7
Densidad del líquido (kg/m <sup>3</sup> )	70,9
Densidad del gas en condiciones normales (kg/m <sup>3</sup> )	0,0899
Coefficiente de difusión en el aire en condiciones normales (m <sup>2</sup> /s)	0,000061
Rango de inflamabilidad en el aire (%vol)	4-75
Temperatura de ignición en el aire (°C)	585
Temperatura de la llama en el aire (°C)	2045
Capacidad calorífica específica a 25 °C y 1 bar (kJ/kg·K)	14,3
Conductividad térmica a 25 °C y 1 bar (W/m·K)	0,186

Otro dato interesante es su coeficiente de difusión en el aire. Si se compara frente a otros combustibles como el butano o el vapor del tolueno, se puede comprobar que es considerablemente superior. Esto es algo beneficioso ya que, en caso de una posible fuga, se propagaría rápidamente por el aire y ascendería debido a su baja densidad, provocando situaciones menos peligrosas que los combustibles mencionados con anterioridad que, por el contrario, se depositarían en la superficie. Los valores del coeficiente de difusión para los diferentes sistemas se muestran en Tabla 2.

Tabla 2. Valores de difusividad [3].

Sistema	Difusividad (m <sup>2</sup> /s)
Aire - H <sub>2</sub>	6,1·10 <sup>-5</sup>
Aire - C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	8,6·10 <sup>-6</sup>
Aire- C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>3</sub>	7,0310 <sup>-6</sup>

Por otro lado, el hidrógeno tiene una energía mínima de ignición muy baja, de unos 0,017 mJ en las proximidades de la concentración estequiométrica [4] y una simple chispa puede desencadenar la reacción de combustión en fase gas que se presenta a continuación:



La reacción (1) es altamente exotérmica, liberando 241,6 kJ por cada mol reaccionado, que equivale a 120,8 kJ por gramo que reacciona, muy superior a otros combustibles empleados en la industria, como se observa en la Tabla 3.

Tabla 3. Comparación de la energía aportada por unidad de masa.

Combustible	Energía aportada (kJ/g)
H <sub>2</sub>	120,8
CH <sub>4</sub>	50,12
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	45,9

Ambos factores hacen que el hidrógeno sea tan explosivo y que se tengan que extremar los cuidados en su transporte y almacenamiento.

## 2.2 TRANSPORTE Y ALMACENAMIENTO

El hidrógeno se puede almacenar de diferentes formas [5, 6, 7]:

- **Almacenamiento en estado gaseoso**, que es el método más empleado. Consiste en introducir el hidrógeno comprimido en tanques o bombonas a una presión según los estándares de 200 o 350 bar, e incluso 700 bar en pilas de combustibles para vehículos. La mayor parte, suelen estar fabricados de acero o aluminio, aunque los más desarrollados están compuestos por fibra de carbono, que reduce considerablemente su peso. A mayor presión, más hidrógeno es posible almacenar debido a la disminución de su volumen, aunque supondría un mayor coste de operación por el consumo eléctrico de los compresores.
- **Almacenamiento en estado líquido**, consistente en almacenar el hidrógeno licuado en tanques a temperaturas inferiores a -252,7 °C. El problema fundamental de utilizar este método reside en el elevado coste económico y aporte energético que se requiere para mantener los equipos a esa temperatura durante el tiempo que sea necesario, consumiendo una enorme cantidad de energía. Además, los tanques deben

estar protegidos y sellados de manera muy estricta mediante materiales aislantes para preservar la temperatura en su interior, lo cual conlleva una alta complejidad técnica.

- **Almacenamiento en hidruros metálicos y nanotubos de carbono**, que actualmente está en investigación y desarrollo. El primero de ellos consiste en la reacción química del hidrógeno gaseoso y un compuesto metálico para formar hidruros, liberándose de la estructura simplemente aplicando calor. Tiene varias ventajas, como que son procesos reversibles, por lo que no existiría problemas en utilizar el mismo metal para un número indefinido de procesos; almacena más cantidad de hidrógeno por unidad de volumen en comparación con el almacenamiento gaseoso y líquido, donde es limitado debido a la baja densidad del hidrógeno en estos estados. En cambio, en los hidruros metálicos sólidos, la densidad es mayor y, por tanto, se almacena más hidrógeno. Por último, es un método más seguro, debido a que no se manejan presiones demasiado altas y temperaturas muy bajas (0-10 bar; 0-100 °C), además de reducirse el riesgo de fuga. Por el contrario, el elevado peso que hay que manejar al ser un sólido metálico es uno de los aspectos a mejorar para su utilización, además de reducir los costes. Con respecto a los nanotubos de carbono, se caracterizan por ser muy porosos y con una alta capacidad para adsorber el hidrógeno (+10 % peso). Su principal problema es que para que la adsorción se maximice, hay que trabajar en un rango de temperaturas muy bajo, en torno a -196 °C. En laboratorios se ha demostrado su viabilidad, pero faltaría desarrollarlo para corroborar si es factible técnicamente en la industria.

El objetivo referente a los sistemas de almacenamiento es conseguir retener la mayor cantidad posible de hidrógeno en el menor volumen y con el menor peso, teniendo en cuenta que, a pesar de que aporta una gran cantidad de energía por unidad de masa, con respecto a su volumen ocurre exactamente lo contrario debido a su bajísima densidad tanto en estado líquido como gaseoso. Esto dificulta el proceso y requiere avances para maximizar su almacenamiento.

Por lo tanto, para lograr que el hidrógeno se convierta en un futuro en el principal vector energético y combustible más utilizado, es necesario que, además de conseguir un almacenamiento seguro y rentable, los sistemas de transportes sean los adecuados para cada situación, permitiendo su traslado de la manera más rápida y, de nuevo, más económica, en función de la cantidad que se quiera transportar.

Con respecto al transporte, este debería hacerse mediante gasoductos cuando las demandas de hidrógeno son demasiado elevadas, siempre y cuando existan infraestructuras que lo permitan.

Este método permite desplazar una gran cantidad de hidrógeno desde el punto de producción hasta el punto de entrega, con costes de operación relativamente bajos. El principal inconveniente que se presenta es que hay que disponer de la infraestructura adecuada y llevar a cabo su construcción tiene unos costes muy elevados. Cabe destacar que, al ser similares a los de gas natural, si las demandas de mercado subiesen, estos podrían reutilizarse para transportar hidrógeno.

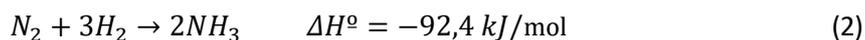
Por otro lado, el desplazamiento más empleado es por carretera en camiones o mediante ferrocarril, o por mar a través de barcos. Este caso lo determina tanto la distancia como la cantidad a transportar y el recorrido a seguir, comprimiéndose el hidrógeno en tanques para trayectos cortos o licuándose en cisternas criogénicas para trayectos más largos. Esta elección se fundamenta en las propiedades del hidrógeno que se comentaron anteriormente, de modo que para que sea rentable un desplazamiento largo, es necesario desplazarla mayor cantidad de energía específica por unidad de volumen, que se consigue con el hidrógeno líquido (a expensas de los avances en las tecnologías para el transporte en estado sólido) [8, 9].

## 2.3 APLICACIONES DEL HIDRÓGENO

La extraordinaria versatilidad del hidrógeno es algo que no pasa desapercibido y lo demuestran las innumerables aplicaciones que puede llegar a tener. Pese al esperado aumento en la producción y el consumo generalizado del hidrógeno en las próximas décadas consolidándose como potencial alternativa a los combustibles fósiles y vector energético para almacenar energía, actualmente es empleado casi en exclusiva (en torno al 90%) en la industria química y petroquímica [10]. Dentro de sus aplicaciones industriales más demandadas se encuentran la producción de amoníaco y metanol, el hidrocracking, la hidrogenación de grasas y aceite o la hidrodesulfuración. A continuación, se detallan brevemente estos procesos.

### SÍNTESIS DE AMONÍACO [11]

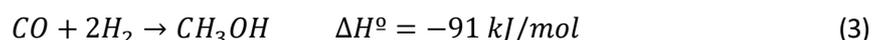
El amoníaco es uno de los productos químicos más utilizados a nivel industrial en todo el mundo, produciéndose anualmente unos 220 millones de toneladas en 2018 [12]. Para producirlo, es necesario disponer de hidrógeno y nitrógeno como reactivos y de un catalizador para que aumente la velocidad de la reacción en estado gaseoso. La reacción (2) muestra la síntesis de amoníaco:



Este proceso de producción de amoníaco es conocido como proceso Haber-Bosch. Sin entrar en detalles sobre la obtención de nitrógeno (que se separa del aire) y del hidrógeno (que se discutirá más adelante), se hacen reaccionar ambos compuestos en un reactor a temperaturas comprendidas entre 650 y 750 K y presiones de entre 50 y 200 bar. Todo ello, en presencia de un catalizador en base hierro y trazas de óxido de aluminio y potasio, para reducir la temperatura del proceso y alcanzar una velocidad de reacción que haga viable el proceso a escala industrial. Aun así, la conversión de la reacción es baja, por lo que es necesario recircular la corriente al reactor. A la salida, el amoníaco gaseoso es separado mediante un proceso de absorción en agua debido a su elevada solubilidad en él.

### **SÍNTESIS DE METANOL**

El metanol tiene una gran cantidad de usos: materia prima para obtener otros compuestos como formaldehído o ácido acético; anticongelante en tuberías de gas o en automóviles; disolvente, facilitando la producción de colorantes o productos farmacéuticos; o como combustible, combinándose con gasolina y permitiendo reducir la contaminación ambiental. El proceso de producción de metanol se lleva a cabo utilizando gas de síntesis, como se muestra en la reacción (3):



Las temperaturas y las presiones dependen del método utilizado para su síntesis, estando actualmente vigentes dos: proceso Lurgi [13, 14] y proceso ICI [15]. En el primer caso, la reacción se lleva a cabo a una temperatura cercana a los 250 - 260 °C, mientras que la presión suele estar comprendida entre 50 y 60 bar; en el segundo caso, la reacción se lleva a una temperatura de entre 200 y 300 °C, y una presión de 35 - 54 bar. Para aumentar su velocidad, la reacción está catalizada con óxido de zinc (ZnO) o de cromo (Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>).

### **HIDROCRACKING [16]**

Es una técnica ampliamente utilizada en la industria petroquímica. Consiste en romper las moléculas de las fracciones más pesadas del crudo o gasóleo de vacío en otras más pequeñas, de menor peso molecular y cadenas más cortas, que tienen más interés y mayor valor económico. Se lleva a cabo dos fases simultáneamente: por un lado, un cracking catalítico, en el que el

catalizador rompe la molécula y permite la formación de olefinas y aromáticos; por otro, una hidrogenación, que rompe los dobles enlaces para formar parafinas y naftenos.

Los productos formados serán distintos en función de la presión y temperatura, de la carga y del tipo de catalizador. Éste debe tener un carácter ácido asociado al cracking catalítico y un carácter metálico para la hidrogenación de modo que satisfaga las dos fases de este proceso. La parte ácida está formada por zeolitas mientras que la metálica por algunos metales como molibdeno, wolframio o níquel. El reparto en las cantidades de los componentes del catalizador depende de la calidad de los productos, la selectividad del proceso y de su estabilidad, relacionada directamente con la temperatura. A su vez muestra grandes ventajas con respecto al cracking catalítico simple ya que no precisa una desulfuración previa y reduce la formación de coque y alquitrán.

#### **HIDROGENACIÓN DE GRASAS Y ACEITES [17]**

Otro campo en el que el hidrógeno juega un papel primordial es en la industria oleoquímica. Mediante una reacción de hidrogenación es posible obtener ácidos grasos saturados a partir de los insaturados, obteniendo así grasas sólidas empleadas en la industria alimentaria, como margarina, grasas para freír o para su uso en pastelería. Este proceso evita la oxidación de las grasas y aceites, mejorando su estabilidad química y conservación.

#### **HIDRODESULFURACIÓN [18]**

La última aplicación del hidrógeno que se comenta a nivel industrial es la hidrodesulfuración. Este proceso es utilizado principalmente al tratar con el petróleo crudo antes de entrar en la torre de destilación y que se separe en los diferentes subproductos o, en su defecto, desulfurando en la salida. El objetivo es eliminar el azufre para que no dañe los catalizadores en operaciones posteriores y disminuya su vida útil o rendimiento. Por otro lado, es necesario también eliminarlos de las fracciones destinadas a combustibles, ya que puede suponer una importante complicación en el momento de la combustión, porque aparte de provocar corrosión en el motor, los gases que emitirían tras la combustión serían contaminantes.

Son reacciones catalizadas generalmente por una aleación de cobalto y molibdeno y cuyo producto son principalmente ácido sulfhídrico ( $H_2S$ ) y compuestos orgánicos.

Por otro lado, aunque minoritarias en la actualidad, también existen aplicaciones del hidrógeno como las que se indican a continuación:

- **Combustibles de transbordadores espaciales:** son de los primeros vehículos en los que se ha consolidado el hidrógeno líquido como combustible, haciéndolo reaccionar con oxígeno líquido. Esta es la combinación más efectiva, ya que los motores necesitan una elevada energía específica másica para la mayor parte se transforme en energía cinética en de los gases de salida y se consiga el mayor empuje posible [19].
- **Combustible para automóviles:** aunque actualmente el mercado del combustible de los automóviles está dominado por el uso de la gasolina y el diésel, se estima que, en las próximas décadas con los avances en las tecnologías de producción del hidrógeno, éste juegue un papel fundamental. Su relevancia se fundamenta en que el producto de su combustión es agua vapor y, si se obtuviera a partir de energías renovables, sería considerada una energía limpia [20].
- **Enfriamiento de generadores eléctricos:** se utilizan en centrales para disipar el calor producido por el movimiento del rotor en su intento de superar el rozamiento con el aire en su interior. Su alta conductividad térmica y baja viscosidad lo hacen ser el refrigerante más utilizado para estas labores [21].
- **Reacción de fusión:** en ellas, se hacen reaccionar los isótopos de hidrógeno deuterio y tritio haciéndolos chocar a una gran velocidad. Se obtiene helio y se libera un neutrón, además una enorme cantidad de energía. Este mecanismo es el que se da en las bombas de hidrógeno, más potentes que las atómicas, y en el Sol, irradiando una gran cantidad de energía electromagnética [22].

## 2.4 MÉTODOS DE PRODUCCIÓN

El hidrógeno gaseoso no es un recurso natural, es decir, no se encuentra en la naturaleza de forma libre ni en yacimientos como ocurre con otros combustibles, por lo que hay que obtenerlo de otros compuestos. Actualmente, se estima que se producen más de 65 millones de toneladas anuales [23] de hidrógeno gaseoso para satisfacer las crecientes demandas de la población. En esta ocasión, el análisis se centra en los diferentes métodos que existen en la industria para producirlo. De nuevo, hay que tener en mente una serie de factores, como son la rentabilidad económica y energética del proceso, la viabilidad técnica y el medio ambiente.

De toda la cantidad producida, el 96% es obtenido a partir de combustible fósiles, como metano extraído del gas natural (48%), petróleo (30%) y carbón (18%) y tan sólo un 4% mediante energías renovables [24]. Esta selección de materias primas para la producción se muestra en la Figura 1.

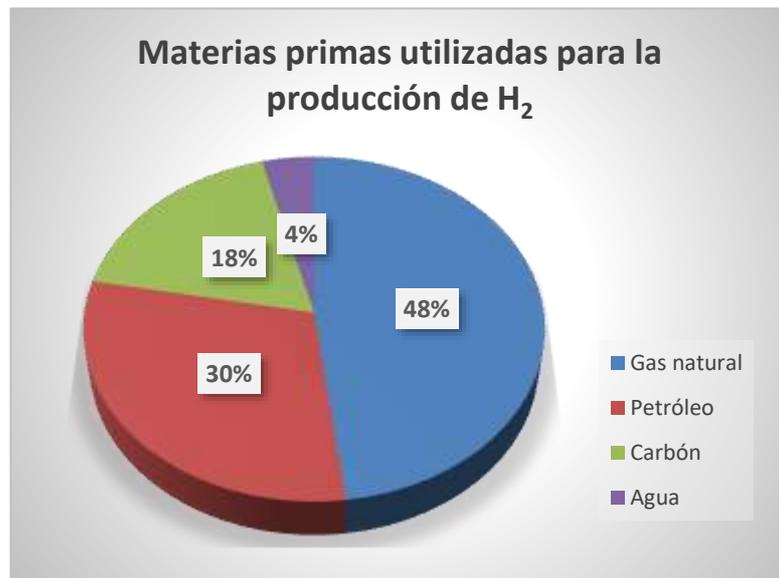
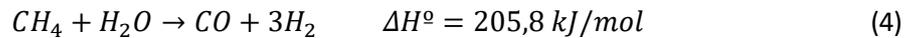


Figura 1. Materias primas utilizadas para la producción de H<sub>2</sub>.

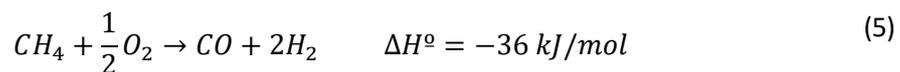
Aunque existen una gran variedad de métodos para producir hidrógeno, los que tienen mayor interés son los que utilizados industrialmente. Los más importantes son:

- **Reformado con vapor (*steam reforming*):** es el proceso más empleado a nivel industrial ya que es el más económico y el que cuenta con una tecnología más desarrollada, avalada por los años que lleva en uso. Un hidrocarburo gaseoso, generalmente metano presente en una corriente de gas natural (aunque también pueden ser gases licuados del petróleo o efluentes de refinerías) reacciona con vapor de agua para producir gas de síntesis, como se muestra en la reacción (4). El proceso se lleva a cabo a unas temperaturas muy elevadas, entre 700 °C y 1000 °C, y a presiones moderadas de entre 3 y 25 bar [25], si bien suele darse a presiones más próximas al rango superior dado al verse favorecida la cinética con presiones más altas. Al ser un proceso catalizado, es posible que antes sea preciso hacer una desulfuración para que el azufre no dañe el catalizador y alargue su vida útil. El gas a la salida está formado por monóxido de carbono e hidrógeno por lo que será necesario separarlos. A su vez, el monóxido

puede ser tratado de nuevo con vapor para producir dióxido de carbono e hidrógeno (reacción de water-gas shift), maximizando así su producción [25].



- **Oxidación parcial:** en este caso, la molécula del hidrocarburo (generalmente metano) se oxida en presencia de una cantidad limitada de oxígeno, que es inferior a la estequiométrica, produciendo así una combustión incompleta. Es una reacción catalizada que ocurre a una temperatura mayor de 800 °C y que, entre sus principales ventajas frente al reformado con vapor, destaca que es una reacción exotérmica, liberando calor y no consumiéndolo. No obstante, la conversión de metano en hidrógeno es menor en este proceso que en el anterior, aunque sigue siendo bastante elevada si se compara con otros procesos de producción de hidrógeno, especialmente los no industriales [25]. La reacción (5) muestra este proceso.

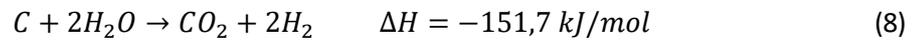
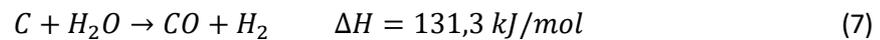


- **Reformado autotérmico (*autothermal reforming*):** en este proceso, representado por la reacción (6), se combinan los principios de los dos procesos anteriores. Por un lado, se introduce en el reactor oxígeno para producir una oxidación parcial del hidrocarburo, mientras que, por otro, se introduce vapor de agua para romper la molécula. La principal característica de este proceso es que el calor generado por la combustión es transferido al proceso de reformado por vapor, reduciendo la energía que hay que suministrar al mismo. Por lo tanto, con respecto a la oxidación parcial, tiene una producción de hidrógeno superior, mientras que, con respecto al reformado con vapor, tiene un consumo energético inferior [26, 27].



- **Gasificación del carbón y biomasa:** consiste fundamentalmente la obtención de un combustible gaseoso a través de carbón sólido. Se hace en presencia de oxígeno y de un agente gasificante como aire o vapor de agua. Con este último se obtiene hidrógeno. Dependiendo del compuesto que se emplee y sus cantidades con el que se haga reaccionar el carbón, es decir, de su estequiometría, los productos obtenidos son

diversos como puede observarse en las reacciones (7) y (8). Es una tecnología madura y cuyo rendimiento se encuentra en torno al 70%-80% [28].



- **Electrolisis del agua:** es un proceso cuyo objetivo radica en la descomposición de la molécula de agua para producir oxígeno e hidrógeno en estado gas mediante la aplicación de una corriente eléctrica. El sistema está compuesto por dos electrodos, uno positivo (ánodo) y otro negativo (cátodo) que es hacia donde se dirigen los protones para formar posteriormente hidrógeno. La reacción suele darse en presencia de electrolitos para aumentar la conductividad eléctrica del agua. En la industria, este proceso se emplea en aplicaciones donde la cantidad de hidrógeno requerida no es demasiado elevada. Actualmente, existen tres métodos que se utilizan en la industria o están en estudio para ser mejorados e implantados, que son: electrolizadores alcalinos (muy desarrollados y avanzados tecnológicamente), membranas de intercambio de protones (utilizados a menor escala, aunque el hidrógeno obtenido tiene una mayor pureza), y membrana de estado sólido (actualmente en investigación, y podría conseguir una eficiencia energética 80% - 90%, siendo mayor incluso que el reformado con vapor) [29].

En las próximas décadas, estas tecnologías de producción de hidrógeno deberán mejorarse y otras podrán desarrollarse de modo que tengan un menor impacto medioambiental y una elevada eficiencia energética, como ocurre con la electrolisis. Utilizando energía eléctrica generada mediante fuentes naturales como la energía solar, eólica o mareomotriz podrá considerarse al hidrógeno como una fuente de energía limpia [30].

Hay otros métodos no implantados en la industria como la producción biológica empleando algas, que dejan de producir oxígeno en ausencia de azufre para producir hidrógeno, o los basados en el uso de celdas electroquímicas que captan directamente la radiación solar para producir una electrolisis en su interior.

## 2.5 MÉTODOS DE PURIFICACIÓN

Para la purificación y recuperación del hidrógeno presente en una corriente gaseosa, en la actualidad existen principalmente tres tecnologías basadas en diferentes principios físicos. La

Tabla 4 muestra una comparativa entre los distintos métodos usados en la industria donde pueden apreciarse sus ventajas y sus inconvenientes.

Estos mecanismos son utilizados poniendo el foco en la separación del hidrógeno para lograr una máxima pureza. Puede observarse como el sistema PSA es el método que logra los valores de pureza más alto. Dependiendo de su aplicación, serán necesarios unos requerimientos más elevados que otros. Por ejemplo, cuando se utiliza hidrógeno para enfriamiento de rotores, se exigirá al menos una pureza del 90% [31], mientras que para otras aplicaciones resulta significativamente insuficiente. Para procesos hidrodesulfuración o formación de otros compuestos como metanol o amoníaco es necesario una pureza muy alta del H<sub>2</sub> ya que, de otra manera, ciertas impurezas pueden dañar y envenenar los catalizadores utilizados en los reactores de estos procesos. Otro caso para el que se requiere una pureza muy elevada es en el uso del hidrógeno como combustible, porque las impurezas disminuyen su poder calorífico mientras que si la reacción se produce en una celda electroquímica (pila de combustible), la potencia ofrecida por la celda es menor para un mismo valor de voltaje debido a que la densidad de corriente es menor existe presencia de contaminantes [32]. En ambos casos, el efecto apreciado es una disminución del rendimiento del proceso, que se traduce en un mayor consumo de producto para obtener el mismo resultado y, por tanto, mayor coste.

*Tabla 4. Comparación de los distintos procedimientos [33].*

Parámetro	Separación por membranas	PSA	Destilación criogénica
Pureza del H <sub>2</sub> (%)	90-98	>99,9	95-99
Recuperación del H <sub>2</sub> (%)	85-95	75-92	90-98
Contenido de H <sub>2</sub> en la alimentación (%)	>25-50	>40	>10
Presión de la alimentación (bar)	20-160	10-40	5-75
Presión del producto con respecto a la de alimentación	Menor	Igual	Igual o menor
Capacidad (Nm <sup>3</sup> /h)	1000-50000	1000-200000	10000-75000
Coste	Bajo	Medio	Alto
Tiempo de arranque	Minutos	Minutos	Horas
Principio físico	Difusión	Adsorción	Condensación

A continuación, se explican brevemente estos procesos haciendo especial énfasis en el sistema PSA, que se explicará en una sección aparte al ser el objeto principal de estudio de este proyecto.

### **SEPARACIÓN CRIOGÉNICA**

Es una tecnología basada en la destilación de una mezcla de gases a muy bajas temperaturas, de entre  $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $-200\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Se centra en la separación de los compuestos en función de los distintos puntos de ebullición, con lo que las condiciones de operación dependerán de la mezcla a separar. El hidrógeno, al tener un punto de ebullición significativamente más pequeños que el resto de componentes (solo superior al del helio), permanecerá en estado gaseoso, mientras que los demás condensarán. De esta manera, puede conseguirse una pureza del hidrógeno bastante elevada [34].

Con respecto a su uso para separar hidrógeno, actualmente no está muy implantado en la industria, debido a que tiene unos costes de inversión y de operación bastante elevados al tener que operar con temperaturas tan bajas. Además, aunque tienen una alta recuperación del hidrógeno con respecto a la corriente de entrada al equipo, existen otros procesos que logran una pureza superior. Es por ello que no suele utilizarse para separar hidrógeno, aunque la tecnología no ha caído en desuso. Se utiliza para separar otros componentes en mezclas gaseosas como por ejemplo el  $\text{CO}_2$  como paso previo en plantas de purificación de hidrógeno antes de que la corriente entre al sistema PSA [35]. También puede usarse para separar  $\text{O}_2$  y  $\text{N}_2$  de una mezcla de aire, método ampliamente desarrollado por varias empresas del sector como Linde Gas, Carbuos Metálicos o Air Liquide. Esta última, además, incluye este sistema para una gran cantidad de procesos, como extracción y licuefacción de helio o producción de una mezcla de kriptón y xenón concentrada a más del 98%. Estos procesos quedan recogidos en su Manual de Tecnología [36].

### **SEPARACIÓN POR MEMBRANAS** [37]

Otra forma de separar el hidrógeno gaseoso de una corriente es emplear una membrana, que deja pasar unas moléculas y otras no en función de su tamaño o de la afinidad química que exista entre el material del que esté compuesta la membrana y el compuesto que quiere atravesarla. La ventaja que tiene este proceso es su ahorro en cuanto a costes económicos se refiere, ya que no hay que invertir tanta energía en su proceso de separación al ser las condiciones de presión y temperaturas bastante más moderadas.

Lo único que se requiere para separar el hidrógeno del resto de componentes es una fuerza impulsora que potencie la difusión a través de la membrana. Esta fuerza impulsora será un gradiente de presiones entre el lado de la alimentación y el lado del permeado, siendo la

separación mayor cuanto mayor sea esa diferencia de presiones, consiguiendo así un mejor rendimiento de la operación.

Una parte fundamental es la elección del material de la membrana porque determina parte del coste económico, no solo en su inversión a la hora de fabricarse, sino en su operación, al tener que realizarse más o menos pasos por la membrana para conseguir una eficiencia deseada. Aunque existen, varios tipos de membranas, las dos más empleadas son:

- **Membranas de paladio:** son las de mejor calidad al presentar una permeabilidad del hidrógeno mucho más elevada que el resto de componentes gaseosos. Está formada por una aleación de paladio, generalmente con una composición de en torno al 90%, y otro elemento metálico como plata o cobre. Consiguen purezas y recuperaciones muy altas, superiores al 99,999% y 99% respectivamente.
- **Membranas poliméricas:** suelen estar compuestas por varias capas y son más resistentes a la humedad, además de ser más baratas.

### **SEPARACIÓN MEDIANTE EL SISTEMA PSA**

Es el proceso de separación de hidrógeno más empleado en la industria y es el que se va a utilizar para el diseño de la planta en el presente proyecto. Por su relevancia, se detallará en una sección aparte.

## **2.6 EL SISTEMA PSA**

La adsorción es una operación de separación mediante la cual las moléculas, átomos o iones (adsorbato) de una mezcla de gases o una disolución quedan retenidas en la superficie de un sólido (adsorbente). Para el caso de la adsorción física, esta operación de separación se basa en las fuerzas de atracción débiles entre la superficie del adsorbente y las moléculas circundantes. También existe la adsorción química, en la que el adsorbato reacciona con el adsorbente, produciendo otro compuesto y manteniendo una diferencia de concentraciones respecto al elemento a separar muy alto, aunque su estudio queda fuera del alcance de este proyecto.

La fuerza impulsora en este proceso sería el gradiente de concentraciones existente entre el fluido que atraviesa el adsorbente y el propio sólido. Cuando se alcanza la máxima concentración superficial del adsorbato para las condiciones operativas establecidas, es necesario hacer una regeneración que permita su reutilización del adsorbente. El proceso inverso a la adsorción y

mediante el cual las partículas se liberan de la superficie del adsorbente es conocido como desorción, y se lleva a cabo generalmente con variaciones en la presión y en la temperatura del sistema.

Con respecto al material adsorbente, debe ser elegido cuidadosamente prestando atención a una serie de factores, como son [38]:

- La capacidad selectiva con respecto al adsorbato que se quiere separar.
- Que sea mecánica, química y térmicamente resistente, para que sea duradero.
- Coste moderado.
- Capacidad de adsorción, que cuanto mayor sea, más será capaz de captar para una misma cantidad de adsorbente o, visto desde otro punto de vista, con un mismo objetivo de adsorción, menos cantidad deberá emplearse (y, por tanto, se ahorra en el coste de operación).

Una vez comentado el fundamento físico en el que se basa la separación de gases mediante adsorción, se puede explicar el proceso asociado a un sistema PSA (*Pressure Swing Adsorption*), que es una tecnología que permite conseguir purezas del 99,999%. En cuanto a purificación de hidrógeno se refiere, es el más empleado. La carga y regeneración del adsorbente se hace mediante oscilaciones en la presión del recipiente donde ocurre la transferencia de masa mientras que si se utilizara la temperatura como agente separador se llamaría sistema TSA (*Temperature Swing Adsorption*). Sus principales ventajas son [39]:

- Fácil instalación.
- Operación completamente automatizada.
- Tiempo de arranque y parada bajos.
- Bajos costes de operación.
- Larga vida útil.

En la industria, para conseguir maximizar la producción, se lleva a cabo un proceso cíclico y en continuo con una serie de recipientes conectados entre sí llamados adsorbedores, de manera que cuando uno esté realizando una fase, el otro estará haciendo justamente la contraria. Es por ello que se explicará simultáneamente para la serie de adsorbedores, y no como si actuaran de manera independiente, ya que así está implantado en la industria. A continuación, se describen

brevemente las diferentes etapas en un sistema PSA básico, si bien en la memoria descriptiva se ampliará y desarrollará más [34, 40, 41]:

- **Presurización y despresurización:** antes de empezar con la adsorción y desorción, es necesario mantener los adsorbedores en unas condiciones de presión óptimas. Para el caso de adsorción, a alta presión para aumentar así la cantidad adsorbida, mientras que, para la desorción, a baja presión para liberar al adsorbato y que salga por la corriente de purga. Para ello, la presurización suele hacerse en isocorriente con el gas de la alimentación, haciéndolo entrar en la columna mientras se impide su salida por el otro extremo; la despresurización, por su parte, se suele hacer en contracorriente con respecto al gas de la alimentación, abriendo dicho extremo y permitiendo que salga por purga los gases residuales.
- **Adsorción y desorción:** una vez que ambos equipos se encuentran en sus condiciones óptimas de presión, comienza la adsorción de uno de ellos y la desorción por parte del otro. Para el primer caso, el gas entra en el lecho por la cola del adsorbedor y sale por la cabeza el elemento purificado, en este caso, el hidrógeno. Los gases residuales de la mezcla quedan retenidos en la superficie del adsorbente. Simultáneamente, se está regenerando el otro adsorbedor, es decir, se eliminan las impurezas que quedan retenidas en los poros del sólido adsorbente. Para ello, se hace pasar una cierta parte corriente de gas purificado que ha salido por la cabeza del recipiente que donde se está llevando a cabo la adsorción.
- **Igualación de presión:** para reducir el consumo energético por parte de los equipos de impulsión, se aprovecha el gradiente de presiones que existe entre los dos adsorbedores para igualarlas. Una vez que se han equilibrado, comienza el proceso de presurización y despresurización comentado anteriormente, pero en este caso en el equipo contrario. De esta manera, se van alternando los procesos en ambos adsorbedores, consiguiendo una producción constante.

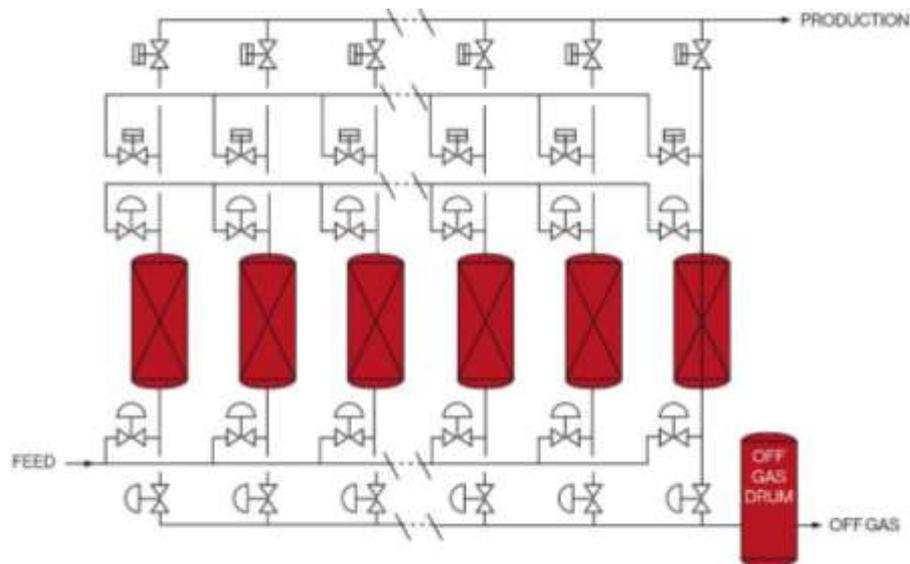


Figura 2. Esquema de una planta PSA [42].



Figura 3. Planta PSA industrial [43].

La Figura 2 muestra una representación esquemática del sistema PSA utilizado para la purificación. Mediante el uso de diferentes válvulas se va variando la presión, de modo que por cabeza sale  $H_2$  puro mientras que el off-gas que sale por cola hacia un tanque de almacenamiento. La Figura 3 representaría la extensión del esquema anterior a una planta real, en el que puede observarse los diferentes adsorbedores, válvulas e incluso el tanque de almacenamiento de  $H_2$  puro.



# 3 MEMORIA DESCRIPTIVA

Como se ha comentado en el capítulo anterior, el proceso que se estudia en este trabajo consiste en la separación del hidrógeno contenido en una mezcla gaseosa que procede del reactor de *steam reforming* de metano.

## 3.1 PLANTA DONDE SE INTEGRA EL PROCESO DE PURIFICACIÓN DE H<sub>2</sub>

A continuación, se describe brevemente el proceso de producción de H<sub>2</sub> que posteriormente tendrá que separarse. Cabe destacar que, mientras que este proceso solo se va a describir brevemente, será el de la purificación del compuesto el que sí se desarrollará más en profundidad. Por tanto, queda descartado el diseño del proceso de producción.

La corriente de gas de síntesis que contiene H<sub>2</sub> que se ha elegido para el diseño del sistema PSA es la que se produce en una planta de reformado de metano con vapor para producir hidrógeno, a partir de gas natural, conformado en su mayoría por metano, siendo el resto otros hidrocarburos ligeros como etano o propano. Dependiendo del lugar donde se extraiga el gas natural, tendrá una composición determinada y estará más o menos enriquecido en ciertos componentes. Este hecho también puede observarse en la Tabla 5, que recoge algunos lugares de extracción del gas natural y su composición.

Tabla 5. Diferente composición del gas natural según su lugar de extracción [44].

Localización	%CH <sub>4</sub>	%C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	%C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	%C <sub>4+</sub>	%N <sub>2</sub>
Egipto (Damietta)	97,25	2,49	0,12	0,12	0,02
Lybia	81,39	12,44	3,51	0,64	2,02
Oman	90,69	5,75	2,12	1,24	0,20
Nigeria	91,70	5,52	2,17	0,58	0,03
Russia (Sakhalin)	92,54	4,47	1,97	0,95	0,07
EEUU (Alaska)	99,70	0,09	0,03	0,01	0,17

Como se puede comprobar, los valores de las composiciones mostrados en la tabla anterior están expresados en porcentaje volumétrico y están ausentes de dióxido de carbono, por lo que serían valores comerciales en condiciones para ser exportados. Además, tampoco se ha tenido en

cuenta que pueden contener pequeñas trazas de gases nobles y derivados del azufre, que, como se verá a continuación, será necesario separarlo del conjunto de gases.

La Figura 4 es un diagrama básico de la instalación, que recoge tanto el proceso de producción como el de purificación. Será este último el que se diseñará en este proyecto, quedando el primero sujeto solamente a una breve descripción del proceso para situar el contexto en el que se encuadra la corriente de gas de síntesis, que será la alimentación a la unidad principal de la planta PSA.

El proceso de purificación comienza, por tanto, con la corriente de salida reformador, que servirá como alimentación al sistema, como se muestra en la figura de abajo. De esta manera, la planta a diseñar comprende desde el intercambiador posterior al reactor hasta las corrientes de salida del sistema PSA.

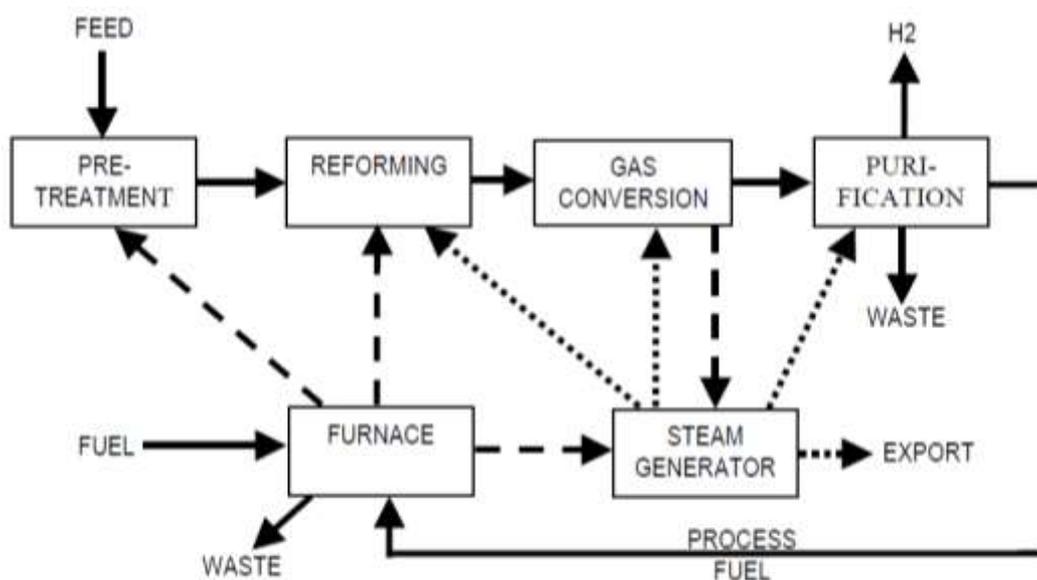


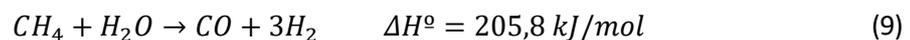
Figura 4. Diagrama de flujo básico de un proceso de reformado por vapor [45].

En primer lugar, una vez que el gas natural llega a la planta, debe ser pretratado antes de reformarse con vapor de agua en el reactor principal. Como paso previo a la hidrosulfuración, la corriente debe hacerse pasar por un tanque flash para eliminar los compuestos en fase líquida y asegurar que ninguno de ellos se condense durante el proceso. A continuación, una vez que se han separado los compuestos condensables, se lleva a cabo un proceso de eliminación de los compuestos de azufre que contiene el gas natural. Para ello, se llevan a cabo dos procesos: una hidrogenación y una desulfuración.

A la corriente que sale del tanque flash, se le adiciona una corriente de hidrógeno para que los compuestos orgánicos del azufre (tioles) se transformen en sulfuro de hidrógeno gaseoso ( $H_2S$ ). El hidrógeno que se utiliza en esta etapa es recirculado del final de la planta. Es decir, cuando se lleva a cabo la purificación de  $H_2$ , la mayor parte se envía a almacenamiento para su posterior uso en la industria o comercialización, pero una cierta cantidad se recircula y se utiliza al principio de la planta de producción para llevar a cabo este proceso. Según autores como Molburg [45] o la enciclopedia Ullmans [46], este porcentaje corresponde aproximadamente entre un 2% y un 5% del hidrógeno total purificado a la salida del sistema PSA.

A su vez, el sulfuro de hidrógeno gaseoso ( $H_2S$ ) obtenido se hace reaccionar en un lecho de adsorción de óxido de zinc ( $ZnO$ ) para obtener sulfuro de zinc ( $ZnS$ ), que puede eliminarse como residuo sólido. La eliminación del  $H_2S$  se lleva a cabo mediante este proceso al tener una concentración baja en toda la corriente, si bien existen otros métodos más efectivos en la industria que logran separar cantidades superiores, aunque, para este caso, éste es válido. También pueden utilizarse varios lechos en paralelo [45]. Tanto la etapa de hidrogenación como de desulfuración se lleva a cabo a una temperatura de en torno a  $350\text{ }^\circ\text{C} - 400\text{ }^\circ\text{C}$  [46].

El gas procedente de la etapa de desulfuración se introduce en un mezclador junto con vapor de agua a una temperatura de alrededor de  $510\text{ }^\circ\text{C}$  y una presión de 30 bar, aproximadamente [45]. Esta corriente pasa primero por un primer reactor donde se logra la conversión de los hidrocarburos más pesados en metano, para conseguir, de esta manera, un mejor rendimiento y más obtención de hidrógeno. Este pre-reformador trabaja a unas condiciones operativas de temperatura comprendidas entre  $350\text{ }^\circ\text{C}$  y  $550\text{ }^\circ\text{C}$  [47]. La reacción (9) de reformado con vapor, que se expone a continuación (aunque también fue mostrada en la ecuación (4) y explicada en la sección 2.4), es altamente endotérmica y se lleva a cabo a una temperatura de entre  $700\text{ }^\circ\text{C}$  y  $1000\text{ }^\circ\text{C}$ , ya que se ve favorecida a altas temperatura, mientras que la presión suele estar comprendida entre 3 y 25 bar [25].

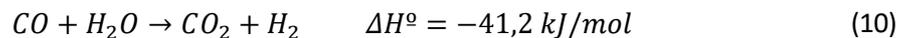


Según Nazir (2019) [48], se consigue una conversión del metano en este reformador de en torno al 80%. El aporte de energía necesario para alcanzar esas temperaturas se consigue con el que aporta un horno. En él, se quema una parte del gas natural de la entrada (en torno al 3% de la corriente de entrada [48]) y la corriente de purga del sistema PSA, que tiene un poder calorífico que se puede utilizar y reducir así el consumo de materia prima. Esta corriente está compuesta

principalmente por el metano no reaccionado, dióxido de carbono y el hidrógeno que no se ha conseguido recuperar. Este hidrógeno es el que se ha tenido que emplear para regenerar los lechos una vez que se ha llevado a cabo el proceso de adsorción, aunque estos detalles se ampliarán más adelante cuando se explique el funcionamiento del sistema PSA.

El calor que proporciona el horno sirve para abastecer de la energía requerida en todos los equipos de la instalación: reactor de desulfuración, pre-reformador y generador de vapor. Además, la corriente de salida del reformador principal contiene todavía mucho calor residual que puede utilizarse en otras partes de la instalación.

La corriente de salida del reformador está compuesta por una mezcla de gases rica en hidrógeno y monóxido de carbono, que es conocida como gas de síntesis. Para maximizar la producción de hidrógeno, que es el principal compuesto que se quiere obtener y purificar en todo el proceso, la corriente se hace pasar por una serie de reactores, donde se produce la reacción conocida como water-gas shift (WGS) [recogida en la ecuación (10)] con la única intención reducir la cantidad de monóxido de carbono en favor de hidrogeno.



Aunque el equilibrio de la reacción favorece a los reactivos a baja temperatura, para que tenga una buena velocidad de reacción que sea práctica para un proceso industrial, ésta se lleva a cabo a altas temperaturas en presencia de un catalizador y dividido en dos etapas. En la primera de ellas (WGS de alta temperatura), la reacción ocurre a una temperatura comprendida entre 300 °C y 400 °C mientras que en la segunda (WGS de baja temperatura) los valores rondan los 200 °C y 300 °C [49].

## 3.2 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE PURIFICACIÓN DE H<sub>2</sub>

En esta sección, se expone la descripción del diseño que se ha realizado a la planta de purificación de H<sub>2</sub> que está formada por los siguientes equipos: intercambiadores de calor, separador líquido-gas, torre de adsorción para la eliminación del vapor de agua, y sistema PSA.

La Figura 5 muestra el diagrama de flujo del proceso. En él, aparecen los principales equipos de la instalación, así como las diferentes corrientes que intervienen en el proceso de purificación.

La corriente de entrada a la planta procede del reactor principal del proceso de reformado, donde se lleva a cabo la obtención de hidrógeno a partir de gas natural y vapor de agua. Se encuentra a una temperatura que ronda los 200 °C - 250 °C, por lo que, antes de que entre en los diferentes equipos para separar los componentes de la mezcla gaseosa, es necesario enfriarla. Por lo tanto, para el diseño del proceso, se especifica la temperatura de la corriente de alimentación en 200 °C y la presión en 15 bar.

Por otro lado, esta corriente contiene una composición determinada, en la que destacan los altos valores del H<sub>2</sub> producido y de vapor de agua incorporado en el proceso de *steam reforming*, que se encuentra en exceso. Además de esta agua, como en los reactores no hay una conversión del 100%, la corriente de salida tiene también metano, así como pequeñas cantidades de etano, propano e hidrocarburos más pesados que no han reaccionado. Estos compuestos no se han tenido en cuenta en el balance de materia porque las concentraciones de los mismos son despreciables (además de reaccionar el prereformador y reformador, las cantidades presentes en el gas natural ya son pequeñas) y quedarán retenidas en los adsorbentes usados.

Los valores de la concentración de los componentes de la corriente usados para el diseño de la planta se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6. Composición de la corriente de gas de síntesis a la entrada de la etapa de purificación.

Compuesto	Concentración (%molar)
H <sub>2</sub>	39,48
CH <sub>4</sub>	18,62
CO <sub>2</sub>	2,17
CO	5,88
H <sub>2</sub> O	30,00
N <sub>2</sub>	3,85

Es importante resaltar que estos valores de concentración (especialmente de H<sub>2</sub>, que es el compuesto principal) son algo diferentes que los que suelen tener estas corrientes procedentes del reformador en este punto, porque no se incluyen etapas de water-gas-shift. Es debido a que, como se verá más adelante, para el diseño de las columnas de adsorción del sistema PSA, realizado por escalado técnico, es necesario obtener unos valores de operación similares a los de algún experimento tomado como referencia.

Estos valores están determinados dependen de varios aspectos. En primer lugar, de la composición del gas natural que se alimenta al proceso, puede tener mayor o menos cantidad de metano, así como de otros hidrocarburos gaseosos o incluso nitrógeno. Este hecho puede observarse en la Tabla 5. Por otro lado, también influye las distintas etapas del proceso de reformado de metano de vapor. Una mayor conversión del reactivo principal en los distintos reactores hará que la cantidad de hidrógeno sea mayor a la entrada de la unidad de purificación, mientras que, por el contrario, la cantidad de agua vapor en exceso y metano no reaccionado será menor.

A continuación, como se puede observar en la Figura 5, esta corriente se hace pasar por un tren de intercambiadores de calor, que emplean agua de refrigeración como corriente de servicio, para reducir la temperatura de la corriente del proceso hasta una temperatura de 35 °C, que es a la que opera el sistema PSA.

Aguas abajo, se encuentra un separador líquido-gas para retirar el agua condensada formada tras el paso de la corriente por el intercambiador. Aunque se logra eliminar casi toda el agua que entra, ya que pasa a estado líquido, una pequeña cantidad permanece en fase vapor, que sale por cabeza. Por ello, antes de entrar en el sistema principal, se hace pasar por un lecho de adsorción altamente selectivo al agua, empleando silica gel como adsorbente.

Luego, la corriente gaseosa se dirige al sistema principal del proceso (PSA) donde se obtendrá hidrógeno con más del 99,999 % de pureza y una recuperación del 90% [42]. Este último valor varía según el número de lechos utilizados en la operación, que suelen ser entre 4 y 12, aunque actualmente los planes de mejora y los más avanzados sistemas llegan a emplear hasta 16. Cabe destacar que, a mayor número de columnas, mayor será la recuperación, ya que se aumenta el número de veces que se igualan las presiones, con lo cual disminuye la cantidad de hidrógeno perdido en la regeneración de los lechos [50]. Como inconveniente principal, destaca que el número de columnas empleadas en el proceso es directamente proporcional al coste de la instalación, con lo cual cuantas más columnas se utilizan mayor es el dinero que hay que invertir en él [40]. Además, en relación al control del sistema, su complejidad aumenta al haber un mayor número de columnas trabajando simultáneamente. Como podrá comprobarse más adelante cuando se detalle el funcionamiento de la PSA, la relación entre la recuperación, la pureza y el número de columnas elegidos es congruente.

La corriente que entra en un sistema PSA tiene unas condiciones operativas de presión y temperaturas moderadas alrededor de 20-40 °C y 7-31 bar [41]. En este diseño, las condiciones

especificadas han sido 35 °C y 15 bar. En el conjunto de adsorbedores, el hidrógeno puro se separa por cabeza, mientras que por cola sale una mezcla de diferentes gases. El hidrógeno puro obtenido es enviado a almacenamiento casi en su totalidad. Esta producción de hidrógeno normalmente se encuentra en valores que van desde 5.000 a 200.000 Nm<sup>3</sup>/h [42]. En el diseño de esta planta se ha tomado un valor de 100.000 Nm<sup>3</sup>/h, al ser habitual en la industria. Como se indicó en la descripción del proceso de producción, una pequeña parte de este H<sub>2</sub> producido es recirculada al principio del proceso de reformado para llevar a cabo la hidrodesulfuración de los tioles. En este caso, se ha especificado un valor de un 3% del total purificado.

La mezcla de gases de purga contiene principalmente metano no reaccionado, monóxido de carbono e hidrógeno no recuperado, por lo que es combustible y se envía al horno para aportar calor al proceso y reducir el consumo de gas natural. Previamente, esta corriente puede tratarse en otro equipo para separar el dióxido de carbono de la corriente con el objeto de almacenarlo para ser utilizarlo o comercializado en otros procesos de la industria.

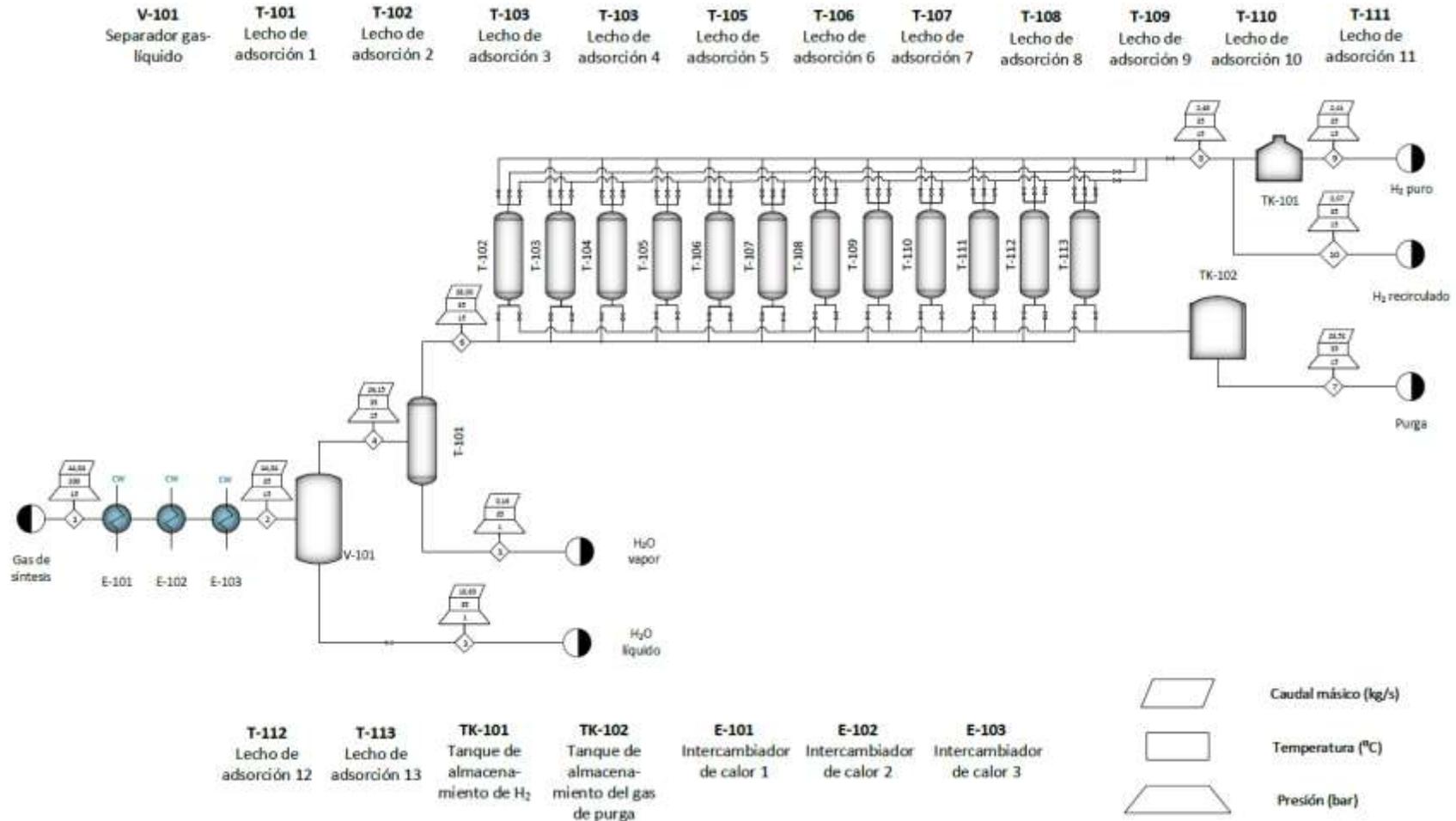


Figura 5. Diagrama de flujo de proceso de la unidad de purificación.

### 3.3 DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS

En esta sección se incluye una descripción de los equipos que conforman la unidad de purificación de hidrógeno. Se mostrarán sus principales características, especificaciones y valores operativos a los que trabajan.

#### 3.3.1 INTERCAMBIADORES DE CALOR

Se disponen tres intercambiadores de calor en serie a la entrada de la planta para conseguir una reducción de su temperatura de 200 °C a 35 °C, produciéndose la casi total condensación del vapor de agua contenido en la corriente a una presión de 15 bar.

Los tres intercambiadores son de carcasa-tubo, aunque con diferentes especificaciones de diseño en función de las condiciones del proceso en cada uno de ellos. Este tipo de intercambiador puede operar con rangos elevados de temperatura, además de trabajar con todo tipo de sistemas (líquido-líquido, gas-gas, líquido-gas y bifásico). En los tres equipos, el intercambio de energía entre los fluidos se produce a contracorriente, aumentando de esta manera la cantidad transferida.

La corriente de servicio utilizada en estos intercambiadores de calor es agua de refrigeración que circulará por la carcasa y experimentará un salto térmico de 15 °C, entrando a 25 °C y saliendo a 40 °C en cada uno de ellos. Para contrarrestar los efectos de la pérdida de carga, el agua entra a 2 bar aunque dicha caída de presión sea despreciable y no se tenga en cuenta en los cálculos. Esta corriente ha sido previamente tratada para evitar dañar el equipo y por tanto tenga un valor de ensuciamiento más bajo, permitiendo un mayor intercambio de calor.

La Figura 6 muestra un esquema de un intercambiador de calor de tipo carcasa y tubo.

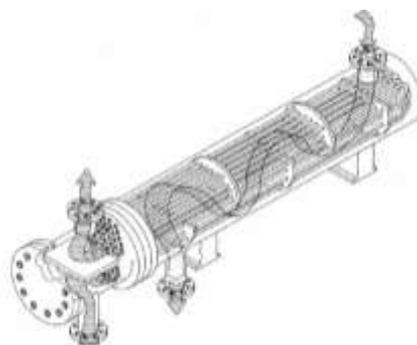


Figura 6. Intercambiador de calor.

### Intercambiador de calor 1

El primer intercambiador seleccionado tiene dos pasos por los tubos y uno por la carcasa. El fluido de proceso experimenta el primer salto de temperatura desde 200 °C hasta 147 °C, que es cuando el agua contenida en la corriente comienza a condensar. Esto provoca que el calor cedido de una corriente a otra sea de 6441 kW.

Está compuesto por 180 tubos dispuestos en 16 hileras, siguiendo una configuración cuadrada en 1" con un espaciado de un 25% superior al diámetro exterior y con placa tubular flotante. El diámetro exterior de los tubos, compuestos por acero inoxidable AISI 304 es 3/4", mientras que el espesor está diseñado según el calibre 12 BWG, valores que han sido escogidos siguiendo la norma TEMA y el sistema BWG inglés. Convertido en unidades del SI, el diámetro interior de los tubos sería de 0,014 m mientras que el exterior es de 0,019 m.

El diámetro de la carcasa es de 457 mm y la longitud del intercambiador es de 4,356 m, valores que se justifican en la memoria de cálculo.

Con respecto a la corriente de servicio, el caudal másico de agua de refrigeración utilizado para absorber el calor que se cede en el intercambiador es de 102,66 kg/s, que circula a una velocidad de 1,68 m/s por la carcasa.

En la Tabla 7 se muestran las especificaciones del primer intercambiador.

*Tabla 7. Especificaciones del intercambiador 1.*

Especificaciones del IC-1	
$N_{tb}$	180
$D_{e, tb}$ (m)	0,019
$D_{i, tb}$ (m)	0,014
$N_{pasos}$	2
$D_{carcasa}$ (m)	0,457
$N_{filas}$	16
$L$ (m)	4,356

### Intercambiador de calor 2

El segundo intercambiador tiene una configuración de la placa tubular igual que el anterior: cuadrada en 1" con 25% del diámetro exterior de los tubos como espaciado. En este caso, está compuesto por 950 tubos distribuidos en 35 hileras, en los que el fluido experimenta un paso por

carcasa y dos por los tubos. Según esta relación, se ha elegido un valor del diámetro de la carcasa de 965 mm.

Este intercambiador es el que experimenta la mayor transferencia de calor de los tres. Esto es debido a que la temperatura pasa de 147 °C a 90 °C, produciéndose la mayor parte de la condensación del vapor de agua en él. Por ello, el consumo de agua de refrigeración es mucho más alto en este equipo, llegando a un valor de 723,08 kg/s, justificado con la alta cantidad de calor (45369 kW) que debe absorber tras la condensación del vapor de agua. Su velocidad es de 2,04 m/s.

Con respecto al diámetro de los tubos, se ha seleccionado un valor del diámetro exterior de 5/8" con un calibre de 20 BWG según la norma TEMA y el sistema BWG inglés. Estos valores, corresponden con un diámetro interior de 0,016 m y exterior de 0,014 m en el SI. Por último, la longitud del intercambiador es de 7,754 m.

En la Tabla 8 se muestra las especificaciones del segundo intercambiador.

*Tabla 8. Especificaciones del intercambiador 2*

Especificaciones del IC-2	
$N_{tb}$	950
$D_{e, tb}$ (m)	0,016
$D_{i, tb}$ (m)	0,014
$N_{pasos}$	2
$D_{carcasa}$ (m)	0,965
$N_{filas}$	35
$L$ (m)	7,754

### **Intercambiador de calor 3**

El último intercambiador diseñado, como se indicó anteriormente, también es de tipo carcasa-tubo. En este caso, la corriente de proceso fluye por el interior de 1085 tubos repartidos en 37 hileras, con un diámetro exterior de 1" y un espesor definido por un calibre de 20 BWG, según la norma TEMA y el sistema BWG inglés. Estos valores, en SI corresponden con un diámetro exterior de 0,025 m e interior de 0,024 m.

Con respecto al diseño de la placa tubular es igual que el de sus predecesores: flotante, de configuración cuadrada en 1" y un espaciado de un 25% del diámetro exterior de los tubos. La

longitud del intercambiador es de 8,115 m, con diámetro de la carcasa de 1,016 m. Esto permite que el fluido de la corriente de proceso pase por los tubos y por la carcasa una sola vez.

En cuanto a las temperaturas que maneja este intercambiador, el fluido pasa de 90 °C a los 35 °C necesarios para la entrada al conjunto de adsorbedores del sistema PSA. En este rango de temperatura, se experimenta una ligera condensación del vapor, pero considerablemente menor que en el intercambiador anterior. El caudal másico de agua circula por la carcasa para hacer frente a la absorción de los 13653,956 kW que cede el gas de síntesis es de 217,61 kg/s, que lo hace a una velocidad de 0,837 m/s.

En la Tabla 9 se muestra las especificaciones del tercer intercambiador.

*Tabla 9. Especificaciones del intercambiador 3*

Especificaciones del IC-3	
$N_{tb}$	1085
$D_{e, tb}$ (m)	0,025
$D_{i, tb}$ (m)	0,024
$N_{pasos}$	1
$D_{carcasa}$ (m)	1,016
$N_{filas}$	37
$L$ (m)	8,115

### 3.3.2 SEPARADOR LÍQUIDO-GAS

Una vez que se ha enfriado la corriente de proceso hasta 35 °C, se dispone un separador líquido-gas para separar el alto contenido de agua condensada.

El equipo utilizado funciona por acción de la gravedad, de modo que las gotas de líquido más densas caen al fondo mientras que el gas más ligero sale por cabeza exento de líquido, con la ayuda de un demister o eliminador de niebla/aerosoles. Cabe destacar que este gas tiene una cierta cantidad de agua vapor correspondiente al equilibrio termodinámico de ambas fases bajo las condiciones de operación. Por otro lado, el líquido está formado casi totalmente por agua, aunque también contiene cantidades muy pequeñas del resto de gases disueltos.

El separador es de tipo vertical, con una altura total de 6,76 m y un diámetro interno de 2,46 m. Se ha especificado un tiempo de retención del líquido de 10 minutos, con un volumen ocupado

por del líquido de 11,28 m<sup>3</sup>. Este volumen es controlado por un interruptor de nivel, pero su especificación queda fuera del alcance de este TFG.

La corriente de entrada tiene un caudal másico de 26,16 kg/s de gas y de 18,69 kg/s de líquido. Los valores de sus densidades son 6,27 kg/m<sup>3</sup> y 993,3 kg/m<sup>3</sup>, respectivamente.

La caracterización de la corriente de entrada puede verse en la Tabla 10.

Tabla 10. Características de la corriente de entrada.

Características de la corriente de entrada			
$m_G$ (kg/s)	26,16	$\rho_G$ (kg/m <sup>3</sup> )	6,27
$m_L$ (kg/s)	18,69	$\rho_L$ (kg/m <sup>3</sup> )	993,73
$Q_G$ (m <sup>3</sup> /s)	4,17	$Q_L$ (m <sup>3</sup> /s)	0,019
$T$ (°C)	35,00	$p$ (bar)	15,00

La Figura 7 ilustra un esquema de un separador líquido-gas vertical.

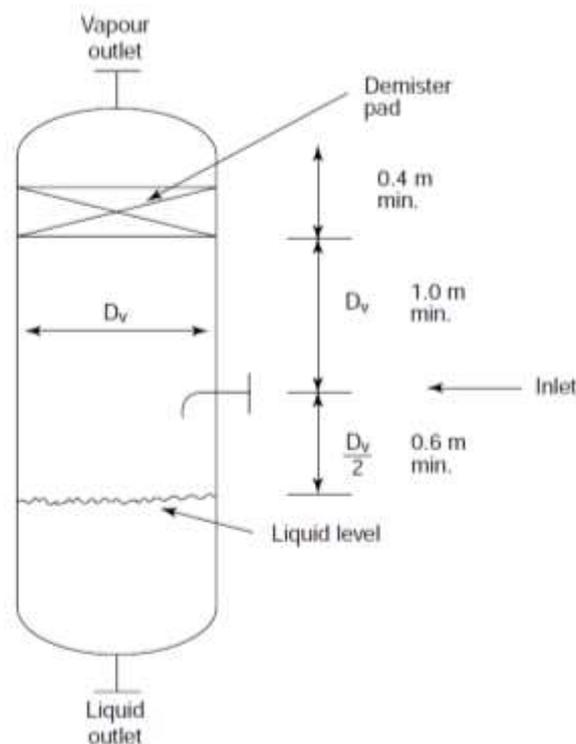


Figura 7. Separador vertical líquido-gas [51].

### 3.3.3 LECHOS DE ADSORCIÓN DE VAPOR DE AGUA

La corriente gaseosa que sale por la cabeza del separador L-G entra en un conjunto de lechos de adsorción con el objetivo de eliminar el vapor de agua remanente, debido al equilibrio líquido-vapor del separador.

El adsorbente empleado en las columnas de adsorción es silica gel, con las mismas características que las del adsorbente usado en el experimento tomado como referencia para el diseño [52].

Se trata de silica gel ZEObeads 720, un material con más de un 99% de  $\text{SiO}_2$  y que representa unos de los mejores adsorbentes de humedad que existen. El tamaño de cada partícula es de 2 mm de diámetro, mientras que el tamaño de los poros es de 20 Å. Por otro lado, la densidad de la partícula es de  $1312 \text{ kg/m}^3$  y la densidad aparente del lecho es de  $854 \text{ kg/m}^3$ , lo que representa una porosidad del lecho igual a 0,349. Con respecto su superficie específica, tiene un valor de  $769,34 \text{ m}^2/\text{g}$  según el fabricante, un valor suficientemente elevado para llevar a cabo el proceso de adsorción del vapor de agua.

Tras realizar el escalado desarrollado en la memoria de cálculo, se concluye que la longitud de la columna necesaria para eliminar el agua contenido en la corriente es de 1,64 m mientras que el diámetro requerido para mantener la velocidad superficial del experimento es de 7,96 m. Las condiciones de operación en la planta industrial, como se ha comentado en explicaciones anteriores, llegado a este punto es de  $35 \text{ }^\circ\text{C}$  y 15 bar. Por último, el tiempo de ruptura establecido es de 24 h.

Por último, para satisfacer las necesidades del proceso y garantizar que sea en todo momento continua, se han colocado 5 lechos de adsorción. De esta manera, al tener un adsorbedor un ciclo completo 30 h, de las cuales, 6 horas está adsorbiendo y 24 h está regenerándose.

### 3.3.4 SISTEMA PSA

#### 3.3.4.1 COLUMNAS DE ADSORCIÓN DEL SISTEMA PSA

Son los equipos principales del proceso, donde se lleva a cabo la separación del hidrógeno del resto de componentes que se adsorben en un material adsorbente.

El primer sistema PSA, patentado en el año 1960 por Charles W. Skarstrom, consistía en un sistema de dos lechos de adsorción que realizaba cuatro etapas: presurización, adsorción,

despresurización y regeneración. El sistema original ha ido experimentando mejoras en su concepción y desempeño. Así, primero se introdujo la despresurización en paralelo, que incrementaba la concentración de las impurezas antes purgarse. Más adelante, con la igualación de presiones, se consiguió un ahorro económico significativo al evitar usar equipos de impulsión para presurizar la columna, reduciendo el consumo energético. Como última modificación importante, se incorporan más lechos al sistema, pudiendo estar formado por hasta 16 columnas, en algunos casos actuales. Estas mejoras permitieron aumentar la recuperación del producto, el ahorro de capital y la utilización de caudales de gas más grandes, promoviendo la tecnología PSA en la industria química, especialmente, en procesos de purificación de gases.

En este proyecto se propone un sistema PSA formado por 12 columnas, con bajos valores de pérdida de  $H_2$  por el gas de purga, como puede observarse en la Figura 8, donde se expone una gráfica en la que se relaciona el número de columnas con los valores de recuperación y pureza obtenidos.

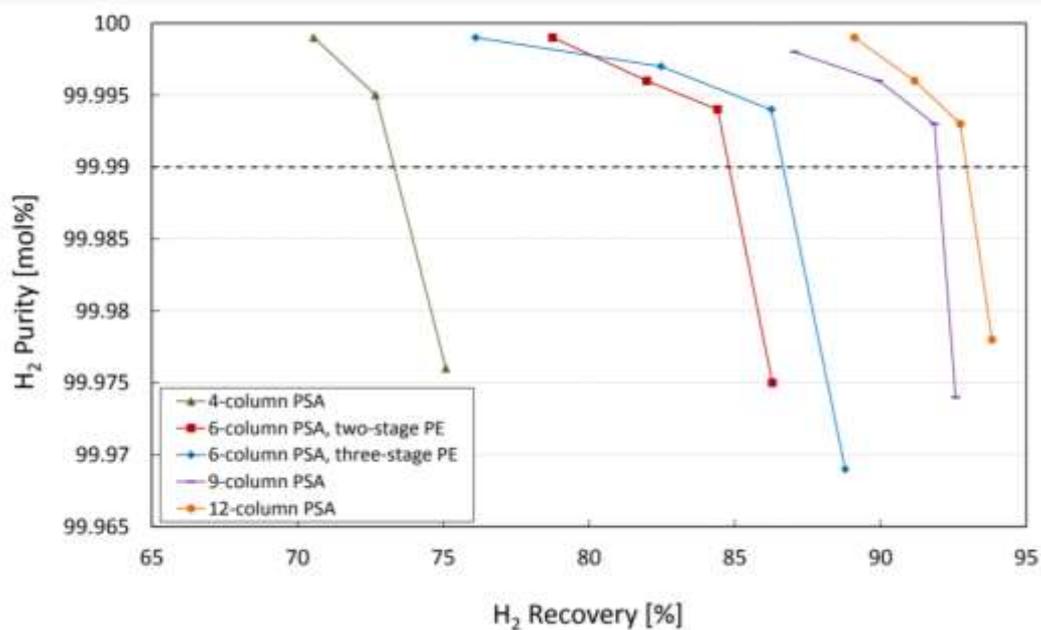


Figura 8. Relación entre la recuperación, la pureza y el número de columnas [53].

También puede observarse como, sacrificando levemente la pureza del  $H_2$ , se consigue perder menos cantidad de producto.

El funcionamiento del conjunto de 12 lechos es una extensión del ciclo de Skarstrom. En el diseño se ha asumido el funcionamiento descrito en la patente de Xu et al (2003) [54], en el que en todo momento hay tres columnas adsorbiendo simultáneamente, dos columnas purgando y

proporcionando purga y cuatro etapas de igualación de presión, como se muestra en la secuencia que aparece en la Figura 9.

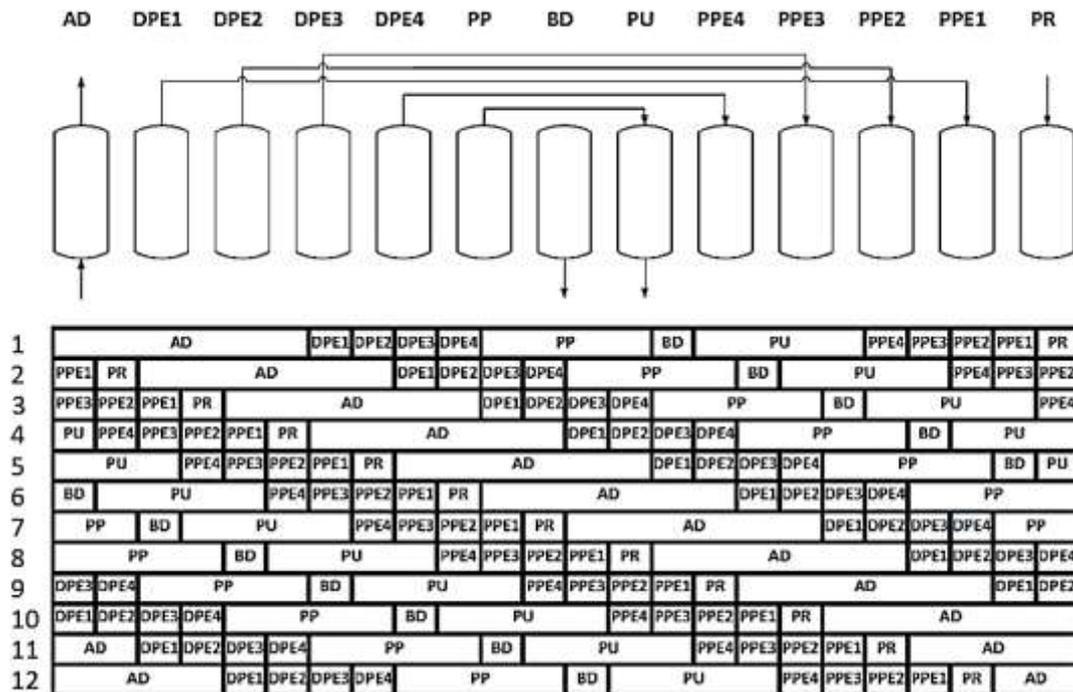


Figura 9. Secuencia del sistema PSA [53].

Si se analiza el ciclo de, por ejemplo, la columna número 1, puede observarse como comienza adsorbiendo impurezas hasta el punto de saturarse. En este momento (a máxima presión, es decir, la de la corriente de alimentación al sistema), comienza a despresurizarse en favor de otras columnas, igualándose las presiones de ambas. El primer equilibrio de presiones lo hace con la columna número 2, que sería la próxima en adsorber y así sucesivamente hasta que termina las 4 etapas de igualación de presiones, en las que la relación entre la pérdida de presión y el tiempo es aproximadamente constante, como se puede observar en la Figura 10. A continuación, se lleva a cabo otra despresurización en favor de la columna número 5 con la diferencia de que parte de esta corriente tendrá que desecharse al no conseguir más equilibrio de presiones. Hasta este punto, las igualaciones de presión se han realizado en paralelo mientras que, en el siguiente paso, deberá purgarse en contracorriente hasta conseguir la presión mínima, que sería la del *off-gas*.

En este punto, comienza la regeneración del lecho, haciendo pasar una cierta cantidad de  $H_2$  puro para liberar las impurezas retenidas en los poros. Este proceso se lleva a cabo a presión constante. Cuando el lecho está completamente limpio, debe prepararse para cuando tenga que adsorber

de nuevo una vez finalizado el ciclo. Para ello, se presuriza de la misma manera que se ha explicado en el párrafo anterior, usando el exceso de presión de las columnas que han terminado su proceso de adsorción y que posteriormente tendrán que regenerarse. Es decir, comienza el camino inverso: 4 etapas de igualación de presiones y una etapa de presurización para alcanzar el valor adecuado, que se hace bloqueando la válvula superior e introduciendo el gas de alimentación. Una vez alcanzada la presión de trabajo, el lecho se encuentra en condiciones de llevar a cabo la adsorción y empezar de nuevo el ciclo.

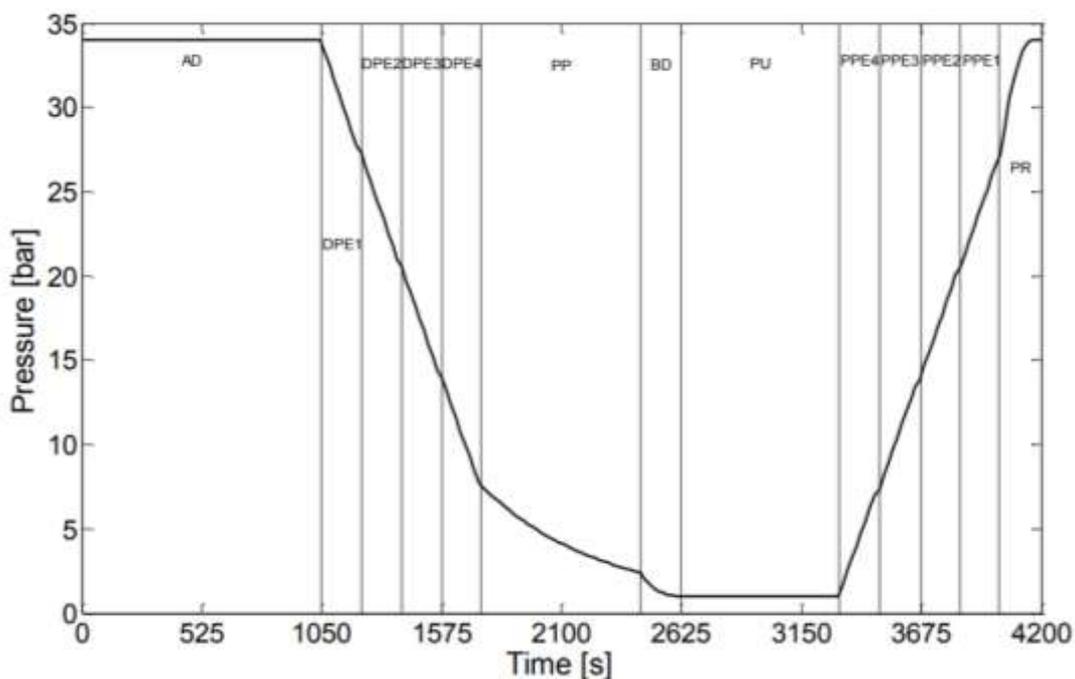


Figura 10. Diagrama p-t del ciclo que sigue una columna [53].

En cuanto a su diseño, los valores experimentales que se han tomado como referencia son los del artículo publicado por Lee et al (1998) [52], en el que se comparan dos adsorbentes distintos en una adsorción multicomponente.

Por un lado, uno de los adsorbentes empleados es carbón activado (AC). El tamaño nominal de la partícula se encuentra entre 1,19 - 3,36 mm, respectivamente. En cuanto a su densidad, tiene un valor de 850 kg/m<sup>3</sup> mientras que la aparente del lecho es de 482 kg/m<sup>3</sup>, lo que hace que tenga un valor de porosidad de 0,433.

Por otro lado, también se utiliza un lecho de Zeolita 5A (Z5A). Las partículas de este adsorbente tienen un tamaño nominal de entre 2,38 y 4,76 mm. La densidad de este tipo de partícula es de

1160 kg/m<sup>3</sup> y la aparente del lecho es de 764 kg/m<sup>3</sup>, siendo la porosidad de este 0,357.

El caudal másico a tratar tiene un valor de 93584,72 kg/h, y la adsorción tiene lugar a 15 bar y 35 °C. El diámetro de las columnas es de 6,33 m y su altura igual a 8,99 m. Cada lecho está compuesto de varias capas de distintos adsorbentes: 0,28 m de Zeolita 5A para eliminar CO<sub>2</sub> y 8,71 m de carbón activo para eliminar CH<sub>4</sub>, CO y N<sub>2</sub>. El tiempo de ruptura se ha definido en 1050 s.

### 3.3.4.2 VÁLVULAS

En un sistema PSA, el conjunto de válvulas juega un papel fundamental en su funcionamiento, demostrándose que su elección puede ser determinante en las cantidades de hidrógeno recuperado y, por tanto, en la economía del proceso. Un buen sistema de control y un buen mantenimiento son fundamentales para la optimización del proceso [55, 56], si bien estos aspectos quedan fuera del alcance de este TFG.

Mediante las válvulas se da paso o no a la circulación de gas entre las distintas columnas que conforman el sistema, y deben disponer de una elevada resistencia mecánica ya que se esperan que realicen muchos ciclos en periodos de tiempo de pocos minutos, además de permitir flujos bidireccionales, que aumenta la probabilidad de que haya daños y rupturas en sus componentes.

En el sistema PSA se van a utilizar dos tipos de válvulas distintas según su uso. Por un lado, se utilizan válvulas de mariposa para las corrientes de alimentación a las columnas, la de *off-gas* y la corriente de hidrógeno puro, mientras que se usarán válvulas de globo en las líneas que unen unas columnas con otras para equilibrar presiones. Por otro lado, se dispondrán de válvulas de alivio de presión en cada columna, para que, en caso de fallo, liberen parte del gas de su interior.

#### Válvulas en corriente de alimentación, *off-gas* y la corriente de H<sub>2</sub> puro [57]

La válvula rotativa 8580 de Fisher™ será la empleada en estas corrientes. Es una válvula de corte que limita su posición a dos estados: abierto o cerrado. Se ha elegido este tipo de válvulas porque, como se recoge en el documento de la referencia [56], no solo aumentan la producción de H<sub>2</sub>, sino que también son válvulas más fiables que permiten funcionar durante un gran número de ciclos sin necesidad de ser reemplazadas, suponiendo un importante ahorro económico. Con respecto a su nivel de estanqueidad, puede conseguirse un cierre hermético tanto si el sello es blando o metálico, independientemente de la caída de presión, que tiene un valor máximo de 51,7 bar.

El tamaño del cuerpo de la válvula que se utiliza en la instalación es de 8", según la norma ASME (DN 200, norma ISO), con un diámetro el eje de 31,8 mm y un rating de presión CL 300, que corresponde una presión nominal de 51,1 bar a la temperatura del proceso. Los materiales usados son:

- Cuerpo de la válvula: AISI 316L
- Eje: NITRONIC® 50
- Camisa y revestimiento de rodamientos: PTFE
- Sello: PTFE
- Empaque: PTFE

La válvula de la Figura 11 utiliza el actuador rotativo de resorte y diafragma Fisher™ 2052.



*Figura 11. Válvula Fisher 8580 con actuador 2052.*

#### Válvulas para equilibrar presiones [58]

Para llevar a cabo esta tarea, se instalarán las válvulas de globo Fisher™ GX de 3 vías, que disponen de un sistema de empaque de teflón que permite el cierre del vástago con grandes caídas de presión.

El tamaño del cuerpo de la válvula que se utilizará en el proceso es de 4", según la norma ASME (DN 100, norma ISO), con un rating de presión de CL300, es decir, tienen una presión nominal de 51,1 bar en las condiciones de temperatura del proceso, con una caída máxima de presión de 4 a 10 bar. Los materiales empleados en la construcción de estas válvulas son:

- Cuerpo de la válvula: AISI 316L
- Vástago: AISI 316L endurecido por deformación
- Obturador: AISI 316L cromado
- Asiento inferior: AISI 316L

Este tipo de válvula, representada en la Figura 12, trae incorporado un actuador de diafragma neumático multirresorte con posicionador.



*Figura 12. Válvula de control Fisher GX de 3 vías con actuador.*

#### Válvulas de alivio [59]

Es el último tipo de válvula del conjunto de ella que componen el sistema PSA. Es una válvula de seguridad que se encuentra tarada a una cierta presión a partir de la cual se abre y libera parte del gas de dentro de la columna para evitar sobrepresiones.

La válvula incorporada la Anderson Greenwood serie 60 Tipo 63B. Se utiliza principalmente por su rango de presión de disparo, ya que es suficiente para las condiciones en las que opera el sistema PSA.

La válvula que puede observarse en la Figura 13 pequeña y resistente, hecha de cobre y con un tamaño nominal de 1/2" en la entrada y 1/4" en la salida, según la norma ASME (DN 15 en la entrada y DN 20 en la salida, según la norma ISO). Se tara a una presión de 25 barg, puesto que el sistema trabaja a 15 bar (16 barg). Por otro lado, el tamaño de los orificios puede ser de 0,497 cm<sup>2</sup> o 0,968 cm<sup>2</sup>, según el valor de la constante de caudal de la válvula K.



*Figura 13. Válvula Anderson Greenwood serie 60 Tipo 63B*

# 4 MEMORIA DE CÁLCULO

En este capítulo se incluyen el balance de materia y energía, así como el diseño de los equipos que intervienen en el proceso de purificación del hidrógeno, cuyo diagrama de bloques se muestra en la Figura 14.

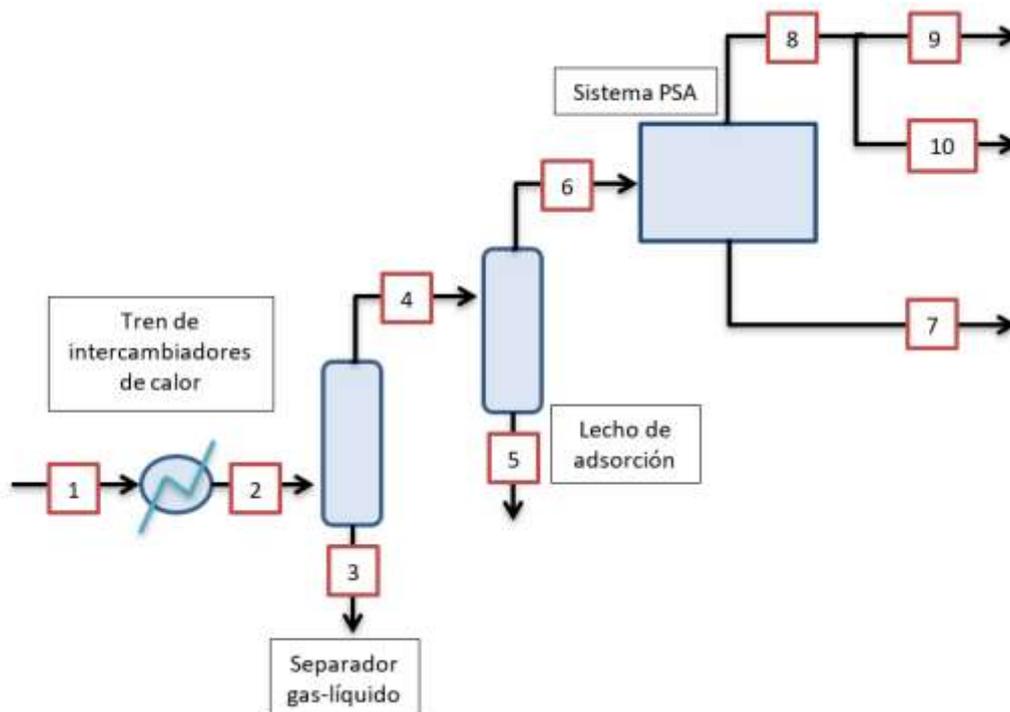


Figura 14. Simplificación esquemática del proceso de purificación de  $H_2$

## 4.1 BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA

La planta se ha diseñado para producir  $100.000 \text{ Nm}^3/\text{h}$  de hidrógeno con una pureza del 99,999 %, que corresponde con la corriente 8. Este es el punto de partida para la resolución del balance de materia.

A continuación, con el valor de la recirculación de la corriente final de hidrógeno (especificado en un 3%), se puede conocer el valor del caudal volumétrico de hidrógeno de la corriente 10 y, por tanto, también de la corriente 9 mediante el uso de las ecuaciones (11) y (12) .

$$Q_{H_2,10} = Q_{H_2,10} \cdot r \quad (11)$$

$$Q_{H_2,9} = Q_{H_2,9} - Q_{H_2,10} \quad (12)$$

donde:

- $Q_{H_2,i}$ : caudal volumétrico de  $H_2$  en la corriente número  $i$  ( $Nm^3/h$ ).
- $r$ : valor de la recirculación (0,03).

Para el cálculo de las corrientes 6 y 7, es necesario hacer uso del valor de la recuperación de hidrógeno que se obtiene al pasar por el sistema PSA. Este valor, al seleccionarse 12 columnas, se ha fijado en 90%, que es conservador. Las ecuaciones (13) y (14) muestran el cálculo de estos valores.

$$Q_{H_2,6} = Q_{H_2,8}/R \quad (13)$$

$$Q_{H_2,7} = Q_{H_2,6} - Q_{H_2,8} \quad (14)$$

donde:

- $R$ : valor de la recuperación (0,90).

Aguas arriba del sistema PSA se encuentra un tren de intercambiadores, un separador líquido-gas y una serie de columnas de adsorción para separar el vapor de agua remanente en la corriente de entrada al sistema PSA. En todas las corrientes que circulan por ellos, la cantidad de  $H_2$  permanece constante ya que no existen más divisores de corrientes, excepto en la corriente 3 y 5. En estos casos, solo circula  $H_2O$  al ser la corriente de salida del separador líquido-gas y del adsorbedor de agua. Esto queda reflejado en las ecuaciones (15) y (16).

$$Q_{H_2,1} = Q_{H_2,2} = Q_{H_2,4} = Q_{H_2,5} = Q_{H_2,7} \quad (15)$$

$$Q_{H_2,3} = Q_{H_2,5} = 0 \quad (16)$$

Una vez conocido el valor del caudal volumétrico de  $H_2$  en todas las corrientes y teniendo en cuenta la composición de la corriente 1 (indicada en la Tabla 6) se pueden calcular los caudales volumétricos del resto de todos los componentes en todas las corrientes, como se indica en las ecuaciones (18) - (19).

$$Q_{j,1} = Q_{H_2,1} \cdot \left( \frac{C_{i,1}}{C_{H_2,1}} \right) \quad (17)$$

$$Q_{j,1} = Q_{j,2} = Q_{j,4} = Q_{j,6} = Q_{j,7} \quad (18)$$

$$Q_{j,3} = Q_{j,5} = 0 \quad (\text{excepto } H_2O) \quad (19)$$

donde:

- $Q_{ji}$ : caudal volumétrico del componente  $j$  en la corriente número  $i$  ( $\text{Nm}^3/\text{h}$ ).
- $C_{i,1}$ : composición del componente  $i$  en la corriente 1 (%)

Como se indicó anteriormente, las corrientes 3 y 5 son los efluentes de los equipos que se han empleado para separar agua, ya sea en forma líquida o vapor. Por ello, una de las simplificaciones que se ha usado es que por dichas corrientes solo sale este componente, estando exento del resto.

Por lo tanto, al llegar al separador líquido-gas, la gran mayoría del agua que entra en el equipo sale en forma de condensado. Para realizar el balance de materia en este equipo se ha hecho uso del simulador de procesos químicos DWSIM. Conocidos los valores de presión, temperatura y composición de la corriente de entrada, así como la temperatura y la presión a la que trabaja el separador, el simulador calcula los flujos másicos, molares y volumétricos que salen tanto por la parte superior como por la inferior. La ecuación de estado que se ha utilizado es la de Peng-Robinson. Además, DWSIM proporciona las propiedades termodinámicas de las diferentes corrientes.

Por lo tanto, se separa el agua previamente condensada para que sea eliminada en forma líquida. En realidad, existe una pequeña disolución de los gases en el condensado, pero al ser tan pequeña (del orden de  $10^{-3}$  a  $10^{-8}$ ) pueden considerarse despreciable.

En la Tabla 11 se muestran los valores de entrada y salida del separador líquido-gas obtenidos mediante DWSIM.

Tabla 11. Valores de las corrientes de entrada y salida al separador líquido-gas.

Valores obtenidos de DWSIM	Corriente 2	Corriente 3	Corriente 4
Fracción molar total en fase vapor	0,70	0	1
Fracción molar total en fase líquida	0,30	1	0
Flujo másico total (kg/s)	44,84	18,69	26,16
Flujo molar total (kmol/s)	3,48	1,04	2,45
Flujo volumétrico total (m <sup>3</sup> /s)	4,19	0,02	4,17
Fracción molar total de H <sub>2</sub>	0,39	3,71E-06	0,56
Fracción molar total de CH <sub>4</sub>	0,19	4,88E-06	0,27
Fracción molar total de CO <sub>2</sub>	0,02	2,15E-04	0,03
Fracción molar total de CO	0,06	2,11E-07	0,08
Fracción molar total de H <sub>2</sub> O	0,30	1,00	3,60E-03
Fracción molar total de N <sub>2</sub>	0,04	1,32E-07	0,05
Fracción molar en fase vapor de H <sub>2</sub>	0,56	0	0,56
Fracción molar en fase vapor de CH <sub>4</sub>	0,27	0	0,27
Fracción molar en fase vapor de CO <sub>2</sub>	0,03	0	0,03
Fracción molar en fase vapor de CO	0,08	0	0,08
Fracción molar en fase vapor de H <sub>2</sub> O	3,60E-03	0	3,60E-03
Fracción molar en fase vapor de N <sub>2</sub>	0,05	0	0,05
Fracción molar en fase líquida de H <sub>2</sub>	3,71E-06	3,71E-06	0
Fracción molar en fase líquida de CH <sub>4</sub>	4,88E-06	4,88E-06	0
Fracción molar en fase líquida de CO <sub>2</sub>	2,15E-04	2,15E-04	0
Fracción molar en fase líquida de CO	2,11E-07	2,11E-07	0
Fracción molar en fase líquida de H <sub>2</sub> O	1,00	1,00	0
Fracción molar en fase líquida de N <sub>2</sub>	1,32E-07	1,32E-07	0

A la salida del separador L-G, se dispone un adsorbedor de agua, cuya finalidad es separar la fracción de agua vapor que ha quedado en equilibrio con el líquido en el separador L-G y que sale con la corriente gaseosa del mismo.

El adsorbente usado es silica gel, que es altamente selectivo hacia el agua, y se asume que esta queda adsorbida en su totalidad y no sale por la corriente de salida número 6. Esto implica que las sucesivas corrientes están exentas de agua, como indica la ecuación (20). A su vez, a pesar de que el lecho puede retener una pequeña cantidad del resto de componentes, no se tienen en cuenta en este diseño al ser una cantidad despreciable.

$$Q_{H_2O,6} = Q_{H_2O,7} = Q_{H_2O,8} = Q_{H_2O,9} = Q_{H_2O,10} = 0 \quad (20)$$

donde:

- $Q_{H_2O,i}$ : caudal volumétrico de H<sub>2</sub>O en la corriente número i (Nm<sup>3</sup>/h).

Para cerrar el balance de materia, se ha hecho otra simplificación. El valor de la pureza que se ha escogido es 99,999% de hidrógeno en la corriente 8, siendo éste el producto listo para comercializarlo o utilizarlo en la misma industria donde se ha producido. A efectos prácticos, un 0,001% de impurezas en la salida del sistema es despreciable y se puede suponer que no están presentes en la corriente de salida del conjunto de lechos, sino que se separan completamente.

Por lo tanto, las cantidades del resto de gases de la mezcla distintos a H<sub>2</sub> de las corrientes 8, 9 y 10 son nulas, como se indica en la ecuación (21).

$$Q_{j,8} = Q_{j,9} = Q_{j,10} = 0 \quad (21)$$

donde:

- $Q_{j,i}$ : caudal volumétrico del componente j en la corriente número i (Nm<sup>3</sup>/h).

Por último, también se han calculado los caudales másicos y molares de todos los componentes en cada una de las corrientes. Para el cálculo del caudal molar, se ha usado la conversión de Nm<sup>3</sup> a kmol. En condiciones normales (273,15 K; 1 atm), 1 kmol ocupa 22,4 (N)m<sup>3</sup>. El cálculo queda definido con la ecuación (22).

$$n_{j,i} = \frac{Q_{j,i}}{conv} \quad (22)$$

donde:

- $n_{j,i}$ : caudal molar del componente j en la corriente número i (kmol/h).
- $Q_{j,i}$ : caudal volumétrico del componente j en la corriente número i (Nm<sup>3</sup>/h).
- $conv$ : valor de la conversión 1 kmol=22,4 Nm<sup>3</sup>.

Por otro lado, para calcular el caudal másico solamente es necesario conocer el peso molecular de cada compuesto y el caudal molar, como relaciona la ecuación (23).

$$m_{j,i} = n_{j,i} \cdot PM_j \quad (23)$$

donde:

- $m_{j,i}$ : caudal másico del componente j en la corriente número i (kg/h).
- $n_{j,i}$ : caudal molar del componente j en la corriente número i (kmol/h).
- $PM_j$ : peso molecular del componente j (kg/kmol)

La Tabla 12 muestra el balance de materia global de la instalación tratada en este TFG. En ella, el valor del caudal molar de agua de la corriente 4 corresponde con un valor obtenido a partir de la simulación realizada con DWSIM.

Tabla 12. Balance de materia.

Número de corriente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Caudal volumétrico (Nm <sup>3</sup> /h)	281436,45	281436,45	83719,37	197717,08	711,56	197005,52	97005,52	100000,00	97000,00	3000,00
Caudal molar (kmol/h)	12565,08	12565,08	3737,76	8827,33	31,77	8795,56	4330,93	4464,62	4330,69	133,94
Caudal másico (kg/h)	161436,16	161436,16	67279,60	94156,56	571,84	93584,72	84655,47	8929,25	8661,37	267,88
Caudal (Nm <sup>3</sup> /h)										
H <sub>2</sub>	111111,11	111111,11	0,00	111111,11	0,00	111111,11	11111,11	100000,00	97000,00	3000,00
CH <sub>4</sub>	52403,47	52403,47	0,00	52403,47	0,00	52403,47	52403,47	0,00	0,00	0,00
CO <sub>2</sub>	6107,17	6107,17	0,00	6107,17	0,00	6107,17	6107,17	0,00	0,00	0,00
CO	16548,46	16548,46	0,00	16548,46	0,00	16548,46	16548,46	0,00	0,00	0,00
H <sub>2</sub> O	84430,94	84430,94	83719,37	711,56	711,56	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
N <sub>2</sub>	10835,30	10835,30	0,00	10835,30	0,00	10835,30	10835,30	0,00	0,00	0,00
Caudal (kmol/h)										
H <sub>2</sub>	4960,69	4960,69	0,00	4960,69	0,00	4960,69	496,07	4464,62	4330,69	133,94
CH <sub>4</sub>	2339,62	2339,62	0,00	2339,62	0,00	2339,62	2339,62	0,00	0,00	0,00
CO <sub>2</sub>	272,66	272,66	0,00	272,66	0,00	272,66	272,66	0,00	0,00	0,00
CO	738,83	738,83	0,00	738,83	0,00	738,83	738,83	0,00	0,00	0,00
H <sub>2</sub> O	3769,52	3769,52	3737,76	31,77	31,7687	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
N <sub>2</sub>	483,76	483,76	0,00	483,76	0,00	483,76	483,76	0,00	0,00	0,00
Caudal (kg/h)										
H <sub>2</sub>	9921,39	9921,39	0,00	9921,39	0,00	9921,39	992,14	8929,25	8661,37	267,88
CH <sub>4</sub>	37433,89	37433,89	0,00	37433,89	0,00	37433,89	37433,89	0,00	0,00	0,00
CO <sub>2</sub>	11997,14	11997,14	0,00	11997,14	0,00	11997,14	11997,14	0,00	0,00	0,00
CO	20687,15	20687,15	0,00	20687,15	0,00	20687,15	20687,15	0,00	0,00	0,00
H <sub>2</sub> O	67851,44	67851,44	67279,60	571,8367	571,8367	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
N <sub>2</sub>	13545,16	13545,16	0,00	13545,16	0,00	13545,16	13545,16	0,00	0,00	0,00

En relación al balance de energía, se han asumido algunas hipótesis y simplificaciones debido a las limitaciones del simulador empleado. En el primer adsorbedor, se ha definido una separación del 100% de agua vapor, mientras que los correspondientes al sistema PSA se ha establecido una separación del 90% de hidrógeno, saliendo puro.

Con respecto a la corriente 5, al estar a 35 °C y 1 atm compuesta por vapor de agua (humedad) contenido en el gas inerte empleado en la regeneración (helio en este caso), el simulador, al definir que separa solo agua y en su totalidad, ofrece los valores en estado líquido. Para ello, se ha calculado el caudal de gas inerte que debería llevar la corriente para que el agua se encuentre en estado vapor contenido en ella, de manera que la presión parcial del agua sea igual o menor a la presión de saturación, que según el software EES tiene un valor de 0,05627 bar. Este cálculo del caudal se ha realizado de una manera independiente a los valores obtenidos tanto en la simulación por DWSIM, como en el balance de materia. Por lo tanto, asumiendo que la presión parcial es igual a su composición molar en la corriente, para un valor de 0,05625 bar que es ligeramente inferior a la presión parcial y cambiándose a valores de composición másica, se



Por lo tanto, usando los valores de entalpía y caudales mostrados en la Tabla 14, así como la suma del calor cedido al exterior por todos los equipos y la potencia mecánica que entra al sistema propio del consumo eléctrico de los motores de las bombas y ventilador, se puede completar el balance de energía, cuyos resultados se muestran en la Tabla 15.

Tabla 15. Balance de energía.

$(\sum m_i \cdot H_i)_e$ (kW)	19538,94
$(\sum m_i \cdot H_i)_s$ (kW)	-46000,34
$Q_{ced}$ (kW)	65539,41
$W_{aport}$ (kW)	166,51
Descuadre BE (kW)	166,38

Como se puede observar, existe un descuadre energético en el sistema, relacionado con el número de cifras significativas utilizadas en los cálculos, así como la incorporación del consumo eléctrico de los motores, que no está contemplado en la simulación.

## 4.2 DISEÑO DE EQUIPOS

En esta sección se realiza el dimensionamiento de los equipos de la instalación, específicamente, el tren de intercambiadores de calor (*coolers*), el separador líquido-gas, los lechos de adsorción y los tanques de almacenamiento. Además de las ecuaciones y el procedimiento de diseño, los datos y resultados se mostrarán mediante tablas.

### 4.2.1 TREN DE INTERCAMBIADORES DE CALOR

La corriente de entrada a la unidad de purificación de hidrógeno tiene una temperatura de 200 °C y debe disminuir hasta 35 °C antes de entrar en el conjunto de los lechos adsorbentes del sistema PSA. Esto se hace mediante un tren de intercambiadores en serie descritos en el capítulo anterior. El procedimiento de diseño se hará a un solo intercambiador ya que, al ser del mismo tipo, la manera en la que se han calculado los parámetros es la misma. Por tanto, se explicará para el primer intercambiador, siendo el proceso extrapolable a los demás, de los que solo se incluirán algunos detalles particulares.

En primer lugar, hay que calcular el caudal que circula por cada tubo, que puede hacerse mediante la ecuación (24). Para aplicarla, basta con conocer el número de tubos, el número de pasos por ellos y el valor del caudal total que circula, que tiene un valor de 44,84 kg/s.

$$\dot{m}_{G,tb} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_G}{N_{tb}}\right)}{N_{pasos}} \quad (24)$$

donde:

- $\dot{m}_{G,tb}$ : caudal másico del gas de síntesis que pasa por cada tubo (kg/s)
- $\dot{m}_G$ : caudal másico total del gas de síntesis (kg/s)
- $N_{tb}$ : número de tubos
- $N_{pasos}$ : número de pasos por tubos

El diámetro interno y externo de los tubos, número de pasos, número de tubos, diámetro de la carcasa y número de hileras por cada intercambiador, se ha calculado en función del calor transferido y usando las relaciones que se exponen en el libro de la asignatura de Tecnología Energética [60] de tal manera que den valores de longitud y velocidades que se asemejen a la realidad. Las tablas de las cuales se han obtenido estos valores han quedado recogidas en el Anexo III: Tablas de Tecnología Energética (18/19, GIQ-US).

Las propiedades termodinámicas de la corriente de proceso se han obtenido de la simulación del proceso realizada en el programa DWSIM, mientras que la corriente de servicio a partir del programa EES. Los números adimensionales que aparecen en las correlaciones experimentales se obtienen a partir de las propiedades de las corrientes que proporciona DWSIM. Así, por ejemplo, el número de Prandtl se calcula a partir de su definición, expresado en la ecuación (25).

$$Pr = \frac{\mu_{G,med} \cdot Cp_{G,med}}{K_{G,med}} \quad (25)$$

donde:

- $Pr$ : número de Prandtl
- $\mu_{G,med}$ : viscosidad media del gas de síntesis (kg/(m·s))
- $Cp_{G,med}$ : calor específico medio del gas de síntesis (kJ/(kg·K))
- $K_{G,med}$ : conductividad térmica del gas de síntesis (kW/(m·K))

En las Tabla 16 – 18 se encuentran recogidos todos los valores de las propiedades de la corriente de proceso que circula por cada intercambiador:

Tabla 16. Propiedades de la corriente de proceso en el intercambiador 1

Propiedades de la corriente del proceso (por tubos)			
$m_G$ (kg/h)	161436,16	Valores medios	
$m_G$ (kg/s)	44,84	$\mu_{G,med}$ (kg/(m·s))	1,52E-05
$m_{tb}$ (kg/s)	0,12	$C_{pG,med}$ (kJ/(kg·K))	2,68
$T_e$ (°C)	200	$K_{G,med}$ (kW/(m·K))	1,20E-04
$T_s$ (°C)	147	Pr	0,34
$\mu_e$ (kg/(m·s))	1,60E-05		
$\mu_s$ (kg/(m·s))	1,45E-05		
$C_{pe}$ (kJ/(kg·K))	2,70		
$C_{ps}$ (kJ/(kg·K))	2,65		
$K_e$ (kW/(m·K))	1,26E-04		
$K_s$ (kW/(m·K))	1,14E-04		
$H_{e,G}$ (kJ/kg)	435,71		
$H_{s,G}$ (kJ/kg)	292,07		

Tabla 17. Propiedades de la corriente de proceso en el intercambiador 2

Propiedades de la corriente del proceso (por tubos)			
$m_G$ (kg/h)	161436,16	Valores medios	
$m_G$ (kg/s)	44,84	$\mu_{L,med}$ (kg/(m·s))	2,50E-04
$m_{tb}$ (kg/s)	0,024	$C_{pL,med}$ (kJ/(kg·K))	4,09
$T_e$ (°C)	147	$K_{L,med}$ (kW/(m·K))	6,81E-04
$T_s$ (°C)	90	$\rho_{L,med}$ (kg/m <sup>3</sup> )	943,13
$\mu_{e,L}$ (kg/(m·s))	1,89E-04	$\rho_{G,med}$ (kg/m <sup>3</sup> )	5,55
$\mu_{s,L}$ (kg/(m·s))	3,11E-04	Pr <sub>L</sub>	1,50
$C_{pe,L}$ (kJ/(kg·K))	4,20	$\rho_{e,L}$ (kg/m <sup>3</sup> )	
$C_{ps,L}$ (kJ/(kg·K))	3,99	920,65	
$K_{e,L}$ (kW/(m·K))	6,87E-04	$\rho_{s,L}$ (kg/m <sup>3</sup> )	
$K_{s,L}$ (kW/(m·K))	6,75E-04	965,61	
$H_e$ (kJ/kg)	292,0	$\rho_{e,G}$ (kg/m <sup>3</sup> )	
$H_s$ (kJ/kg)	-719,66	5,61	
		$\rho_{s,G}$ (kg/m <sup>3</sup> )	
		5,48	

Tabla 18. Propiedades de la corriente de proceso en el intercambiador 3

Propiedades de la corriente del proceso (por tubos)			
$m_G$ (kg/h)	161436,16	Valores medios	
$m_G$ (kg/s)	44,84	$\mu_{L,med}$ (kg/(m·s))	5,17E-04
$m_{tb}$ (kg/s)	0,041	$C_{p,L,med}$ (kJ/(kg·K))	3,95
$T_e$ (°C)	90	$K_{L,med}$ (kW/(m·K))	6,50E-04
$T_s$ (°C)	35	$\rho_{L,med}$ (kg/m <sup>3</sup> )	979,67
$\mu_{e,L}$ (kg/(m·s))	3,11E-04	$\rho_{G,med}$ (kg/m <sup>3</sup> )	5,88
$\mu_{s,L}$ (kg/(m·s))	7,24E-04	$Pr_L$	3,15
$C_{p,e,L}$ (kJ/(kg·K))	3,99	$\rho_{e,L}$ (kg/m <sup>3</sup> )	
$C_{p,s,L}$ (kJ/(kg·K))	3,92	965,62	
$K_{e,L}$ (kW/(m·K))	6,75E-04	$\rho_{s,L}$ (kg/m <sup>3</sup> )	
$K_{s,L}$ (kW/(m·K))	6,24E-04	993,73	
$H_e$ (kJ/kg)	-719,66	$\rho_{e,G}$ (kg/m <sup>3</sup> )	
$H_s$ (kJ/kg)	-1024,14	5,48	
		$\rho_{s,G}$ (kg/m <sup>3</sup> )	
		6,27	

Con respecto a la corriente de servicio, el fluido refrigerante es agua proveniente de una torre de refrigeración, previamente tratada, con el objetivo de reducir el ensuciamiento en el lado de carcasa. El intercambiador se ha diseñado de tal manera que el agua absorba el máximo calor posible, entrando a una temperatura de 25 °C y un 2 bar y saliendo a 40 °C, limitando el salto térmico a 15 °C. Por lo tanto, para calcular el consumo de agua, es necesario conocer el área disponible que hay en la carcasa para el fluido fluya, teniendo en cuenta el diámetro de la carcasa y área que ocupan los tubos. Por lo tanto, resolviendo las ecuaciones (26) - (31) se determina el caudal másico que pasa por cada intercambiador en función de los requerimientos térmicos del proceso en cada equipo.

$$A_{shell} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{shell}^2 \quad (26)$$

$$A_{ocup,b} = N_{tb} \cdot N_{pasos} \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_{e,tb}^2\right) \quad (27)$$

$$A_{disp} = A_{shell} - A_{ocup,tb} \quad (28)$$

$$\dot{m}_W = \frac{\dot{Q}}{Cp_w \cdot (T_{s,w} - T_{e,w})} \quad (29)$$

$$Q_W = \frac{\dot{m}_W}{\rho_w} \quad (30)$$

$$V_W = \frac{Q_W}{A_{disp}} \quad (31)$$

donde:

- $\dot{m}_W$ : caudal másico de agua de refrigeración por la carcasa (kg/s)
- $\dot{Q}$ : calor intercambiado en el proceso (kW)
- $Cp_w$ : calor específico del agua (kJ/(kg·K))
- $T_{e,w}$ : temperatura de entrada del agua (°C)
- $T_{s,w}$ : temperatura de salida del agua (°C)
- $Q_W$ : caudal volumétrico de agua de refrigeración por la carcasa (m<sup>3</sup>/s)
- $\rho_w$ : densidad del agua de torre a la temperatura media de película (kg/m<sup>3</sup>)
- $A_{disp}$ : área disponible para que pase el flujo de agua de refrigeración (m<sup>2</sup>)
- $V_w$ : velocidad del agua de refrigeración en el interior de la carcasa (m/s)
- $A_{carcasa}$ : área interior de la carcasa (m<sup>2</sup>)
- $A_{ocup,tb}$ : área ocupada por los tubos en el interior de la carcasa (m<sup>2</sup>)
- $D_{carcasa}$ : diámetro interior de la carcasa (m)
- $D_{e,tb}$ : diámetro exterior de los tubos (m)
- $N_{tb}$ : número de tubos
- $N_{pasos}$ : número de pasos

El objetivo de este sistema de ecuaciones es calcular la velocidad del agua a través de la carcasa, que debe tener un valor generalmente comprendido entre 1 y 2 m/s.

La potencia térmica que debe ceder el fluido caliente y absorber el frío, asumiendo un rendimiento del 100%, está definida por el caudal másico de la corriente de proceso y por la

diferencia de entalpía que experimenta entre la entrada al intercambiador y la salida. En los intercambiadores 2 y 3 existe condensación, si bien el balance de energía en los equipos se ha realizado teniendo en cuenta las entalpías de las corrientes de entrada y salida, valores que proporciona DWSIM. Por ello, para calcular el calor cedido por el gas, se utiliza la ecuación (32):

$$\dot{Q} = \dot{m}_G \cdot (H_e - H_s) \quad (32)$$

donde:

- $\dot{Q}$ : calor que cede el gas de síntesis (kW).
- $\dot{m}_G$ : caudal másico total del gas de síntesis (kg/s)
- $H_e$ : entalpía del gas de síntesis a la entrada del intercambiador (kJ/kg)
- $H_s$ : entalpía del gas de síntesis a la salida del intercambiador (kJ/kg)

Las propiedades termodinámicas del agua de torre utilizada para refrigerar la corriente del proceso han sido obtenidas del programa informático EES a la presión de 2 bar y a la temperatura media de masa del fluido. Para calcular dicha temperatura, se ha calculado la media aritmética de las temperaturas a la entrada y a la salida de los dos fluidos, como se indica en la ecuación (33).

$$T_{mm,w} = \frac{T_{e,w} + T_{s,w}}{2} \quad (33)$$

donde:

- $T_{mm,w}$ : temperatura media de masa del agua de torre entre la entrada y la salida (°C)
- $T_{e,w}$ : temperatura de entrada del agua de torre a la carcasa (°C)
- $T_{s,w}$ : temperatura de salida del agua de torre de la carcasa (°C)

En las Tabla 19 – 21 se muestran las propiedades termodinámicas del agua de refrigeración a la temperatura media de masa, calculada con anterioridad, y 2 bar para los tres intercambiadores. Estos valores son mostrados para los tres intercambiadores y han sido obtenidos mediante EES. Con ellos, se llevará a cabo el cálculo del coeficiente de película en el lado de la carcasa.

Tabla 19. Propiedades de la corriente de servicio en el intercambiador 1.

Propiedades de la corriente de servicio (por carcasa)					
$T_{e,w}$ (°C)	25	$T_{mm,G}$ (°C)	173,5	$T_{pared}$ (°C)	103
$T_{s,w}$ (°C)	40	$T_{mm,w}$ (°C)	32,5	$T_{m, film}$ (°C)	67,75
$V_w$ (m/s)	1,76	$Q_{vol}$ (m <sup>3</sup> /s)	0,078		
$A_{tot, shell}$ (m <sup>2</sup> )	0,099	$m_w$ (kg/s)	77,92		
$A_{ocup, tb}$ (m <sup>2</sup> )	0,055				
$A_{disp}$ (m <sup>2</sup> )	0,045				
$\rho_w$ (kg/m <sup>3</sup> )	994,90				
$\mu_w$ (kg/m·s)	7,57E-04				
Pr	5,22	$Pr_s$			
$K_w$ (kW/m·K)	6,07E-04		1,73		
$Cp_w$ (kJ/(kg·K))	4,18				

Tabla 20. Propiedades de la corriente de servicio en el intercambiador 2

Propiedades de la corriente de servicio (por carcasa)					
$T_{e,w}$ (°C)	25	$T_{mm,G}$ (°C)	118,5	$T_{pared}$ (°C)	75,5
$T_{s,w}$ (°C)	40	$T_{mm,w}$ (°C)	32,5	$T_{m, film}$ (°C)	54
$V_w$ (m/s)	2,04	$Q_{vol}$ (m <sup>3</sup> /s)	0,73		
$A_{tot, shell}$ (m <sup>2</sup> )	0,73	$m_w$ (kg/s)	723,08		
$A_{ocup, tb}$ (m <sup>2</sup> )	0,38	$A_{tb}$ (m <sup>2</sup> )	1,56E-04		
$A_{disp}$ (m <sup>2</sup> )	0,36				
$\rho_w$ (kg/m <sup>3</sup> )	994,90				
$\mu_w$ (kg/(m·s))	7,57E-04				
Pr	5,22	$Pr_s$			
$K_w$ (kW/(m·K))	6,07E-04		2,41		
$Cp_w$ (kJ/(kg·K))	4,18				

Tabla 21. Propiedades de la corriente de servicio en el intercambiador 3

Propiedades de la corriente de servicio (por carcasa)					
$T_{e,W}$ (°C)	25	$T_{mm,G}$ (°C)	62,5	$T_{pared}$ (°C)	47,5
$T_{s,W}$ (°C)	40	$T_{mm,W}$ (°C)	32,5	$T_{m, film}$ (°C)	40
$V_w$ (m/s)	0,84	$Q_{vol}$ (m <sup>3</sup> /s)	0,22		
$A_{tot, shell}$ (m <sup>2</sup> )	0,81	$m_w$ (kg/s)	217,61		
$A_{ocup, tb}$ (m <sup>2</sup> )	0,55	$A_{tb}$ (m <sup>2</sup> )	4,38E-04		
$A_{disp}$ (m <sup>2</sup> )	0,26				
$\rho_w$ (kg/m <sup>3</sup> )	994,90				
$\mu_w$ (kg/(m·s))	7,57E-04				
Pr	5,217	$Pr_s$			
$K_w$ (kW/(m·K))	6,07E-04		3,80		
$C_{pW}$ (kJ/(kg·K))	4,18				

Sin embargo, el número de Prandtl en la superficie ( $Pr_s$ ) ha sido calculado a 2 bar y a la temperatura de media de la superficie de acuerdo con la correlación usada para los intercambiadores 2 y 3. Para calcular esta temperatura se ha hecho la media aritmética de la temperatura media de masa del agua, obtenida mediante la ecuación (33), y la temperatura media de masa del gas de síntesis. Estos cálculos quedan definidos con las ecuaciones (34) y (35).

$$T_{mm,G} = \frac{T_{e,G} + T_{s,G}}{2} \quad (34)$$

$$T_{pared} = \frac{T_{mm,W} + T_{mm,G}}{2} \quad (35)$$

Para el diseño de intercambiadores, los dos parámetros más importantes que habrá que optimizar son el área de transferencia y el coeficiente global de transferencia de calor, es decir, disminuir el área para reducir costes, maximizando el coeficiente para que el proceso transfiera más calor para un mismo diseño.

Con respecto al área de transferencia, por convenio suele establecerse el área exterior de los tubos y depende de cuántos tubos tenga el intercambiador, el diámetro exterior de los mismos y su longitud. Se puede calcular mediante la ecuación (36):

$$A_e = \pi \cdot D_{e,tb} \cdot L \cdot N_{tb} \quad (36)$$

donde:

- $A_e$ : área de transferencia del calor; por convenio, la externa de los tubos (m<sup>2</sup>)
- $D_{e,tb}$ : diámetro exterior de los tubos (m)
- $L$ : longitud del intercambiador (m)
- $N_{tb}$ : número de tubos

Para calcular el área, se usa la ecuación (43), que expresa la transferencia del calor mediante el método de la diferencia de temperatura media logarítmica:

$$\dot{Q} = A \cdot U \cdot F \cdot DTLM \quad (37)$$

donde:

- $\dot{Q}$ : calor transferido en el proceso (kW)
- $A$ : área de transferencia del calor (m<sup>2</sup>)
- $U$ : coeficiente global de transferencia del calor (kW/(m<sup>2</sup>·K))
- $F$ : factor de corrección del área (-).
- $DTLM$ : diferencia de temperatura media logarítmica (°C)

Al conocerse las temperaturas de entrada y salida al intercambiador, tanto del fluido de proceso como de servicio, la  $DTLM$  queda determinada a partir de la ecuación (38):

$$DTLM = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} \quad (38)$$

donde:

- $DTLM$ : diferencia de temperatura media logarítmica (°C)
- $\Delta T_e$ : diferencia de temperaturas en la sección 1 (°C)
- $\Delta T_s$ : diferencia de temperaturas en la sección 2 (°C)

Las secciones 1 y 2 del intercambiador se definen como las de entrada y salida (Figura 15).



Figura 15. Diagrama de un intercambiador

El cálculo del factor de corrección  $F$  se obtiene resolviendo la ecuación (42), donde previamente se ha debido de calcular los parámetros  $R$ ,  $P$  y  $D$ , usando las ecuaciones (39), (40), y (41), respectivamente.

$$R = \frac{\Delta T_{carc}}{\Delta T_{tb}} \quad (39)$$

$$P = \frac{\Delta T_{tb}}{\Delta T_{m\acute{a}x}} \quad (40)$$

$$D = (1 + R^2)^{1/2} \quad (41)$$

$$F = \frac{D \cdot \ln \frac{1 - R \cdot P}{1 - P}}{(1 - R) \cdot \ln \frac{2 - P \cdot (1 + R - D)}{2 - P \cdot (1 + R + D)}} \quad (42)$$

donde:

- $R$ : parámetro necesario para calcular  $F$
- $P$ : parámetro necesario para calcular  $F$
- $D$ : parámetro necesario para calcular  $F$
- $F$ : factor de corrección de la ecuación de transferencia
- $\Delta T_{carc}$ : diferencia de temperatura del fluido que circula por la carcasa ( $^{\circ}\text{C}$ )
- $\Delta T_{tb}$ : diferencia de temperatura del fluido que circula por los tubos ( $^{\circ}\text{C}$ )
- $\Delta T_{m\acute{a}x}$ : diferencia de temperatura máxima entre ambos fluidos ( $^{\circ}\text{C}$ )

Una vez calculado el factor de corrección  $F$  (ecuación (42)) y la diferencia media de temperatura logarítmica  $DTLM$  (ecuación (38)), solo queda por calcular coeficiente global de transferencia del calor,  $U$ , para poder determinar el valor del área de transferencia, mediante la ecuación (37).

El coeficiente global de transferencia del calor ( $U$ ) depende tanto de las características estructurales del intercambiador como de las condiciones del proceso. Influyen factores como el diámetro de los tubos y su espesor, así como el material del que está construido, que debe de ser un buen conductor térmico para facilitar el intercambio energético en el menor tiempo posible.

Con respecto a las condiciones de los fluidos, una mayor velocidad de circulación aumenta el intercambio, porque aumenta el coeficiente de película o de convección. Asimismo, también depende los fluidos que se utilizan en el proceso. La ecuación (43) es la utilizada para el cálculo de  $U$  es:

$$U = \frac{1}{A_e \cdot \left( \frac{1}{h_i \cdot A_i} + \frac{1}{h_e \cdot A_e} + \frac{F S_i}{A_i} + \frac{F S_e}{A_e} + \frac{\ln(D_{e,tb}/D_{i,tb})}{2 \cdot \pi \cdot K_{acero} \cdot L \cdot N_{tb}} \right)} \quad (43)$$

que simplificada resulta ser la ecuación (44).

$$U = \frac{1}{D_{e,tb} \cdot \left( \frac{1}{h_i \cdot D_{i,tb}} + \frac{1}{h_e \cdot D_{e,tb}} + \frac{F S_i}{D_{i,tb}} + \frac{F S_e}{D_{e,tb}} + \frac{\ln(D_{e,tb}/D_{i,tb})}{2 \cdot K_{acero}} \right)} \quad (44)$$

donde:

- $U$ : coeficiente global de transferencia del calor (kW/(m<sup>2</sup>·K))
- $A_e$ : área de transferencia del calor; por convenio, la exterior de los tubos (m<sup>2</sup>)
- $A_i$ : área interna de transferencia del calor (m<sup>2</sup>)
- $h_i$ : coeficiente de película del lado de los tubos (kW/(m<sup>2</sup>·K))
- $h_e$ : coeficiente de película del lado de la carcasa (kW/(m<sup>2</sup>·K))
- $F S_i$ : factor de ensuciamiento del lado de los tubos (m<sup>2</sup>·K/kW)
- $F S_e$ : factor de ensuciamiento del lado de la carcasa (m<sup>2</sup>·K/kW)
- $D_{e,tb}$ : diámetro exterior de los tubos (m)

- $D_{i,tb}$ : diámetro interior de los tubos (m)
- $K_{acero}$ : conductividad térmica del acero al carbono (kW/(m·K))
- $L$ : longitud del intercambiador (m)
- $N_{tb}$ : número de tubos

Los valores de los factores de ensuciamiento empleados en el cálculo de U se han obtenido de tabla mostrada en el Anexo III: Tablas de Tecnología Energética (18/19, GIQ-US).

En la ecuación (44) todos los datos son conocidos excepto los coeficientes de película. En su cálculo intervienen la geometría de los tubos y su configuración dentro del intercambiador, los caudales que circulan por el intercambiador, las temperaturas de entrada y salida de los dos fluidos y las propiedades termodinámicas de estos evaluadas a su correspondiente temperatura.

#### **Cálculo del coeficiente de película interno**

Se obtiene a partir del número adimensional de Nusselt, que relaciona el calor transferido por convección con el transferido por conducción. Se define mediante la ecuación (45):

$$Nu = h_i \cdot \frac{D_{i,tb}}{K_{G,med}} \quad (45)$$

donde:

- $Nu$ : número de Nusselt
- $h_i$ : coeficiente de película del lado de los tubos (kW/(m<sup>2</sup>·K))
- $D_{i,tb}$ : diámetro interior de los tubos (m).
- $K_{G,med}$ : conductividad térmica del gas de síntesis (kW/(m·K))

Para el cálculo del número de Nusselt se utilizan correlaciones diferentes según los intercambiadores. En el primero, se usa la correlación de Dittus-Boelter para un flujo interno a través de un conducto circular y con convección forzada. Esta correlación es aplicable para un flujo turbulento completamente desarrollado, con un número de Reynolds superior a 10000, un número de Prandtl comprendido entre 0,6 y 160 y una relación L/D mayor a 10. Dicha correlación se expresa mediante la ecuación (46).

$$Nu = 0,023 \cdot Re^{4/5} \cdot Pr^n \quad (46)$$

donde:

- $Nu$ : número de Nusselt
- $Re$ : número de Reynolds
- $Pr$ : número de Prandtl
- $n$ : parámetro igual a 0,3 cuando la temperatura media de masa es superior a la superficial.

El número de Prandtl se obtiene a partir de las propiedades del fluido evaluadas a su temperatura media de masa, como se indicó en la ecuación (25). Por otro lado, el número de Reynolds se calcula mediante la ecuación (47):

$$Re = \frac{4 \cdot \dot{m}_{G,tb}}{\pi \cdot D_{i,tb} \cdot \mu_{G,med}} \quad (47)$$

donde:

- $Re$ : número de Reynolds
- $\dot{m}_{G,tb}$ : caudal másico del gas de síntesis que pasa por cada tubo (kg/s)
- $D_{i,tb}$ : diámetro interior de los tubos (m). En este caso, la dimensión característica.
- $\mu_{G,med}$ : viscosidad media del gas de síntesis (kg/(m·s))

Los resultados obtenidos tras aplicar las ecuaciones anteriores para calcular el coeficiente de película interno para el intercambiador 1 se muestran en la Tabla 22.

Tabla 22. Resultados del cálculo del coeficiente de película interno para el intercambiador 1.

Cálculo de coeficiente de película int	
Re	770587,90
n	0,30
Nu	851,59
$h_i$ (kW/(m <sup>2</sup> ·K))	7,58

Por otro lado, para el segundo y el tercer intercambiador se usa la correlación de Akers, Deans y Crossers, que tiene en cuenta la condensación de vapor de agua en la corriente que circula por el interior de los tubos. Es aplicable para un flujo anular, medio y con una temperatura superficial constante. La correlación se muestra en la ecuación (48).

$$Nu = C \cdot Re^n \cdot Pr_L^{1/3} \quad (48)$$

donde:

- $Nu$ : número de Nusselt
- $Re$ : número de Reynolds
- $Pr_L$ : número de Prandtl de la fase líquida
- $C$ : parámetro igual a 0,0265 si  $Re$  es superior a  $5 \cdot 10^4$  y de 5,03 si es inferior
- $n$ : parámetro igual a 0,8 si  $Re$  es superior a  $5 \cdot 10^4$  y 0,333 si es inferior

Al igual que en el caso anterior, el número de Prandtl se ha calculado usando la ecuación (25) pero en base a sus propiedades termodinámicas correspondientes a la fase líquida, de acuerdo con la correlación usada para los el cálculo del coeficiente de película interno en los intercambiadores 2 y 3. Estas propiedades se han obtenido del simulador DWSIM y representadas en las Tabla 20 y 21.

A continuación, es necesario calcular el número de Reynolds usando la ecuación (49) que usa el flujo másico superficial equivalente por tubos de la corriente, calculado con la ecuación (50), teniendo en cuenta el caudal másico superficial de líquido y el de gas, calculados mediante las ecuaciones (51) y (52). Para ello, se requiere el valor de la sección transversal de los tubos, según la ecuación (53) y el valor del título de vapor ( $x$ ), que indica fracción de vapor que hay en la corriente, de modo que  $x=1$  significa que todo está en fase vapor y  $x=0$  que está es fase líquida. El valor empleado es la media aritmética entre el título de vapor en la entrada y el de la salida, como se expresa en la ecuación (54).

$$Re = \frac{G_e \cdot D_{i,tb}}{\mu_{L,med}} \quad (49)$$

$$G_e = G_L + G_G \cdot \left( \frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{1/2} \quad (50)$$

$$G_L = \frac{\dot{m}_{tb}}{A_{tb}} \cdot (1 - x_m) \quad (51)$$

$$G_G = \frac{\dot{m}_{tb}}{A_{tb}} \cdot x_m \quad (52)$$

$$A_{tb} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{i,tb}^2 \quad (53)$$

$$x_m = (x_e + x_s) \cdot \frac{1}{2} \quad (54)$$

donde:

- $x_m$ : valor medio del título de vapor entre la entrada y la salida
- $x_e$ : título de vapor a la entrada
- $x_s$ : título de vapor a la salida
- $\dot{m}_{tb}$ : flujo másico total que circula por los tubos (kg/s)
- $G_L$ : flujo másico superficial del líquido (kg/(s·m<sup>2</sup>))
- $G_G$ : flujo másico superficial del gas (kg/(s·m<sup>2</sup>))
- $A_{tb}$ : área de la sección transversal de los tubos (m<sup>2</sup>)
- $\rho_L$ : densidad de la fase líquida (kg/m<sup>3</sup>)
- $\rho_G$ : densidad de la fase gas (kg/m<sup>3</sup>)
- $Re$ : número de Reynolds
- $D_{i,tb}$ : diámetro interior de los tubos (m)
- $\mu_{L,med}$ : valor medio de la viscosidad de la fase gas entre la entrada y la salida (kg/(m·s))

Los valores de los títulos de vapor para los intercambiadores 1 y 2 se muestran en las Tabla 23 y 24 respectivamente, mientras que el resultado del cálculo del coeficiente de película interno para ambos intercambiadores aparece en las Tabla 25 y 26.

Tabla 23. Valores del título de vapor en el intercambiador 2

$x_e$	1	$x_m$
$x_s$	0,76	0,87

Tabla 24. Valores del título de vapor en el intercambiador 3

$x_e$	0,76	$x_m$
$x_s$	0,70	0,72

Tabla 25. Resultados del cálculo del coeficiente de película interno para el intercambiador 2

Cálculo de coeficiente de película int	
$G_L$ (kg/(s·m <sup>2</sup> ))	20,09
$G_G$ (kg/(s·m <sup>2</sup> ))	131,13
$G_e$ (kg/(s·m <sup>2</sup> ))	1730,01
Re	97702,96
C	0,027
n	0,80
Nu	297,81
$h_i$ (kW/(m <sup>2</sup> ·K))	14,39

Tabla 26. Resultados del cálculo del coeficiente de película interno para el intercambiador 3

Cálculo de coeficiente de película int	
$G_L$ (kg/(s·m <sup>2</sup> ))	26,54
$G_G$ (kg/(s·m <sup>2</sup> ))	67,77
$G_e$ (kg/(s·m <sup>2</sup> ))	901,412
Re	41170,71
C	5,03
n	0,33
Nu	254,52
$h_i$ (kW/(m <sup>2</sup> ·K))	7,00

### Cálculo del coeficiente de película externo

El cálculo del coeficiente de película externo es el mismo para los tres intercambiadores. En este caso influye la geometría externa de los tubos y su estructura dentro de la carcasa. El número de Nusselt se calcula según la ecuación (50):

$$Nu = h_e \cdot \frac{D_{e,tb}}{K_W} \quad (50)$$

donde:

- $Nu$ : número de Nusselt
- $h_e$ : coeficiente de película del lado de la carcasa (kW/(m<sup>2</sup>·K))
- $D_{e,tb}$ : diámetro exterior de los tubos (m). En este caso, la dimensión característica.
- $K_W$ : conductividad térmica del agua de refrigeración (kW/(m·K))

Para obtener el valor de  $Nu$ , se ha elegido la correlación de Zhukauskas para un flujo externo con un banco de tubos, con convección forzada. La correlación se expresa con la ecuación (51). Hay que recordar que la configuración de los tubos en el interior se ha diseñado de manera que sea cuadrada y con una longitud de paso tanto longitudinal como transversal de un 25% superior al diámetro exterior de los tubos. Además, para este cálculo también se tendrá que tener cuenta el número de hileras de tubos en la sección del intercambiador. Esta ecuación es aplicable para un valor de Reynolds comprendido entre  $10^3$  y  $2 \cdot 10^6$  y un valor del número de Prandtl comprendido entre 0,7 y 500.

$$Nu = C_1 \cdot C_2 \cdot Re^m \cdot Pr^{0,36} \cdot \left(\frac{Pr}{Pr_s}\right)^{1/4} \quad (51)$$

donde:

- $Nu$ : número de Nusselt.
- $C_1$ : coeficiente relacionado con la distribución de tubos. Para los intercambiadores diseñados, tiene un valor de 0,27.
- $C_2$ : coeficiente relacionado con el número de hileras de tubos. Para los intercambiadores diseñados, tiene un valor de 1.
- $m$ : coeficiente relacionado con la distribución de tubos. Para los intercambiadores diseñados, tiene un valor de 0,63.
- $Re$ : número de Reynolds.
- $Pr$ : número de Prandtl.

Todas las propiedades termodinámicas requeridas se han obtenido del programa informático EES evaluadas a 2 bar y a la temperatura media de masa del agua que, como se calculó mediante la ecuación (33), tiene un valor de 32,5 °C. En cambio, como se explicó con anterioridad, el valor de  $Pr_s$  ha sido evaluado a 2 bar y a la temperatura de la superficie, calculada mediante la ecuación (35).

El número de Reynolds del flujo de agua de refrigeración a través de la carcasa se ha calculado en este caso mediante la ecuación (52):

$$Re = \frac{\rho_w \cdot D_{e,tb} \cdot V_w}{\mu_w} \quad (52)$$

donde:

- $Re$ : número de Reynolds.
- $\rho_w$ : densidad del agua a la temperatura media de película ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ).
- $D_{e,tb}$ : diámetro exterior de los tubos (m). En este caso, la dimensión característica.
- $V_w$ : velocidad del agua en el interior de la carcasa (m/s).
- $\mu_w$ : viscosidad del agua ( $\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$ ).

Las Tabla 27 – 29 muestran los resultados obtenidos para el cálculo del coeficiente de película externo para los distintos intercambiadores

Tabla 27. Resultados del cálculo del coeficiente de película externo para el intercambiador 1

Cálculo de coeficiente de película ext	
Re	41992,66
C1	0,27
C2	0,99
m	0,63
Nu	521,90
$h_e$ ( $\text{kW}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$ )	16,62

Tabla 28. Resultados del cálculo del coeficiente de película externo para el intercambiador 2

Cálculo de coeficiente de película ext	
Re	42625,72
C1	0,27
C2	1
m	0,63
Nu	490,08
he (kW/(m <sup>2</sup> ·K))	18,74

Tabla 29. Resultados del cálculo del coeficiente de película externo para el intercambiador 3

Cálculo de coeficiente de película ext	
Re	27943,89
C1	0,27
C2	1
m	0,63
Nu	335,06
he (kW/(m <sup>2</sup> ·K))	8,01

### Cálculo del coeficiente global de transferencia de calor

Usando las ecuaciones (37), (36) y (44) se puede obtener el área total de transferencia y del coeficiente global de transferencia de calor para cada intercambiador de calor. Los resultados obtenidos se muestran en las Tabla 30 – 32.

Tabla 30. Resultados del cálculo del área y el coeficiente global de transferencia de calor para el intercambiador 1

Cálculo de A y U	
U (kW/(m <sup>2</sup> ·K))	0,99
A (m <sup>2</sup> )	46,93

Tabla 31. Resultados del cálculo del área y el coeficiente global de transferencia de calor para el intercambiador 2

Cálculo de A y U	
U (kW/(m <sup>2</sup> ·K))	1,50
A (m <sup>2</sup> )	367,32

Tabla 32. Resultados del cálculo del área y el coeficiente global de transferencia de calor para el intercambiador 3

Cálculo de A y U	
U (kW/(m <sup>2</sup> ·K))	1,25
A (m <sup>2</sup> )	702,41

Por último, conocido el valor del área, se puede calcular la longitud de los tubos,  $L$ , de los intercambiadores mediante la ecuación (36). Este valor, según las recomendaciones de diseño de intercambiadores expuestas en [60] debe ser de entre 5 y 10 veces el valor del diámetro de la carcasa, requisito que se ha cumplido en los tres equipos.

#### 4.2.2 SEPARADOR LÍQUIDO-GAS

Para el dimensionamiento del separador líquido-gas vertical colocado aguas abajo del intercambiador de calor se ha seguido una metodología ampliamente conocida según se describe en [51].

Las condiciones de la corriente de entrada al separador se indican en la Tabla 10, ubicada en la sección 3.3.2 de la memoria descriptiva.

En primer lugar, es necesario calcular la velocidad terminal de las gotas de líquido contenidas en la corriente de entrada al equipo. Para ello, se utiliza la ecuación (53):

$$U_t = 0,07 \cdot \left( \frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (53)$$

donde:

- $U_t$ : velocidad terminal del líquido (m/s)
- $\rho_L$ : densidad de la fase líquida ( $\text{kg/m}^3$ )
- $\rho_V$ : densidad de la fase gas ( $\text{kg/m}^3$ )

Para facilitar la separación del agua del resto de componentes gaseosos de la mezcla, se opta por incorporar un demister o eliminador de nieblas que capture las potenciales gotas de líquido que escapen por la parte superior del separador. Por ello, el valor de la velocidad del líquido se hace corresponder con el de la velocidad terminal, como se muestra en la ecuación (54):

$$U_s = U_t \quad (54)$$

donde:

- $U_s$ : velocidad terminal del líquido corregida (m/s)
- $U_t$ : velocidad terminal del líquido (m/s)

A partir de la velocidad terminal se puede calcular el diámetro mínimo del separador, mediante la relación que aparece en la ecuación (55).

$$D_{\min} = \sqrt{\frac{4 \cdot Q_G}{\pi \cdot U_s}} \quad (55)$$

donde:

- $D_{\min}$ : diámetro mínimo del separador (m)
- $Q_G$ : caudal de la fase gas ( $\text{m}^3/\text{s}$ )
- $U_s$ : velocidad terminal del líquido corregida (m/s)

El tiempo de retención del líquido dentro del separador se fija en 10 min, por lo que el volumen que ocupa el líquido se obtiene a partir de la ecuación (56):

$$V_L = Q_L \cdot (t_H \cdot 60) \quad (56)$$

donde:

- $V_L$ : volumen que ocupa la fase líquida en el separador ( $m^3$ )
- $Q_L$ : caudal de la fase líquida ( $m^3/s$ )
- $t_H$ : tiempo de retención de la fase líquida (min).

El nivel de la fase líquida puede calcularse según la ecuación (57):

$$H_L = \frac{V_L}{\frac{\pi}{4} \cdot D^2} \quad (57)$$

donde:

- $H_L$ : nivel de la fase líquida (m)
- $V_L$ : volumen ocupado por la fase líquida ( $m^3$ )
- $D$ : diámetro de diseño del separador (m)

En la metodología, se propone una altura entre el nivel del líquido y la entrada de la corriente por la boquilla ( $H_1$ ) que debe ser el mayor valor de entre  $D_{min}/2$  y 0,6 m, mientras que entre la boquilla y la rejilla colocada para retirar aerosoles ( $H_2$ ) es el mayor valor de entre  $D_{min}$  y 1 m. Además, hay que tener en cuenta que, si se requiere colocar un interruptor de nivel, hay que dejar un espacio ( $H_3$ ) de 0,3 m. Por su parte, la colocación de la rejilla también necesita 0,4 m ( $H_4$ ) aproximadamente para su desempeño. Todos ellos son valores que hay que tener en cuenta para el cálculo final de la altura del equipo, expresado en la ecuación (58).

$$H_{total} = H_L + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 \quad (58)$$

Los resultados obtenidos tras aplicar las ecuaciones anteriores y resolver el diseño del separador L-G se muestran en la Tabla 33.

Tabla 33. Resultado del diseño del separador líquido-gas

Cálculos de diseño	
$U_t$ (m/s)	0,88
$U_s$ (m/s)	0,88
$D_{\min}$ (m)	2,46
$H_{\text{controlador}}$ (m)	0,30
$H_{\text{salida gas}}$ (m)	0,40
$H_{\text{encima boquilla}}$ (m)	2,46
$H_{\text{boquilla}}$ (m)	1,23
$t_H$ (min)	10,00
$V_L$ (m <sup>3</sup> )	11,28
$H_L$ (m)	2,38
$H_{\text{total}}$ (m)	6,76

#### 4.2.3 ADSORBEDOR DE SILICA GEL

El dimensionamiento de los adsorbedores, tanto el de silica gel y como de los que componen el sistema PSA, se han realizado en base a artículos publicados en revistas científicas. En el caso del lecho de silica gel empleado para eliminar el vapor de agua de la corriente de gas, se ha utilizado el documento [61].

A la hora de hacer un escalado de un estudio experimental para implantar sus resultados en la industria hay que tener en cuenta una serie de aspectos. En primer lugar, las condiciones de operación reproducidas en el experimento deben ser las mismas que las que se desean implantar a escala industrial, esto es, misma temperatura y presión, así como la composición del gas a tratar.

Para realizar el diseño del adsorbedor de silica gel se ha tomado como referencia el artículo anteriormente citado, asumiendo una serie de limitaciones que condicionan los resultados finales del diseño final del adsorbedor. Por lo tanto, aunque el procedimiento seguido es el correcto, para obtener unos resultados más realistas habría sido necesario haber realizado una experiencia en laboratorio para permitir un posterior escalado en las mismas condiciones operativas.

La primera diferencia que se tiene reside en el gas portador, que para el gas tratado en el experimento es helio, mientras que en el gas industrial se trata de una mezcla de metano, dióxido

de carbono, monóxido de carbono, hidrógeno y nitrógeno procedente de una etapa de *steam reforming*. Ambos gases tienen propiedades y pesos moleculares distintos que afectan al cálculo y diseño de la columna.

Por otro lado, las condiciones operativas de presión y temperatura también difieren (Tabla 34 y 35).

Tabla 34. Condiciones de operaciones del estudio experimental

p (bar)	1,24
T (K)	293

Tabla 35. Condiciones de operaciones del caso industrial

p (bar)	15
T (K)	308

Además, la cantidad de adsorbato (vapor de agua) en la corriente tratada es distinta para ambos casos (Tabla 36).

Tanto la diferencia entre los valores de presión y temperatura, como en la composición de la corriente gaseosa hace que no pueda cumplirse un requisito fundamental en el escalado de torres de adsorción: mantener un caudal másico superficial de adsorbato constante. De esta manera, la longitud del lecho sin usar, que se explicará más adelante, no se mantiene estrictamente constante y no sería la misma en ambos casos.

Tabla 36. Comparativa de los valores de composición del gas experimental y el industrial

	Composición experimental		Composición industrial	
	%vol	%masa	%vol	%masa
Gas portador	98,47%	93,46%	99,64%	99,39%
H <sub>2</sub> O	1,53%	6,54%	0,36%	0,61%

A continuación, se describe del procedimiento de cálculo para el escalado de los valores experimentales, una vez comentadas las diferencias y limitaciones del mismo.

En primer lugar, son necesarios conocer los valores de los caudales máscicos tanto del gas experimental como del industrial. En la Tabla 37 se muestran los valores experimentales recogidos del artículo [61].

Tabla 37. Datos experimentales

$Q_{exp}$ (SLPM)	$Q_{exp}$ (m <sup>3</sup> /s)	$D_{exp}$ (m)	$A_{exp}$ (m <sup>2</sup> )
1,92	0,00002654	0,02	0,00031416

$\rho_b$ (g/cm <sup>3</sup> )	$\rho_b$ (kg/m <sup>3</sup> )
0,854	0,854

$P_w^o$ (bar)	0,019	$L_{exp}$ (m)	0,15
---------------	-------	---------------	------

Mediante la ecuación (59) se obtiene la fracción molar o volumétrica del agua en la corriente.

$$P_w^o = P_{exp} \cdot x_w \quad (59)$$

donde:

- $P_w^o$ : presión de vapor del agua en las condiciones del experimento (bar)
- $P_{exp}$ : presión de la corriente gaseosa en el experimento (bar)
- $x_w$ : fracción molar o volumétrica de agua en el experimento.

A partir de la composición volumétrica de la corriente y del caudal volumétrico total, puede obtenerse el caudal volumétrico individual de cada componente. En unidades máscicas, se ha utilizado la ecuación (60).

$$P \cdot Q_i = \frac{m_i}{PM_i} \cdot R \cdot T \quad (60)$$

donde:

- $P$ : presión de la corriente gaseosa (atm)
- $Q_i$ : caudal volumétrico del componente  $i$  (m<sup>3</sup>/s)

- $m_i$ : caudal másico del componente i (kg/s)
- $PM_i$ : peso molecular del componente i (kg/mol)
- $R$ : constante universal de los gases ideales (atm·L/(mol·K))

Los resultados obtenidos para el cálculo del caudal másico de cada componente del gas experimental (He y H<sub>2</sub>O) se encuentran recogidos en la Tabla 38. Una vez obtenidos, se procede al cálculo del área y del diámetro de la columna industrial. Este escalado se lleva a cabo asumiendo que la velocidad superficial en ambos casos es la misma. Por lo tanto, haciendo uso de las ecuaciones (61) - (63) se puede conocer sus valores.

$$\frac{Q_{ind}}{A_{ind}} = \frac{Q_{exp}}{A_{exp}} \quad (61)$$

$$A_{exp} = \frac{4}{\pi} \cdot D_{exp}^2 \quad (62)$$

$$A_{ind} = \frac{4}{\pi} \cdot D_{ind}^2 \quad (63)$$

donde:

- $Q_{ind}$ : caudal volumétrico de la corriente industrial (m<sup>3</sup>/s)
- $Q_{exp}$ : caudal volumétrico de la corriente experimental (m<sup>3</sup>/s)
- $A_{ind}$ : área de la sección transversal del lecho industrial (m<sup>2</sup>)
- $A_{exp}$ : área de la sección transversal del lecho experimental (m<sup>2</sup>)
- $D_{ind}$ : diámetro de la columna industrial (m)
- $D_{exp}$ : diámetro de la columna experimental (m)

El caudal volumétrico del gas industrial ha sido calculado usando la ecuación de los gases ideales. Se ha usado esta ecuación de estado por dos motivos fundamentales. El primero de ellos, porque al no estar a una presión excesivamente alta, la diferencia en los valores obtenidos con respecto a otra ecuación de estado más precisa (como la de Peng-Robinson usada en la simulación) es muy pequeña y despreciable en los resultados finales. La segunda, porque al haberse realizado los cálculos en hojas de cálculos, su facilidad de uso compensa las mínimas diferencias con los valores

obtenidos en la simulación. A modo de ejemplo, el caudal volumétrico de la corriente de entrada a este adsorbedor siguiendo la ecuación de estado de Peng-Robinson y obtenido mediante el simulador es de 4,17 m<sup>3</sup>/h, mientras que el valor obtenido en la hoja de cálculo usando gases ideales es de 4,20 m<sup>3</sup>/h, lo que representa un error relativo de 0,72%.

Para el cálculo de la longitud de la columna, es necesario conocer los caudales individuales de los componentes, tanto en condiciones experimentales como industriales, así como la curva de ruptura experimental. De ella se obtendrá la información sobre los tiempos de ruptura y estequiométrico necesarios para calcular la capacidad de adsorción del adsorbente (silica gel, en este caso).

La longitud real de la columna industrial se calcula como la suma de la longitud del lecho sin usar y la longitud del lecho en el momento de parar la operación de adsorción (ruptura), como expresa la ecuación (64).

$$L = LUB + LES \quad (64)$$

donde:

- $L$ : longitud real de la columna industrial (m)
- $LUB$ : longitud del lecho sin usar (m)
- $LES$ : longitud del lecho en el punto de ruptura (m)

La longitud del lecho sin usar ( $LUB$ ) se calcula usando los valores experimentales y se asume que es la misma que para el caso industrial. Se calcula usando la ecuación:

$$LUB = L_{exp} \cdot \left(1 - \frac{q_{b,i}}{q_{s,i}}\right) \quad (65)$$

donde:

- $LUB$ : longitud del lecho sin usar (m)
- $L_{exp}$ : longitud del lecho experimental (m)
- $q_{b,i}$ : capacidad de adsorción en el momento de ruptura experimental (kg/kg<sub>adsorbente</sub>)
- $q_{s,i}$ : capacidad de adsorción en el momento de equilibrio (kg/kg<sub>adsorbente</sub>)

Los valores de la capacidad de adsorción para estas condiciones experimentales se pueden obtener conociendo los caudales máscos de cada componente, sus tiempos de ruptura y estequiométricos, la densidad aparente del lecho, el área de la sección transversal y la longitud de la columna, todos ellos referidos al caso experimental. Por lo tanto, aplicando las ecuaciones (66) y (67) se pueden conocer los valores de  $q_b$  y  $q_s$ .

$$q_{b,i} = \frac{m_{ex,i} \cdot t_{b,i}}{A_{exp} \cdot L_{exp} \cdot \rho_b} \quad (66)$$

$$q_{s,i} = \frac{m_{exp,i} \cdot t_{s,i}}{A_{exp} \cdot L_{exp} \cdot \rho_b} \quad (67)$$

donde:

- $q_{b,i}$ : capacidad de adsorción en el momento de ruptura experimental (kg/kg<sub>adsorbente</sub>)
- $q_{s,i}$ : capacidad de adsorción en el momento de equilibrio (kg/kg<sub>adsorbente</sub>)
- $m_{exp,i}$ : caudal máscico experimental del componente i (kg/s)
- $t_{b,i}$ : tiempo de ruptura del componente i (s)
- $t_{s,i}$ : tiempo estequiométrico del componente i (s)
- $A_{exp}$ : área de la sección transversal del lecho experimental (m<sup>2</sup>)
- $L_{exp}$ : longitud del lecho experimental (m)
- $\rho_b$ : densidad aparente del lecho (kg/m<sup>3</sup>)

Los resultados tanto de las capacidades de adsorción, como de la longitud de lecho sin usar anteriormente comentada pueden verse en la Tabla 38.

Para conocer los tiempos de ruptura y estequiométricos del caso experimental es necesario disponer de la curva de ruptura, que se encuentra en el artículo de referencia. En las condiciones del experimento, la adsorción se realizó en una columna de 15 cm de longitud y un diámetro interior de 2 cm, pasando a través de ella un caudal de 1,92 SLPM. Por otro lado, la temperatura del proceso fue de 20 °C mientras que la presión se fijó en 1,24 bar. El gas de entrada estaba compuesto en un 1,53 % de vapor de agua y un 98,47 % de He en volumen, que era el gas portador inerte en el proceso de adsorción.

En cuanto a la curva de ruptura de adsorción, se muestra en la Figura 16 junto a otras experiencias realizadas en otras condiciones operativas. El caso elegido como referencia para el diseño de la columna corresponde con el denominado como Run A1.

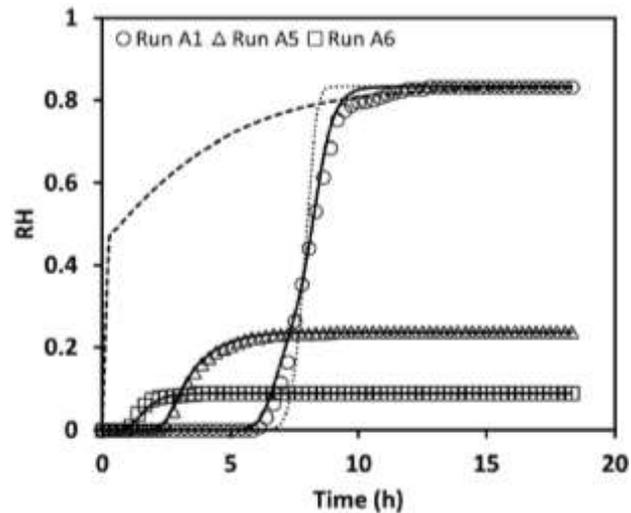


Figura 16. Curva de ruptura experimental del proceso de adsorción

El tiempo estequiométrico es 7,97 h mientras que el de ruptura es 5,61 h, valores calculados mediante interpolación lineal y justificados más adelante.

En la Figura 17 se muestra la curva de ruptura para la regeneración. En ella, se puede observar que un lecho experimental tarda aproximadamente 24 h en regenerarse completamente y quedarse exento de humedad en condiciones para volver a adsorber. En este caso, la prueba usada como referencia es la denominada como *Run D1*.

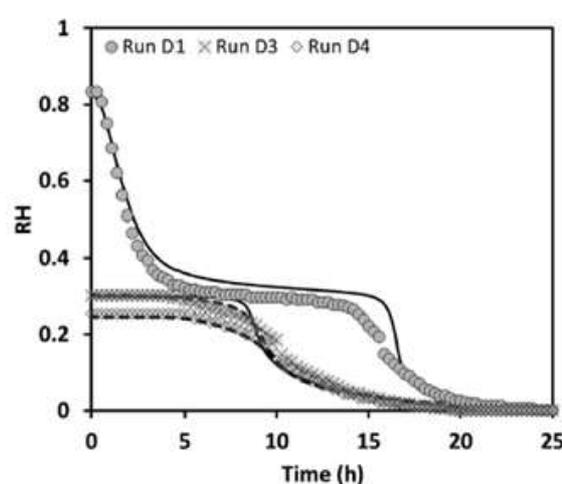


Figura 17. Curva de ruptura experimental del proceso de regeneración

Con respecto al gas industrial, existen una serie de diferencias importantes al usado en el experimento, que influyen directamente en los valores obtenidos en el diseño de la torre, por lo que se han asumido simplificaciones, como se ha mencionado antes.

Está compuesto por hidrógeno (56,2%), dióxido de carbono (3,09%), monóxido de carbono (8,37%), nitrógeno (5,48%), metano (26,5%) y vapor de agua (0,36%). Por lo tanto, se ha asumido que la mezcla se comporta como si estuviese compuesto por dos gases: vapor de agua en un 0,36% y el gas portador, formado por el resto de gases, con una composición total de 99,64%, todos ellos valores volumétricos o molares.

Para una mejor visualización de la curva, se ha usado una herramienta web llamada *Web Plot Digitizer* con la que, estableciendo los ejes sobre la gráfica y marcando la curva con puntos, se pueden obtener los valores de la misma tanto en el eje de abscisas como en el de ordenadas. Dichos valores se recogen en el Anexo I: Curva de ruptura del adsorbedor de silica gel. El valor del tiempo estequiométrico corresponde con el tiempo para el que la concentración de salida es la mitad que la concentración de la entrada, mientras que el tiempo de ruptura se ha definido como el tiempo correspondiente al momento en el que la concentración de salida corresponde a un 0,1% que la de la entrada.

Para esos valores de concentración, se ha obtenido el valor de los respectivos tiempos observando el anexo citado anteriormente y realizando una extrapolación lineal, cuyos resultados se recogen en la Tabla 38.

Por último, es necesario calcular el valor de la longitud del lecho industrial en el punto de ruptura (*LES*). La fórmula utilizada es similar a la que se usó en cálculos anteriores, pero empleando valores industriales. Por ello, para el cálculo de *LES* se ha empleado la ecuación (68).

$$LES = \frac{m_{ind,i} \cdot t_{b,ind,i}}{A_{ind} \cdot q_{s,i} \cdot \rho_b} \quad (68)$$

donde:

- *LES*: longitud del lecho completamente saturado (m)
- $m_{ind,i}$ : caudal másico industrial del componente i (kg/s)
- $t_{b,ind,i}$ : tiempo de ruptura industrial del componente i (s)
- $A_{ind}$ : área de la sección transversal del lecho industrial (m<sup>2</sup>)

- $q_{s,i}$ : capacidad de adsorción en el momento de equilibrio ( $\text{kg}/\text{kg}_{\text{adsorbente}}$ )
- $\rho_b$ : densidad aparente del lecho ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )

Todos los cálculos anteriormente citados se recogen en la Tabla 38.

Tabla 38. Resultados del diseño de la columna de silica gel

Silica gel	$m_{i, \text{exp}}$ (kg/s)	$m_{i, \text{ind}}$ (kg/s)	$t_{s,i}$ (s)	$q_{s,i}$ (kg/kg)	$t_{b,i}$ (s)	$q_{b,i}$ (kg/kg)	$q_{b,i}/q_{s,i}$	LUB <sub>i</sub> (m)	LES <sub>i</sub> (m)
Otros	5,32E-06	25,00	0	0	0	0	0	0	0
H <sub>2</sub> O	3,73E-07	0,16	28681,13	0,27	20182,93	0,19	0,70	0,04	1,22

Por último, en la Tabla 39 se muestra el valor final de la longitud de la columna, según la ecuación (64), y del diámetro, según la ecuación (63). El valor de la longitud obtenido tras resolver la ecuación anterior se ha aumentado un 30%, con la finalidad de adoptar un diseño conservador que solvete las limitaciones y simplificaciones del método empleado.

Tabla 39. Diámetro y longitud del lecho industrial

$L_{\text{tot}}$ (m)	1,640
$D_{\text{ind}}$ (m)	7,955

#### 4.2.4 ADSORBEDORES DEL SISTEMA PSA

Para el diseño de los adsorbedores del sistema PSA, cuyo procedimiento de cálculo es muy similar al explicado en la sección anterior, se han tomado los valores experimentales del artículo de J Yang y C-H Lee [52]. En base a los valores publicados en este artículo, se ha realizado el estudio y diseño de la columna industrial, pero asumiendo un diseño conservador en el que el adsorbedor está formado por un lecho multicapa de manera que los componentes son adsorbidos uno a uno y no simultáneamente como muestra el artículo.

El diseño de la columna para este tipo de adsorción requeriría la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, procedimiento que no se ha seguido por su complejidad, asumiendo un diseño más simple, pero, al mismo tiempo, conservador.

Al igual que en el caso del lecho con silica gel, al no disponer de datos experimentales que reproduzcan el caso industrial en un laboratorio, hay ciertos aspectos que no se han podido ajustar correctamente a la hora de hacer el escalado, como es el caudal másico superficial que no es exactamente igual en las dos escalas debido a que la presión y la temperatura son diferentes, si bien coinciden las composiciones de la corriente a la entrada del sistema PSA.

También, y como en el caso anterior, se ha asumido un frente de onda con patrón constante, de manera que facilite los cálculos de los tiempos de ruptura y estequiométrico a partir de la curva de ruptura.

Por último, se ha asumido que el CO y el N<sub>2</sub> se adsorben a la vez y en la misma capa, al tener selectividades de adsorción similares, y se ha tratado como si fuesen un mismo componente cuya concentración en la mezcla es la suma de sus concentraciones individuales.

Las Tabla 40 y 41 recogen los valores de presión y temperatura tanto del experimento como del proceso industrial.

*Tabla 40. Condiciones de operaciones del estudio experimental*

p (atm)	10
T (K)	300

*Tabla 41. Condiciones de operaciones del caso industrial*

p (bar)	15
T (K)	308

Asimismo, la Tabla 42 recoge todos los datos del estudio experimental usados como referencia en el escalado.

*Tabla 42. Datos experimentales*

$Q_{exp}$ (L/min)	$Q_{exp}$ (m <sup>3</sup> /s)	$D_{exp}$ (cm)	$D_{exp}$ (m)	$A_{exp}$ (m <sup>2</sup> )
8,6	0,000143333	3,71	0,0371	0,00108103
$\rho_{b,AC}$ (g/cm <sup>3</sup> )	$\rho_{b,AC}$ (kg/m <sup>3</sup> )	$L_{exp}$ (cm)	$L_{exp}$ (m)	
0,482	482	100	1	
$\rho_{b,Z5A}$ (g/cm <sup>3</sup> )	$\rho_{b,Z5A}$ (kg/m <sup>3</sup> )			
0,764	764			

En ambas pruebas experimentales, la adsorción se llevó a cabo en una columna de 1 m de longitud y de 3,71 cm de diámetro interno, por donde circulaba una corriente de 8,6 L/min a unas condiciones de presión y temperatura de 10 atm y 300 K, respectivamente. En cuanto la composición del gas empleado (en volumen) fue de 56,4% de hidrógeno, 26,6% de metano, 8,4% de monóxido de carbono, 5,5% de nitrógeno y 3,1% de dióxido de carbono. Con respecto a las curvas de ruptura obtenidas en el experimento, las Figuras 18 y 19 muestran curvas de ruptura en la adsorción multicomponente para cada adsorbente.

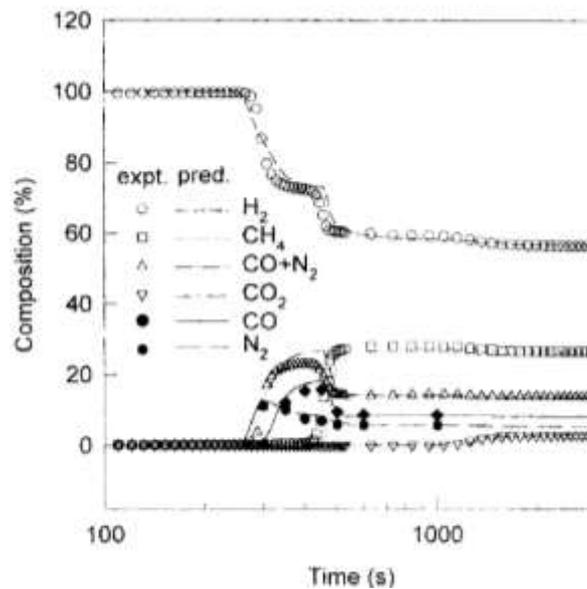


Figura 18. Curva de ruptura para el carbón activo (AC)

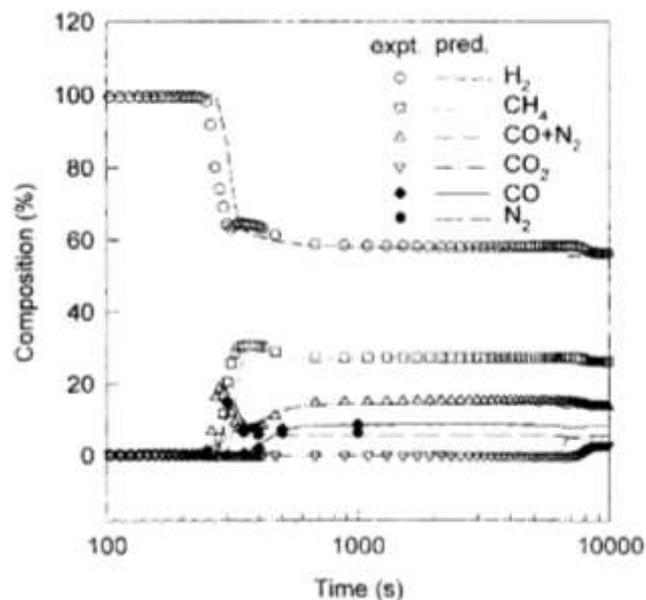


Figura 19. Curva de ruptura la zeolita 5A (Z5A)

La principal diferencia con respecto al diseño explicado en la sección anterior es que en él se utilizó un solo adsorbente mientras que en este caso se van a utilizar dos: carbón activo (AC) y Zeolita 5A (Z5A). Por lo tanto, para este diseño se calcula la altura de lecho necesaria para adsorber cada adsorbato en cada adsorbente, eligiendo posteriormente la mejor opción.

El cálculo de los tiempos estequiométrico y de ruptura se han calculado interpolando en las respectivas tablas de  $C/C_F$  frente al tiempo, asociando el punto de ruptura al momento en que la concentración de salida es un 0,1% de la concentración de la entrada, y el tiempo estequiométrico al momento en que la concentración de salida un 50%. En las tablas mostradas en el Anexo II: Curva de ruptura de los adsorbedores del sistema PSA aparecen los valores numéricos de las diferentes curvas de ruptura para cada adsorbato y cada adsorbente. De nuevo, al igual que en el caso anterior, los valores se han obtenido mediante interpolación lineal.

Por último, haciendo uso de las ecuaciones (60) - (68), se obtienen los resultados relativos al diseño de las columnas de adsorción del sistema PSA, los cuales se muestran en las Tabla 43 y 44.

Tabla 43. Resultados del diseño del lecho de AC

AC	$m_{i,exp}$ (kg/s)	$m_{i,ind}$ (kg/s)	$t_{s,i}$ (s)	$q_{s,i}$ (kg/kg)	$t_{b,i}$ (s)	$q_{b,i}$ (kg/kg)	$q_{b,i}/q_{s,i}$	LUB <sub>i</sub> (m)	L <sub>i</sub> (m)	L <sub>AC</sub> (m)
H <sub>2</sub>	6,57E-05	2,76	0	0	0	0	0	0	0	0
CH <sub>4</sub>	2,48E-04	10,40	455,47	0,212	386,30	0,18	0,85	0,15	3,32	3,48
CO <sub>2</sub>	7,95E-05	3,33	1281,36	0,19	1036,16	0,16	0,81	0,19	1,18	1,37
CO+N <sub>2</sub>	2,23E-05	9,51	297,24	0,13	256,99	0,11	0,86	0,13	5,09	5,23

Tabla 44. Resultados del diseño del lecho de Z5A

Z5A	$m_{i,exp}$ (kg/s)	$m_{i,ind}$ (kg/s)	$t_{s,i}$ (s)	$q_{s,i}$ (kg/kg)	$t_{b,i}$ (s)	$q_{b,i}$ (kg/kg)	$q_{b,i}/q_{s,i}$	LUB <sub>i</sub> (m)	L <sub>i</sub> (m)	L <sub>Z5A</sub> (m)
H <sub>2</sub>	6,57E-05	2,76	0	0	0	0	0	0	0	0
CH <sub>4</sub>	2,48E-04	10,40	297,55	0,09	222,93	0,07	0,75	0,25	5,09	5,34
CO <sub>2</sub>	7,95E-05	3,33	8097,67	0,80	7357,756	0,71	0,91	0,09	0,19	0,28
CO+N <sub>2</sub>	2,23E-05	9,51	263,78	0,07	221,89	0,06	0,84	0,16	5,74	5,90

Al proceder los datos de una adsorción multicomponente, la altura del lecho podría ser aquella correspondiente al adsorbato de menor tiempo de ruptura, lo que garantizaría la eliminación del resto de componentes. Según este diseño, sería de 5,229 m para el caso del adsorbente AC y de 5,899 m para el adsorbente Z5A.

Sin embargo, atendiendo a un diseño conservador, se va a elegir el adsorbente más adecuado para eliminar cada adsorbato que, como se puede observar en las tablas anteriores, corresponde con Z5A para el dióxido de carbono y AC el metano y la mezcla de monóxido de carbono y nitrógeno. Por lo tanto, según este criterio, la altura total de lecho sería la suma de las alturas requeridas para adsorber cada uno de los componentes como si se adsorbieran individualmente. Los resultados quedan recogidos en la Tabla 45, donde también aparece el diámetro del lecho requerido que ha sido obtenido tras aplicar las ecuaciones (61) - (63) con los valores de este equipo.

*Tabla 45. Diámetro y longitud de los lechos industriales*

$L_{tot}$ (m)	8,99
$D_{ind}$ (m)	6,33

## 5 REFERENCIAS

---

- [1] L. Gutiérrez Jodra, «El hidrógeno, combustible del futuro,» *Revista Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, vol. 99, nº 1, pp. 49-67, 2005.
- [2] «Simagas,» [En línea]. Available: [https://www.simagas.es/pdf/gases\\_industriales/FT\\_Hidrogeno\\_tecnico.pdf](https://www.simagas.es/pdf/gases_industriales/FT_Hidrogeno_tecnico.pdf). [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [3] R. E. Treybal, *Operaciones de Transferencia de Masa*, México: McGraw-Hill, 1980.
- [4] E. Turmo Sierra, «NTP 379: Productos inflamables: variación de los parámetros de peligrosidad.».
- [5] J. R. Ares, «Norvento,» 4 Diciembre 2018. [En línea]. Available: <https://www.norvento.com/almacenamiento-hidrogeno/>. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [6] R. Pozo Baquero, «Ariema,» 23 Julio 2019. [En línea]. Available: <http://www.ariema.com/almacenamiento-de-h2>. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [7] O. Santiago, «Apilados,» 1 Mayo 2016. [En línea]. Available: <http://apilados.com/blog/3-metodos-almacenamiento-hidrogeno/>. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [8] C. Fernández-Bolaños Badía, *Energética el hidrógeno: Contexto, estado actual y perspectiva de futuro.*, Sevilla, 2005.
- [9] A. González García-Conde, «Producción, almacenamiento y distribución de hidrógeno.,» *Asociación Española del Hidrógeno*, 2010.
- [10] Ó. Fernández Isla, «Revista PQ,» 19 Junio 2019. [En línea]. Available: <http://www.revistapq.com/es/notices/2019/06/hidrogeno-el-futuro-de-la-energia->

- 65014.php#.X00qn8gzY2y. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [11] A. Vojvodic, A. J. Medford, F. Studt, F. Abild-Pedersen, T. S. Khan, T. Bligard y J. K. Nørskov, «Exploring the limits: A low-pressure, low-temperature Haber–Bosch process,» *Chemical Physics Letters*, vol. 598, pp. 108-112, 2014.
- [12] «Fertilizer Outlook 2019 – 2023,» de *87th IFA Annual Conference*, Montreal (Canada), 2019.
- [13] A. Theophilus, *Control structure design for methanol process.*, Trondheim, 2010.
- [14] M. Á. Gómez, I. Dobrosz-Gómez y E. Gil Pavas, «Región de Inestabilidad y Optimización de las Condiciones de Producción de Metanol en un Reactor Lurgi,» *Información Tecnología*, vol. 27, nº 3, pp. 171-178, 2016.
- [15] F. Dalena, A. Senatore, M. Basile, S. Knani, A. Basile y A. Iulianelli, «Advances in Methanol Production and Utilization, with Particular Emphasis toward Hydrogen Generation via Membrane Reactor Technology,» *Membranes*, vol. 8, nº 4, 2018.
- [16] B. Babío Núñez, *Estudio de Procesos de Hydrocracking y Mild Hydrocracking: evaluación de catalizadores en planta piloto y desarrollo de modelos para el proceso industrial.*, Madrid, 2017.
- [17] «Encontrando la frontera tecnológica del sector palma, aceite, grasas vegetales y biocombustibles,» Bogotá, 2013.
- [18] K. J. Dávila Vivas, M. d. I. A. Dugarte, M. Gutiérrez y C. P. Muñoz, «Planta de Hidrodesulfuración para reducir la cantidad de compuestos azufrados presentes en crudo pesado.,» Mérida (Venezuela), 2012.
- [19] W. Peschka, «Liquid Hydrogen as a Rocket Propellant,» de *Liquid Hydrogen*, Viena, Springer, 1992, pp. 105-115.
- [20] S. Alcalde, «National Geographic España,» 08 Diciembre 2019. [En línea]. Available: [https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/ventajas-e-inconvenientes-hidrogeno-como-combustible-alternativo\\_14897](https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/ventajas-e-inconvenientes-hidrogeno-como-combustible-alternativo_14897). [Último acceso: 12 octubre 2020].

- [21] N. Spring, «Power Engineering,» 6 Enero 2009. [En línea]. Available: <https://www.power-eng.com/2009/06/01/hydrogen-cools-well-but-safety-is-crucial/#gref>. [Último acceso: 12 Octubre 2020].
- [22] O. Planas, «Energía Nuclear,» 18 Diciembre 2009. [En línea]. Available: <https://energia-nuclear.net/que-es-la-energia-nuclear/fusion-nuclear#:~:text=La%20fusi%C3%B3n%20nuclear%20es%20una,deuterio%20se%20emite%20un%20neutr%C3%B3n>.. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [23] K.-A. Adamson, «The Fuel Cell and Hydrogen Annual Review,» 2017.
- [24] IRENA, « Hydrogen from renewable power: Technology outlook for the energy transition,» Abu Dhabi, 2018.
- [25] Departamento de Energía de EEUU., «ENERGY EFFICIENCY & RENEWABLE ENERGY,» [En línea]. Available: <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/hydrogen-production-natural-gas-reforming#:~:text=In%20steam%20methane%20reforming%2C%20methane,for%20the%20reaction%20to%20proceed>.. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [26] Air Liquide, [En línea]. Available: [https://www.engineering-airliquide.com/es/generacion-gas-sintesis-por-reformado-autotermico-atr#:~:text=El%20reformado%20autot%C3%A9rmico%20\(ATR\)%20es,vapor%2C%20y%20posterior%20reformado%20catal%C3%ADtico](https://www.engineering-airliquide.com/es/generacion-gas-sintesis-por-reformado-autotermico-atr#:~:text=El%20reformado%20autot%C3%A9rmico%20(ATR)%20es,vapor%2C%20y%20posterior%20reformado%20catal%C3%ADtico).. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [27] I. Staffell, D. Brett, M. Manage, E. Agante, N. Brandon, E. Brightmas y R. Brown, «The role of the fuel in the operation, performance and degradation of fuel cells.,» de *Functional materials for sustainable energy applications.*, Cambridge, Woodhead Publishing, 2012, pp. 249-278.
- [28] Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía (IDAE), «Biomasa: Gasificación,» Madrid, 2007.
- [29] J. de Bucy, «THE POTENTIAL OF POWER-TO-GAS,» Enea Consulting, París, 2016.
- [30] L. Farrás, «El hidrógeno verde, el combustible que está cada vez más cerca,» *La*

- Vanguardia*, 11 Junio 2020.
- [31] A. Delgado Martín, «Refrigeración de alternadores con hidrógeno producido mediante electrolizadores tipo PEM.,» *Anales de mecánica y electricidad*, vol. 82, nº 2, pp. 17-23, 2005.
- [32] J. Pierre-André, «Hydrogen fuel Quality requirements for transportation and other energy applications.,» 2011.
- [33] J. Benson y A. Celin, «Recovering Hydrogen –and Profits– from Hydrogen-rich offgas,» 2018.
- [34] P. Brea Prieto, «Recuperación de hidrógeno de mezclas gaseosas mediante un proceso PSA,» Madrid, 2018.
- [35] Air Liquide, [En línea]. Available: <https://www.engineering-airliquide.com/es/separacion-criogenica-co2-cryocap-h2>. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [36] Air Liquide, «Manual de Tecnología.,» 2018.
- [37] A. Martínez Díaz, «Estudio de la separación de hidrógeno en una mezcla gaseosa por membranas densas de paladio.,» Madrid, 2018.
- [38] F. Arroyo Torralvo, M. C. Fernández Baco, P. A. Ollero de Castro y S. Louise Nilsson, *Operaciones de Separación (Grado en Ingeniería Química)*, ETSI, Sevilla, 2019.
- [39] Linde Engineering, «Hydrogen Recovery by Pressure Swing Adsorption».
- [40] M. García Rodríguez, «Recuperación de hidrógeno de corrientes de purga en la producción de bases lubricantes,» Cartagena, 2018.
- [41] S. Sircar; T.C. Golden, «Purification of Hydrogen by Pressure Swing Adsorption,» *SEPARATION SCIENCE AND TECHNOLOGY*, vol. 35, nº 5, pp. 667-687, 2000.
- [42] Air Liquide, «Air Liquide,» [En línea]. Available: <https://www.engineering-airliquide.com/es/purificacion-hidrogeno-por-adsorcion-por-oscilacion-presion-psa>.

[Último acceso: 12 octubre 2020].

- [43] Air Liquide, «Engineering Air Liquide,» [En línea]. Available: <https://www.engineering-airliquide.com/es/Air-Liquide-Yuhuang-Chemical-Inc-hydrogen-methanol-USA>. [Último acceso: 12 octubre 2020].
- [44] F. Denys y W. de Vries, «Gas Composition Transition Agency,» 2013.
- [45] J. C. Molburg y R. D. Doctor, «Hydrogen from Steam-Methane Reforming with CO<sub>2</sub> Capture,» de *20th Annual International Pittsburgh Coal Conference*, Pittsburgh, 2013.
- [46] P. Häussinger, R. Lohmüller, A. M. Watson y F. Ullmann, «Hydrogen, 3. Purification,» de *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Weinheim, Wiley-VCH, 2014, pp. 309-333.
- [47] J. R. Rostrup-Nielsen y T. Rostrup-Nielsen, «Large-scale Hydrogen Production,» de *6th World Congr. of Chemical Engineering*, Melbourne, 2001.
- [48] S. Mohd Nazir, J. Hendrik Cloete, S. Cloete y S. Amini, «Efficient hydrogen production with CO<sub>2</sub> capture using gas switching reforming,» *Energy*, vol. 185, pp. 372-385, 2019.
- [49] Y.-S. Seo, D.-J. Seo, Y.-T. Seo y W.-L. Yoon, «Investigation of the characteristics of a compact steam reformer integrated with a water-gas shift reactor,» *Hydrogen & Fuel Cell Research Department, Korea Institute of Energy Research (KIER)*, vol. 71, nº 2, pp. 305-343, 2006.
- [50] C. A. Grande, «Advances in Pressure Swing Adsorption for Gas Separation,» *International Scholarly Research Network*, vol. 2012, 2012.
- [51] R. K. Sinnott, J. M. Coulson y J. F. Richardson, «GAS LIQUID SEPARATORS,» de *Chemical Engineering Design*, Oxford, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005, pp. 460-465.
- [52] J. Yang y C.-H. Lee, «Adsorption Dynamics of a Layered Bed PSA for H<sub>2</sub> Recovery from Coke Oven Gas,» *AIChE Journal*, vol. 44, nº 6, pp. 1325-1334, 1998.
- [53] M. Luberti, D. Friedrich, S. Brandani y H. Ahn, «Design of a H<sub>2</sub> PSA for cogeneration of ultrapure hydrogen and power at an advanced Integrated Gasification Combined Cycle

- with pre-combustion capture,» *Adsorption*, vol. 20, p. 511–524, 2014.
- [54] X. J., R. D. L., C. T. A., H. K. K., S. M. y Agrawal R..Estados Unidos Patente US Patent 6565628 B2, 2003.
- [55] Emerson Process Management, «Control Valve Sourcebook - Refining,» 2014.
- [56] M. Stinn y J. Vance, «Selecting valves for pressure swing adsorption,» EPTQ, 2018.
- [57] Emerson, «Manual de instrucciones. Válvula rotativa 8580 de Fisher. D103300X0ES,» 2018.
- [58] Emerson, «Actuador y válvula GX de 3 vías. D103305X0ES,» 2017.
- [59] Emerson, «ANDERSON GREENWOOD DIRECT SPRING OPERATED PRESSURE RELIEF VALVES SERIES 60 AND 80,» 2017.
- [60] R. González Falcón y D. Velázquez Alonso, de *Tablas y gráficos. Tecnología Energética*, Sevilla, 2018/2019.
- [61] P. Goyal, M. J. Purdue y S. Farooq, «Adsorption and diffusion of moisture and wet flue gas on silica gel,» *Chemical Engineering Science*, vol. 227, 2020.
- [62] Muy interesante, «¿De qué está hecho el combustible de las naves espaciales?,» 28 Octubre 2019. [En línea]. Available: <https://www.muyinteresante.com.mx/curiosidades/de-que-esta-hecho-el-combustible-de-las-naves-espaciales/#:~:text=El%20hidr%C3%B3geno%20l%C3%ADquido%20es%20el,ox%C3%A9geno%20l%C3%ADquido%20es%20el%20oxidante.&text=El%20hidr%C3%B3geno%20l%C3%ADquido%20y%20e>. [Último acceso: 12 octubre 2020].





# ANEXO I: CURVA DE RUPTURA DEL ADSORBEDOR DE SILICA GEL

---

t (h)	C/C <sub>F</sub>
0,613	0,000
2,594	0,000
5,142	0,000
5,566	0,000
5,708	0,003
5,943	0,012
6,132	0,021
6,274	0,038
6,415	0,056
6,557	0,082
6,651	0,100
6,792	0,129
6,934	0,165
7,123	0,197
7,311	0,229
7,547	0,297
7,689	0,329
7,830	0,376
7,972	0,421
8,208	0,506
8,443	0,597
8,585	0,650
8,679	0,685
8,774	0,718
8,868	0,738
9,104	0,779
9,198	0,791
9,387	0,806
9,670	0,824
10,000	0,829
10,377	0,838
10,613	0,838
10,755	0,838
10,991	0,838

# ANEXO II: CURVA DE RUPTURA DE LOS ADSORBEDORES DEL SISTEMA PSA

---

## 5.1 Carbón activo

CH <sub>4</sub>		CO <sub>2</sub>		CO+N <sub>2</sub>	
t (s)	C/C <sub>F</sub>	t (s)	C/C <sub>F</sub>	t (s)	C/C <sub>F</sub>
110,203	0,000	110,110	0,000	110,203	0,000
203,244	0,000	439,122	0,000	121,447	0,000
230,605	0,000	729,656	0,000	131,263	0,000
254,134	0,000	1035,641	0,000	141,873	0,000
308,639	0,000	1150,367	0,702	151,857	0,000
385,921	0,000	1255,623	1,404	162,544	0,000
433,641	3,529	1358,563	2,105	173,983	0,000
455,227	13,725	1457,129	2,456	184,426	0,000
464,159	20,784	1562,847	2,646	199,332	0,000
473,266	24,314	1661,622	2,807	211,298	0,000
487,263	25,882	1782,176	3,158	217,547	0,000
506,572	26,667	1878,297	3,158	228,376	0,000
526,646	27,059			244,448	0,000
569,212	27,843			256,615	0,000
639,598	27,843			269,389	0,784
				277,356	1,961
				285,559	3,922
				296,875	11,373
				308,639	17,647
				327,166	21,176
				340,130	21,961
				360,547	22,353
				374,835	23,137
				389,688	23,137
				405,130	23,137
				425,297	23,137

## 5.2 Zeolita 5A

CH <sub>4</sub>		CO <sub>2</sub>		CO+N <sub>2</sub>	
t (s)	C/C <sub>F</sub>	t (s)	C/C <sub>F</sub>	t (s)	C/C <sub>F</sub>
101,287	0,000	2576,980	0,000	101,287	0,000
199,526	0,000	3593,814	0,000	199,526	0,000
221,027	0,000	6989,473	0,000	221,027	0,000
244,844	0,385	7356,423	0,000	238,659	0,385
274,719	2,308	7547,060	0,385	261,016	6,923
281,838	5,000	7742,637	0,769	271,227	16,154
292,864	11,923	8045,547	1,154	281,838	18,846
304,322	20,385	8254,042	1,923	287,335	18,846
312,208	25,769	8576,959	2,692		
324,423	28,846	9027,252	2,692		
332,830	30,000	9747,402	2,692		
345,851	30,385				
350,303	30,769				
359,381	30,769				
388,051	30,769				
373,441	30,769				

# ANEXO III: TABLAS DE TECNOLOGÍA ENERGÉTICA (18/19, GIQ-US)

Tube O.D. inches	B.W.G. Gage	Thickness inches	Internal Area Sq. inch	Sq. Ft. External Surface Per Foot Length	Sq. Ft. Internal Surface Per Foot Length	Weight Per Ft. Length Steel Lbs.*	Tube I.D. inches	Moment of Inertia Inches <sup>4</sup>	Section Modulus Inches <sup>3</sup>	Radius of Gyration inches	Constant C**	Q.D. I.D.	Transverse Metal Area Sq. Inch	
1/4	22	0.026	0.0296	0.0654	0.0508	0.066	0.194	0.00012	0.00098	0.0791	46	1.269	0.0195	
	24	0.022	0.0333	0.0654	0.0539	0.054	0.206	0.00010	0.00083	0.0810	52	1.214	0.0158	
	26	0.018	0.0360	0.0654	0.0560	0.045	0.214	0.00009	0.00071	0.0823	56	1.168	0.0131	
3/8	27	0.016	0.0373	0.0654	0.0571	0.040	0.218	0.00008	0.00065	0.0829	58	1.147	0.0118	
	18	0.049	0.0603	0.0982	0.0725	0.171	0.277	0.00068	0.0036	0.1166	94	1.354	0.0502	
	20	0.035	0.0731	0.0982	0.0798	0.127	0.305	0.00055	0.0029	0.1208	114	1.230	0.0374	
	22	0.028	0.0799	0.0982	0.0835	0.104	0.319	0.00046	0.0025	0.1231	125	1.176	0.0305	
1/2	24	0.022	0.0860	0.0982	0.0867	0.083	0.331	0.00039	0.0020	0.1250	134	1.133	0.0244	
	16	0.065	0.1075	0.1309	0.0969	0.302	0.370	0.0021	0.0086	0.1555	168	1.391	0.0688	
	18	0.049	0.1269	0.1309	0.1062	0.236	0.402	0.0018	0.0071	0.1604	198	1.244	0.0694	
	20	0.035	0.1452	0.1309	0.1126	0.174	0.430	0.0014	0.0056	0.1649	227	1.163	0.0511	
5/8	22	0.028	0.1548	0.1309	0.1162	0.141	0.444	0.0012	0.0046	0.1672	241	1.126	0.0415	
	12	0.109	0.1301	0.1636	0.1066	0.601	0.407	0.0061	0.0197	0.1865	203	1.536	0.177	
	13	0.095	0.1486	0.1636	0.1139	0.536	0.435	0.0057	0.0183	0.1904	232	1.437	0.158	
	14	0.083	0.1655	0.1636	0.1202	0.481	0.459	0.0053	0.0170	0.1929	258	1.362	0.141	
7/8	15	0.072	0.1817	0.1636	0.1259	0.426	0.481	0.0049	0.0156	0.1972	283	1.299	0.125	
	16	0.065	0.1924	0.1636	0.1296	0.389	0.495	0.0045	0.0145	0.1980	300	1.263	0.114	
	17	0.058	0.2035	0.1636	0.1333	0.352	0.509	0.0042	0.0134	0.2015	317	1.228	0.103	
	18	0.049	0.2181	0.1636	0.1380	0.302	0.527	0.0037	0.0119	0.2044	340	1.185	0.089	
	19	0.042	0.2299	0.1636	0.1416	0.262	0.541	0.0033	0.0105	0.2067	359	1.155	0.077	
	20	0.035	0.2419	0.1636	0.1453	0.221	0.555	0.0029	0.0091	0.2090	377	1.126	0.065	
	3/4	10	0.134	0.1825	0.1963	0.1262	0.830	0.482	0.0129	0.0344	0.2229	286	1.566	0.259
		11	0.120	0.2043	0.1963	0.1335	0.808	0.510	0.0122	0.0326	0.2267	319	1.471	0.238
		12	0.109	0.2223	0.1963	0.1398	0.747	0.532	0.0116	0.0309	0.2299	347	1.410	0.219
		13	0.095	0.2463	0.1963	0.1466	0.665	0.560	0.0107	0.0285	0.2340	384	1.339	0.195
14		0.083	0.2679	0.1963	0.1529	0.592	0.584	0.0098	0.0262	0.2376	418	1.284	0.174	
15		0.072	0.2884	0.1963	0.1587	0.522	0.606	0.0089	0.0238	0.2411	450	1.239	0.153	
16		0.065	0.3019	0.1963	0.1623	0.478	0.620	0.0083	0.0221	0.2433	471	1.210	0.140	
17		0.058	0.3157	0.1963	0.1660	0.429	0.634	0.0076	0.0203	0.2455	492	1.183	0.126	
18		0.049	0.3339	0.1963	0.1707	0.367	0.652	0.0067	0.0178	0.2484	521	1.150	0.108	
20		0.035	0.3532	0.1963	0.1750	0.298	0.660	0.0060	0.0164	0.2531	567	1.103	0.079	
1	10	0.134	0.2894	0.2291	0.1589	1.062	0.607	0.0221	0.0505	0.2562	451	1.442	0.312	
	11	0.120	0.3167	0.2291	0.1662	0.989	0.635	0.0208	0.0475	0.2703	494	1.378	0.285	
	12	0.109	0.3390	0.2291	0.1720	0.893	0.657	0.0196	0.0449	0.2736	529	1.332	0.262	
	13	0.095	0.3685	0.2291	0.1793	0.792	0.685	0.0180	0.0411	0.2778	575	1.277	0.233	
	14	0.083	0.3948	0.2291	0.1866	0.703	0.709	0.0164	0.0374	0.2815	616	1.234	0.207	
	15	0.072	0.4197	0.2291	0.1914	0.618	0.731	0.0148	0.0337	0.2850	655	1.197	0.182	
	16	0.065	0.4359	0.2291	0.1950	0.563	0.745	0.0137	0.0312	0.2873	680	1.174	0.165	
	17	0.058	0.4525	0.2291	0.1987	0.507	0.759	0.0125	0.0285	0.2896	706	1.153	0.149	
	18	0.049	0.4742	0.2291	0.2034	0.433	0.777	0.0109	0.0249	0.2925	740	1.128	0.127	
	20	0.035	0.5090	0.2291	0.2107	0.314	0.805	0.0082	0.0187	0.2972	794	1.067	0.092	
1-1/4	8	0.165	0.3526	0.2618	0.1754	1.473	0.670	0.0292	0.0794	0.3009	550	1.493	0.433	
	10	0.134	0.4208	0.2618	0.1816	1.241	0.732	0.0250	0.0700	0.3098	656	1.396	0.385	
	11	0.120	0.4536	0.2618	0.1990	1.129	0.760	0.0232	0.0664	0.3140	708	1.318	0.332	
	12	0.109	0.4803	0.2618	0.2047	1.038	0.782	0.0207	0.0615	0.3174	749	1.279	0.305	
	13	0.095	0.5153	0.2618	0.2121	0.919	0.810	0.0280	0.0559	0.3217	804	1.235	0.270	
	14	0.083	0.5483	0.2618	0.2183	0.814	0.834	0.0253	0.0507	0.3255	852	1.190	0.239	
	15	0.072	0.5755	0.2618	0.2241	0.714	0.858	0.0227	0.0455	0.3291	898	1.168	0.210	
	16	0.065	0.5945	0.2618	0.2278	0.650	0.870	0.0210	0.0419	0.3314	927	1.149	0.191	
	18	0.049	0.6390	0.2618	0.2361	0.498	0.902	0.0166	0.0332	0.3367	997	1.109	0.146	
	20	0.035	0.6793	0.2618	0.2435	0.361	0.930	0.0124	0.0247	0.3414	1060	1.075	0.106	
1-1/2	7	0.160	0.6221	0.3272	0.2330	2.059	0.890	0.0890	0.1425	0.3806	970	1.404	0.605	
	8	0.165	0.6648	0.3272	0.2409	1.914	0.920	0.0847	0.1355	0.3890	1037	1.359	0.562	
	10	0.134	0.7574	0.3272	0.2571	1.599	0.982	0.0742	0.1187	0.3974	1162	1.273	0.470	
	11	0.120	0.8012	0.3272	0.2644	1.450	1.010	0.0688	0.1100	0.4018	1250	1.238	0.428	
	12	0.109	0.8366	0.3272	0.2702	1.330	1.032	0.0642	0.1027	0.4052	1305	1.211	0.391	
	13	0.095	0.8825	0.3272	0.2775	1.173	1.060	0.0579	0.0926	0.4097	1377	1.179	0.345	
	14	0.083	0.9229	0.3272	0.2838	1.036	1.084	0.0521	0.0833	0.4136	1440	1.153	0.304	
	16	0.065	0.9652	0.3272	0.2932	0.824	1.120	0.0428	0.0682	0.4196	1537	1.116	0.242	
	18	0.049	1.0423	0.3272	0.3016	0.629	1.152	0.0334	0.0534	0.4250	1626	1.085	0.185	
	20	0.035	1.0936	0.3272	0.3089	0.455	1.180	0.0247	0.0395	0.4297	1706	1.059	0.134	
2	10	0.134	1.1921	0.3927	0.3225	1.957	1.232	0.1334	0.1806	0.4853	1860	1.216	0.575	
	12	0.109	1.2908	0.3927	0.3356	1.621	1.282	0.1159	0.1545	0.4933	2014	1.170	0.478	
	14	0.083	1.3977	0.3927	0.3492	1.257	1.334	0.0931	0.1241	0.5018	2180	1.124	0.369	
	16	0.065	1.4741	0.3927	0.3587	0.997	1.370	0.0756	0.1008	0.5079	2300	1.095	0.293	
2-1/2	11	0.120	2.4328	0.5236	0.4606	2.412	1.760	0.3144	0.3144	0.5660	3795	1.136	0.709	
	12	0.109	2.4941	0.5236	0.4665	2.204	1.782	0.2904	0.2904	0.5697	3891	1.122	0.648	
	13	0.095	2.5730	0.5236	0.4739	1.935	1.810	0.2586	0.2586	0.5744	4014	1.105	0.589	
	14	0.083	2.6417	0.5236	0.4801	1.7010	1.834	0.2300	0.2300	0.5784	4121	1.091	0.500	
3	10	0.134	3.9127	0.6545	0.5843	3.9893	2.232	0.6992	0.5594	0.6378	6104	1.120	0.966	
	12	0.109	4.0900	0.6545	0.5974	2.7861	2.282	0.5883	0.4690	0.6462	6360	1.096	0.819	
	14	0.083	4.2785	0.6545	0.6110	2.1446	2.334	0.4608	0.3686	0.6550	6674	1.071	0.630	
3-1/2	10	0.134	5.8821	0.7854	0.7152	4.1056	2.732	1.2415	0.6277	1.0144	9145	1.098	1.207	
	12	0.109	6.0786	0.7854	0.7283	3.9687	2.782	1.0357	0.6905	1.0229	9483	1.078	0.990	
	14	0.083	6.3080	0.7854	0.7419	2.5883	2.834	0.8096	0.5398	1.0317	9840	1.059	0.781	

\* Weights are based on low carbon steel with a density of 0.2836 lbs./cu.in. For other metals multiply by the following factors:

Aluminum.....	0.35	Aluminum Bronze.....	1.04	Nickel.....	1.13
Titanium.....	0.56	Aluminum Brass.....	1.06	Nickel-Copper.....	1.12
A.I.S.I 400 Series S/Steels.....	0.99	Nickel-Chrome-Iron.....	1.07	Copper and Cupro-Nickels.....	1.14
A.I.S.I 300 Series S/Steels.....	1.02	Admiralty.....	1.09		

\*\* Liquid Velocity =  $\frac{\text{lbs. Per Tube Hour}}{C \times \text{Sp. Gr. Of Liquid}}$  in feet per sec. ( Sp.Gr. Of Water at 60 deg F = 1.0 )

Full Circle Tube Layouts Floating Head Exchanger 3/4-in. O.D. Tubes on 15/16-in. Triangular Pitch

Size (Inches)	NUMBER OF PASSES					Net Free Distance 2 Passes	Rows Across
	1	2	4	6	8		
8	42	40	32	32	24	3.75	13
10	73	68	56	54	52	4.03	17
12	109	106	88	80	80	4.00	21
14	130	124	110	108	104	4.50	25
16	187	176	162	162	144	5.00	29
18	241	232	214	216	204	5.88	33
20	308	302	282	274	264	6.50	37
22	384	372	352	348	336	7.13	41
24	472	458	432	420	406	7.75	45
26	565	538	510	510	502	8.83	48
28	640	630	610	606	580	8.13	53
30	764	744	716	708	700	8.75	57
32	868	850	822	812	796	9.38	63
34	964	970	930	928	912	9.75	65
36	1131	1108	1066	1058	1028	10.50	71
38	1268	1246	1204	1190	1172	11.25	75
40	1414	1390	1360	1338	1316	12.06	79
42	1568	1544	1502	1482	1464	11.50	83

Full Circle Tube Layouts Floating Head Exchanger 3/4-in. O.D. Tubes on 1-in. Square Pitch

Size (Inches)	NUMBER OF PASSES					Net Free Distance 2 Passes	Rows Across
	1	2	4	6	8		
8	32	32	26	24	24	3.50	6
10	56	52	48	48	48	4.13	8
12	82	82	78	72	72	4.50	11
14	104	96	92	88	88	6.00	11
16	140	136	128	120	120	6.50	14
18	185	182	172	168	164	6.88	16
20	241	236	224	212	212	7.38	17
22	300	290	280	268	268	7.75	20
24	360	330	336	322	322	8.25	21
26	424	412	402	392	392	8.75	23
28	492	488	480	472	472	9.25	25
30	580	566	566	548	548	9.75	27
32	665	648	644	628	628	10.00	29
34	760	758	730	728	728	10.19	31
36	833	848	832	816	816	11.06	33
38	973	960	938	932	932	12.19	35
40	1085	1064	1032	1036	1036	12.69	37
42	1201	1176	1162	1148	1148	13.19	39

Full Circle Tube Layouts Floating Head Exchanger 1-in. O.D. Tubes on 1 1/4-in. Square Pitch

Size (Inches)	NUMBER OF PASSES					Net Free Distance 2 Passes	Rows Across
	1	2	4	6	8		
8	21	16	16	....	....	4.13	5
10	37	32	32	....	....	4.25	6
12	48	52	48	48	48	4.25	8
14	61	60	60	52	52	5.50	10
16	89	84	80	76	76	5.50	11
18	113	112	112	108	108	5.38	13
20	148	148	140	136	136	5.38	14
22	184	178	172	168	164	7.38	16
24	221	220	212	206	208	7.38	17
26	266	266	258	252	252	7.38	19
28	316	308	304	292	292	7.38	20
30	368	360	352	344	340	9.38	21
32	421	410	402	392	392	9.38	23
34	481	472	464	452	452	9.69	24
36	545	540	532	524	524	9.69	25
38	606	608	588	588	588	9.69	28
40	680	680	656	664	660	9.69	29
42	750	738	728	728	728	11.69	31

Full Circle Tube Layouts Floating Head Exchanger 5/8-in. O.D. Tubes on 1-in. Triangular Pitch

Size (Inches)	NUMBER OF PASSES					Net Free Distance 2 Passes	Rows Across
	1	2	4	6	8		
8	37	30	26	26	24	4.13	11
10	51	56	52	46	44	4.88	17
12	92	90	86	78	72	4.38	21
14	121	110	102	98	92	5.50	21
16	163	152	146	140	132	6.25	25
18	212	202	194	188	184	5.88	29
20	269	260	250	240	236	6.63	35
22	337	330	314	300	296	7.33	39
24	421	404	390	378	364	8.00	43
26	499	476	460	450	440	8.83	47
28	579	562	542	538	520	9.63	51
30	658	646	636	624	612	10.53	55
32	766	744	732	714	712	11.00	57
34	870	850	834	828	808	10.50	61
36	960	976	942	932	920	11.38	67
38	1106	1100	1060	1060	1036	12.13	71
40	1236	1226	1200	1190	1164	12.75	75
42	1367	1350	1322	1306	1288	13.25	77

Full Circle Tube Layouts Floating Head Exchanger 1-in. O.D. Tubes on 1 1/4-in. Triangular Pitch

Size (Inches)	NUMBER OF PASSES					Net Free Distance 2 Passes	Rows Across
	1	2	4	6	8		
8	22	20	18	16	12	4.13	9
10	38	36	32	32	28	4.50	13
12	60	52	48	46	44	4.63	15
14	73	68	60	58	56	4.25	19
16	97	98	86	82	80	4.25	21
18	130	126	118	114	112	6.50	25
20	170	164	152	150	144	6.75	27
22	212	202	196	188	184	7.00	31
24	258	250	242	232	228	7.25	33
26	304	302	286	278	272	7.50	37
28	361	348	338	336	324	7.75	39
30	421	408	400	394	386	8.00	43
32	482	472	456	446	440	8.25	47
34	565	546	524	520	500	11.06	49
36	625	616	592	588	572	10.44	51
38	700	688	672	660	640	10.69	55
40	786	776	752	742	736	11.00	59
42	872	850	834	824	816	11.32	61

Tabla 4.9: Intercambiadores de carcasa y tubos: Diámetro de carcasa y número de tubos en intercambiadores de placa tubular flotante.

TABLE TEMA Design Fouling Resistances for Water

Temperature of Heating Medium	Up to 115°C		115 to 205°C	
	50°C		Over 50°C	
Temperature of Water	Water Velocity, m/s		Water Velocity, m/s	
	< 0.9	> 0.9	< 0.9	> 0.9
Sea water	0.088	0.088	0.176	0.176
Brackish water	0.352	0.176	0.528	0.352
Cooling tower and artificial spray pond				
Treated makeup	0.176	0.176	0.352	0.352
Untreated	0.528	0.528	0.881	0.705
City or well water	0.176	0.176	0.352	0.352
River water				
Minimum	0.352	0.176	0.528	0.352
Average	0.528	0.352	0.705	0.528
Muddy or silty	0.528	0.352	0.705	0.528
Hard (over 15 grains/gallon)	0.528	0.528	0.881	0.881
Engine jacket	0.176	0.176	0.176	0.176
Distilled or closed cycle				
Condensate	0.088	0.088	0.088	0.088
Treated boiler feed water	0.176	0.088	0.176	0.176
Boiler blowdown	0.352	0.352	0.352	0.352

TABLE TEMA Design Fouling Resistances for Chemical Processing Streams, ( $m^2 \cdot K$ ) / kW [19]

Gases and vapors	
Acid gases	0.352–0.528
Solvent vapors	0.176
Stable overhead products	0.176
Liquids	
MEA and DEA solutions	0.352
DEG and TEG solutions	0.352
Stable side draw and bottom product	0.176–0.352
Caustic solutions	0.352
Vegetable oils	0.528

TABLE TEMA Design Fouling Resistances for Natural Gas–Gasoline Processing Streams, ( $m^2 \cdot K$ ) / kW [19]

Gases and vapors	
Natural gas	0.176–0.352
Overhead products	0.176–0.352
Liquids	
Lean oil	0.352
Rich oil	0.176–0.352
Natural gasoline and liquified petroleum gases	0.176–0.352

Table 4.15: Resistencia de ensuciamiento: Normas TEMA ( $m^2k/kW$ )