

Trabajo Fin de Máster

Ingeniería Química

Diseño, Simulación y Operación de una planta de electrólisis PEM

Autor: Carlos Sánchez García

Tutor: Pedro García Haro

Dpto. Ingeniería Química y Ambiental
Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Universidad de Sevilla

Sevilla, 2024



Trabajo Fin de Máster
Ingeniería Química

Diseño, Simulación y Operación de una planta de electrólisis PEM

Autor:

Carlos Sánchez García

Tutor:

Pedro García Haro

Profesor Titular de Universidad

Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental

Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Universidad de Sevilla

Sevilla, 2024

Trabajo Fin de Máster: Diseño, Simulación y Operación de una planta de electrólisis PEM

Autor: Carlos Sánchez García

Tutor: Pedro García Haro

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

Presidente:

Vocales:

Secretario:

Acuerdan otorgarle la calificación de:

Sevilla, 2024

El Secretario del Tribunal

A mi familia

A mis maestros

Resumen

Este trabajo se centra en el estudio de la producción de hidrógeno a partir de electrólisis del agua, la simulación de una planta de electrólisis tipo PEM con una capacidad nominal de producción de H_2 de 30 kWth (PCI), y el desarrollo de la ingeniería básica de la planta y los elementos de seguridad y control asociados. El documento abarca la descripción detallada de los procesos principales que tienen lugar en la producción de hidrógeno, compara las distintas tecnologías de electrólisis en desarrollo, considerando las ventajas y limitaciones de cada una de ellas. Asimismo, describe los métodos actuales más comúnmente utilizados para la purificación, la compresión y el almacenamiento del hidrógeno y las especificaciones técnicas de los equipos principales seleccionados para la planta considerada. Además, se presentan los procedimientos de arranque y parada de la planta, así como los modos de operación contemplados, y se detallan los sistemas de supervisión y control diseñados para la operación segura y eficiente de la planta. Finalmente, se incluyen como anexos la memoria de cálculo de los equipos clave para la planta, el diagrama de instrumentación y tuberías (P&ID) de la planta e información sobre la simulación realizada, incluido el balance de materia y energía del proceso diseñado.

Abstract

The present work focuses on the study of hydrogen production from water electrolysis, the simulation of a PEM with a nominal H₂ production capacity of 30 kW_{th} (LHV) electrolysis plant, and the development of the basic engineering of the plant and the associated safety and control elements. The document covers a detailed description of the main processes that take place in hydrogen production, compares the different electrolysis technologies under development, considering the advantages and limitations of each. Likewise, it describes the most commonly used current methods for the purification, compression, and storage of hydrogen and the technical specifications of the main equipment selected for the considered plant. In addition, the procedures for starting up and shutting down the plant as well as the contemplated modes of operation are presented, and the supervision and control systems designed for the safe and efficient operation of the plant are detailed. Also, included as appendices are the calculation memory of the key equipment for the plant, the instrumentation and piping diagram (P&ID) of the plant, and information on the simulation carried out, including the material and energy balance of the designed process.

Índice

Resumen	ix
Abstract	xi
Índice de Tablas	xv
Índice de Figuras	xvii
1 Alcance y objetivos	1
2 Descripción general de la planta	2
2.1 <i>Introducción y Objetivos de la Planta.</i>	2
2.2 <i>Descripción de productos y especificaciones.</i>	3
2.2.1 Hidrógeno y su uso como combustible.	3
2.3 <i>Descripción de los procesos principales.</i>	4
2.3.1 Electrólisis del agua	4
2.3.2 Purificación de hidrógeno mediante adsorción	7
2.3.3 Compresión del hidrógeno	9
2.3.4 Almacenamiento del hidrógeno.	12
2.4 <i>Especificaciones técnicas de los equipos principales.</i>	14
2.4.1 Sistema de Tratamiento de Aguas	14
2.4.2 Electrolizador PEM	15
2.4.3 Sistema PSA	16
2.4.4 Sistema de compresión y refrigeración	17
2.4.5 Sistema de almacenamiento	18
3 Procedimientos de operación	19
3.1 <i>Procedimiento de arranque de la planta</i>	19
3.2 <i>Procedimientos de parada, protocolos de emergencia y seguridad.</i>	20
4 Sistemas de supervisión y control	23
4.1 <i>Sistema de control, supervisión y adquisición de datos (SCADA)</i>	23
4.2 <i>Metodología de control y enclavamientos.</i>	23
3.2.1. Tanque separador de H ₂ O y O ₂	23
3.2.2. Entrada y salida de H ₂ O al electrolizador.	24
3.2.3. Stack de electrólisis PEM	25
3.2.4. Sistema PSA y Tanque separador H ₂ y H ₂ O.	25
3.2.5. Sistema de compresión y almacenamiento.	26
4.3 <i>Parámetros clave y rangos de operación normal</i>	27
4.4 <i>Listado de equipos</i>	28
4.5 <i>Listado de instrumentación</i>	29
Conclusiones y recomendaciones	32
Referencias	34
5 ANEXO 1: MEMORIA DE CÁLCULO	36
5.1 <i>Stack de electrólisis PEM</i>	36
5.2 <i>Sistema de secado de la corriente producto de H₂.</i>	37
6 ANEXO 2: DIAGRAMA DE INSTRUMENTACIÓN Y TUBERÍAS(P&ID)	0
7 ANEXO 3: SIMULACIÓN CON DWSIM	0

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Especificación de pureza del H ₂ para su uso como combustible en pilas de combustible PEM.	3
Tabla 2. Comparación de las tecnologías disponibles de electrólisis.	7
Tabla 3. Clasificación de tanques para almacenamiento de hidrógeno.	13
Tabla 4. Características membrana ósmosis inversa	14
Tabla 5. Características electrolizador MTSA 50 kW	15
Tabla 6. Especificaciones PSA L&C's PSA-1000.	17
Tabla 7. Características Compresor recíprocante TOPLONG HV-50/0.5-9	18
Tabla 8. Procedimiento de arranque de la planta de electrólisis.	19
Tabla 9. Parámetros clave y rangos de operación normal	27
Tabla 10. Listado de equipos	28
Tabla 11. Listado de instrumentación	29
Tabla 12. Características del adsorbente utilizado.	37
Tabla 13. Condiciones del lecho experimental y del lecho de la planta.	38

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Esquema general de la planta de electrólisis PEM.	2
Figura 2. Esquema genérico de un stack de electrólisis.	5
Figura 3. Esquema de una celda alcalina.	5
Figura 4. Esquema de una celda PEM.	6
Figura 5. Esquema de una celda AEM.	6
Figura 6. Esquema de una celda SOEC.	7
Figura 7. Proceso de adsorción y desorción mediante PSA.	8
Figura 8. Ciclo PSA para un sistema de 4 lechos.	9
Figura 9. Energía requerida para comprimir el hidrógeno comparado con su poder calorífico superior.	10
Figura 10. Gráfico para la selección del tipo de compresor. Las áreas indican las regiones de mejor rendimiento.	11
Figura 11. Pérdidas de energía por compresión en un electrolizador PEM en función de la presión de salida y el grosor de membrana.	12
Figura 12. Tanques para almacenamiento estacionario de hidrógeno.	12
Figura 13: Electrolizador MTSA de 50kW	16
Figura 14. Sistema PSA L&C's PSA-1000	16
Figura 15: Esquema de un compresor de pistón recíprocante de dos etapas.	17
Figura 16: Compresor recíprocante TOPLONG HV-50/0.5-9	18
Figura 17: Estados de operación de la planta de electrólisis (GRAF CET).	21
Figura 18: Esquema de control Tanque separador de H ₂ O y O ₂	24
Figura 19: Esquema de control conductividad del agua de alimentación	24
Figura 20: Esquema de control Entrada y salida de H ₂ O al electrolizador.	24
Figura 21: Esquema de control Stack de electrólisis PEM.	25
Figura 22: Esquema de control Sistema PSA y Tanque separador H ₂ y H ₂ O.	26
Figura 23: Esquema de control Sistema de compresión y almacenamiento.	27
Figura 24. Diagrama Psicrométrico He-H ₂ O.	39
Figura 25. Curva experimental de adsorción para distintas condiciones de operación.	41
Figura 26. Curva experimental de desorción para distintas condiciones de operación.	42
Figura 27. Diagrama de instrumentación y tuberías (P&ID)	0
Figura 28. Flowsheet de simulación de la planta de electrólisis PEM con capacidad de producir 10Nm ³ /h de H ₂	0

1 ALCANCE Y OBJETIVOS

El principal objetivo de este trabajo es llevar a cabo el diseño de una planta de producción de 30 kWth (PCI) (10 Nm³/h) de hidrógeno para su uso como combustible mediante electrólisis tipo PEM.

Dentro del alcance del trabajo se incluye la elaboración de la simulación de la planta completa usando el software de acceso abierto DWSIM incluyendo el stack de electrólisis, sistema de purificación de hidrógeno (PSA), sistemas de compresión, sistemas de almacenamiento, separadores líquido-gas y equipos auxiliares de intercambio de calor. Del mismo modo se ha llevado a cabo el P&ID de la planta completa. Además, se incluye una introducción teórica sobre el hidrógeno y su uso como combustible y sobre los procesos principales que intervienen en su producción, así como las especificaciones técnicas y selección de los equipos principales de la planta. Igualmente, se incluye el procedimiento de arranque manual de la planta, los estados de funcionamiento que se contemplan y los distintos eventos que llevan la planta de un estado a otro, o a parada, así como los protocolos de emergencia y seguridad de manera simplificada. A su vez se incluye la descripción de los sistemas para el control y la supervisión de la planta, incluyendo la descripción de la metodología de control establecida y los enclavamientos de seguridad planteados. También entran dentro del alcance la determinación de los parámetros clave del proceso y el establecimiento de sus rangos de operación normal, así como un listado de los equipos principales que conforman la planta y sus características y un listado de la instrumentación de la planta.

Quedan fuera del alcance la simulación de la planta de tratamiento de agua de mar, la elección de válvulas y tuberías, el análisis económico y de impacto ambiental, el diseño de los sistemas auxiliares de la planta, la infraestructura para el suministro del hidrógeno y la elección de la fuente de energía para alimentar el proceso.

2 DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA PLANTA

2.1 Introducción y Objetivos de la Planta.

El sistema propuesto produce hidrógeno a partir de la descomposición de H_2O en H_2 y O_2 mediante electrólisis empleando la tecnología de membrana de intercambio de protones (PEM). El H_2 generado se destinará a almacenamiento a alta presión para su posterior uso (por ejemplo, para alimentar pilas de combustible, inyección a la red de gas natural, transporte, red gasística para su uso en industrias de refino y petroquímicas cercanas, etc.). Por el contrario, el O_2 generado se vende directamente a la atmósfera. El diseño y dimensionado de la planta y de los equipos principales se ha realizado utilizando el simulador de procesos DWSIM.

El agua se hace pasar por un stack de electrólisis PEM donde se produce la disociación de la misma en sus dos componentes, en el cátodo se obtiene H_2 saturado de H_2O y en el ánodo se obtiene una corriente de O_2 saturado en H_2O . La corriente de O_2 se refrigera antes de ser vendida para eliminar la humedad contenida y recoger el agua en el tanque de separación para ser reutilizada en el proceso de electrólisis.

De forma análoga, la corriente de H_2 se lleva a un tanque de separación donde se extrae el agua condensada por el fondo del tanque y se almacena el H_2 húmedo. El H_2 se somete posteriormente a secado mediante un sistema PSA de adsorción mediante lechos de sílica gel, el cual implica la adsorción de la humedad presente en la corriente de hidrógeno a través del gel de sílice a alta presión, seguido por la desorción de la humedad del gel de sílice a baja presión y alta temperatura para regenerarlo mediante un sistema PSA. El hidrógeno purificado abandona el sistema PSA con una pureza del 99,9999% (v/v) y se somete a compresión y almacenamiento a 300 bar mediante el uso de compresores reciprocantes y tanques de almacenamiento especiales para hidrógeno (Tipo I-II). La corriente resultante de la desorción de H_2 se vende de manera controlada a la atmósfera, con las condiciones de seguridad pertinentes.

Junto al Helio, el Hidrógeno es el único gas que se calienta al expandirse en condiciones normales (efecto de Joule-Thomson negativo), además es inflamable por lo que será necesario que la instalación asegure que la zona de purga del H_2 sea al menos una Zona 2 (ATEX). De igual manera ocurre con la zona designada para la instalación del almacenamiento de H_2 a alta presión y todas las conducciones por las que circula el H_2 a alta presión. Estos elementos han de estar situados al menos en Zonas de tipo 2, ya que, en caso de fuga, el hidrógeno puede salir a gran velocidad, en función de la presión, la temperatura y la geometría de la fuga. Sin una ventilación adecuada, en cuestión de segundos la concentración de H_2 en las inmediaciones de la fuga puede alcanzar valores muy altos, y dado su alta combustibilidad y la presencia de O_2 como comburente en el aire puede dar lugar a accidentes muy graves.(1,2)

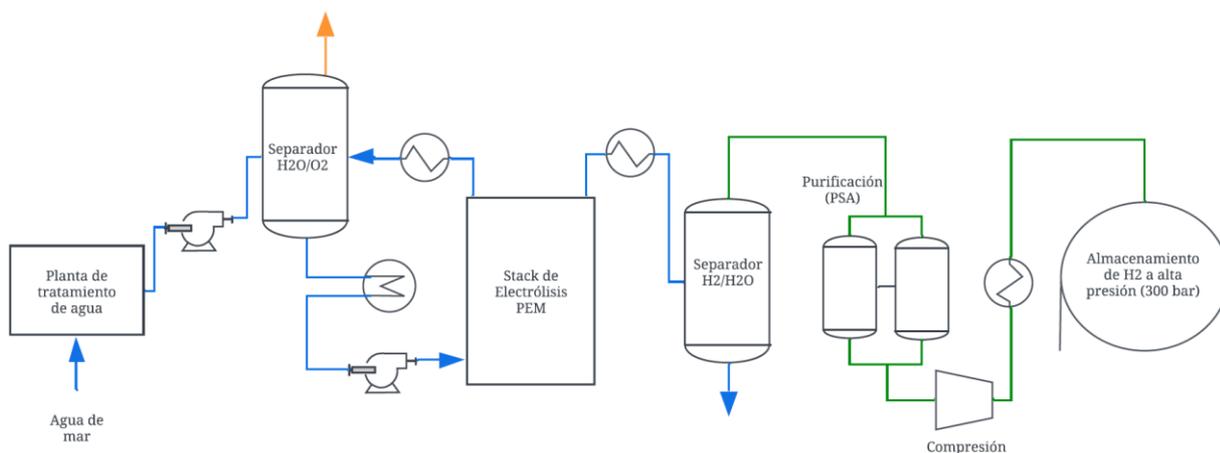


Figura 1: Esquema general de la planta de electrólisis PEM.

2.2 Descripción de productos y especificaciones.

2.2.1 Hidrógeno y su uso como combustible.

El hidrógeno es el elemento más pequeño y ligero y el más abundante del universo, formando el 75% del total de la materia conocida. Se trata de un elemento crítico para la vida ya que es la fusión nuclear del hidrógeno que se produce dentro del sol la que provee de energía para las actividades que tienen lugar en nuestro planeta. Cuando dos átomos de hidrógeno se combinan, se forma una molécula estable de H_2 , aunque puede reaccionar con otros elementos y moléculas bajo las condiciones adecuadas.(3)

De entre todas las cualidades del H_2 destaca actualmente su gran potencial como combustible limpio, y renovable en el caso del hidrógeno verde, esto se debe principalmente al rápido aumento de la demanda de energía en el mundo debido al desarrollo tecnológico y en cierta medida a un intento por mejorar la situación mundial actual en cuanto al deterioro de las condiciones ambientales, debido principalmente al cambio climático generado por la industrialización y las actividades antropogénicas derivadas de esta, involucrando entre otras la combustión de combustibles fósiles, liberando una gran cantidad de gases de efecto invernadero (CO_2 , CH_4 , N_2O , gases fluorados) a la atmósfera.(4)

Según los medios utilizados para su generación y las emisiones de CO_2 asociadas, el hidrógeno puede adquirir diferentes clasificaciones, siendo el hidrógeno verde aquel con menores emisiones de CO_2 asociadas. El hidrógeno verde es aquel generado de forma general mediante procesos de electrólisis, utilizando agua como materia prima y alimentando el proceso mediante energía proveniente de fuentes renovables. También se considera hidrógeno verde el generado mediante reformado de biogás o conversión bioquímica de la biomasa, siempre y cuando se cumplan una serie de requisitos de sostenibilidad establecidos. En España el consumo anual de hidrógeno se sitúa en torno a 500.000 toneladas, proveniente mayoritariamente de generación mediante reformado con gas natural (hidrógeno gris), donde el 95% del consumo se utiliza como materia prima en la industria de refino y petroquímica, cuya producción a su vez tiene lugar en la propia instalación.(5)

La generación y el uso del hidrógeno lleva asociado una serie de consideraciones desde el punto de vista de la seguridad que hay que tener presentes en todo momento y deben ser tomadas en cuenta desde las etapas tempranas del diseño de una planta de hidrógeno. El hidrógeno es un elemento con un alto potencial de ignición espontánea en presencia de oxígeno, por lo que hay que tener especial cuidado en no mezclar corrientes que puedan contener trazas de alguno de los compuestos, mientras que en ausencia del mismo se convierte en un asfixiante, por tanto, es necesaria la detección precoz de fugas y la correcta ventilación en todo momento de la planta en especial de las zonas en las que se produce el venteo de gases. Además, el hidrógeno tiene la cualidad de fragilizar los materiales metálicos, provocando una reducción de su resistencia a la fatiga y aumentando el riesgo de fractura, en especial en aceros de alta resistencia, por tanto, será necesario recurrir a depósitos reforzados con materiales compuestos y recubrimientos especiales para evitar este fenómeno, en especial a altas presiones. Al ser un gas incoloro e inodoro el uso de detectores de fugas y alarmas es esencial en cualquier planta de hidrógeno para poder advertir el escape de gas a tiempo y tomar las acciones necesarias para salvaguardar la seguridad del personal de planta y los equipos.(3)

El hidrógeno utilizado como combustible puede contener impurezas originadas durante su producción o introducidas durante el almacenamiento y manejo posterior. Estas impurezas, tanto en cantidad como en tipo, pueden afectar negativamente a los sistemas que usan hidrógeno. Por esta razón, la Norma UNE-EN 17124 (6), define las características de calidad del hidrógeno combustible para garantizar uniformidad en los productos destinados a vehículos y otras aplicaciones. Esta norma clasifica el hidrógeno en tres categorías: tipo I, tipo II y tipo III, que corresponden a los estados gaseoso, líquido y semisólido, respectivamente. Además, el tipo I se subdivide en los grados A, B y C, que indican niveles crecientes de pureza. La Norma UNE-EN 17124 (6) especifica la calidad mínima requerida del hidrógeno para su uso como combustible en aplicaciones de vehículos de carretera de pila de combustible (PEM):

Tabla 1: Especificación de pureza del H_2 para su uso como combustible en pilas de combustible PEM.

Fuente:(6)

Constituyente	Características
Índice de hidrógeno combustible (fracción molar mínima) ^a	99,97 %
Gases totales distintos del hidrógeno	300 µmol/mol
Concentración máxima de contaminantes individuales	
Agua (H ₂ O)	5 µmol/mol
Hidrocarburos totales (THC) ^b (Excluyendo el metano)	2 µmol/mol
Metano (CH ₄)	100 µmol/mol
Oxígeno (O ₂)	5 µmol/mol
Helio (He)	300 µmol/mol
Nitrógeno (N ₂)	300 µmol/mol
Argón (Ar)	300 µmol/mol
Dióxido de carbono (CO ₂)	2 µmol/mol
Monóxido de carbono (CO) ^c	0,2 µmol/mol
Compuestos de azufre totales (base H ₂ S)	0,004 µmol/mol
Formaldehído (HCHO) ^c	0,2 µmol/mol
Ácido fórmico (HCOOH) ^c	0,2 µmol/mol
Amoníaco (NH ₃)	0,1 µmol/mol
Compuestos halogenados ^d (base de iones de halógeno)	0,05 µmol/mol
Concentración máxima de partículas	1 mg/kg
Para los constituyentes que se añaden, como los hidrocarburos totales y los compuestos de azufre totales, la suma de los componentes debe ser inferior o igual al límite aceptable	

En el mismo documento se recoge la probabilidad de contaminación del hidrógeno por cada una de las impurezas recogidas en la tabla en función del proceso de producción del hidrógeno. Para el proceso de producción de hidrógeno mediante electrólisis por membrana de intercambio de protones (PEM), el O₂ y el H₂O están catalogados como impurezas potencialmente presentes, mientras que N₂, Ar, CO, CH₄, He, TS, NH₃, THC, HCHO, HCOOH y halógenos se encuentran catalogados como impurezas muy improbables.

El diseño de la planta se ha realizado para conseguir un hidrógeno producto al 99,9999% (v/v) de pureza y un contenido en agua <1 µmol/mol.

En cuanto al impacto ambiental derivado del uso de hidrógeno como combustible, se prevé que el uso de sistemas de hidrógeno tenga efectos benignos sobre el medioambiente. En su mayoría, la única sustancia producida por la reacción es agua pura, salvo en los sistemas que utilizan aire para la combustión del hidrógeno a altas temperaturas, los cuales pueden generar óxidos de nitrógeno (NO_x). Las pilas de combustible tipo PEM y los electrolizadores solo producen y utilizan agua respectivamente, y algunos sistemas pueden recuperar la mayor parte del agua para reutilizarla. En el futuro, si los vehículos impulsados por hidrógeno se vuelven predominantes, las áreas con alta densidad de vehículos, como las ciudades, podrían ver un aumento en los niveles de humedad, lo que podría requerir que estos vehículos incorporen dispositivos para condensar y capturar las emisiones de agua. En cualquier caso, lo cierto es que supondría una reducción muy significativa de contaminantes como CO, CO₂ y NO_x, los cuales son a la vez gases de efecto invernadero y gases nocivos para los seres vivos, contribuyendo por tanto a una mejora potencialmente sustancial de los contaminantes atmosféricos. (1)

2.3 Descripción de los procesos principales.

2.3.1 Electrólisis del agua

La aplicación de la electrólisis del agua en la industria es un proceso que se conoce desde principios del siglo XIX donde se utilizaban principalmente para la producción de amoníaco, utilizando electrólisis alcalina. Los electrolizadores son dispositivos capaces de descomponer las moléculas de agua en hidrógeno y oxígeno aplicando una corriente eléctrica. El proceso de electrólisis tiene lugar en las celdas electroquímicas, compuestas

por dos electrodos (ánodo y cátodo) que, en función del tipo de electrolizador, se encuentran sumergidos en un electrolito líquido o bien, adyacentes a una membrana de electrolito sólido, a una capa porosa en el lado opuesto de cada electrodo, que facilita el transporte de reactivos y productos, y a una placa bipolar que contribuye a mantener las propiedades mecánicas del dispositivo y distribuir los caudales de entrada y salida del electrolizador (ver Fig. 2). Estas celdas se encuentran a menudo conectadas en serie para conformar un stack de electrólisis. El stack junto con los equipos principales necesarios para la producción del hidrógeno, sin contar los equipos auxiliares, forman lo que se denomina el balance de planta.(3,7,8)

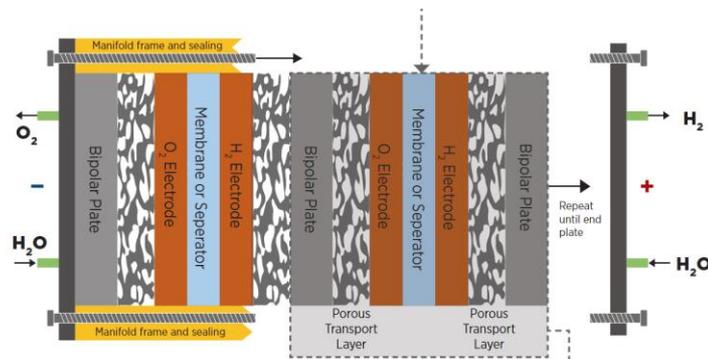


Figura 2. Esquema genérico de un stack de electrólisis. Fuente: (8)

Actualmente existen cuatro tecnologías principales para la producción de hidrógeno mediante electrólisis; Alcalina, de electrolito de membrana polimérica de intercambio de protones (PEM), de electrolito de membrana polimérica de intercambio de aniones (AEM) y de oxido solido (SOEC). De estas cuatro solamente las tecnologías de electrólisis Alcalina y PEM se encuentran en una fase de madurez avanzada y están disponibles a escala comercial. Por el contrario, las tecnologías de electrólisis AEM y SOEC, pese a ser tecnologías muy prometedoras, se encuentran todavía en fase de desarrollo a escala de laboratorio, aunque algunas compañías ofertan soluciones de potencia reducida de este tipo.

La **electrólisis alcalina** es la más madura de las tecnologías desarrolladas y la que cuenta con una mayor potencia instalada. El diseño de los stacks de electrólisis alcalina es simple, ofrecen una alta durabilidad y su coste de fabricación relativamente bajo. Se basan en el uso de un electrolito líquido, normalmente una solución 5-7M de KOH y un diafragma que contiene ZrO₂ entre el ánodo, de acero inoxidable con recubrimiento de Ni o aleación Ni/Co/Fe, y el cátodo de acero inoxidable con recubrimiento de Ni. La función del diafragma es la de mantener la separación de los gases generados y dejar pasar el agua, el KOH y los iones hidroxilo hacia el ánodo, donde se produce la semirreacción de oxidación, liberando O₂ gas y electrones. Estos últimos son transportados por la corriente hacia el cátodo, donde se lleva a cabo la semirreacción de reducción y liberación del H₂ gas. El diafragma no permite llevar a cabo una completa separación de ambos gases, de manera que estos son capaces de difundir a través del diafragma hacia el lado contrario, empeorando la eficiencia y en los casos más extremos comprometiendo la seguridad. Otra desventaja de la electrólisis alcalina es que opera a niveles de densidad de carga relativamente bajos, lo que repercute directamente en la cantidad de H₂ producido. Esto se debe principalmente a las pérdidas óhmicas debido a la resistencia a través del electrolito líquido y el diafragma. Es posible disminuir la difusión en el diafragma aumentando su grosor a costa de una mayor resistencia óhmica. A su vez, el uso de un electrolito líquido no permite la operación de la celda a alta presión, lo que dificulta también el diseño de stacks compactos. Tampoco permite una respuesta rápida ante cambios en las condiciones de operación lo cual hace que su dinámica sea lenta. Esto unido a que los electrolizadores alcalinos operan en un rango de carga parcial relativamente estrecho (40-100%) la sitúan por detrás del resto de tecnologías a la hora de acoplarse con energías renovables, en esencia variables, para la producción de hidrógeno verde. A pesar de ello, es una tecnología completamente vigente que sigue perfeccionándose, y que actualmente ofrece un rendimiento no muy dispar al de la electrólisis PEM.(7,8)

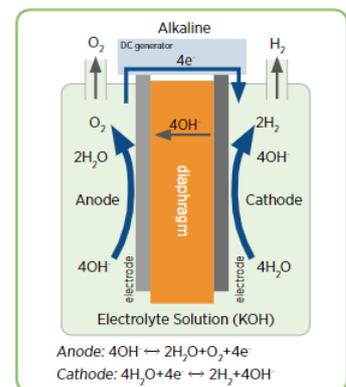


Figura 3. Esquema de una celda alcalina. Fuente:(8)

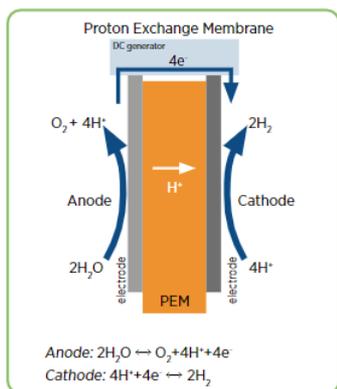


Figura 4. Esquema de una celda PEM. Fuente:(8)

La **electrólisis PEM** (Proton Exchange Membrane), también conocida como electrolisis de membrana de intercambio de protones, representa una de las tecnologías más prometedoras en el panorama de la producción de hidrógeno verde. Esta técnica utiliza una fina membrana sólida de ácido perfluorosulfónico Nafion (9) que facilita el paso de los protones, actúa como barrera para los gases, lo que mejora la pureza del hidrógeno generado y reduce el riesgo de mezcla con el oxígeno y además permite operar a altas presiones diferenciales debido a su robustez química y mecánica, permitiendo obtener presiones de hasta 70 bares en el lado del H_2 mientras el lado del O_2 permanece a presión atmosférica. El uso de estas membranas junto con altos voltajes y la generación de O_2 en el ánodo genera un ambiente corrosivo, por lo que es necesario el uso de materiales que soporten tales condiciones. El ánodo, generalmente de titanio con recubrimientos de metales preciosos como el iridio o el platino, y el cátodo, a menudo de acero inoxidable igualmente recubierto con platino u otros catalizadores para optimizar la eficiencia y la durabilidad

de la celda. Estos requisitos hacen que el coste de un stack PEM sea superior a uno alcalino. Los electrolizadores PEM presentan una arquitectura compacta y son capaces de operar a altas densidades de corriente, lo que se traduce en una mayor producción de hidrógeno por unidad de área superficial y hace posible un diseño modular y fácilmente escalable. Una de las ventajas significativas de la tecnología PEM es su rápida dinámica, lo que facilita el control del proceso y le otorga la capacidad para responder rápidamente a las fluctuaciones en la oferta de energía, y, por tanto, la hace ideal para integrarse con fuentes de energía renovables intermitentes como la solar o la eólica. En cuanto a las desventajas; la electrolisis PEM es muy sensible a las impurezas presentes en el agua como el hierro, cobre, cromo y sodio, por lo que es necesario utilizar únicamente agua desionizada como alimentación, lo que a menudo supone un coste adicional de tratamiento y controles de calidad del agua utilizada. Además, la durabilidad de estos equipos es inferior a los stacks alcalinos.(8,10,11)

La **electrólisis AEM** (Membrana Intercambiadora de Aniones), es una tecnología emergente en el campo de la producción de hidrógeno que combina algunas de las mejores características de la electrolisis alcalina y PEM. En la configuración AEM, se utiliza una membrana sólida que permite el paso de aniones, típicamente OH^- , y evita la mezcla de gases producidos, mejorando así la seguridad y la pureza del hidrógeno. Esta membrana actúa como barrera física entre el ánodo y el cátodo, y al mismo tiempo, facilita la conducción de los iones hidróxido desde el ánodo hacia el cátodo, donde se genera el hidrógeno. Una ventaja significativa de la tecnología AEM es el uso de catalizadores no preciosos, lo cual reduce los costes en comparación con la electrolisis PEM. Además, los electrolizadores AEM pueden operar a densidades de corriente comparables a los PEM, lo que se traduce en una alta producción de hidrógeno y permite su funcionamiento con rangos de energía variables proveniente de fuentes renovables. La electrolisis AEM permite operar en condiciones de alcalinidad, reduciendo el riesgo a que se produzca la corrosión de los componentes y aumentando la vida útil de la celda. La electrolisis AEM aún enfrenta desafíos como la mejora en la estabilidad química y mecánica de la membrana, lo cual limita su durabilidad. Además, el rendimiento que ofrece hasta el momento es mejorable debido principalmente a una baja conductividad de la membrana y una cinética demasiado lenta. Aunque es una tecnología menos madura que la electrolisis alcalina tradicional o PEM, sus prometedoras características hacen que la investigación y el desarrollo en AEM sean muy activos, con el propósito de optimizar la eficiencia, durabilidad y coste de los sistemas. (8,12)

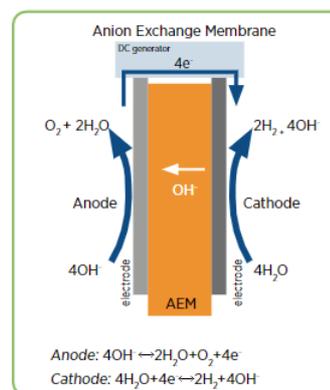


Figura 5. Esquema de una celda AEM. Fuente:(8)

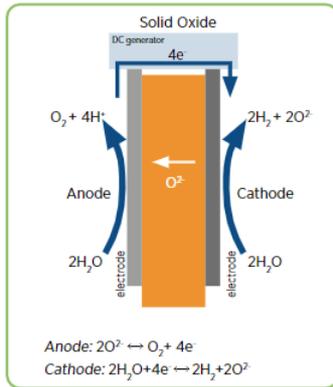


Figura 6. Esquema de una celda SOEC. Fuente:(8)

La **electrólisis de óxido sólido** (SOEC, por sus siglas en inglés Solid Oxide Electrolysis Cell) destaca por su capacidad para operar a temperaturas elevadas, generalmente entre 700°C y 850°C. Esta tecnología utiliza un electrolito de cerámica que conduce iones de oxígeno desde el ánodo hacia el cátodo a través de un mecanismo de transporte iónico a alta temperatura. En el ánodo, el agua se descompone generando hidrógeno y liberando iones de oxígeno, que luego migran a través del electrolito hasta el cátodo, donde se combinan para formar gas oxígeno. Además, pueden funcionar como celdas de combustible y realizar la co-electrólisis de CO₂ y agua para producir gas de síntesis, fundamental en la industria química. Sin embargo, los ciclos termoquímicos, especialmente durante apagados o ajustes, aceleran la degradación y reducen su vida útil. Otros problemas incluyen dificultades con el sellado a altas presiones y la contaminación de los electrodos. Actualmente, los SOEC se usan a escala de kW, aunque algunos proyectos han alcanzado 1 MW.(8,13)

A modo de resumen, en la siguiente tabla se recogen y se comparan las características más importantes de las distintas tecnologías de electrólisis más relevantes disponibles actualmente.

Tabla 2. Comparación de las tecnologías disponibles de electrólisis. Fuente: a partir de (11,14)

Especificación	Alcalina	PEM	SOEC	AEM
Madurez tecnológica TRL	9	7-9	3-4	3-4
Temperatura de celda (°C)	65-100	70-90	900-1000	50-70
Presión de celda (bar)	25-30	30-80	<30	<30
Densidad de corriente (mA/cm ²)	200-500	800-3000	300-1000	200-500
Potencial de celda (V)	1,8-2,4	1,8-2,2	0,95-1,3	1,8-2,2
Eficiencia energética (%)	50-70,8	70-80	81-86	39,7
Consumo energético del sistema (kWh/Nm ³)	4,5-7,5	5,8-7,5	2,5-3,5	4,8-5,2
Producción de Hidrógeno (Nm ³ /h)	<760	0,265-30	-	0,25-1
Durabilidad del stack (h)	10000	<20000	<40000	-
Elemento transportador de carga	OH ⁻	H ⁺	O ₂ ⁻	OH ⁻
Coste de capital (€/kW _{el})	1000-1200	1860-2320	>2000	-

2.3.2 Purificación de hidrógeno mediante adsorción

La adsorción es un proceso mediante el cual uno o varios componentes de una corriente líquida o gas se difunden hacia la superficie de un sólido en cuya superficie quedan retenidos formando enlaces o bien por efecto de fuerzas intermoleculares débiles. El componente adsorbido se denomina adsorbato mientras que la partícula en cuya superficie queda retenido se conoce como adsorbente. Con el fin de conseguir un ratio elevado de área superficial de adsorción por unidad de volumen de adsorbente, se utilizan partículas de sólido porosas de pequeño diámetro, donde la mayor parte de la adsorción se produce en la superficie de dichos poros. Durante el proceso de adsorción (alta presión) llega un punto en el que el adsorbente queda saturado o prácticamente al límite de saturación en adsorbato. En este caso se realiza lo que se denomina una regeneración del adsorbente o regeneración del lecho, mediante la cual se desorbe el adsorbato (baja presión), y el sólido adsorbente se prepara para ser reutilizado de nuevo. Los procesos de adsorción se pueden considerar como procesos de purificación

o separación en función del contenido en masa de los componentes a adsorber. Como heurística se puede considerar hasta un 10%wt del componente a separar en la corriente alimentada como una purificación, mientras que de forma general para valores superiores se puede considerar una operación de separación.(15)

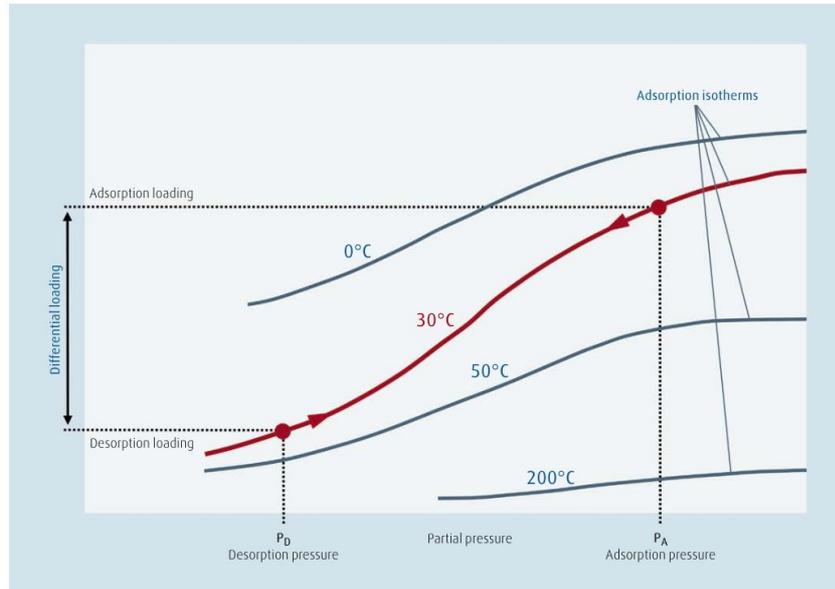


Figura 7. Proceso de adsorción y desorción mediante PSA. Fuente:(16)

La purificación del hidrógeno mediante adsorción con sílica gel, en concreto mediante el uso de sistemas PSA (Pressure Swing Adsorption) es una práctica muy común en la industria que permite la operación continua en ciclos de adsorción- regeneración y además ofrecen un consumo energético óptimo. Un sistema PSA está formado normalmente por lechos de adsorción, skid de válvulas y tuberías interconectadas, válvulas de control, instrumentación y un sistema propio de control de la unidad. Un ciclo de PSA está compuesto de 4 etapas básicas para conseguir la purificación del hidrógeno; adsorción, despresurización, regeneración y represurización. Durante la etapa de adsorción las impurezas presentes en la corriente de alimentación son adsorbidas a alta presión, normalmente en un rango de 10-40 bar, hasta que se alcanza el equilibrio de adsorción. El hidrógeno alimentado fluye a través del lecho de adsorción y sale purificado por cabeza. Al transcurrir el tiempo de adsorción estipulado para el lecho, este se lleva hasta la etapa de regeneración y el hidrógeno alimentado se deriva hacia otro lecho disponible para continuar el proceso de adsorción. En los sistemas PSA actuales la etapa de regeneración consta de 5 pasos secuenciales; ecualización de presiones, provisión de purga, despresurización final, purgado o regeneración y represurización. En la figura 8 se puede ver una representación de las distintas etapas y de cómo se realiza la gestión de presiones de forma óptima para un sistema PSA formado por 4 lechos de adsorción.(16)

La etapa de ecualización de presiones comienza justo después de acabar la etapa de adsorción del lecho y es la etapa en la que da comienzo la despresurización del lecho. En esta etapa el hidrógeno a alta presión que se encuentra contenido en el espacio vacío del sólido adsorbente y en los huecos entre partículas se utiliza para presurizar otro lecho que acaba de finalizar su etapa de regeneración. Cada una de las etapas de ecualización de un sistema PSA contribuye a reducir las pérdidas de hidrógeno y aumentar la recuperación, es por esto por lo que los sistemas PSA son más eficientes cuanto mayor es el número de lechos de adsorción que lo forman. La etapa de ecualización termina una vez el lecho se ha despresurizado hasta un determinado valor de presión, entonces da comienzo la etapa de provisión de purga.

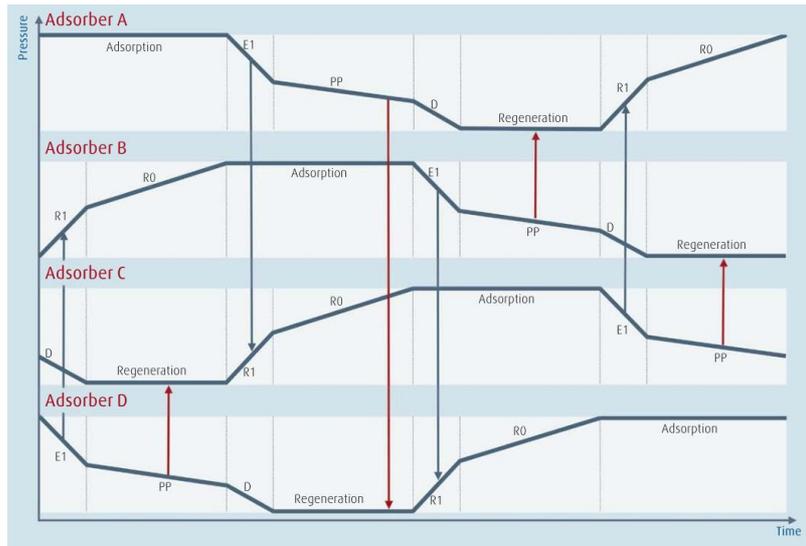


Figura 8. Ciclo PSA para un sistema de 4 lechos. Fuente:(16)

En la etapa de provisión de purga, el hidrógeno todavía parcialmente presurizado se lleva a otro lecho que se encuentra en fase de purgado o regeneración como corriente de arrastre en la desorción del adsorbato. De nuevo tras despresurización del lecho hasta un valor de presión determinado finaliza la etapa de provisión de purga y comienza la etapa de despresurización final. En esta etapa la presión restante del lecho se libera en contracorriente, dando comienzo a la regeneración del lecho. En la etapa de purgado o regeneración, se produce la desorción final del adsorbato del lecho a la presión más baja del ciclo PSA. El adsorbato desorbido fruto de la disminución de la presión es arrastrado por la corriente de hidrógeno proveniente de un lecho en etapa de provisión de purga, reduciendo al mínimo la carga de adsorbato presente en el sólido adsorbente y completando la regeneración del lecho. Antes de comenzar el siguiente ciclo de adsorción el lecho regenerado debe presurizarse de nuevo durante la etapa de represurización. Para ello se utiliza el hidrógeno proveniente de otro lecho en etapa de equalización hasta que ambos lechos alcanzan el mismo valor de presión. Una vez alcanzado dicho valor de presión se termina de presurizar el lecho hasta su valor final mediante alimentación con hidrógeno a presión proveniente de la producción, dando comienzo de nuevo al siguiente ciclo de adsorción.

2.3.3 Compresión del hidrógeno

Aunque el hidrógeno es el carburante con mayor densidad de energía gravimétrica; 39,5 kWh/kg frente a los 13,1 kWh/kg del petróleo, también es uno de los que menor densidad de energía volumétrica presenta; 2,2 kWh/m³ en condiciones normales, frente a los 10.445,3 kWh/m³ del petróleo. Para aumentar la densidad de energía volumétrica del hidrógeno y así poder competir con otros carburantes, es necesario comprimir el hidrógeno, ya sea mediante compresión mecánica en estado gaseoso o mediante licuefacción para obtener hidrógeno en estado líquido. Salvo en los casos más extremos, el comportamiento de la mayoría de los gases se puede modelar haciendo uso de la ecuación de los gases ideales. En el caso del hidrógeno, este no se comporta como un gas ideal a partir de aproximadamente 100 bares de presión, por lo que es necesario añadir un factor de compresibilidad (Z) para corregir la desviación y describir el comportamiento real del gas a presiones mayores:

$$PV = nRZT$$

Siendo P la presión absoluta (Pa), V el volumen ocupado por el gas (m³), n el n° de moles de gas, R la constante de los gases (8.32 J/kg K) y T la temperatura (K). Este factor de compresibilidad (Z) puede calcularse mediante ecuaciones de estado o bien obtenerse gráficamente y mediante el uso de tablas que se pueden encontrar en la bibliografía. Haciendo uso de la ecuación anterior podemos calcular el volumen de hidrógeno en unas condiciones de presión y temperatura determinadas, partiendo de unas condiciones conocidas de volumen, presión y temperatura y haciendo uso de los factores de compresibilidad, según la siguiente relación:

$$\frac{P_1 V_1}{Z_1 T_1} = \frac{P_2 V_2}{Z_2 T_2}$$

Para calcular el trabajo necesario para comprimir un gas podemos hacer uso de la primera ley de la termodinámica, formulada de la siguiente manera:

$$\dot{W}_{in} = \dot{Q}_{loss} + \dot{m}(h_{2t} - h_{1t})$$

Siendo \dot{W}_{in} el trabajo que lleva a cabo el compresor (W), \dot{Q}_{loss} las pérdidas de calor (W), \dot{m} el flujo másico (kg/s), donde h_{1t} y h_{2t} son los valores de entalpía de entrada y salida respectivamente (J/kg). Según como se lleva a cabo el proceso de compresión se aproximará más a un proceso adiabático, isotérmico o politrópico. Para que el proceso sea isoterma debe llevarse a cabo muy lentamente para mantener la temperatura del gas constante, mientras que un proceso adiabático ideal ocurre rápidamente en ausencia de intercambio de calor hacia dentro o hacia fuera del sistema. En general, la mayoría de los procesos no son idealmente isotérmicos ni adiabáticos, sino que se encuentran en un punto medio, lo que se denomina un proceso politrópico. Un proceso politrópico se caracteriza por la siguiente expresión:

$$P_1 V_1^n = P_2 V_2^n, \dots$$

Donde n es el exponente politrópico, determinado experimentalmente para el tipo de compresor en particular. La eficiencia de un proceso politrópico se suele considerar como 0,72-0,85 para compresores centrífugos y 1 para compresores recíprocos, aunque puede calcularse usando la siguiente expresión:

$$\eta_p = \frac{n/(n-1)}{k/(k-1)}$$

Siendo k la relación de calor específico para el hidrógeno. La cabeza politrópica, se define normalmente como el trabajo expresado en N-m/kg. A una determinada velocidad y capacidad del compresor, la cabeza desarrollada por un compresor centrífugo no varía, independientemente del gas que se comprime, sin embargo, el aumento de presión que se obtiene para un determinado valor de cabeza sí va a depender del gas que se somete a compresión. La cabeza politrópica puede calcularse mediante la siguiente expresión:

$$H_p = Z_{avg} \bar{R} T_1 \frac{n}{(n-1)} \left(r_p^{\frac{n-1}{n}} - 1 \right)$$

Siendo Z_{avg} el factor de compresibilidad medio entre la entrada y la salida del compresor y r_p la relación de compresión, la cual se obtiene dividiendo la presión absoluta de descarga entre la presión absoluta de succión. La relación de compresión máxima que se puede alcanzar en un compresor viene limitada por la temperatura de funcionamiento admisible en función del diseño y las propiedades mecánicas del compresor. Cuando es necesario trabajar con relaciones de presión muy altas, es una práctica habitual dividir el trabajo de compresión en dos o más etapas con refrigeración intermedia, consiguiendo una configuración más eficiente desde el punto de vista energético. El ahorro obtenido al adoptar esta configuración se estima comparable al coste de los equipos de refrigeración y su mantenimiento. Además, esta configuración supone un beneficio adicional, dado que en los sistemas de compresión con refrigeración intermedia la temperatura de descarga es menor, lo cual reduce la necesidad de utilizar compresores reforzados con materiales especiales. En la práctica, los compresores multietapa operan de forma politrópica, de manera que el gas comprimido se enfría a la salida de cada etapa, contribuyendo a hacer el proceso menos adiabático y más isotérmico.(17)

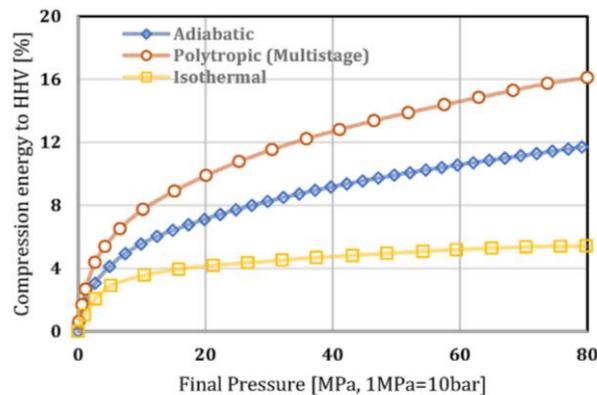


Figura 9. Energía requerida para comprimir el hidrógeno comparado con su poder calorífico superior. Fuente:(17)

En la figura 9 se puede comprobar como varía la energía requerida, expresada en porcentaje del poder calorífico superior (PCS o HHV en inglés) del hidrógeno, para la compresión del gas hasta una determinada presión. Como

se muestra en la gráfica, la energía requerida para comprimir el hidrógeno mediante un proceso politrópico es mayor que la requerida en los procesos de compresión puramente adiabático e isotérmico, aunque en la práctica estos últimos no resultan factibles. Cabe destacar que para la compresión de hidrógeno a 800 bares mediante compresión multietapa la energía necesaria es entorno a un 16% del poder calorífico superior del hidrógeno (142,5 MJ/kg). También se puede apreciar como la energía requerida para comprimir el hidrógeno en la franja de 0-100 bar es, en proporción, muy superior a la requerida para comprimirlo a mayores presiones. De manera que comprimir el hidrógeno a 100 bar requiere en torno al 8% del PCS del hidrógeno mientras que comprimirlo a 800 bar sólo requiere el doble de energía.(17)

Para la elección del tipo de compresor y el número de etapas requeridas es necesario tener en cuenta una serie de factores como son, el caudal volumétrico o flujo másico, la presión de succión, la presión de descarga, la temperatura de succión y la gravedad específica del gas. Existen diagramas, como el de la figura 10, donde se muestra qué tipos de compresores ofrecen un mejor rendimiento en función del caudal volumétrico de entrada y la presión de descarga. Por lo general, se puede apreciar que para aplicaciones donde es necesario procesar grandes caudales de gas la opción idónea será la de un compresor centrífugo, mientras que para aplicaciones que precisen la compresión de caudales más pequeños la mejor opción es un compresor reciprocante. Además, como se ha discutido anteriormente en esta sección, para aplicaciones donde la presión de descarga es muy elevada, o, dicho de otra manera, la relación de compresión es muy alta será necesario el uso de compresores multietapa.(18)

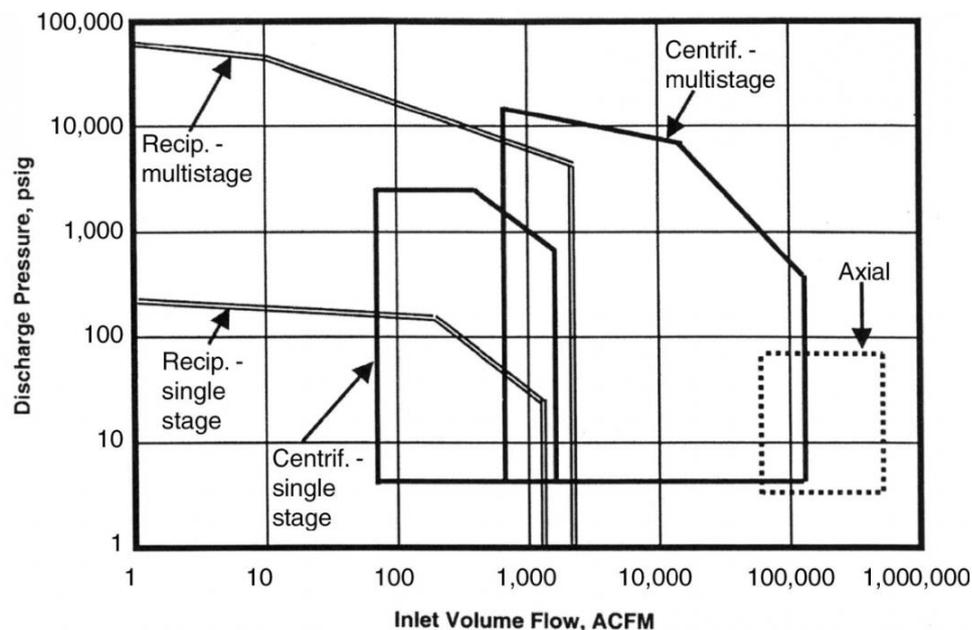


Figura 10. Gráfico para la selección del tipo de compresor. Las áreas indican las regiones de mejor rendimiento. Fuente:(18)

La compresión del hidrógeno en el propio electrolizador puede resultar una opción atractiva desde el punto de vista del ahorro energético, ya que se ahorraría en comprimir el hidrógeno de forma mecánica en la franja de baja presión en la que resulta más costoso. Por ejemplo, si se lleva a cabo la compresión del hidrógeno a 40 bar en el electrolizador, se estaría generando un ahorro energético del 6% del PCS del hidrógeno. La contrapartida es que el electrolizador debe haber sido diseñado para soportar dicha presión, lo que requiere de componentes estructurales reforzados y membranas con un mayor grosor, como es el caso de la electrólisis tipo PEM, lo cual supone un aumento del coste. Una mayor presión supone además un potencial aumento de la permeación del hidrógeno a través de la membrana, lo cual va en detrimento de la eficiencia y la duración de la misma. Un aumento en la permeación del hidrógeno a través de la membrana por efecto de la difusión y la presión diferencial supondría un aumento de la concentración de hidrógeno en el lado del oxígeno (ánodo), generando una pérdida de rendimiento en la producción y un mayor riesgo para la seguridad.

En la figura 11 se muestra el límite inferior de explosividad para la operación balanceada y diferencial en una membrana PEM. En operación diferencial el lado del hidrógeno se encuentra a alta presión mientras que el lado del oxígeno a baja, por el contrario, en operación balanceada ambos lados operan a la misma presión, lo cual hace que, en caso de que se opere a alta presión en modo balanceado, sea necesario que el lado del oxígeno y el resto de equipamiento aguas abajo esté diseñado para soportar tales presiones. Esto explica también por qué el

límite inferior de explosividad mostrado en la figura es sensiblemente mayor en operación balanceada que en operación diferencial, ya que un mismo volumen de hidrógeno se encuentra más diluido en un volumen de oxígeno a alta presión que en el mismo volumen de oxígeno a baja presión.

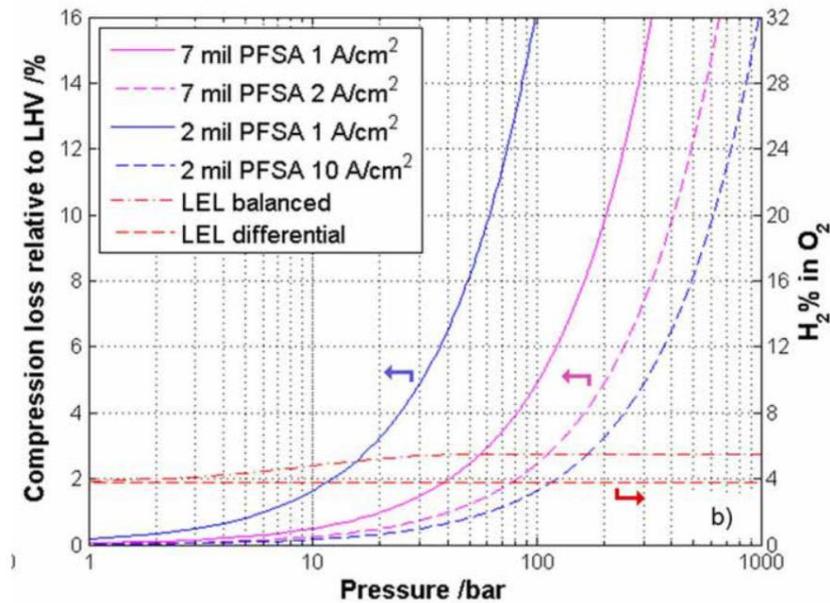


Figura 11. Pérdidas de energía por compresión en un electrolizador PEM en función de la presión de salida y el grosor de membrana. Fuente:(19)

En la figura se puede apreciar cómo, por un lado, al aumentar el grosor de la membrana utilizada en el electrolizador la intensidad de corriente por superficie se consigue disminuir las pérdidas por compresión, referidas como porcentaje del poder calorífico inferior del hidrógeno, y el porcentaje de hidrógeno en el lado del oxígeno (ánodo). Esto es debido a la mayor resistencia estructural que se consigue con el aumento de grosor y al efecto diluidor sobre el hidrógeno que permea hacia el ánodo, generado por la aplicación de una mayor intensidad de corriente por área, lo que provoca un aumento de la velocidad de generación de oxígeno.(19)

2.3.4 Almacenamiento del hidrógeno.

Para aumentar la densidad de energía volumétrica del hidrógeno y así poder competir con otros carburantes, se han desarrollado diversas tecnologías para comprimir y almacenar el hidrógeno; almacenamiento gaseoso a alta presión, almacenamiento líquido, almacenamiento en líquidos orgánicos, almacenamiento sólido en hidruros metálicos, etc. (20). Almacenar el hidrógeno líquido a temperaturas criogénicas lleva asociado una serie de problemas que lastran su puesta en práctica de forma más extendida. El principal es que alrededor del 35% de la energía contenida en el hidrógeno se invierte únicamente en el cambio de fase de gas a líquido, lo que supone alrededor del triple de la energía que se necesita para comprimirlo mecánicamente (21). Por otra parte, el almacenamiento del hidrógeno gaseoso a alta presión, hasta 700 bar, implica el uso de tanques de almacenamiento reforzados con materiales compuestos y fibra de carbono para cumplir con los requerimientos de seguridad. El almacenamiento de hidrógeno gas a temperaturas criogénicas es una solución que busca superar las limitaciones del almacenamiento líquido y el almacenamiento gaseoso a alta presión, de manera que se reducen las pérdidas típicas asociadas a la evaporación y condensación del hidrógeno líquido a la vez que se reducen los requerimientos de material reforzado para los tanques al permitir operar a una presión menor, normalmente de unos 300 bar.(22)



Figura 12. Tanques para almacenamiento estacionario de hidrógeno. Fuente:(24)

Comprimir el hidrógeno desde presión atmosférica hasta 70 bares, un valor de presión típico para redes gasísticas de transmisión permite reducir el volumen del gas por un factor de 65. Comprimirlo hasta 1000 bares, una presión asumible para el almacenamiento en tanques puede reducir el volumen hasta un factor de 625, mientras que la licuefacción puede reducirlo por un factor de 870. (8) En condiciones normales, el hidrógeno se encuentra en fase gas y cuenta con el segundo menor punto de ebullición y fusión de todos los elementos por detrás del helio, lo cual hace que enfriar el gas para su almacenamiento líquido requiera de grandes cantidades de energía, por ello el almacenamiento de hidrógeno en estado gaseoso, sigue siendo la elección predominante en el ámbito industrial.(23)

Después de ser comprimido el H₂ se almacena normalmente en tanques o depósitos de geometría cilíndrica con casquetes esféricos en ambos extremos, donde se encuentran situados las válvulas para la entrada y salida del gas almacenado y las válvulas de seguridad y alivio para la purga del hidrógeno en caso de sobrepresiones. Estos depósitos se fabrican con materiales reforzados, normalmente materiales compuestos de fibra de vidrio, carbono y aluminio, para cumplir con los requisitos mecánicos y estructurales que deben cumplir para el almacenamiento de hidrógeno a alta presión. Aunque este tipo de materiales son mucho más caros que el acero, su uso está justificado ya que permiten la construcción de dispositivos de almacenamiento de muy alta presión, disminuyen el riesgo de fragilización por hidrógeno y minimizan el peso total del sistema. Actualmente existen 5 tipos de depósitos fabricados con distintos materiales en función de la presión máxima de hidrógeno que tienen que soportar.(23)

Tabla 3. Clasificación de tanques para almacenamiento de hidrógeno. Fuente: a partir de (24)

Tipo	Material			Presión Máxima (bar)	Aplicaciones
	Metal	Materiales compuestos	Polímeros		
I	Acero/Aluminio	-	-	Al: 175 Acero: 200	Submarinas
II	Acero/ lámina de Aluminio	Bobinado de fibra en la sección cilíndrica	-	Al/vidrio: 263 Acero/fibra de carbono: 299	Almacenamiento estacionario y tecnologías de pila de hidrógeno
III	Aluminio/ lámina de Acero	Recubrimiento exterior de fibra de vidrio/aramida o fibra de carbono	-	Al/vidrio: 305 Al/aramida: 438 Al/carbono: 700	Vehículos de hidrógeno.
IV	-	Recubrimiento exterior de fibra de carbono	Lámina de polímero	350 (autobuses) 700	Vehículos de hidrógeno
V	-	Materiales compuestos	-	1000	Aeroespacial

Los tanques de tipo I están fabricados únicamente en metal, normalmente acero y aleaciones de aluminio. La ventaja principal de este tipo de almacenamiento es su bajo coste y su gran capacidad de almacenamiento. Ofrecen una presión de almacenamiento de hasta 200 bar y generalmente están destinados a almacenamiento estacionario y aplicaciones submarinas. La principal desventaja es su peso debido a la alta densidad de los metales utilizados en su construcción y al mayor grosor de las paredes del depósito en comparación con el resto de los tipos de tanque. Los tanques de tipo II son similares a los de tipo I con la peculiaridad de que cuentan con enrollamientos de filamentos de fibra de vidrio o carbono que recubren la parte cilíndrica del depósito (sin incluir los casquetes). Estos tanques también están destinados típicamente a almacenamiento estacionario, con la ventaja de que ofrecen almacenamiento de hidrógeno hasta los 300 bares de presión. Los tanques de tipo III y

IV están destinados principalmente a su uso en el ámbito automovilístico, puesto que reducen significativamente el peso del depósito. Ambos tipos de tanque están totalmente revestidos por materiales compuestos, normalmente fibra de carbono Tory TS 700S o TS 800S. La diferencia es que los tipo III tienen una lámina metálica normalmente de aleación AA6061 o AA7000 mientras que los tipo IV montan una lámina polimérica, lo que los hace significativamente más ligeros. Ambos tipos de tanques pueden soportar presiones en un rango de 300-700 bar en función de los materiales de construcción, lo cual permite almacenar grandes cantidades de hidrógeno en depósitos compactos. Los tanques de tipo V están contruidos completamente de materiales compuestos, lo cual los hace alrededor de un 20% más ligeros que los tipo IV, siendo capaces de soportar presiones hasta 1000 bares. Esta tecnología se encuentra actualmente en fases de desarrollo y se prevé su uso en aplicaciones específicas del ámbito aeroespacial ya que el alto coste de los materiales compuestos limita enormemente su aplicación en el ámbito industrial. (23,24)

2.4 Especificaciones técnicas de los equipos principales.

2.4.1 Sistema de Tratamiento de Aguas

Para poder producir hidrógeno a partir de agua de mar es necesario eliminar las impurezas y las sales presentes en ella. En la actualidad existen varias tecnologías capaces de eliminar las sales presentes en el agua de mar. Entre los procesos térmicos destaca la destilación, la cual está enormemente asentada en países con acceso a fuentes de calor de bajo coste debido a que tiene como inconveniente un alto consumo unitario de 10 a 20 kWh/m³. Existen también tecnologías de membranas, entre las que destaca la ósmosis, que se basa en la separación de las moléculas de sal del agua a través de una membrana semipermeable. Sus principales ventajas son su carácter modular, lo que permite ampliar la capacidad de tratamiento el sistema de ósmosis y un consumo energético menor que el de los procesos de separación térmicos. Como contra son sistemas en los que se necesita de un pretratamiento (desbaste y tamizado, desinfección, coagulación-floculación, regulación de pH, ultrafiltración) para maximizar su vida útil.

Para la utilización de agua de mar en el proceso de electrólisis se hará uso de un sistema de tratamiento de agua mediante ósmosis inversa con pretratamiento de ultrafiltración y electrodesionización (EDI) en caso de necesitar agua ultrapura para alimentar el sistema de electrólisis, de manera que para que pueda ser utilizada por el electrolizador el valor de conductividad del agua ha de ser menor a <0,25 µS/cm.

El sistema de ósmosis diseñado cuenta con 1 etapa de un paso formado por 6 elementos en un recipiente a presión que utilizan la membrana FilmTec™ SW30 de Dupont, especialmente diseñada para la desalinización de aguas de mar hasta un SDI (Índice de densidad de sedimentación de la alimentación máxima) <5, con una eficiencia mínima del 40%, el sistema suministra 10 l/h de agua desalinizada como permeado, generando 25 l/h de agua de rechazo en el concentrado, que serán vertidos directamente al mar.

El módulo de electrodesionización elimina los iones restantes en el agua mediante intercambio iónico con resinas, las cuáles se regeneran de forma continua debido al campo eléctrico aplicado en el módulo y no son susceptibles de degradación, por lo que el mantenimiento necesario asociado a este equipo es mínimo.

Tabla 4. Características membrana ósmosis inversa

Tipo de Membrana	Poliamida
Máxima Temperatura de operación	de 45°C
Máxima Presión de operación	83 bar
Máxima pérdida de carga	1 bar
Rango de pH:	
- Operación continua	2-11
- Operaciones de limpieza	1-13
Máximo SDI alimentación	<5
Tolerancia a cloro libre	<0,1ppm

2.4.2 Electrolizador PEM

Dentro de las tecnologías comercialmente viables, se ha propuesto la electrólisis PEM para la elaboración de este trabajo, puesto que presenta una serie de mejoras respecto a la electrólisis alcalina. Las más significativas son una mayor simplicidad del proceso de producción de hidrógeno por PEM, ya que se requiere generalmente de menos equipos y etapas, lo cual también favorece la construcción de instalaciones más compactas. Otra ventaja notable de la electrólisis PEM frente a la alcalina es la posibilidad de trabajar dentro de un amplio rango de operación entre el 5-130% de la capacidad nominal del electrolizador, que unido a su rápida respuesta dinámica ante cambios en las condiciones de operación los hacen ideales para generación de hidrógeno verde, es decir hidrógeno generado mediante electrólisis haciendo uso únicamente de energía proveniente de fuentes renovables, normalmente fotovoltaica y eólica cuya disponibilidad es variable a lo largo del tiempo. Además, los electrolizadores PEM son capaces de operar a presiones de hasta 70 bar mientras que los alcalinos son capaces de llegar a 30 bar de forma general, lo cual se traduce en un ahorro de equipos de compresión mecánica para comprimir el hidrógeno en la franja de 0 a 100 bar en la cual la compresión mecánica del hidrógeno resulta menos eficiente como se ha discutido en la sección 2.3.3 , por tanto, puede resultar una opción atractiva comprimir el hidrógeno en esa franja de presiones en el propio electrolizador y aguas abajo utilizar compresores mecánicos para aumentar la presión del hidrógeno producto para cumplir con los requisitos según su uso final. Como contrapartida, la electrólisis PEM suele requerir por lo general de un mayor capital inicial debido principalmente al elevado coste de las membranas de intercambio de protones, (a mayor presión mayor será el grosor de membrana requerido y por tanto el coste) y los catalizadores de óxido de iridio (ánodo) y platino (cátodo).(8,10)

El stack de electrólisis propuesto está compuesto de 28 celdas de electrólisis PEM, funcionando a 56 V y 900 A de con una potencia conjunta de 50 kWe (ver Anexo I). Cuando se enciende la alimentación, salen burbujas de gas de hidrógeno del extremo negativo, llamado cátodo, y el oxígeno emerge en el extremo positivo, el ánodo. No obstante, el cloruro cargado negativamente presente en la sal de agua de mar puede corroer el extremo positivo, limitando la vida útil del sistema, por lo que cobra especial importancia el proceso de tratamiento de agua de mar para la obtención de agua ultrapura apta de ser utilizada en el stack de electrólisis.

Se ha fijado una producción mínima de H₂ de 10 Nm³/h, lo cual requeriría una cantidad estequiométrica de 8,1 l/h de H₂O. El consumo neto de agua fresca del electrolizador es de 8,5 l/h, aunque para asegurar un caudal de agua suficiente en todo momento durante el funcionamiento del stack de electrolizadores y contribuir a una mejor disipación del calor en el stack, se ha aumentado el flujo circulante de agua al electrolizador en DWSIM hasta un valor de 250 l/h. Se ha elegido el electrolizador MTSA de 50kW, el cual se cumple con los requisitos de diseño establecidos como se muestra en la tabla 5:

Tabla 5. Características electrolizador MTSA 50 kW

Tecnología	PEM
Producción H ₂	<0,9 kg/h
Pureza H ₂	ISO 14687/NEN-EN 17124 (99,97%)
Presión de salida	<40 bar
Pot. Max. Entrada	50 kWe

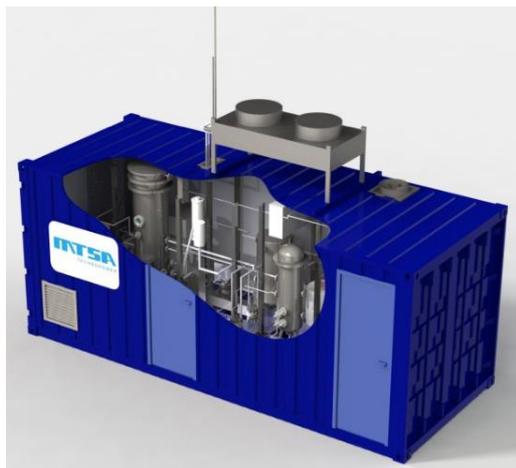


Figura 13: Electrolizador MTSA de 50kW

2.4.3 Sistema PSA

El sistema de purificación mediante PSA está formado por un mínimo de 3 lechos de sílica gel y 8 válvulas de control, cuya operación está controlada por un PLC propio que modifica la apertura de las mismas para llevar a cabo la gestión de la presión del sistema y completar los distintos pasos de ciclo PSA y asegurar un funcionamiento continuo. El gel de sílice es un adsorbente comúnmente utilizado en sistemas PSA para el secado de gases, debido a su alta capacidad de adsorción de humedad (alta afinidad por el agua y otros compuestos polares) y su estabilidad química. El proceso de secado mediante PSA con gel de sílice es fundamental para garantizar la pureza y la calidad del hidrógeno producido, ya que la presencia de humedad en el hidrógeno puede afectar negativamente a las aplicaciones finales, como la generación de energía o la industria química.

El ciclo de adsorción y desorción se repite cíclicamente cada 62 horas aproximadamente para mantener la eficiencia del proceso de secado. La etapa de adsorción tiene lugar a 25 °C y 40 bar, y tiene una duración de 20 horas, mientras que la desorción y regeneración del lecho tiene lugar con purga intermitente de H₂ a 25 °C y 1,24 bar, con una duración máxima de 25 horas. El montaje del sistema se compone de tres lechos de gel de sílice, más un lecho adicional para ser utilizado en caso de mantenimiento o avería de alguno de los lechos. Cada lecho tiene unas dimensiones de 24,5 cm de largo y 12,25 cm de diámetro interior. En la memoria de cálculo (ver Anexo I) aparece de forma detallada el procedimiento llevado a cabo para realizar el dimensionamiento del sistema de adsorción.



Figura 14. Sistema PSA L&C's PSA-1000

Fuente: (25)

Se ha elegido el sistema L&C's PSA-1000 como equipo de purificación ya que sus especificaciones se ajustan a los requerimientos de diseño como se muestra en la siguiente tabla 6:

Tabla 6. Especificaciones PSA L&C's PSA-1000. Fuente:(25)

Diámetro lecho	10,16 cm
Altura lecho	182,88 cm
Volumen de lecho	3500 cm ³
Rango de caudal	5-700 l/min
Presión de operación máxima	83 bar
Temperatura de operación	5-60 °C

2.4.4 Sistema de compresión y refrigeración

En base a lo expuesto en la sección 2.3.3, se puede comprobar que el sistema de compresión óptimo para la planta considerada es un sistema de compresión recíprocante multietapa (ver figura 10). El sistema de compresión está compuesto por dos compresores recíprocanes basados en el uso de pistones para comprimir mecánicamente el hidrógeno a muy alta presión.(23)

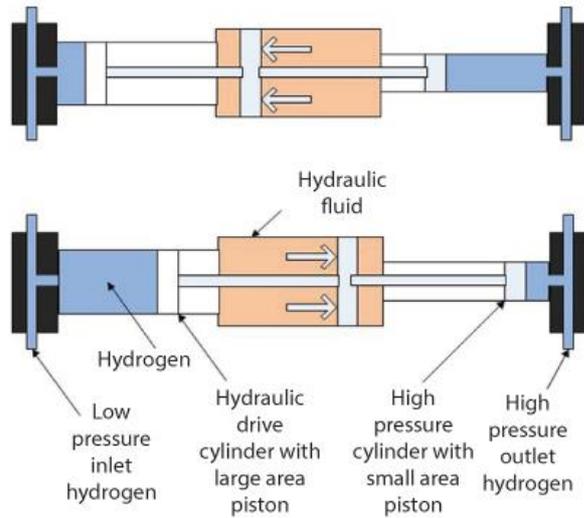


Figura 15: Esquema de un compresor de pistón recíprocante de dos etapas. Fuente:(23)

El primer compresor se encarga de aumentar la presión del hidrógeno proveniente de la PSA de 40 a 60 bar para posible suministro a la red de gas natural o a industrias petroquímicas cercanas a la instalación. Entre la PSA y el primer compresor es necesario un depósito “buffer” de almacenamiento de H₂ con la doble función de suministrar un flujo de H₂ constante al compresor y dotar de cierta autonomía al sistema aguas abajo del proceso. El segundo compresor se encarga de aumentar la presión del hidrógeno proveniente del tanque de almacenamiento a 60 bar hasta los 300 bar de presión para ser almacenado y transportado en camiones hidrogeneros hacia su uso final. Después de cada compresor hay una etapa de refrigeración de la corriente de salida. (17)



Figura 16: Compresor recíprocante TOPLONG HV-50/0.5-9

Para ambos compresores se ha elegido el compresor TOPLONG HV-50/0.5-9, cuyas características principales se recogen en la siguiente tabla 7:

Tabla 7. Características Compresor recíprocante TOPLONG HV-50/0.5-9

Tecnología	Compresor recíprocante (refrigerado, oil-free)
Flujo máximo	1000 m ³ /h
Presión de entrada	0-0,5 bar
Presión de salida máxima	300 bar
Potencia máxima entrada	<55 kWe

2.4.5 Sistema de almacenamiento

El sistema de almacenamiento está compuesto por un total de 5 tanques principales con distintas funciones y características(24).

- Almacenamiento a baja presión (T-201) - Se trata de un tanque a presión atmosférica que hace la doble función de almacenar unos 1000 litros de agua tratada para alimentación del stack y separar el oxígeno del agua proveniente de electrólisis. El O₂ se ventea directamente a la atmósfera y el H₂O se recircula hacia el stack de electrólisis.(26)
- Almacenamiento a 40 bar (T-501) – Es un tanque de 1m³ cuya función es almacenar el hidrógeno húmedo proveniente del stack de electrólisis a 40 bar y condensar y separar parte del agua contenida en la corriente. El tanque cuenta con dos válvulas de alivio para venteo del hidrógeno en caso de sobrepresiones. Se trata de un tanque con clasificación tipo I cuya composición es principalmente acero, recomendado para aplicaciones industriales estacionarias para almacenamiento de hidrógeno a presiones no superiores a 200 bares(23).
- Almacenamiento buffer a 40 bar (T-601) – Se trata de un tanque de tipo I de 1m³ cuyo objetivo es almacenar el hidrógeno purificado al 99,9999% de pureza proveniente del sistema PSA a 40 bar y asegurar un suministro constante y homogéneo de hidrógeno al compresor.
- Almacenamiento buffer a 60 bar (T-602) – Es un tanque de tipo I con una capacidad de 850 litros que almacena el hidrógeno proveniente de la primera etapa de compresión a 60 bar. El hidrógeno contenido en este tanque cumple con los requisitos para su inyección a la red básica de gas natural del territorio español.(27)
- Almacenamiento a 300 bar (T-603)- El hidrógeno proveniente de la segunda etapa de compresión hasta 300 bares, se almacena en cilindros de tipo II, cuyo interior está formado por acero con un revestimiento compuesto por capas de fibra de vidrio o carbono, capaces de soportar presiones de 300 bares (23). El almacenamiento cuenta con una capacidad conjunta de almacenamiento de unos 2,2m³, lo que equivale a unos 45 kg de hidrógeno, es decir unas 48 horas de producción. Este hidrógeno está destinado típicamente a transporte.

3 PROCEDIMIENTOS DE OPERACIÓN

3.1 Procedimiento de arranque de la planta

El arranque y parada de la planta son operaciones esenciales y comunes en una planta química, y por tanto sus procedimientos han de ser diseñados de forma cuidadosa para minimizar los riesgos asociados y asegurar en primer lugar la seguridad del personal de planta y en segundo lugar el correcto mantenimiento y operación de los equipos. El procedimiento de arranque se realiza de manera secuencial. En la tabla 8 se recoge el procedimiento manual de arranque de la planta:

Tabla 8. Procedimiento de arranque de la planta de electrólisis.

UNIDAD	PRIORIDAD	PROCEDIMIENTO DE ARRANQUE
GENERAL	1	Comprobación de señal de los elementos de control.
PTA	2	Inertización completa con N ₂ del stack de electrólisis y de los equipos y tuberías aguas abajo del mismo.
	3	Cierre de válvula v-01, apertura de válvula v-13.
	4	Encendido de la bomba de captación de agua P-01.
	5	Comprobación del cumplimiento de valores de calidad de agua proveniente de tratamiento.
	6	Cierre de válvula v-13, v-02 y v-03, apertura de válvula v-01.
T-201	7	Comprobación de llenado de T-201 hasta nivel dentro de consigna.
	8	Establecer control de nivel de T-201 en modo automático (LC-201).
	9	Comprobación de calidad del agua contenida en T-201.
	10	Establecer control de calidad de agua proveniente de T-201 en modo automático (CC-202).
H-301	11	Apertura válvula v-03 y encendido de bomba P-02 y calentador H-301.
	12	Recirculación de la corriente de salida del calentador hasta alcanzar temperatura de consigna.
	13	Establecer control de caudal (FC-302) y control de temperatura (TC-301) en modo automático.
GENERAL	14	Comprobación de valores de inertización dentro de cumplimiento.
STACK PEM	15	Comprobación del llenado de depósito interno de stack de electrólisis
	16	Encendido del stack de electrólisis y unidades de refrigeración C-301 y CT-401.
	17	Establecer controles de temperatura (TC-404 y TC-307) en modo automático.
T-501	18	Cierre de válvulas v-05 y v-07.
	19	Venteo de H ₂ a lugar seguro hasta cumplimiento de las especificaciones de calidad.
	20	Comprobación de llenado de T-501 hasta nivel dentro de consigna. Establecer control de nivel de T-501 en modo automático (LC-502).
	21	Comprobación del cumplimiento del valor de presión en T-501.
PSA	22	Cierre de todas las válvulas del sistema PSA. Apertura de v-07 y v-08A.
	23	Comprobación de correcta presurización del lecho.

	24	Apertura de válvula v-09A y purga de H ₂ hasta cumplir los requisitos de pureza.
	25	Cierre de válvula v-09A y apertura de válvula v-11A. Establecer operación del sistema PSA en modo automático.
T-601	26	Cierre de válvula v-06.
	27	Purga de H ₂ en T601 hasta cumplimiento de pureza (Desplazamiento del N ₂).
	28	Comprobación de cumplimiento de valores de presión y temperatura.
CP-601	29	Cierre de válvulas v-12 y v-15.
	30	Encendido de compresor CP-601 y apertura de válvula v-06.
T-602	31	Purga de H ₂ en T602 hasta cumplimiento de pureza (Desplazamiento del N ₂).
	32	Comprobación de cumplimiento de valores de presión y temperatura.
	33	Cierre de válvula v-16
CP-602 y C-601	34	Encendido de refrigerador C-601 y del compresor CP-602. Apertura de válvula v-12.
T-603	35	Purga de H ₂ en T603 hasta cumplimiento de pureza (Desplazamiento del N ₂).
T-601, T-602 y C-601	36	Establecimiento de control del flujo de hacia compresores (FC-602 y FC-603) y temperatura de salida de la refrigeración (TC-601) en modo automático.

3.2 Procedimientos de parada, protocolos de emergencia y seguridad.

Para la planta propuesta se contemplan 5 estados de operación para llevar la planta desde el estado inicial de Parada hasta el estado Producción de forma segura. Como se muestra en la figura 17 el estado inicial del sistema es el estado de **Parada**. Dentro del estado de parada se contempla el estado de Parada programada y el estado de Parada de emergencia. En ambos casos el sistema se desenergiza, empezando por el stack de electrólisis, se detiene la producción de hidrógeno, se despresuriza y se inertiza el sistema. La principal diferencia entre ellos es el origen de la parada. La parada programa es una parada establecida por diseño y su principal fin es el mantenimiento de los equipos, se estima un total de 24 días de parada programada al año. La parada de emergencia por el contrario se activa en uno de los siguientes casos; ante la pulsación del botón de emergencia, cuando se activa algún enclavamiento de seguridad que implique parada o cuando se produce un corte eléctrico. En cualquier estado ante una pulsación el botón de paro o la activación de un enclavamiento de seguridad el sistema será dirigido al estado de Parada. Partiendo del estado de parada, en ausencia de alarmas, para evitar condiciones de operación inseguras, y ante la pulsación del botón de marcha, el sistema entra en estado de **Inertización**.

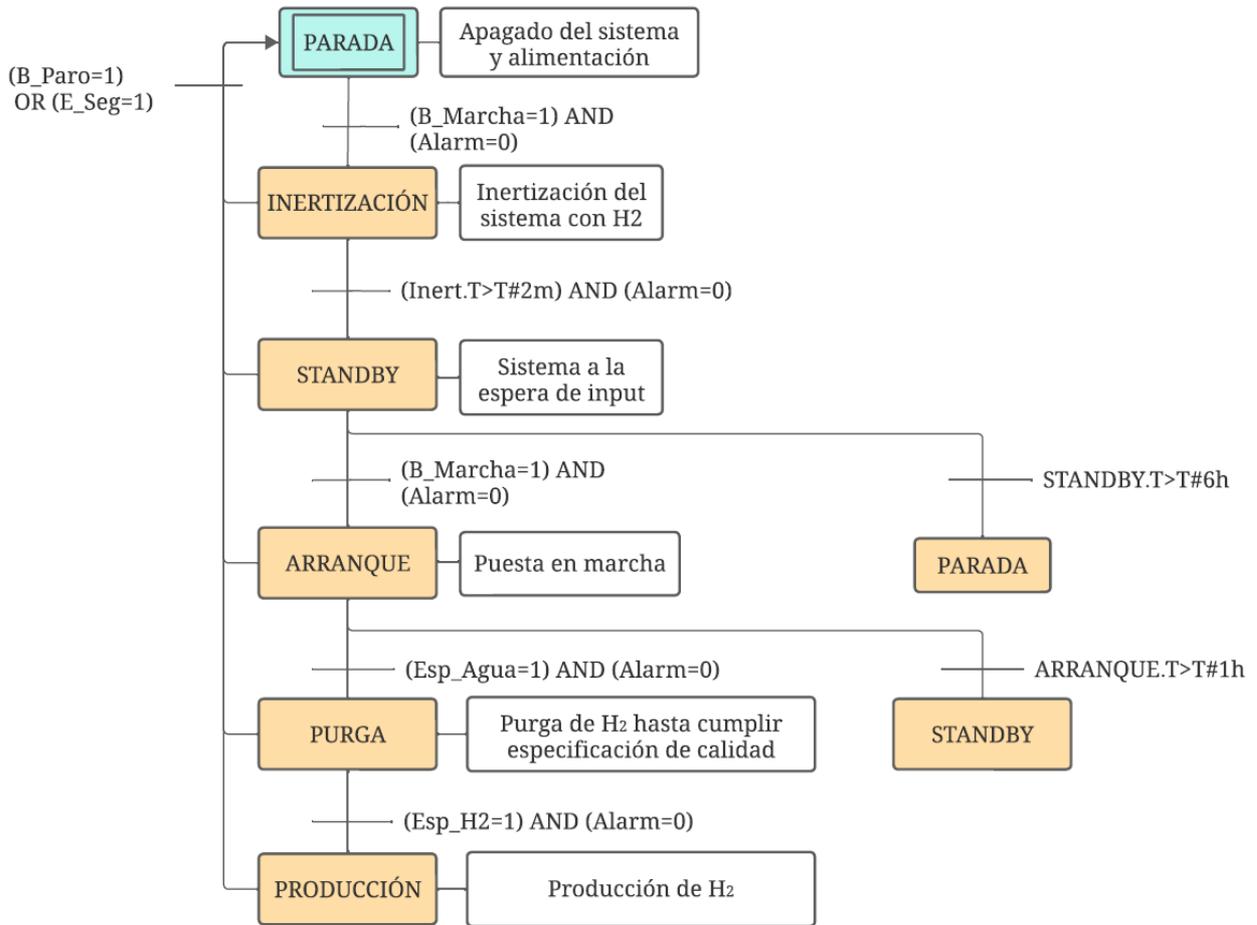


Figura 17: Estados de operación de la planta de electrólisis (GRAF CET). Fuente: a partir de (11)

A presión atmosférica, un volumen de nitrógeno líquido a su temperatura de ebullición se vaporiza expandiéndose rápidamente hasta aproximadamente 700 volúmenes de gas cuando se calienta hasta temperatura ambiente. La inertización con N₂ se vale de este principio para liberar una cantidad de nitrógeno en el sistema de forma que desplace rápidamente al resto de gases contenidos en el mismo creando así una atmósfera inerte, evitando la formación de atmósferas explosivas. Esta maniobra está extendida en muchas industrias de ahí su aplicación en materia de prevención. De manera que antes de proceder a introducir el hidrógeno en cualquier parte de la instalación se procede a desplazar el oxígeno que haya podido quedar en las tuberías con el propósito de evitar que la mezcla de oxígeno e hidrógeno tenga concentraciones que puedan provocar una explosión. Este protocolo se activa también automáticamente en caso de fugas, limitando las concentraciones y evitando por tanto atmósferas explosivas. Para esto no sólo se usan detectores de hidrógeno sino también detectores de oxígeno, para comprobar las concentraciones de ambos gases. A la hora de purgar los gases se ha tenido en cuenta que todos los venteos de hidrógeno deben estar provistos con supresores de llama, protegidos de la lluvia y orientados hacia el lado del sotavento teniendo en cuenta la dirección principal del viento. Se debe considerar el hecho de instalar un bypass a los diferentes equipos de la planta por los que circule el H₂ para aumentar la rapidez y la seguridad de la inertización en caso de parada de emergencia de forma que la operación de la planta sea más segura.

Una vez transcurrido el tiempo necesario para llevar a cabo la inertización del sistema y siempre que no haya ninguna alarma activa, el sistema entra en estado de **Standby**, quedando así a la espera de input del operario o usuario para comenzar con el arranque de la planta tras la pulsación del botón de marcha. En caso de no recibir ninguna entrada transcurridas seis horas el sistema vuelve automáticamente al estado de parada.

Una vez en estado de **Arranque** de la planta, se verifican que estén en condiciones operativas adecuadas, incluyendo los sistemas de seguridad. Se activa el circuito de refrigeración. Se comienza a alimentar los stacks de electrólisis con el agua ultrapura proveniente de la planta de tratamiento de agua, asegurando previamente que se cumplen las especificaciones requeridas en cuanto a conductividad, presión y temperatura del agua alimentada y desechándola en caso contrario. Se comprueba que los niveles que de los tanques de agua se

encuentran dentro de rango.

Una vez el agua de alimentación cumple especificaciones y el sistema no da señales de alarma, el sistema entra en estado de **Purga**, de manera que se pone en marcha el sistema de electrólisis, que comienza a producir H₂, aumentando la presión hasta alcanzar la presión de funcionamiento a 40 bar. Seguidamente se pone en funcionamiento el sistema PSA y se purga el H₂ a la salida en caso de no cumplir con la especificación de calidad. Finalmente se procede a la supervisión de los parámetros clave del proceso como son temperatura, presión y pureza del hidrógeno interviniendo en caso de ser necesario para que los niveles en los tanques, las presiones, y las temperaturas se estabilicen, y la pureza del hidrógeno se encuentre dentro del rango especificado, consiguiendo un funcionamiento en régimen permanente.

Una vez alcanzado el régimen permanente y la especificación de calidad del hidrógeno producido, el sistema entra en estado de **Producción**. En este estado el sistema de control, supervisión y adquisición de datos (SCADA) será el encargado de supervisar y controlar el proceso y manipular la apertura de los distintos actuadores para mantener las variables controladas dentro del rango admisible, alertando al operador en caso de que se produzcan situaciones que comprometan la seguridad (fugas de gas, aumentos de presión, incendios...) o en caso de ineficiencias o valores anormales de los parámetros del proceso.

En caso de que se genere alguna situación en cualquiera de los estados de funcionamiento que pueda comprometer la seguridad de los operarios y/o los equipos de la planta, el sistema cuenta con una serie de enclavamientos que fuerzan al sistema a volver a un estado de seguridad.

Los sistemas de seguridad individuales y generales de la planta se han diseñado teniendo en cuenta las recomendaciones generales recogidas en la norma UNE-ISO/TR 15916 IN "Consideraciones básicas de seguridad de los sistemas de hidrógeno" (1) Tanto las instalaciones como la operación de los equipos de la planta han de ser diseñados y operados de forma segura, respondiendo a dichas directrices, para ello se busca cumplir los siguientes objetivos de seguridad:

1. Mantener al mínimo indispensable la cantidad de hidrógeno almacenada y utilizada en las operaciones de la planta.
2. Mantener el hidrógeno aislado en todo momento de sustancias oxidantes y peligrosas.
3. El venteo de hidrógeno ha de producirse siempre a una altura mayor que la del resto de elementos de la planta y en zonas de Tipo 2 (ATEX), a fin de evitar posibles acumulaciones de gas.
4. Los operarios deberán hacer uso en todo momento de elementos de protección individuales (EPI's).
5. Disponer de zonas de acceso restringido y zonas con usos exclusivos a fin de minimizar la exposición del personal a los riesgos inherentes a la planta.
6. Disponer de alarmas y sistemas de detección temprana de fugas, incendios y demás eventos que puedan comprometer la seguridad de la planta.

4 SISTEMAS DE SUPERVISIÓN Y CONTROL

4.1 Sistema de control, supervisión y adquisición de datos (SCADA)

El control de la planta propuesta se lleva a cabo mediante un sistema de control, supervisión y adquisición de datos (SCADA). Se trata de una herramienta de automatización y control industrial que se utiliza en los procesos industrial para el control, supervisado, recopilación y análisis de datos a distancia mediante el uso conjunto de aplicaciones informáticas. El sistema está formado por un ordenador desde el que se ejecutan las aplicaciones, denominado Master o MTU, el cual se encuentra conectado a otros instrumentos de campo y PLCs que realizan el control local de alguna unidad concreta. Los datos recopilados durante el monitoreo del proceso se presentan al operario en una interfaz gráfica o HMI, desde la cual el operario puede realizar acciones de control y supervisar las distintas partes del proceso y los distintos equipos. En esta interfaz los operarios podrán supervisar los valores de presión, temperatura, caudal, nivel, composición, etc. para cada equipo o línea que disponga de indicación en el panel. Los parámetros que cuentan con indicación tanto en panel como en campo se encuentran indicados en el Diagrama de Instrumentación y Tuberías.

A lo largo del proceso se han distribuido distintos sensores, los cuales son capaces de medir magnitudes físicas u otro tipo de alteraciones en su entorno, la magnitud captada por el sensor se transforma a señal por medio un transmisor, capaz de mandar esta señal a distancia hacia un controlador, el cual será el encargado de realizar cálculos pertinentes utilizando la información recogida para establecer acciones de control y efectuarlas mandando una señal al actuador correspondiente. Los actuadores o elementos finales de control son dispositivos capaces de transformar la energía hidráulica, neumática o eléctrica en la activación de un proceso con la finalidad de generar un efecto sobre un proceso automatizado. El sistema de control consta de 12 lazos de control establecidos para mantener los parámetros clave del proceso dentro de los valores admisibles.

El sistema SCADA también será el encargado de activar las alarmas pertinentes en caso de que se produzca alguna desviación en el proceso que pueda suponer un riesgo para la seguridad del personal o los equipos de la planta. El sistema de control cuenta a su vez con un sistema de parada de emergencia (ESD), que se encarga de activar los enclavamientos de seguridad establecidos. Ante el surgimiento de unas condiciones de operación que puedan suponer un riesgo para la seguridad del personal de planta o los equipos, estos enclavamientos se activan sobrescribiendo cualquier acción de control previa y llevando el sistema al estado de parada de forma segura.

4.2 Metodología de control y enclavamientos.

3.2.1. Tanque separador de H₂O y O₂

El tanque T-201 actúa como tanque buffer para controlar el inventario de agua del sistema y separar el oxígeno del agua para su posible uso o venteo a la atmósfera. Este tanque cuenta con un transmisor de nivel alto/bajo.

En el lazo de control 201, ante una variación en el nivel de agua del tanque el sistema de control actúa abriendo o cerrando V-01 para mantener el nivel del tanque dentro de los parámetros de operación. En el interfaz de operador aparecerá en todo momento el valor del nivel de agua en el interior del tanque.

Cuando se detecta un nivel muy alto en el tanque se generará una alarma en el SCADA y se activa en el ESD el enclavamiento que abre la válvula de alivio de agua V-02.

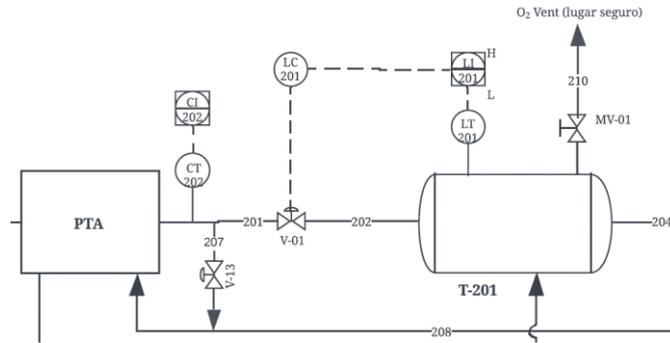


Figura 18: Esquema de control Tanque separador de H₂O y O₂

En el lazo de control CC-202, si se supera el valor máximo admisible de conductividad del agua de alimentación al electrolizador se cierra V-03 impidiendo el paso de la misma hacia el electrolizador y se abre V-02 para enviar el agua de vuelta al sistema de tratamiento. En el interfaz del operador debe aparecer el valor instantáneo de conductividad medido.

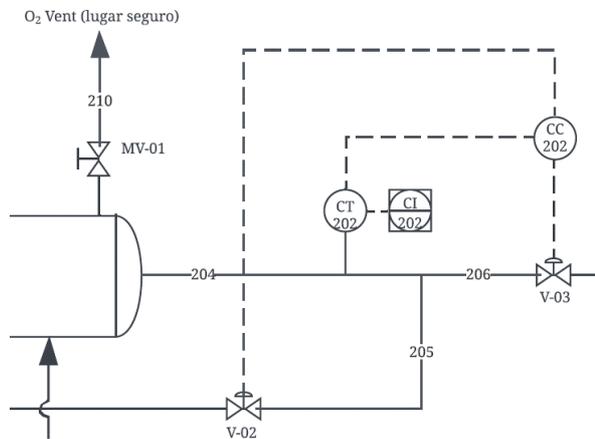


Figura 19: Esquema de control conductividad del agua de alimentación

3.2.2. Entrada y salida de H₂O al electrolizador.

A la entrada del stack de electrólisis se ha establecido un control para controlar y ajustar el caudal de alimentación de agua fresca al electrolizador en función del agua recirculada, de manera que el lazo de control FC-302 se encarga de medir el caudal de recirculación en la corriente 302 y calcular el caudal de alimentación fresca necesario para alcanzar el valor de consigna mediante apertura o cierre parcial de la válvula V-18.

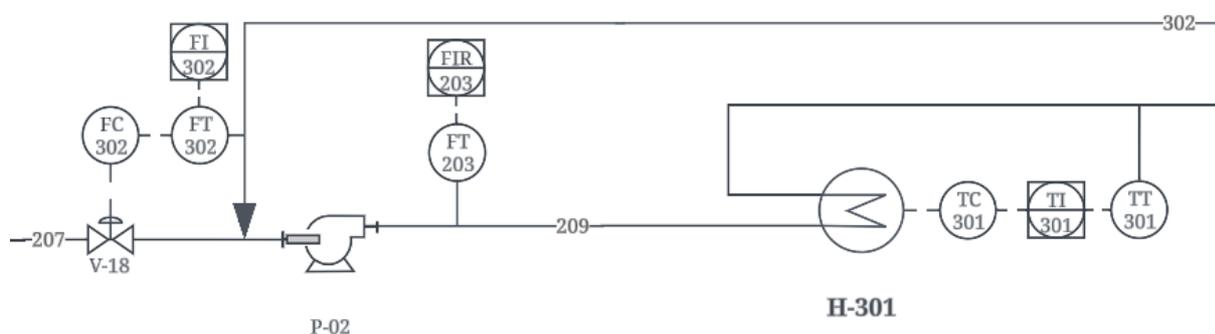


Figura 20: Esquema de control Entrada y salida de H₂O al electrolizador.

En los electrolizadores PEM una mayor temperatura de operación repercute en un mejor rendimiento del stack aunque una temperatura demasiado elevada puede afectar a la durabilidad de la membrana, por ello se ha establecido el lazo de control TC-301 para controlar la cantidad de calor aportada a la corriente de entrada al

electrolizador en función de la temperatura de salida del heater y el valor de consigna. En caso de registrar un valor de temperatura excesiva se generará en el SCADA una alarma y se activará en el ESD un enclavamiento para el cese de suministro de energía al heater.

3.2.3. Stack de electrólisis PEM

El stack de electrólisis cuenta con su propio PLC para el control del nivel del tanque interno de agua desmineralizada y la presión en la corriente de producto de hidrógeno. Este PLC será el encargado de manipular las válvulas asociadas al control de estas variables para mantenerlas dentro de rango.

Adicionalmente se han establecido transmisores e indicadores de presión, temperatura composición y caudal en las salidas de hidrógeno y oxígeno. Se registrará y calculará el caudal de H₂ producido por el sistema de electrólisis desde la puesta a cero y la puesta en marcha. Ante una temperatura o presión demasiado elevadas se generará una alarma en el SCADA y se activará en el ESD un enclavamiento para el cese de suministro de energía al electrolizador. En caso de que se detecte un %vol de H₂ en O₂ o viceversa superior al admisible se generará una alarma en el SCADA y se activará en el ESD el enclavamiento que cesa la alimentación de energía al electrolizador y se procede a la purga e inertización del electrolizador con N₂.

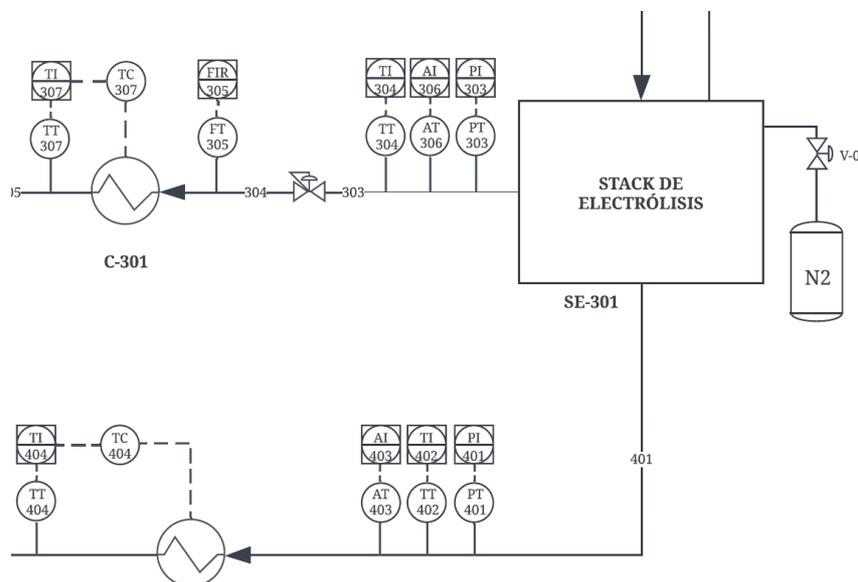


Figura 21: Esquema de control Stack de electrólisis PEM.

Los lazos de control TC-307 y TC-404 se encargan de controlar que la temperatura de salida del cooler se mantenga dentro del rango admisible variando la cantidad de calor a retirar de la corriente de hidrógeno y oxígeno a la salida del electrolizador respectivamente.

Se prevé la instalación de detectores de fugas de gas hidrógeno que, en caso de detectar una fuga, envían una señal para detener la generación de hidrógeno y activar ventiladores eléctricos que se encienden automáticamente para dispersar el gas H₂. Igualmente, hay detectores para el gas oxígeno que funcionan de manera similar.

3.2.4. Sistema PSA y Tanque separador H₂ y H₂O.

El nivel de agua en el tanque T-501 está controlado por el lazo de control LC-502, de manera que ante una subida de nivel fuera de rango el sistema de control actúa abriendo la válvula de control V-05, mientras que ante una bajada excesiva de nivel el sistema de control actúa cerrando la válvula.

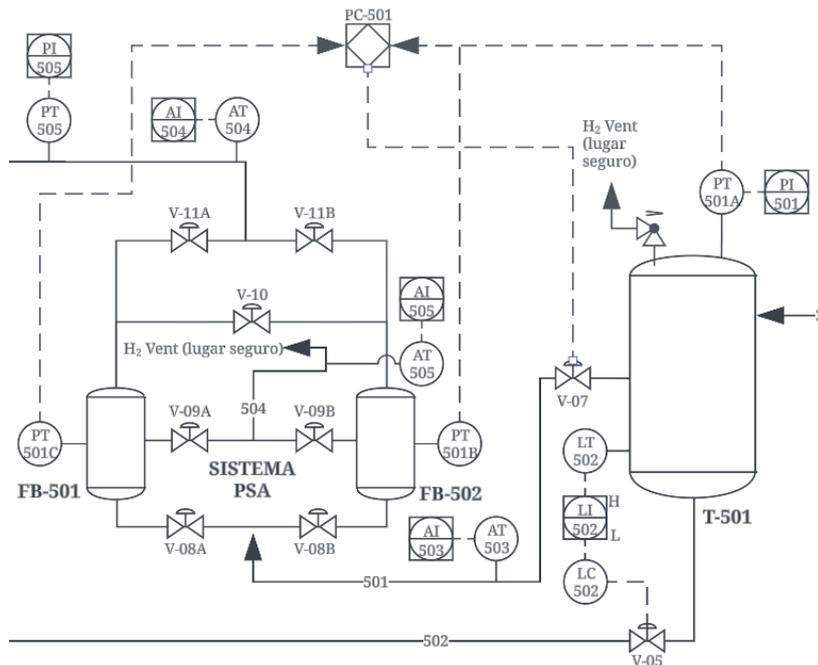


Figura 22: Esquema de control Sistema PSA y Tanque separador H₂ y H₂O.

El sistema de purificación mediante PSA está formado por 3 lechos de sílica gel (ver Anexo I) y 8 válvulas de control, cuya operación está controlada por un PLC propio que modifica la apertura de las mismas para completar los distintos pasos de ciclo de adsorción de humedad de la corriente de H₂ húmedo y mantiene el sistema operando un rango de presiones admisible.

El lazo de control PC-501 controla el funcionamiento del sistema PSA. Una vez que hay suficiente cantidad de H₂ almacenado, el sistema de control local abre las válvulas V-07 y V-08A dejando pasar H₂ hacia el lecho que está presurizándose, en este caso el izquierdo, una vez el lecho está presurizado abre V-11A dejando pasar el H₂ seco hacia el almacenamiento o uso final. Seguidamente una pequeña parte del H₂ se hace pasar por el lecho que se encuentra en regeneración, en este caso el derecho, con el fin de purgar la humedad retenida en la sílice, para ello se abre ligeramente V-10 y se abre V-09B para mandar el gas de purga a venteo. Una vez que el lecho en fase de adsorción y el lecho en fase de regeneración terminan sus ciclos, se vuelve a realizar otro ciclo, de manera que el lecho regenerado empezaría a presurizarse y el lecho que alcanzó su límite de adsorción se somete a regeneración, y así sucesivamente. Cuando se detecta presión muy alta en alguno de los lechos o en el tanque, se generará una alarma en el SCADA y se activa en el ESD el enclavamiento que procede a despresurizar dicho lecho y lleva a la planta al estado de parada.

3.2.5. Sistema de compresión y almacenamiento.

En el caso que se produzca una presión excesiva en alguno de los depósitos de almacenamiento se generará una alarma en el SCADA y se activará en el ESD un enclavamiento que abre la válvula de emergencia de los tanques de almacenamiento y activa el sistema de ventilación habilitado para la correcta dispersión del hidrógeno liberado.

En cuanto al sistema de compresión, los lazos de control FC-602 y FC-604 se encargan de que el suministro de hidrógeno a los compresores CP-601 y CP-602 se mantenga en su valor de consigna modificando la apertura de las válvulas V-06 y V-12 respectivamente.

De manera análoga, los lazos de control TC-604 Y TC-607 se encargan de mantener la temperatura del hidrógeno de salida de los coolers C-601 y C-602 se mantenga dentro del rango admisible modificando la cantidad de calor retirado en dichos equipos de refrigeración.

Finalmente se registrará y calculará la cantidad de hidrógeno almacenada desde la puesta a cero y la puesta en marcha.

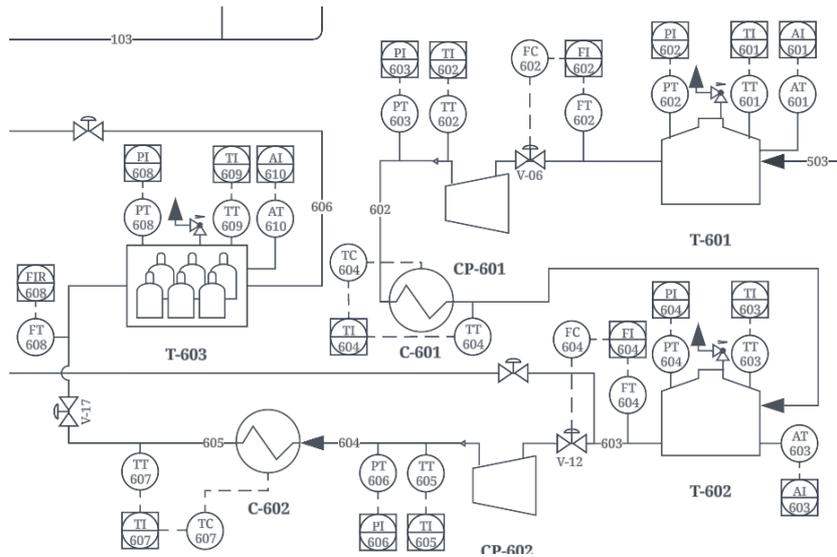


Figura 23: Esquema de control Sistema de compresión y almacenamiento.

4.3 Parámetros clave y rangos de operación normal

Los parámetros clave del proceso y sus rangos de operación en condiciones normales de producción se encuentran recogidos en la siguiente tabla 9:

Tabla 9. Parámetros clave y rangos de operación normal

PARÁMETROS CLAVE Y RANGOS DE OPERACIÓN NORMAL						
DESCRIPCIÓN	CORRIENTE/EQUIPO	RANGO	UNIDADES	LAZO DE CONTROL	SENSOR TRANSMISOR	ELEMENTO FINAL DE CONTROL
Nivel tanque separación H ₂ O/O ₂	T-201	Alto-Bajo	-	LC-201	LT-201	V-01
Conductividad agua alimentación electrolizador	204	0,1-0,25	μS/cm	CC-202	CT-202	V-03/V-02
Caudal de alimentación fresca al electrolizador	207	8,52-10	kg/h	FC-302	FT-302	V-18
Temperatura de entrada a electrolizador	301	50-80	°C	TC-301	TT-301	-
Temperatura salida cooler 1	305	10-15	°C	TC-307	TT-307	-
Temperatura salida cooler 2	402	20-25	°C	TC-404	TT-404	-
Nivel tanque separación H ₂ /H ₂ O	T-501	Alto-Bajo	-	LC-502	LT-502	V-05
Manejo de presiones sistema PSA	T-501, FB-501, FB-502	20-40	bar	PC-501	PT-501A, PT-501B, PT501C	V-07, V-08A, V-08B, V-09A, V-09B, V-10, V-11A, V-11B
Caudal a compresor 1	601	0,28	m ³ /h	FC-602	FT-602	V-06

Temperatura salida cooler 3	602	5-10	°C	TC-604	TT-604	-
Caudal a compresor 2	603	0,19	m ³ /h	FC-604	FT-604	V-12
Temperatura salida cooler 4	605	5-10	°C	TC-607	TT-607	-

4.4 Listado de equipos

Tabla 10. Listado de equipos

LISTADO DE EQUIPOS								
CODIGO	SECCIÓN	EQUIPO	DESCRIPCIÓN	CONSUMO ENERGÉTICO	TEMP (°C)	PRES (Bar)	VOL (m ³)	MATERIAL
T-201	200	Tanque/Separador	Separación de O ₂ y H ₂ O. Almacenamiento de H ₂ O	-	25	atm	1	Acero galvanizado con revestimiento especial anticorrosivo (ISO EN 10346)
H-301	300	Heater	Calentamiento entrada electrolizador	8,03 kW	60- >70	atm	-	-
SE-301	300	Electrolizador PEM	Producción de hidrógeno	52.56 kW	70-80	40	-	-
C-301	300	Cooler	Enfriamiento para reducir humedad del hidrógeno a la salida del electrolizador	-0,29 kW	68- >15	40	-	-
C-401	400	Cooler	Reducción de temperatura de la salida de oxígeno del electrolizador	-4,21 kW	83- >25	atm	-	-
T-501	500	Tanque/Separador	Reducción del H ₂ O contenida en el H ₂ y almacenamiento H ₂	-	15	40	1	SS AISI 316
FB-501	500	Lecho de adsorción (sílica gel)	Adsorción de humedad	-	-	40	0,003	
FB-502	500	Lecho de adsorción (sílica gel)	Adsorción de humedad	-	-	40	0,003	
T-601	600	Tanque buffer	Almacenamiento de H ₂ y amortiguación a la entrada del compresor	-	25	40	1	SS AISI 316
T-602	600	Tanque buffer	Almacenamiento de H ₂ y amortiguación a la entrada del compresor	-	25	60	0,85	SS AISI 316

CP-601	600	Compresor recíprocante	Compresión de H ₂	0,18 kW	-	40- >60	-	-
CP-602	600	Compresor recíprocante	Compresión de H ₂	0,90 kW	-	60- >300	-	-
C-601	600	Cooler	Refrigeración salida de compresor	0,07 kW	10	60	-	-
C-602	600	Cooler	Refrigeración salida de compresor	0,06 kW	15	300	-	-
T-603	600	Tanques de almacenamiento	Almacenamiento final para transporte	-	25	300	2,2	SS AISI 316 + recubrimiento de fibra de vidrio/carbono

4.5 Listado de instrumentación

Tabla 11. Listado de instrumentación

LISTADO DE INSTRUMENTACIÓN				
CODIGO	SECCIÓN	EQUIPO/LINEA	SERVICIO	LAZO DE CONTROL
FT-101	100	102	Caudal de agua salada de entrada	-
FIR-101		-	Indicar caudal y registrar el consumo total	-
FT-102		103	Caudal de agua de rechazo	-
FIR-102		-	Indicar caudal y registrar vertido total	-
CT-102		201	Conductividad agua tratada	-
CI-102		-	Indicación conductividad de agua tratada	-
LT-201	200	T-201	Nivel tanque agua de alimentación	LC-201
LI-201		-	Indicar nivel del tanque agua de alimentación	-
CT-202		204	Conductividad agua de alimentación	CC-202
CI-202		-	Indica conductividad de agua de alimentación	-
FT-203		203	Caudal de agua alimentada	FC-203
FI-203		-	Indicación de caudal agua alimentada	-
TT-301	300	301	Temperatura de entrada al electrolizador	TC-301
TI-301		-	Indicación de temperatura entrada del electrolizador	
FT-302		302	Caudal de agua de salida electrólisis	FC-302
FI-302		-	Indicación caudal agua de salida electrólisis	
PT-303		303	Presión hidrógeno salida del electrolizador	-
PI-303		-	Indicador de presión hidrógeno salida del electrolizador	-
TT-304		303	Temperatura hidrógeno salida electrolizador	-
TI-304		-	Indicador temperatura hidrógeno salida electrolizador	-
FT-305		304	Caudal hidrógeno salida electrolizador	-
FIR-305		-	Indicador y registro caudal hidrógeno salida electrolizador	-
AT-306		303	Composición hidrógeno salida electrolizador	-
AI-306		-	Indicador composición hidrógeno salida electrolizador	-
TT-307		305	Temperatura hidrógeno salida electrolizador enfriado	TC-307
TI-307		-	Indicador temperatura hidrogeno salida refrigeración	
PT-401	400	401	Presión oxígeno salida electrolizador	-
PI-401		-	Indicador presión oxígeno salida electrolizador	-

TT-402		401	Temperatura oxígeno salida electrolizador	-	
TI-402		-	Indicador temperatura oxígeno salida electrolizador	-	
AT-403		401	Composición oxígeno salida electrolizador	-	
AI-403		-	Indicador composición oxígeno salida electrolizador	-	
TT-404		402	Temperatura oxígeno salida refrigeración	TC-404	
TI-404		-	Indicador temperatura oxígeno salida refrigeración		
PT-501A	500	T-501	Presión tanque separación H ₂ /H ₂ O	PC-501	
PT-501B		FB-502	Presión lecho de adsorción 2		
PT-501C		FB-501	Presión lecho de adsorción 1		
PI-501		-	Indicador presiones tanque separación H ₂ /H ₂ O y lechos de adsorción		
LT-502		T-501	Nivel de agua tanque de separación H ₂ /H ₂ O	LC-502	
LI-502		-	Indicador nivel de agua tanque de separación H ₂ /H ₂ O		
AT-503		501	Composición hidrógeno húmedo	-	
AI-503		-	Indicador de composición hidrógeno húmedo	-	
AT-504		503	Composición hidrógeno seco	-	
AI-504		-	Indicador de composición hidrógeno seco	-	
AT-505		504	Composición de corriente de venteo PSA	-	
AI-505		-	Indicador de composición de corriente de venteo PSA	-	
PT-505		503	Presión de hidrógeno seco	-	
PI-505		-	Indicador de presión de hidrógeno seco	-	
AT-601		600	T-601	Composición almacenamiento buffer 40 bar	-
AI-601			-	Indicador composición almacenamiento buffer 40 bar	-
TT-601			T-601	Temperatura almacenamiento buffer 40 bar	-
TI-601	-		Indicador temperatura almacenamiento buffer 40 bar	-	
PT-602	601		Presión almacenamiento buffer 40 bar	-	
PI-602	-		Indicador de presión almacenamiento buffer 40 bar	-	
FT-602	601		Caudal entrada al compresor 1	FC-602	
FI-602	-		Indicador caudal entrada al compresor 1		
TT-602	602		Temperatura salida compresor 1	-	
TI-602	-		Indicador salida compresor 1	-	
PT-603	602		Presión salida compresor 1	-	
PI-603	-		Indicador presión salida compresor 1	-	
TT-604	604		Temperatura salida enfriador 1	TC-604	
TI-604	-		Indicador temperatura de salida enfriador 1		
AT-603	T-602		Composición almacenamiento buffer 60 bar	-	
AI-603	-		Indicador composición almacenamiento buffer 60 bar	-	
TT-603	T-602		Temperatura almacenamiento buffer 60 bar	-	
TI-603	-		Indicador temperatura almacenamiento buffer 60 bar	-	
PT-604	T-602		Presión almacenamiento buffer 60 bar	-	
PI-604	-		Indicador presión almacenamiento buffer 60 bar	-	
FT-604	603		Caudal entrada al compresor 2	FC-604	
FI-604	-		Indicador caudal entrada al compresor 2		
TT-605	604		Temperatura salida compresor 2	-	
TI-605	-		Indicador temperatura compresor 2	-	
PT-605	604		Presión salida compresor 2	-	
PI-605	-		Indicador presión salida compresor 2	-	
TT-607	605		Temperatura salida enfriador 2	TC-607	
TI-607	-	Indicador temperatura salida enfriador 2			

FT-608		605	Caudal de hidrógeno a almacenamiento	-
FIR-608		-	Indicador y registro de caudal hidrógeno almacenado	-
PT-608		T-603	Presión de almacenamiento hidrógeno 300 bar	-
PI-608		-	Indicador presión de almacenamiento hidrógeno 300 bar	-
TT-609		T-603	Temperatura almacenamiento hidrógeno 300 bar	-
TI-609		-	Indicador temperatura almacenamiento hidrógeno 300 bar	-
AT-610		T-603	Composición almacenamiento hidrógeno 300 bar	-
AI-610		-	Indicador de composición almacenamiento hidrógeno 300 bar	-

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En el presente trabajo se ha simulado en DWSIM una planta de producción de 30 kWth (PCI) (10 Nm³/h) de hidrógeno mediante electrólisis tipo PEM, produciendo hidrógeno con una pureza del 99,9999% (v/v) y una presión final de 300 bar. Para alcanzar esta producción se ha calculado que es necesario un stack de electrólisis con un consumo de 50 kWe, formado por 28 celdas que operan a 2 V y 900 A. El sistema de purificación propuesto es tipo PSA, formado por un mínimo de 3 lechos de sílica gel, para asegurar la operación continua, con unas dimensiones mínimas por lecho de 12,25 cm de diámetro y 24,5 cm de altura, cuyo tiempo de adsorción se ha estimado de unas 20 horas y el tiempo de desorción de unas 25 horas. El sistema de compresión óptimo seleccionado es un sistema multietapa formado por 2 compresores recíprocos con refrigeración intermedia. El tanque de almacenamiento de hidrógeno a 300 bares es de tipo II, con un volumen de 2,2 m³, con capacidad de almacenar hasta 48 horas de producción. El consumo de agua desmineralizada de la planta es de 8,53 kg/h, mientras que por el electrolizador circulan 244 kg/h de agua. El mayor consumo energético de la planta (a parte del stack de electrólisis) se debe al calentamiento del agua de alimentación al electrolizador y ha sido de 7,9 kW.

Algunas de las consideraciones más importantes que se pueden extraer tras haber realizado este trabajo son:

- Para su uso en pilas de combustible PEM se requiere un nivel mínimo de pureza del hidrógeno del 99,7% (v/v) con un contenido máximo en agua y en oxígeno de 5 μmol/mol.
- La desalinización y desmineralización del agua de mar para su uso como materia prima en la electrólisis para producción de hidrógeno es una opción muy atractiva desde el punto de vista de la sostenibilidad, en especial en aquellos lugares en los que la disponibilidad de agua para su uso en actividades humanas es limitada.
- La electrólisis PEM destaca sobre la alcalina por su capacidad de operar a presión diferencial, la posibilidad de construir sistemas más compactos, su amplio rango de operación y su rápida dinámica.
- La operación de la electrólisis PEM en modo diferencial permite un ahorro de energía de compresión mecánica en la franja de presiones donde esta resulta menos eficiente a costa de un mayor grosor de membrana polimérica y unos materiales de construcción del stack reforzados, es decir, a costa de un mayor coste de capital.
- El almacenamiento gaseoso de hidrógeno a alta presión a nivel industrial se lleva a cabo en recipientes clasificados como tipo I o tipo II.
- Los procedimientos de arranque y parada juegan un papel fundamental en la seguridad del personal y los equipos de una planta. Además, el hidrógeno presenta una serie de riesgos particulares (fragilización, asfixia, ignición, etc.) que deben ser tenidos en cuenta a la hora de diseñar estos procedimientos, así como los sistemas de supervisión y control encargados de mantener las variables del proceso dentro de los rangos de operación normal establecidos.

En este trabajo se ha logrado diseñar satisfactoriamente y exponer el procedimiento de arranque manual de la planta paso por paso y el de parada de forma simplificada, lo cual puede servir como referencia para el desarrollo de programas de formación para estudiantes de ingeniería y operadores de planta. También se ha llevado a cabo la elaboración de algunos de los elementos más importantes de la ingeniería básica de la planta como el diagrama de instrumentación y tuberías del proceso, el listado de equipos, el listado de instrumentación, los cuales pueden servir de referencia para la elaboración de los diseños iniciales de futuros proyectos de producción de hidrógeno o como base de partida para la elaboración de una posterior ingeniería de detalle.

Como recomendación para posteriores desarrollos, destacar el gran potencial que puede suponer utilizar de base la simulación realizada, los procedimientos expuestos y las consideraciones de control y seguridad para llevar a cabo una simulación dinámica de la planta con el fin de realizar una serie de prácticas virtuales destinadas a la formación donde se lleven a cabo distintos procedimientos sobre la planta, como el arranque, la parada programada y la parada de emergencia, y se trabaje la toma de decisiones ante la ocurrencia de distintos eventos o determinadas situaciones de operación.

REFERENCIAS

1. UNE-ISO/TR 15916 IN informe UNE. 2007.
2. Jespen T. Springer Series in Reliability Engineering ATEX-Explosive Atmospheres Risk Assessment, Control and Compliance [Internet]. Disponible en: <http://www.springer.com/series/6917>
3. Zhang JZ, Li J, Li Y, Zhao Y. Hydrogen Generation, Storage and Utilization. Hydrogen Generation, Storage and Utilization. 28 de abril de 2014;9781118140635:1-195.
4. Causes of climate change - European Commission [Internet]. [citado 19 de mayo de 2024]. Disponible en: https://climate.ec.europa.eu/climate-change/causes-climate-change_en
5. Sitio web del Hidrógeno [Internet]. [citado 19 de mayo de 2024]. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/energia/hidrocarburos-nuevos-combustibles/hidrogeno.html>
6. UNE-EN 17124 [Internet]. 2022. Disponible en: www.une.org
7. Pietra A, Gianni M, Zuliani N, Malabotti S, Taccani R. Experimental characterization of an alkaline electrolyser and a compression system for hydrogen production and storage. *Energies (Basel)*. 1 de septiembre de 2021;14(17).
8. Green hydrogen cost reduction : scaling up electrolysers to meet the 1.5⁰ C climate goal.
9. membranas nafion, chemours nafion, membrana de intercambio de protones [Internet]. [citado 7 de junio de 2024]. Disponible en: <https://www.nafion.com/es/products/sulfonic-membranes>
10. Carmo M, Fritz DL, Mergel J, Stolten D. A comprehensive review on PEM water electrolysis. Vol. 38, *International Journal of Hydrogen Energy*. 2013. p. 4901-34.
11. Mancera JJC, Manzano FS, Andújar JM, Vivas FJ, Calderón AJ. An optimized balance of plant for a medium-size PEM electrolyzer. Design, control and physical implementation. *Electronics (Switzerland)*. 1 de mayo de 2020;9(5).
12. Li Q, Molina Villarino A, Peltier CR, Macbeth AJ, Yang Y, Kim MJ, et al. Anion Exchange Membrane Water Electrolysis: The Future of Green Hydrogen. *Journal of Physical Chemistry C* [Internet]. 4 de mayo de 2023 [citado 8 de junio de 2024];127(17):7901-12. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.3c00319>
13. Hauch A, Küngas R, Blennow P, Hansen AB, Hansen JB, Mathiesen B V., et al. Recent advances in solid oxide cell technology for electrolysis. *Science (1979)* [Internet]. 9 de octubre de 2020 [citado 8 de junio de 2024];370(6513). Disponible en: <https://www.science.org/doi/10.1126/science.aba6118>
14. El-Shafie M. Hydrogen production by water electrolysis technologies: A review. *Results in Engineering*. 1 de diciembre de 2023;20:101426.
15. Separation-Process-Principles-Third-Edition-J.SEADER.
16. Hydrogen Recovery by Pressure Swing Adsorption.
17. Tahan MR. Recent advances in hydrogen compressors for use in large-scale renewable energy integration. Vol. 47, *International Journal of Hydrogen Energy*. Elsevier Ltd; 2022. p. 35275-92.
18. Compressors - PetroWiki [Internet]. [citado 1 de junio de 2024]. Disponible en: https://petrowiki.spe.org/Compressors#Polytropic_compression
19. Schuler T, De Bruycker R, Schmidt TJ, - al, Roy A, Roenning FH, et al. Critical Review—Identifying Critical Gaps for Polymer Electrolyte Water Electrolysis Development. *J Electrochem Soc* [Internet]. 25 de febrero de 2017 [citado 1 de junio de 2024];164(4):F387. Disponible en: <https://iopscience.iop.org/article/10.1149/2.1441704jes>
20. Hidrógeno como alternativa sustentable a los combustibles fósiles - Santo Tomás en Línea [Internet]. [citado 19 de mayo de 2024]. Disponible en: <https://enlinea.santotomas.cl/actualidad->

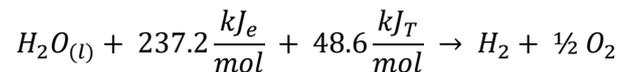
institucional/hidrogeno-como-alternativa-sustentable-a-los-combustibles-fosiles/219573/

21. Sundén B. Hydrogen. Hydrogen, Batteries and Fuel Cells [Internet]. 1 de enero de 2019 [citado 30 de mayo de 2024];37-55. Disponible en: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128169506000038>
22. Langmi HW, Engelbrecht N, Modisha PM, Bessarabov D. Hydrogen storage. Electrochemical Power Sources: Fundamentals, Systems, and Applications Hydrogen Production by Water Electrolysis. 1 de enero de 2022;455-86.
23. Sankir M, DemirciSankir N. Hydrogen storage technologies. 1st edition. Sankir M, Demirci Sankir N, editores. Hoboken, NJ: Wiley; 2018. (Advances in hydrogen production and storage).
24. Cheng Q, Zhang R, Shi Z, Lin J. Review of common hydrogen storage tanks and current manufacturing methods for aluminium alloy tank liners. International Journal of Lightweight Materials and Manufacture. 1 de marzo de 2024;7(2):269-84.
25. PSA-1000 System Series - L&C Science and Technology [Internet]. [citado 9 de junio de 2024]. Disponible en: <http://www.landscience.com/psa-1000-system-series/>
26. Demineralised Water Tanks | APRO Industrie : stockage de liquides [Internet]. [citado 17 de mayo de 2024]. Disponible en: <https://aproindustrie.com/en/applications/eau-potable-eaux-de-process/reservoir-eau-demineralisee/>
27. Transporte y distribución [Internet]. [citado 17 de mayo de 2024]. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/energia/hidrocarburos-nuevos-combustibles/gas/transporte-distribucion.html>
28. Harrison KW, Remick R, Martin GD, Hoskin A. Hydrogen Production: Fundamentals and Cas Study Summaries e Preprint [Internet]. 2010. Disponible en: <http://www.osti.gov/bridge>
29. Goyal P, Purdue MJ, Farooq S. Adsorption and diffusion of moisture and wet flue gas on silica gel. Chem Eng Sci. 14 de diciembre de 2020;227.
30. O. T. Z, Robert C. R. A Study of the Relationship Between Temperature, Pressure and Humidity, and Wet- and Dry-Bulb Temperatures. 1968;

5 ANEXO 1: MEMORIA DE CÁLCULO

5.1 Stack de electrólisis PEM

Para el dimensionamiento básico del stack de electrólisis a simular en DWSIM se ha partido del establecimiento de una producción de hidrógeno de 30 kWth (PCI) o lo que es lo mismo, 10 Nm³/h. La reacción para la electrólisis del agua en estado líquido se puede definir de la siguiente manera:



El voltaje termo neutro es la diferencia de potencial mínima teórica que es necesario aplicar para que se lleve a cabo la reacción de electrólisis del agua. De manera que, para separar un mol de agua líquida en H₂ y O₂ a 25° C es necesario suministrar 285,8 kJ, correspondiente al PCS del hidrógeno, que corresponde a 237,2 kJ de electricidad y 48,6 kJ de calor. En electrólisis PEM el requerimiento de se cumple con calor disipado en el proceso debido a la resistencia interna (pérdidas óhmicas) por efecto de la circulación de cargas eléctricas a través de la celda. En caso de tratarse de electrólisis de agua en estado vapor la energía a suministrar sería únicamente 237,2 kJ, el correspondiente al PCI del hidrógeno. Haciendo uso de la Ley de Faraday se puede calcular el potencial estándar para llevar a cabo la reacción de electrólisis de agua en estado líquido o lo que es lo mismo el voltaje termo neutro (28):

$$E_0 = \frac{\Delta_f H^\circ}{zF} = \frac{285840 \frac{J}{mol}}{2 * 96485 \frac{C}{mol}} = 1,481 \frac{V}{celda}$$

La eficiencia eléctrica de un stack suele expresarse como la relación entre el voltaje termo neutro y el voltaje real de operación de la celda. Para un stack de electrólisis promedio se puede considerar un funcionamiento de celda de 2V de potencial. Por tanto, la eficiencia eléctrica del stack PEM puede considerarse como:

$$\eta_c = \frac{E_0}{V} = \frac{1,481}{2} = 0,74$$

Haciendo uso de la ecuación de los gases ideales, se puede aproximar la cantidad de hidrógeno que produciría el stack (siempre y cuando se asuman condiciones ideales):

$$PV = nRT;$$

$$m = \frac{1atm \cdot \frac{10000l}{h} \cdot 2 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{mol}}{0,082 \frac{atm \cdot l}{mol \cdot K} \cdot 273K} = 0,9 \frac{kg H_2}{h} = 450 \frac{mol H_2}{h}$$

Por tanto, la energía mínima teórica necesaria para llevar a cabo la reacción de electrólisis se puede calcular como:

$$450 \frac{\text{mol}}{\text{h}} \cdot \frac{285,8 \text{ kJ}}{1 \text{ mol } H_2} \cdot \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} = 35,725 \text{ kW}$$

La potencia mínima real que debe suministrar el stack de electrólisis PEM será:

$$Pot_{stack} = \frac{35,725 \text{ kW}}{0,74} = 48,27 \text{ kW} \cong 50 \text{ kW}$$

En consecuencia, el número de celdas del stack para unas condiciones de operación promedio de celda de 2V de potencial, una densidad de corriente de hasta 3000 mA/cm² y un área de celda de hasta 300 cm² puede calcularse de la siguiente manera:

$$N_{celdas} = \frac{50000 \text{ W}}{2 \text{ V} \cdot 3 \frac{\text{A}}{\text{cm}^2} \cdot 300 \text{ cm}^2} = 27,7 \rightarrow 28 \text{ celdas}$$

5.2 Sistema de secado de la corriente producto de H₂.

Para hacer el dimensionamiento de los lechos de adsorción se ha seguido el procedimiento expuesto en (15) para el escalado de un lecho experimental asumiendo un frente de adsorción constante, partiendo de un lecho de adsorción a escala de laboratorio del cual se han obtenido las curvas de ruptura experimentales. Lo ideal para este tipo de escalado hubiera sido realizar un trabajo en laboratorio sobre un lecho bajo mismas condiciones de operación a las que se va operar el lecho de la planta diseñada, cosa que queda fuera del alcance de este trabajo.

Por lo tanto, se ha tomado como referencia para su escalado el lecho experimental utilizado en el estudio realizado por (29). En él se lleva a cabo la adsorción de la humedad contenida en una corriente de Helio sobre un lecho de sílica gel. En la tabla 12 se recogen las características del adsorbente utilizado en el experimento. Se considera que es el mismo que será utilizado en el lecho de la planta.

Tabla 12. Características del adsorbente utilizado. Fuente:(29)

Nombre del adsorbente	Zeochem Silica gel
Nombre comercial	ZEObeads 720
Tamaño de partícula	2 mm diámetro
Tamaño de poro	20 Å
Densidad aparente	0.854 g/cm ³
Densidad de partícula	1.312 g/ cm ³
Volumen total de poro abierto	0.405 cm ³ /g
Área superficial	769.344 m ² /g

En la tabla 13 se recogen las condiciones a las que se encuentra la alimentación del lecho experimental y del lecho de la planta.

Tabla 13. Condiciones del lecho experimental y del lecho de la planta. Fuente:(29)

Condiciones de alimentación	Experimento	Planta
$Q \left(\frac{m^3}{h} \right)$	0,1152	0,29
X_{H_2O}	0,015	$8,12 \cdot 10^{-4}$
$T \text{ (}^\circ\text{C)}$	20	25
$P \text{ (bar)}$	1,24	40

Como se puede observar, las condiciones de la alimentación del lecho experimental y el lecho de la planta son muy dispares, en especial la presión, la cual cobra especial importancia en los procesos de adsorción, puesto que a mayor presión mayor es la cantidad de adsorbato que puede ser retenida por el adsorbente, es decir, la sílica gel. En este caso, al funcionar el lecho de la planta a una presión muy superior que el experimental de referencia, se puede asegurar que el lecho real de la planta tendrá un rendimiento superior al lecho calculado siguiendo este procedimiento, por lo que se puede considerar que se está siguiendo una aproximación conservadora en el dimensionamiento del lecho. Lo mismo ocurre con la fracción molar de agua en la alimentación; al ser menor en el caso de la planta nos aseguramos de que para el tiempo de ruptura experimental, la humedad a la salida del lecho real será menor que la humedad contenida a la salida del lecho experimental.

Para poder realizar el escalado del lecho es necesario expresar el caudal de alimentación de lecho de la planta (Q') en condiciones de caudal de alimentación del lecho experimental (Q):

$$Q' = \frac{0,29 \text{ m}^3 \cdot 40 \text{ bar} \cdot 293 \text{ K}}{h \cdot 298 \text{ K} \cdot 1,24 \text{ bar}} = 9,19 \frac{\text{m}^3}{h}$$

Es requisito fundamental para poder escalar un lecho experimental que la velocidad superficial del lecho se mantenga constante. La velocidad superficial (V_s) en el lecho experimental es de 21,65 cm/s y dicho lecho tiene una longitud de 15 cm y un diámetro de 1 cm. Por tanto, podemos determinar el diámetro del lecho de la planta conociendo el caudal de alimentación:

$$V_s = \frac{Q'}{A_t};$$

$$V_s = \frac{21,65 \text{ cm} \cdot 1 \text{ m}}{s \cdot 100 \text{ cm}} = 0,2165 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$A_t = \frac{9,19 \frac{\text{m}^3 \cdot 1 \text{ h}}{h \cdot 3600 \text{ s}}}{0,2165 \frac{\text{m}}{\text{s}}} = 117,9 \text{ cm}^2$$

$$D = \sqrt{\frac{4}{\pi} \cdot A_t} = \mathbf{12,25 \text{ cm}}$$

Para calcular el tiempo de ruptura del lecho (t_b), a partir del cual se cesa la alimentación para prevenir una

concentración de adsorbato más alta de la deseada a la salida del lecho, se establece un balance de materia donde la cantidad de agua presente en la alimentación se iguala a la cantidad de agua adsorbida en el sólido:

$$Q' \cdot t_b \cdot C_F = \rho_b \cdot A_t \cdot LES \cdot q_F$$

Donde LES la longitud de la denominada sección de lecho en equilibrio, C_F es la concentración de adsorbato en la alimentación, ρ_b es la densidad de partícula del adsorbente, A_t el área transversal del lecho y q_F es la capacidad de adsorción en el equilibrio con la alimentación.

Podemos calcular C_F de dos formas, utilizando el diagrama psicrométrico del sistema He – H₂O, o haciendo uso de la ecuación de los gases ideales. Para el primer caso, sabemos que la humedad relativa a la entrada del lecho experimental es del 83% y la temperatura de 20°C (68°F).

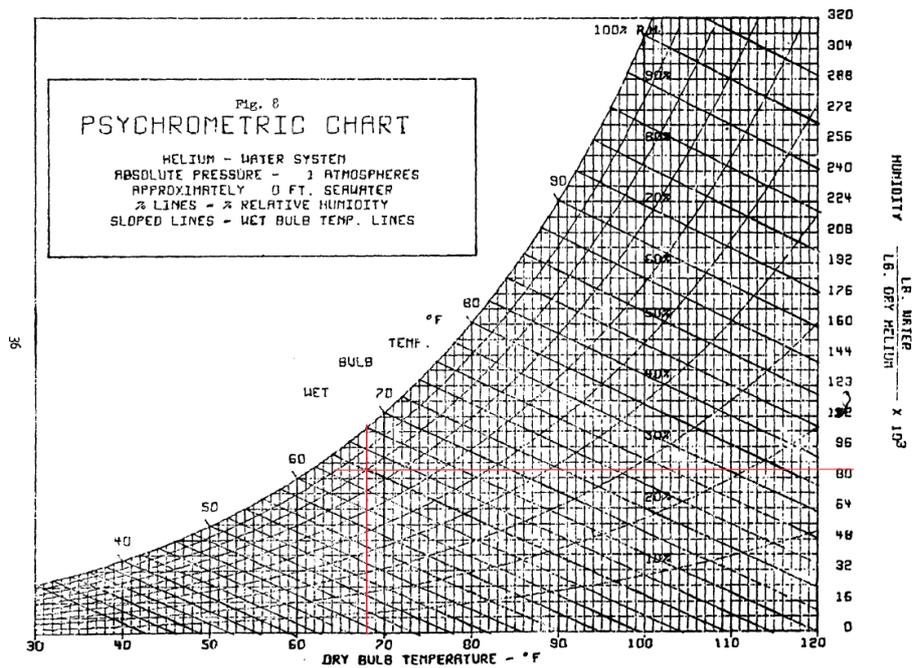


Figura 24. Diagrama Psicrométrico He-H₂O. Fuente:(30)

Por lo tanto, entrando al diagrama psicrométrico para 1 atmósfera de presión mostrado en (30) con esos datos, obtenemos un valor de humedad absoluta de $0,084 \frac{kg H_2O}{kg He}$ o lo que es lo mismo $0,014 \frac{kg H_2O}{m^3 He}$.

De otro modo, si hacemos uso de la ecuación de los gases ideales:

$$PV = nRT; \frac{m}{V} = \frac{P^{\circ}_W \cdot M}{R \cdot T} = \frac{1,22[atm] \cdot 0,015 \cdot 18[g/mol]}{0,082[atm \cdot L/mol \cdot K] \cdot 293[K]} = 0,0137 \frac{g H_2O}{L} = 0,0137 \frac{kg}{m^3}$$

Se ha utilizado el valor de $C_F = 0,014 \frac{kg H_2O}{m^3 He}$ en el balance debido a que es la opción ligeramente más desfavorable.

Para el cálculo de q_F se ha hecho uso de la expresión obtenida en (29) para el cálculo de la constante de transferencia de masa (k) suponiendo un modelo LDF (Linear-driving force), despreciando el efecto de película externa y la resistencia de microporo a la transferencia de masa:

$$\frac{1}{k} = \frac{R_p^2}{15\varepsilon_p D_e} \frac{q_0^*}{C_F}$$

Donde, q_0^* ($mmol/cm^3$) es la concentración de adsorbato en la fase sólida en equilibrio con C_F ($mmol/cm^3$), la concentración de adsorbato en la alimentación. ε_p es la porosidad de la partícula de adsorbente, D_e (cm^2/s) es la difusividad efectiva y R_p (cm) el radio de partícula del adsorbente.

Para el experimento A1 (RH=0,83; P=1,24 bar; T=20°C; $V_s=21,65$ cm/s), los valores experimentales de k y D_e han sido $0,0009 s^{-1}$ y $0,165$ (cm^2/s) respectivamente. Reordenando y sustituyendo:

$$q_0^* = \frac{C_F \cdot 15\varepsilon_p \cdot D_e}{R_p^2 \cdot k} = \frac{0,014[kg/m^3] \cdot 15 \cdot 0,33 \cdot 0,165[cm^2/s]}{(0,1)^2[cm^2] \cdot 0,0009[s^{-1}]} = 1270,5 \frac{kg H_2O}{m^3 adsorbente}$$

$$q_F = \frac{q_0^*}{\rho_b} = \frac{1270,5 \frac{kg H_2O}{m^3 adsorbente}}{1312 \frac{kg adsorbente}{m^3 adsorbente}} = 0,968 \frac{kg H_2O}{kg adsorbente}$$

Para calcular LES se puede hacer uso de la siguiente expresión:

$$LES = L - LUB$$

Donde L es la longitud total del lecho y LUB es la sección de lecho sin utilizar. Sabiendo que la fracción de lecho sin utilizar $\frac{LUB}{L}$ se mantiene constante siempre y cuando la velocidad superficial del fluido se mantenga constante y haciendo uso de la curva de ruptura experimental proporcionada en (29) podemos calcular LUB según la siguiente expresión:

$$\frac{LUB}{L} = \frac{t_s - t_b}{t_s}$$

Donde t_s es el tiempo estequiométrico donde la concentración de salida de adsorbato es la mitad que la de entrada y se puede calcular gráficamente.

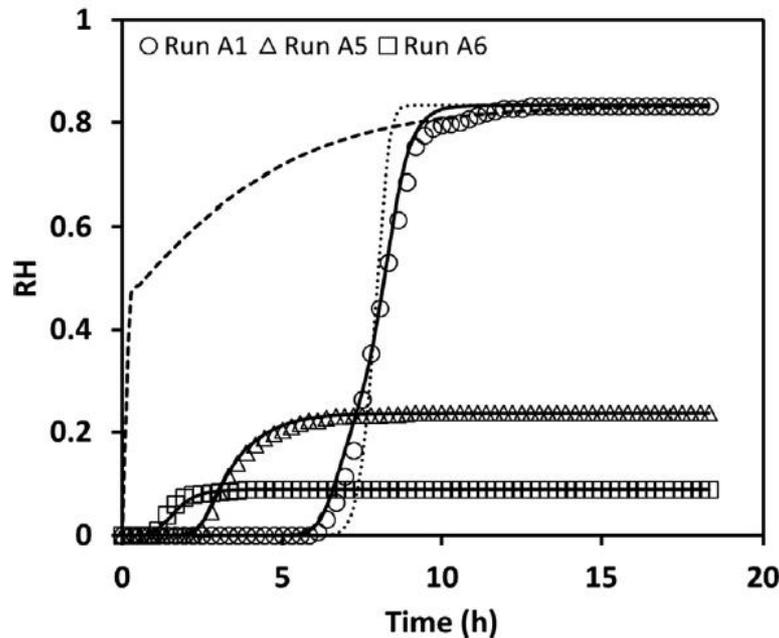


Figura 25. Curva experimental de adsorción para distintas condiciones de operación. Fuente:(29)

Haciendo uso de la herramienta web plotdigitalizer para la visualización de los puntos, para una humedad relativa del 41,5% se obtiene un valor de t_s de 7,9 h.

También se puede calcular de forma analítica haciendo uso del concepto de la MTZ (Mass Transfer Zone) mediante la siguiente expresión:

$$t_s = \frac{t_e + t_b}{2}$$

Donde t_b es el tiempo de ruptura y t_e es el tiempo en el que la capacidad de adsorción es mínima y se considera el límite de la zona de transferencia de masa. Se suelen considerar como valores típicos para t_b y t_e el 5% y el 95% respectivamente de la concentración inicial de adsorbato en la concentración de salida.

Sin embargo, el uso de una concentración de ruptura del 5% para determinar el t_b , supone una concentración de salida de $0,83 \cdot 0,05 = 0,0415$ es decir un 4,15% de humedad relativa, lo cual correspondería, según el diagrama psicrométrico He-H₂O a una humedad absoluta de aproximadamente $4 \cdot 10^{-3} \frac{kg H_2O}{kg He}$, sobrepasando ampliamente la especificación de $8,9 \cdot 10^{-6} \frac{kg H_2O}{kg H_2}$ para conseguir una pureza de hidrógeno del 99,9999% a la salida del lecho. Por tanto, se ha optado en este caso por tomar el límite de detección como concentración de ruptura para determinar t_b . En este caso, el tiempo máximo para el cual no se ha detectado presencia de adsorbato en la corriente de salida sería de aproximadamente $t_b = 5,2 h$ según la curva de ruptura experimental. El tiempo t_e en cambio sería de 9,1 h. Por lo tanto:

$$t_s = \frac{t_e + t_b}{2} = \frac{9,1 + 5,2}{2} = 7,15 h$$

Se ha tomado $t_s = 7,15 \text{ h}$ al ser la opción más desfavorable. Haciendo uso de la expresión anterior podemos calcular LUB sabiendo que la longitud total del lecho experimental es de 15cm y la fracción de lecho sin usar:

$$\frac{LUB}{L} = \frac{t_s - t_b}{t_s}$$

$$LUB = \frac{7,15 - 5,2}{7,15} \cdot 0,15 = 0,041 \text{ m}$$

$$\frac{LUB}{L} = 0,273 = cte$$

En cuanto a las dimensiones del lecho de la planta; anteriormente se ha calculado el diámetro del lecho de la planta en función del caudal de alimentación y de la velocidad superficial del fluido, que será de $D = 12,25 \text{ cm}$. Como norma general la longitud del lecho se calcula de forma que $L = 2D$, por tanto, $L = 24,5 \text{ cm}$. Con estos datos podemos calcular LES del lecho de la planta.

$$LES = L - LUB = 24,5 - 24,5 \cdot 0,273 = 17,81 \text{ cm}$$

Despejando t_b en el balance de materia podemos determinar el tiempo de ruptura para el lecho de la planta:

$$Q' \cdot t_b \cdot C_F = \rho_b \cdot A_t \cdot LES \cdot q_F$$

$$t_b = \frac{\rho_b \cdot A_t \cdot LES \cdot q_F}{Q' \cdot C_F} = \frac{1312[\text{kg}/\text{m}^3] \cdot 0,01179[\text{m}^2] \cdot 0,1781[\text{m}] \cdot 0,968}{9,19 [\text{m}^3/\text{h}] \cdot 0,014[\text{kg}/\text{m}^3]} = 20,73 \text{ h}$$

Por tanto, el tiempo máximo de duración de la etapa de adsorción será de 20,73 horas.

El tiempo de regeneración del lecho se estima en torno a las 25 horas en base a la curva experimental de

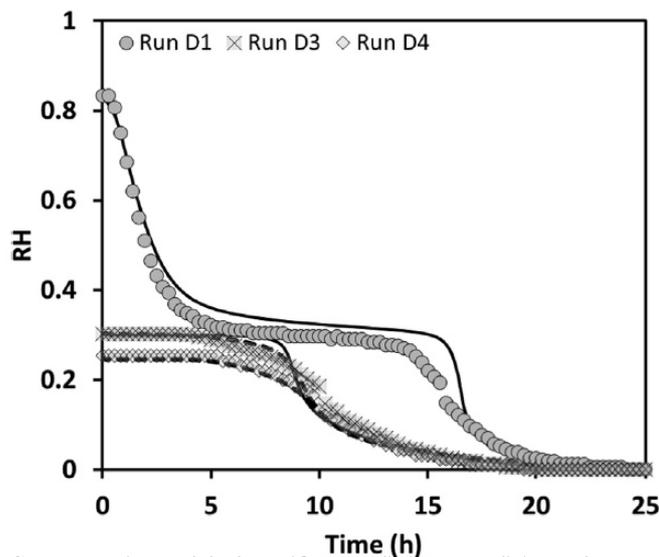
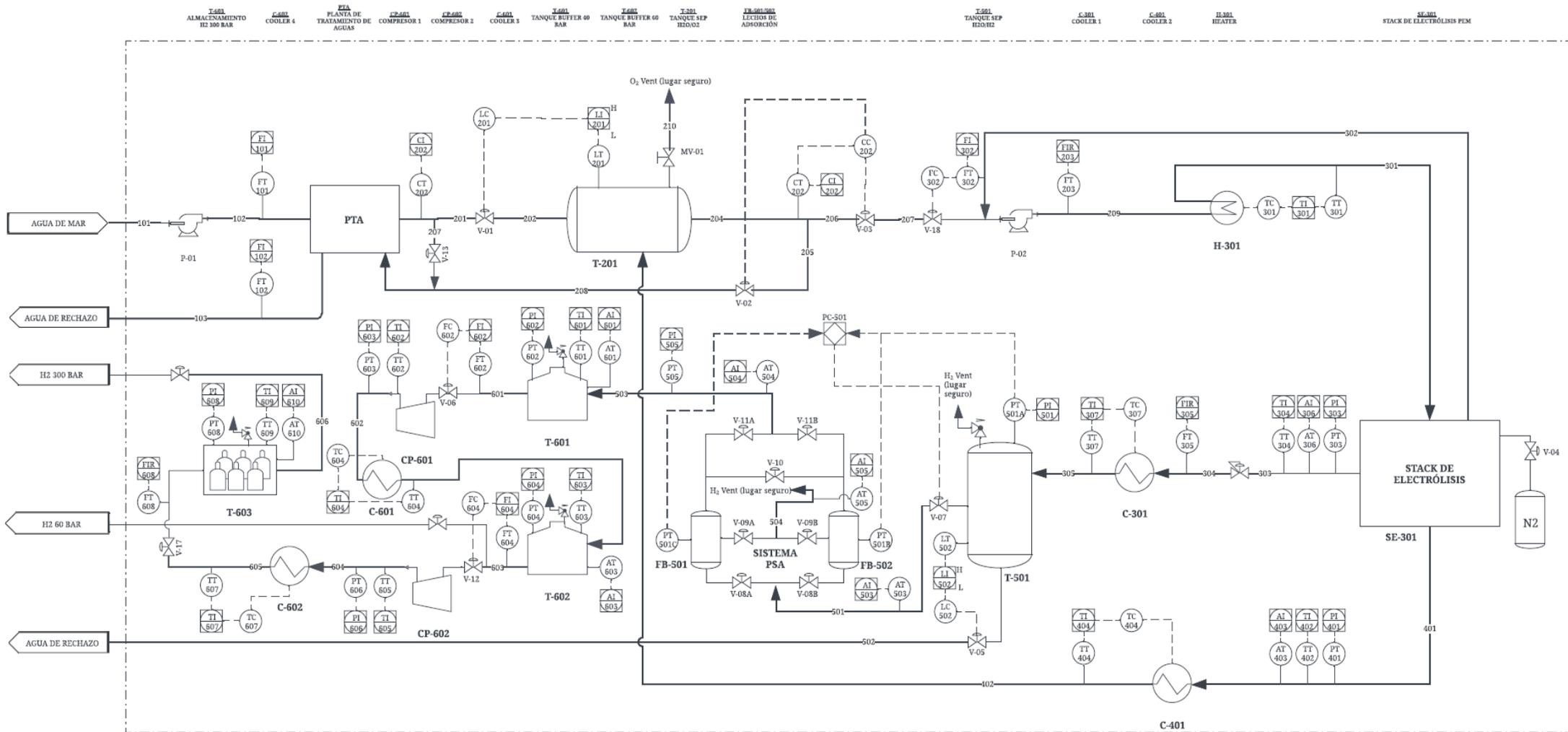


Figura 26. Curva experimental de desorción para distintas condiciones de operación. Fuente: (29)

desorción mostrada en (29).

Por tanto para asegurar la operación en continuo será necesario disponer de 3 lechos (más uno adicional para labores de mantenimiento o apoyo) con un **tiempo de ciclo** total de aproximadamente de $20,73h \cdot 3 =$ **62,2 horas**.

6 ANEXO 2: DIAGRAMA DE INSTRUMENTACIÓN Y TUBERÍAS(P&ID)



Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Object: 301(1)

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	70	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	244.046	kg/h
MolarFlow	13.5464	kmol/h
VolumetricFlow	0.25122	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.89246E -05	
Water	0.999981	
Density(Mixture)	971.443	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	18.0155	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2475.13	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-6.34791	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-44590.8	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-114.361	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.662165	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.649283	
Water	0.350717	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.63082E -05	
Water	0.999984	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.63082E -05	
Water	0.999984	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Aqueous)		

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: 606

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	24.7501	C
Pressure	300	bar
MassFlow	0.902122	kg/h
MolarFlow	0.447504	kmol/h
VolumetricFlow	0.0441176	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
Density(Mixture)	20.4481	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	2.0159	kg/kmol
SpecificEnthalpy (Mixture)	155.737	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-23.6265	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy (Mixture)	313.949	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-47.6286	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.177836	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0.999999	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Oxygen	0
Water	9.99967E -07
MolarFraction(Liquid 2)	
Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07
MolarFraction(Aqueous)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07

Object: 605

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	15	C
Pressure	300	bar
MassFlow	0.902122	kg/h
MolarFlow	0.447504	kmol/h
VolumetricFlow	0.0428872	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
Density(Mixture)	21.0348	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	2.0159	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	152.179	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-24.1117	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	306.777	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-48.6067	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.173243	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Water	9.99967E -07
MolarFraction(OverallLiquid)	
Hydrogen	NaN
Oxygen	NaN
Water	NaN
MolarFraction(Liquid 1)	
Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07
MolarFraction(Liquid 2)	
Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07
MolarFraction(Aqueous)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07

Object: 604

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	259.5	C
Pressure	300	bar
MassFlow	0.902122	kg/h
MolarFlow	0.447504	kmol/h
VolumetricFlow	0.073395	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
Density(Mixture)	12.2913	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	2.0159	kg/kmol
SpecificEnthalpy (Mixture)	198.042	KJ/kg

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

SpecificEntropy (Mixture)	-15.1064	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy (Mixture)	399.231	kJ/kmol
MolarEntropy (Mixture)	-30.4529	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity (Mixture)	0.279158	W/[m.K]
MolarFraction (Vapor)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction (OverallLiquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
MolarFraction (Liquid 1)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction (Liquid 2)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction (Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction (Solid)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	

Object: 603

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	24.872	C
Pressure	60	bar
MassFlow	0.902122	kg/h
MolarFlow	0.447504	kmol/h
VolumetricFlow	0.189898	m3/h

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
Density(Mixture)	4.75056	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	2.0159	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	14.9776	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-16.8909	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	30.1932	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-34.0504	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.177893	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	

Object: 602

Type: Material Stream

Property	Value
----------	-------

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Temperature	10	C
Pressure	60	bar
MassFlow	0.902122	kg/h
MolarFlow	0.447504	kmol/h
VolumetricFlow	0.180575	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
Density(Mixture)	4.99584	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	2.0159	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	13.1554	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-17.6244	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	26.52	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-35.5289	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.170872	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07

Object: 601

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	74.425	C
Pressure	60	bar
MassFlow	0.902122	kg/h
MolarFlow	0.447504	kmol/h
VolumetricFlow	0.220895	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
Density(Mixture)	4.08394	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	2.0159	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	19.8097	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-14.6734	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	39.9343	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-29.5801	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.200655	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Water	9.99967E -07
MolarFraction(Liquid 2)	
Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07
MolarFraction(Aqueous)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07

Object: 501

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	24.9405	C
Pressure	40	bar
MassFlow	0.902122	kg/h
MolarFlow	0.447504	kmol/h
VolumetricFlow	0.282066	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
Density(Mixture)	3.19827	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	2.0159	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	8.57018	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-15.2001	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	17.2766	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-30.6418	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.177926	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MolarFraction(OverallLiquid)

Hydrogen	NaN
Oxygen	NaN
Water	NaN

MolarFraction(Liquid 1)

Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07

MolarFraction(Liquid 2)

Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07

MolarFraction(Aqueous)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

MolarFraction(Solid)

Hydrogen	0.999999
Oxygen	0
Water	9.99967E -07

Object: 504 (H2 Vent)

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	15	C
Pressure	40	bar
Mass Flow	0.0144643	kg/h
Molar Flow	0.00481733	kmol/h
Volumetric Flow	0.00274918	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.93833	
Oxygen	0	
Water	0.0616702	
Density(Mixture)	5.26133	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	3.00257	kg/kmol
SpecificEnthalpy (Mixture)	-862.619	kJ/kg
SpecificEntropy (Mixture)	-12.1816	kJ/[kg.K]

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MolarEnthalpy(Mixture)	-2590.07	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-36.576	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.195147	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.999342	
Oxygen	0	
Water	0.000657796	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0.0647687	
Oxygen	0	
Water	0.935231	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0.0647687	
Oxygen	0	
Water	0.935231	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	

Object: 503

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	15	C
Pressure	40	bar
MassFlow	0.902122	kg/h
MolarFlow	0.447504	kmol/h
VolumetricFlow	0.272744	m3/h
MixtureMolarFraction		

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
Density(Mixture)	3.30758	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	2.0159	kg/kmol
SpecificEnthalpy (Mixture)	7.72295	kJ/kg
SpecificEntropy (Mixture)	-15.6851	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy (Mixture)	15.5687	kJ/kmol
MolarEntropy (Mixture)	-31.6196	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.173243	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0.999999	
Oxygen	0	
Water	9.99967E -07	

Object: 502 (Rejected water)

Type: Material Stream

Property	Value
----------	-------

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Temperature	15	C
Pressure	40	bar
MassFlow	3.76669	kg/h
MolarFlow	0.221844	kmol/h
VolumetricFlow	0.00352554	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.0647691	
Oxygen	0	
Water	0.935231	
Density(Mixture)	1068.4	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	16.979	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2349.63	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-6.34153	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-39894.3	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-107.673	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.510235	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0.0647691	
Oxygen	0	
Water	0.935231	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0.0647691	
Oxygen	0	
Water	0.935231	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Oxygen	0
Water	0

Object: 305

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	15	C
Pressure	40	bar
Mass Flow	0.916587	kg/h
Molar Flow	0.452322	kmol/h
Volumetric Flow	0.275659	m ³ /h
Mixture Molar Fraction		
Hydrogen	0.999342	
Oxygen	0	
Water	0.000657791	
Density (Mixture)	3.32507	kg/m ³
Molecular Weight (Mixture)	2.0264	kg/kmol
Specific Enthalpy (Mixture)	7.58369	kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)	-15.5992	kJ/[kg.K]
Molar Enthalpy (Mixture)	15.3676	kJ/kmol
Molar Entropy (Mixture)	-31.6102	kJ/[kmol.K]
Thermal Conductivity (Mixture)	0.173141	W/[m.K]
Molar Fraction (Vapor)		
Hydrogen	0.999342	
Oxygen	0	
Water	0.000657791	
Molar Fraction (Overall Liquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
Molar Fraction (Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
Molar Fraction (Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Water	0
MolarFraction(Aqueous)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: 303

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	68.2703	C
Pressure	40	bar
MassFlow	4.68328	kg/h
MolarFlow	0.674165	kmol/h
VolumetricFlow	0.329735	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.691807	
Oxygen	0	
Water	0.308193	
Density(Mixture)	14.2032	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	6.94679	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-1663.39	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-6.75803	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-11555.2	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-46.9466	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.311922	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.991642	
Oxygen	0	
Water	0.00835781	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0.0786821	
Oxygen	0	
Water	0.921318	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MolarFraction(Liquid 1)

Hydrogen	0.0786821
Oxygen	0
Water	0.921318

MolarFraction(Liquid 2)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

MolarFraction(Aqueous)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

MolarFraction(Solid)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: 2

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	68.2703	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	4.68328	kg/h
MolarFlow	0.674165	kmol/h
VolumetricFlow	18.2783	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0.691807	
Oxygen	0	
Water	0.308193	
Density(Mixture)	0.256221	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	6.94679	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-201.608	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	1.11666	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-1400.53	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	7.75718	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.163533	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Hydrogen	0.714126
Oxygen	0
Water	0.285874
MolarFraction(OverallLiquid)	
Hydrogen	8.14242E -06
Oxygen	0
Water	0.999992
MolarFraction(Liquid 1)	
Hydrogen	8.14242E -06
Oxygen	0
Water	0.999992
MolarFraction(Liquid 2)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Aqueous)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: 301

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	70	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	244.046	kg/h
MolarFlow	13.5464	kmol/h
VolumetricFlow	0.25122	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.89246E -05	
Water	0.999981	
Density(Mixture)	971.443	kg/m3

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MolecularWeight(Mixture)	18.0155	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2475.13	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-6.34791	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-44590.8	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-114.361	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.662165	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.649283	
Water	0.350717	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.63082E -05	
Water	0.999984	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.63082E -05	
Water	0.999984	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	

Object: 209

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	60.7962	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	244.046	kg/h

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MolarFlow	13.5464	kmol/h
VolumetricFlow	0.24844	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.89246E -05	
Water	0.999981	
Density(Mixture)	982.315	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	18.0155	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2507.08	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-6.49335	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-45166.3	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-116.981	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.653949	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.650905	
Water	0.349095	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.89246E -05	
Water	0.999981	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	1.89246E -05	
Water	0.999981	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	

Object: 401

Type: Material Stream

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Temperature	83.5459	C
Pressure	1.01325	bar
Mass Flow	13.5486	kg/h
Molar Flow	0.570915	kmol/h
Volumetric Flow	16.6268	m3/h
Mixture Molar Fraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.408778	
Water	0.591222	
Density (Mixture)	0.814868	kg/m3
Molecular Weight (Mixture)	23.7314	kg/kmol
Specific Enthalpy (Mixture)	-1.5918	kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)	0.47746	kJ/[kg.K]
Molar Enthalpy (Mixture)	-37.7758	kJ/kmol
Molar Entropy (Mixture)	11.3308	kJ/[kmol.K]
Thermal Conductivity (Mixture)	0.0262497	W/[m.K]
Molar Fraction (Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.408778	
Water	0.591222	
Molar Fraction (Overall Liquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
Molar Fraction (Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
Molar Fraction (Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
Molar Fraction (Aqueous)		
Hydrogen	0	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: 207(1)

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	24.959	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	14.426	kg/h
MolarFlow	0.800611	kmol/h
VolumetricFlow	0.0144754	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.000249181	
Water	0.999751	
Density(Mixture)	996.586	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	18.0188	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2629.21	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-7.09445	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-47375.2	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-127.833	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.609788	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.000249181	
Water	0.999751	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.000249181	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Water	0.999751
MolarFraction(Liquid 2)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Aqueous)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: 3

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	83.5459	C
Pressure	1.01325	bar
Mass Flow	243.295	kg/h
Molar Flow	13.3237	kmol/h
Volumetric Flow	16.8638	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.0175216	
Water	0.982478	
Density(Mixture)	14.4271	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	18.2603	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2293.17	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-5.77255	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-41873.9	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-105.408	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.644468	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.408778	
Water	0.591222	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MolarFraction(OverallLiquid)

Hydrogen	0
Oxygen	4.59576E -06
Water	0.999995

MolarFraction(Liquid 1)

Hydrogen	0
Oxygen	4.59576E -06
Water	0.999995

MolarFraction(Liquid 2)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

MolarFraction(Aqueous)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

MolarFraction(Solid)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: 302

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	83.5459	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	229.747	kg/h
MolarFlow	12.7528	kmol/h
VolumetricFlow	0.237021	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	4.59576E -06	
Water	0.999995	
Density(Mixture)	969.308	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	18.0153	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2428.31	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-6.14113	kJ/[kg,K]

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MolarEnthalpy(Mixture)	-43746.8	KJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-110.635	KJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.672144	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	4.59576E -06	
Water	0.999995	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	4.59576E -06	
Water	0.999995	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	

Object: 8

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	505.59	C
Pressure	40	bar
MassFlow	4.68328	kg/h
MolarFlow	0.674165	kmol/h
VolumetricFlow	1.09507	m3/h
MixtureMolarFraction		

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Hydrogen	0.691807	
Oxygen	0	
Water	0.308193	
Density(Mixture)	4.27671	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	6.94679	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	0.367715	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	1.11666	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	2.55444	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	7.75717	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.278988	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0.691807	
Oxygen	0	
Water	0.308193	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	7.41414E -85	
Oxygen	0	
Water	1	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	

Object: 402

Type: Material Stream

Property	Value
----------	-------

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Temperature	25	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	13.5486	kg/h
MolarFlow	0.570915	kmol/h
VolumetricFlow	5.96488	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.408778	
Water	0.591222	
Density(Mixture)	2.2714	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	23.7314	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-1143.86	KJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-3.04477	KJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-27145.4	KJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-72.2567	KJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.360571	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.956851	
Water	0.043149	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.000248683	
Water	0.999751	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.000248683	
Water	0.999751	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Aqueous)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	0	
MolarFraction(Solid)		
Hydrogen	0	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Oxygen	0
Water	0

Object: 202 (Fresh water feed)

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	25	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	8.52779	kg/h
MolarFlow	0.473364	kmol/h
VolumetricFlow	0.00855923	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	1	
Density(Mixture)	996.327	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	18.0153	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2630.81	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-7.09727	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-47394.7	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-127.859	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.610248	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	1	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	1	
MolarFraction(Liquid 1)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	
Water	1	
MolarFraction(Liquid 2)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Water	0
MolarFraction(Aqueous)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	1

Object: 210 (O2 vent)

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	24.959	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	7.65039	kg/h
MolarFlow	0.243668	kmol/h
VolumetricFlow	5.95452	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.956946	
Water	0.0430536	
Density(Mixture)	1.2848	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	31.3968	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-0.286847	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	0.0725672	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-9.00607	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	2.27837	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.0261416	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.956946	
Water	0.0430536	
MolarFraction(OverallLiquid)		
Hydrogen	NaN	
Oxygen	NaN	
Water	NaN	

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

MolarFraction(Liquid 1)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

MolarFraction(Liquid 2)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

MolarFraction(Aqueous)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

MolarFraction(Solid)

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: 207

Type: Material Stream

Property	Value	
Temperature	24.959	C
Pressure	1.01325	bar
MassFlow	14.426	kg/h
MolarFlow	0.800611	kmol/h
VolumetricFlow	0.0144754	m3/h
MixtureMolarFraction		
Hydrogen	0	
Oxygen	0.000249181	
Water	0.999751	
Density(Mixture)	996.586	kg/m3
MolecularWeight(Mixture)	18.0188	kg/kmol
SpecificEnthalpy(Mixture)	-2629.21	kJ/kg
SpecificEntropy(Mixture)	-7.09445	kJ/[kg.K]
MolarEnthalpy(Mixture)	-47375.2	kJ/kmol
MolarEntropy(Mixture)	-127.833	kJ/[kmol.K]
ThermalConductivity(Mixture)	0.609788	W/[m.K]
MolarFraction(Vapor)		

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(OverallLiquid)	
Hydrogen	0
Oxygen	0.000249181
Water	0.999751
MolarFraction(Liquid 1)	
Hydrogen	0
Oxygen	0.000249181
Water	0.999751
MolarFraction(Liquid 2)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Aqueous)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0
MolarFraction(Solid)	
Hydrogen	0
Oxygen	0
Water	0

Object: E11

Type: Energy Stream

Property	Value
EnergyFlow	7.87935 kW

Object: E10

Type: Energy Stream

Property	Value
EnergyFlow	0.0628233 kW

Object: E9

Type: Energy Stream

Property	Value
----------	-------

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

EnergyFlow	0.897238	kW
-------------------	----------	----

Object: E8
Type: Energy Stream

Property	Value
-----------------	--------------

EnergyFlow	0.0734187	kW
-------------------	-----------	----

Object: E7
Type: Energy Stream

Property	Value
-----------------	--------------

EnergyFlow	0.180191	kW
-------------------	----------	----

Object: E6
Type: Energy Stream

Property	Value
-----------------	--------------

EnergyFlow	0.00346146	kW
-------------------	------------	----

Object: E5
Type: Energy Stream

Property	Value
-----------------	--------------

EnergyFlow	-0.292566	kW
-------------------	-----------	----

Object: E4
Type: Energy Stream

Property	Value
-----------------	--------------

EnergyFlow	2.55788	kW
-------------------	---------	----

Object: E3
Type: Energy Stream

Property	Value
-----------------	--------------

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

EnergyFlow	3.0812	kW
------------	--------	----

Object: E1

Type: Energy Stream

Property	Value	
----------	-------	--

EnergyFlow	50	kW
------------	----	----

Object: E12

Type: Energy Stream

Property	Value	
----------	-------	--

EnergyFlow	4.29894	kW
------------	---------	----

Object: H2 300 Bar Tank

Type: Liquid Storage Tank

Property	Value	
----------	-------	--

Liquid Level	0	m
--------------	---	---

Height	2	m
--------	---	---

Initialize using Inlet Stream	0	
-------------------------------	---	--

ResetContent	0	
--------------	---	--

PressureDrop	0	bar
--------------	---	-----

Volume	2.2	m ³
--------	-----	----------------

ResidenceTime	184671	s
---------------	--------	---

Object: H2 60 Bar Tank

Type: Liquid Storage Tank

Property	Value	
----------	-------	--

Liquid Level	0	m
--------------	---	---

Height	2	m
--------	---	---

Initialize using Inlet Stream	0	
-------------------------------	---	--

ResetContent	0	
--------------	---	--

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

PressureDrop	0	bar
Volume	0.85	m3
ResidenceTime	16945.9	s

Object: H2 Buffer Tank 40 Bar

Type: Liquid Storage Tank

Property	Value	
Liquid Level	0	m
Height	2	m
Initialize using InletStream	0	
ResetContent	0	
PressureDrop	0	bar
Volume	1	m3
ResidenceTime	13199.2	s

Object: H2-40 Bar

Type: Vapor-Liquid Separator

Property	Value	
VesselOrientation	0	
OperatingPressure	0	bar
Liquid Level	0	m
Volume	1	m3
Height	2	m
MinimumPressure	1.01325	bar
Initialize using InletStream	-1	
ResetContent	0	
SeparationTemperature(if overridden)	15	C
SeparationPressure(if overridden)	40	bar

Object: Internal Stack Separation

Type: Vapor-Liquid Separator

Property	Value	
VesselOrientation	0	
OperatingPressure	0	bar
Liquid Level	0	m
Volume	1	m3

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Height	2	m
MinimumPressure	1.01325	bar
Initialize using Inlet Stream	-1	
ResetContent	0	
SeparationTemperature(if overridden)	70	C
SeparationPressure(if overridden)	1.5	bar

Object: O2-LPS

Type: Vapor-Liquid Separator

Property	Value	
VesselOrientation	0	
OperatingPressure	0	bar
Liquid Level	0	m
Volume	1	m3
Height	2	m
MinimumPressure	1.01325	bar
Initialize using Inlet Stream	-1	
ResetContent	0	
SeparationTemperature(if overridden)	25	C
SeparationPressure(if overridden)	1.01325	bar

Object: HT-1

Type: Material Stream Heater

Property	Value	
Flow Conductance	1	[kg/s]/[Pa ^{0.5}]
Volume	1	m3
MinimumPressure	1.01325	bar
Initialize using Inlet Stream	-1	
ResetContent	0	
PressureDrop	0	bar
Efficiency	100	
Outlet Temperature	70	C
Heat Added	7.87935	kW
Outlet Molar Vapor Fraction	4.02962E -06	
TemperatureDifference	9.20382	C.

Object: C-3

Type: Adiabatic Compressor

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

PressureIncrease	240	bar
Adiabatic Efficiency	75	%
TemperatureDifference	234.628	C.
Power Required	0.897238	kW
Outlet Pressure	300	bar
Polytropic Efficiency	79.6209	%
Adiabatic Coefficient	1.5193	
Polytropic Coefficient	1.69302	
Adiabatic Head	293588	m
Polytropic Head	311677	m
Rotation Speed	1500	rpm
Pressure Ratio	5	

Object: C-2

Type: Adiabatic Compressor

Property	Value	
PressureIncrease	20	bar
Adiabatic Efficiency	75	%
TemperatureDifference	49.4846	C.
Power Required	0.180191	kW
Outlet Pressure	60	bar
Polytropic Efficiency	76.3869	%
Adiabatic Coefficient	1.44681	
Polytropic Coefficient	1.65866	
Adiabatic Head	56144.2	m
Polytropic Head	57182.4	m
Rotation Speed	1500	rpm
Pressure Ratio	1.5	

Object: Back Pressure Regulator

Type: Adiabatic Compressor

Property	Value	
----------	-------	--

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

PressureIncrease	38.9868	bar
Adiabatic Efficiency	100	%
TemperatureDifference	437.32	C.
Power Required	3.0812	kW
OutletPressure	40	bar
PolytropicEfficiency	100	%
AdiabaticCoefficient	1.30581	
PolytropicCoefficient	1.30581	
AdiabaticHead	235217	m
PolytropicHead	235217	m
RotationSpeed	1500	rpm
PressureRatio	39.4769	

Object: CL-3

Type: Material Stream Cooler

Property	Value	
Flow Conductance	1	[kg/s]/[Pa ^{0.5}]
Volume	1	m ³
MinimumPressure	1.01325	bar
Initialize using Inlet Stream	-1	
ResetContent	0	
PressureDrop	0	bar
Efficiency	75	
Outlet Temperature	15	C
Heat Removed	0.0628233	kW
Outlet Molar Vapor Fraction	1	
TemperatureDifference	-244.5	C.

Object: CL-2

Type: Material Stream Cooler

Property	Value	
Flow Conductance	1	[kg/s]/[Pa ^{0.5}]
Volume	1	m ³
MinimumPressure	1.01325	bar
Initialize using Inlet Stream	-1	
ResetContent	0	
PressureDrop	0	bar

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

Efficiency	75	
Outlet Temperature	10	C
Heat Removed	0.0734187	kW
Outlet Molar Vapor Fraction	1	
Temperature Difference	-64.425	C.

Object: Internal Stack Cooler

Type: Material Stream Cooler

Property	Value	
Flow Conductance	1	[kg/s]/[Pa ^{0.5}]
Volume	1	m ³
Minimum Pressure	1.01325	bar
Initialize using Inlet Stream	-1	
Reset Content	0	
Pressure Drop	0	bar
Efficiency	75	
Outlet Temperature	68.2703	C
Heat Removed	2.55788	kW
Outlet Molar Vapor Fraction	0.671584	
Temperature Difference	-437.32	C.

Object: CL-4

Type: Material Stream Cooler

Property	Value	
Flow Conductance	1	[kg/s]/[Pa ^{0.5}]
Volume	1	m ³
Minimum Pressure	1.01325	bar
Initialize using Inlet Stream	-1	
Reset Content	0	
Pressure Drop	0	bar
Efficiency	100	
Outlet Temperature	25	C
Heat Removed	4.29894	kW
Outlet Molar Vapor Fraction	0.427063	
Temperature Difference	-58.5459	C.

Object: PSA System

Type: Compound Separator

Simulation Report

DWSIM 8.7

Details

Title: MySimulation_36

Comments:

EnergyBalance	0.00346146	kW
SpecifiedStreamIndex	0	
SepSpecValue_Hydrogen	99	%
SepSpecValue_Oxygen	0	%
SepSpecValue_Water	0.1504	%

Object: WE-1

Type: Water Electrolyzer

Property	Value	
Voltage	56	V
ThermoneutraVoltage	1.47353	V
ReversibleVoltage	1.19104	V
Number of Cells	28	
Cell Voltage	2	V
Waste Heat	13.1618	kW
Current	892.857	A
ElectronTransfer	0.932784	kmol/h
Efficiency	0.736765	
Input Efficiency	0	
