

Purificació d'hidrogen verd

TREBALL DE FI DE GRAU

Grau en Enginyeria Química

Tarragona, 21 de juliol de 2024

Identificació: TFGEQ_2414

Membres: Pau Costa Ribalta

Dídac Badia Porras

Ainoa Vigo Malvido

Tutor: Mònica Rosell Trillas

Departament d'Enginyeria Química. Universitat Rovira i Virgili.

Vist i plau pel lliurament i defensa del TFG del grau d'Enginyeria Química.

TÍTOL DEL TFGEQ:Purificació d'hidrogen verd.....

SUBTÍTOL

AUTOR: Pau Costa Ribalta, Dídac Badia Porras, Ainoa Vigo Malvido.....

CURS ACADÈMIC: 2023/2024.....

VIST I PLAU DEL TUTOR ACADÈMIC

En/Na .Mònica Rosell Trillas.....
en la seva capacitat de tutor acadèmic fa constar que considera que el TFGEQ_2414

SI és adequat i en conseqüència recomana la seva defensa

no en recomana la defensa per presentar les mancances exposades en el document annex

Signatura:

Monica
Rosell-
Trillas

Digitally signed
by Monica
Rosell-Trillas
Date: 2024.07.21
23:51:28 +02'00'

Data: 21/07/24

DECLARACIÓ D'ABSÈNCIA DE CONFLICTES DE CONFIDENCIALITAT

En/Na Mònica Rosell Trillas....., en la seva capacitat de supervisor extern^(*) del treball fa constar que ha revisat el contingut del TFGEQ i que no conté cap informació que pugui ser considerada com confidencial per part de l'empresa

^(*) Cas que el TFGEQ no sigui extern serà el professor tutor qui emplenarà aquesta secció

Signatura:

Monica
Rosell-
Trillas

Digitally signed
by Monica
Rosell-Trillas
Date: 2024.07.21
23:51:42 +02'00'

Data: 21/07/24



DÍDAC BADIA PORRAS



PAU COSTA RIBALTA



AINOA VIGO MALVIDO

NOMENCLATURA

ÍNDIX

1.	Introducció	1
2.	Etapa preliminar	1
2.1.	Definició i descripció del projecte	1
2.2.	Abast del projecte	1
2.3.	Classificació d'H ₂	1
2.4.	Estudi d'alternatives de producció d'H ₂	2
2.4.1.	<i>Steam reforming</i> (H ₂ gris)	2
2.4.2.	Captura i emmagatzematge de CO ₂ (H ₂ blau)	3
2.4.3.	Electròlisi (H ₂ verd)	4
2.5.	Estudi d'alternatives dels processos del purificació	5
2.5.1.	Adsorció	5
2.5.2.	Absorció per amines	6
2.5.3.	Membranes de separació	6
2.5.4.	Destil·lació criogènica	7
2.5.5.	Rentat amb aigua	7
2.6.	Estudi d'alternatives	8
2.6.1.	Procés escollit	8
2.6.2.	Catalitzador del reactor	8
2.6.3.	Tipus d'adsorbent	11
2.6.4.	Configuració de les columnes	15
2.6.5.	Tipus de separació	16
2.6.6.	Equips d'intercanvi de calor	21
3.	Bases de disseny	22
3.1.	Especificacions d'alimentacions	22
3.2.	Especificacions de producte	22
3.3.	Capacitat operativa	22
3.4.	Legislació, normes i codis de disseny	23
3.5.	Especificació dels serveis disponibles	23
3.5.1.	Servei d'aigua de refrigeració	23
3.5.2.	Servei de nitrogen	23
4.	Enginyeria bàsica	25
4.1.	Diagrames de blocs i de procés	25
4.1.1.	Diagrama de procés (PFD)	26

4.1.2.	Balanç de matèria del procés	27
4.2.	Diagrama de canonades i instrumentació (P&ID)	29
4.3.	Diagrama de control i xarxes de control (PCD)	34
4.4.	Llistat i dimensionament de canonades	35
4.4.1.	Materials de canonades	35
4.4.2.	Dimensionament de canonades	35
4.4.3.	Llistat de canonades	35
4.5.	Llistat i disseny d'equips	40
4.5.1.	Llistat d'equips	40
4.5.2.	Resistència elèctrica W-101 i W-401	41
4.5.3.	Reactor R-101	43
4.5.4.	Bescanviador E-101 i E-201	46
4.5.5.	Bescanviador E-301	51
4.5.6.	Separadors S-201 i S-301	54
4.5.7.	Vàlvules d'expansió V-201 i V-202	57
4.5.8.	Compresor C-301	58
4.5.9.	Columnes d'adsorció T-401 i T-402	60
4.6.	Llistat de vàlvules	65
4.7.	Llistat d'instrumentació	69
5.	Seguretat	72
5.1.	Identificació de perills	72
5.2.	Anàlisi de risc (HAZOP)	72
6.	Medi ambient	73
6.1.	Residus	73
6.1.1.	Catalitzador	73
6.1.2.	Adsorbent	73
6.2.	H ₂ gris vs. H ₂ blau vs. H ₂ verd	73
7.	Avaluació econòmica	74
7.1.	Estimació de la inversió inicial	74
7.2.	Cas base	75
8.	Bibliografia	76

INDEX ANNEXOS

9.	Bases de disseny	1
9.1.	Càlcul condicions d'entrada	1
10.	Enginyeria bàsica	1
10.1.	R-101	1
10.1.1.	Model cinètic	1
10.1.2.	Paràmetres cinètics per la reacció de desoxidació	3
10.2.	T-401 i T-404	4
10.2.1.	Càlculs Dimensionament	4
10.2.2.	Simulació <i>Aspen Adsorption</i>	6
11.	Seguretat	11
11.1.	HAZOP P&ID 100	11
11.2.	HAZOP P&ID 200	17
11.3.	HAZOP P&ID 300	24
11.4.	HAZOP P&ID 400	29

1. INTRODUCCIÓ

L'hidrogen és l'element químic més petit i abundant del planeta i actualment, exerceix un paper fonamental en el món dels combustibles i fonts d'energia. La seva importància ha augmentat en la fita mundial de la transició energètica i la descarbonització de l'economia. També amb una importància relativa, augmenta la sostenibilitat de processos industrials que fan servir l'hidrogen com a matèria prima.

A més, més de 30 països, incloent-hi tots els estats membres de la Unió Europea, ja han fet pública una estratègia conjunta per a la incorporació de l'hidrogen com a font energètica. Les inversions en aquest àmbit ascendeixen a milers de milions de dòlars, tant de fons públics (70,000) com privats (fins a 300,000)[1].

En el territori, ja s'han realitzat grans apostes econòmiques per a fomentar l'ús de l'hidrogen. Alguns projectes notables inclouen la Vall d'Hidrogen de Catalunya a la zona de Tarragona, el Corredor Basc de l'Hidrogen, el clúster de l'Hidrogen a Castella – La Manxa i el Pol de l'Hidrogen Renovable al voltant del Vall d'Escombreras, a Cartagena [2].

Aquest projecte té com a fita aprofundir més sobre aquestes noves tecnologies de purificació d'hidrogen ja que, si veiem com evoluciona el món al nostre voltant, es qüestió de temps que tots en depenguem una mica més.

2. ETAPA PRELIMINAR

2.1. Definició i descripció del projecte

El present projecte té com a objectiu la conceptualització, disseny i implementació d'una planta de purificació d'hidrogen verd. Aquesta planta rebrà l'hidrogen produït per un electrolitzador alimentat amb energia renovable, com ara solar o eòlica, i el purificarà fins a obtenir una puresa superior al 99.999%, adequada per a aplicacions industrials i energètiques com la indústria química i les piles de combustible. El procés de purificació inclourà l'eliminació d'O₂ present en la corrent d'entrada i la posterior separació de gasos mitjançant tecnologies avançades com l'adsorció per oscil·lació de temperatura (TSA) i sistemes de dessecació per eliminar qualsevol traça d'humitat restant.

L'objectiu principal és garantir una producció d'hidrogen sostenible i d'alta qualitat, tot optimitzant l'ús d'energia per minimitzar les pèrdues i augmentar l'eficiència global del sistema. La planta serà dissenyada amb capacitat d'escalabilitat per a futures ampliacions i assegurarà el compliment de totes les regulacions mediambientals i de seguretat vigents. Així, es pretén contribuir al desenvolupament de tecnologies d'energia neta i sostenibilitat, proporcionant una solució viable i eficient per a la producció d'hidrogen verd.

2.2. Abast del projecte

Es realitzarà un estudi detallat de les cinètiques i els catalitzadors implicats en els processos de separació de gasos i dessecació. S'analitzaran diverses tecnologies de purificació d'hidrogen, com membranes de separació, adsorció per oscil·lació de temperatura (TSA) i processos criogènics, per seleccionar la més eficient i adequada. A més, es durà a terme una anàlisi de risc operacional (HAZOP) per identificar i mitigar els possibles riscos associats a la planta, garantint així la seguretat operativa i el compliment de les regulacions mediambientals.

El projecte inclourà un disseny dels equips i de tota la instal·lació, optimitzant l'ús d'energia per minimitzar les pèrdues i augmentar l'eficiència global del sistema. L'estudi d'alternatives tecnològiques de purificació permetrà identificar les solucions més innovadores i eficients disponibles al mercat. Amb aquests elements, es pretén contribuir al desenvolupament de tecnologies d'energia neta i sostenibilitat, proporcionant una solució viable i eficient per a la producció d'hidrogen verd, que pugui ser escalada per a futures ampliacions de producció. També es durà a terme un anàlisi econòmic per avaluar la viabilitat financera del projecte, considerant els costos d'inversió, operació i manteniment.

2.3. Classificació d'H₂

Amb el creixent interès de la indústria en l'hidrogen[3], han sorgit diversos tipus de producció (alguns de més coneguts i convencionals que d'altres). La producció d'hidrogen es pot classificar segons el mètode i la font d'energia utilitzada en el procés.

A dia d'avui, podem trobar fins a 6 tipus d'hidrògens diferents anomenats per colors[4].

Taula 2.1. Classificació d'hidrogen segons la seva producció.

Tipus de H ₂	Producció
Gris	A partir de gas natural o altres hidrocarburs lleugers mitjançant processos de reformació amb vapor
Verd	A partir d'electricitat renovable mitjançant electròlisi
Groc	Similar al verd, però l'energia només prové d'instal·lacions fotovoltaïques
Blau	Similar al gris, però amb tècniques que capturen el carboni emès
Rosa	Similar al verd, però l'electricitat prové de l'energia nuclear
Turquesa	A partir de piròlisi de metà. No es necessària la captura de carboni.

Els tipus més comuns són l'hidrogen gris, blau i verd, cadascun amb característiques diferents pel que fa al seu procés de producció i el seu impacte ambiental.

Mentre que l'hidrogen gris és l'opció més econòmica, el seu impacte ambiental és significatiu. L'hidrogen blau ofereix un equilibri entre reducció d'emissions i costos, però encara depèn dels combustibles fòssils. L'hidrogen verd, encara que actualment és el més costós, representa la ruta més sostenible per a la producció d'hidrogen degut al seu mínim impacte ambiental i el seu potencial per aprofitar les energies renovables. La tria entre aquests mètodes dependrà de factors com la disponibilitat de recursos, la infraestructura existent, els objectius de sostenibilitat i els costos.

2.4. Estudi d'alternatives de producció d'H₂

2.4.1. *Steam reforming* (H₂ gris)

El *steam reforming*, també conegut com a reformació amb vapor d'aigua, és el mètode més comú per a la producció d'hidrogen a gran escala (**hidrogen gris**). És àmpliament utilitzat degut a la seva eficiència (70-80%)[5] i el seus baixos costos de consum energètic (1 kWh/mol H₂ aproximadament).

No obstant això, l'emissió de CO₂ com a subproducte és una desavantatge significativa en termes d'impacte ambiental, motiu pel qual es busquen alternatives més sostenibles, com la producció d'**hidrogen verd** mitjançant electròlisi de l'aigua amb energia renovable.

La producció via *steam reforming* implica diverses etapes i es basa en la reacció de hidrocarburs, com el gas natural (principalment metà), amb vapor d'aigua per produir hidrogen i diòxid de carboni (CO₂) com a subproductes principals (Equació E.4.1.).



Desulfuració

Abans que el gas natural pugui ser utilitzat en el procés de *steam reforming*, cal eliminar els compostos de sofre que conté, ja que podrien enverinar els catalitzadors utilitzats en les etapes posteriors. Aquesta eliminació es realitza mitjançant diversos processos de desulfuració.[6]

La selecció del mètode de desulfuració adequat depèn de diversos factors, incloent la composició del corrent a tractar, la concentració de sofre, els requisits de puresa del producte final, i també consideracions econòmiques.

En general, l'HDS acostuma a ser el preferit per a aplicacions a gran escala amb altes concentracions de sofre, mentre que la adsorció i la dessulfuració oxidativa poden ser més adequades per a corrents amb baixes concentracions de sofre o quan les condicions

d'operació suaus són una prioritat. Les tecnologies basades en sorbents són útils per a aplicacions específiques on la captura d'H₂S és el focus principal.

Reforma Primària

El gas natural desulfuritzat es mescla amb vapor d'aigua i s'introdueix en un reformador primari, on la mescla es calenta a temperatures elevades (generalment entre 700 °C i 1.000 °C) en presència d'un catalitzador a base de níquel. La reacció principal que ocorre en aquesta etapa és la reforma amb vapor de metà, que es pot expressar com segueix:



Aquesta reacció és endotèrmica, la qual cosa significa que consumeix calor.

Conversió de Gas d'Aigua (Water-Gas Shift Reaction)

El monòxid de carboni (CO) produït en l'etapa anterior pot reaccionar encara més amb l'aigua per produir més hidrogen i diòxid de carboni a través de la reacció de conversió de gas d'aigua:



Aquesta etapa pot incloure una conversió d'alta temperatura seguida d'una de baixa temperatura per maximitzar la producció d'hidrogen.

Purificació de l'Hidrogen

El corrent de gas que surt de la reacció de conversió de gas d'aigua conté hidrogen, diòxid de carboni, un poc de monòxid de carboni, i possiblement traces d'altres gasos. L'hidrogen es separa d'aquests gasos a través de mètodes com l'adsorció per swing de pressió (PSA), membranes de separació, o tecnologies de criogènia per obtenir hidrogen d'alta puresa.

El tipus de separació escollida dependrà de les condicions tant d'entrada com de sortida de la unitat de separació i de la puresa que es vulgui obtenir.

Tractament de Subproductes

El CO₂ i altres subproductes generats durant el procés poden ser tractats o eliminats segons les normatives ambientals i l'eficiència desitjada del procés.

2.4.2. Captura i emmagatzematge de CO₂ (H₂ blau)

La captura i emmagatzematge de diòxid de carboni (CAC o CCS, per les seves sigles en anglès de *Carbon Capture and Storage*) és un component clau en la producció d'hidrogen blau, permetent reduir significativament les emissions de CO₂ associades a la producció d'hidrogen a partir de combustibles fòssils. El procés d'hidrogen blau implica la producció d'hidrogen mitjançant mètodes com el *steam reforming* de gas natural o la gasificació de carbó, amb la captura i emmagatzematge subsequents del CO₂ produït durant aquest procés.

L'eficàcia de la captura i emmagatzematge de CO₂ depèn de diversos factors, incloent la tecnologia utilitzada, la localització de la instal·lació, les formacions geològiques disponibles per a l'emmagatzematge, i els costos associats. El consum energètic d'aquests processos acostuma a representar entre un 15-25% més que el procés productiu de l'hidrogen per *steam reforming*.

Malgrat els desafiaments, el desenvolupament i la implementació d'aquestes tecnologies són crucials per reduir l'impacte ambiental de la producció d'hidrogen blau i altres processos industrials intensius en emissions de CO₂.

A continuació, es descriuen els mètodes principals de captura i emmagatzematge de CO₂:

Captura de CO₂

- **Captura Precombustió:** Aquest mètode es realitza abans de la combustió del combustible, típicament durant processos com la gasificació, on els combustibles fòssils es converteixen en un gas sintètic ric en monòxid de carboni (CO). El CO es transforma posteriorment en CO₂, que es pot capturar més fàcilment, mentre que l'hidrogen es separa i s'utilitza.
- **Captura Postcombustió:** Es refereix a la captura de CO₂ dels gasos d'escapament generats després de la combustió del combustible. Aquest mètode es pot aplicar a plantes de generació d'energia i altres instal·lacions industrials. Utilitza absorbents, com amines o carbonats, per separar el CO₂ dels gasos d'escapament.
- **Captura d'Oxigen (*Oxy-fuel combustion*):** Aquest procés implica la combustió del combustible en un ambient ric en oxigen, en lloc d'aire, produint un corrent de gasos d'escapament que consisteix principalment en vapor d'aigua i CO₂. El vapor d'aigua es condensa, deixant darrere un corrent de gas ric en CO₂ que pot ser més fàcilment capturat.

Emmagatzematge de CO₂

- **Emmagatzematge Geològic:** Inclou la injecció de CO₂ en formacions geològiques profundes, com camps de petroli i gas exhaurits, jaciments salins profunds o formacions de carbó no minables, on el CO₂ es pot emmagatzemar de manera segura durant milers d'anys.
- **Utilització de CO₂:** Abans o en lloc de l'emmagatzematge, el CO₂ capturat pot ser utilitzat en diversos processos industrials, com la producció de materials de construcció, com ciment, la fabricació de plàstics, o com a matèria prima en mètodes de producció química, incloent la síntesi de combustibles renovables o altres productes químics.

Transport de CO₂

Abans de l'emmagatzematge, el CO₂ capturat ha de ser transportat des del punt de captura fins al lloc d'emmagatzematge o utilització. Això es realitza generalment a través de *pipelines* o, en alguns casos, mitjançant vaixells, especialment quan les distàncies són grans o no hi ha infraestructura de *pipeline* disponible.

2.4.3. Electròlisi (H₂ verd)

L'electròlisi del aigua és un procés mitjançant el qual aquesta es divideix en oxigen i hidrogen utilitzant electricitat. Per a que l'hidrogen produït pugui ser considerat verd, l'electricitat utilitzada ha de provenir de fonts renovables com l'energia solar, eòlica, hidràulica o geotèrmica.

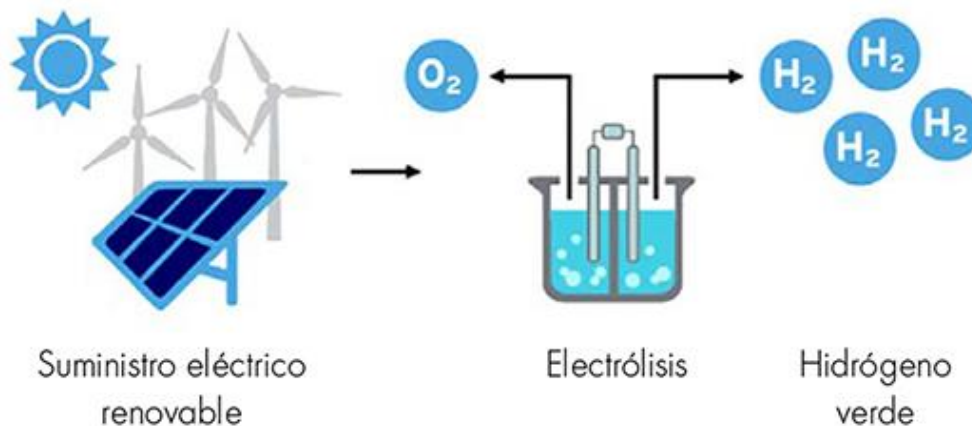


Figura 2.1. Esquema de la producció d'hidrogen mitjançant l'electròlisi.

L'equip utilitzat s'anomena electrolitzador i conté dos elèctrodes (ànode i càtode) submergits a la solució electrolítica (H_2O). L'aigua utilitzada normalment s'acostuma a purificar per eliminar impureses que podrien afectar a l'eficiència del procés. Al aplicar el corrent elèctric a la solució, l'aigua es descompon en els seus components bàsics; el oxigen es forma al ànode i el hidrogen al càtode. L'hidrogen produït es comprimeix o liqua pel seu emmagatzematge i transport.

El procés d'electròlisi requereix alts consums d'energia elèctrica (4.5 a 6 kWh/mol H_2), per això, els avanços tecnològics en aquest procés estan centrats en la millorar l'eficiència dels electrolitzadors, intentant reduir el seu consum.

2.5. Estudi d'alternatives dels processos del purificació

2.5.1. Adsorció

El procés d'adsorció en totes les seves opcions és una tècnica fonamental en la separació i purificació de gasos, especialment en la purificació d'hidrogen [7].

Al llarg d'aquest procés, les molècules d'un gas o líquid (en aquest cas gas) s'adhereixen a la superfície d'un sòlid anomenat adsorbent. La selecció d'aquest és clau ja que són necessaris materials amb una superfície específica alta capaç d'adherir de forma selectiva les impureses presents en el gas. Aquest procés, és impulsat per forces de *Van der Waals* o per interaccions químiques entre les impureses i l'adsorbent.

En el cas concret del H_2 , compta amb una menor afinitat per l'adsorbent, pel que resulta passant sense interaccions a través de la columna i es recull com a gas purificat. En el cas de les impureses, que si compten amb interaccions, es queden adherides al adsorbent de la columna. Quan aquest material arriba a la seva capacitat màxima d'adsorció, es procedeix a la desorció de les impureses mitjançant canvis o bé de temperatura o bé de pressió. Això permet la seva regeneració i s'allarga la vida útil per ser reutilitzat en els futurs cicles.

El procés d'adsorció, és especialment avantatjós per a la purificació d'hidrogen per diverses raons. En primer lloc, permet una separació molt eficient, ja que els materials adsorbents es poden dissenyar per tenir una alta selectivitat per a determinades impureses. Aquesta flexibilitat permet utilitzar aquesta tècnica a diferents escales, des de petites aplicacions de laboratoris fins a grans instal·lacions industrials (escalabilitat). A més, és compatible amb el procés de producció d'hidrogen verd, que pot contenir impureses complicades que necessiten ser eliminades per a aplicacions sensibles, com en les piles de combustible. L'adsorció és capaç de tractar aquestes impureses de manera efectiva.

2.5.2. Absorció per amines

La purificació d'hidrogen mitjançant el mètode d'absorció per amines és una tecnologia clau en processos industrials, especialment en aquells relacionats amb la producció de gasos purs i la captura de CO₂.

Aquest mètode es basa en l'ús de solucions d'amines per a absorbir selectivament compostos no desitjats, com serien el diòxid de carboni (CO₂), del corrent de gas que conté hidrogen. Definim com a solució d'amines una mescla líquida que conté compostos orgànics derivats de l'amoni (NH₃) on un o mes hidrògens de l'amoni són substituïts per grups aquil o aril, formant així les amines que li donen nom.

Així doncs, el funcionament d'aquest tipus de purificació es basa en aprofitar la capacitat de certes amines líquides per a capturar selectivament molècules de CO₂ i altres contaminants que pugui haver en el gas. El gas impur es fa passar a través d'un absorbent líquid que conté amines, on els contaminants són absorbits, deixant passar un corrent de gas més pur, principalment i complint amb l'objectiu, hidrogen. Després, l'absorbent saturat és regenerat (normalment mitjançant escalfament) per alliberar el CO₂ capturat i reutilitzar l'amina.

Es tracta d'un mètode que, a banda assolir la fita de purificar l'hidrogen d'una corrent de gas amb impureses, permet captar CO₂, contribuint així a la reducció d'emissions de gasos d'efecte hivernacle. S'obté un hidrogen amb una alta puresa que es pot centrar en usos més exigents (afegint això un valor afegit per trobar-se en un sector més específic), com podrien ser els sectors de l'energia, de la química fina o la electrònica.

2.5.3. Membranes de separació

La purificació d'hidrogen mitjançant membranes de separació és un procés utilitzat en la indústria per obtenir hidrogen d'alta puresa a partir de mescles gasoses que contenen hidrogen. Aquest procés es basa en la capacitat selectiva de certes membranes per permetre el pas de certs gasos, com l'hidrogen, mentre que bloquegen altres components presents en la mescla.

La membrana més comunament utilitzada per la purificació d'hidrogen es la membrana de polímer d'intercanvi de protons (PEM). Aquestes membranes són altament selectives per al hidrogen i poden separar-lo eficaçment de mescles gasoses que contenen hidrogen, com els gasos de síntesis obtinguts a partir de processos de reformat de gas natural, gasificació de carbó, entre altres. A més de les membranes de PEM, també s'utilitzen membranes ceràmiques i de metall suportades per zeolites per a la purificació d'hidrogen en aplicacions específiques, com els difusors de pal·ladi o els sistemes dessecants de sílice.

El procés generalment implica 4 fases. Un pretractament del gas d'alimentació, on abans de que entri en contacte amb la membrana selectiva, s'elimina les impureses com el diòxid de carboni, aigua i altres contaminants que podrien afectar a la eficiència de separació de la membrana. Un cop realitzat el pretractament, el gas d'alimentació, que conté hidrogen i altres gasos, es fa passar a través de la membrana. Aquesta membrana està dissenyada per permetre que l'hidrogen passi a través d'ella degut a la seva mida i característiques moleculars, mentre que els altres gasos els retenen. A mesura que l'hidrogen va passant per la membrana, es va separant de la resta de gasos del gas d'alimentació. Finalment, l'hidrogen purificat es recull en el costat permeat de la membrana, mentre que la resta de gasos es recullen al costat de la alimentació.

Es important tenir en compte que la eficiència i la selectivitat de la membrana poden variar segons el disseny específic de la membrana i les condicions d'operació.

2.5.4. Destil·lació criogènica

Aquest procés de purificació d'hidrogen comença amb la compressió i refredament de la mescla de gasos. S'aconsegueixen temperatures de fins a -253°C , en aquest punt l'hidrogen es torna líquid. Durant el refredament, la resta d'impureses, com ara el CO_2 , metà o aigua, també es condensen i es separen del hidrogen líquid. Això s'aconsegueix ajustant les condicions de temperatura i pressió perquè les impureses es condensin a diferents temperatures que l'hidrogen.

Una vegada s'ha separat la major part de les impureses, l'hidrogen líquid es passa a un procés de fraccionament, on es separen els compostos més lleugers dels pesats. Donat que l'hidrogen és el gas més lleuger, es vaporitza i es recull en la part superior del equip de fraccionament, mentre que les impureses més pesades s'acumulen a la part inferior.

Aquest procés resulta efectiu per produir hidrogen d'alta puresa i es àmpliament utilitzat en la indústria. Tot i així, és un mètode que pot resultar bastant costós i requereix d'infraestructures especialitzades per controlar les temperatures extremadament baixes que es donen.

2.5.5. Rentat amb aigua

El rentat d'aigua, conegut també com a *scrubbing* amb aigua, és un mètode utilitzat per eliminar impureses com el CO_2 , el CO i en alguns casos el sulfur d'hidrogen del hidrogen i altres gasos. Es basa en la solubilitat d'aquests compostos en aigua sota condicions específiques de temperatura i pressió.

El gas impur amb hidrogen es bombolleja a través d'un recipient o torre de rentat ple d'aigua. Alternativament, l'aigua pot ser polvoritzada en contra flux amb el gas ascendent dins de la torre. Les impureses com el CO_2 són molt més solubles en aigua que l'hidrogen. Al passar el gas a través de l'aigua, les impureses es dissolen, mentre que l'hidrogen, que és pràcticament insoluble, passa a través del sistema amb una concentració d'impureses significativament reduïda. Les condicions de pressió i temperatura es poden ajustar per millorar l'absorció de les impureses. Per exemple, augmentant la pressió de la torre d'absorció, s'augmenta la solubilitat del CO_2 en l'aigua.

L'aigua que ha absorbit les impureses pot requerir tractament abans de ser reutilitzada. Això pot influir mètodes de desgasificació, neutralització o sistemes de tractaments d'aigües residuals.

És un mètode relativament simple i econòmic per certes aplicacions, especialment quan les impureses solubles en aigua són el principal objectiu de la purificació. Per altra banda, l'eficiència del rentat amb aigua està limitada per la solubilitat de les impureses, el que pot ser insuficient per arribar als nivells de puresa requerits per algunes aplicacions d'hidrogen. A més, no resulta efectiu per eliminar impureses com el nitrogen o el metà, que tenen una solubilitat molt baixa. L'alt consum d'aigua i les necessitats del seu tractament poden ser també un dels factors limitant.

2.6. Estudi d'alternatives

2.6.1. Procés escollit

Una vegada coneguts els sistemes de purificació d'hidrogen comentats en apartats anteriors, s'ha escollit la tecnologia que s'utilitzarà pel procés de purificació en aquest projecte en concret [7].

Condicionats per la corrent d'entrada del procés, es essencial comptar amb un grup d'equips que permetin la desoxidació d'aquesta. Aquesta etapa serà molt important a l'hora de la facilitar la posterior separació del H_2 amb H_2O .

A causa de la seva competitivitat econòmica i la seva selectivitat per a materials específics, aquest projecte desenvoluparà el disseny d'una unitat de purificació utilitzant les tecnologies d'adsorció. D'aquesta manera, ja sigui mitjançant la tecnologia del TSA o el PSA, es podrà treballar per purificar al màxim la corrent d' H_2 sent el més eficient possible. A banda, la viabilitat de la regeneració dels adsorbents en aquestes tecnologies permet un avantatge clar respecte la regeneració de les solucions d'amines utilitzades en l'absorció, les quals requereixen de temps d'operació més prolongats.

A més, l'adsorció és un procés ben establert i àmpliament utilitzat en la indústria, amb una gran varietat de materials adsorbents disponibles com zeolites, carbó actiu i alúmines, que permeten adaptar el procés a diferents necessitats i condicions operatives.

Finalment, les tecnologies d'adsorció proposades presenten avantatges en els costos d'inversió i d'operació en comparació amb altres tecnologies de purificació, com la destil·lació criogènica o l'absorció per amines. L'eficiència energètica que presenten, combinada amb la capacitat d'aconseguir altes pureses d'hidrogen i la flexibilitat operativa, fan l'adsorció la millor opció per al projecte de purificació d'hidrogen verd.

2.6.2. Catalitzador del reactor

Per a poder separar l' H_2 de l'aigua en etapes posteriors, facilita eliminar les traces d' O_2 just en l'entrada del procés. Aquesta operació es durà a terme amb una reacció de desoxidació. Per a determinar quin serà el millor catalitzador capaç d'eliminar totes les traces de l'oxigen, s'ha seguit l'estudi [8] on s'avalua l'activitat catalítica i la desactivació del Pd, Pt, Cu i Ni sobre un portador de $\gamma-Al_2O_3$.

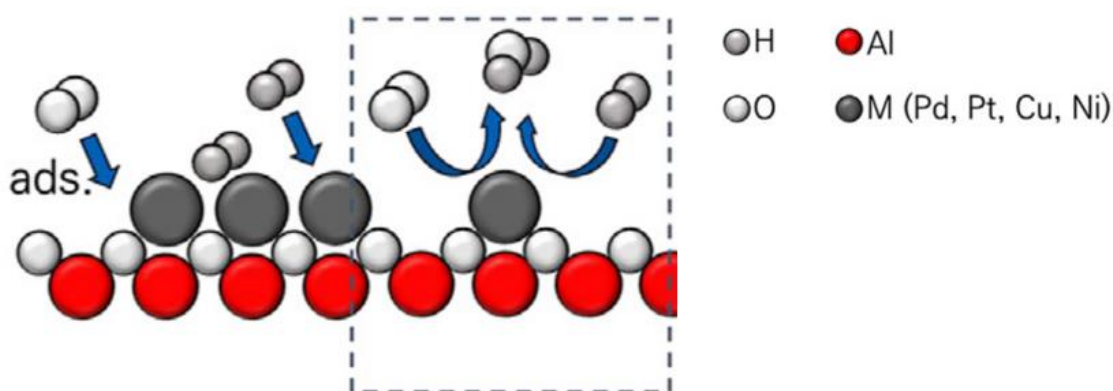


Figura 2.2. Representació gràfica de la recombinació H_2-O_2 per forma H_2O sobre un catalitzador M/Al_2O_3 .

En la Taula 2.2. es mostren les principals propietats dels catalitzadors mencionats.

Taula 2.2. Resultats de quimisorció del catalitzador $M/\text{Al}_2\text{O}_3$ (M :Pd, Pt, Cu, Ni). El número davant del nom del catalitzador representa el percentatge en pes de càrrega metàl·lica.

Catalitzador	Captació H_2 ($\mu\text{mol/g}$)	Captació O_2 ($\mu\text{mol/g}$)	Superfície metàl·lica (m^2/g mostra)	Mida cristalls (nm)
0.5Pd/ Al_2O_3	2.3	6.6	0.644	3.77
0.5Pt/ Al_2O_3	1.2	2.0	0.222	4.84
0.5Cu/ Al_2O_3	-	12.5	0.305	8.52
0.5Ni/ Al_2O_3	3.1	0.1	0.243	12.11

Com es pot observar el catalitzador amb Ni és el que ofereix major capacitat d'adsorció per l'hidrogen. El Ni es presenta en forma de NiO_x a la superfície del catalitzador i mostra una interacció molt forta amb el portador. L'hidrogen s'adsorbeix damunt de les posicions d'oxigen del NiO_x . Tot i així, aquesta forta interacció i presència de posicions d'oxigen impedeix l'adsorció química del oxigen del corrent, fent-lo així el catalitzador amb menys capacitat de captació d'aquest. La seva mida de partícula també serà la més gran amb 12.11nm, indicant que aquest es presentarà com un aglomerat. Es per això, que aquest catalitzador serà el menys actiu de tots els presentats en aquest estudi.

Per altra banda, el 0.5Pd/ Al_2O_3 és el que presenta més capacitat de captació d'oxigen, per darrere del 0.5Cu/ Al_2O_3 , adsorbeix el doble d'hidrogen que el 0.5Pt/ Al_2O_3 i es també el que presenta una mida de partícula més petita. A més és el que mostra major superfície metàl·lica i per tant serà el catalitzador amb més llocs actius.

El catalitzador 0.5Pt/ Al_2O_3 és el que té una superfície metàl·lica més petita, fent-lo el que menys llocs actiu tindrà. Apart és el que té menys capacitat per captar l'hidrogen i el segon amb menys captació per l'oxigen.

Sobre el catalitzador de Cu, no es tenen dades de la seva captació d'hidrogen però es pot observar que és el que major capacitat té per l'oxigen.

Per veure l'activitat catalítica de cadascun d'ells[8], es mostra els resultats (veure Figura 2.3.) a pressió atmosfèrica i temperatura ambient de la reacció entre l'oxigen (2vol%) i l'hidrogen (98vol%). S'utilitzen 0.025g de catalitzador en un reactor de 4mm de diàmetre i un caudal d'entrada de 100mL/min.

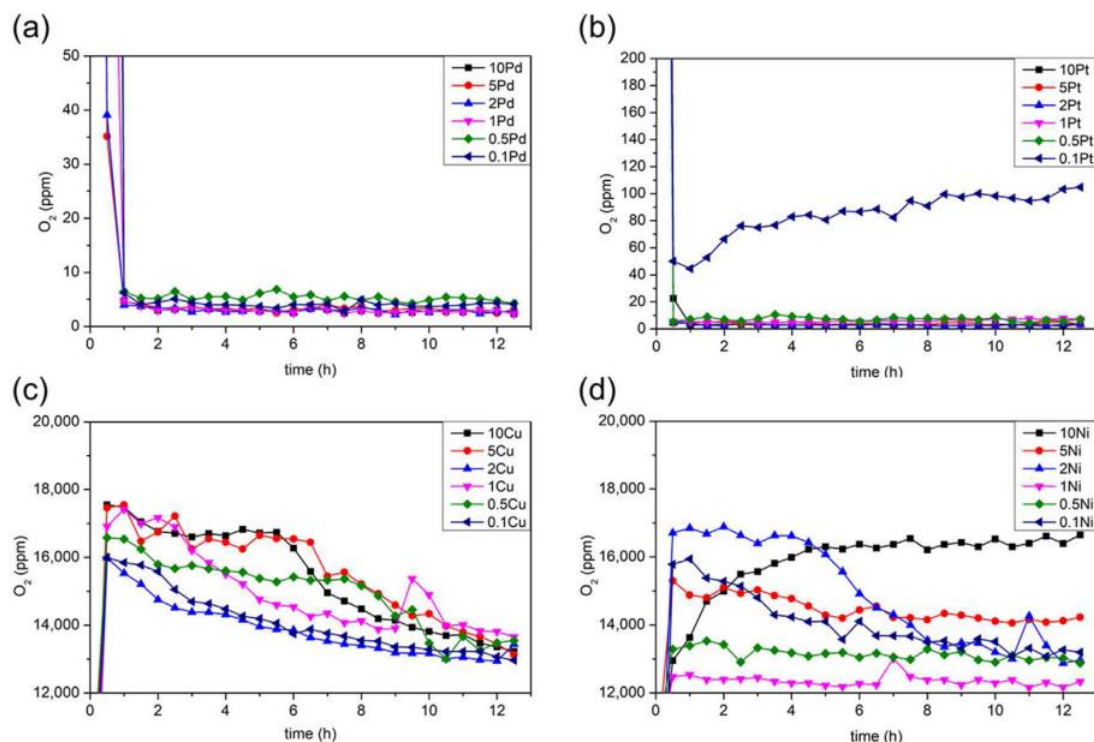


Figura 2.3. Evolució de la concentració d'oxigen en funció del temps (13 hores) per un corrent en excés d'hidrogen (98vol%) en diferents catalitzadors. (a) Pd, (b) Pt, (c) Cu i (d) Ni. En diferents colors representada la mateixa prova per diferents concentracions en pes de càrrega metàl·lica.

Analitzant la Figura 2.3. veiem que el Pd/Al₂O₃ amb càrrega metàl·lica entre 0.1 i 10% en pes, mostra un rendiment de desoxidació excel·lent reduint la concentració d'O₂ de 2% a 3 a 4ppm, eliminant així el 99.98-99.985% de l'oxigen en el corrent.

Per altra banda, el Pt/Al₂O₃ també mostra un rendiment similar al Pd/Al₂O₃, exceptuant per la càrrega metàl·lica del 0.1% en pes, la qual mostra una disminució del rendiment que es pot atribuir al menor número de llocs actius que es pot veure afectat per la formació de PtO_x (igual que passava amb el Ni). Tot i així, el Pt/Al₂O₃ sembla eliminar l'oxigen més ràpid que el Pd/Al₂O₃, assolint el rendiment màxima en 30 minuts. Per la càrrega metàl·lica de 10Pt/Al₂O₃ es necessita més temps per arribar al màxim rendiment a causa del menor número de llocs actius per l'excés contingut de metall (increment d'interaccions entre àtoms de Pt i menor interaccions entre el metall i el portador).

En el cas del catalitzador de Cu es presenta un rendiment de desoxidació baix en les primeres hores, però es pot observar com a mesura que passa el temps el rendiment va millorant per totes les diferents càrregues metàl·liques. Tot i així, els valors de concentració d'oxigen es redueixen tan sols fins al 1.3-1.4%, lluny dels resultats del Pt/Al₂O₃ o el Pd/Al₂O₃. Es creu que la millora del rendiment d'aquest catalitzador amb el temps es per la generació de punts catalítics que es generen a mesura que es formen aglomerats de CuO a la superfície del catalitzador.

Pel Ni/Al₂O₃, també presentat com a aglomerat, el seu rendiment millora amb el pas del temps al igual que Cu/Al₂O₃. Pel 10Ni/Al₂O₃, es veu com el rendiment empitjora per l'excés de càrrega metàl·lica que forma enllaços NiO_x.

A continuació, en la Taula 2.3., es mostra el resum dels resultats finals recollits de les representacions gràfiques de cada catalitzador de la Figura 2.3.

Taula 2.3. Quantitat d'oxigen mesurada després de 13 hores de reacció per diferents càrregues metàl·liques.

Càrrega metàl·lica (wt %)	O ₂ (ppm)			
	Pd	Pt	Cu	Ni
10	3	3	13.227	16.648
5	3	4	13.125	14.227
2	3	3	13.125	12.963
1	3	4	13.654	12.327
0.5	4	7	13.547	12.875
0.1	4	104	12.968	13.194

Finalment, l'estudi analitza la freqüència de recanvi (TOF) per veure quins son els metalls que presenten millor rendiment de desoxidació. Es mostra la Figura 2.4.

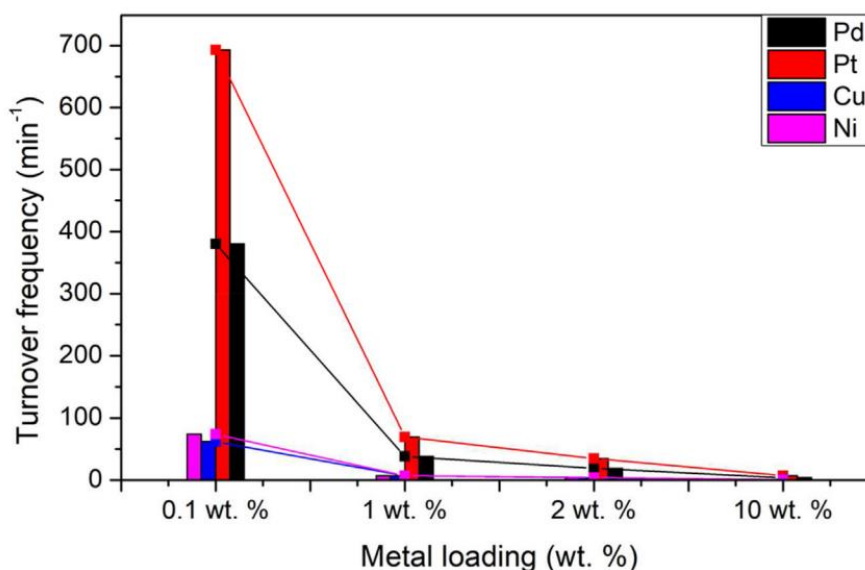


Figura 2.4. Freqüència de rotació per cada metall i per diferents càrregues metàl·liques (wt %).

La freqüència de rotació s'entén com el consum de d'oxigen (mol/min) partit pels mols de metall disponibles en cada mostra de catalitzador. Es pot observar veient la Figura 2.4., que el Pt/Al₂O₃ és el que presenta els valors de TOF més alts per totes les càrregues metàl·liques. Veiem també com el 0.1Pt/Al₂O₃ té un valor de TOF 1.8 vegades més gran que el 0.1Pd/Al₂O₃. Tot i així, per 0.1wt%, el Pt/Al₂O₃ mostra una baixada del rendiment de desoxidació, com es pot veure en la Figura 2.4.. L'article argumenta que catalitzadors incapaços de controlar la concentració O₂ en corrents amb excés d'hidrogen no son adequats per la reacció de formació de l'aigua. En canvi, el Pd/Al₂O₃ tot i no tenir els valors més alts de TOF mostra estabilitat en el rendiment de desoxidació inclús per càrregues metàl·liques baixes, sent així la millor opció per catalitzar la reacció estudiada en aquest projecte.

2.6.3. Tipus d'adsorbent

En la operació unitària de l'adsorció, la propietat que fonamenta la separació és la diferència en el grau d'interacció entre els components de la mescla i el adsorbent. Aquesta interacció que resulta entre el adsorbent i el adsorbat depèn de les propietats de cada un. Respecte al adsorbat, influeix sobretot la mida de la molècula i la seva configuració espacial, i respecte al adsorbent, influeix la quantitat i la distribució de la porositat i la heterogeneïtat dels centres d'adsorció. [7]

La elecció del adsorbent és un dels factors essencials que determinen l'èxit d'una operació d'adsorció, ja que definirà la viabilitat i el grau de separació de la mescla que es

vol tractar. Alguns dels materials més utilitzats inclouen el carbó actiu, les zeolites, els gels de sílice i les estructures metall-orgàniques (MOFs).

Els processos d'adsorció poden ser classificats segons el tipus d'interaccions que es produeixen entre l'adsorbent i l'adsorbat.

L'**adsorció física** implica interaccions febles, com les forces de *Van der Waals*, que inclouen forces de dispersió, d'inducció i de dipol-dipol. Aquest tipus d'adsorció és reversible i depèn fortament de la temperatura i la pressió.

L'**adsorció química**, en canvi, implica la formació de llaços químics entre l'adsorbent i l'adsorbat. Aquestes interaccions són més fortes que les físiques i sovint resulten en la modificació de les propietats químiques de l'adsorbat o l'adsorbent. Per exemple, els llaços covalents impliquen la compartició d'electrons entre l'adsorbent i l'adsorbat, formant llaços químics forts. També es poden formar interaccions àcid-base de Lewis, on un àcid de Lewis (acceptor d'electrons) interacciona amb una base de Lewis (donador d'electrons). Aquesta interacció més forta, sovint implica regeneracions més lentes o en condicions de pressió molt més baixes o de temperatura molt més altes, respecte les condicions necessàries per regenerar els casos d'interacció físiques.

En punts següents, es mostren i comenten les característiques dels adsorbents principals dins del món industrial.

2.6.3.1 Zeolites

Les zeolites són materials cristal·lins amb estructures poroses tridimensionals compostes de sílice (SiO₄) i alumina. La seva estructura porosa proporciona una elevada superfície específica i una alta capacitat d'adsorció selectiva.

Aquest material és molt adequat per adsorbir aigua. La seva elevada superfície específica i la presència de cations intercanviables permeten la formació de ponts d'hidrogen amb les molècules d'aigua, així com interaccions electroestàtiques.

Les zeolites poden ser regenerades per desorció tèrmica (calor) o per despressurització. Tanmateix, a causa de la forta interacció química amb les molècules d'aigua, la regeneració pot ser lenta i requerir temperatures elevades, fet que implica un major consum energètic i temps per retornar-les a la seva capacitat inicial d'adsorció.

2.6.3.2 Carbó actiu

El carbó actiu és un material adsorbent amb una estructura porosa que proporciona una superfície específica molt elevada. Està constituït a partir de materials carbonosos actius mitjançant processos físics o químics.

Aquest material és adequat per adsorbir aigua, encara que no és tant efectiu com altres materials com les zeolites o la sílica gel. Les interaccions d'adsorció són principalment físiques, basades en forces de *Van der Waals*. Els grups funcionals oxigenats poden formar ponts d'hidrogen amb l'aigua, millorant la capacitat d'adsorció.

En quant a la seva regeneració, pot realitzar-se mitjançant desorció tèrmica, despressurització o rentat amb vapor. Els processos de regeneració són relativament ràpids comparats amb altres materials i menys exigents en termes energètics.

2.6.3.3 Alúmina activada

L'alúmina activada és un material adsorbent altament porós fet d'òxid d'alumini, especialment efectiu per a la deshidratació de gasos i líquids.

És molt adequada per adsorbir aigua gràcies a la seva elevada superfície específica i les seves propietats acido-bàsiques. Forma ponts d'hidrogen i interaccions electroestàtiques amb les molècules d'aigua.

La seva regeneració és similar a la sílice gel però pot requerir temperatures elevades a causa de la forta interacció química amb l'aigua.

2.6.3.4 Sílice Gel

La sílice gel és un material adsorbent amorf fet de diòxid de silici, conegut per la seva elevada superfície específica.

Aquest material s'utilitza comunament per a l'adsorció de vapors i la deshidratació, i és molt adequat per adsorbir aigua. Les interaccions es basen en la formació de ponts d'hidrogen entre les molècules d'aigua i els grups silanol (Si-OH) presents a la superfície de l'adsorbent.

La regeneració del material es pot dur a terme mitjançant desorció tèrmica o despressurització. És relativament eficient en termes energètics, ja que no fa falta augmentar tant la temperatura com en els altres materials tot i tenir interaccions fortes.

2.6.3.5 Materials metal·lorgànics (MOFs)

Els MOFs són materials formats per ions metàl·lics coordinats a lligands orgànics, creant estructures poroses amb una gran superfície específica i alta capacitat d'adsorció. Són altament personalitzables.

Pel que fa a la adsorció d'aigua, poden ser adequats depenent de la seva composició i estructura. Alguns MOFs són dissenyats específicament per tenir alta afinitat amb l'aigua, mitjançant interaccions de *Van der Waals*, electroestàtiques i ponts d'hidrogen.

De igual manera, la seva regeneració pot variar significativament segons el tipus. Alguns poden ser regenerats fàcilment mitjançant desorció tèrmica o despressurització, mentre que d'altres poden requerir més energia a causa de les interaccions químiques fortes amb l'aigua.

En el procés del projecte present, la principal impuresa a eliminar en la purificació és el vapor d'aigua. Pel que fa al adsorbent, la sílice gel (veure Taula 2.4.) compta amb una elevada afinitat per a aquesta impuresa, permetent una adsorció efectiva fins i tot a baixes concentracions de vapor en la mescla de gasos. Això assegura que l'hidrogen resultant sigui d'alta puresa (99,999 %) i que compleixi amb els requeriments del projecte.

A més, la sílice gel es regenera de manera més eficient mitjançant el procés de TSA. Tot i que l'energia necessària per a la regeneració pot ser significativa, la seva característica de mantenir una alta capacitat d'adsorció després de múltiples cicles de regeneració fa que sigui una opció viable i llarga en el temps. Aquest material és estable a les temperatures utilitzades en un procés de TSA (300 – 500K), evitant la degradació i assegurant la vida útil de l'adsorbent.

Taula 2.4. Resum característiques tipus adsorbents.

Material Adsorbent	Capacitat adsorció H₂O	Regeneració	Velocitat Regeneració	Costos	Manteniment
Zeolites	Alta capacitat	Escalfament o despressurització	Lenta	Inicials elevats. Durabilitat pot compensar cost	Control regular per evitar contaminació
Carbó actiu	Bona capacitat	Tractament tèrmic o desorció química	Ràpida	Relativament econòmic	Periòdic per garantir eficàcia (tractament actiu)
Alúmina activada	Capacitat moderada	Escalfament o tractament químic	Complexa i costosa	Inicials elevats. Durabilitat pot compensar cost	Especialitzat necessari
Sílice Gel	Alta capacitat	Escalfament a temperatures moderades	Senzilla i ràpida	Cost baix a moderat	Mínim
MOFs	Molt alta	Ús solvents o tractaments específics	Diffícil i costosa	Molt alt	Complex

S'ha realitzat una recerca d'adsorbents de tipus sílice gel dins del món industrial i s'ha escollit l'adsorbent de tipus 3A. Aquest adsorbent és capaç de regenerar-se al 100% a una temperatura de 413.15K.

2.6.4. Configuració de les columnes

El procés d'adsorció industrial, especialment en la purificació d'hidrogen verd, és altament dependent de la configuració de les columnes per maximitzar l'eficiència energètica. La seva configuració influeix directament en la quantitat d'energia necessària per operar el sistema, així com la capacitat de purificació i l'eficiència operativa[11].

En sistemes amb una sola unitat, el procés d'adsorció es realitza en una única columna fins que aquesta es satura. Un cop arriba a aquest punt, la columna ha de ser aturada per a la regeneració, on les impureses adsorbides es desorbeixen per retornar l'adsorbent a la seva capacitat inicial. Aquest cicle d'adsorció-regeneració pot causar interrupcions en el procés i augmentar el temps d'inactivitat, fent que el sistema sigui menys eficient energèticament.

En contrast, els sistemes de dues columnes milloren significativament l'eficiència energètica, ja que permeten una operació contínua. En aquest tipus de sistema, mentre una columna està en procés d'adsorció, l'altra es regenera (cada columna es fa de *backup* de l'altra). Això evita interrupcions en el flux del gas purificat i minimitza el temps d'inactivitat. La clau per aconseguir una operativa contínua, és assegurar que el temps de regeneració sigui més baix que el temps d'adsorció.

Per últim els sistemes de múltiples columnes, que utilitzen tres o més unitats, presenten una configuració encara més avançada i eficient a nivell energètic. Aquesta configuració permet suposar els cicles d'adsorció i desorció, assegurant que sempre hi ha columnes disponibles per al procés d'adsorció mentre les altres es regeneren. La part negativa d'aquesta configuració, és que augmenta el cost d'equips i d'instal·lació, i al ser tan avançada pot arribar a ser complicada a la hora de tenir un control de les columnes. A més columnes, s'obté menys *recovery* i per tant, el ritme de producció es més lent.

En aquest procés s'ha optat per treballar amb dues columnes per garantir la continuïtat del procés. Tot i que amb tres columnes pot arribar a ser més eficient, energèticament parlant, incrementa el cost d'inversió inicial i el de manteniment, juntament amb la complexitat del procés.

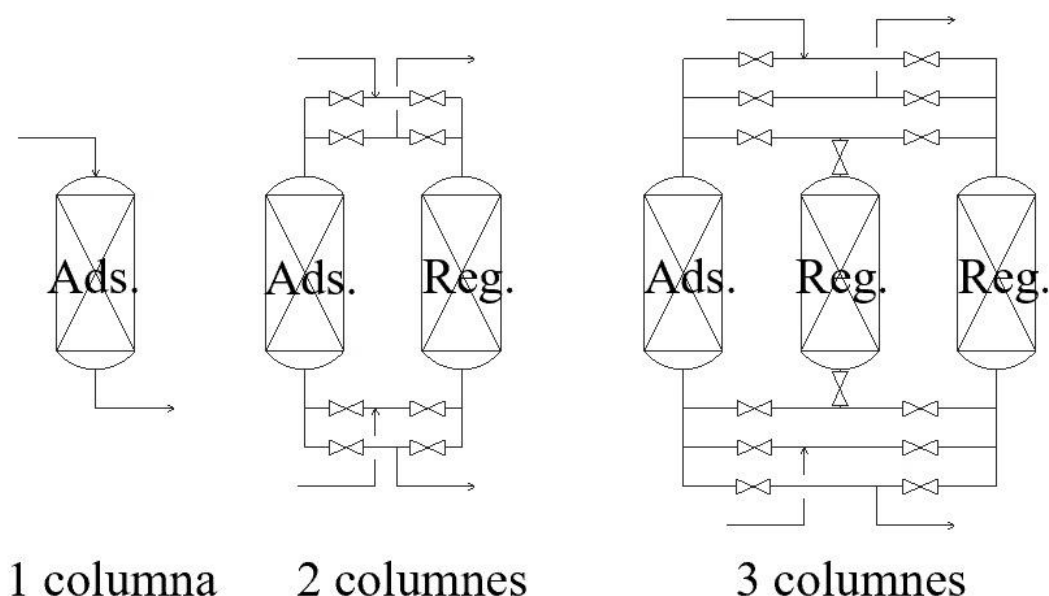


Figura 2.5. Esquema de les possibles configuracions.

2.6.5. Tipus de separació

Dins del propi procés d'adsorció estàndard, hi ha diverses alternatives especialitzades per poder regenerar l'adsorbent. Aquestes alternatives inclouen regeneració per canvi de pressió (PSA, *Pressure Swing Adsorption*), per canvi de temperatura (TSA, *Temperature Swing Adsorption*) o ambdós complementats. Cadascuna d'aquestes tècniques té les seves pròpies característiques i avantatges, així com diferents opcions en termes del nombre de columnes utilitzades [12].

2.6.5.1 PSA (Pressure Swing Adsorption).

El procés d'adsorció per canvi de pressió és una de les tècniques més comuns per a la purificació d'hidrogen. En aquest procés, el gas es fa passar per la columna a alta pressió. Quan l'adsorbent es satura, la pressió es redueix per permetre la desorció de les impureses, regenerant així l'adsorbent per a un altre cicle.

L'avantatge principal del PSA és la seva eficiència energètica, ja que consumeix relativament poca energia perquè els canvis de pressió són més econòmics que els canvis de temperatura. A més, amb múltiples columnes, es pot aconseguir una operació continua i sense interrupcions. També és una tècnica que permet molta flexibilitat a la hora de manejar una àmplia varietat de gasos i impureses.

Tanmateix, aquest procés necessita compressors per mantenir la pressió alta, cosa que pot augmentar els costos operatius i pot resultar menys efectiu per impureses molt adherents, que requereixen més energia per desorbir-se. El desavantatge més notable és el fet de la necessitat de purgar la columna per despressuritzar, que es pot traduir en pèrdua de producte.

Generalment el procés per oscil·lació de pressió es basa en 4 etapes i un mínim de 2 columnes. Entre les dos columnes es van alternant els cicles de manera que es garanteix un procés continu. El canvi entre etapes es degut a unes vàlvules automàtiques programades per obrir-se o tancar-se en funció de la etapa corresponent. Les 4 etapes del procés són les que es presenten en la següent taula.

Taula 2.5. Etapes de l'adsorció mitjançant les tecnologies PSA.

Etapa	Descripció
Adsorció	La columna es troba adsorbint les impureses del gas a alta pressió i obtenint com a resultat el producte purificat.
Despressurització	Es tracta de purgar la columna per poder baixar la alta pressió amb la que ha estat adsorbint, i regenerar a baixa pressió.
Regeneració	Es recircula una part del corrent d'entrada o de la de producte. La recirculació a baixa pressió ajuda a la desorció del adsorbat i d'aquesta manera es regenera el adsorbent. *El mètode més efectiu es recircular una part del producte i a contra-corrent.
Pressurització	En aquesta etapa s'intenta recircular el caudal mínim necessari de manera que el <i>recovery</i> del producte sigui el més alt possible.
	Un cop la columna ja es regenerada, es torna a pressuritzar a alta pressió per poder tornar a adsorbir.

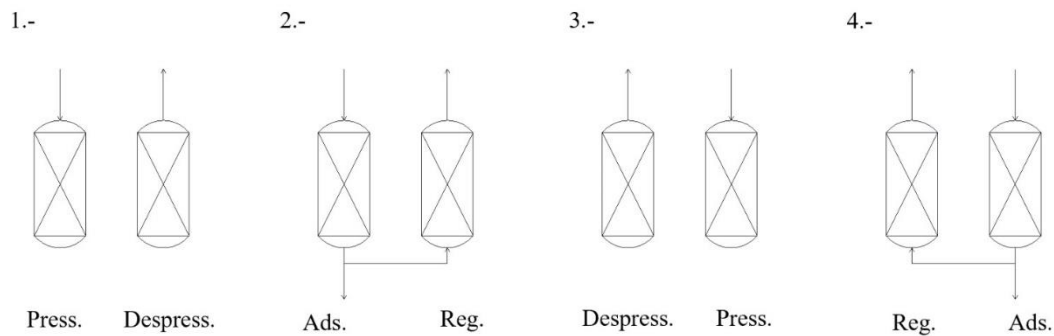


Figura 2.6. Esquema etapes PSA.

2.6.5.2 VPSA (Vacuum Swing Adsorption)

Sovint si l'adsorbent presenta una interacció química amb l'adsorbat, el canvi de pressió del PSA no és suficient. La alternativa es basa en desorbir al buit, que combina els beneficis del PSA amb l'ús d'aquest per facilitar la regeneració. Aquest procés és conegut com VPSA, *Vacuum Pressure Swing Adsorption*, i es necessita d'equips específics per arribar al buit [13].

En aquest cas, també presenta una millora energètica en comparació al TSA, ja que no fa falta canvis de temperatura. Amb l'ús del buit es millora la desorció d'impureses resistents, incrementant així l'eficàcia de regeneració de l'adsorbent.

L'ús del buit, també implica el requeriment d'equips per generar i mantenir aquest, fet que pot augmentar els costos d'instal·lació i manteniment. A més, aquest procés pot arribar a ser més complex de controlar i operar que els sistemes PSA o TSA estàndard.

Les etapes del VPSA són les mateixes que les del PSA, ja que la única diferència del procés és la pressió de regeneració.

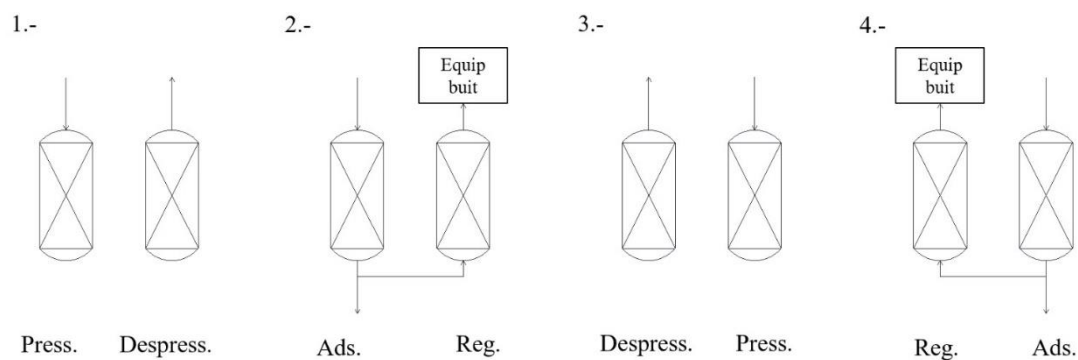


Figura 2.7. Esquema etapes VPSA.

2.6.5.3 TSA (Temperature Swing Adsorption)

El procés d'adsorció per canvi de temperatura és similar al PSA, però en aquest cas s'adsorbeix a baixa temperatura i la desorció es duu a terme en temperatures més altes. A diferència del procés per canvi de pressió, el TSA és més favorable en situacions en que el adsorbat té una interacció química forta amb l'adsorbent. Augmentat la temperatura s'aconsegueix una millor eficàcia i millors resultats en la desorció.

Tot i presentar notable avantatges en la eficàcia del adsorbent respecte el PSA, també presenta algunes desavantatges. Aquest procés implica un consum energètic més alt ja que s'ha d'augmentar la temperatura per fer la regeneració, i el cicle de regeneració sol ser més llarg i més lent. En aquest aspecte s'ha de tenir cura, ja que les etapes que engloben la regeneració han de ser més curtes que la etapa d'adsorció per poder garantir un procés continu. En aquest cas el nombre d'etapes del procés són 3, que es presenten en la següent taula.

Taula 2.6. Etapes d'adsorció mitjançant les tecnologies TSA.

Etapa	Descripció
Adsorció	Aquesta etapa és igual que la del procés de PSA, amb la única diferència de que es treballa a baixa temperatura.
Escalfament	En aquesta etapa és recircula una part del producte o de la alimentació i s'escalfa abans d'entrar a la columna. Igual que quan es baixa la pressió al PSA, l'augment de la temperatura afavoreix la regeneració del adsorbent.
Regeneració	En aquesta última etapa es busca refredar la columna, que ha augmentat la seva temperatura en la etapa de regeneració per escalfament. Per refredar la temperatura es recircula la mateixa corrent però sense augmentar-li la temperatura. D'aquesta manera es redueix la temperatura fins a la temperatura d'operació de la etapa d'adsorció

De la mateixa manera que en el PSA, és sol treballar amb 2 columnes, tot i que també s'opera amb 3 columnes, per poder tornar a aprofitar la calor de les corrents de sortida de la etapa de regeneració per escalfament.

Si les impureses es troben molt adherides al adsorbent (interacció química molt forta), sovint el canvi de temperatura no és suficient o pot arribar a ser molt lenta. Per poder solucionar aquesta situació, la alternativa és la de combinar el efecte del canvi de temperatura i pressió alhora (PTSA).

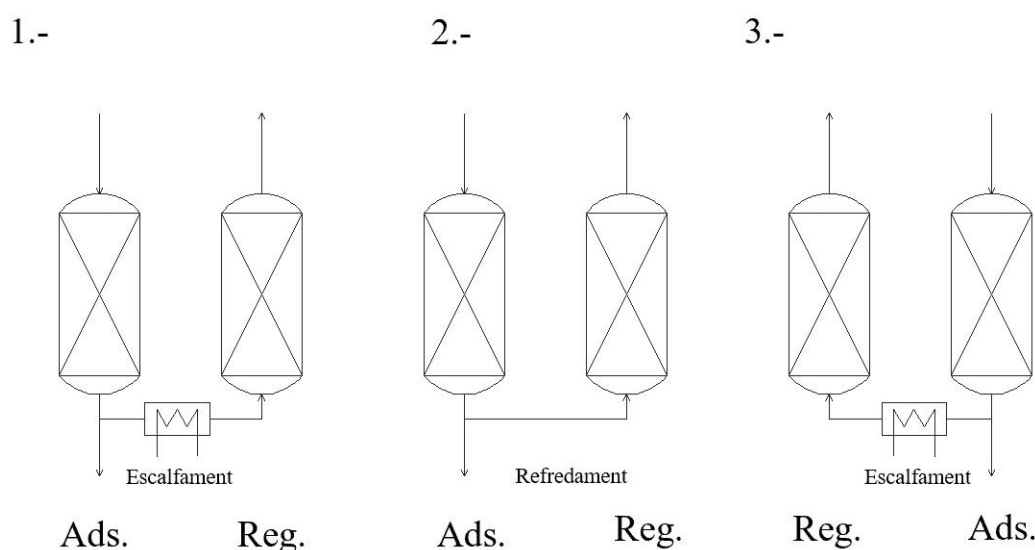


Figura 2.8. Essquema etapes TSA.

2.6.5.4 PTSA (Pressure Temperature Swing Adsorption)

Aquesta alternativa combina els beneficis de la oscil·lació de la pressió i la temperatura en la adsorció. Quan s'adsorbeix el procés està a alta pressió i baixa temperatura, i per desorbir es regenera a baixa pressió i alta temperatura per afavorir el procés [15].

En aquest procés es té un consum més alt d'energia que en el cas del PSA, però inferior al del TSA, ja que no fa falta augmentar tant la temperatura. El desavantatge més notable, continua sent el mateix que el PSA, la purga de la columna i la pèrdua de producte.

En aquest cas hi ha 5 etapes, que resulta en la combinació dels dos processos: adsorció, despressurització, escalfament, refredament i pressurització

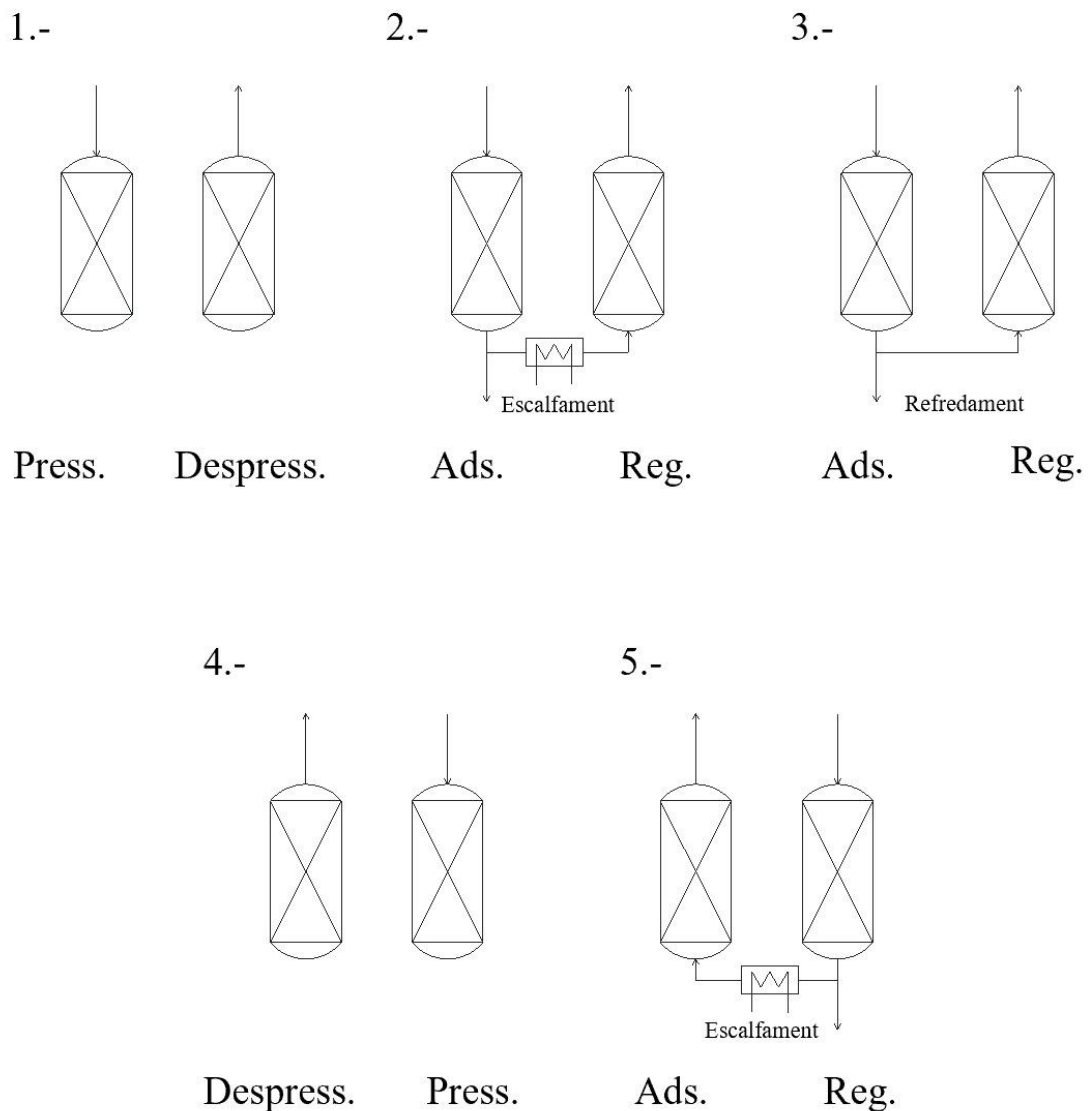


Figura 2.9. Esquema etapes PTSA.

En el procés del projecte present i sabent que l'adsorbent escollit es la sílice gel, s'ha realitzat l'estudi d'alternatives i s'ha escollit el mètode d'adsorció per *Temperature Swing Adsorption* (TSA). La decisió d'utilitzar aquest procés i adsorbent es basa en diverses raons tècniques i econòmiques.

Taula 2.7 Taula resum tipus de processos d'adsorció.

Tipus procés d'adsorció	Principi funcionament	Avantatges	Desavantatges	Manteniment	Velocitat Regeneració
PSA	Adsorció a alta pressió i desorció a baixa pressió.	Alta eficiència energètica, operació continua possible, sense necessitat de calor per a la desorció	Requereix compressió de gas, pot tenir alta caiguda de pressió	Moderat	Ràpida
VPSA	Adsorció a pressió alta o lleugerament per sobre atmosfèrica i desorció a pressió de buit.	Millor control sobre la desorció que en processos PSA	Complexitat mecànica, necessitat d'equips de buit	Alt, manteniment de bombes de buit necessari	Ràpida
TSA	Adsorció a temperatura baixa o ambient i desorció a alta temperatura.	Pot assumir grans volums de gas, efectiu per a adsorbats fortament adherits	Necessitat de subministrament de calor per desorció, més lent que PSA	Baix	Lenta
PTSA	Adsorció a alta pressió i baixa temperatura i regeneració a. Pressió baixa i temperatura alta	Pot aconseguir una regeneració completa en menys temps	Mes complexitat i cost energètic per la combinació de dos processos	Alt, manteniment de sistemes de pressió i temperatura	Moderada

A diferència d'altres processos com el PSA, el TSA és particularment eficaç per a la deshidratació, ja que utilitza canvis de temperatura per a adsorbir i desorbir el vapor d'aigua, permetent una purificació profunda. A més, pot regenerar completament l'adsorbent, ja que el canvi de temperatura facilita la desorció completa de les molècules d'aigua adsorbides. Això és especialment important per a mantenir l'eficiència a llarg termini del sistema.

Tot i que el TSA pot tenir costos energètics inicials més alts a causa de la necessitat d'escalfament per a la desorció, aquest mètode resulta ser més econòmic a llarg termini en processos on la deshidratació es crítica. L'energia necessària per a escalfar el llit adsorbent pot ser perfeccionada per fonts de calor residual, optimitzant així el consum energètic global del procés.

2.6.6. Equips d'intercanvi de calor

Al llarg d'aquest procés ens trobem amb etapes tant d'escalfament com de refredament de la corrent de procés. És important fer una tria adient, tant pel que fa a assolir els requisits fisicoquímics del procés com intentar que aquests intercanvis es duguin a terme de la forma més eficient i sostenible possible.

2.6.6.1 Equips d'escalfament

En el cas dels equips d'escalfament, s'ha optat per l'ús de resistències elèctriques en contra de bescanviadors típicament de vapor.

Aquesta decisió es troba basada en la categoria de venda del producte del procés. Com s'ha esmentat anteriorment en l'apartat 2.2. Abast del projecte, aquest treball tracta l'etapa d'alta purificació d'hidrogen procedent d'una electròlisi amb energia renovable. Per tal de seguir mantenint la categoria d'hidrogen verd, es pretén usar energia d'origen renovable per a escalfar el fluid de procés a través d'unes resistències elèctriques i prescindir dels equips d'escalfament amb fluids de vapor.

2.6.6.2 Equips de refredament

En el cas d'equips de refredament, valorant bescanviadors de tipus BEM i BEU, s'ha optat per la segona opció.

En el cas dels bescanviadors BEU, poden oferir una alta eficiència tèrmica gràcies a la configuració de flux contracorrent per tal de maximitzar la transferència de calor i aconseguir la temperatura desitjada. La variable de quantitat de passos també beneficia la fita anterior. També compten amb una gran versatilitat enfront de les expansions tèrmiques reduint l'estrès tèrmic que poden causar les corrents del procés sent un equip útil en grans diferències de temperatura entre els fluids de bescanvi (com és el cas).

La particular configuració de tubs en U també minimitza el risc de fuites millorant la seguretat de l'operació. La composició de les corrents a tractar es pràcticament H_2 a altes pressions i temperatures i és important mitigar en cada decisió possibles accions un cop la planta es trobi en funcionament.

Tot i que els bescanviadors BEU compten amb més costos de manteniment que no pas els bescanviadors amb configuració BEM. En aquest cas concret, es treballa amb fluids molt nets (una corrent pràcticament pura d' H_2 i aigua com a fluid refrigerant), fet que minimitza aquests darrers costos.

3. BASES DE DISSENY

3.1. Especificacions d'alimentacions

Per a aquets projecte de purificació d'hidrogen, es parteix d'una corrent de la sortida de l'electrolitzador de 2300kg/h d'hidrogen saturat d'aigua i amb traces d'oxigen (0.2% w/w) arrossegades en l'electròlisi. La corrent es troba a 40°C i una pressió de 30barg.

En funció de les dades de projecte es calculen les composicions màssiques que es troben en la Taula 3.1. Els càlculs corresponents es troben al apartat 1.1. dels annexos.

Taula 3.1. Composicions màssiques de la corrent d'entrada al sistema de purificació.

	H₂	H₂O	O₂
Composició vap (%)	97.72	2.08	0.20

3.2. Especificacions de producte

Una de les premisses mes importants que ens demana el client és eliminar per complet la poca aigua i O₂ present en traces de la corrent d'entrada. A mesura que augmenta la demanda de l'hidrogen, els requeriments per la seva puresa també ho fan. Especialment pel seu consum en piles de combustible les necessitats de puresa poden arribar fins al 99.999% [16]. Per això, traces d'aigua, o d'oxigen que en presència d'H₂ formin aigua, poden comprometre la funcionalitat dels equips.

L'hidrogen verd presenta alts costos de producció, fet que el fa un producte insostenible pel seu ús com a combustible. En cas de no purificar-se, l'hidrogen sortit d'un electrolitzador es pot utilitzar en calderes, turbines de vapor i plantes que no tinguin catalitzadors, ja que l'oxigen els enverina. Pel producte d'aquesta planta, l'hidrogen verd es destinarà com a reactiu per a noves substàncies, com és el cas de la producció de metanol a partir de CO₂. És per això que la puresa obtinguda en aquest procés serà del 99.999%.

3.3. Capacitat operativa

La capacitat operativa de la planta és un aspecte clau per garantir l'eficiència i eficàcia del procés productiu, així com el subministrament constant d'hidrogen de gran puresa als clients.

La planta ha estat dissenyada per processar 2,300kg/h d'hidrogen de baixa puresa. Aquesta capacitat ens permet complir amb la demanda del client i treballar amb tota la sortida de producte de l'electrolitzador. Els equips de la instal·lació operen en continu permeten poder treballar sense parades importants 360 dies l'any les 24 hores del dia. Inclús el sistema de dessecat inclou dos torres d'adsorció per mantenir la sortida de flux pur de manera continua.

Els equips empacats amb material, el R-101, el T-401 i el T-402, estan orientats de forma vertical facilitant així les parades de càrrega i descàrrega del catalitzador o l'adsorbent en cada cas. Apart, en el disseny de la instal·lació, s'han considerat diversos *bypass* per a facilitar el manteniment en continu d'equips concrets i crítics i evitar aturades generals.

Es considera realitzar les parades de planta i de manteniment en sincronia amb les parades de l'electrolitzador, maximitzant així la productivitat del procés productiu.

3.4. Normes i codis de disseny

En la següent taula que es mostra a continuació, es pot comprovar els codis i les normes de disseny que s'han seguit al llarg de l'elaboració del projecte.

Taula 3.2. Codis i normes de disseny d'equips i canonades del procés.

Equip	Codi i/o norma de disseny
Resistències elèctriques W-101 i W-401	EN 60204-1[23]
Reactor PBF R-101	ASME (The American Society of Mechanical Engineers) [17]
Bescanviadors de calor E-101, E-201 i E-401	TEMA (Tubular Exchanger Manufacturers Association) [19]
Separadors S-201 i S-301	ASME (The American Society of Mechanical Engineers) [17]
Columnes d'adsorció T-401 i T-402	ASME (The American Society of Mechanical Engineers) [17]
Compressor C-301	A Practical Guide to Compressor Technology
Canonades	ASME (The American Society of Mechanical Engineers) [17]

3.5. Especificació dels serveis disponibles

3.5.1. Servei d'aigua de refrigeració

En el procés, s'utilitzen dos tipus de fluids refrigerants: l'aigua de torre de refrigeració (E-101) i l'aigua freda (E-201 i E-301).

A continuació es mostren totes les dades rellevants sobre aquestes corrents.

Taula 3.3. Condicions de treball de la xarxa d'aigua provinent de la torre de refrigeració.

Paràmetre	Valor
Pressió de subministrament (bar)	4.4
Temperatura màxima entrada (°C)	27
Temperatura màxima sortida (°C)	40
Diàmetre intern de la canonada (in)	4
Velocitat de l'aigua	1
Densitat del H ₂ O (kg/m ³)	997.00
Viscositat (Pa·s)	1.02·10 ⁻³

Taula 3.4. Condicions de treball de la xarxa d'aigua provinent de la xarxa d'aigua freda de la planta.

Paràmetre	Valor
Pressió de subministrament (bar)	4.4
Rang temperatures entrada (°C)	5
Rang temperatures sortida (°C)	15
Diàmetre intern de la canonada (in)	4
Velocitat de l'aigua	1
Densitat del H ₂ O (kg/m ³)	997.00
Viscositat (Pa·s)	1.02·10 ⁻³

3.5.2. Servei de nitrogen

Amb la intenció de facilitar les parades i els manteniments al llarg de tot el procés, s'ha optat per incloure entrades de N₂ en diversos punts (veure P&IDs). Aquest N₂

internitzarà els equips i les línies, millorant la seguretat dels operaris i treballadors de manteniment (evitant qualsevol traça de H_2 que pugui quedar).

Aquesta corrent de nitrogen comptarà amb una temperatura de $25^{\circ}C$ i una pressió de 6 bars. En el moment on es doni pas i entrada de les corrents de N_2 cap al procés, el N_2 eliminarà tot l' H_2 que pugui haver en l'ambient.

A continuació es mostren totes les dades rellevants sobre aquestes corrents d'inertització.

Taula 3.5. Condicions de treball de les corrents d'inertització (N_2)

Paràmetre	Valor
Pressió de subministrament (bar)	6
Diàmetre intern de la canonada (in)	4
Velocitat del gas (m/s)	30
Densitat del N_2 (kg/m ³)	1.15
Viscositat (Pa·s)	$1.76 \cdot 10^{-5}$

4. ENGINYERIA BÀSICA

A continuació es troba tota la informació del projecte referent a diagrames de procés i equips. Des de diagrames de blocs i d'instrumentació, fins a balanços de matèria i llistat d'equips.

4.1. Diagrames de blocs i de procés

El procés del projecte es basa en la purificació d' H_2 verd de 2,300 kg/h i 40°C procedent d'una planta d'electròlisi. Aquesta corrent es pràcticament tota H_2 però compta amb presència d' H_2O i també d' O_2 . L' O_2 podria arribar a ser potencialment perillós en el cas de que arribés a una corrent d' H_2 que servis a piles d' H_2 , podent formar H_2O dins de les piles i fer-les malbé. Per aquest motiu, la principal premissa en la primera part del procés es eliminar totes les traces d'aigua presents. A més, el procés de separació H_2-H_2O es més senzill i fàcil que el sistema H_2-O_2 .

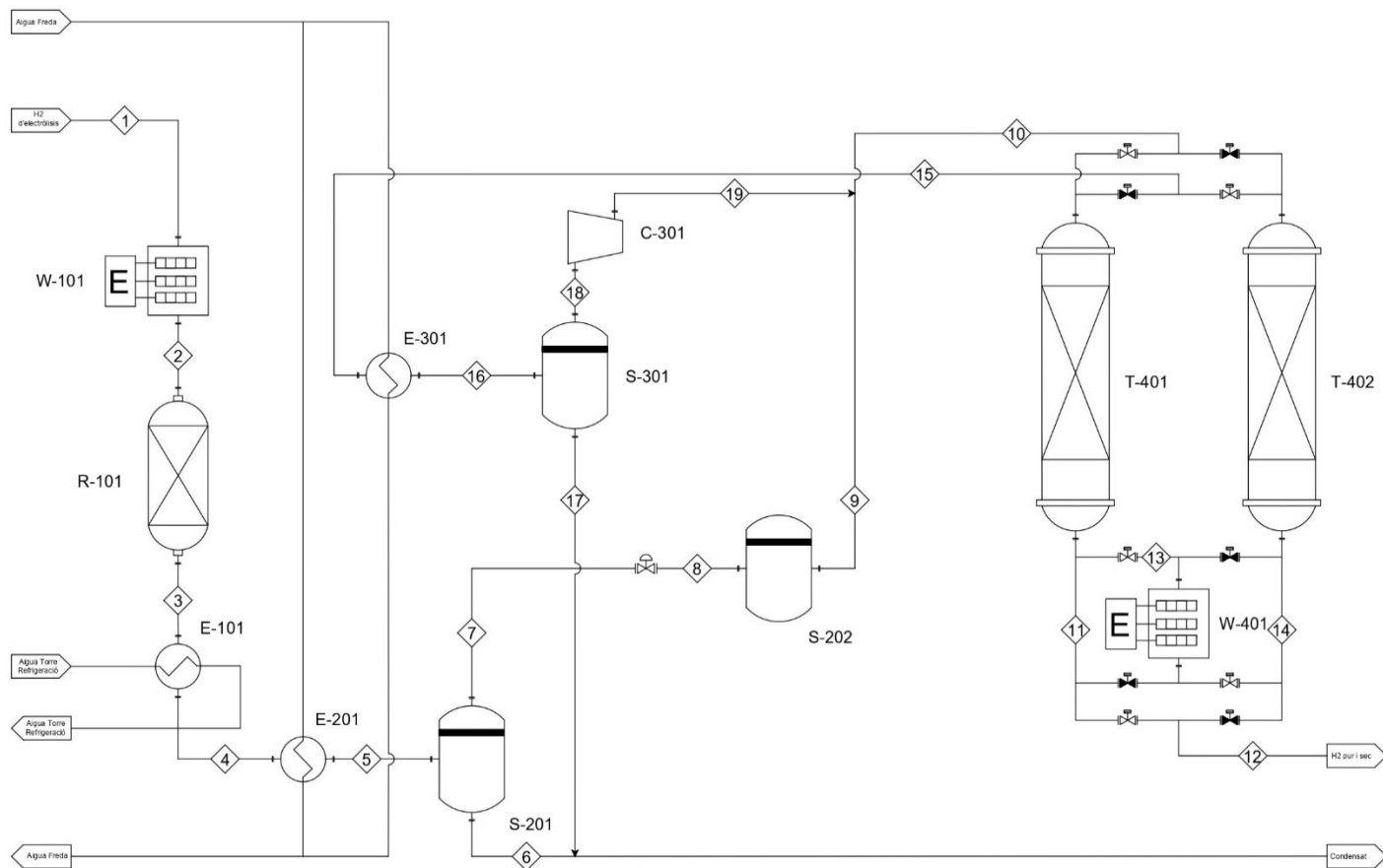
La corrent d'alimentació passarà en primer lloc per una resistència elèctrica (W-101), que aportarà l'energia suficient per assolir una temperatura per a la òptima conversió de l' O_2 en H_2O dins del reactor (R-101). Aquesta temperatura s'ha establert als 70°C. Amb la presència d'aquest reactor el que fem es eliminar tota possible traça d' O_2 amb redundància d'un analitzador a la sortida que recircularà la corrent en cas de que la reacció no s'hagi dut a terme amb èxit.

Un cop ja no queda més O_2 en la corrent, la següent part es separar l' H_2O present per tal de purificar-la al màxim (segons requeriments, al 99.999%). Abans del primer equip de separació (S-101), ens trobem amb dos bescanviadors de tub i carcassa en sèrie (un amb aigua de torre de refrigeració i un segon amb aigua freda) amb la intenció de baixar la temperatura de la corrent i separar el màxim d' H_2O en aquesta etapa.

La següent part del procés tracta d'un cicle d'adsorció mitjançant un TSA per tal d'obtenir la màxima puresa del H_2 . Aquest tipus de cicles treballen a unes pressions de treball significativament més baixes que la corrent de procés en aquest punt. Per aquest motiu, es compta amb dues vàlvules controladores de pressió (per redundància) per disminuir la corrent fins a 20 bar.

El cicle tracta d'un sistema amb dues columnes fent de *backup*. Alhora que una de les dues columnes està adsorbint l'aigua, l'altra es troba regenerant-se amb ajut de corrent pura a més temperatura i a contracorrent. La corrent regenerada, comptarà amb una major composició d'aigua. Per aquest motiu, es recircula cap a un separador (S-301) per separar la màxima quantitat d'aigua i posteriorment, un cop assolides les característiques fisicoquímiques (a través d'un bescanviador i compressor), cap a l'entrada del cicle.

4.1.1. Diagrama de procés (PFD)



AUTORS TFGEQ_2414	TIPUS DE DOCUMENT CAD A PDF		
PURIFICACIÓ H2 VERD PROCESS FLOW DIAGRAM (PFD)		S / N A3	VERSIÓ V. 3
		DATA DE CREACIÓ 28/04/2024	

Figura 4.1. Diagrama de procés del sistema de purificació d'hidrogen verd mitjançant un cicle adsorbent TSA.

4.1.2. Balanç de matèria del procés

A continuació es mostra la taula de corrents amb el balanç de matèria corresponent al procés de purificació d'hidrogen verd mitjançant TSA. S'ha dut a terme amb l'ajut d'*Aspen Plus*. Per al balanç de matèria i en relació al n° de corrents del PFD, tenir en compte que la primera columna (T-401) es troba adsorbint i la segona (T-402) es troba regenerant.

Taula 4.1. Balanç de matèria, en kg/h, del procés de purificació d'H₂ verd elaborat amb Aspen Plus.

Corrents	1		2		3		4		5	
	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt
H₂O	47.13	0.02049	47.13	0.02049	52.29	0.02274	52.29	0.02274	52.29	0.02274
O₂	4.60	0.00200	4.60	0.00200	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000
H₂	2,248.27	0.97751	2,248.27	0.97751	2,247.70	0.97726	2,247.70	0.97726	2,247.70	0.97726
Total (kg/h)	2,300.0	1.00000	2,300.0	1.00000	2,300.0	1.00000	2,300.0	1.00000	2,300.0	1.00000
T (°C)	47.13		70.00		72.16		43.00		20.01	
P (bar)	4.60		31.01		30.98		30.82		30.63	
Fase	Vapor		Vapor		Vapor		Vapor		Vapor	

Continuació Taula 4.1. Balanç de matèria, en kg/h, del procés de purificació d'H₂ verd elaborat amb Aspen Plus.

Corrents	6		7		8		9		10	
	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt
H₂O	39.02	1.00000	13.28	0.00587	13.28	0.00587	13.28	0.00587	24.30	0.00858
O₂	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000
H₂	0.00	0.00000	2,247.70	0.99413	2,247.70	0.99413	2,247.70	0.99413	2,809.62	0.99142
Total (kg/h)	39.02	1.00000	2,260.97	1.00000	2,260.97	1.00000	2,260.97	1.00000	2,833.92	1.00000
T (°C)	20.01		20.01		20.41		20.40		22.97	
P (bar)	30.63		30.63		10.00		10.00		10.00	
Fase	Líquid		Vapor		Vapor		Vapor		Vapor	

Continuació Taula 4.1. Balanç de matèria, en kg/h, del procés de purificació d'H2 verd elaborat amb Aspen Plus

Corrents	11		12		13		14		15	
	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt
H₂O	0.02	0.00001	0.02	0.00001	0.00	0.00001	0.00	0.00001	24.29	0.04143
O₂	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000
H₂	2,809.62	0.99999	2,247.70	0.99999	561.92	0.99999	561.92	0.99999	561.92	0.95857
Total (kg/h)	2,809.64	1.00000	2,247.71	1.00000	561.93	1.00000	561.93	1.00000	586.21	1.00000
T (°C)	22.97		22.97		22.97		139.85		131.56	
P (bar)	9.50		9.50		9.50		9.50		9.00	
Fase	Vapor		Vapor		Vapor		Vapor		Vapor	

Continuació Taula 4.1. Balanç de matèria, en kg/h, del procés de purificació d'H2 verd elaborat amb Aspen Plus

Corrents	16		17		18		19	
	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt	kg/h	% wt
H₂O	24.29	0.04143	13.26	1.00000	11.03	0.01924	11.03	0.01924
O₂	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000	0.00	0.00000
H₂	561.92	0.95857	0.00	0.00000	561.92	0.98076	561.92	0.98076
Total (kg/h)	586.21	1.00000	13.26	1.00000	572.95	1.00000	572.95	1.00000
T (°C)	19.99		19.99		22.97		33.22	
P (bar)	8.78		8.78		9.50		10.00	
Fase	Vapor		Líquid		Vapor		Vapor	

4.2. Diagrama de canonades i instrumentació (P&ID)

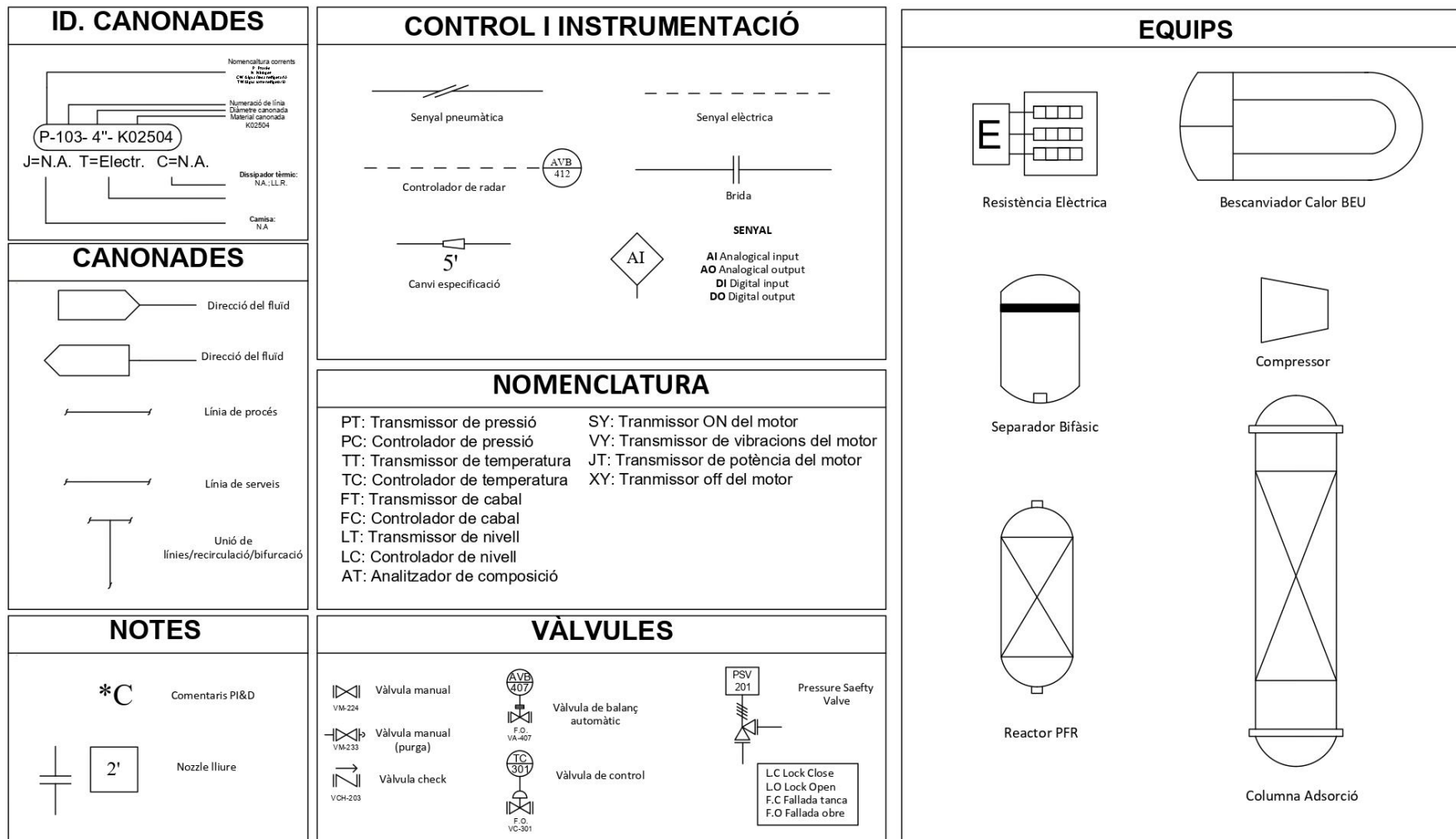


Figura 4.2. Nomenclatura dels diagrames de control i instrumentació del procés (P&ID's).

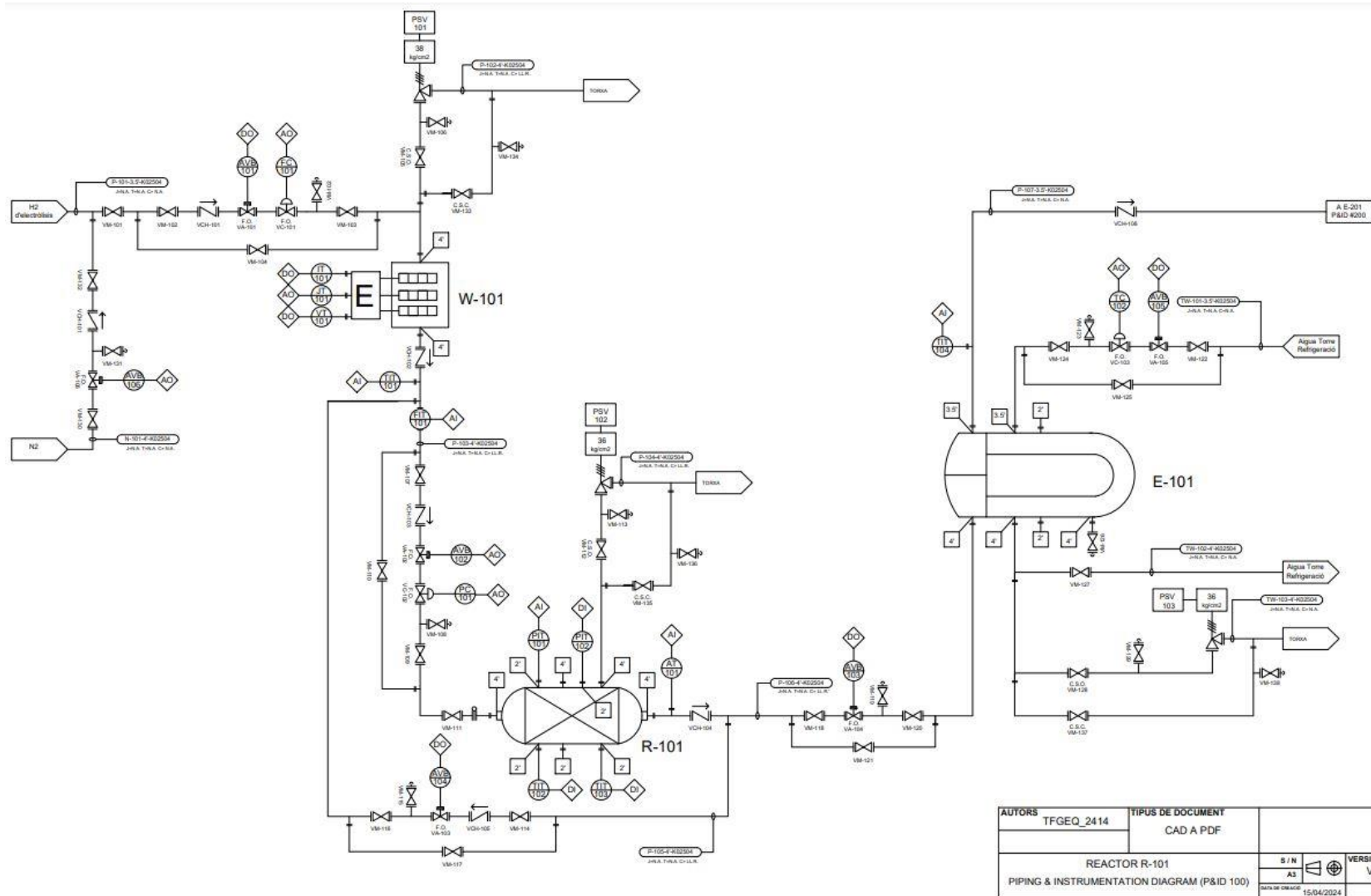
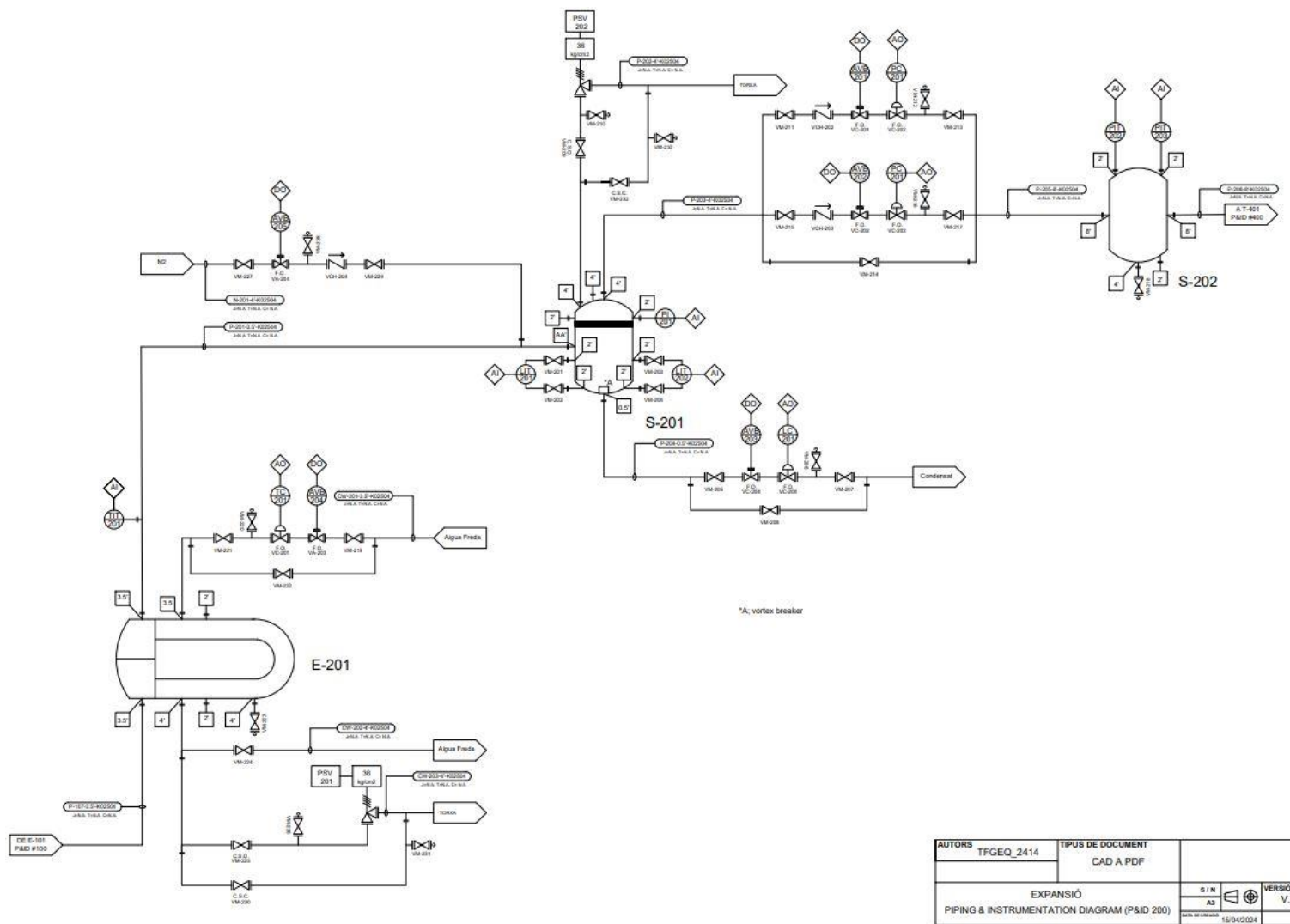


Figura 4.3. Diagrama P&ID – 100 de la primera part del procés (des de entrada de matèria prima fins a sortida E-101).



AUTORS	TFGEQ_2414	TIPUS DE DOCUMENT	CAD A PDF	
EXPANSIÓ			S / N	VERSIÓ
PIPING & INSTRUMENTATION DIAGRAM (P&ID 200)			A3	V. 7
			15/04/2024	

Figura 4.4. Diagrama P&ID – 200 de la segona part del procés (des de E-201 fins a sortida S-202).

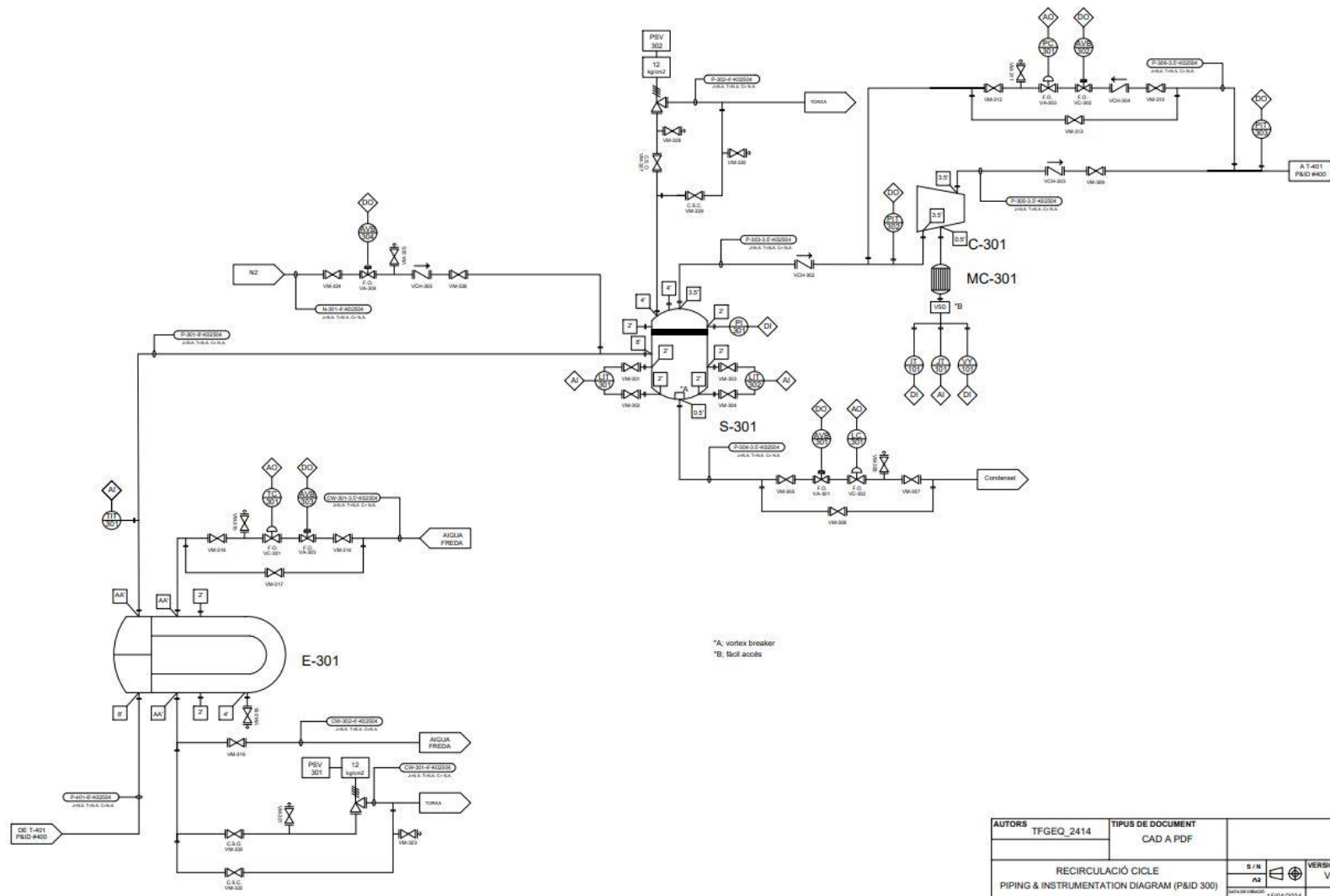
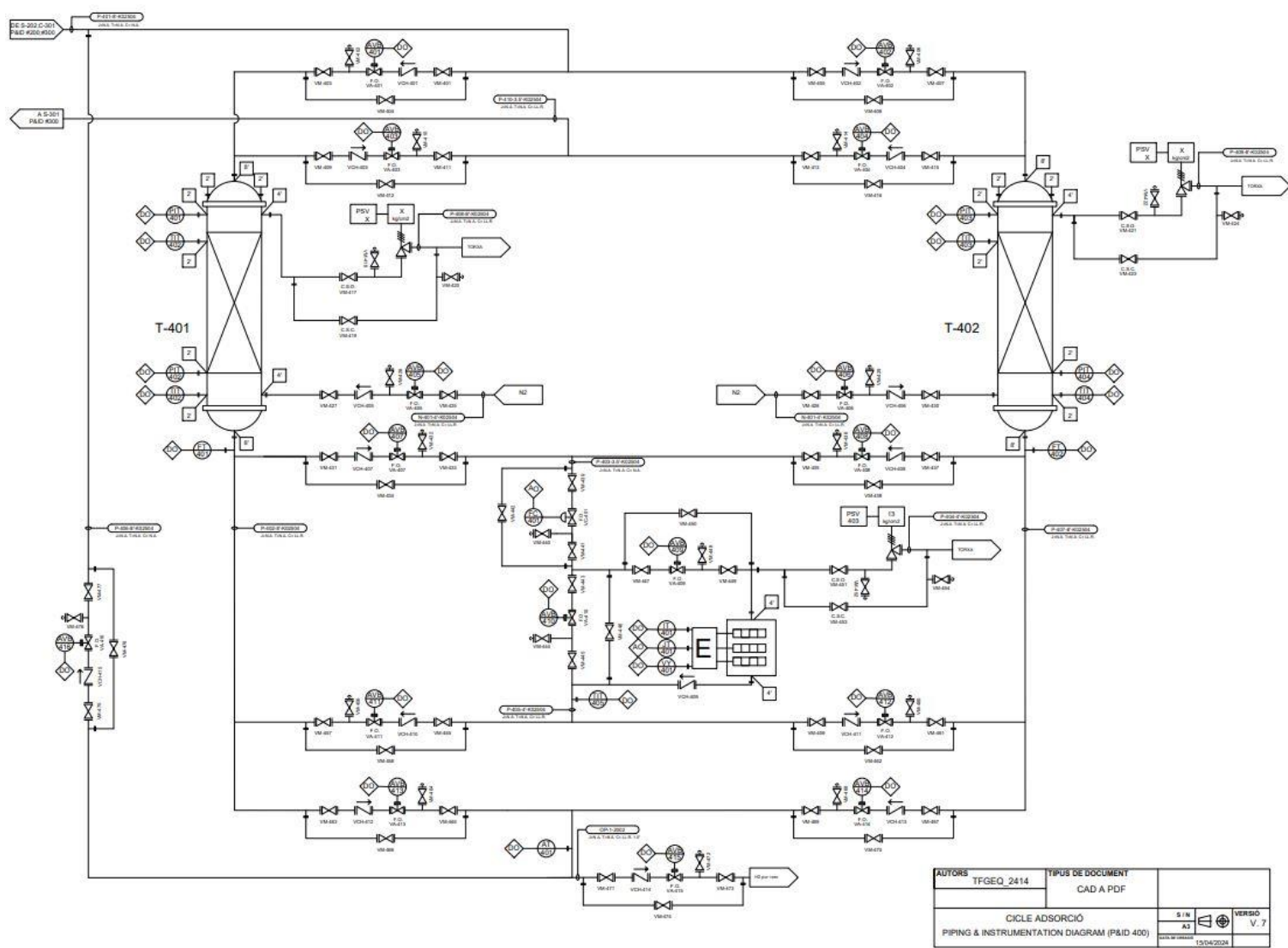


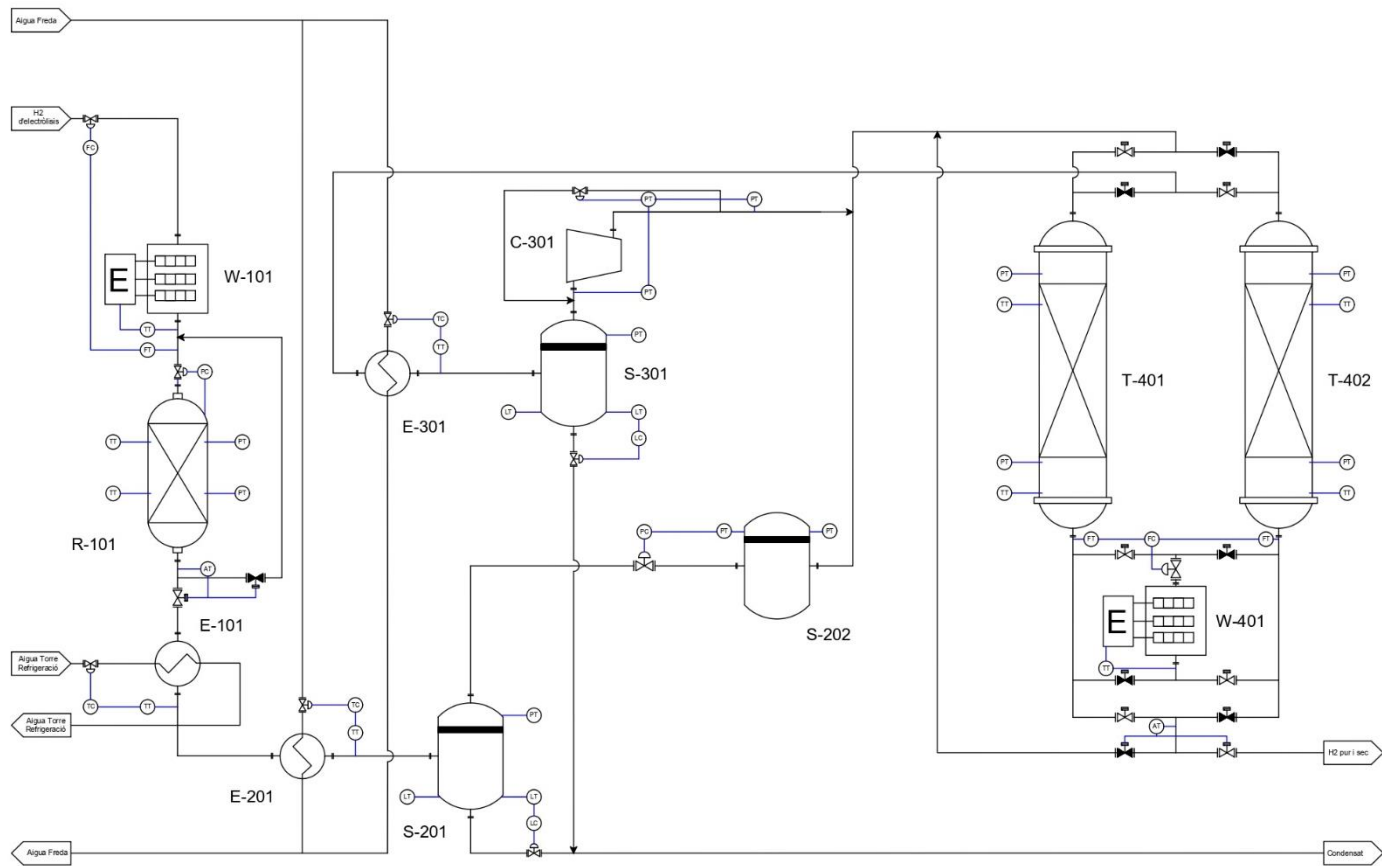
Figura 4.5. Diagrama P&ID – 300 de la part de recirculació del procés (des de E-301 fins a sortida C-301).



AUTORS	TFGEQ_2414	TIPUS DE DOCUMENT	CAD A PDF	
CICLE ADSORCIO			S. IN.	VERSIDO
PIPING & INSTRUMENTATION DIAGRAM (P&ID 400)			A3	V. 7
			13/04/2024	

Figura 4.6. Diagrama P&ID – 400 de la darrera part del procés (des de T-401 fins a T-402).

4.3. **Diagrama de control i xarxes de control (PCD)**



AUTORS	TFGEQ_2414	TIPUS DE DOCUMENT	CAD A PDF		
PURIFICACIÓ H2 VERD		S / N		VERSIO	
PROCESS CONTROL DIAGRAM (PCD)		A3		V. 3	
		DATA DE CREACIÓ	30/05/2024		

Figura 4.7. Diagrama de control del procés de purificació d'hidrogen verd.

4.4. Llistat i dimensionament de canonades

4.4.1. Materials de canonades

Per tal de fer una elecció de material adient per a les canonades del procés, s'ha tingut en compte tant la composició química del líquid a transportar com les condicions d'operació i la pròpia resistència a la corrosió del material. En aquest cas s'ha discutit sobre l'acer al carboni i l'acer inoxidable.

Analitzant les temperatures al llarg del procés i comprovant que en molts pocs punts aquesta arriba a ser significativament alta, s'ha optat per acer amb baix contingut de carboni (no aliat). La temperatura més elevada es registra dins del cicle d'adsorció, just entre la adsorció i el *recovery* de la columna. Aquesta corrent (en el PFD com a 14) es necessari escalfar el fluid fins assolir una temperatura de uns 413.15K (140°C) [10].

Aquest acer es tracta d'un material econòmic, amb facilitat de soldadura i que compta amb una gran diversitat d'aplicacions industrials, característiques idònies per a l'aplicació de canonades que es proposa. Alhora, es proposen accions per tal d'allargar la vida útil d'aquestes canonades (manteniment) que inclouen inspeccions programades per poder dur a terme un seguiment del seu estat.

Esmentar també que les canonades que contenen el fluid a una temperatura superior de 60°C (als voltants del reactor R-101), s'aïllaran tèrmicament amb llana de roca. Es tracta d'un dels aïllants del mercat més econòmic i resolutiu.

4.4.2. Dimensionament de canonades

En el llistat de canonades que trobarem en el següent punt (4.4.3. Llistat de canonades), es mostren tots els resultats dels càlculs pertinents, sobretot pel que fa als diàmetres.

Per a dur a terme aquests càlculs, esmentar que les pressions de disseny s'han establert un marge de seguretat del 50% per a les pressions i del 20% pel que fa a les temperatures.

4.4.3. Llistat de canonades

En les següents taules (Taula 4.2 – Taula 4.5), es mostren els llistats de canonades corresponents als diagrames P&ID's. En funció del fluid que transporta cada canonada i les seves condicions de treball, s'ha dut a terme un dimensionament i disseny.

Taula 4.2. Llistat de canonades del P&ID 100.

Línia	Diàmetre nominal (in)	P&ID	Des de	Fins	Fluid	Estat	T. O.(°C)	P. O. (bar)	T. dis.(°C)	P. dis (barg)	Material	Camisat	Aïllant	Tracejat
P-101	3.5	100	Entrada	W-101	H ₂	Gas	40.00	31.01	48.00	46.52	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-102	4.0	100	Entrada	PSV-101	H ₂	Gas	70.00	31.01	84.00	46.52	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-103	4.0	100	W-101	R-101	H ₂	Gas	70.00	31.01	84.00	46.52	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-104	4.0	100	R-101	PSV-102	H ₂	Gas	72.16	30.98	86.59	46.47	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-105	4.0	100	R-101	P-103	H ₂	Gas	72.16	30.98	86.59	46.47	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-106	4.0	100	R-101	E-101	H ₂	Gas	72.16	30.98	86.59	46.47	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-107	3.5	100	E-101	E-201	H ₂	Gas	43	30.82	51.6	46.23	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
N-101	4.0	100	N ₂	P-101	N ₂	Gas	20	6.00	24.00	9.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
TW-101	3.5	100	Torre ref	E-101	Aigua	Líquid	27	4.40	37.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
TW-102	4.0	100	E-101	Torre ref	Aigua	Líquid	35.92	4.40	37.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
TW-103	4.0	100	TW-102	PSV-103	Aigua	Líquid	35.92	4.40	37.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.

Taula 4.3. Llistat de canonades del P&ID 200.

Línia	Diàmetre nominal (in)	P&I D	Des de	Fins	Fluid	Estat	T. O.(°C)	P. O. (bar)	T. dis.(°C)	P. dis (barg)	Material	Camisat	Aïllant	Tracejat
P-201	3.5	200	E-201	S-201	H ₂	Gas	20.01	30.63	24.01	45.95	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-202	4.0	200	S-201	PSV-202	H ₂	Gas	20.01	30.63	24.01	45.95	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-203	4.0	200	S-201	VC-202/ VC203	H ₂	Gas	20.01	30.63	24.01	45.95	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-204	0.5	200	S-201	Condensat	H ₂	Líquid	20.01	30.63	24.01	45.95	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-205	8.0	200	VC-202/ VC203	S-202	H ₂	Gas	20.41	10.00	24.49	15.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-206	8.0	200	S-202	P-401	H ₂	Gas	20.40	10.00	24.48	15.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
N-201	4.0	200	N ₂	P-201	N ₂	Gas	20.00	6.00	24.00	9.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
CW-201	3.5	200	Aigua freda	E-201	Aigua	Líquid	5.00	4.40	46.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
CW-202	4.0	200	E-201	Aigua freda	Aigua	Líquid	14.00	4.40	46.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
CW-203	4.0	200	CW-202	PSV-201	Aigua	Líquid	14.00	4.40	46.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.

Taula 4.4. Llistat de canonades del P&ID 300.

Línia	Diàmetre nominal (in)	P&ID	Des de	Fins	Fluid	Estat	T. O.(°C)	P. O. (bar)	T. dis.(°C)	P. dis (barg)	Material	Camisat	Aïllant	Tracejat
P-301	3.0	300	E-301	S-301	H ₂	Gas	19.99	8.78	23.99	13.17	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-302	4.0	300	S-301	PSV-302	H ₂	Gas	19.99	8.78	23.99	13.17	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-303	3.5	300	S-301	C-301	H ₂	Gas	19.99	8.78	23.99	13.17	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-304	0.5	300	S-301	Condensat	Aigua	Líquid	19.99	8.78	23.99	13.17	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-305	3.5	300	C-301	P-401	H ₂	Gas	33.22	10.00	39.86	15.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-301	3.0	300	E-301	S-301	H ₂	Gas	19.99	8.78	23.99	13.17	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
N-301	4.0	300	N ₂	P-301	N ₂	Gas	20.00	6.00	24.00	9.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
CW-301	3.5	300	Aigua freda	E-301	Aigua	Líquid	5.00	4.40	46.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
CW-302	4.0	300	E-301	Aigua freda	Aigua	Líquid	14.00	4.40	46.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
CW-303	4.0	300	CW-302	PSV-301	Aigua	Líquid	14.00	4.40	46.00	7.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.

Taula 4.5. Llistat de canonades del P&ID 400.

Línia	Diàmetre nominal (in)	P&ID	Des de	Fins	Fluid	Estat	T. O.(°C)	P. O. (bar)	T. dis.(°C)	P. dis (barg)	Material	Camisat	Aïllant	Tracejat
P-401	8.0	400	C-301/ S-202	T-401/ T-402	H ₂	Gas	22.97	10.00	27.56	15.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-402	8.0	400	T-401	Producte sec	H ₂	Gas	22.97	10.00	27.56	15.00	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-403	3.5	400	T-401	E-401	H ₂	Gas	22.97	10.00	27.56	15.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-404	4.0	400	P-403	PSV-403	H ₂	Gas	139.85	9.00	167.82	13.50	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-405	4.0	400	E-401	T-401/ T-402	H ₂	Gas	139.85	9.00	167.82	13.50	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-406	8.0	400	P-402	P-401	H ₂	Gas	22.97	10.00	27.56	15.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
P-407	8.0	400	E-401	T-401/ T-402	H ₂	Gas	139.85	9.00	167.82	13.50	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-408	8.0	400	T-401	PSV-401	H ₂	Gas	22.97	10.00	27.56	15.00	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-409	8.0	400	T-402	PSV-402	H ₂	Gas	131.56	9.00	157.87	13.50	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
P-410	3.5	400	T-401/ T-402	E-301	H ₂	Gas	131.56	9.00	157.87	13.50	K02504	N.A.	Llana roca	N.A.
N-401	4.0	400	N ₂	T-401	N ₂	Gas	20.00	6.00	24.00	9.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.
N-402	4.0	400	N ₂	T-402	N ₂	Gas	20.00	6.00	24.00	9.00	K02504	N.A.	N.A.	N.A.

4.5. Llistat i disseny d'equips

4.5.1. Llistat d'equips

A continuació, es mostra el llistat de tots els equips involucrats en el procés que concernia a aquest projecte.

A banda de la numeració dels equips i de en quin diagrama P&ID es troba, també es mostra informació rellevant com es el proveïdor de l'equip o el model.

Taula 4.6. Llistat de 'equips involucrats en el procés de la purificació d'H₂ verd.

Nom	P&ID	Descripció	T. O.(°C)	P. O. (bar)	T. dis.(°C)	P. dis (barg)
W-101	P&ID-100	Resistència Elèctrica	70.00	31.01	70.00	84.00
R-101	P&ID-100	Reactor PBR	72.16	30.98	72.16	86.59
E-101	P&ID-100	Bescanviador BEU	43.00	30.98	43.00	51.60
E-201	P&ID-200	Bescanviador BEU	20.01	30.63	20.01	24.01
S-201	P&ID-200	Separador bifàsic	20.01	30.63	20.01	24.01
S-202	P&ID-200	Separador	20.41	10.00	20.41	24.49
T-401	P&ID-400	Columna Adsorció	22.97	10.00	22.97	27.56
T-402	P&ID-400	Columna Adsorció	139.85	9.00	139.85	167.82
W-401	P&ID-400	Resistència Elèctrica	149.85	9.50	149.85	179.82
E-301	P&ID-300	Bescanviador BEU	131.56	9.00	131.56	157.87
S-301	P&ID-300	Separador bifàsic	19.99	8.78	19.99	23.99
C-301	P&ID-300	Compressor	33.22	10.00	33.22	39.86

4.5.2. Resistència elèctrica W-101 i W-401

Com s'ha esmentat en l'estudi d'alternatives, en aquest procés es faran servir resistències elèctriques per a escalfar els fluids necessaris segons requeriments. Al llarg del procés ens trobem amb la necessitat de dos equips d'aquest tipus.

El primer el trobarem just abans de l'entrada al reactor (per afavorir el rendiment de la reacció). En aquest cas hem d'escalfar el fluid de 2,300 kg/h de pràcticament tot H₂ des de 40°C d'entrada fins als 70°C.

El segon equip el trobarem entre la columna d'adsorció que en aquell moment es trobi adsorbint (que es trobarà a escaig 20°C) i la columna que es trobi fent el *recovery*. És important per desadsorbir la columna que es faci amb una corrent que es trobi al voltant dels 140°C [10]. Estem parlant de un ΔT significatiu tot i que el flux a escalfar serà molt menor que en el cas anterior.

4.5.2.1 Dimensionament

Tenint en compte el flux màssic del fluid a escalfar, les capacitats calorífiques i composicions de la corrent i les temperatures necessàries, a continuació podem veure els kWh que necessitaria cada resistència elèctrica per a incrementar cada corrent.

Es fa servir la següent equació i dades (Taula 4.7.) per a poder dur a terme el càlcul de consum d'aquests equips.

$$Q = m \cdot c \cdot \Delta T \quad \text{E.4.5.1.}$$

On Q són els joules necessaris (unitat energètica) per a assolir aquest canvi de temperatura, m és el flux màssic de la corrent a tractar, la cp és la capacitat calorífica en J/kg °C i ΔT és la diferència de graus de temperatura que hi ha entre l'entrada a l'equip i la sortida.

Taula 4.7. Dades per al càlcul energètic de les resistències elèctriques W-101 i W-401.

	W-101		W-401	
	m (kg/h)	cp (J/kg °C)	m (kg/h)	cp (J/kg °C)
H ₂	2,248.27	1,930.0	0.69	1,930.0
O ₂	4.60	920.0	0.00	920.0
H ₂ O	47.126	14,320.0	223.00	14,320.0
ΔT		30		120

També s'ha suposat un 90% d'eficiència de les resistències elèctriques donat que aquests equips, per molt optimitzant que siguin, mai assoleixen el 100% de conversió.

Taula 4.8. Resultats de kWh necessaris per escalfar els fluids.

	W-101	W-401
J (ideals)	$9.69 \cdot 10^8$	$9.66 \cdot 10^8$
kWh (ideals)	269.09	268.23
kWh (eff. 90%)	298.99	298.03

4.5.2.2 Integració de instal·lació solar

Com s'ha anat esmentant al llarg de tot el projecte, moltes decisions venen preses pel tipus de producte, en aquest cas, H₂ pur verd. La diferència que caracteritza aquest H₂ en vers la resta del mercat es que tota l'energia emprada per a la seva producció es d'origen renovable (típicament serà solar o eòlica).

Amb la intenció de posar en context aquestes dades energètiques pertanyents al consum de les resistències elèctriques, s'ha elaborat un càlcul orientatiu per la producció d'aquesta energia si aquesta.

Per aquest càlcul s'ha seguit l'equació 4.5.2. Alhora s'han suposat que la planta treballarà 24h/dia i que, al ser solar, la instal·lació comptarà pròpiament amb unes bateries per tal d'acumular la producció diürna per emprar-la en hores nocturnes (fora de l'abast d'aquest projecte). S'han tingut en compte la irradiació promig anual (en aquest cas a la província de Tarragona) i un factor de dissipació comú en el tipus de instal·lacions d'aquest tipus. També, s'ha suposat una potència pic per panell (de 0.4) i que cada panell fa uns 0.18m².

$$\text{Generació (kWh)} = \text{Potència pic (kWp)} \cdot \text{HSP (h)} \cdot \text{PR (\%)} \quad \text{E.4.5.2.}$$

En aquesta equació, la *Generació* en kWh es la quantitat d'energia que genera una instal·lació fotovoltaica. La *Potència Pic* (kWp) es una qualitat de la instal·lació física, les *HSP* es la quantitat d'hores de irradiació al dia es troba la instal·lació exposada a la llum (es té en compte que 1 HSP es l'equivalent a rebre 1000 W/m² durant 1h). Per últim, el *PR* es l'anomenat *Performance Ratio* que inclou pèrdues energètiques per dissipació de la corrent, cablejat, inversors,...

Coneixent la generació necessària i la resta de variables, es substitueix l'equació per trobar quina es la Potència Pic necessària per a la possible instal·lació. En la següent taula es mostren els resultats.

Taula 4.9. Càlculs de dimensionament d'una instal·lació fotovoltaica per suplir el consum de les resistències elèctriques.

	W-101	W-401
kWh necessaris/dia	7,200	7,200
HSP (Tarragona)		5.47[21]
Performance Ratio		80%
Instal·lació kWp	1645.34	1645.34
		3,290.68
Panells necessaris	4,113	4,113
m ² ocupats	740	740
		1,480

En resum, hauríem de comptar amb una instal·lació fotovoltaica amb gairebé 1,500 m² per tal de poder suplir la demanda energètica només de les residències elèctriques del procés.

4.5.3. Reactor R-101

Pel disseny del reactor s'ha utilitzat el simulador de processos *Aspen Plus*. S'ha proposat un reactor de llit empaquetat (PBR) que treballarà de forma adiabàtica. Tot i tractar-se d'una cinètica altament exotèrmica, al disposar de traces d'oxigen la reacció no farà pujar excessivament la temperatura de reacció, permetent així la configuració adiabàtica i l'estalvi d'haver de disposar d'un sistema encamisat de refrigeració.

El fet de no haver de disposar d'un sistema de refrigeració per les baixes quantitats d'oxigen també ha determinat la configuració que tindrà el reactor. Típicament, per a reactors que necessiten una evacuació o aportació d'energia s'utilitzen configuracions amb altes superfícies d'intercanvi, les quals es poden aconseguir amb reactors de diàmetres petits i grans llargades. L'inconvenient d'aquestes configuracions són l'alta pèrdua de càrrega que presenten i que no interessa per al cas estudiat. En l'altre extrem, per a reactors que no necessiten l'intercanvi de calor es busquen configuracions amb diàmetres més amples i longituds més curtes, on la pèrdua de pressió de carrega serà bastant més petita. Aquest últim cas, serà el que s'ha buscat per l'elaboració de les dimensions del reactor de desoxidació.

4.5.3.1 Dimensionament

L'article [22] s'ha agafat de referència per treballar amb el model cinètic proposat, el qual es descriu en l'annex 2.1.1. S'utilitza el catalitzador Pd/Al₂O₃-SiO₂ amb una mida de malla entre 10 i 20 (0.08-0.2cm). Per l'escalat s'ha considerat un diàmetre de partícula de 8mm, quatre vegades més gran que la mostra utilitzada en el laboratori per l'article.

Una variable important a determinar és la fracció de buit que tindrà el llit del catalitzador, ja que determinarà els canals disponibles per on passaran els reactius. Aquesta variable és pot relacionar amb el diàmetre del reactor (d_r) i el diàmetre de partícula (d_c) segons l'equació E.4.5.3, considerant les constants de disseny a_1 , a_2 i a_3 corresponents a una esfera.

Taula 4.10. Valors per diferents tipus de forma de catalitzador en funció del seu rang de diàmetre de reactor i diàmetre de partícula de catalitzador, valors aplicats per l'equació E.4.5.3.

Forma partícula	Rang (d_r/d_c)	a_1	a_2	a_3
Esfèrica	1.5 a 50	0.390	1.740	1.140
Cilindre massís	1.7 a 26.3	0.373	1.703	0.611
Cilindre buit	1.9 a 14.5	0.465	2.030	1.033
Cilindre de 4 forats	1.9 a 8.4	0.595	0.082	1.244

Així doncs, agafant els valors corresponents a la partícula esfèrica i fixant el diàmetre de partícula, es troba un valor de diàmetre de reactor acceptable pel rang proposat. Es treballarà amb el valor del rang superior ($d_r/d_c = 50$) en comptes del inferior per intentar apropar-se a la configuració de reactor comentada anteriorment, on es busca un diàmetre gran i llargades curtes per evitar pèrdues de pressió. A més, com més gran sigui la relació de diàmetre reactor/partícula més uniformitat tindrà el flux a través del reactor, optimitzant així el rendiment del catalitzador i evitant possible canalitzacions. Per tant, és calcula el diàmetre de reactor en funció de l'equació E.4.5.4, donant un valor de 0.4 metres.

$$d_r = 50 \cdot d_c = 50 \cdot 0.008m = 0.4m \quad (\text{E.4.5.3})$$

Seguint doncs amb l'equació E.4.5.4, es troba la fracció de buit del llit (ε_{llit}).

$$\varepsilon_{llit} = a_1 + \frac{a_2}{\left(\frac{d_r}{d_c} + a_3\right)^2} = 0.390 + \frac{1.740}{\left(\frac{0.4}{0.008} + 1.140\right)^2} = 0.47 \quad (\text{E.4.5.4})$$

Una vegada trobades les variables principals de disseny es passa a la modelització amb *Aspen Plus*. Es realitza, en primer lloc un estudi de la sensibilitat de la conversió d'oxigen en funció de la massa de catalitzador utilitzada, la representació dels resultats obtinguts es pot observar en la Figura 4.8. D'aquesta manera, la quantitat de catalitzador necessària per aconseguir els requeriments de conversió suficients per eliminar tot l'oxigen de la corrent serà de 350kg.

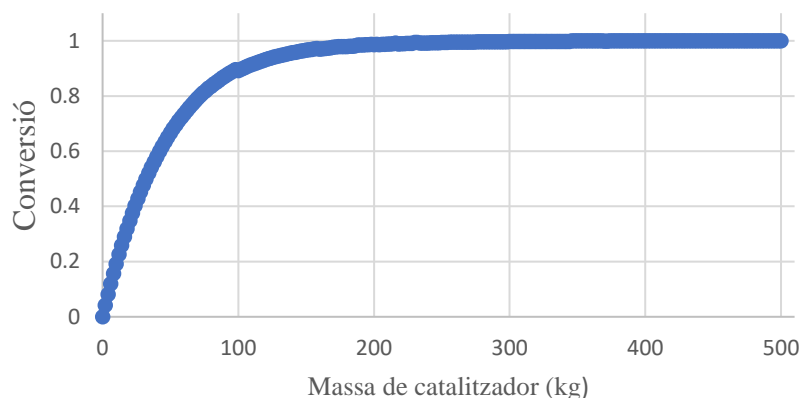


Figura 4.8. Representació de les dades del anàlisi de sensibilitat de la conversió d'oxigen en funció de la massa de catalitzador utilitzada en el reactor.

La determinació de la massa de catalitzador necessària s'ha trobat per una temperatura fixa de 70°C. A continuació, s'ha realitzat un estudi sobre la temperatura d'entrada al reactor adiabàtic per veure el seu impacte en la conversió d'oxigen. L'estudi es realitzarà fixant la massa de catalitzador trobada anteriorment. Com es pot observar en la Figura 4.8, la temperatura mínima necessària per aconseguir l'eliminació de tot l'oxigen és a partir dels 70°C, per tant, s'ha determinat aquesta com la temperatura de treball en l'entrada del reactor de desoxidació. En l'anàlisi de sensibilitat utilitzat en *Aspen* s'han trobat alguns valors que es desvien de la tendència exponencial que presenta la simulació. Aquestes desviacions es creu que poden ser donats a errors de convergència que no representen la realitat del procés, i per tant, s'han eliminat de la tendència que es representa en la Figura 4.9.

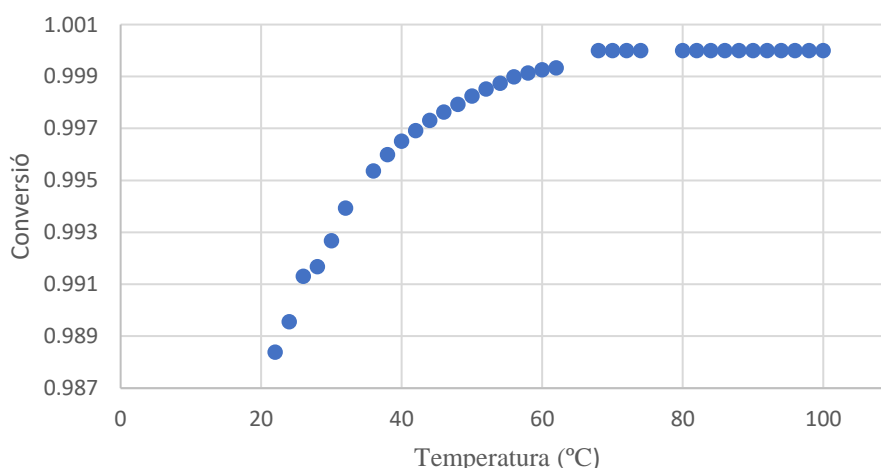


Figura 4.9. Representació de les dades de l'anàlisi de sensibilitat de la conversió d'oxigen en funció de la temperatura d'entrada al reactor.

4.5.3.2 Full d'especificacions

1	GENERAL	Manufacturer:				
2		Item: Reactor R-101				
3		Descriptio: Adiabatic reactor PBR		Position:	Horiz.	X Vertical
4	OPERATING	Product: Hydrogen				
5		Operating Pressure (eff.)	31 bar			
6		Operating Temperature	70 °C			
7		Liquid Density	2.57 kg/m ³			
8	DESIGN DATA	Design Pressure (eff.) 40 bar				
9		Design Temperature 100 °C				
10		Hydrostatic Test (eff.) kg/cm2g				
11		Corr. Allow. Shell / Heads mm				
12		Joint Eff. Shell / Heads				
13		Code: ASME				
14		Radiograph:				
15		Stress Relieve:	36 bar	Yes	X No	
16		Seismic:				
17		Wind Load: N/m ²				
18		Hydrostatic Test (eff.) kg/cm2g				
19	MATERIALS		Thickness	Mat'l Class		
20		Shell	9 mm			
21		Heads	- mm			
22		Lining	- mm			
23		Nozzle Necks	No			
24		Flanges	No			
25	CONSTRUCTION		Dia.	L / H	Material	
26		Shell		2 0.4	Carbon Steel	
27		Heads		- -	Carbon steel	
28		Insulation:	X	Yes	No	
29		Fireproofing:	X	Yes	No	
30		Sandblast:	X	Yes	No	
31		Paint:	X	Yes	No	
32		Wt. Empty: kg				
33		Wt. Full Water: kg				
34	NON INZUFFICIENTE SCHEMATA	Service	Mark	Nº	Size	Rating
35		Process	A		4'	
36		Instrumentation	B		2'	
37		Free	C		4'	
38		Instrumentation	D		2'	
39		PSV	E		4'	
40		Process	F		4'	
41		Instrumentation	G		2'	
42		Free	H		2'	
43	Instrumentation	I		2'		
44		NOTES:				
45						
46						
47						
48						
49						
			Realitzat	Aprovat		
REV. 1	15/07/2024	Pau Costa		Ainoa Vigo		

REACTOR SKETCH

R-101

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI
Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química
Departament d'Enginyeria Química

Figura 4.10. Fulla d'especificacions del reactor R-101.

4.5.4. Bescanviador E-101 i E-201

Davant de la necessitat del procés de refredar la corrent principal després del seu pas pel reactor R-101 (apartat 4.5.3), es proposa una combinació de dos bescanviadors en sèrie: un d'aigua procedent de torre de refrigeració i un segon d'aigua freda. La corrent surt de l'etapa anterior a 72.14°C i es necessari baixar-la fins aproximadament uns 20°C per assegurar una millor separació en les etapes posteriors (S-201).

Al tractar-se d'un interval de temperatura important, i basant-nos en els criteris d'eficiència energètica, la primera etapa redueix significativament la càrrega tèrmica que ha de manejar el sistema d'aigua freda en la segona etapa, optimitzant el consum d'energia i els costos operatius. D'aquest forma, s'aprofiten les fonts de refredament disponibles de forma eficient.

Introduir dos equips per al refredament de la corrent també ens assegura un refredament estable, i eficient, complint així amb els requisits específics necessaris per al procés.

4.5.4.1 Dimensionament

Tots dos bescanviadors (E-101 i E-201) s'han dimensionat amb el simulador *Aspen Hysys Exchanger Design*. El software simula a partir de les propietats fisicoquímiques i de composició tant de la corrent a refredar com el fluid refrigerant.

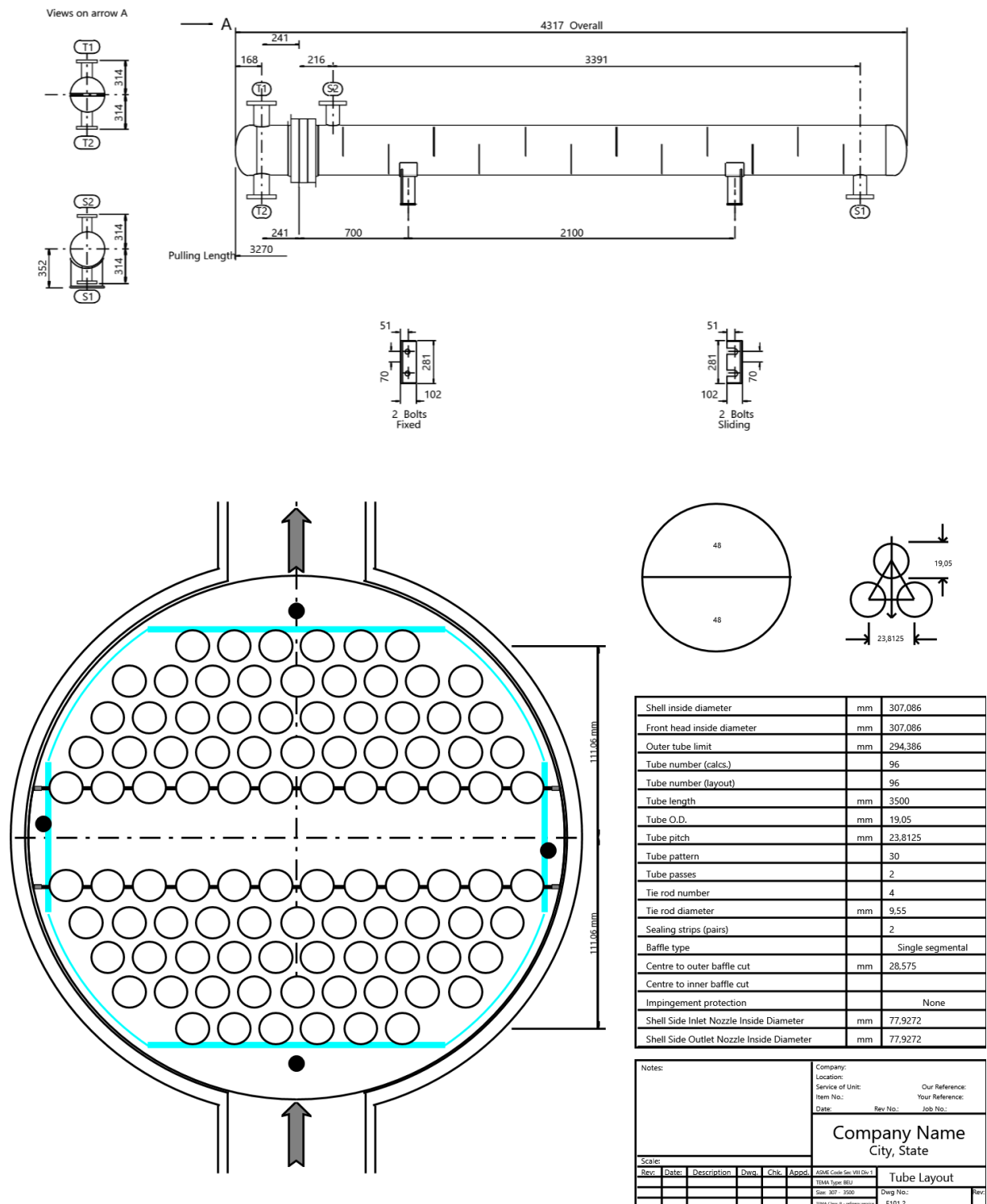


Figura 4.11. Dimensions i LayOut dels tubs del bescanviador BEU E-101.

En aquest cas, es tracta d'un bescanviador tipus BEU (veure Alternatives de Procés 2.6.6.2).

El cost total de l'equip està estimat en 15,318.00 €, estrictament relacionat amb la massa de l'equip buit 784.10 kg.

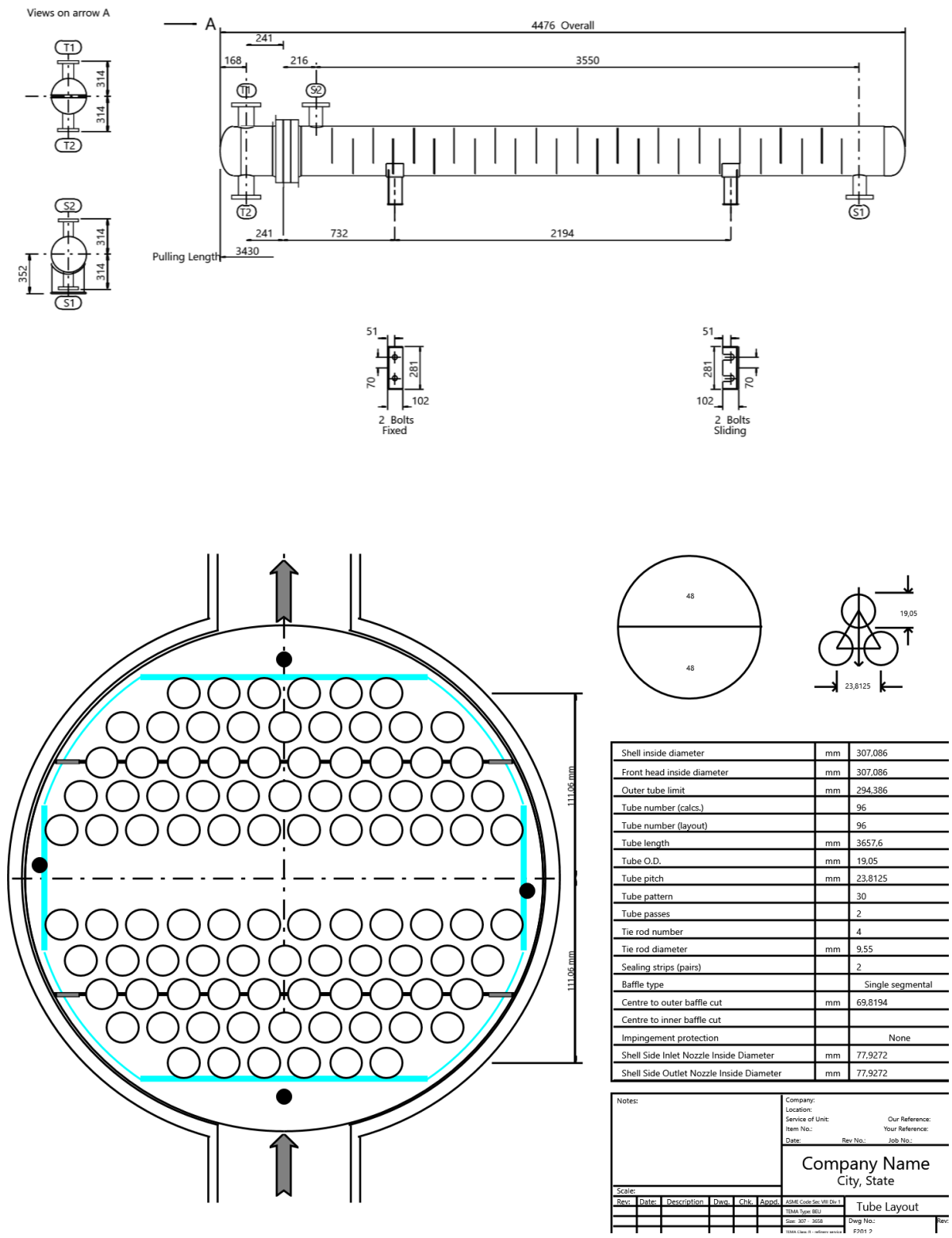


Figura 4.12. Dimensions i LayOut dels tubs del bescanviador BEU E-201.

En aquest cas, es tracta d'un bescanviador tipus BEU (veure Alternatives de Procés 2.6.6.2).

El cost total de l'equip està estimat en 16,051.00 €, estrictament relacionat amb la massa de l'equip buit 824.70 kg.

4.5.4.2 Full d'especificacions

A continuació, trobem la fulla d'especificacions del bescanviador E-101. Aquest es el primer de la sèrie de dos i empra com a fluid refrigerant aigua de torre de refrigeració.

Heat Exchanger Specification Sheet														
1	Company:													
2	Location:													
3	Service of Unit:				Our Reference:									
4	Item No.: E-101		Your Reference:											
5	Date:	Rev No.:	Job No.:											
6	Size	305 -	3500 mm	Type	BEU	Hor	Connected in	1 parallel	1 series					
7	Surf/unit(eff.)	20.4	m ²	Shells/unit	1	Surf/shell (eff.)	20.4	m ²						
8	PERFORMANCE OF ONE UNIT													
9	Fluid allocation			Shell Side			Tube Side							
10	FluidName			water			hydrogen							
11	Fluid quantity, Total			kg/s			6.9866							
12	Vapor (In/Out)			kg/s			0 0 0.0145 0.0145							
13	Liquid			kg/s			6.9866 6.9866 0 0							
14	Noncondensable			kg/s			0 0.6244							
15														
16	Temperature (In/Out)			°C			27 35.92 72.14 43							
17	Bubble / Dew point			C			/ / -197.77 / 43 -197.8 / 42.9							
18	Density (Vap / Liq)			kg/m ³			/ 997.94 / 995.83 2.22 / 2.41 /							
19	Viscosity			mPa-s			/ 0.8561 / 0.7064 0.0091 / 0.0081 /							
20	Molecular wt, Vap						2.06 2.06							
21	Molecular wt, NC						2.02							
22	Specific heat			kJ/(kg-K)			/ 4.191 / 4.189 14.075 / 13.986 /							
23	Thermal conductivity			W/(m-K)			/ 0.6031 / 0.6147 0.2032 / 0.1917 /							
24	Latent heat			kJ/kg										
25	Pressure (abs)			bar			4.4 4.34547 30.9789 30.82238							
26	Velocity (Mean/Max)			m/s			0.46 / 0.89 33.25 / 34.69							
27	Pressure drop, allow / calc.			bar			0.49987 0.05453 0.40979 0.15652							
28	Fouling resistance (min)			m ² -K/W			0.0004 0.0005 0.00064 Ao based							
29	Heat exchanged			261.2 kW			MTD corrected 22.81 °C							
30	Transfer rate, Service			561.3 Dirty			561.3 Clean 1352.5 W/(m ² -K)							
31	CONSTRUCTION OF ONE SHELL													
32							Sketch							
33	Design/vac/test pressure-g			bar			5.5158 / / 34.474 / /							
34	Design temperature / MDMT			°C			76.67 / / 110 / /							
35	Number passes per shell			1			2							
36	Corrosion allowance			mm			3.18 3.18							
37	Connections			In mm			1 77.9 / - 1 90.12 / -							
38	Size/rating			Out			1 77.9 / - 1 90.12 / -							
39	ID			Intermediate			/ - / -							
40	Tube No.	48	U's	OD	19.05	Tks- Avg	2.11	mm	Length	3500	mm	Pitch	23.81	mm
41	Tube type	Plain		#/m	Material			Carbon Steel		Tube pattern		30		
42	Shell	Carbon Steel		ID	307.1	OD	323.85	mm	Shell cover	Carbon Steel				
43	Channel or bonnet	Carbon Steel		Channel cover		-								
44	Tube sheet-stationary	Carbon Steel		Tube sheet-floating		-								
45	Floating head cover	-		Impingement protection		None								
46	Baffle-cross	Carbon Steel		Type	Single segmer		Cut(%d)	40.7	H	Spacing: c/c	292.1 mm			
47	Baffle-long	-		Seal type		Inlet 0 mm								
48	Supportstube	-		UBend		0		Type						
49	Bypass seal	-		Tube-tubesheet joint		Exp. 2 grv								
50	Expansion joint	-		Type		None								
51	RhoV2-Inlet nozzle	2150		Bundle entrance		250		Bundle exit		141 kg/(m ² -s)				
52	Gaskets - Shell side	Flat Metal Jacket Fibe		Tube Side		Flat Metal Jacket Fibe								
53	Floating head	-												
54	Code requirements	ASME Code Sec VIII Div 1				TEMA class		R - refinery service						
55	Weight/Shell	784.1		Filled with water		1052.4		Bundle		352.5 kg				
56	Remarks													
57														
58														

Figura 4.13. Fulla d'especificacions del bescanviador de calor E-101.

A continuació, trobem la fulla d'especificacions del bescanviador E-201. Aquest es el segon de la sèrie de dos i empra com a fluid refrigerant aigua freda.

Heat Exchanger Specification Sheet											
1	Company:										
2	Location:										
3	Service of Unit:					Our Reference:					
4	Item No.: E-201					Your Reference:					
5	Date:		Rev No.:		Job No.:						
6	Size		305 -		3657.6 mm		Type	BEU		Hor	
7	Surf/unit(eff.)		21.3		m ²		Shells/unit	1		Surf/shell (eff.)	
8							Connected in	1		parallel	
9								1		series	
10	PERFORMANCE OF ONE UNIT										
11	Fluid allocation			Shell Side				Tube Side			
12	FluidName			water				hydrogen			
13	Fluid quantity, Total			kg/s				6.0163			
14	Vapor (In/Out)			kg/s				0			
15	Liquid			kg/s				6.0163			
16	Noncondensable			kg/s				0			
17	Temperature (In/Out)			°C				5			
18	Bubble / Dew point			C				/			
19	Density (Vap / Liq)			kg/m ³				/ 998.14			
20	Viscosity			mPa-s				/ 1.5466			
21	Molecular wt, Vap							2.05			
22	Molecular wt, NC							2.03			
23	Specific heat			kJ/(kg-K)				/ 4.2			
24	Thermal conductivity			W/(m-K)				/ 0.5731			
25	Latent heat			kJ/kg				/ 4.196			
26	Pressure (abs)			bar				4.4			
27	Velocity (Mean/Max)			m/s				0.47			
28	Pressure drop, allow./calc.			bar				0.49987			
29	Fouling resistance (min)			m ² -K/W				0.0004			
30	Heat exchanged			kW				227.3			
31	Transfer rate, Service			546.8				Dirty			
32								555.1			
33								Clean			
34								1317			
35								W/(m ² -K)			
36	CONSTRUCTION OF ONE SHELL										
37				Shell Side				Tube Side			
38	Design/vac/test pressure.g			bar				5.5158			
39	Design temperature / MDMT			°C				54.44			
40	Number passes per shell							1			
41	Corrosion allowance			mm				3.18			
42	Connections			In mm				1			
43	Size/rating			Out				1			
44	ID			Intermediate				/			
45	Tube No.			48				U's			
46	Tubetype			Plain				#/m			
47	Shell			Carbon Steel				ID			
48	Channel or bonnet			Carbon Steel				OD			
49	Tubesheet-stationary			Carbon Steel				307.1			
50	Floating head cover			-				323.85			
51	Baffle-cross			Carbon Steel				mm			
52	Baffle-long			-				mm			
53	Supporttube			-				mm			
54	Bypass seal			-				mm			
55	Expansion joint			-				mm			
56	RhoV2-Inlet nozzle			1594				mm			
57	Gaskets - Shell side			Flat Metal Jacket Fibe				mm			
58	Floating head			-				mm			
59	Code requirements			ASME Code Sec VIII Div 1				TEMA class			
60	Weight/Shell			824.7				kg			
61	Remarks										
62											
63											
64											
65											
66											
67											
68											
69											
70											
71											
72											
73											
74											
75											
76											
77											
78											
79											
80											
81											
82											
83											
84											
85											
86											
87											
88											
89											
90											
91											
92											
93											
94											
95											
96											
97											
98											
99											
100											

Figura 4.14. Fulla d'especificacions del bescanviador de calor E-201.

4.5.5. Bescanviador E-301

Per tal de poder recircular la corrent de la regeneració altre cop a l'entrada del cicle, es necessari disminuir la temperatura a una mes afina. D'aquesta forma també s'accentua la posterior separació en l'equip S-301.

En aquest cas, ens trobem amb l'interval de temperatura més gran de tot el procés. Cal baixar des dels 140°C fins a uns 20°C.

En aquest cas i com que la corrent no es molt gran, s'opta per un únic equip BEM amb aigua freda com a fluid de refrigeració.

4.5.5.1 Dimensionament

Aquest bescanviador E-301, de la mateixa forma que els anteriors (E-101 i E-201) s'ha dimensionat amb el simulador *Aspen Hysys Exchanger Design*. El software simula a partir de les propietats fisicoquímiques i de composició tant de la corrent a refredar com el fluid refrigerant

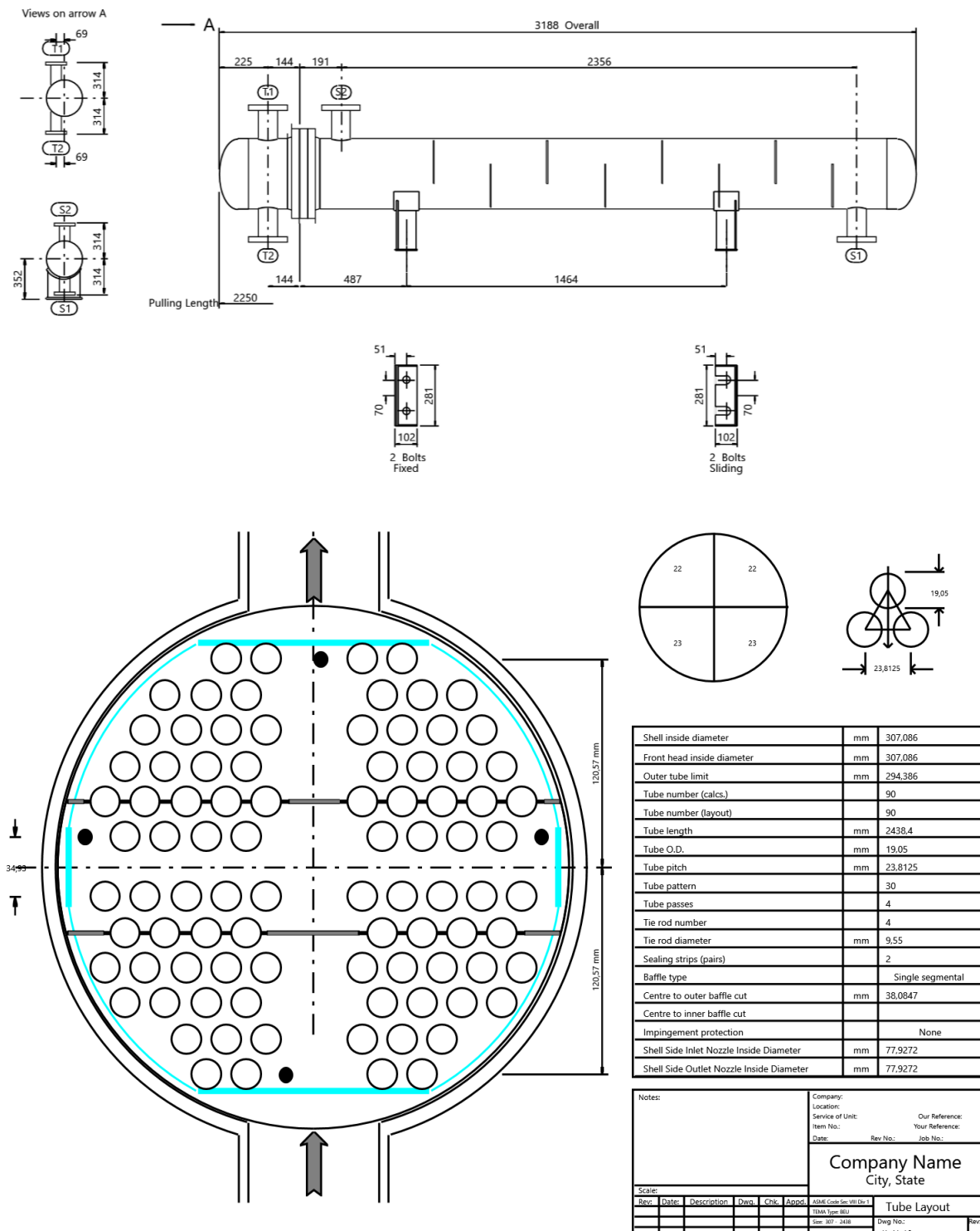


Figura 4.15. Dimensions i LayOut dels tubs del bescanviador BEU E-301..

En aquest cas, es tracta d'un bescanviador tipus BEU (veure Estudi d'alternatives; 2.6.6.2. Equips de refredament.).

El cost total de l'equip està estimat en 19,793.00 €, estrictament relacionat amb la massa de l'equip buit 557.20 kg.

4.5.5.2 Full d'especificacions

A continuació, trobem la fulla d'especificacions del bescanviador E-301.

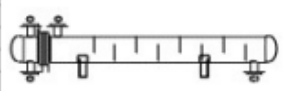
Heat Exchanger Specification Sheet															
1	Company:														
2	Location:														
3	Service of Unit:				Our Reference:										
4	Item No.: E-301				Your Reference:										
5	Date:	Rev No.:	Job No.:												
6	Size	305 - 0	2438.4 mm	Type	BEU	Hor	Connected in	1 parallel	1 series						
7	Surf/unit(eff.)	13.5 m ²		Shells/unit	1		Surf/shell (eff.)	13.5 m ²							
8	PERFORMANCE OF ONE UNIT														
9	Fluid allocation			Shell Side			Tube Side								
10	FluidName			water			hydrogen								
11	Fluid quantity, Total			kg/s			7.0145								
12	Vapor (In/Out)			kg/s			0 0 0.0042 0.0035								
13	Liquid			kg/s			7.0145 7.0145 0 0.0007								
14	Noncondensable			kg/s			0 0.1528								
15	Temperature (In/Out)			°C			5 14 139.85 19.99								
17	Bubble / Dew point			C			0 / 0 0 / 0 -180.85 / 23.24 -181.3 / 22.85								
18	Density (Vap / Liq)			kg/m ³			0 / 998.14 0 / 999.01 0.54 / 0 0.74 / 967.89								
19	Viscosity			mPa-s			0 / 1.5466 0 / 1.1934 0.011 / 0 0.0072 / 0.9107								
20	Molecular wt, Vap						0 2.07 2.06								
21	Molecular wt, NC						0 2.02								
22	Specific heat			kJ/(kg-K)			0 / 4.2 0 / 4.196 14.169 / 0 13.838 / 4.219								
23	Thermal conductivity			W/(m-K)			0 / 0.5731 0 / 0.5855 0.2268 / 0 0.1807 / 0.5927								
24	Latent heat			kJ/kg			0 0 2494.8 2490								
25	Pressure (abs)			bar			4.4 4.35432 9 8.78441								
26	Velocity (Mean/Max)			m/s			0.27 / 0.53 62.84 / 76.3								
27	Pressure drop, allow./calc.			bar			0.49987 0.04568 0.25855 0.21559								
28	Fouling resistance (min)			m ² -K/W			0.0004 0.0005 0.00064 Ao based								
29	Heat exchanged			265 kW			MTD corrected 46.62 °C								
30	Transfer rate, Service			420.1 Dirty			477.8 Clean 951.6 W/(m ² -K)								
31	CONSTRUCTION OF ONE SHELL														
32	Shell Side						Tube Side			Sketch 					
33	Design/vac/test pressure:g bar						5.5158 / 0 / 0 10.342 / 0 / 0								
34	Design temperature / MDMT °C						54.44 / 0 176.67 / 0								
35	Number passes per shell						1 4								
36	Corrosion allowance mm						3.18 3.18								
37	Connections In mm						1 77.9 / - 1 77.93 / -								
38	Size/rating Out						1 77.9 / - 1 77.93 / -								
39	ID Intermediate						0 / - 0 / -								
40	Tube No.	45	U's	OD	19.05	Tks- Avg	2.11	mm	Length		2438.4	mm	Pitch	23.81	mm
41	Tube type	Plain			0 #/m	Material	Carbon Steel		Tube pattern		30				
42	Shell	Carbon Steel		ID	307.1	OD	323.85		mm	Shell cover	Carbon Steel				
43	Channel or bonnet	Carbon Steel				Channel cover	-								
44	Tubesheet-stationary	Carbon Steel				Tubesheet-floating	-								
45	Floating head cover	-				Impingement protection	None								
46	Baffle-cross	Carbon Steel		Type	Single segmer		Cut(%d)	37.6	H	Spacing: c/c	260.35 mm				
47	Baffle-long	-				Seal type	Inlet 0 mm								
48	Supportstube					UBend	0		Type						
49	Bypass seal					Tube-tubesheet joint	Exp. 2 grv								
50	Expansion joint	-				Type	None								
51	RhoV2-Inlet nozzle	2167		Bundle entrance	326		Bundle exit	31 kg/(m-s ²)							
52	Gaskets - Shell side	Flat Metal Jacket Fibe		Tube Side	Flat Metal Jacket Fibe										
53	Floating head	-													
54	Code requirements	ASME Code Sec VIII Div 1				TEMA class	R - refinery service								
55	Weight/Shell	557.7		Filled with water	759.4		Bundle	236.2 kg							
56	Remarks														
57															
58															

Figura 4.16. Fulla d'especificacions del bescanviador de calor E-301.

4.5.6. Separadors S-201 i S-301

Donada la necessitat de disposar d'un equip amb un volum de control per a realitzar la separació de fases posteriors als intercanviadors E-201 i E-301, es dissenyen els separadors S-201 i S-301. En aquests equips es realitza la condensació de l'aigua present en el corrent d'hidrogen, retirant d'aquesta manera una part important de l'aigua abans d'entrar a les columnes d'adsorció.

4.5.6.1 Dimensionament

El seu disseny s'ha realitzat amb el programa *Aspen Hysys*, on després d'afegir les condicions de procés especificades segons la simulació del procés per a cadascun d'ells s'han trobats els paràmetres de la següent taula. S'ha utilitzat un dipòsit en orientació vertical, de forma cilíndrica plana.

Taula 4.11. Variables de disseny pels separadors de condensació d'aigua.

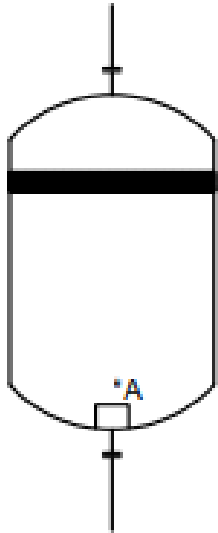
	Volum (m ³)	Altura (m)	Diàmetre (m)
S-201	4.982	4.267	1.219
S-301	3.337	3.374	1.067

Per la normalització del dimensionament d'equips, s'ha decidit que s'utilitzaran 5 i 3.5 m³ pel separador S-201 i S-301, respectivament i 1.5 m de diàmetre per cadascun d'ells. D'aquesta manera es modifica l'alçada en 2.82 i 1.98 m pel S-201 i el S-301.

4.5.6.2 Full d'especificacions

A continuació, trobem el full d'especificacions pels dos separadors que s'han dissenyat en el procés per treure les condensacions d'aigua abans de que l'hidrogen entri a les columnes d'adsorció.

1	GENERAL	Manufacturer:			
2	GENERAL	Item: Separador S-201			
3	GENERAL	Description: Separador de condensació d'aigua	Position:	Horiz.	<input checked="" type="checkbox"/> Vertical
4	OPERATING	Product: Hidrogen			
5	OPERATING	Operating Pressure (eff.)	30.6	bar	
6	OPERATING	Operating Temperature	20	°C	
7	OPERATING	Liquid Density	1012	kg/m ³	
8	DESIGN DATA	Design Pressure (eff.)	kg/cm ² g		
9	DESIGN DATA	Design Temperature	°C		
10	DESIGN DATA	Hidrostatic Test (eff.)	kg/cm ² g		
11	DESIGN DATA	Corr. Allow. Shell / Heads	mm		
12	DESIGN DATA	Joint Eff. Shell / Heads			
13	DESIGN DATA	Code:			
14	DESIGN DATA	Radiograph:			
15	DESIGN DATA	Stress Relieve:	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	
16	DESIGN DATA	Seismic:			
17	DESIGN DATA	Wind Load:	N/m ²		
18	DESIGN DATA	Hidrostatic Test (eff.)	kg/cm ² g		
19	MATERIALS	Thickness	Mat'l Class		
20	MATERIALS	Shell	9 mm		
21	MATERIALS	Heads	- mm		
22	MATERIALS	Lining	- mm		
23	MATERIALS	Nozzle Necks	No		
24	MATERIALS	Flanges	No		
25	CONSTRUCTION	Dia.	L / H	Material	
26	CONSTRUCTION	Shell	2.8 1.5	Carbon steel	
27	CONSTRUCTION	Heads	- -	Carbon steel	
28	CONSTRUCTION	Insulation:	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	
29	CONSTRUCTION	Fireproofing:	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	
30	CONSTRUCTION	Sandblast:	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	
31	CONSTRUCTION	Paint:	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	
32	CONSTRUCTION	Wt. Empty:	kg		
33	CONSTRUCTION	Wt. Full Water:	kg		
34	NONNIZZLE	Service	Mark N°	Size	Rating
35	NONNIZZLE	Process	A	3.5'	
36	NONNIZZLE	Free	B	2'	
37	NONNIZZLE	PSV	C	4'	
38	NONNIZZLE	Free	D	4'	
39	NONNIZZLE	Process	E	4'	
40	NONNIZZLE	Instrumentation	F	2'	
41	NONNIZZLE	Instrumentation	G	2'	
42	NONNIZZLE	Instrumentation	H	2'	
43	NONNIZZLE	Process	I	0.5'	
44	NONNIZZLE	Instrumentation	J	2'	
45	NONNIZZLE	Instrumentation	K	2'	
46	NONNIZZLE				
47	NONNIZZLE				
48	NONNIZZLE				
49	NONNIZZLE				




DRUM SKETCH

S-201

NOTES:			

		Realitzat	Aprovat
REV. 1	15/07/2024	Pau Costa	Ainoa Vigo



UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI
Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química
Departament d'Enginyeria Química

Figura 4.17. Fulla d'especificacions del separador bifàsic S-201.

1	GENERAL	Manufacturer:				
2	GENERAL	Item: Separador S-301				
3	GENERAL	Description: Separador de condensació d'aigua	Position:	Horiz.	X	Vertical
4	OPERATING	Product: Hidrogen				
5	OPERATING	Operating Pressure (eff.)	8.78	bar		
6	OPERATING	Operating Temperature	20	°C		
7	OPERATING	Liquid Density	1011	kg/m ³		
8	DESIGN DATA	Design Pressure (eff.)			kg/cm2g	
9		Design Temperature			°C	
10		Hidrostatic Test (eff.)			kg/cm2g	
11		Corr. Allow. Shell / Heads			mm	
12		Joint Eff. Shell / Heads				
13		Code:				
14		Radiograph:				
15		Stress Relieve:	X	Yes	No	
16	Seismic:					
17	Wind Load:			N/m ²		
18	Hidrostatic Test (eff.)			kg/cm2g		
19	MATERIALS	Thickness	Mat'l Class			
20		Shell	9 mm			
21		Heads	- mm			
22		Lining	- mm			
23		Nozzle Necks	No			
24	Flanges	No				
25	CONSTRUCTION	Dia.	L / H	Material		
26		Shell	1.9	1.5	Carbon steel	
27		Heads	-	-	Carbon steel	
28		Insulation:	X	Yes	No	
29		Fireproofing:	X	Yes	No	
30		Sandblast:	X	Yes	No	
31		Paint:	X	Yes	No	
32		Wt. Empty:			kg	
33	Wt. Full Water:			kg		
34	NON N Z F E S C H E D U C T I O N	Service	Mark	Nº	Size	Rating
35		Process	A		3'	
36		Free	B		2'	
37		PSV	C		4'	
38		Free	D		4'	
39		Process	E		3.5'	
40		Instrumentation	F		2'	
41		Instrumentation	G		2'	
42		Instrumentation	H		2'	
43		Process	I		0.5'	
44		Instrumentation	J		2'	
45	Instrumentation	K		2'		
46		NOTES:				
47						
48						
49						
		Realitzat	Aprovat			
REV. 1	15/07/2024	Pau Costa	Ainoa Vigo			

DRUM SKETCH

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI
Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química
Departament d'Enginyeria Química

Figura 4.18. Fulla d'especificacions del separador bifàsic S-301.

4.5.7. Vàlvules d'expansió V-201 i V-202

Un dels punts més importants d'aquest procés de purificació per les condicions de la nostra entrada, es la pèrdua de pressió necessària que té lloc just abans del cicle d'adsorció.

En aquest cas, ens trobem *a priori* una separació (S-201) que té lloc a més de 30 bars de pressió i un dels requeriments físics per a que l'adsorció *a posteriori* tingui lloc amb èxit es que la corrent a adsorbir es trobi al voltant dels 10 bars.

Es tracta d'una pèrdua de pressió de més de 10 bars. Es per això que just després de la vàlvula d'expansió s'ha comptat amb un recipient per poder dur a terme aquesta caiguda de pressió de forma més controlada (S-202). Aquest recipient també compta amb una purga per evacuar líquids en el cas de que, afavorit pel canvi de pressió, puguin precipitar traces d'aigua.

A més a més, i tractant-se d'un equip tant crític per al correcte funcionament del procés i optimització de recursos, es troba duplicat en paral·lel amb una configuració idèntica.

4.5.7.1 Full d'especificacions

1	GENERAL	Item: VC-202					
2		Service:					
3		Manufacturer:					
4		Quantity:					
5		Type: Pressure expansion controller valve				Model: Piston valve	
6	SERVICE	Vapor or Gas Handled			Drawing		
7		Component 1	Hydrogen	99.41	%		
8		Component 2	Oxygen	0	%		
9		Component 3	Water	0.58	%		
10							
11		Molecular wt.					kg/kmol
12		Density					1.243 kg/m ³
13		Viscosity					8.65E+11 cP
14		Critical Press. (eff.)					kg/cm ² g
15		Critical Temp.					°C
16		Cp/Cv					1.422
17		Compressibility					
18		Inlet Conditions					
19		Weight Flow				2.261 kg/h	
20		Volume Flow				32.19 Nm ³ /h	
21		Pressure				30.63 bar	
22		Temperature				20.01 °C	
23							
24		Discharge Conditions					
25		Pressure				10 bar	
26		Dif. Pressure				20 bar	
27		Estim. Mechanical Efficiency				%	
28		Power (including Gear Loss)				0 kW	
29	Rot. freq.				0 s ⁻¹		
30		ACTION	Mat'l Class				
31	Watertight valve	No					
32	Action on air failure	Close					
33	All/nothing action	No					
34							
35							
36							
37							
38							
39							
40							
41							
42							
43							
44							
45							
46		Service	Mark	Nº	Size	Rating	NOTES:
47	NOZZLES	Inlet	A		4"		
48		Outlet	B		8"		
49							
50							
51							
52							
53							
REV. 1	15/7/2024	Pau Costa	Ainoa Vigo			UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química Departament d'Enginyeria Química	

Figura 4.19. Fulla d'especificacions de la vàlvula d'expansió.

4.5.8. Compresor C-301

Degut a la pèrdua de càrrega de pressió que pateix la corrent al cicle de regeneració de les columnes i la posterior recirculació d'aquest corrent a l'entrada de la columna que s'està adsorbint, es requereix d'aquest equip per elevar la pressió segons les condicions d'operació de les columnes d'adsorció.

Es disposarà d'un compresor tipus axial que treballarà amb paletes per impulsar el gas d'entrada. Les paletes es disposaran tan en el rotor, per aportar energia cinètica al fluid, com al estator, per generar l'augment de pressió necessari.

Com la pèrdua de pressió a través de les columnes no és gran, el C-301 no representa un equip crític en el seu procés, però sí que n'és necessari el seu ús i per això en el següent apartat se'n mostra el full d'especificacions.

4.5.8.1 Dimensionament

Pel dimensionament del C-301 s'ha utilitzat el programa *Aspen Hysys*, el qual ha servit per treure les dades de potència necessària i propietats que tindran el fluid quan aquest passi per dins l'equip. També s'han determinat les connexions que haurà de tenir en funció dels cabals de matèria que li arribin i l'eficiència mecànica que tindrà aquest.

4.5.9. Columnes d'adsorció T-401 i T-402

4.5.9.1 Dimensionament

El disseny d'un sistema TSA depèn de diversos factors, incloent-hi la composició de la mescla de gasos, les propietats de l'adsorbent, la puresa i el cabal desitjats del gas producte. La mida del llit adsorbent i el nombre de llits utilitzats en el sistema dependran del cabal desitjat i del temps del cicle del procés. El dimensionament correcte d'una columna d'adsorció, es vital per assegurar un funcionament eficient i de manera efectiva [9][23].

Per al disseny d'un sistema TSA, es poden fer diversos supòsits per simplificar el modelatge i l'anàlisi del procés, tot mantenint una precisió i practicitat raonables. Aquests supòsits es basen en el coneixement i els diferents estudis en el sector de la separació de gasos. A continuació es presenten alguns dels supòsits que s'han considerat per aquest procés:

- Comportament de gas ideal: Es considera que la mescla de gasos segueix la llei dels gasos ideals, negligint els comportaments no ideals que podrien aparèixer a altes pressions
- Equilibri d'adsorció: Es considera que el procés d'adsorció arriba a l'equilibri termodinàmic amb una isoterma constant
- Geometria idealitzada del Llit: Es simplifiquen les formes dels llits amb distribució de flux uniforme
- Adsorció d'un sol component: Es considera l'adsorció selectiva d'un component, ignorant les interaccions entre altres components
- Operació semi estacionària: Es considera que el sistema TSA opera en un estat on la temperatura i la concentració presenten variacions lentes, que permeten l'anàlisi en estat estacionari per a cada fase del cicle.
- Comportament Homogeni del Llit: Es considera una concentració uniforme a través del llit adsorbent.
- Isoterma lineal a baixes concentracions: A baixes concentracions del component adsorbit, es pot suposar que la isoterma d'adsorció segueix una relació lineal (Llei de Henry)
- Eficàcia de la Regeneració: Es suposa que el procés té una regeneració del 100%.
- No reaccions Químiques: no hi ha reaccions químiques entre el gas i l'adsorbent o entre els components del gas durant el procés d'adsorció i desorció.
- Selecció velocitat superficial: Per a gasos, les velocitats solen ser més altes que per a líquids a causa de les seves taxes de difusió més ràpides, que resulten en temps de contracte més curts. Les velocitats típiques per a gasos varien entre 0.15 i 0.6 m/s. Per al dimensionament de la columna s'ha determinat 0.5 m/s.

El cabal i la composició de la mescla s'ha extret del balanç de matèria, on després de la separació prèvia, la corrent d'hidrogen té una impuresa de 0.55% en pes d'aigua i un cabal de 2,260 kg/h. Després de la etapa d'adsorció es vol purificar l'hidrogen fins a una puresa del 99.999%.

Taula 4.12. Suposicions en el dimensionament de les columnes d'adsorció T-401 i T-402.

Dades	Valor
Velocitat	0.5 m/s
Pressió entrada	10 bar
Temperatura entrada	213.15 K
Eficiència regeneració	100%
Capacitat requerida	894.7 m ³ /h
Capacitat requerida	2,260 kg/h
Fracció màssica impuresa	0.55%
Temps cicle	48h
Estàndard industrial sílice gel 3A	0.2 kg H ₂ O/kg adsorbent

Tenint en compte la capacitat del adsorbent de sílica gel del tipus 3A i considerant un temps necessari per saturar l'adsorbent de dos dies, s'ha obtingut el dimensionament de les columnes d'adsorció a partir dels càlculs detallats al Annex 2.2.1. Càlcul Dimensionament.

Taula 4.13. Resultats dimensionament columnes adsorció T-401 i T-402.

Equip	Longitud	Diàmetre
Columna Adsorció	6m	0.8m

4.5.9.2 Simulació

Un cop s'ha calculat una primera aproximació del disseny de la columna, s'ha realitzat una simulació més aproximada i acurada del procés d'adsorció amb el programa *Aspen Adsorption*. A partir de les isoterms d'operació, el simulador és capaç de calcular el comportament del procés i obtenir resultats [24][25].

Com s'ha comentat al llarg del anterior apartat, al treballar a concentracions baixes del component adsorbit, s'ha suposat un comportament de l'aigua que segueix una relació lineal a partir de la llei de Henry. Pel que respecta al H₂ que és el component que es vol purificar, s'ha considerat que no hi ha cap tipus d'interacció amb l'adsorbent.

Taula 4.14. Paràmetres isoterms Llei de Henry

Component	Paràmetre isoterma (IP1)	Paràmetre isoterma (IP2)
Aigua	$1,23 \cdot 10^{-8}$	5293

Un cop dibuixat el procés al simulador, es caracteritza la columna amb les característiques del adsorbent, com es mostra en el Annex 2.2.2. Simulació.

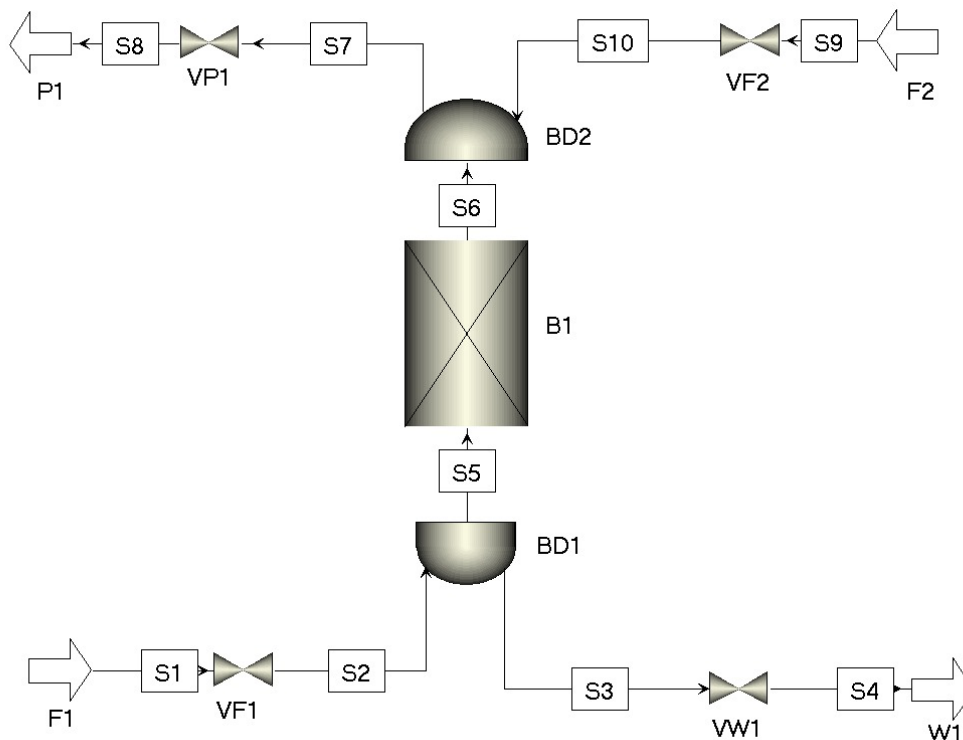


Figura 4.21. Esquema procés TSA amb Aspen Adsorption.

Un cop establert el procés, s’inicia la simulació amb el temps aproximat obtingut dels càlculs del dimensionament. Amb la concentració de l’aigua i hidrogen al llarg del temps, s’obté la *Breakthrough Curve* que permet determinar el temps necessari per al canvi de cicle. S’observa que els resultats de la simulació s’aproximen als valors determinats prèviament. Degut a la puresa que es vol obtenir, el canvi de cicle es duu a terme molt més aviat. Concretament el cicle d’adsorció tindrà una durada de 4.2h, ja que a partir d’aquest punt encara que l’adsorbent encara no estigui saturat, la puresa ja està per sota de les especificacions.

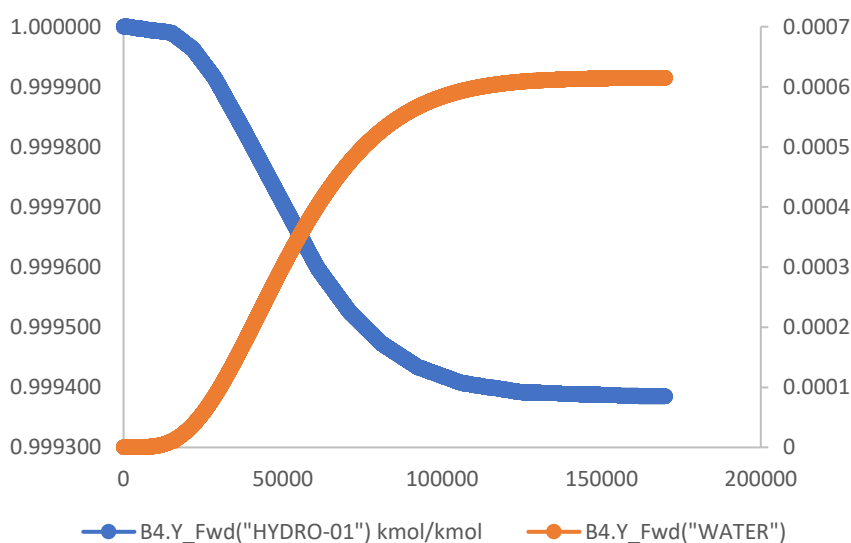


Figura 4.22. Corba de trencament mescla hidrogen aigua en sílice gel del tipus 3A.

Per la part de la regeneració es recircula una part del corrent purificat, on aquest s'escalfa a 413K amb una resistència i es fa passar per la columna que s'està regenerant a contra-corrent. Per assegurar la desorció d'un 100% s'ha escollit la opció de recircular el corrent purificada i no de la corrent d'alimentació, ja que l'alimentació conté les impureses que encara no s'han separat. Si es recircula la alimentació, pot ser que no sigui completa perquè les impureses de la pròpia corrent recirculada es vagin adsorbint un cop es va dessaturant el propi adsorbent. A més es fa passar a contra-corrent perquè és més efectiu que no pas a co-corrent. La temperatura de regeneració la marca el propi adsorbent tipus 3A, que dins del interval de desorció és la temperatura més conservadora, podent garantir d'aquesta manera la regeneració que s'ha marcat com a objectiu.

El cabal de recirculació s'ha fixat en un 20% de la corrent de purificada, obtenint d'aquesta manera un *recovery* d'un 80%. Bibliogràficament s'ha trobat que es pot arribar a aconseguir un 86% de *recovery* en aquests tipus de procés, per a aquest cas s'ha establert en una mica menys per a que sigui més conservador i poder garantir una regeneració efectiva.

Pel que fa als temps de les etapes d'escalfament i refredament s'ha suposat que ambdues etapes corresponen a T/2 de l'etapa d'adsorció, consideració bastant comú respecte aquest tipus de procés. En la part de regeneració es pot considerar que serà suficient, ja al suposar la temperatura més conservadora, la corrent estarà prou calenta com per afavorir la regeneració.

Taula 4.15. Cicles procés TSA

Etapa	Temps cicle	Temps corresponent
Adsorció	T	4h i 15 min
Regeneració	T/2	2h i 07 min
Refredament	T/2	2h i 08 min

4.6. Llistat de vàlvules

A continuació, es mostra el llistat De vàlvules presents al llarg del procés amb les característiques més rellevants. El llistat es troba dividit per P&ID's.

Totes les vàlvules que en quant a característiques son iguals, s'ha optat per no incloure-les en el llistat.

Taula 4.16. Llistat de vàlvules corresponents al P&ID 100.

Nom	Senyal	T_{op} (°C)	P_{op} (bar)	T_d (°C)	P_d (bar)
VM-101	N.A.	40.00	31.01	48.00	46.52
VCH-101	N.A.	40.00	31.01	48.00	46.52
VA-101	D.O.	40.00	31.01	48.00	46.52
VC-101	A.O.	40.00	31.01	48.00	46.52
VM-138	N.A.	70.00	31.01	84.00	46.52
VM-107	N.A.	70.00	31.01	84.00	46.52
VCH-103	N.A.	70.00	31.01	84.00	46.52
VA-102	D.O.	70.00	31.01	84.00	46.52
VC-102	A.O.	70.00	31.01	84.00	46.52
VCH-104	N.A.	72.16	30.98	86.59	46.47
VA-103	D.O.	72.16	30.98	86.59	46.47
VM-115	N.A.	72.16	30.98	86.59	46.47
VM-122	N.A.	27.00	4.40	32.40	6.60
VA-105	D.O.	27.00	4.40	32.40	6.60
VC-103	A.O.	27.00	4.40	32.40	6.60
VM-128	N.A.	37.00	4.40	44.40	6.60

Taula 4.17. Llistat de vàlvules corresponents al P&ID 200.

Nom	Senyal	T_{op} (°C)	P_{op} (bar)	T_d (°C)	P_d (bar)
VM-201	N.A.	20.01	30.63	24.01	45.95
VC-204	A.O.	20.01	30.63	24.01	45.95
VA-204	D.O.	20.01	30.63	24.01	45.95
VM-209	C.S.O.	20.01	30.63	24.01	45.95
VM-211	N.A.	20.01	30.63	24.01	45.95
VCH-202	N.A.	20.01	30.63	24.01	45.95
VA-201	D.O.	20.01	30.63	24.01	45.95
VC-202	A.O.	20.01	30.63	24.01	45.95
VM-213	N.A.	20.41	10.00	24.49	15.00
VM-205	N.A.	20.01	30.63	24.01	45.95
VM-219	N.A.	5.00	4.44	6.00	6.66
VA-203	D.O.	5.00	4.44	6.00	6.66
VC-201	A.O.	5.00	4.44	6.00	6.66
VM-225	C.S.O.	14.00	4.44	16.80	6.66

Taula 4.18. Llistat de vàlvules corresponents al P&ID 300.

Nom	Senyal	T_{op} (°C)	P_{op} (bar)	T_d (°C)	P_d (bar)
VM-301	N.A.	19.99	8.78	23.99	10.28
VM-305	N.A.	19.99	8.78	23.99	10.28
VA-301	D.O.	19.99	8.78	23.99	10.28
VC-302	A.O.	19.99	8.78	23.99	10.28
VCH-302	N.A.	19.99	8.78	23.99	10.28
VCH-303	N.A.	33.22	10.00	39.86	11.50
VM-309	N.A.	33.22	10.00	39.86	11.50
VM-312	N.A.	33.22	10.00	39.86	11.50
VC-303	A.O.	33.22	10.00	39.86	11.50
VA-302	D.O.	33.22	10.00	39.86	11.50
VCH-304	N.A.	33.22	10.00	39.86	11.50
VM-310	N.A.	33.22	10.00	39.86	11.50

Taula 4.19. Llistat de vàlvules corresponents al P&ID 400.

Nom	Senyal	T_{op} (°C)	P_{op} (bar)	T_d (°C)	P_d (bar)
VM-401	N.A.	22.97	10.00	27.56	15.00
VCH-401	N.A.	22.97	10.00	27.56	15.00
VA-401	D.O.	22.97	10.00	27.56	15.00
VM-415	N.A.	131.56	9.00	157.87	13.50
VCH-404	N.A.	131.56	9.00	157.87	13.50
VA-404	D.O.	131.56	9.00	157.87	13.50
VM-421	C.S.O.	131.56	10.00	157.87	15.00
VM-431	N.A.	22.97	9.50	27.56	14.25
VCH-407	N.A.	22.97	9.50	27.56	14.25
VA-407	D.O.	22.97	9.50	27.56	14.25
VC-401	A.O.	22.97	9.50	27.56	14.25
VA-409	D.O.	22.97	9.50	27.56	14.25
VM-459	N.A.	139.85	9.50	167.82	14.25
VCH-411	N.A.	139.85	9.50	167.82	14.25
VA-412	D.O.	139.85	9.50	167.82	14.25
VM-463	N.A.	22.97	9.50	27.56	14.25
VCH-412	N.A.	22.97	9.50	27.56	14.25
VA-413	D.O.	22.97	9.50	27.56	14.25

4.7. Llistat d'instrumentació

A continuació, es mostra el llistat d'instrumentació present al llarg del procés amb les característiques més rellevants. El llistat es troba dividit per P&ID's.

Mencionar que s'ha contemplat un factor pel marge de seguretat en el disseny de 20% per a la temperatura i 50% bars per a la pressió. La pressió mínima establerta pel disseny es de 4 bars.

Taula 4.20. Llista d'instrumentació del P&ID 100

Nom	Senyal	T_{op} (°C)	P_{op} (bar)	T_d (°C)	P_d (bar)
TIT-101	A.I.	70.00	31.01	84.00	46.52
FIT-101	A.I.	70.00	31.01	84.00	46.52
PIT-101	A.I.	72.16	30.98	86.59	46.47
PIT-102	D.I.	72.16	30.98	86.59	46.47
TIT-102	D.I.	72.16	30.98	86.59	46.47
TIT-103	D.I.	72.16	30.98	86.59	46.47
AT-101	A.I.	72.16	30.98	86.59	46.47
TIT-104	A.I.	43.00	30.98	51.60	46.47
PSV-101	N.A.	40.00	12.00	48.00	18.00
PSV-102	N.A.	72.16	12.00	86.59	18.00
PSV-103	N.A.	40.00	12.00	48.00	18.00

Taula 4.21. Llista d'instrumentació del P&ID 200

Nom	Senyal	T _{op} (°C)	P _{op} (bar)	T _d (°C)	P _d (bar)
TIT-201	A.I.	20.01	30.63	24.01	45.95
LIT-201	A.I.	20.01	30.63	24.01	45.95
LIT-202	A.I.	20.01	30.63	24.01	45.95
PI-201	D.I.	20.01	30.63	24.01	45.95
PIT-202	A.I.	20.41	10.00	24.49	15.00
PIT-203	A.I.	20.41	10.00	24.49	15.00
PSV-201	N.A.	15.00	12.00	18.00	18.00
PSV-202	N.A.	19.99	12.00	23.99	18.00
PSV-203	N.A.	19.99	12.00	23.99	18.00

Taula 4.22. Llista d'instrumentació del P&ID 300

Nom	Senyal	T _{op} (°C)	P _{op} (bar)	T _d (°C)	P _d (bar)
TIT-301	A.I.	19.99	8.78	23.99	13.17
LIT-301	A.I.	19.99	8.78	23.99	13.17
LIT-302	A.I.	19.99	8.78	23.99	13.17
PI-301	D.I.	19.99	8.78	23.99	13.17
PIT-302	D.O.	19.99	8.78	23.99	13.17
PIT-303	D.O.	33.22	10.00	39.86	15.00
IT-301	D.I.	25.00	0.00	30.00	4.00
JT-301	A.I.	25.00	0.00	30.00	4.00
VY-301	D.I.	25.00	0.00	30.00	4.00
PSV-301	N.A.	15.00	12.00	18.00	18.00
PSV-302	N.A.	15.00	12.00	18.00	18.00
PSV-303	N.A.	15.00	12.00	18.00	18.00

Taula 4.23. Llista d'instrumentació del P&ID 400

Nom	Senyal	T_{op} (°C)	P_{op} (bar)	T_d (°C)	P_a (bar)
PIT-401	D.O.	22.97	10.00	27.56	15.00
TIT-401	D.O.	22.97	10.00	27.56	15.00
PIT-402	D.O.	22.97	10.00	27.56	15.00
TIT-402	D.O.	22.97	10.00	27.56	15.00
PIT-403	D.O.	139.85	9.50	167.82	14.25
TIT-403	D.O.	139.85	9.50	167.82	14.25
PIT-404	D.O.	139.85	9.50	167.82	14.25
TIT-404	D.O.	139.85	9.50	167.82	14.25
FT-401	D.O.	22.97	9.50	27.56	14.25
FT-402	D.O.	139.85	9.50	167.82	14.25
TIT-405	D.O.	139.85	9.50	167.82	14.25
IT-401	D.O.	25.00	0.00	30.00	4.00
JT-401	A.O.	25.00	0.00	30.00	4.00
VY-401	D.O.	25.00	0.00	30.00	4.00
AT-401	D.O.	22.97	9.50	27.56	14.25
PSV-401	N.A.	139.85	12.00	167.82	18.00
PSV-402	N.A.	139.85	12.00	167.82	18.00
PSV-403	N.A.	139.85	12.00	167.82	18.00

5. SEGURETAT

5.1. Identificació de perills

La seguretat industrial en el context d'una planta de purificació d'hidrogen que es troba a altes pressions, com la proposada en aquest projecte, requereix una sèrie de consideracions tècniques i uns coneixements profunds per garantir els mínims incidents durant la producció d'hidrogen.

L'hidrogen gas no és tòxic ni tampoc fa olor. Presenta un rang d'inflamabilitat molt ampli, entre el 4% i el 74% de concentració en aire, i requereix molt poca energia per iniciar la combustió (0.02mJ). Això fa que una simple fuga en una canonada pugui inflamar-se només amb l'electricitat estàtica present en la superfície d'aquesta. El seu rang d'explosivitat, trobant-se entre el 18.3% i el 59%, es troba més limitat en comparació amb altres combustibles com la gasolina (que pot explotar en concentracions del 1%). A part, al ser un gas lleuger, tendeix a ascendir i dispersar-se en el ambient, mentre que altres gasos com el propà o vapors de gasolina son més pesats i augmentant el risc d'explosió.

Així doncs, segons el Sistema Mundial Harmonitzat de Classificació i Etiquetatge de Productes Químics, l'hidrogen es classifica com a gas inflamable de categoria 1.

Les frases H que corresponen a aquesta substància, referent a la indicació del perill son la **H220** (*gas extremadament inflamable*) i la **H280** (*Conté gas a pressió, perill d'explosió en cas d'escalfament*).

Les frases P referents als consells de prudència a tenir en compte quan s'utilitza l'hidrogen son la **P210** (*Mantenir lluny de calor, espurnes, flames obertes, superfícies calentes. No fumar*), la **P377** (*En cas d'incendi d'una fuga de gas: No apagar, excepte si la fuga no es pot apagar-se sense perill*), la **P381** (*Eliminar totes les fonts d'ignició si no hi ha perill en fer-ho*) i la **P403** (*Emmagatzemar en un lloc ben ventilat*).

Finalment, en qualsevol etiqueta d'un producte que contingui hidrogen com el produït en el cas d'aquest estudi es mostrarà com a paraula d'advertència "Perill" i es mostraran també els pictogrames de inflamable i gas a pressió.

5.2. Anàlisi de risc (HAZOP)

Amb la intenció de fer un anàlisi exhaustiu i anticipar-nos als futurs esdeveniments que poden tenir lloc al llarg de la producció, s'ha dut a terme un HAZOP. En aquest s'han estudiat possibles casos de fallada del procés, analitzant tant causes com conseqüències i introduint proteccions en els equips amb la fita de mitigar i disminuir al màxim aquestes possibles fallades. En l'Annex 3. Seguretat es mostren els quatre anàlisis HAZOP, un per a cada P&ID.

Els principals riscos identificats en el reactor de desoxidació inclouen la possibilitat de reaccions inesperades a causa d'un excés d'oxigen residual, problemes amb el catalitzador, i la formació de mescles explosives d'hidrogen i oxigen. Al mòdul TSA, les desviacions en la temperatura i pressió, així com possibles fallades en el sistema de control, podrien comprometre l'eficàcia del procés d'adsorció i incrementar els riscos de fugues de gasos o danys en els materials adsorbents.

Tal com s'indica en el HAZOP, s'han proposat mesures preventives i correctives per mitigar aquests riscos, incloent la millora dels sistemes de control i el reforçament d'algunes mesures de seguretat sensibles. La implementació d'aquestes accions garantirà un funcionament més segur i fiable de la planta, alhora que reduirà la probabilitat de

fallades crítiques que podrien afectar tant la seguretat dels treballadors com la integritat del procés.

6. MEDI AMBIENT

6.1. Residus

6.1.1. Catalitzador

El catalitzador emprat en el R-101 ($\text{Pd}/\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$) té una vida útil aproximada d'uns 20 dies. Es pot observar en l'estudi [8] com el rendiment dels catalitzadors de Pd decreix a partir de les 500 hores. Així doncs, tenint en compte que la capacitat operativa de la planta son 360 dies l'any i que la càrrega de catalitzador en el reactor de desoxidació (R-101) es de 350kg, es calcula que s'utilitzaran 6,300kg de $\text{Pd}/\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ a l'any.

Tot i així, després de ser oxidat i desactivat, aquest podrà ser regenerat en un procés de reducció a baixa temperatura. D'aquesta manera, aprofitant també els alts costos d'aquest material, es proposa un procés de regeneració que es durà a terme per un proveïdor extern en el qual es reutilitzarà la gran majoria del catalitzador. Reduint així l'impacte ambiental d'aquest residu.

6.1.2. Adsorbent

La vida útil de l'adsorbent de sílice gel del tipus 3A en un procés per oscil·lació de temperatura (TSA) amb una regeneració a 413.15K pot variar depenent de diversos factors, però en termes generals, es pot esperar una vida útil d'entre 3 i 5 anys.

6.2. H₂ gris vs. H₂ blau vs. H₂ verd

En general, tot i que l'hidrogen gris és l'opció més econòmica, el seu impacte ambiental és significatiu. L'hidrogen blau per altra banda, ofereix un equilibri entre reducció d'emissions i costos, però encara depèn dels combustibles fòssils.

L'hidrogen verd, encara que actualment és el més costós, representa la ruta més sostenible per a la producció d'hidrogen degut al seu mínim impacte ambiental i el seu potencial per aprofitar les energies renovables.

Taula 6.1. Comparació d'H₂ gris, blau i verd.

	Producció	Impacte Ambiental	Cost	Comentari
Gris	Reformació de vapor de gas natural	Emissions de CO ₂ emeses a l'atmosfera	€	És l'opció més econòmica però el seu impacte ambiental es significatiu
Blau	Reformació de vapor de gas natural	Emissions de CO ₂ capturades	€€	Ofereix un equilibri entre emissions i costos però encara depèn de combustibles fòssils
Verd	Electròlisi amb electricitat d'energies renovables		€€€	Promou la transició cap a sistemes més sostenibles

7. AVALUACIÓ ECONÒMICA

7.1. Estimació de la inversió inicial

En aquest apartat, es durà a terme un breu anàlisi econòmic del procés estudiat en aquest projecte, de la purificació d'hidrogen verd a través de un cicle d'adsorció TSA. Tots els càlculs s'han fet contemplant que la planta operarà 360 dies/any a 3 torns (24h).

Per al càlcul d'estimació de costos de totes les partides que es troben en la següent taula, s'ha consultat el llibre *Turton* [26] o, en alguns casos en que es disposava de la informació, el cost dels equips donats pel fabricant, instrumentació, vàlvules...

A continuació es mostra el cost de cada equip del procés dissenyat amb la informació pertinent. Cal tenir en compte que en el cas particular de les resistències, el *Turton* no té constants per poder fer un càlcul pertinent. Per aquest motiu, s'ha suposat que el cost serà equivalent al cost que podria tenir un bescanviador de *steam boiler*.

Taula 7.1. Resultat de càlcul dels costos dels equips del procés

Equip	Descripció	Origen Càlcul	Cost \$
R-101	Reactor	<i>Cost Capital</i>	32,700.00
W-101 i W-401	Resistències Elèctriques	<i>Cost Capital</i>	60,000.00
E-101	Bescanviador TW	<i>Aspen EDR</i>	15,318.00
E-201	Bescanviador CW	<i>Aspen EDR</i>	16,051.00
S-201	Separador bifàsic	<i>Turton</i>	36,056.77
S-202	Separador	<i>Turton</i>	12,176.59
T-401	Torre Adsorció	<i>Cost Capital</i>	145,800.00
T-402	Torre Adsorció	<i>Cost Capital</i>	145,800.00
E-301	Bescanviador CW	<i>Aspen EDR</i>	13,503.00
S-301	Separador bifàsic	<i>Turton</i>	11,122.68
C-301	Compressor	<i>Turton</i>	11,468.62
TOTAL			499,996.66

Només en equips, la instal·lació ascendeix a 499,996.66\$ (458,712.53€). Es un cost que no sorprèn per ser elevat, doncs els equips tenen una tendència a ser més petits i això repercuteix al preu.

Pel que fa a *utilities*, de procés, s'ha contemplat el cost de l'electricitat (tenint en compte que aquesta serà d'origen renovable i per tant, més cara que la convencional) i un consum igual al de les resistències elèctriques W-101 i W-401 més el consum del compressor C-301 (un total de 630 kWh).

Taula 7.2. Resultats de càlcul de les *utilities* necessàries.

Ítem	Cost Ud. (€/m ³ o €/kWh)	Consum / h (m ³ /h - kWh)	Consum / any	Cost \$
N ₂ *	2,941.00	3.47	1,333.33	5,276.86
Electra	0.150	630.00	5,443,200.00	889,963.20
Aigua TW	0.743	25.15176	217,311.2064	175.99
Aigua CW	1.490	46.91088	405,310.0032	656.50
TOTAL				896,072.55

* Per al N₂ s'ha suposat una capacitat de treball únic amb inertització de 15 dies al any durant 24h. Aquest temps ha de ser molt més que el necessari per inertitzar durant manteniments i sempre que sigui necessari.

A partir de les llistes de vàlvules i instrumentació i preu aproximat, també s'ha pogut fer una estimació d'aquesta partida de despeses. En aquest cas la xifra seria de 120,650.00 € per a les vàlvules i 15,200€ per a la part instrumental. Es tracta d'un procés que compta amb gran quantitats de vàlvules pels pocs equips que participen en aquest i això provoca que aquesta partida sigui més alta d l'esperada en proporció.

A continuació, es mostra una taula resum de totes les partides que s'han considerat en aquesta estimació inicial.

Taula 7.3. Costos de totes les partides.

Partida	Despesa (\$)	Despesa (€)
Equips	499,996.66	458,712.53
Utilities	896,072.55	822,084.91
Vàlvules	109,155.83	100,423.36
Instrumentació	12,432.15	11,437.58
TOTAL	1,517,657.19	1,392,658.38

La suma total de l'estimació de la inversió inicial ascendeix fins als 1,392,658.38 €. Tenint en compte un marge d'imprevistos d'un 20%, aquesta xifra passa a ser de 1,671,190.06 €.

7.2. Cas base

Actualment el preu estimat que se li atorga al nostre producte es de uns 5€/kg en països on l'energia elèctrica compta amb un baix cost i fins a 15€/kg en països amb elevats preus d'electricitat.

Revisant el balanç de matèria, amb aquesta planta s'estarien produint fins a 2,247.71 kg/h en continu que equivaldria a 19,420.21 tn/any. Si ens mantenim conservadors i tenim en compte que de forma estàndard el preu de venda serà d'uns 5€/kg, la planta estaria facturant 97.101 milions d'€ anualment.

Quan la matèria prima es de gran cost, els valors d'EBITDA amb els que es treballa acostumen a ser baixos. Suposant que en aquest projecte la planta comptaria amb un 3%, el *payback* de l'estimació de la inversió inicial seria de gairebé 7 mesos.

8. **BIBLIOGRAFIA**

[1] Repsol. (2023, September 11). Hidrógeno como combustible. REPSOL; Repsol. <https://www.repsol.com/es/energia-futuro/movilidad-sostenible/hidrogeno-como-combustible/index.cshtml>

[2] Energías Renovables. (2021, March 3). Mapa español del hidrógeno. Energías Renovables, El Periodismo de Las Energías Limpias. <https://www.energias-renovables.com/hidrogeno/la-geografia-espanola-del-hidrogeno-20210303>

[3] Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. (2021). Ministerio Para La Transición Ecológica Y El Reto Demográfico; Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. <https://www.miteco.gob.es/es/energia/hidrocarburos-nuevos-combustibles/hidrogeno.html>

[4] Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. (2021). Ministerio Para La Transición Ecológica Y El Reto Demográfico; Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. <https://www.miteco.gob.es/es/energia/hidrocarburos-nuevos-combustibles/hidrogeno.html>

[5] Davis, B. H., & Davis, R. J. (2002). Fundamentals of chemical reaction engineering. McGraw-Hill.

[6] Mokhatab, S., Poe, W. A., & Speight, J. G. Handbook of Natural Gas Transmission and Processing. Editorial.

[7] Ruthven, D.M. (1938). Principles of adsorption and adsorption processes. Wiley – Interscience.

[8] Taejun Kim, Putrakumar Balla, Daeseob Shin, Sungtak Kim (2024), A comparison of g-Al₂O₃-supported deoxo catalysts for the selective removal of oxygen from highconcentration hydrogen streams

[9] Ayush Joshi, Ninad Chaulamwar, Dr. Mandar Tendolkar (2023). Design and development of PSA System for ultra purification of green Hydrogen. IEEE International Transportation Electrification Conference (ITEC-India)

[10] K.C.Ng, H.T. Chua, C.Y. Chung, C.H. Loke, T.Kashiwagi, A.Akisawa, B.B. Saha (2001). Experimental investigation of the silica gel-water adsorption isotherm characteristics. Applied Thermal Engineering 21 (2001) 1631-1642

[11] M.Chlendi and D.Tondeur. (1995) Dynamic behaviour of layered columns in pressure swing adsorption. Gas. Sep.purif. Vol. 9 No 4, pp 231-242.

[12] Ayub Golmakani, Shohreh Fatemi, Javad Tamnanloo (2016). Investigating PSA, VSA and TSA methods in SMR unit of refineries for hydrogen production with fuel cell specification. School of chemical Engineering, College of Engineering, University of Tehran, P.O. Box: 11365-4563, tehran, Iran

[13] Mauro Luberti, Alexander Brown, Marco Balsamo and Mauro Capocelli (2022). Numerical Analysis of VPSA Technology Retrofitted to steam Reforming Hydrogen Plants to Capture CO₂ and Produce Blue H₂. Energies 2022, 15, 1091

[14] Du, Z.; Liu, C.; Zhai, J.; Guo, X.; Xiong, Y.; Su, W.; He, G. A (2021). Review of Hydrogen Purification

Technologies for Fuel Cell Vehicles.Catalysts 2021, 11, 393

[15] Saima Parkar, Gautami Narhari, Dr. Sunil Jayant Kulkarni (2022). Intensification of Temperature Swing Adsorption. Journal of Sustainable Materials Processing and Management

[16] Ayush Joshi, Ninad Chaulamwar, Dr. Mandar Tendolkar (2023). DESIGN AND DEVELOPMENT OF PSA SYSTEM FOR ULTRA PURIFICATION OF GREEN HYDROGEN

[17] The American Society of Mechanical Engineers (2019). ASME Boiler and Pressure Vessel Code. Section VIII (Rules for Construction of Pressure Vessels). Division 1.

[18] API. (2024). Api.org. <https://www.api.org/>

[19] Tubular Exchanger Manufacturers Association. <https://tema.org/>

[20] Heinz P. Bloch (2006). A Practical Guide to Compressor Technology, Second Edition

[21] POWEN. (2023, July 12). Horas solares y Hora solar pico en España por provincia | POWEN. POWEN. <https://powen.es/numero-horas-solares-en-espana/>

[22] Izuru Yokoyama, Hiroori Nishikawa, Mamoru Ai, Sadao Suzuki (1968), Estudi cinètic de la reacció d'eliminació d'oxigen en gas d'hidrogen impur mitjançant catalitzador de Pd suportat

[23] J. Nastaj, B. Ambrozek (2015). Analysis of gas dehydration in TSA System with multi-layered bed of solid adsorbents. Department of Chemical Engineering and Environmental Protection, West Pomeranian University of Technology. Al. Piastów 42, 71-065 Szczecin

[24] Kevin R. Wood, Y.A. Liu, and Yueying Yu (2018). Design, Simulation and Optimization of Adsorptive and Chromatographic Separations. Wiley -VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

[25] Cristian DINCA, Nela SLAVU, Adrian BADEA (2017). CO2 Adsorption Process Simulation in ASPEN Hysys. IEEE 978-1-5386-3943-6/17/

[26] King, C. F. (1999). Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes. Richard Turton, Richard Bailie, Wallace Whiting, Joseph Shaeiwitz Prentice Hall, 1998. Chemie-Ingenieur-Technik/Chemieingenieurtechnik, 71(11), 1319-1320. <https://doi.org/10.1002/cite.330711124>

ANNEXOS

9. BASES DE DISSENY

9.1. Càlcul condicions d'entrada

La corrent es troba en fase gas a una temperatura de 40°C i 30barg de pressió. A partir de la saturació del aigua del corrent (Hr=100%) es troba la pressió de vapor corresponent amb l'equació d'Antoine.

Constants d'Antoine per l'aigua en rang de 1 a 100°C (en mmHg, °C):

$$A=8.07131 \quad B=1730.63 \quad C=233.426$$

Es calcula la pressió de vapor, aplicant el factor de conversió per obtenir el resultat en bars.

$$P_{H_2O}^* = 10^{A - \frac{B}{C+T}} = 10^{8.07131 - \frac{1730.63}{233.426+40}} \cdot 0.001333 = 0.074 \text{ bar} \quad \text{E.1.1.1}$$

Seguidament es calcula la fracció molar de l'aigua mitjançant la relació de pressió parcial amb la pressió total del sistema.

$$y_{H_2O} = \frac{H_r \cdot P_{H_2O}^*}{P_T} = \frac{1 \cdot 0.074}{31.013} = 0.0024 \quad \text{E.1.1.2}$$

Combinant les equacions X s'obté un sistema d'equacions de tres equacions amb dos incògnites. On PM_i representa el pes molecular (g/mol) de cadascuna de les substàncies.

$$w_{H_2} + w_{H_2O} + w_{O_2} = w_{H_2} + w_{H_2O} + 0.002 = 1$$

$$w_{H_2} = \frac{y_{H_2} \cdot PM_{H_2}}{y_{H_2} \cdot PM_{H_2} + y_{H_2O} \cdot PM_{H_2O} + y_{O_2} \cdot PM_{O_2}} = \frac{y_{H_2} \cdot 2.02}{y_{H_2} \cdot 2.02 + 0.0024 \cdot 18.02 + y_{O_2} \cdot 32}$$

$$w_{H_2O} = \frac{y_{H_2O} \cdot PM_{H_2O}}{y_{H_2} \cdot PM_{H_2} + y_{H_2O} \cdot PM_{H_2O} + y_{O_2} \cdot PM_{O_2}} = \frac{0.0024 \cdot 18.02}{y_{H_2} \cdot 2.02 + 0.0024 \cdot 18.02 + y_{O_2} \cdot 32}$$

Resolent el sistema es troba que la fracció molar d'hidrogen en el corrent és de 0.9975 i la d'oxigen de 0.00013. Finalment, utilitzant l'equació X i X es troba que la fracció massica de l'hidrogen és de 0.9772 i la de l'aigua de 0.0208.

10. ENGINYERIA BÀSICA

10.1. R-101

10.1.1. Model cinètic

Per elaborar el model cinètic de la reacció de desoxidació s'han agafat les dades del article el qual treballa amb un catalitzador de Pd/Al₂O₃-SiO₂. Concretament el catalitzador té un 0.3% wt, sobre un portador que té 90% wt de Al₂O₃ i 10% wt de SiO₂.

La reacció estudiada és altament exotèrmica, amb una entalpia de reacció de -241.8kJ/mol, la presència del SiO₂ en el portador es creu que pot aportar estabilitat tèrmica, necessària en reaccions altament exotèrmiques. Pel model cinètic estudiat, es simplifica el mecanisme de reacció plantejat anteriorment en la reacció següent:



En la següent taula es mostra el rang de validesa de la cinètica.

Taula 10.1. Rang de validesa del model cinètic del article referència.

	Rang de validesa
Temperatura	20-60°C
Pressió parcial H₂	0.062-1 atm
Concentració O₂	170-2500ppm

Com es pot observar, el model presentat treballa a pressions parcials baixes. El mecanisme de reacció mostra que en pressions elevades afavoreixen a la cobertura sobre la superfície del catalitzador. Tot i així, l'article considera que per sobre de la pressió de 1atm, la superfície del catalitzador estarà saturada d'hidrogen, i augmentos en les condicions de pressió parcial d'hidrogen no afectaran en l'augment de velocitat de reacció. Per aquest projecte, es considera que l'efecte de pressió important es sobre la pressió parcial d'oxigen, el qual es el limitant per la reacció.

El rang de concentració d'oxigen es troba entre 170-2500ppm, la concentració del corrent d'aquest projecte es troba lleugerament per sota d'aquest rang en 129ppm. Es considera acceptable aquesta extrapolació ja que amb l'augment de pressió del corrent del projecte s'aconsegueix un valor de pressió parcial d'oxigen de 0.0039bar, mentre que el rang experimental del model cinètic es troba entre 0.0002 i 0.0025bar. Justificant així l'augment de pressió necessari. Es considera per tant el model cinètic d'aquest estudi vàlid.

En l'article es mostra que la pressió parcial d'hidrogen, no afecta en la variació de la velocitat de reacció, veure Figura 2.1. Donant així, un ordre de reacció igual a zero per la pressió parcial d'hidrogen.

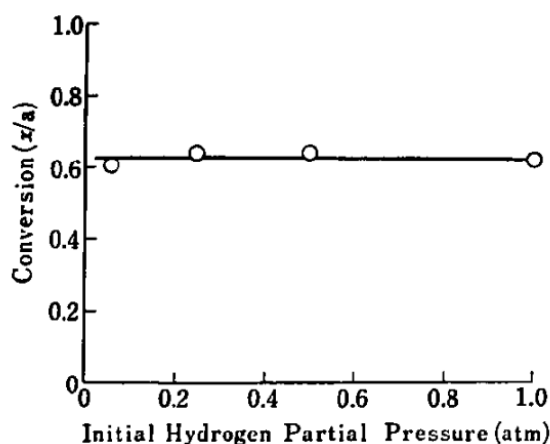


Figura 10.1. Representació del efecte de la pressió parcial d'hidrogen inicial respecte la conversió de la reacció. Es pot observar que la variació de pressió no influeix en la reacció. Per la conversió (x/a), "x" representa el consum de la concentració d'oxigen, mentre que "a" representa la concentració inicial d'oxigen.

L'article mostra també la dependència lineal de la velocitat de reacció amb la concentració d'oxigen. Donant així, un primer ordre de reacció per la pressió parcial d'oxigen.

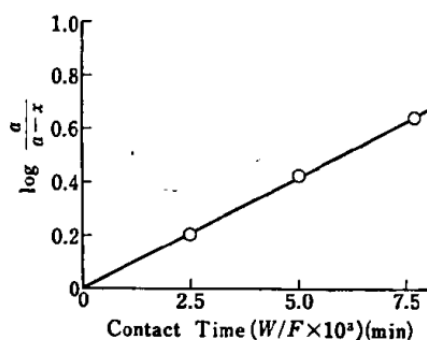


Figura 10.2. Representació del temps de contacte del gas amb el catalitzador utilitzant la carga de catalitzador (W) amb el cabal d'alimentació (F) respecte el $\log(a/(a-x))$, que també es pot expressar com el $\ln(C_{O_2 \text{ inicial}}/C_{O_2})$. La recta resultant amb pendent= kt justifica el primer ordre de reacció respecte l'oxigen.

Així doncs el model cinètic seguit per la reacció E.2.1.1 segueix la llei de potència de primer ordre per la pressió parcial d'oxigen, tal i com es mostra en l'equació E.2.1.3.

$$-\frac{dP_{O_2}}{dt} = kP_{O_2} \quad \text{E.2.1.3.}$$

Seguidament, es mostra la linealització de les dades de l'article per trobar l'energia d'activació i el factor freqüència per determinar la constant de velocitat en funció de la temperatura.

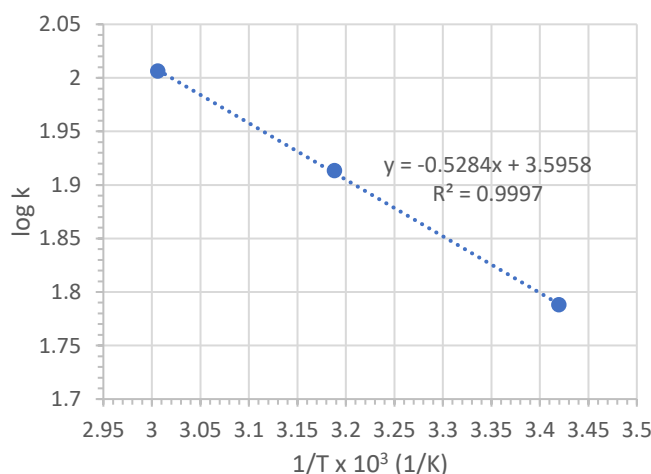


Figura 10.3. Representació del efecte de la temperatura sobre la constant cinètica mitjançant l'equació d'Arrhenius.

En la Taula 2.2. es mostren els resultats dels paràmetres cinètics extrets de les dades de l'article. Es poden veure els càlculs al Annex 2.1.2.

Taula 10.2. Paràmetres cinètics per la reacció de primer ordre respecte l'oxigen de formació de l'aigua.

Factor de freqüència (k0)	1.66 · 10 ⁻⁷ kmol/(Pa · s · kgcat)
Energia d'activació (Ea)	2.42 kcal/mol

10.1.2. Paràmetres cinètics per la reacció de desoxidació

Veient la linealització de la gràfica d'Arrhenius de la Figura 2.3, i saben que l'article segueix la fórmula segons l'equació E.2.1.4. es troben els paràmetres cinètics de l'article amb les unitats que s'observen en la Taula 2.2.

$$\log_{10}(k) = \log_{10}(A) + \log_{10}(e) \cdot -\frac{Ea}{R \cdot T} = 3.5958 - 0.5284 \cdot \frac{1}{T \cdot 10^3} \quad \text{E.2.1.4.}$$

Per a trobar l'energia d'activació s'ha seguit l'equació E.2.1.5.

$$0.5284 = \log_{10}(e) \cdot \frac{E_a}{\frac{1.987 \text{ cal}}{\text{K} \cdot \text{mol}}} \quad \text{E.2.1.5.}$$

Per trobar el factor de freqüència s'ha seguit l'equació E.2.1.6.

$$3.5958 = \log_{10}(A) \cdot 10^3 \quad \text{E.2.1.6.}$$

Taula 10.3. Paràmetres cinètics per la reacció de desoxidació amb les unitats de l'article de referència.

Factor de freqüència (k₀)	1.01 mol/(atm·min·g _{cat})
Energia d'activació (E_a)	2.42 kcal/mol

Per a poder afegir aquests paràmetres cinètics al simulador de processos *Aspen Plus*, les unitats del factor de freqüència s'han modificat segons les necessàries amb que treballa el simulador.

10.2. T-401 i T-404

10.2.1. Càlculs Dimensionament

Per al dimensionament de les columnes d'adsorció, s'han seguit les següents equacions i consideracions:

Primer de tot, es troba el caudal volumètric requerit i es calcula el diàmetre de la columna necessari d'acord amb la seva capacitat:

El caudal volumètric (V) ve donat per la equació:

$$V = \frac{Q_{\text{capacitat}}}{3600} \quad (\text{m}^3/\text{s}) \quad \text{(E.10.1)}$$

On $Q_{\text{capacitat}} = 894.7 \text{ m}^3/\text{h}$

$$V = \frac{894.7}{3600} = 0.25 \text{ m}^3/\text{s} \quad \text{(E.10.2)}$$

La secció transversal de la columna (A) es troba seguint la següent equació:

$$A = \frac{V}{v} \quad (\text{m}^2) \quad \text{(E.10.3)}$$

$$A = \frac{0.25}{0.5} = 0.5 \text{ m}^2 \quad \text{(E.10.4)}$$

On V és el caudal volumètric (m³/s), i v és la velocitat de la corrent (m/s).

Un cop s'ha obtingut l'àrea de la columna, es disposa a calcular el diàmetre d'aquesta, seguint la equació següent:

$$D = \sqrt{4 \times \frac{A}{\pi}} \quad (\text{m}) \quad \text{(E.10.5)}$$

$$D = \sqrt{4 \times \frac{0.25}{\pi}} = 0.8 \text{ m} \quad \text{(E.10.6)}$$

En segon lloc, es calcula la quantitat d'adsorbat acumulat a la columna per cicle.

Considerant que l'adsorbat actua com un gas ideal, s'ha calculat la densitat de la corrent d'entrada, amb la següent relació:

$$\rho = \frac{P}{RT} \left(\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \right) \quad \text{(E.10.7)}$$

$$\rho = \frac{1 \cdot 10^6}{2078.5 \times 293.15} = 1.64 \text{ kg/m}^3 \quad \text{(E.10.8)}$$

On:

P: pressió entrada; $1 \cdot 10^6$ Pa

T: temperatura entrada; 293.15K

R: constant gasos ideals; 2078.5 J/Kg·K·mol

Es calcula la quantitat d'adsorbat acumulat:

$$Q_{adsorbat} = T \times V \times X_{impuresa} \times \rho_{alimentació} \quad (Kg) \quad (E.10.9)$$

$$Q_{adsorbat} = 48 \times 0.25 \times 0.55 \times 1.64 = 385.54 \text{ kg} \quad (E.10.10)$$

On

T: temps cicle establert; 48h

$X_{impuresa}$: fracció màssica impuresa en la corrent entrada; 0.55%

Un cop s'ha calculat la quantitat d'adsorbent que s'acumula a la columna, es pot calcular la quantitat d'adsorbent requerit.

La capacitat d'adsorció del adsorbent en específic és obtingut pel propi fabricant o a partir de les isoterms. En aquest procés, s'ha escollit un adsorbent de sílice gel del tipus 3A, que presenta una relació de 0.2 kg H₂O/kg sílice gel 3A (x). Així doncs, a partir de la equació E.X s'obté la quantitat d'adsorbent necessària per segon del cicle d'adsorció.

$$Q_{adsorbent} = \frac{Q_{adsorbat}}{x} \quad (kg) \quad (E.10.11)$$

$$Q_{adsorbent} = \frac{385.54}{0.2} = 1,927.7 \quad (kg) \quad (E.10.12)$$

A partir de la quantitat d'adsorbent i la seva densitat, es calcula el volum ocupat pel sílice gel, a partir de la següent equació (E.X):

$$V_{adsorbent} = Q_{adsorbent} \div \rho_{adsorbent} \quad (m^3) \quad (E.10.13)$$

$$V_{adsorbent} = 1,927.7 \times 770 = 2.5m^3 \quad (E.10.14)$$

L'altura del adsorbent requerit en la columna, es calcula a partir del seu volum i la secció transversal de la pròpia columna.

$$L_{requerida} = V_{adsorbent} \div A_{columna} \quad (m) \quad (E.10.15)$$

$$L_{requerida} = 2.5 \div 0.5 = 5m \quad (E.10.16)$$

Assumint que un 20% de la columna no s'utilitza (*Lenght of Unused Bed*):

$$LUB = 1m \quad (E.10.17)$$

Per tant, la longitud final de la columna serà la longitud requerida més la longitud no utilitzada:

$$L_{columna} = L_{requerida} + LUB \quad (m) \quad (E.10.18)$$

$$L_{columna} = 5 + 1 = 6m \quad (E.10.19)$$

Com a la fase de regeneració s'ha considerat que es regenera un 100% no fa falta ajustar els resultats.

Taula 10.4. Resum resultats dimensionament columna adsorció

Resultats	
Cuadal volumètric	0.25 m ³ /s
Àrea columna	0.5 m ²
Diàmetre	0.8m
Quantitat adsorbent	1,927.7 kg
Longitud columna	6.0 m

10.2.2. Simulació Aspen Adsorption

Un cop s'han realitzats els primer càlculs per tenir una aproximació, a partir del programa *ASPEN Adsorption*, s'ha realitzat la simulació de l'adsorció de la columna.

En primer lloc, s'ha creat un fitxer nou del programa, i s'ha introduït els components del procés. Per determinar els components amb els que es treballarà, s'ha accedit a la llista de components del *ASPEN* i s'ha configurat les propietats d'aquests.

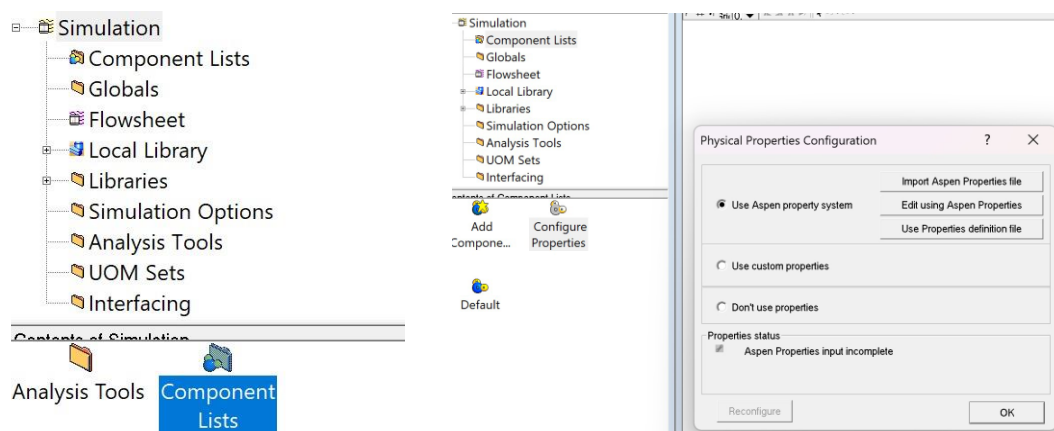


Figura 10.4 Accés llista components ASPEN Adsorption

Figura 10.5. Accés propietats ASPEN

Un cop s'hi accedeix, s'obra la base de dades d'un altre programa del *ASPEN* com es el *Plus*, ja que l'*Adsorption* no en té de pròpia. Des de la base de dades es determina els components del procés i quin model termodinàmic segueix la simulació. En aquest cas, només hi ha hidrogen i aigua i el model termodinàmic que regeix la simulació és el *NRTL*.

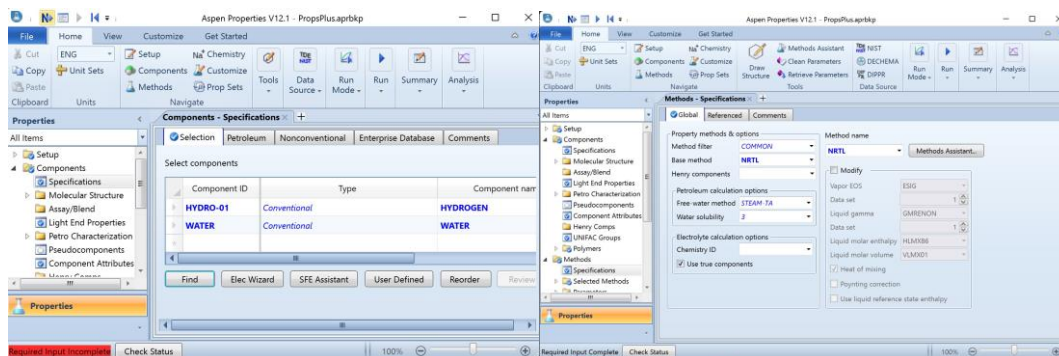


Figura 10.6. Selecció components procés

Figura 10.7. Selecció model termodinàmic

Al seleccionar els components i el model, l'estatus de les propietats canviarà a color verd, indicant que tot està correcte. Si hi hagués qualsevol tipus d'inconvenient, es mostraria de color vermell.

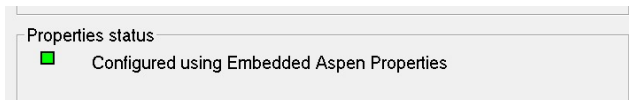


Figura 10.8. Comprovació estatus propietats components.

Abans de començar a dibuixar l'esquema, primer s'han d'acabar d'introduir els components a la sessió de treball que s'està utilitzant. Per fer-ho s'accedeix a la secció *Default* i s'escull els components que estan disponibles.

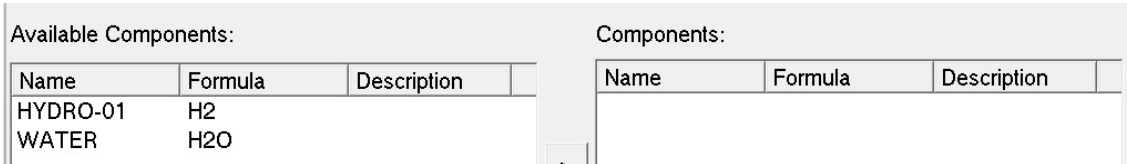


Figura 10.9. Components disponibles

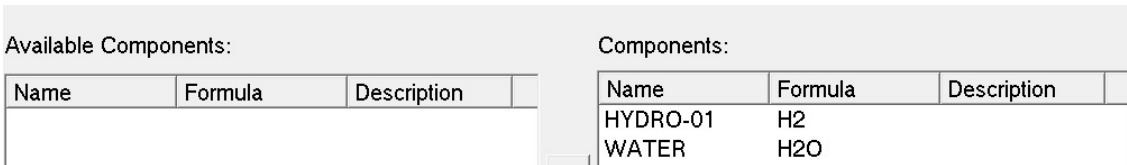


Figura 10.10. Components seleccionats

Un cop establerts els components del procés i les seves propietats, s'ha realitzat el esquema del procés TSA. Tot i treballar amb dues columnes, al esquema només fa falta introduir una columna per obtenir els resultats de la etapa d'adsorció.

Per a la corrent d'entrada s'ha utilitzat la funció *gas_feed* i per les corrent de sortida *gas_product*. Per a cada una d'elles, s'ha determinat les condicions d'operació.

	Value	Units	Spec	Description
F	0,3	kmol/s	Free	Flowrate
Y_Fwd(*)				
Y_Fwd("HYDRO-01")	0,999315	kmol/kmol	Fixed	Composition in forward direction
Y_Fwd("WATER")	6,15e-004	kmol/kmol	Fixed	Composition in forward direction
T_Fwd	293,15	K	Fixed	Temperature in forward direction
P	10,0	bar	Fixed	Boundary pressure

Figura 10.11. Propietats corrent entrada

	Value	Units	Spec	Description
F	0,3	kmol/s	Fixed	Flowrate
Y_Rev(*)				
Y_Rev("HYDRO-01")	1,0	kmol/kmol	Fixed	Composition in reverse direction
Y_Rev("WATER")	0,0	kmol/kmol	Fixed	Composition in reverse direction
T_Rev	293,15	K	Fixed	Temperature in reverse direction
P	9,72584	bar	Free	Boundary pressure

Figura 10.12. Propietats corrent sortida

Per al cas de la corrent d'entrada s'ha deixat el caudal molar "lliure" per a que el ASPEN ho calculi, però realment s'ha determinat ja que el caudal de la corrent de sortida s'ha fixat en 0.3 kmol/s. La composició d'aquesta corrent s'ha extret del propi balanç de matèria.

Per a la corrent de sortida, s'ha fixat que la composició sigui totalment hidrogen, i s'ha considerat que és un procés isotèrmic, per tant surt a la mateixa temperatura que entra.

Per al cas de la pressió, s'ha deixat "lliure" per a que el ASPEN calculi la pèrdua de carrega que en aquest cas és de aproximadament 0.3 bar.

Com s'observa a la Figura 10.13 aquestes dues corrents, van connectades a un llit adsorbent, què és on s'adsorbiran les impureses.

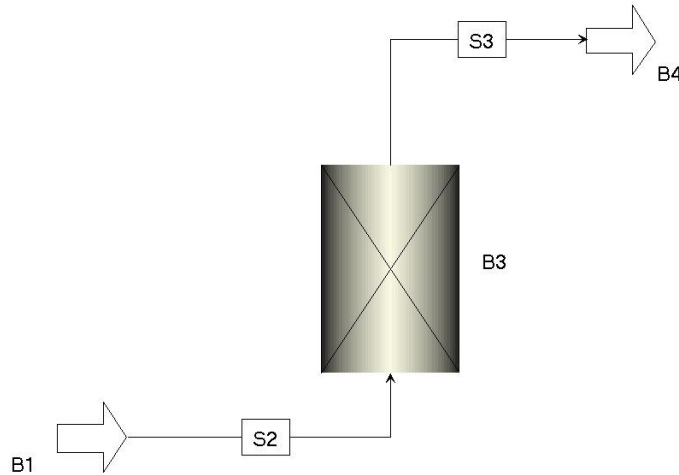


Figura 10.13. Esquema etapa Adsorció

10.2.2.1 Determinació paràmetres isoterma

Per poder simular l'adsorció en la columna, es fonamental determinar els paràmetres de la isoterma del adsorbent sílice gel tipus 3A.

En aquest cas, l'adsorbent descriu l'equilibri d'adsorció amb les següents equacions:

$$P_{sat} = IP_1 \times e^{\frac{IP_2 - IP_3}{T}} \quad (E.10.20)$$

$$P_{rel} = Y_{H_2O} \times \frac{P_{Total}}{P_{sat}} \quad (E.10.21)$$

$$W_{H_2O} = IP_4 \times P_{rel} \quad (E.10.22)$$

Si s'agrupen les tres equacions i es reordenen, es pot convertir la isoterma en una equació que es pugui implementar en l'ASPEN.

$$W_{H_2O} = IP_4 \times \frac{Y_{H_2O} \times P_{Total}}{IP_1 \times e^{\frac{IP_2 - IP_3}{T}}} \quad (E.10.23)$$

Si reordenem, $Y_{H_2O} \times P_{Total}$ es pot determinar com la pressió parcial de l'aigua ρ_{H_2O} . A més, es pot reagrupar IP_4/IP_1 com una única constant IP_6 . Finalment, per reordenar el denominador, si es passa l'exponent a negatiu es pot moure al numerador.

$$W_{H_2O} = IP_5 \times \rho_{H_2O} \times e^{-IP_2 + \frac{IP_3}{T}} \quad (E.10.24)$$

Encara que ja sembla molt més simple, encara es pot simplificar més. Encara hi ha el paràmetre $e^{-IP_2 + \frac{IP_3}{T}}$, el qual no és compatible amb cap isoterma del ASPEN. Es sap que la suma d'exponents es pot convertir en $e^{-IP_2} + e^{\frac{IP_3}{T}}$ on e^{-IP_2} és pròpiament una constant. Així doncs, finalment es pot escriure la isoterma com:

$$W_{H_2O} = IP_6 \times \rho_{H_2O} \times e^{\frac{IP_3}{T}} \quad (\text{E.10.25})$$

La equació simplificada, té clarament l'estil de la llei de Henry 2 que proporciona l'ASPEN. En aquest cas IP_6 pot ser expressat com:

$$IP_6 = \frac{IP_4}{IP_1} e^{-IP_2} \quad (\text{E.10.26})$$

10.2.2.2 Caracterització columna

Per a la caracterització de la columna, s'han assumit les següents suposicions:

Taula 10.5. Suposicions per a la simulació.

Mètode Discretització	QDS (<i>quadratic differencing scheme</i>)	Número de Nodes	20
Balanç de Matèria Model cinètic	Nomès convecció <i>Linear lumped resistance</i>	Pèrdua càrrega Basat en	Ergun Concentració fase sòlida
Coefficient transferència de massa	Constant		
Isoterma	Henry 2 (basat en pressió parcial)	Conduction	No
Balanç energia Consideració fase sòlida	No isotèrmic	Adsorció calor Capacitat calorífica	Constant
Transferència calor ambient	No		Constant
	Adiabàtic		

Finalment, s'especifica les característiques de les dimensions de la columna juntament amb les propietats del adsorbent, i les condicions inicials de la pròpia columna:

	Value	Units	Description
Hb	5,0	m	Height of adsorbent layer
Db	0,8	m	Internal diameter of adsorbent layer
Ei	0,35	m ³ void/m ³ bed	Inter-particle voidage
Ep	1,e-010	m ³ void/m ³ bead	Intra-particle voidage
RHOs	770,0	kg/m ³	Bulk solid density of adsorbent
Rp	0,0045	m	Adsorbent particle radius
SFac	1,0	n/a	Adsorbent shape factor
MTC(*)			
MTC("HYDRO-01")	5,e-008	1/s	Constant mass transfer coefficients
MTC("WATER")	2,468e-004	1/s	Constant mass transfer coefficients
IP(*)			
IP(1,"HYDRO-01")	0,0	n/a	Isotherm parameter
IP(1,"WATER")	1,23e-008	n/a	Isotherm parameter
IP(2,"HYDRO-01")	0,0	n/a	Isotherm parameter
IP(2,"WATER")	5293,0	n/a	Isotherm parameter
Direction	0,0	n/a	Specified flow direction (self determined: 0, forward: 1)
Cps	1,e-003	MJ/kg/K	Adsorbent specific heat capacity
DH(*)			
DH("HYDRO-01")	0,0	MJ/kmol	Constant for heat of adsorption
DH("WATER")	-64,0	MJ/kmol	Constant for heat of adsorption
HTC	1,0	MW/m ² /K	Constant for the heat transfer coefficient
ap	433,333	1/m	Specific surface area of adsorbent

Figura 10.14. Taula especificacions columna

	Value	Units	Spec	Derivative	Description
ProfileType	Constant				Is the bed initially specified with constant o
Y_First_Node(*)					
Y_First_Node("HYDRO-01")	1,0	kmol/kmol	Initial		Mole fraction within first element
Y_First_Node("WATER")	0,0	kmol/kmol	Initial		Mole fraction within first element
Vg_First_Node	0,5	m/s	Initial		Gas velocity within first element
W_First_Node(*)					
W_First_Node("HYDRO-01")	0,0	kmol/kg	RateInitial	0,0	Solid loading within first element
W_First_Node("WATER")	0,0	kmol/kg	RateInitial	0,0	Solid loading within first element
Tg_First_Node	293,15	K	Initial		Gas temperature within first element
Ts_First_Node	293,15	K	Initial		Solid temperature within first element

Figura 10.15. Condicions inicials columna

Un cop s'inicia la simulació, representant la concentració al llarg del temps d'ambdós compostos, es pot obtenir la corba de trencament i establir el temps de canvi de cicle més òptim.

11. SEGURETAT

A continuació, i complementant l'apartat 5.2, es mostren els anàlisis HAZOP per a cada P&ID del procés.

11.1. HAZOP P&ID 100

Taula 11.1. Anàlisi HAZOP del P&ID 100.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
1.1 Més	1.1.1 Més nivell en W-101	1.1.1.1 No aplica									
	1.1.2 Més nivell en R-101	1.1.2.1 No aplica									
	1.1.3 Més nivell en E-101	1.1.3.1 No aplica									
1.2 Menys	1.2.1 Menys nivell en W-101	1.2.1.1 No aplica									
	1.2.2 Menys nivell en R-101	1.2.2.1 No aplica									
	1.2.3 Menys nivell en E-101	1.2.3.1 No aplica									
1.3 No	1.3.1 No flux W-101	1.3.1.1 Vàlvula de control VC101 queda tancada completament	Augmenta de la temperatura en el W-101, no s'evacua calor de la resistència elèctrica.	4	-1	A	Configurar la vàlvula perquè quedi oberta en cas de fallada.	4	-6	D	

Continuació Taula 11.1. Anàlisi HAZOP del P&ID 100.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
1.3 No	1.3.1 No flux W-101	1.3.1.2 Vàlvula VA101 queda tancada completament	Veure apartat 1.3.1.1.								
	1.3.2 No flux R-101	1.3.2.1 Vàlvula de control VC102 queda tancada completament	Despresurització gradual del R-101 que pot causar acumulació de productes en el catalitzador que poden donar lloc a reaccions secundaries formant subproductes desitjats. Sense conseqüències de seguretat.								
		1.3.2.2 Vàlvula VA102 queda tancada completament	Veure apartat 1.3.2.1.								
	1.3.3 No flux E-101	1.3.3.1 Vàlvula automàtica VA104 queda tancada completament	Augment de pressió R-101, possible ruptura catastròfica. Cap conseqüència de seguretat en E-101.	4	-1	A	Configurar la vàlvula perquè quedi oberta en cas de fallada.	4	-6	D	

Continuació Taula 11.1. Anàlisi HAZOP del P&ID 100.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
1.4 Menys	1.4.1 Menys flux W-101	1.4.1.1 Error en vàlvula de control VC101, queda parcialment tancada	Augment de la temperatura en W-101, no s'evacua tota la calor de la resistència.	1	-	D	Implementació del llaç JT101 per regular la potència de la resistència en funció de la temperatura del corrent.	1	-	D	Posar alarma d'alta temperatura al TIT101.
	1.4.2 Menys flux R-101	1.4.2.1 Error en vàlvula de control VC102, queda parcialment tancada	Sense conseqüència de seguretat, tema operacional amb baixada de pressió del sistema.								
	1.4.3 Menys flux E-101	1.4.3.1 Veure apartat 1.4.2									
1.5 Més	1.5.1 Més flux W-101	1.5.1.1 Vàlvula de control VC101 queda completament oberta	Lleuger augment de pressió, sense conseqüències de seguretat.								
	1.5.2 Més flux R-101	1.5.2.1 Vàlvula de control VC102 queda completament oberta	Lleuger augment de pressió, disminució de la conversió. Sense conseqüències de seguretat.								
	1.5.3. Més flux E-101	1.5.3.1 No aplica									
1.6 Invers	1.6.1 Flux invers W-101	1.6.1.1 Error en vàlvula de control VC101 en recirculació de producte en R-101	Sense conseqüències de seguretat.				Posar una vàlvula antiretorn a la sortida de W-101.				

Continuació Taula 11.1. Anàlisi HAZOP del P&ID 100.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
1.6 Invers	1.6.2 Flux invers R-101	1.6.2.1 No aplica									
	1.6.3 Flux invers E-101	1.6.3.1 No aplica									
1.7 Més	1.7.1 Més pressió W-101	1.7.1.1 Vàlvula de control VC101 queda completament oberta	Veure apartat 1.5.1.								
	1.5.2 Més flux R-101	1.7.1.2 Error del controlador JT101, dona un valor més alt al requerit	Augment de la pressió, possible ruptura de la corrent.	4	-1	A	Incloure uns fusibles de seguretat per evitar pujades excessives d'intensitat. Vàlvula de seguretat PSV (1 IPL).	4	-6	D	Posar alarma més temperatura en TIT101. Dissenyar PSV per aquest cas.
	1.7.2 Més pressió R-101	1.7.2.1 Vàlvula automàtica VA104 queda tancada completament	Veure apartat 1.3.3.1. Es recircula el producte a l'entrada del reactor.								
		1.7.2.2 Vàlvula automàtica VA103 queda tancada completament	Aquest incident es donaria quan s'estigui donant la recirculació del producte de sortida del reactor on VA104 quedaria també tancada. Veure apartat 1.3.3.1.								

Continuació Taula 11.1. Anàlisi HAZOP del P&ID 100.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
1.7 Més	1.7.3 Més pressió E-101	1.7.3.1 Ruptura dels tubs en E-101	Entrada d'hidrogen a l'aigua de refrigeració. Depèn de la pressió de disseny del E-201 ruptura catastròfica de l'equip.	4	-	C	Vàlvula de seguretat PSV (1 IPL).	4	-	D	Dissenyar PSV per aquest cas.
1.8 Menys	1.8.1 Menys pressió W-101	1.8.1.1 Vàlvula de control VC101 queda parcialment tancada	Veure apartat 1.4.1.								
	1.8.2 Menys pressió R-101	1.8.2.1 Veure apartat 1.4.2									
	1.8.3 Menys pressió E-101	1.8.3.1 No aplica									
1.9 Més	1.9.1 Més temperatura W-101	1.9.1.1 Veure apartat 1.7.1.2									
	1.9.2 Més temperatura R-101	1.9.2.1 No aplica									
	1.9.3 Més temperatura E-101	1.9.3.1 Error en vàlvula de control VC103	Sense conseqüències de seguretat, no s'aconseguirà baixar la temperatura del corrent.								Posar alarma més temperatura en el TIT104.
1.10 Menys	1.10.1 Menys temperatura W-101	1.10.1.1 Error del controlador JT101, dona un valor més baix al requerit	Sense conseqüències de seguretat, no s'arribarà a l'especificació.								

Continuació Taula 11.1. Anàlisi HAZOP del P&ID 100.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQUÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
1.10 Menys	1.10.2 Menys temperatura R-101	1.10.2.1 No aplica									
	1.11.1 Altra composició W-101	1.11.1.1 No aplica									
1.11 Altra	1.11.2 Altra composició R-101	1.11.2.1 Baixa conversió R-101	Si arribes mes O ₂ al reactor podria produir-se amb més intensitat la reacció d'oxidació que es molt exotèrmica i augmentaria molt la temperatura.	4	-1	A	Recirculació del corrent de sortida a l'entrada del R-101. Termòmetres a diferents punts del reactor amb alarma d'alta temperatura.	4	-6	D	Posar un llaç de control AT101
	1.11.3 Altra composició E-101	1.11.3.1 No aplica									
	1.12.1 Altra fase W-101	1.12.1.1 No aplica									
1.12 Altra	1.12.2 Altra fase R-101	1.12.2.1 No aplica									
	1.12.3 Altra fase E-101	1.12.3.1 No aplica									
		1.13.1.1 Error del controlador JT101 en la resistència tèrmica	Disminució de la temperatura R-101, sense conseqüències de seguretat.								
1.13 No	1.13.1 No utilities W-101										
	1.13.2 No utilities R-101	1.13.2.1 No aplica									
	1.13.3 No utilities E-101	1.13.3.1 Veure apartat 1.9.3									

11.2. HAZOP P&ID 200

Taula 11.2. Anàlisi HAZOP del P&ID 200.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
2.1 Més	2.1.1 Més nivell E-201	2.1.1.1 No aplica									
	2.1.2 Més nivell S-201	2.1.2.1 Error vàlvula de control VC204, tanca completament	Inundació S-201, sense conseqüències de seguretat.								Posar alarma d'alt nivell en LIT201 i LIT202.
	2.1.3 Més nivell S-202	2.1.3.1 No aplica									
2.2 Menys	2.2.1 Menys nivell E-201	2.2.1.1 No aplica									
	2.2.2 Menys nivell S-201	2.2.2.1 Error vàlvula de control VC204, obra completament	Possible evacuació d'hidrogen per culs de S-201	3	-1	B	Afegir un altre controlador de nivell per redundància.	3	-5	C	Posar alarma de nivell baix en LIT201 i LIT202.
	2.2.3 Menys nivell S-202	2.2.3.1 No aplica									
2.3 No	2.3.1 No flux E-201	2.3.1.1 No aplica									
	2.3.2 No flux S-201	2.3.2.1 No aplica									
	2.3.3 No flux S-202	2.3.3.1 Error vàlvula de control VC202, tanca completament.	Procés fora d'especificacions, sense conseqüències de seguretat per aquest equip.								

Continuació Taula 11.2. Anàlisi HAZOP del P&ID 200.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
2.3 No	2.3.3 No flux S-202	2.3.3.1 Error vàlvula de control VC202, tanca completament.	Procés fora d'especificacions, sense conseqüències de seguretat per aquest equip.								
		2.3.3.2 Error vàlvula de control VC203, tanca completament.	Procés fora d'especificacions, sense conseqüències de seguretat per aquest equip.								Posar alarma d'alt nivell en LIT201 i LIT202.
		2.3.3.3 Error vàlvula automàtica VA201, tanca completament.	Procés fora d'especificacions, sense conseqüències de seguretat per aquest equip.								
		2.3.3.4 Error vàlvula automàtica VA202, tanca completament.	Procés fora d'especificacions, sense conseqüències de seguretat per aquest equip.								
2.4 Menys	2.4.1 Menys flux E-201	2.4.1.1 No aplica									
	2.4.2 Menys flux S-201	2.4.2.1 No aplica									

Continuació Taula 11.2. Anàlisi HAZOP del P&ID 200.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
2.4 Menys	2.4.3 Menys flux S-202	2.4.3.1 Error en vàlvula de control VC202, queda parcialment tancada.	Procés fora d'especificacions, sense conseqüències de seguretat.								
		2.4.3.2 Error en vàlvula de control VC203, queda parcialment tancada.	Procés fora d'especificacions, sense conseqüències de seguretat.								Posar alarma d'alt nivell en LIT201 i LIT202.
	2.5.1 Més flux E-201	2.5.1.1 No aplica									
	2.5.2 Més flux S-201	2.5.2.1 No aplica									
2.5 Més	2.5.3 Més flux S-202	2.5.3.1 Error en vàlvula de control VC202, queda oberta completament.	Augment de pressió en S-202, possible ruptura catastròfica de l'equip.	4	-1	A	Vàlvula de seguretat PSV (1IPL) Posar dos vàlvules de control per redundància.	4	-5	C	Dissenyar PSV per aquest cas Posar alarma de més pressió en S-202 PIT202 I PIT203.
		2.5.3.2 Error en vàlvula de control VC203, queda oberta completament.	Augment de pressió en S-202, possible ruptura catastròfica de l'equip.	4	-1	A	Vàlvula de seguretat PSV (1IPL) Posar dos vàlvules de control per redundància.	4	-5	C	Dissenyar PSV per aquest cas Posar alarma de més pressió en S-202 PIT202 I PIT203.

Continuació Taula 11.2. Anàlisi HAZOP del P&ID 200.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
2.6 Invers	2.6.1 Flux invers E-201	2.6.1.1 No aplica									
	2.6.2 Flux invers S-201	2.6.2.1 No aplica									
	2.6.3 Flux invers S-202	2.6.3.1 No aplica									
2.7 Més	2.7.1 Més pressió E-201	2.7.1.1 Ruptura tubs E-201	Entrada d'hidrogen a l'aigua de refrigeració. Depèn de la pressió de disseny del E-201 ruptura catastròfica de l'equip.	4	-4	C	Vàlvula de seguretat PSV (1 IPL).	4	-6	D	Dissenyar PSV per aquest cas.
	2.7.2 Més pressió S-201	2.7.2.1 Error vàlvula de control VC202, tanca completament	Possibilitat de ruptura catastròfica del S-201	4	-1	A	Vàlvula de seguretat PSV (1 IPL) En cas de fallada la vàlvula quedarà sempre oberta.	4	-7	D	Dissenyar PSV per aquest cas. Posar alarma de més pressió en PI201.
		2.7.2.2 Error vàlvula de control VC203, tanca completament	Veure apartat 2.7.2.1.								
		2.7.2.3 Error vàlvula automàtica VA201, tanca completament	Veure apartat 2.7.2.1.								

Continuació Taula 11.2. Anàlisi HAZOP del P&ID 200.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
2.7 Més	2.7.2 Més pressió S-201	2.7.2.4 Error vàlvula automàtica VA202, tanca completament	Veure apartat 2.7.2.1.								
	2.7.3 Més pressió S-202	2.7.3.1 Veure apartat 2.5.3.									
	2.8.1 Menys pressió E-201	2.8.1.1 No aplica									
2.8 Menys	2.8.2 Menys pressió S-201	2.8.2.1 Error en vàlvula de control VC202, obra completament	Sense conseqüències de seguretat. No es compliran els requeriments de l'equip.								
		2.8.2.2 Error en vàlvula de control VC203, obra completament	Sense conseqüències de seguretat. No es compliran els requeriments de l'equip.								
	2.8.3 Menys pressió S-202	2.8.3.1 Error en vàlvula de control VC202, tanca parcialment.	Procés fora d'especificació, sense conseqüències de seguretat.								

Continuació Taula 11.2. Anàlisi HAZOP del P&ID 200.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
2.8 Menys	2.8.3 Menys pressió S-202	2.8.3.2 Error en vàlvula de control 203, tanca parcialment.	Procés fora d'especificació, sense conseqüències de seguretat.								
2.9 Més	2.9.1 Més temperatura E-201	2.9.1.1 Error en aigua de refrigeració, vàlvula de control VC201 tanca completament	Sense conseqüències de seguretat. No es compliran els requeriments del E-201.								Posar alarma de més temperatura en TIT201.
	2.9.2 Més temperatura S-201	2.9.2.1 No aplica									
	2.9.3 Més temperatura S-202	2.9.3.1 No aplica									
2.10 Menys	2.10.1 Menys temperatura E-201	2.10.1.1 Error en aigua de refrigeració, vàlvula de control VC201 oberta completament	Sense conseqüències de seguretat. No es compliran els requeriments del S-201								
	2.10.2 Menys temperatura S-201	2.10.2.1 No aplica									

Continuació Taula 11.2. Anàlisi HAZOP del P&ID 200.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C F R SALVAGUARDIA	C F R ACCIONS
2.10 Menys	2.10.3 Menys temperatura S-202	2.10.3.1 No aplica			
2.11 Altra	2.11.1 Altra composició E-201	2.11.1.1 No aplica			
	2.11.2 Altra composició S-201	2.11.2.1 Variació de les condicions de la corrent d'entrada a S-201	No s'aconseguirà la composició de sortida desitjada, sense conseqüències de seguretat.		
	2.11.3 Altra composició S-202	2.11.3.1 Variació de les condicions de la corrent d'entrada a S-202	No s'aconseguirà la composició de sortida desitjada, sense conseqüències de seguretat.		
2.12 Altra	2.12.1 Altra fase E-201	2.12.1.1 No aplica			
	2.12.2 Altra fase S-201	2.12.2.1 No aplica			
	2.12.3 Altra fase S-202	2.12.3.1 No aplica			
2.13 No	2.13.1 No <i>utilities</i> E-201	2.13.1.1 Veure apartat 2.9.1			
	2.13.2 No <i>utilities</i> S-201	2.13.2.1 No aplica			
	2.13.3 No <i>utilities</i> S-202	2.13.3.1 No aplica			

11.3. HAZOP P&ID 300

Continuació Taula 11.2. Anàlisi HAZOP del P&ID 300.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
3.1 Més	3.1.1 Més nivell E-301	3.1.1.1 No aplica									
	3.1.2 Més nivell S-301	3.1.2.1 Error vàlvula de control VC302, tanca completament	Inundació S-301, sense conseqüències de seguretat.								Posar alarma d'alt nivell en LIT301.
	3.1.3 Més nivell C-301	3.1.3.1 No aplica									
3.2 Menys	3.2.1 Menys nivell E-301	3.2.1.1 No aplica									
	3.2.2 Menys nivell S-301	3.2.2.1 Error vàlvula de control VC302, obra completament	Possible evacuació d'hidrogen per culs de S-301	3	-1	B	Afegir un altre controlador de nivell per redundància.	3	-5	D	Posar alarma de nivell baix en LIT302.
	3.2.3 Menys nivell C-301	3.2.3.1 No aplica									
3.3 No	3.3.1 No flux E-301	3.3.1.1 Error vàlvula automàtica VA404, tanca completament	Sense conseqüències de seguretat.								
	3.3.2 No flux S-301	3.3.2.1 No aplica									
	3.3.3 No flux C-301	3.3.3.1 No aplica									

Continuació Taula 11.3. Anàlisi HAZOP del P&ID 300.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQUÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
3.4 Menys	3.4.1 Menys flux E-301	3.4.1.1 No aplica									
	3.4.2 Menys flux entrada S-301	3.4.2.1 No aplica									
	3.4.3 Menys flux C-301	3.4.3.1 Error vàlvula de control VC303, tanca parcialment	No s'assolirà la pressió de disseny en l'alimentació de l'adsorció. Sense conseqüències de seguretat.								
3.5 Més	3.5.1 Més flux E-301	3.5.1.1 No aplica									
	3.5.2 Més flux S-301	3.5.2.1 No aplica									
	3.5.3 Més flux C-301	3.5.3.1 Error vàlvula de control VC303, obra parcialment	Augment de pressió en C-301, possible ruptura de l'equip.	4	-1	A	En cas de fallada, la vàlvula VC303 quedarà tancada.	4	-7	D	
3.6 Invers	3.6.1 Flux invers E-301	3.6.1.1 No aplica									
	3.6.2 Flux invers S-301	3.6.2.1 Retorn del bypass en C-301 a S-301	Sense conseqüències de seguretat								Posar vàlvula antiretorn VCH302.
	3.6.3 Flux invers C-301	3.6.3.1 No aplica									

Continuació Taula 11.3. Anàlisi HAZOP del P&ID 300.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
3.7 Més	3.7.1 Més pressió E-301	3.7.1.1 Ruptura tubs E-301	Entrada d'hidrogen a l'aigua de refrigeració. Depèn de la pressió de disseny del E-301 ruptura catastròfica de l'equip.	4	-4	C	Vàlvula de seguretat PSV (1 IPL).	4	-6	D	Dissenyar PSV per aquest cas.
	3.7.2 Més pressió S-301	3.7.2.1 No aplica									
	2.7.3 Més pressió C-301	3.7.3.1 Veure apartat 3.5.3									
3.8 Menys	3.8.1 Menys pressió E-301	3.8.1.1 No aplica									
	3.8.2 Menys pressió S-301	3.8.2.1 No aplica									
	3.8.3 Menys pressió C-301	3.8.3.1 Veure apartat 3.4.3.									
3.9 Més	3.9.1 Més temperatura E-301	3.9.1.1 Error en aigua de refrigeració, vàlvula de control VC301 tanca completament	Sense conseqüències de seguretat. No es compliran els requeriments del E-301.								Posar alarma de més temperatura en E-301 TIT301.

Continuació Taula 11.3. Anàlisi HAZOP del P&ID 300.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
3.9 Més	3.9.2 Més temperatura S-301	3.9.2.1 No aplica									
	3.9.3 Més temperatura C-301	3.9.3.1 No aplica									
3.10 Menys	3.10.1 Menys temperatura E-301	3.10.1.1 Error en aigua de refrigeració, vàlvula de control VC301 obra completament	Sense conseqüències de seguretat. No es compliran els requeriments del S-301.								
	3.10.2 Menys temperatura S-301	3.10.2.1 No aplica									
	3.10.3 Menys temperatura C-301	3.10.3.1 No aplica									
3.11 Altra	3.11.1 Altra composició E-301	3.11.1.1 No aplica									
	3.11.2 Altra composició S-301	3.11.2.1 Variació de les condicions de la corrent d'entrada a S-301	No s'aconseguirà la composició de sortida desitjada, sense conseqüències de seguretat.								

Continuació Taula 11.3. Anàlisi HAZOP del P&ID 300.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
3.11 Altra	3.11.3 Altra composició C-301	3.11.3.1 No aplica									
3.12 Altra	3.12.1 Altra fase E-301	3.12.1.1 No aplica									
	3.12.2 Altra fase S-301	3.12.2.1 No aplica									
	3.12.3 Altra fase C-301	3.12.3.1 No aplica									
3.13 No	3.13.1 No <i>utilities</i> E-301	3.13.1.1 Fallada energia elèctrica.	Veure apartat 3.9.1								
	3.13.2 No <i>utilities</i> S-301	3.13.2.1 Fallada energia elèctrica.	Fallada del sistema de control de l'equip.								
	3.13.3 No <i>utilities</i> C-301	3.13.3.1 Fallada energia elèctrica.	Aturada de l'equip, sense conseqüències de seguretat.								

11.4. HAZOP P&ID 400

Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
4.1 Més	4.1.1 Més nivell T-401	4.1.1.1 No aplica									
	4.1.2 Més nivell T-402	4.1.2.1 No aplica									
	4.1.3 Més nivell W-401	4.1.3.1 No aplica									
4.2 Menys	4.2.1 Menys nivell T-401	4.2.1.1 No aplica									
	4.2.2 Menys nivell T-402	4.2.2.1 No aplica									
	4.2.3 Menys nivell W-401	4.2.3.1 No aplica									
4.3 No	4.3.1 No flux T-401	4.3.1.1 Vàlvula automàtica VA401 tanca completament.	Possible augment de pressió en el sistema degut a la falta de descompressió en la línia d'entrada. Ruptura de la línia d'entrada.	3	-1	B	Configurar les dues vàlvules perquè quedin obertes en cas de fallada.	3	-5	D	
	4.3.2 No flux T-402	4.3.2.1 Error en vàlvula automàtica VA412, tanca completament.	Possible augment de pressió en el sistema degut a la falta de descompressió en la línia d'entrada. Ruptura de la línia d'entrada.	3	-1	B	Configurar la vàlvula perquè quedi oberta en cas de fallada.	3	-5	D	

Continuació Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQUÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
4.3 No	4.3.3 No flux W-401	4.3.3.1 Interrupció en la columna d'adsorció.	Possible sobreescalfament de l'intercanviador degut a la falta de cabal que podrien causar danys irreversibles en l'equip.	2	-1	C	Afegir un fusible tèrmic al W-401 que salti en superar els límits de disseny de l'equip. Configurar les vàlvules perquè quedin obertes en cas de fallada.	2	-5	D	
		4.3.3.2 Error en vàlvula automàtica VA407.	Veure apartat 4.3.3.1.								
		4.3.3.2 Error en vàlvula automàtica VA409.	Veure apartat 4.3.3.1.								
		4.3.3.3 Error en vàlvula de control VC401.	Veure apartat 4.3.3.1.								
4.4. Menys	4.4.1 Menys flux T-401	4.4.1.1 No aplica.									
	4.4.2 Menys flux T-402	4.4.2.1 Errors acumulats al W-301.	Desorció insuficient, s'allarga el temps per la regeneració completa. Sense consequències de seguretat.								

Continuació Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQUÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
4.4. Menys	4.4.3 Menys flux W-401	4.4.3.1 Error en vàlvula de control VC401, tanca parcialment.	Eficiència reduïda de l'escalfament, la columna de regeneració no aconseguirà la temperatura necessària. Possible sobreescalfament lleu de l'intercanviador.	1	-1	D		1	-1	D	
	4.5.1 Més flux T-401	4.5.1.1. No aplica.									
4.5 Més	4.5.2 Més flux T-402	4.5.2.1 Errors acumulats al W-401	Possible desorció incompleta si l'hidrogen passa massa ràpid a través de la columna. Sense conseqüències de seguretat.								
	4.5.3 Més flux W-401	4.5.3.1 Error en vàlvula de control VC401.	El intercanviador no escalfarà adequadament degut al pas ràpid de l'hidrogen. Sense conseqüències de seguretat.								

Continuació Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQUÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
4.6 Invers	4.6.1 Flux invers T-401	4.6.1.1 Error en vàlvula VA403, queda oberta durant el cicle d'adsorció.	Contaminació creuada de la corrent saturada d'aigua de la regeneració i la línia d'entrada. Sense conseqüències de seguretat.								
		4.6.2.1 Error en vàlvula VA408, queda oberta durant el cicle de desorció.	Pèrdua d'eficiència del procés de desorció. Tema operacional. Sense conseqüències de seguretat.								Posar vàlvula antiretorn VCH408.
	4.6.2 Flux invers T-402	4.6.2.2 Error en vàlvula VA414, queda oberta durant el cicle de desorció.	Pèrdua d'eficiència del procés de desorció. Tema operacional. Sense conseqüències de seguretat.								Posar vàlvula antiretorn VCH413.
		4.6.2.3 Error en vàlvula VA411, queda oberta durant el cicle de desorció.	Pèrdua d'eficiència del procés de desorció. Tema operacional. Sense conseqüències de seguretat.								Posar vàlvula antiretorn VCH411.

Continuació Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
4.6 Invers	4.6.3 Flux invers W-401	4.6.3.1 Error en vàlvula VA410, queda oberta durant el cicle de desorció.	Pèrdua d'eficiència del procés de desorció. Tema operacional. Sense conseqüències de seguretat.								Posar vàlvula antiretorn VCH409
	4.7.1 Més pressió T-401	4.7.1.1 Error en vàlvula VA413, queda tancada durant el cicle d'adsorció.	Risc d'explosió o ruptura de l'equip.	4	-1	A	Configurar la vàlvula perquè quedi oberta en cas de fallada. Implementar vàlvula de seguretat PSV (1 IPL). Afegir dos PIT a la columna per redundància.	4	-7	D	Dissenyar PSV per aquest cas. Posar alarma d'alta pressió en PIT401 i PIT402.
4.7. Més		4.7.1.2 Error en vàlvula VA415, queda tancada durant el cicle d'adsorció.	Veure aparat 4.7.1.1.								
	4.7.2 Més pressió T-402	4.7.2.1 Error en vàlvula VA404, queda tancada durant el cicle de desorció.	Risc d'explosió o ruptura de l'equip.	4	-1	A	Configurar la vàlvula perquè quedi oberta en cas de fallada. Implementar vàlvula de seguretat PSV (1 IPL). Afegir dos PIT a la columna per redundància.	4	-6	D	Dissenyar PSV per aquest cas. Posar alarma d'alta pressió en PIT403 i PIT404.
	4.7.3 Més pressió W-401	4.7.2.2 Veure apartat 4.3.2.									

Continuació Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C F R			SALVAGUARDIA	C F R			ACCIONS
				C	F	R		C	F	R	
4.8 Menys	4.8.1 Menys pressió T-401	4.8.1.1 Fugues en l'equip.	Risc d'explosió si l'hidrogen es mescla amb aire dins el rang d'inflamabilitat (4-75%). Risc d'incendi si la mescla entra en contacte amb una espurna o font de calor.	4	-5	C					
		4.8.1.2 Error en vàlvula de control VC401, obra completament.	Ineficiència en l'adsorció degut a la baixa pressió d'operació. Sense conseqüències de seguretat.								
	4.8.2 Menys pressió T-402	4.8.2.1 Fugues en l'equip	Risc d'explosió si l'hidrogen es mescla amb aire dins el rang d'inflamabilitat (4-75%). Risc d'incendi si la mescla entra en contacte amb una espurna o font de calor.	4	-5	C					
	4.8.3. Menys pressió W- 401	4.8.3.1 Fugues en l'equip	Risc d'explosió si l'hidrogen es mescla amb aire dins el rang d'inflamabilitat (4-75%). Risc d'incendi si la mescla entra en contacte amb una espurna o font de calor.	3	-5	D					
		4.8.3.2 Error en la vàlvula de control VC401.	Veure apartat 4.4.3.1.								

Continuació Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
4.9 Més	4.9.1 Més temperatura T-401	4.9.1.1 Reacció exotèrmica inesperada en el procés d'adsorció.	Descomposició de l'adsorbent i reducció de l'eficiència del procés. Augment de la pressió interna degut a l'expansió tèrmica amb risc d'explosió de l'equip.	4	-5	C	Implementar vàlvula de seguretat PSV (1 IPL). Afegir dos TIT a la columna per redundància.	4	-7	D	Posar alarma d'alta temperatura en TIT401 i TIT402. Dissenyar PSV per aquest cas.
		4.9.1.2 Refredament insuficient durant l'etapa de regeneració.	Veure apartat 4.9.1.1.								
	4.9.2 Més temperatura T-402	4.9.2.1 Error en el controlador JT401.	Descomposició de l'adsorbent. Increment de la pressió interna degut a l'expansió tèrmica amb risc d'explosió de l'equip.	4	-1	A	Implementar vàlvula de seguretat PSV (1 IPL). Afegir dos TIT a la columna T-402 per redundància.	4	-5	C	Posar alarma d'alta temperatura en TIT403 i TIT404. Dissenyar PSV per aquest cas.
	4.9.3 Més temperatura W-401	4.9.3.1 Error en el controlador JT401	Veure apartat 4.9.2.1								
4.10 Menys	4.10.1 Menys temperatura T-401	4.10.1.1 Fugues de calor a través de les parets de l'equip degut a un aïllament tèrmic insuficient.	Tema operacional, sense conseqüències de seguretat.								

Continuació Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQUÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
4.10 Menys	4.10.1 Menys temperatura T-401	4.10.1.2 La reacció d'adsorció no genera suficient calor per mantenir les condicions d'operació adiabàtiques.	Tema operacional, sense consequències de seguretat.								
	4.10.2 Menys temperatura T-402	4.10.2.1 Error en controlador JT401.	Desorció ineficient, evitant l'alliberació d'aigua de l'adsorbent. Major temps necessari per la regeneració completa. Sense consequències de seguretat.								
	4.10.3 Menys temperatura W-401	4.10.3.2 Veure apartat 4.10.2.1.									
4.11 Altra	4.11.1 Altra composició T-401	4.11.1.1 La columna en cicle d'adsorció es troba saturada.	Tema operacional, sense consequències de seguretat.								Activació de la recirculació del corrent d'hidrogen fora d'especificacions.
	4.11.2 Altra composició T-402	4.11.2.1 No aplica									
	4.11.3 Altra composició W-401	4.11.3.1 No aplica									

Continuació Taula 11.4. Anàlisi HAZOP del P&ID 400.

PARAULA GUIA	DESVIACIÓ	CAUSES	CONSEQÜÈNCIES	C	F	R	SALVAGUARDIA	C	F	R	ACCIONS
4.12 Altra	4.12.1 Altra fase T-401	4.12.1.1 No aplica									
	4.12.2 Altra fase T-402	4.12.2.1 No aplica									
	4.12.3 Altra fase W-401	4.12.3.1 No aplica.									
4.13 No	4.13.1 No utilities T-401	4.13.1.1 Fallada energia elèctrica	Fallada del sistema de control de l'equip.	4	-1	A	Parada de seguretat de la planta.	4	-6	D	
	4.13.2 No utilities T-402	4.13.2.1 Fallada energia elèctrica	Fallada del sistema de control de l'equip.	4	-1	A	Parada de seguretat de la planta.	4	-6	D	
	4.13.3 No utilities W-401	4.13.3.1 Fallada energia elèctrica.	Desorció ineficient. Sense conseqüències de seguretat.								

