

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS
INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

UNIVERSIDAD DE CANTABRIA



Trabajo Fin de Grado

**Modelado matemático de sistemas de
membrana en configuración de fibra hueca
para la purificación de hidrógeno en
corrientes industriales**

**(Mathematical modelling of membrane systems
in hollow fiber configuration for hydrogen
purification in industrial streams)**

Para acceder al Título de
Graduado/a en Ingeniería Química

Autor: Laia Ruiz García

Febrero – 2020

Índice

1. Introducción	1
1.1. El hidrógeno.....	1
1.2. Producción de hidrógeno	5
1.3. Tecnología de membrana.....	9
2. Objetivos	15
3. Desarrollo del modelo matemático	16
3.1. Balance de materia en cocorriente	20
3.2. Balance de materia en contracorriente	21
3.3. Balance de materia en flujo cruzado	23
3.4. Balance de energía.....	25
3.5. Perfiles a lo largo del módulo.....	28
4. Resultados y discusión	34
4.1. Estudio del Coke Oven Gas.....	39
4.2. Estudio del Ammonia Purge Gas	45
4.3. Estudio del Methanol Purge Gas	47
4.4. Comparación de las corrientes residuales	51
5. Conclusiones	52
6. Nomenclatura	55
7. Referencias	57
8. Anexos	59
8.1. Anexo I: Modelado en Aspen Custom módulo de membrana en configuración de fibra hueca en cocorriente.....	59
8.2. Anexo II: Modelado en Aspen Custom módulo de membrana en configuración de fibra hueca en contracorriente	63

8.3. Anexo III: Modelado en Aspen Custom módulo de membrana en configuración de fibra hueca en flujo cruzado	68
8.4. Anexo IV: Exportar modelo desde Aspen Custom Modeler (ACM) a Aspen Plus (AP)	73
8.5. Anexo V: Resumen de las configuraciones óptimas para la separación de hidrógeno en cada corriente residual.	75

Lista de Figuras

Figura 1. Configuración de pila de combustible [2].	2
Figura 2. Rutas de producción de hidrógeno [6].	6
Figura 3. Mecanismos de transporte molecular en membranas [15].	9
Figura 4. A la izquierda, transporte molecular a través de los poros de una membrana porosa. A la derecha, transporte por solución difusión en una membrana densa [16].	10
Figura 5. Robeson Plot para la separación de hidrógeno de dióxido de carbono [15].	12
Figura 6. Configuraciones de operación de módulos de membrana en fibra hueca. De arriba abajo: cocorriente, contracorriente y flujo cruzado.	17
Figura 7. Esquema de flujo de un módulo de membrana en cocorriente.	20
Figura 8. Esquema de la etapa k en un módulo de membrana en cocorriente.	21
Figura 9. Esquema de flujo de módulo de membrana en contracorriente.	22
Figura 10. Esquema de la etapa k en un módulo de membrana en contracorriente.	22
Figura 11. Esquema de flujo de módulo de membrana en flujo cruzado.	23
Figura 12. Esquema de la etapa k en un módulo de membrana en flujo cruzado.	24
Figura 13. Perfiles de concentración en el permeado (cocorriente).	29
Figura 14. Perfiles de temperatura (cocorriente).	30
Figura 15. Perfiles de concentración en el permeado (contracorriente)	31
Figura 16. Perfiles de temperatura (contracorriente)	32
Figura 17. Perfiles de concentración en el permeado (flujo cruzado).	32
Figura 18. Perfiles de temperatura (flujo cruzado).	33
Figura 19. Comparación de la recuperación de hidrógeno con distintos gradientes de presiones.	37
Figura 20. Comparación de la pureza de hidrógeno con distintos gradientes de presiones.	37
Figura 21. Flowsheet de la separación de COG en una etapa.	40
Figura 22. Flowsheet de la separación de COG en dos etapas en serie.	41
Figura 23. Flowsheet de la separación de COG en cuatro etapas en serie y uno de tratamiento del permeado.	42
Figura 24. Flowsheet de la separación de COG en cuatro etapas en serie y uno de tratamiento de una fracción del permeado.	43

Figura 25. Recuperación de hidrógeno obtenida en función del número de módulos de membrana empleados (COG).....	45
Figura 26. Recuperación de hidrógeno obtenida en función del número de módulos de membrana empleados (APG).	47
Figura 27. Recuperación de hidrógeno obtenida en función del número de módulos de membrana empleados (MPG).	50

Lista de Tablas

Tabla 1. Especificaciones técnicas del hidrógeno como vector energético [4].	3
Tabla 2. Composiciones de las corrientes residuales para la recuperación de hidrógeno.	7
Tabla 3. Permeabilidades y selectividades del H ₂ en distintos polímeros.	13
Tabla 4. Permeabilidad de gases puros a 5.5 bar y 35°C [6].	13
Tabla 5. Comparación de resultados en función de la longitud del módulo, el material de la membrana y el modo de flujo para las tres corrientes industriales.	35
Tabla 6. Condiciones de operación y dimensiones del módulo de membrana.	39
Tabla 7. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie (COG).	41
Tabla 8. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie añadiendo etapa de tratamiento del permeado (COG).	42
Tabla 9. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie añadiendo etapa de tratamiento de una fracción del permeado (COG).	43
Tabla 10. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie añadiendo etapa de tratamiento de una fracción del permeado y empleando 70 bares en la primera etapa (COG).	44
Tabla 11. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie en función de la longitud del módulo (APG).	46
Tabla 12. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie (MPG).	48
Tabla 13. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie y etapas de purificación del permeado (MPG).	49

1. Introducción

1.1. El hidrógeno

El hidrógeno (H) se trata del elemento químico más ligero de la tabla periódica. En condiciones normales, se encuentra en estado gaseoso y forma diatómica. Es un gas incoloro, inodoro, insípido, no tóxico e inflamable. Su número atómico es 1 al igual que su peso atómico, sus estados de oxidación son ± 1 . El tamaño de un átomo de hidrógeno es de $54 \cdot 10^{-12}$ m [1]. Solo es parcialmente soluble en líquidos y se trata del elemento con mayor capacidad difusiva.

Es el elemento más abundante del universo, formando entre un 70-80%_m de este. En La Tierra, se trata del noveno elemento más abundante, con un 0.88%_m, o el tercero más abundante si se considera la concentración atómica, con un 15.4% [1].

Con una demanda global de energía cada vez mayor y ante los problemas de agotamiento y la contaminación de combustibles fósiles, se buscan nuevas formas de producción energética más sostenibles para descarbonizar el sistema energético. El hidrógeno se plantea como un buen sustituto de los hidrocarburos debido a su abundancia y al hecho de no emitir gases de efecto invernadero como lo hacen los combustibles tradicionales.

Las formas de producción energética más habituales a partir de hidrógeno comprenden las pilas de combustible, los motores de combustión y las turbinas.

Las pilas de combustible son celdas electroquímicas que, esencialmente, transforman la energía química en eléctrica. Están formadas de dos electrodos, un electrolito y placas bipolares, como se muestra en la Figura 1. El sistema es alimentado con hidrógeno y oxígeno y produce agua y electricidad en corriente continua.

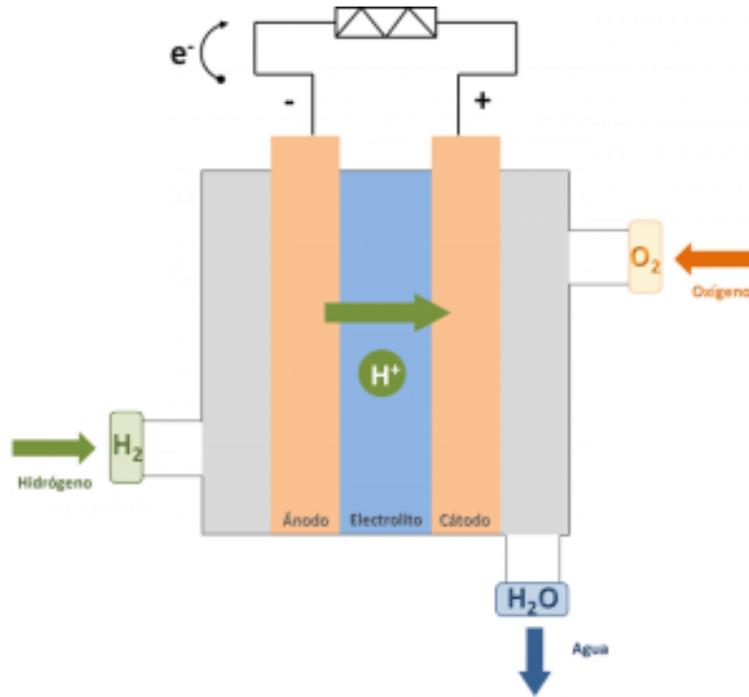
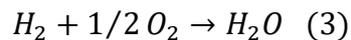
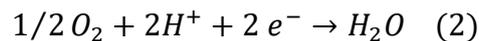
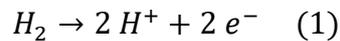


Figura 1. Configuración de pila de combustible [2].

En los electrodos, cubiertos de un catalizador, se producen las reacciones de oxidación y reducción del hidrógeno y del oxígeno respectivamente. La reacción (1) se corresponde con la oxidación, la (2) con la reducción y la (3) se trata de la reacción global mediante la cual se produce agua y electricidad:



Como se observa en la Figura 1, el transporte de electrones se lleva a cabo por un circuito exterior y esa circulación de electrones produce una corriente eléctrica. Para que circulen por el exterior la membrana debe estar aislada eléctricamente [2].

Una ventaja de la generación de energía mediante celdas electroquímicas es la posibilidad de invertir el proceso. Si se parte de agua y se aplica una corriente eléctrica, es posible descomponerla en hidrógeno y oxígeno, de forma que se puede almacenar el hidrógeno para una futura producción de energía. De esta forma, en cualquier momento a partir de agua, es posible producir hidrógeno a través de un consumo energético.

Este proceso inverso resulta interesante para su aplicación junto con las energías renovables, cuya producción se debe detener en los momentos de menor demanda eléctrica ya que no es posible el almacenamiento a gran escala de la energía. Si se emplea esta energía en la disociación del agua se puede almacenar energía en forma de hidrógeno.

Las otras alternativas más usadas para la producción de energía a través de hidrógeno son los motores de combustión y las turbinas. En ambos, se produce la combustión del hidrógeno, que provoca el movimiento de pistones o palas, respectivamente. En las turbinas, el vapor generado hace girar a las palas y el movimiento de las palas se transfiere a un alternador que genera electricidad. En los motores, la combustión provoca el movimiento de los pistones, permitiendo emplearse directamente en vehículos o transformarlo también en energía eléctrica mediante un alternador.

Mediante la combustión de hidrógeno con oxígeno puro como comburente se produce vapor de agua y energía, evitando de esta manera los gases contaminantes producidos por los motores convencionales con combustibles fósiles. Sin embargo, si se utiliza aire en lugar de únicamente oxígeno se pueden dar NO_x . El hidrógeno, además, tiene la ventaja de producir una buena combustión en cualquier proporción de hidrógeno/aire [3].

La combustión se lleva a cabo mediante encendido provocado, ya que debido a la alta temperatura de autoignición del hidrógeno es muy difícil provocar la combustión por presión como en el caso de los motores diésel. La llama se produce con gran velocidad, lo que requiere alta presión de inyección para evitar detonaciones.

Para el uso de hidrógeno como vector energético, la norma UNE-ISO 14687:2006 “Hidrógeno como combustible: especificaciones de producto”, establece unos requisitos mínimos en cuanto a concentración y contaminantes, se muestran en la Tabla 1 [4]. Cabe destacar la existencia de dos actualizaciones de esta norma en el año 2014 y 2019, sin embargo, solo la normativa de 2006 está traspuesta en Europa, por lo que será la considerada. La concentración de hidrógeno requerida para su aplicación como vector energético se mantiene en todas las versiones de la normativa.

Tabla 1. Especificaciones técnicas del hidrógeno como vector energético [4].

Apartado	Características	Tipo I			Tipo II	Tipo III
		Grado A	Grado B	Grado C		
6.2	Concentración hidrógeno (fracción molar mínima, %)	98,0	99,90	99,995	99,995	99,995
6.3	Para-hidrógeno (fracción molar mínima, %)	Sin especificar	Sin especificar	95,0	95,0	
Impurezas (contenido máximo)						
	Componentes			50	50	
6.4	Agua (cm ³ /m ³)	Sin considerar	Sin considerar	b	b	
6.5	Hidrocarburos totales	100	Sin considerar	b	b	
6.6	Oxígeno	a	100	c	c	
6.7	Argón	a	-	c	c	
6.7	Nitrógeno	a	400	b	b	
6.7	Helio			39	39	
6.8	CO ₂			d	d	
6.9	CO	1		d	d	
6.1	Mercurio		0,004			
6.11	Azufre	2,0	10			
6.12	Partículas	f	e	e	e	
	Densidad					e

Donde Tipo I se refiere a especificaciones de hidrógeno gas, Tipo II a líquido y Tipo III a estado semi-sólido. El Grado A incluye su aplicación en motores de combustión interna o turbinas para su uso en transporte, uso residencial y comercial. Es el único producto que no se puede emplear en pilas de combustible. El Grado B incluye el combustible industrial para ser usado en generación eléctrica o como fuente de energía calorífica. El Grado C incluye los sistemas de apoyo terrestre a vehículos aéreos y espaciales. El hidrógeno líquido (Tipo II) se puede aplicar a aviones y vehículos espaciales para su propulsión, generación eléctrica a bordo o vehículos terrestres. El hidrógeno en estado semi-sólido (Tipo III) se puede emplear para la propulsión de aviones y vehículos espaciales. La concentración de los contaminantes se expresa en micromoles/mol.

El objetivo de este trabajo fin de carrera será la producción de hidrógeno para el primero de los casos, con una pureza del 98%, sin considerar las impurezas. Para eliminar estas últimas se deberán emplear procesos complementarios. Mediante estos, también será

posible aumentar la concentración para la aplicación en pilas de combustible y otros sistemas más exigentes. Para ello, en primer lugar, se estudiarán las alternativas disponibles para la producción de hidrógeno.

1.2. Producción de hidrógeno

La producción de hidrógeno a nivel industrial se ha llevado a cabo habitualmente partiendo de combustibles fósiles. Su descomposición en fracciones más ligeras conlleva el desprendimiento de moléculas de hidrógeno en forma gaseosa. Sin embargo, existe un amplio abanico de materias primas y tecnologías para su producción, las más habituales se describen a continuación:

- A) Gasificación de carbón: transformación de combustibles sólidos en gases mediante una serie de reacciones termoquímicas. Para la producción de hidrógeno se quema carbón con oxígeno de alta pureza a alta presión y temperatura. Se puede alcanzar una pureza de hidrógeno de en torno al 30% [5]. Es posible gasificar otros combustibles: madera, fuel, metano, etc.
- B) Reforma catalítica de hidrocarburos: los hidrocarburos reaccionan con vapor de agua absorbiendo calor y formando monóxido de carbono e hidrógeno. La alimentación más común es gas natural. Además, se puede formar hidrógeno adicional por la reacción exotérmica que ocurre con el agua y el monóxido de carbono para dar dióxido de carbono e hidrógeno. Se puede alcanzar pureza alta [5].
- C) Procesos de refinerías: operaciones como la reforma catalítica, el craqueo catalítico o térmico son comunes en este sector y llevan asociada una producción de hidrógeno. La pureza obtenida se encuentra entre un 75 y 85% [5].
- D) Procesos petroquímicos: para la producción de etileno, propileno y acetileno se produce hidrógeno como subproducto. Si se separa del metano por condensación, se puede obtener una corriente de una pureza superior al 80% [5].
- E) Electrólisis del agua: si se invierte el proceso de una pila electroquímica se puede producir hidrógeno mediante el consumo de agua y energía eléctrica.

- F) Reacciones de metales: la formación de hidróxidos metálicos lleva asociada la liberación de hidrógeno. Otras reacciones, como la formación de cloruro de zinc a partir de ácido clorhídrico, también generan este gas como subproducto [5].
- G) Descomposición de amoníaco: al aplicar calor, el amoníaco se descompone produciendo nitrógeno e hidrógeno. La pureza de esta corriente es menor de un 50% [5].
- H) Descomposición de metanol: el metanol se puede descomponer mediante dos reacciones en serie. La primera de ellas da como resultado dióxido de carbono e hidrógeno y la segunda monóxido de carbono e hidrógeno. La temperatura debe ser alta y se debe usar un catalizador. La pureza es similar al caso del amoníaco [5].
- I) Descomposición de sulfuro de hidrógeno: se necesitan temperaturas muy altas y cobalto o platino como catalizador, es difícil tener una conversión alta de la reacción. Da como resultado azufre e hidrógeno [5].

Sin embargo, existen otras formas de producción menos implementadas. Algunas de estas se recogen en la Figura 2:

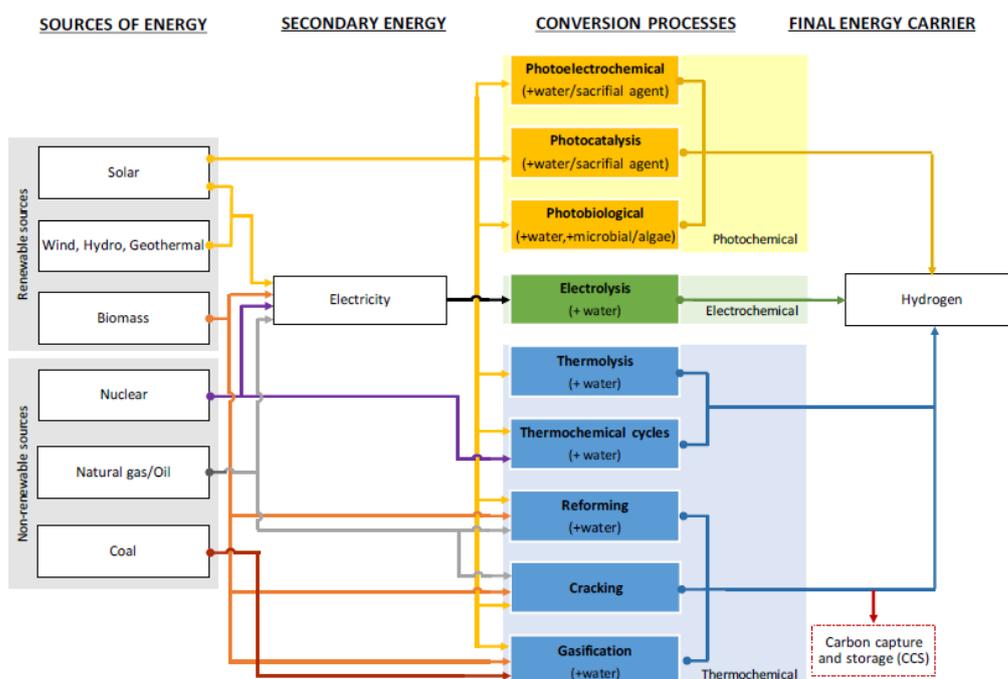


Figura 2. Rutas de producción de hidrógeno [6].

Se busca una producción limpia y sostenible, que no genere gases contaminantes y de una pureza muy elevada. Una buena alternativa es la separación de H₂ de corrientes

residuales procedentes de distintas actividades industriales. Estas corrientes de no ser aprovechadas son desechadas, con lo que su valorización energética es favorecedora para el medioambiente.

Un amplio estudio de las industrias con hidrógeno en sus procesos y de la concentración de este en sus corrientes residuales lleva a considerar tres alternativas diferentes:

- Coke Oven Gas: se trata de un subproducto de la producción de coque, se produce al calentar el carbón y forma la parte volátil del mismo [7]. Este proceso también se lleva a cabo en acerías. La media de producción de esta corriente en estas empresas es de 908 kg/h, su presión de 1 bar y la temperatura de 25°C [8].
- Ammonia Purge Gas: para la producción de amoniaco se emplea habitualmente gas natural. El gas no convertido se recircula al reactor para aumentar la conversión, pero contiene metano por lo que se deben hacer purgas para no aumentar su concentración el reactor, en estas purgas también se extrae hidrógeno [9]. Esta corriente de media en estas industrias tiene un caudal de 230.5 kg/h, una presión de 100-200 bar y una temperatura de 15°C [8].
- Methanol Purge Gas: la producción de metanol se lleva a cabo mediante gas de síntesis, el cual se produce a partir de hidrocarburos. Al igual que en el anterior caso, para aumentar la conversión se deben realizar recirculaciones, pero esto conlleva también extraer purgas para no aumentar en exceso la concentración de gases inertes [10]. La media de producción de este gas es de 3932 kg/h, tiene una presión de 68 bar y una temperatura de 40°C [8].

Las composiciones de las anteriores corrientes de muestran en la Tabla 2:

Tabla 2. Composiciones (% molar) de las corrientes residuales para la recuperación de hidrógeno.

	COG	MPG	APG
H_2	60.2%	63.1%	61%
N_2	4.7%	11.2%	22.1%
CO_2	2.1%	11.1%	-
CO	6.8%	3.4%	-
CH_4	26.2%	11.2%	16.9%

Para el uso del hidrógeno como vector energético es necesario tener una concentración muy elevada del mismo, por lo que es necesario recurrir a técnicas de purificación. Lo habitual es utilizar una combinación de ellas para alcanzar el mejor resultado teniendo en cuenta consideraciones económicas y energéticas.

Las técnicas más habituales son la destilación criogénica, PSA (Pressure Swing Adsorption) y la tecnología de membranas.

La destilación criogénica aprovecha la diferencia en el punto de ebullición. El punto de ebullición del hidrógeno es de $-252.9\text{ }^{\circ}\text{C}$ (20.55 K). Si se comparan las temperaturas de ebullición de los contaminantes más comunes con la del hidrógeno, solamente el helio tiene una menor [11].

Las tecnologías criogénicas operan a temperaturas inferiores a 123 K [12]. Si se aplica a una columna de destilación habitual, es posible enfriar el sistema hasta una temperatura suficiente para que los contaminantes presentes en la corriente residual se encuentren en fase gas y el hidrógeno en fase líquida, siendo separadas ambas corrientes por densidad. Sin embargo, esta tecnología requiere una gran inversión económica y un elevado coste de operación.

Las técnicas de adsorción dan mejores rendimientos debido a la baja interacción del hidrógeno con los adsorbentes [13], y necesitan menor energía para el enfriamiento por lo que económicamente también son más eficientes. La elección del agente adsorbedor dependerá de las impurezas que se deban eliminar de la corriente.

El tipo de adsorción más utilizada es la PSA (Pressure Swing Adsorption). Esta utiliza una despresurización para la regeneración del agente adsorbedor. Cuando la corriente a tratar se pone en contacto, a alta presión, con el agente, este adsorbe los contaminantes mientras que el hidrógeno permanece libre.

El coste de operación de la tecnología de membranas es menor, ya que no requiere operaciones de intercambio de calor. Además, no requiere de ningún agente material como era el caso de la adsorción, lo que le permite operar en continuo. Según su configuración, pueden llegar a ser muy compactas minimizando el volumen que requiere el equipo e intensificando el proceso, lo que resulta en un menor coste de inversión. Además, la operación de este tipo de equipos es muy sencilla.

La tecnología de membranas es la elegida para la purificación de hidrógeno en este trabajo fin de carrera. Con ella, se pretende alcanzar la especificación de pureza, mientras que la eliminación de contaminantes se deberá abordar después mediante PSA o destilación criogénica. A continuación, se describirá su fundamento y características principales.

1.3. Tecnología de membrana

Las tecnologías de membranas se basan en una separación mediante una barrera, que debido a la estructura física de la misma solo permite a determinados componentes atravesarla. La propiedad que distingue los componentes que atraviesan la membrana es la permeabilidad. La permeabilidad es una propiedad intrínseca de la membrana para cada componente y varía con la temperatura según la ecuación de Arrhenius [14].

Existen cuatro mecanismos diferentes por medio de los cuales los componentes atraviesan una membrana:

- Difusión Knudsen: las colisiones de las moléculas con las paredes son más probables que con otras moléculas [14].
- Tamizado molecular: el diámetro del poro es tan pequeño que no permite colisiones. Las moléculas lo suficientemente pequeñas lo atraviesan [14].
- Solución-difusión: está basado tanto en la solubilidad de los compuestos en la membrana como en la movilidad de la especie en la misma por difusividad [14].
- Difusión en la superficie: puede ocurrir a la vez que la difusión Knudsen, las moléculas son adsorbidas en las paredes de los poros y se transportan por la superficie [14].

En la Figura 3 se muestran los mecanismos anteriormente descritos:

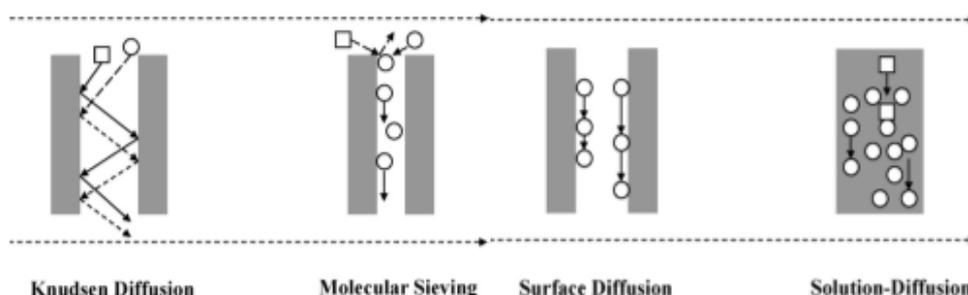


Figura 3. Mecanismos de transporte molecular en membranas [15].

Atendiendo a su estructura, las membranas pueden ser densas o porosas. Las porosas poseen microporos de diámetro menor a 2nm mientras que las densas no tienen poros o no son apreciables [14]. Esta diferencia estructural provoca que en la segunda de ellas el único mecanismo de transporte posible sea el de solución difusión, como se observa en la Figura 4.

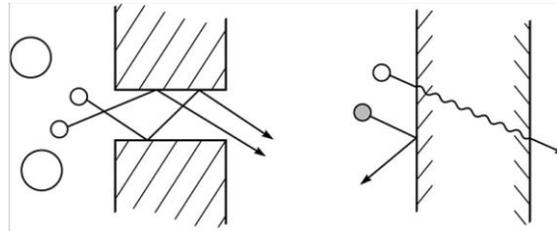


Figura 4. A la izquierda, transporte molecular a través de los poros de una membrana porosa. A la derecha, transporte por solución difusión en una membrana densa [16].

Las membranas se pueden dividir en dos grupos diferenciados teniendo en cuenta el material de fabricación: orgánicas e inorgánicas. Las primeras agrupan a todas las membranas poliméricas, mientras que las segundas recogen las metálicas, cerámicas y de carbono. Las membranas cerámicas pueden ser densas, en cuyo caso el mecanismo de transporte es solución-difusión, o porosas, ocurriendo por tamizado molecular. En membranas poliméricas normalmente ocurre por solución-difusión y su estructura es densa. Estas últimas se pueden dividir a su vez en glassy (cristalinas) o rubbery (amorfas) en función de su estructura molecular. Las membranas metálicas también se pueden clasificar por su composición: metales puros, aleaciones binarias, aleaciones complejas, aleaciones amorfas, recubrimientos metálicos [14].

Las membranas inorgánicas soportan condiciones de temperatura, acidez, etc, más agresivas que las orgánicas. Los polímeros son fácilmente degradables, por lo que no soportan temperaturas de operación superiores a 100°C ni compuestos como ácido clorhídrico, SO_x y CO₂, este último debido a la plastificación de las membranas [14].

Se emplearán para la separación membranas poliméricas densas, el mecanismo de transporte habitual para estos materiales es de solución-difusión. La ecuación que describe este fenómeno es la que se expresa a continuación:

$$m_j = \frac{P_j}{\delta} \cdot \Delta P_j$$

El flujo, m_j , es el transporte de gas a través de la membrana por unidad de área de membrana, se expresará en $\text{kmol}/(\text{h m}^2)$. La fuerza impulsora del transporte es la diferencia de presión parcial, ΔP_j , entre los lados de la membrana y se medirá en bar. Para que la separación se lleve a cabo, los compuestos deben tener diferente permeabilidad, P_j , expresada en $\text{kmol}/(\text{h m bar})$. El flujo es inversamente proporcional al espesor de la membrana, δ (m), es por esto que la configuración estructural más habitual para las membranas sea asimétrica. Estas están compuestas por una fina capa activa responsable de la separación sobre un soporte, que aporta resistencia mecánica para soportar altas presiones [11].

La permeabilidad, a su vez, es el producto del coeficiente de difusión del permeado, D_j , que mide la movilidad de las moléculas en la membrana y se expresa en m^2/h , y el coeficiente de sorción, S_j , que caracteriza la facilidad de la solubilidad de los compuestos en la membrana y se expresa en $\text{kmol}/(\text{bar m}^3)$.

$$P_j = D_j \cdot S_j$$

El coeficiente de sorción es dependiente de la temperatura y se puede calcular a partir de correlaciones con la temperatura crítica de los gases. Mientras que la difusión depende de la temperatura y varía mucho según el material. Cuando aumenta el tamaño molecular el coeficiente de difusión cae [16].

La capacidad de separación se mide a través de la selectividad:

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i}{P_j}$$

Habitualmente, se consiguen selectividades altas cuando el componente más permeable también es el más pequeño [16]. En el caso del hidrógeno, esta tecnología ofrece altas selectividades debido a que su permeabilidad es mayor que la de la mayoría de los gases [11].

Experimentalmente, se ha observado que existe una relación entre la permeabilidad y la selectividad, de forma que cuando una aumenta la otra cae, impidiendo conseguir una separación de alta pureza y flujo. Esto se observa en los gráficos denominados Robeson Plot, donde se grafica la selectividad en el eje y frente a la permeabilidad en el eje x. Al

representar datos experimentales, se dibuja una línea superior que se denomina upper bound [16]. Cuando se busca una selectividad muy alta, la permeabilidad que se puede conseguir es muy baja, es decir, se obtiene un producto de alta pureza y bajo caudal. Lo mismo ocurre al contrario, dibujándose de esta forma el upper bound. Como ejemplo, en la Figura 5 se tiene el Robeson Plot para la separación de hidrógeno de dióxido de carbono.

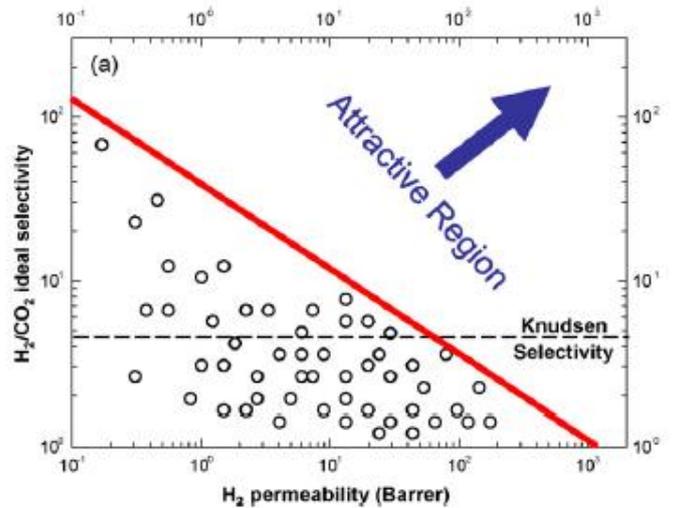


Figura 5. Robeson Plot para la separación de hidrógeno de dióxido de carbono [15].

Las membranas metálicas con plata o platino son muy empleadas para la separación de hidrógeno ya que tienen una permeabilidad específica muy alta, llegando a alcanzar purzas de hidrógeno del 99.9% [14], sin embargo, el coste de fabricación es muy elevado [11]. Las membranas poliméricas también dan valores altos de permeabilidad y selectividad y su coste es considerablemente más bajo [14]. Actualmente, todas las membranas de uso comercial son poliméricas, las más empleadas son de polisulfonas, poliimidias y acetatos de celulosa [11]. De hecho, la primera separación industrial que empleó membranas fue para separar hidrógeno de una corriente de purga de una planta de producción de amoniaco [16].

En la Tabla 3 se puede muestran las permeabilidades y selectividades del hidrógeno en distintas membranas poliméricas.

Tabla 3. Permeabilidades y selectividades del H₂ en distintos polímeros.

Polímero	Permeabilidad H ₂ (Barrer)	Selectividad			Referencia
		H ₂ /N ₂	H ₂ /CH ₄	H ₂ /CO ₂	
<i>Polisulfona</i>	12.1	15.1	30.3	2.0	[14]
<i>Poliestireno</i>	23.8	39.7	29.8	2.3	[14]
<i>Polimetil metacrilato</i>	2.4	2.0	4.0	4.0	[14]
<i>Fluoruro de polivinilideno</i>	2.4	3.4	1.8	2.0	[14]
<i>Matrimid</i>	24	96	109	2.70	[17]
<i>Polyactive 1500</i>	18	5.3	1.8	0.099	[17]
<i>PDMS</i>	820	2.1	0.75	0.23	[17]

Este trabajo fin de grado se enmarca dentro de las actividades del proyecto europeo PEMFC SUDOE del programa Interreg SUDOE coordinado por el grupo Procesos Avanzados de Separación de la Universidad de Cantabria, en el que se estudió experimentalmente la viabilidad de recuperar hidrógeno de corrientes residuales industriales mediante la tecnología de membranas. En este sentido se obtuvieron en el laboratorio valores de permeabilidades de los diferentes gases que integran las corrientes residuales para 3 tipos de membranas comerciales a 35 °C y 5.5 bares de presión como se indican en la Tabla 4.

Tabla 4. Permeabilidad de gases puros a 5.5 bar y 35°C [6].

Membrana	Permeabilidad a 5.5 bar, 35°C (Barrer)				
	H ₂	N ₂	CH ₄	CO	CO ₂
PEI 25 μm	7,88	0,03	0,05	0,04	1,76
PES 25 μm	10,47	0,08	0,2	0,11	5,63
PBI 55 μm	0,52	0,002	0,001	0,004	0,26

Usar datos de permeabilidad obtenidos para gases puros puede causar errores debido a adsorciones competitivas, plastificación y polarización de la concentración al trabajar con mezclas. La plastificación se debe a que algunos compuestos, como el CO₂, se adsorben en los polímeros y no se desorben, incrementando el espacio entre cadenas poliméricas y la movilidad de estas, provocando un aumento de la permeabilidad de

todos los componentes. La polarización de la concentración consiste en un aumento de la concentración de los componentes menos permeables en la capa de gas contigua a la membrana, pudiendo provocar un aumento de la resistencia al transporte de materia [18].

Para las separaciones, habitualmente se necesitan áreas de membrana muy grandes, que requerirían volúmenes de equipos desmesurados en el caso de utilizar membranas planas. Para maximizar el área de membrana por unidad de volumen de equipo se utilizan membranas planas enrolladas en espiral, capaces de proporcionar áreas mayores de $900 \text{ m}^2/\text{m}^3$ o fibras huecas, con áreas de en torno a $9000 \text{ m}^2/\text{m}^3$. Las fibras huecas son membranas cilíndricas y huecas, de un diámetro del orden de 0.5 mm. Estas últimas son las elegidas para la separación que se va a llevar a cabo.

2. Objetivos

El principal objetivo de este trabajo fin de carrera consiste en encontrar la mejor configuración del sistema de membrana de fibras huecas para optimizar la recuperación de hidrógeno de tres corrientes residuales en tres membranas comerciales, de forma que se alcance la pureza de hidrógeno requerida para su uso en el sector energético, del 98%, y se maximice su recuperación. Para ello se deben llevar a cabo los siguientes pasos:

- Implementación del modelo para la simulación para la separación de hidrógeno en corrientes residuales industriales de acerías, plantas de fabricación de coque, amonio y metanol.
- Análisis de resultados y planteamiento de la mejor configuración para la separación de hidrógeno.

Para ello, en primer lugar, se debe desarrollar un modelo matemático e integrarlo en un software que describa la separación que se lleva a cabo en un módulo de membrana de fibra hueca, para ello se deben perseguir los siguientes objetivos individuales:

- Planteamiento de balances de materia y de energía de un módulo de membrana de fibra hueca en cocorriente, contracorriente y flujo cruzado para la separación de hidrógeno.
- Modelado en software de simulación Aspen Custom Modeler de los balances de materia y energía que describen el comportamiento de un módulo de membrana de fibra hueca.
- Exportación de los modelos en Aspen Custom Modeler a Aspen Plus, donde crear sistemas de separación en serie-paralelo.

3. Desarrollo del modelo matemático

Con el objetivo de estudiar la influencia de las distintas variables de operación en la separación de hidrógeno de corrientes residuales, se busca crear una herramienta de simulación donde estudiar las diferentes opciones disponibles.

Se quiere describir el comportamiento de los gases en el interior de un módulo de membrana de fibra hueca mediante un simulador de procesos como Aspen Plus. Para ello, se escribirán los distintos conjuntos de ecuaciones que describen cada posible modo de operación en Aspen Custom Modeler. Este software permite el diseño de equipos mediante su propio lenguaje de programación, mientras que Aspen Plus constituye un simulador donde introducir las condiciones de operación y obtener los resultados del proceso.

Las ecuaciones que describen un módulo de membrana dependen del modo de flujo de los gases en su interior. Si el permeado y el retenido fluyen en la misma dirección, se dice que el módulo trabaja en cocorriente, y si van en sentidos contrarios en contracorriente. Si la dirección de flujo es perpendicular, se dice que es flujo cruzado. Estas configuraciones se describen en la Figura 6. Se asume que en todos los casos la alimentación será introducida por el interior de las fibras huecas y permeará hacia la carcasa del módulo de membrana. La corriente de arrastre, sin embargo, se introduce por la carcasa.

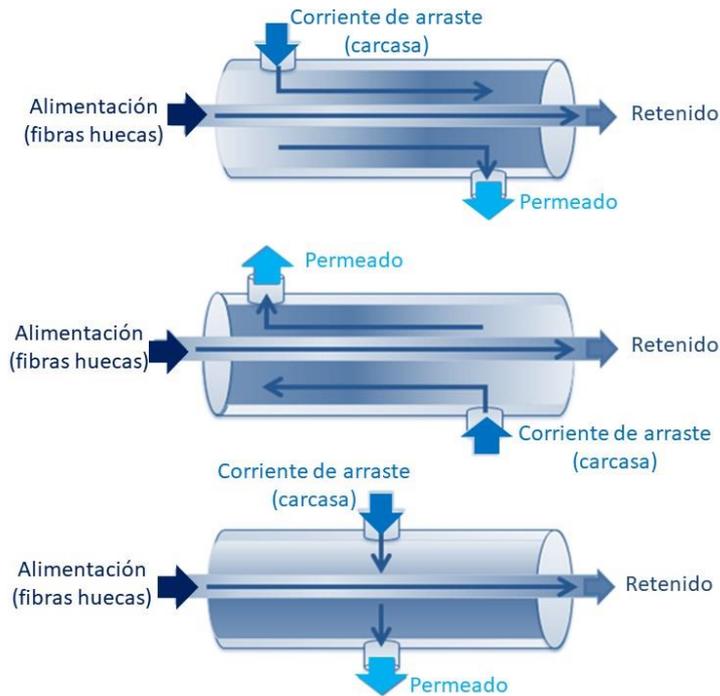


Figura 6. Configuraciones de operación de módulos de membrana en fibra hueca. De arriba abajo: cocorriente, contracorriente y flujo cruzado.

En una primera fase, para el modelado de las distintas configuraciones se utilizarán balances de materia, considerando que se trabaja en condiciones isoterma.

Además de esto, se asumirá [19]:

- Presión constante en el lado de la carcasa y en el interior de las fibras.
- Toda la resistencia al transporte de materia se encuentra en la capa selectiva de la fibra y nada en su soporte.
- No hay mezcla axial.
- Flujo pistón en todo el módulo.
- Todas las fibras se comportan igual, de manera que con la resolución de una de ellas se puede escalar el resultado.
- No hay deformación de las fibras por la presión.
- El radio interno, externo y el espesor de las fibras huecas es uniforme.
- El módulo de membrana opera en estado estacionario.

La resolución dependerá del número de componentes que intervienen en el sistema. Se debe dar resultado al caudal de permeado y retenido del sistema, así como a sus composiciones. Para ello, en un caso en que se tengan M componentes, se deben

resolver $2(M-1)+2$ ecuaciones, las cuales incluyen las fracciones molares de cada componente en cada corriente y el caudal de ellas. En el caso de no considerar presiones constantes, se necesitarán dos ecuaciones más para el cálculo de la presión en la carcasa y en las fibras.

Para facilitar la obtención de resultados fiables se discretizará la longitud del módulo de membrana en N etapas, de manera que se eliminen las integrales de los balances. Cuanto mayor número de etapas se utilicen, más exacto será el resultado. Su numeración será de derecha a izquierda, comenzando por 1 hasta la última etapa que será N . Las corrientes recibirán el número de la etapa que abandonan.

Para el modelado se considerará que la alimentación entra por las fibras huecas y las atraviesa para convertirse en permeado. Se considera la posibilidad de introducir una corriente de arrastre por la carcasa de composición diferente a la alimentación, normalmente se emplea un gas inerte como helio, nitrógeno o argón, para facilitar el transporte del permeado.

Se utilizarán dos índices para la formulación de los balances de materia: uno para los componentes y otro para las etapas de discretización. El subíndice j se refiere a los componentes y va de 1 a M . El subíndice k se refiere a las etapas y va de 0 a $N+1$, 0 a N o 1 a N , dependiendo del modo de flujo.

A las corrientes que no han atravesado la membrana (alimentación y retenido) se les denotará con L_k para el flujo molar total que sale de la etapa k , $l_{j,k}$ para flujo molar del componente j que sale de la etapa k y la composición en el componente j en la etapa k será $x_{j,k}$. Para el otro lado de la membrana, es decir, la corriente de arrastre y el permeado serán V_k , $v_{j,k}$ e $y_{j,k}$ respectivamente. Todos los flujos molares serán expresados en kmol/h.

Los flujos molares de cada componente se pueden relacionar con los flujos molares totales a partir de su composición mediante las siguientes ecuaciones:

$$l_{j,k} = L_k \cdot x_{j,k} \quad L_k = \sum_{j=1}^M l_{j,k} \quad 1 = \sum_{j=1}^M x_{j,k}$$

$$v_{j,k} = V_k \cdot y_{j,k} \quad V_k = \sum_{j=1}^M v_{j,k} \quad 1 = \sum_{j=1}^M y_{j,k}$$

Para plantear el balance de materia de cada etapa es necesario conocer el área de membrana que le corresponde a cada una de ellas. Para ello se usará la siguiente ecuación:

$$A_k = \frac{2 \cdot \pi \cdot R_o \cdot L \cdot N_f}{N}$$

Donde R_o se corresponde con el radio exterior de la fibra hueca (metros), L su longitud activa (metros), N_f el número de fibras que forman el módulo y N el número de etapas en que se discretiza la longitud.

También más tarde será necesario conocer la relación entre la permeancia y la permeabilidad, que viene dada por la siguiente expresión:

$$Q_j = \frac{P_j}{\delta}$$

Donde Q_j es la permeancia del compuesto j , P_j es su permeabilidad y δ es el espesor activo de la membrana. Se expresará la permeancia en GPU y la permeabilidad en Barrer, al tratarse de las unidades más comunes en la bibliografía. La conversión es inmediata si se introduce el espesor en micrómetros.

Para introducir la permeancia en los balances de materia se deben convertir sus unidades a una base molar. Mediante la consulta de tablas de conversión, se conoce la siguiente equivalencia:

$$1 \text{ GPU} = 10^{-6} \frac{\text{cm}^3 (\text{STP})}{\text{cm}^2 \text{ s cmHg}}$$

Por simples cálculos de conversión, se puede obtener la siguiente relación con las unidades que se emplean en los balances de materia:

$$1 \text{ GPU} = 1.206 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kmol}}{\text{m}^2 \text{ h bar}}$$

Con todas estas consideraciones se puede pasar al modelado de cada una de las posibles configuraciones de módulos de membranas huecas.

El modelado de cada una de estas situaciones en lenguaje de Aspen Custom Modeler se encuentra en los Anexos I, II y III respectivamente.

3.1. Balance de materia en cocorriente

Si el módulo de membrana opera en cocorriente, la alimentación entra por la etapa N y la corriente de arrastre también, de esta forma el retenido sale por la etapa 1 al igual que el permeado, como se muestra en la Figura 7.

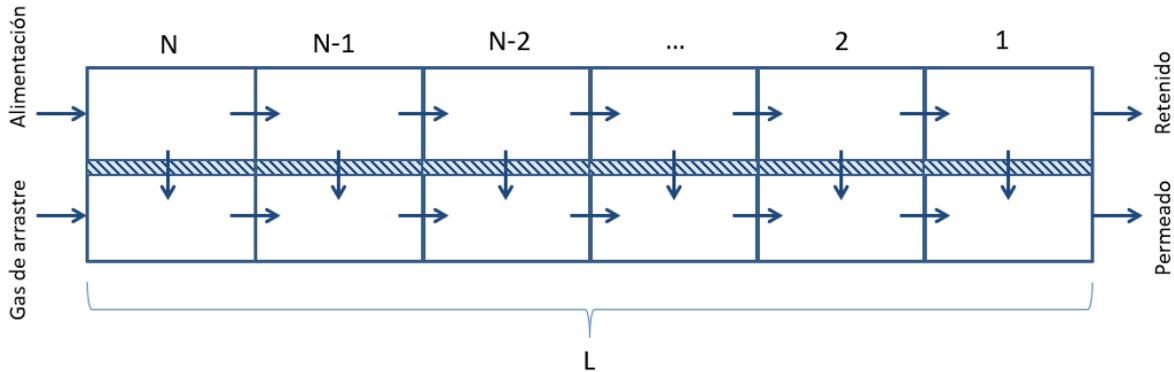


Figura 7. Esquema de flujo de un módulo de membrana en cocorriente.

Este esquema representa el caso de una única fibra hueca, se escalará para la totalidad de fibras que componen el módulo. De esta forma, la cámara superior se corresponde con el interior de la fibra, la membrana que se representa se trata de la pared de la fibra y la cámara inferior es el espacio entre la carcasa del módulo de membrana y la fibra que se somete a estudio.

Siguiendo el anterior esquema, si se elabora uno correspondiente a una etapa k cualquiera dentro del módulo, la nomenclatura de las corrientes se muestra en la Figura 8. Si se aplica a la etapa N, las corrientes de entrada se corresponderán con la alimentación y el gas de arrastre, mientras que, si se aplica a la etapa 1, las corrientes de salida serán el retenido y el permeado del proceso.

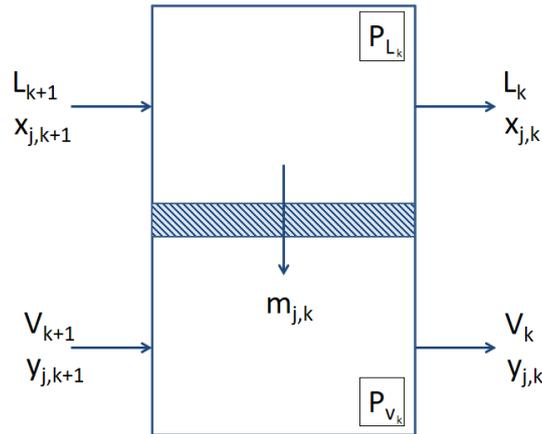


Figura 8. Esquema de la etapa k en un módulo de membrana en cocorriente.

Ahora se puede plantear el balance de materia a cada componente en cada una de las etapas, que siguiendo el esquema se corresponde con:

$$l_{j,k+1} + v_{j,k+1} = l_{j,k} + v_{j,k}$$

Para conocer el flujo molar de cada componente que atraviesa la membrana en cada etapa se realiza otro balance, pero esta vez a cada lado de la membrana, de donde se obtiene:

$$m_{j,k} = l_{j,k+1} - l_{j,k} = v_{j,k} - v_{j,k+1}$$

Donde $m_{j,k}$ se trata del flujo molar del componente j que atraviesa la membrana en la etapa k, expresado en kmol/h. Debido a que la presión en el lado de la alimentación es mayor, la corriente que atraviesa la membrana siempre lo hace en la dirección desde el retenido hacia el permeado, es decir, hacia abajo.

Este flujo a través de la membrana se puede relacionar con la permeancia y el gradiente de presión parcial a través de la siguiente expresión [19]:

$$m_{j,k} = Q_j \cdot A_k \cdot (P_{L_k} \cdot x_{j,k} - P_{V_k} \cdot y_{j,k})$$

La traducción de las ecuaciones al lenguaje de programación de Aspen Custom Modeler se encuentra en el Anexo I.

3.2. Balance de materia en contracorriente

Si el módulo de membrana opera en contracorriente, la alimentación entra por la etapa N y la corriente de arrastre por la etapa 1, de esta forma el retenido sale por la etapa 1

y el permeado por la etapa N. Esto se puede observar en la Figura 9, de igual forma que en el anterior caso ilustrado para una única fibra hueca.

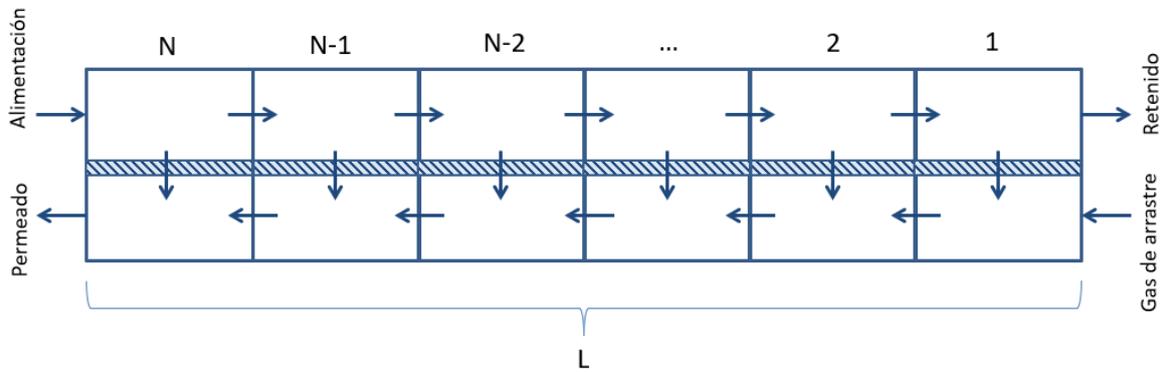


Figura 9. Esquema de flujo de módulo de membrana en contracorriente.

El esquema correspondiente a una etapa cualquiera k dentro de las N etapas se muestra en la Figura 10. Ahora, si nos situamos en la etapa N, como entrada se tiene la alimentación a la izquierda y como salida el permeado también a la izquierda. Sin embargo, en la etapa 1, a la derecha como entrada se puede identificar el gas de arrastre y como salida el retenido.

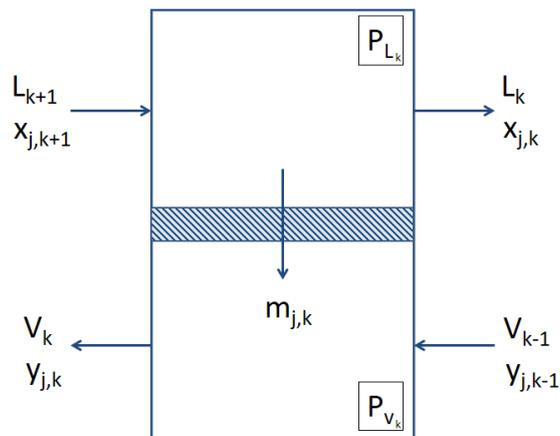


Figura 10. Esquema de la etapa k en un módulo de membrana en contracorriente.

Se debe aplicar un balance de materia a cada una de las etapas, donde se iguale lo que entra en cada una de ellas a lo que sale:

$$l_{j,k+1} + v_{j,k-1} = l_{j,k} + v_{j,k}$$

También resulta de interés conocer el flujo molar de cada componente que atraviesa la membrana. Si ahora efectuamos el balance de materia a cada lado de la membrana, la

diferencia de lo que entra y sale en cada uno de ellos es lo que ha pasado al otro compartimento:

$$m_{j,k} = l_{j,k} - l_{j,k+1} = v_{j,k} - v_{j,k-1}$$

De igual manera que en el caso en cocorriente, podemos relacionar este flujo molar con la permeancia y la diferencia de presiones parciales [19]:

$$m_{j,k} = Q_j \cdot A_k \cdot (P_{L_k} \cdot x_{j,k} - P_{V_k} \cdot y_{j,k})$$

La traducción de las ecuaciones al lenguaje de programación de Aspen Custom Modeler se encuentra en el Anexo II.

3.3. Balance de materia en flujo cruzado

Un módulo de membrana que opera en flujo cruzado lo hace de manera significativamente diferente a como se ha visto en el flujo en cocorriente y en contracorriente. Hasta ahora, tanto la corriente del permeado como el retenido se desplazaban a lo largo de todas las etapas. Sin embargo, en el caso de flujo cruzado, solamente la corriente de alimentación recorre todas ellas mientras que el permeado que se obtiene en cada una solamente abandona el módulo, sin seguir en contacto con la membrana.

El esquema que describe el flujo de gases dentro del módulo de membrana, para una única fibra hueca como en los anteriores casos, se encuentra en la Figura 11.

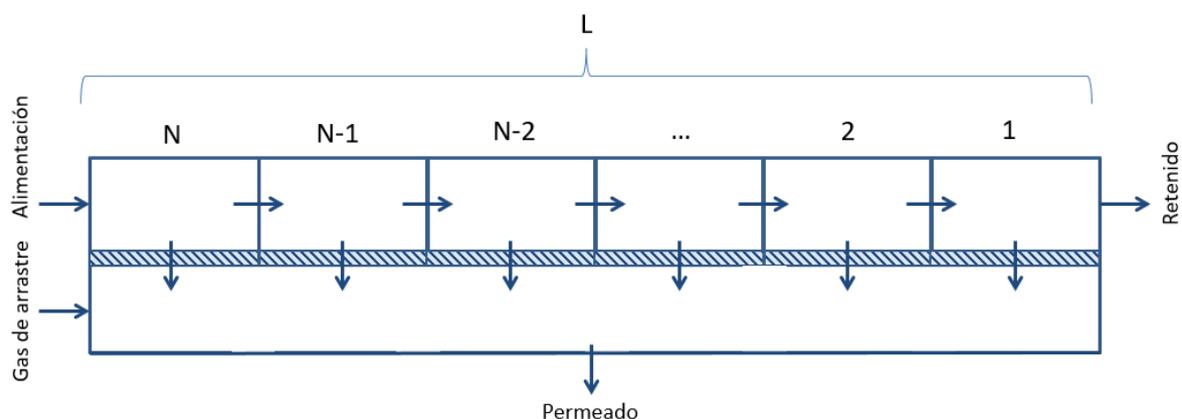


Figura 11. Esquema de flujo de módulo de membrana en flujo cruzado.

En la Figura 12 se muestra el esquema de flujo en una etapa cualquiera k dentro de las N etapas. Ahora, si nos situamos en la etapa N se tiene como entrada la alimentación

mientras que si es en la etapa 1 se tiene como salida la corriente de retenido. El permeado del proceso se trata del sumatorio de los permeados de todas las etapas, donde se incluye el gas de arrastre como permeado de la etapa N+1.

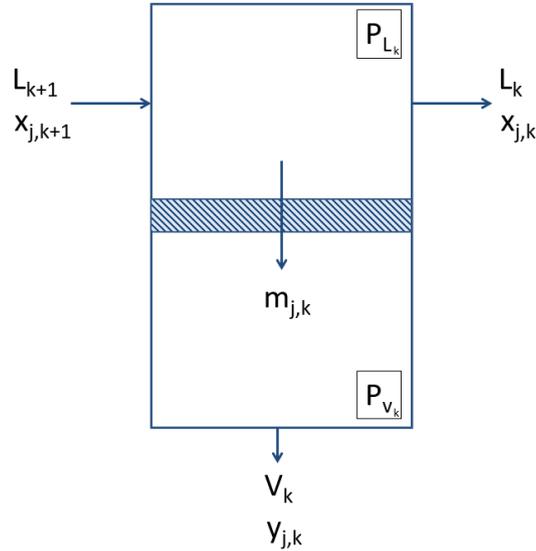


Figura 12. Esquema de la etapa k en un módulo de membrana en flujo cruzado.

Si se aplica el balance de materia a cada etapa k, como se ha hecho en los anteriores casos, se tiene:

$$l_{j,k+1} = l_{j,k} + v_{j,k}$$

En este caso cobra especial interés conocer el flujo que atraviesa la membrana de cada etapa, ya que se trata del permeado de cada etapa y mediante la suma de todas las etapas se obtendrá el permeado total:

$$m_{j,k} = v_{j,k} = l_{j,k+1} - l_{j,k}$$

$$v_{j,total} = \sum_{k=1}^{N+1} v_{j,k}$$

De igual manera que en el resto de los casos, podemos relacionar este flujo molar con la permeancia y la diferencia de presiones parciales [19]:

$$m_{j,k} = Q_j \cdot A_k \cdot (P_{L_k} \cdot x_{j,k} - P_{V_k} \cdot y_{j,k})$$

Esta configuración, en realidad, actúa como una serie de módulos de membranas planas conectados en serie.

La traducción de las ecuaciones al lenguaje de programación de Aspen Custom Modeler se encuentra en el Anexo III.

A continuación, se plantearán los balances energéticos para describir la variación de la temperatura de los fluidos en el interior del módulo de membrana.

3.4. Balance de energía

Una vez que los balances de materia isoterms proporcionan resultados se incluirá el balance de energía con el objetivo de determinar cómo varía la temperatura a lo largo del proceso. Ahora se considerará que el módulo de membrana tiene un recubrimiento exterior de cierto aislante, de manera que el equipo opera en condiciones adiabáticas, es decir, sin intercambio de calor con el exterior.

Además de esta suposición, se considerarán algunas de las utilizadas anteriormente en el balance de materia y otras nuevas [20]:

- Presión constante en el lado de la carcasa y en el interior de las fibras.
- Toda la resistencia al transporte de materia se encuentra en la capa selectiva de la fibra y nada en su soporte.
- No hay mezcla axial.
- Flujo pistón en todo el módulo.
- Todas las fibras se comportan igual, de manera que con la resolución de una de ellas se puede escalar el resultado.
- No hay deformación de las fibras por la presión.
- El radio interno, externo y el espesor de las fibras huecas es uniforme.
- El módulo de membrana opera en estado estacionario.
- La ecuación de Peng-Robinson describe adecuadamente las propiedades de los gases del sistema.
- La transferencia de calor convectiva en el eje axial es despreciable.
- Los efectos caloríficos de disipación viscosa y trabajo reversible son despreciables.
- No ocurre condensación en el proceso de expansión y enfriamiento.
- La permeabilidad, y por tanto la permeancia, permanecen constantes a pesar de los cambios de temperatura.

La resolución nuevamente dependerá del número de componentes que intervienen en el sistema. Se debe dar resultado, además del caudal de permeado, retenido y sus composiciones como se hizo en el anterior caso, a la temperatura de las corrientes de salida. Para ello, en un caso en que se tengan M componentes, se deben resolver $2(M-1)+4$ ecuaciones, las cuales incluyen las fracciones molares de cada componente en cada corriente y el caudal y temperatura de ellas.

Se mantiene la discretización de la longitud del módulo de membrana y la nomenclatura usada hasta el momento para todas las variables y subíndices.

El modelado de los balances de energía también dependerá del modo de flujo en el módulo de membrana. Se emplearán para ello los mismos esquemas, mostrados desde la Figura 4 a la 9. Los balances de materia serán los explicados hasta ahora, simplemente se añadirá el balance de energía a continuación.

Para comenzar con el modelado se planteará el balance de energía de una etapa cualquiera k, concretamente del lado de la alimentación o el retenido. Este balance de energía será común a los tres modos de flujo, ya que el sentido del retenido no se altera en ninguno de ellos, sino que solo lo hace el permeado.

La energía de cada corriente se cuantifica a través de su entalpía. La totalidad de la energía se conserva, lo que se puede aplicar también a cada etapa y a su vez al lado del retenido de cada etapa. Si se plantea un balance clásico donde lo que entra es igual a lo que sale a una etapa cualquiera k, se tiene:

$$H_{k+1}^L \cdot L_{k+1} = H_k^L \cdot L_k + H_{k+1}^L \cdot \sum_{j=1}^M m_{j,k} - Q_{membR, k}$$

Donde H_k^L se trata de la entalpía de la corriente de retenido que abandona la etapa k, expresada en GJ/kmol, y $Q_{membR, k}$ el flujo de calor neto que atraviesa la membrana desde el permeado hacia el retenido, expresado en GJ/h. El término a la izquierda del igual es el calor que se introduce en la etapa asociado a la corriente que entra. A la derecha del igual, el primer término se refiere al calor que sale asociado a la corriente que abandona la etapa sin atravesar la membrana, el siguiente es el calor asociado a la

corriente que permea y el último al intercambio de calor neto entre los lados de la membrana.

Este flujo neto de calor se puede relacionar con el gradiente de temperatura y el área de la membrana en la etapa a través del coeficiente global de transmisión de calor como se muestra a continuación:

$$Q_{membR, k} = U_o \cdot A_k \cdot (T_k^V - T_k^L)$$

Donde U_o es el coeficiente global de transmisión de calor expresado en $GJ/(h \text{ m}^2 \text{ K})$, T_k^V la temperatura del permeado en la etapa k y T_k^L la temperatura del retenido en la etapa k , ambas en Kelvin.

Hasta ahora estas ecuaciones han sido comunes a los tres modelos de flujo. Sin embargo, el balance de energía global a cada etapa es diferente para cada uno de ellos debido a la dirección de flujo de las corrientes. El método de obtención será igual para todos ellos, igualar la energía que entra a la que sale.

En el caso de un flujo en cocorriente, el balance será el siguiente:

$$H_{k+1}^L \cdot L_{k+1} + H_{k+1}^V \cdot V_{k+1} = H_k^L \cdot L_k + H_k^V \cdot V_k$$

Si el flujo es en contracorriente, el balance vendrá descrito por la siguiente ecuación:

$$H_{k+1}^L \cdot L_{k+1} + H_{k+1}^V \cdot V_{k+1} = H_k^L \cdot L_k + H_k^V \cdot V_k$$

Por último, si el módulo de membrana opera en flujo cruzado, el balance de energía vendrá descrito por la siguiente ecuación:

$$H_{k+1}^L \cdot L_{k+1} = H_k^L \cdot L_k + H_k^V \cdot V_k$$

Donde H_k^V se trata de la entalpía de la corriente de permeado que abandona la etapa k y H_{k+1}^V la entalpía de la corriente de permeado que entra en la etapa k , expresadas en $GJ/kmol$.

La entalpía de cada corriente se debe calcular mediante una subrutina en Aspen Custom, que la evalúa en Aspen Properties a partir de la temperatura, la presión y la composición de la corriente. De esta manera la temperatura y la entalpía están directamente relacionadas.

No se debe olvidar que, en el caso de flujo cruzado, la temperatura de la última etapa de permeado no es igual al permeado global, como pasaba anteriormente con el flujo en el balance de materia.

La temperatura de la corriente de permeado de salida se calculará a partir de la temperatura del permeado de cada una de las etapas, así como sus flujos y capacidades caloríficas mediante la siguiente expresión:

$$T^V = \frac{\sum_{k=1}^{N+1} T_k^V \cdot C_{p_{V,k}} \cdot V_k}{C_{p_{V \text{ total}}} \cdot V_{\text{total}}}$$

Donde $C_{p_{V,k}}$ se trata de la capacidad calorífica de la corriente de permeado que abandona la etapa k, $C_{p_{V \text{ total}}}$ es la capacidad calorífica de la corriente de permeado total que abandona el equipo, ambas expresadas en kJ/(kmol K) y V_{total} su flujo, en kmol/h.

Al igual que la entalpía, las capacidades caloríficas de las corrientes son calculadas mediante subrutinas a partir de la temperatura, la presión y la composición.

Estas ecuaciones se han traducido al lenguaje de Aspen Custom Modeler y se han incluido en los Anexos I, II y III, respectivamente para el modelo en cocrriente, en contracorriente y en flujo cruzado, junto con el balance de materia desarrollado anteriormente.

Después, estos modelos se exportarán a Aspen Plus para la simulación de las corrientes industriales en distintas configuraciones. Los pasos seguidos para la exportación de ACM a AP se detallan en el Anexo IV.

A continuación, se pasará al estudio de los perfiles de composición y temperatura que se obtienen de la resolución de los balances planteados.

3.5. Perfiles a lo largo del módulo

Se van a estudiar los perfiles de composición y temperatura con la posición en los distintos modos de flujo con el objetivo de cuantificar el comportamiento de los gases en su interior.

Para el estudio se tomará como ejemplo la corriente de Coke Oven Ga, con un caudal de 100 kmol/h. Las dimensiones del módulo serán las que toma por ejemplo el investigador

Freeman para el desarrollo de los modelos [19]. Se empleará una longitud activa de las fibras de 10 metros, 500.000 fibras por módulo, un espesor activo de membrana de 10^{-7} m, un radio exterior de las fibras huecas de $1.5 \cdot 10^{-4}$ m, una presión en el lado de la alimentación de 7 bar y presión atmosférica en el lado del permeado. La temperatura de la corriente de alimentación será de 25°C. Se supone que la membrana no ofrece resistencia a la transferencia de calor, se tomará un coeficiente de transferencia de calor de $0.0036 \text{ GJ/m}^2 \text{ h K}$. No se empleará corriente de arrastre para no complicar demasiado el estudio de las variables. Las permeabilidades que se considerarán son medias entre los materiales disponibles: $P_{\text{H}_2}=6.038$ barrer, $P_{\text{CO}}=0.0513$ barrer, $P_{\text{CO}_2}=2.085$ barrer, $P_{\text{CH}_4}=0.067$ barrer, $P_{\text{N}_2}=0.04883$ barrer.

Se comenzará con el estudio de los perfiles en el módulo que trabaja en contracorriente, se ha graficado la evolución de la concentración y de la temperatura a lo largo en las Figuras 13 y 14.

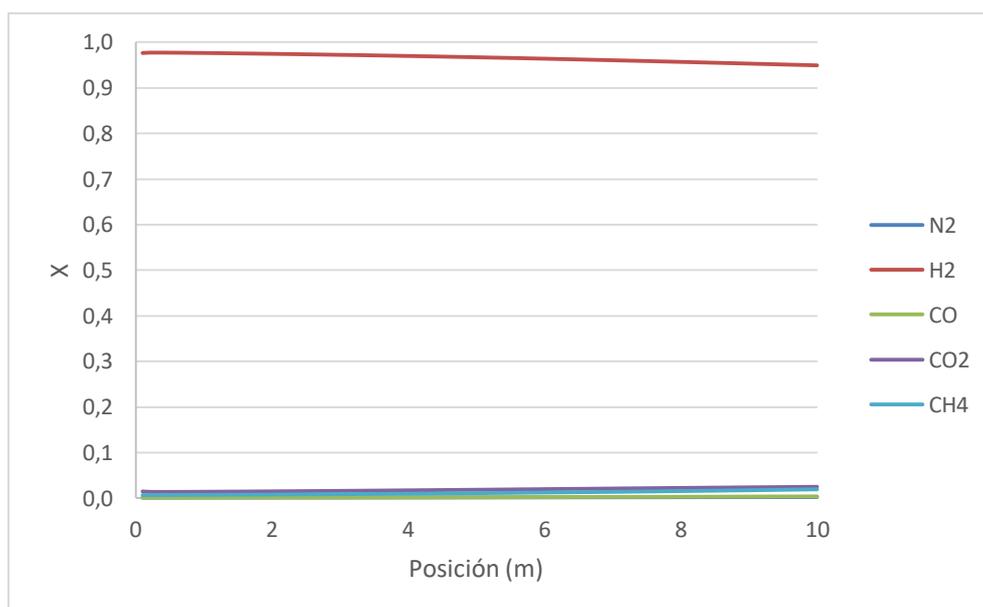


Figura 13. Perfiles de concentración en el permeado (cocorriente).

La concentración de hidrógeno es máxima al inicio del proceso y disminuye ligeramente a lo largo del módulo. Justo al contrario ocurre con el resto de los componentes. Esto se debe a que el gradiente de presiones parciales para el hidrógeno es máximo al inicio y va cayendo a lo largo del proceso, favoreciéndose el flujo de otros componentes. La fracción molar final del hidrógeno es de 0.949. Si se tiene en cuenta el flujo que se obtiene de la separación, la recuperación final de hidrógeno toma un valor de 86%.

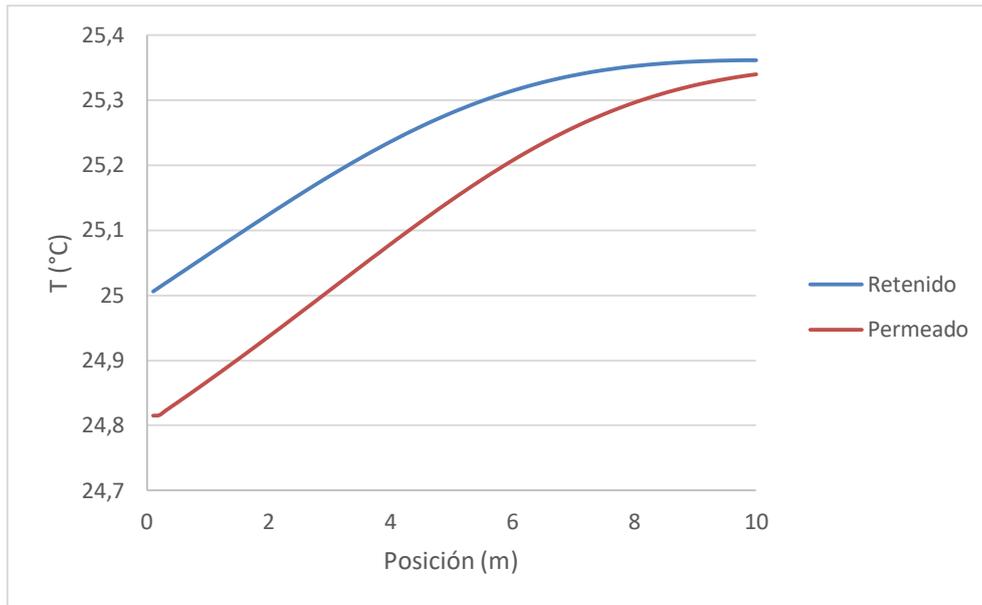


Figura 14. Perfiles de temperatura (cocorriente).

Las corrientes sufren un ligero calentamiento a lo largo del proceso. Esto es una característica de las corrientes ricas en hidrógeno. El hidrógeno al expandirse sufre un calentamiento, en lugar de un enfriamiento, debido a su comportamiento no ideal.

Sin embargo, la diferencia térmica es muy leve, lo suficientemente pequeña para no afectar a la permeabilidad de los componentes. Es por esto que, al menos en el caso en cocorriente, se puede despreciar el balance de energía para modelar la separación.

A continuación, se estudiará el comportamiento de las corrientes en un módulo de membrana que trabaja en contracorriente mediante las gráficas de las Figuras 15 y 16.

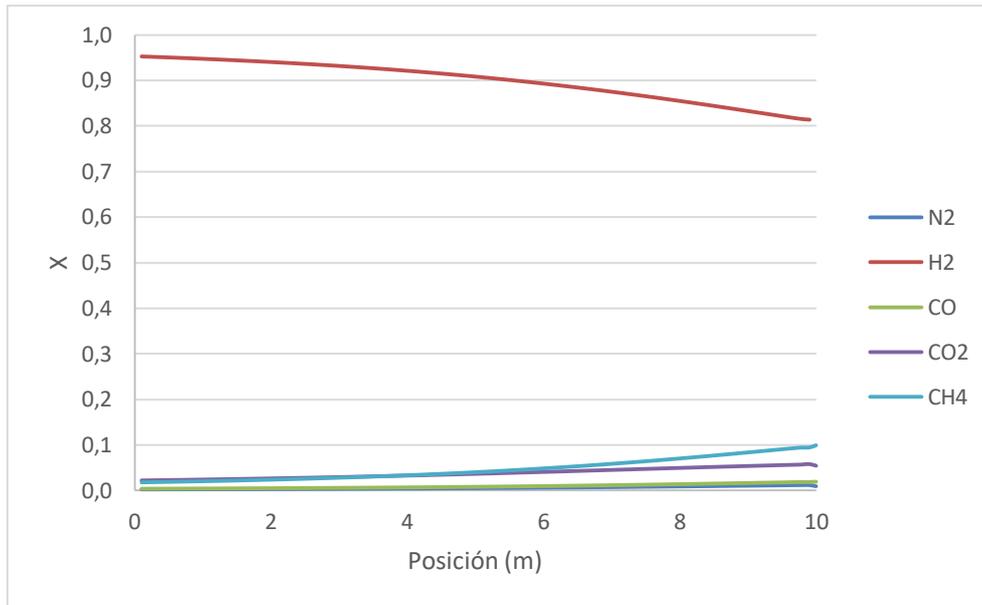


Figura 15. Perfiles de concentración en el permeado (contracorriente).

No se debe olvidar que al trabajar en contracorriente el permeado se obtiene como producto al inicio del módulo, es decir, en la posición 0. Se obtiene una concentración de hidrógeno de 0.9497, ligeramente superior al caso de fluir en cocorriente. La concentración mínima de hidrógeno se obtiene al final del módulo, el inicio de la formación del permeado. Este se va enriqueciendo conforme va avanzando, hacia la izquierda, hasta alcanzar su concentración máxima antes de salir del módulo, en la posición 0. Al inicio del módulo, la concentración de hidrógeno es máxima en el retenido ya que acaba de ser introducido como alimentación, mientras que en el permeado también es máximo ya que se ha enriquecido en toda la longitud del equipo. Al avanzar, ambas concentraciones disminuyen. Justo al contrario ocurre con el resto de los componentes, de forma que la concentración máxima se alcanza en el primer contacto del permeado con el retenido, en la posición 10. Junto con el dato de flujo que ofrece la simulación, se puede calcular que la recuperación de hidrógeno obtenida en este caso es del 89.32%, también ligeramente superior al caso en cocorriente.

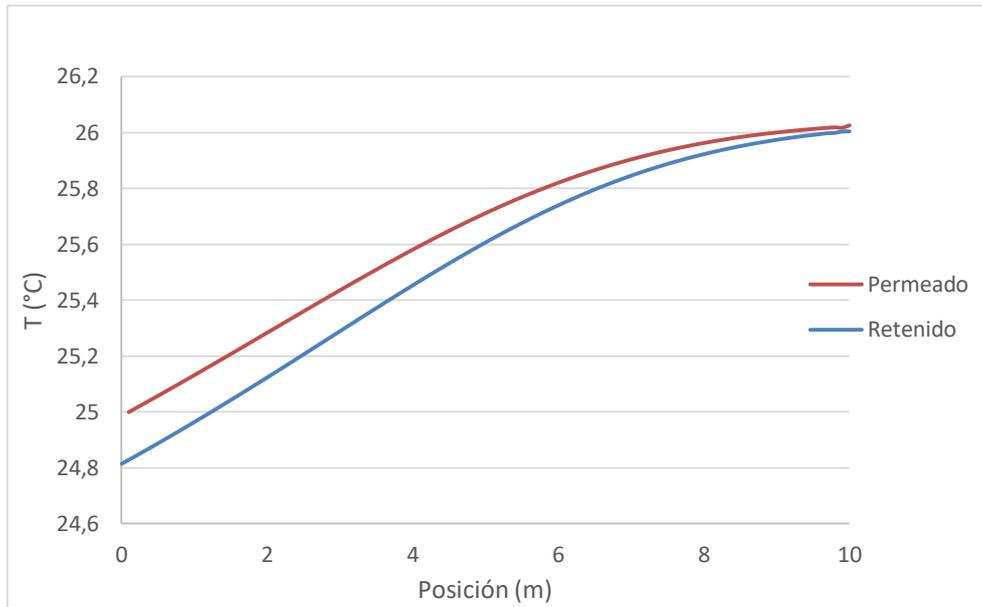


Figura 16. Perfiles de temperatura (contracorriente).

El perfil obtenido tiene una forma bastante similar al caso anterior. Nuevamente, las diferencias térmicas son despreciables en el rango de estudio.

Por último, se estudia la evolución de la temperatura y la concentración en el caso de trabajar con flujo cruzado en las Figuras 17 y 18.

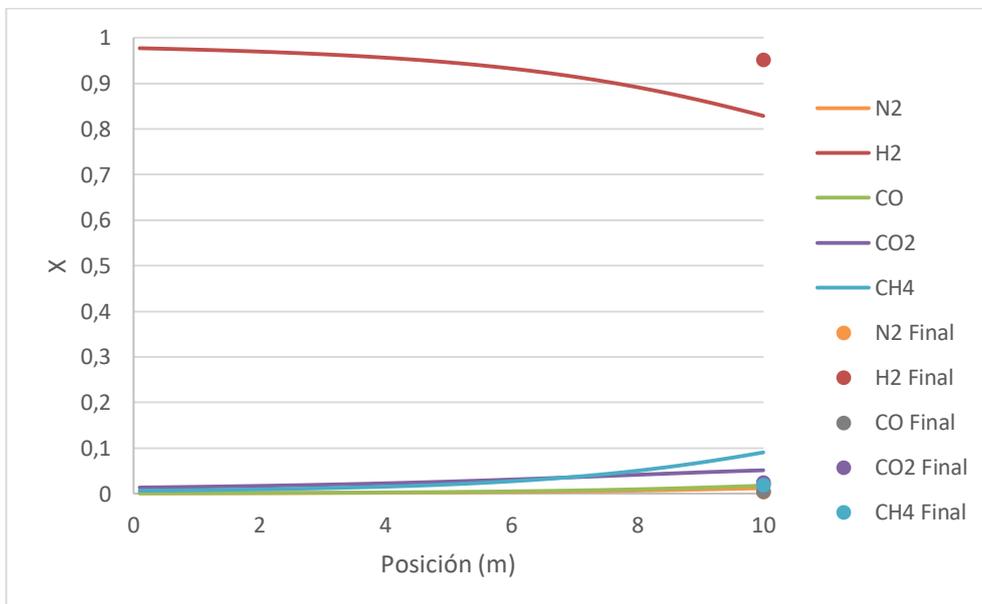


Figura 17. Perfiles de concentración en el permeado (flujo cruzado).

La composición que se obtiene en cada etapa discretizada se muestra mediante la línea continua. Esta comienza siendo máxima para el hidrógeno y mínima para el resto de componentes para después caer ligeramente en el caso del hidrógeno y ascender para

las otras especies. Esto se debe al gradiente de presiones parciales al igual que sucedía en el flujo en cocrriente.

Los puntos representan la composición final de la corriente de permeado, calculada como suma de todos los permeados obtenidos en cada etapa. En el caso del hidrógeno, alcanza una fracción molar de 0.9511, ligeramente mejor que los otros casos. Si se tiene en cuenta el flujo que se obtiene al trabajar en esta configuración, la recuperación de hidrógeno que se consigue a través de la separación es del 87%. Es ligeramente mejor que el caso en cocrriente y peor que en contracorriente.

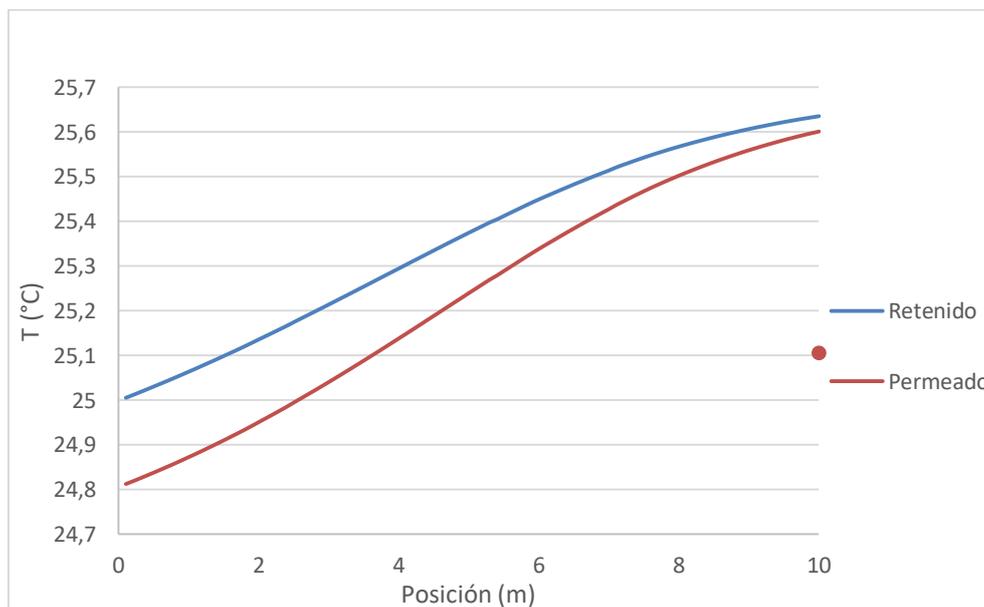


Figura 18. Perfiles de temperatura (flujo cruzado).

Nuevamente los gradientes de temperatura son lo suficientemente bajos como para ser despreciados.

Con esto se concluye que el balance de energía no es relevante en ninguna de las configuraciones de flujo, ya que los gradientes térmicos son tan pequeños que no afectan a la permeabilidad de los compuestos. Por tanto, se asumirán constantes en el rango de temperaturas estudiadas.

4. Resultados y discusión

El primer paso para el estudio de las corrientes industriales consiste en conocer las dimensiones comerciales de los módulos de membrana de fibra hueca. Como ejemplo de estas, se tomará un módulo comercial, Permea Prism, fabricado por Monsanto [11]. Las fibras huecas de este módulo tienen un diámetro interior de entre 100 y 250 μm y un diámetro exterior de entre 300 y 500 μm . Cada módulo está compuesto de 10.000 fibras, empacadas en una carcasa de 10-20 cm de diámetro y de una longitud de entre 3 y 6 metros. Estos módulos tratan un caudal medio de 1500 m^3/h (65 kmol/h). Es habitual emplear entre 4 y 8 módulos en serie para aumentar la recuperación del hidrógeno o su pureza según requisitos.

Las fibras huecas son membranas asimétricas, es decir, no toda la diferencia entre el diámetro externo y el interno se trata del espesor de la membrana, sino que la mayor parte del mismo se trata de un soporte para aportar resistencia mecánica y no oponer resistencia a la transferencia de materia. El espesor típico de la capa activa de este tipo de membranas es de 10^{-7} m [19].

Para las simulaciones de las separaciones de las corrientes se considerará un diámetro exterior de las fibras medio entre las posibilidades que ofrece Monsanto, de $4 \cdot 10^{-4}$ m.

Se considera que la membrana no ofrece resistencia a la transferencia de calor. El coeficiente global de transferencia de calor se tomará de 0.0036 $\text{GJ}/\text{m}^2 \text{K h}$ [20]. No obstante, ya se ha visto anteriormente que el balance de energía puede considerarse despreciable en el rango de operación estudiado.

En una primera instancia, se estudiará la influencia de la longitud del módulo de membrana y del material de fabricación de las fibras mediante los datos de permeabilidad en diferentes polímeros recogidos en la Tabla 3. También se estudiará la influencia del modo de flujo de los fluidos en el interior del módulo. Se empleará para ello un caudal igual en todas las simulaciones, de 1500 m^3/h (65 kmol/h), para cada una de las corrientes industriales. No se tendrá corriente de arrastre. La presión en el permeado será atmosférica mientras que en el retenido será de 7 bares. Se empleará un solo módulo de membrana para la separación.

Los resultados obtenidos se recogen en la Tabla 5.

Tabla 5. Comparación de resultados en función de la longitud del módulo, el material de la membrana y el modo de flujo para las tres corrientes industriales.

	POLIBENCIMIDAZOL		POLIETERIMIDA		POLIETERSULFONA	
	X _{H2} Permeado	% Recuperación H2	X _{H2} Permeado	% Recuperación H2	X _{H2} Permeado	% Recuperación H2
COCORRIENTE L=3 m						
APG	0,976	0,197%	0,996	2,939%	0,989	3,903%
MPG	0,909	0,202%	0,952	3,009%	0,899	4,054%
COG	0,978	0,196%	0,986	2,936%	0,967	3,915%
COCORRIENTE L=6 m						
APG	0,975	0,393%	0,996	5,833%	0,989	7,727%
MPG	0,909	0,404%	0,951	5,978%	0,898	8,044%
COG	0,978	0,391%	0,986	5,827%	0,966	7,752%
CONTRACORRIENTE L=3 m						
APG	0,997	0,195%	0,996	2,941%	0,989	3,905%
MPG	0,909	0,202%	0,952	3,011%	0,899	4,056%
COG	0,978	0,196%	0,986	2,937%	0,967	3,916%
CONTRACORRIENTE L=6 m						
APG	0,997	0,390%	0,996	5,837%	0,989	7,733%
MPG	0,909	0,404%	0,951	5,983%	0,894	8,010%
COG	0,978	0,3911%	0,986	5,830%	0,967	7,756%
FLUJO CRUZADO L=3 m						
APG	0,997	0,195%	0,996	2,938%	0,989	3,902%
MPG	0,905	0,203%	0,952	3,009%	0,899	4,054%
COG	0,968	0,196%	0,986	2,936%	0,967	3,915%
FLUJO CRUZADO L=6 m						
APG	0,997	0,390%	0,996	5,831%	0,989	7,724%
MPG	0,905	0,405%	0,951	5,978%	0,898	8,045%
COG	0,969	0,392%	0,986	5,826%	0,966	7,751%

La primera conclusión que se puede extraer de los anteriores resultados es que, al duplicar la longitud del módulo, el porcentaje de recuperación también se dobla sin afectar a la pureza significativamente. Por tanto, se emplearán módulos de 6 metros.

La recuperación que se obtiene para un modelo de flujo en cocorriente es similar a la que se obtiene en flujo cruzado. Sin embargo, con flujo en contracorriente se obtienen ligeramente mejores resultados de recuperación, por lo que será el modo de flujo elegido. Las purezas, en cambio, apenas varían con la elección del modo de flujo, sino que lo hacen con el material de la membrana.

Los mejores valores de recuperación se obtienen con la membrana de polietersulfona mientras que los mejores resultados de pureza se obtienen con la membrana de polieterimida. Con la membrana de polibencimidazol se obtienen unas recuperaciones tan bajas que no tiene sentido considerarla para el tratamiento de las corrientes industriales. Este resultado era previsible al observar la diferencia entre las permeabilidades de esta membrana respecto a las otras, siendo en este caso dos órdenes de magnitud menor para el hidrógeno.

Se debe recordar que la especificación necesaria para emplear el hidrógeno como vector energético es del 98%. Esta no se alcanza con ninguno de los materiales para la corriente de purga de plantas de metanol al emplear una separación con membranas en una única etapa. Es por esto que, para emplear esta corriente como fuente de hidrógeno, se deben emplear más etapas en serie para la purificación del permeado o considerar otras tecnologías complementarias a las membranas, como la destilación criogénica o la absorción presurizada para alcanzar la especificación.

Para la corriente de purga de las plantas de producción de amoníaco la especificación se alcanza tanto con las membranas de polietersulfona como polieterimida, será conveniente usar la primera ya que ofrece mayor recuperación.

Por último, para la corriente de purga de acerías se alcanza la especificación con la membrana de polieterimida.

A continuación, se estudiará la influencia del gradiente de presión del sistema en los resultados de recuperación y pureza del hidrógeno. Los módulos industriales son capaces de operar con gradientes de presiones de hasta 70 bares [21]. Se analizará, para la membrana de polietersulfona y polieterimida, operando en contracorriente, con las mismas dimensiones que el anterior estudio y una longitud del módulo de 6 metros, los resultados que se obtienen al trabajar con 35, 50 y 70 bares de gradiente de presión. Los resultados obtenidos se comparan mediante las Figuras 19 y 20.

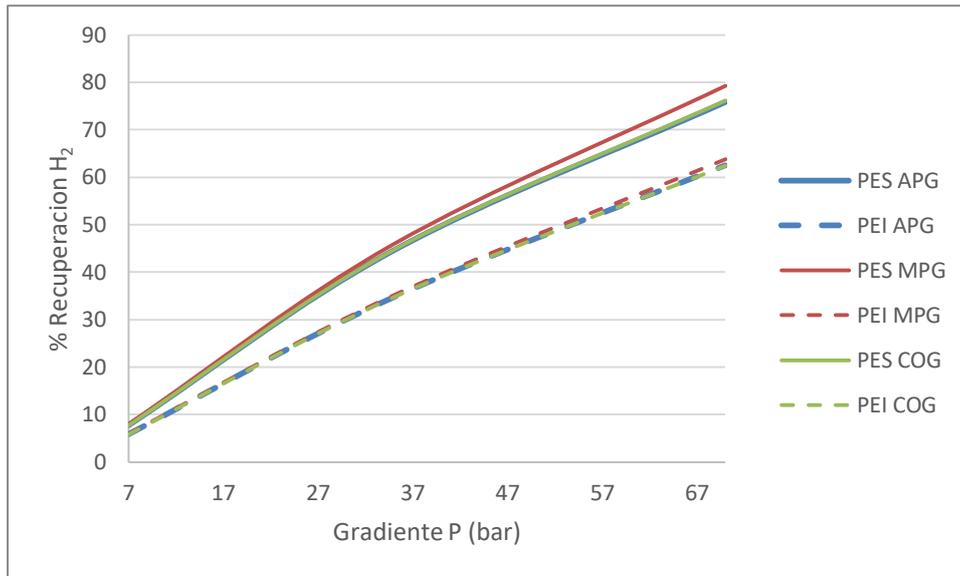


Figura 19. Comparación de la recuperación de hidrógeno con distintos gradientes de presiones.

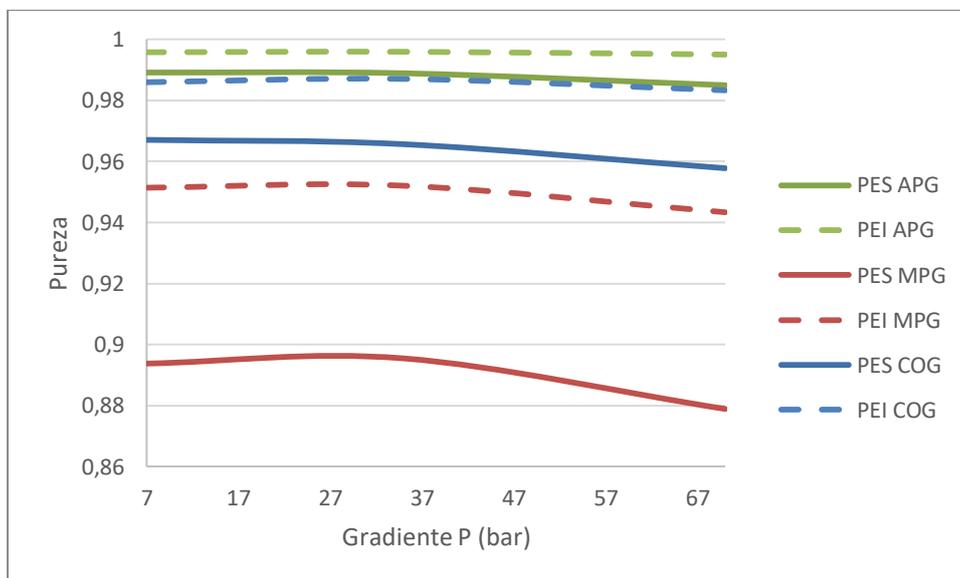


Figura 20. Comparación de la pureza de hidrógeno con distintos gradientes de presiones.

La pureza apenas sufre cambios al cambiar el gradiente de presión de 7 a 35 bares, en cambio sí que se ve afectada al aumentar hasta 50 o 70. La recuperación se observa que aumenta de forma prácticamente lineal con el aumento de la presión. Para obtener una alta recuperación, por tanto, se debe aumentar la presión todo lo que el sistema nos permita. Para conseguir una pureza alta de hidrógeno, sin embargo, no se debe trabajar a altas presiones. Los mejores resultados se obtienen al no rebasar un gradiente de presión de 35 bares.

No obstante, este estudio se ha realizado considerando un único módulo de membrana. Mediante la colocación de módulos en serie que traten consecutivamente la corriente de permeado se puede conseguir aumentar la pureza de esta corriente, pudiendo llegar a conseguir, incluso para la corriente de MPG, alcanzar la especificación que dicta la normativa. También se puede aumentar el porcentaje de recuperación mediante el tratamiento en serie de la corriente del retenido.

Desde un punto de vista energético, resulta más eficiente tratar en serie la corriente del retenido ya que de esta forma no será necesario presurizarla antes de cada módulo. En el caso de querer tratar en serie la corriente del permeado, en cada etapa esta vuelve a presión atmosférica al atravesar la membrana, por lo que el coste energético de compresión será muy elevado.

Siguiendo este razonamiento, la mejor opción desde el punto de vista energético reside en utilizar una presión de 35 bares y emplear membranas de polieterimida para todas las corrientes, de manera que se obtenga la máxima pureza posible del permeado. Para mejorar la recuperación de hidrógeno, se emplearán módulos de membrana en serie que traten la corriente del retenido de manera que se optimice el proceso.

Finalmente, si es necesario, se empleará una etapa posterior para alcanzar la especificación de pureza del permeado.

A su vez, para tratar la totalidad de las corrientes de purga se deberán utilizar módulos en paralelo. En el caso de la corriente de COG, el caudal habitual de esta corriente es de 908 kg/h (95 kmol/h), lo que requiere dos módulos en paralelo. La corriente de APG tiene un caudal medio de 230.5 kg/h (23 kmol/h), por lo que en este caso es suficiente con un único módulo. Por último, el caudal medio es de 3932 kg/h (326 kmol/h) para la corriente de MPG, lo que requeriría 5 módulos de membrana en paralelo.

También resulta de interés conocer las condiciones en las que estas corrientes abandonan las plantas de producción para saber las necesidades de compresión e intercambio de calor. La corriente de COG habitualmente una presión de 1 bar, por lo que necesita ser comprimida. Sin embargo, las corrientes de MPG y APG se encuentran a presiones elevadas, de 68 y 100-200 bares respectivamente.

Las condiciones de operación que se han encontrado óptimas para la separación, así como las dimensiones del módulo de membrana se recogen en la Tabla 6 a modo de resumen.

Tabla 6. Condiciones de operación y dimensiones del módulo de membrana.

Radio exterior de las fibras huecas	$2 \cdot 10^{-4}$ m
Número de fibras huecas	10000
Longitud activa del módulo de membrana	6 m
Espesor activo de la membrana	10^{-7} m
Presión en el retenido	35 bar
Presión en el permeado	1 bar
Temperatura	25 °C
Flujo medio por módulo	65 kmol/h
Material	Polieterimida
Modo de flujo	Contracorriente
Sin corriente de arrastre	
Balance de energía despreciable	

A continuación, se estudiará el caso de cada corriente individualmente para definir la mejor configuración para cada una de ellas.

4.1. Estudio del Coke Oven Gas

Para tratar la corriente de COG es necesario emplear dos módulos de membrana en paralelo en la primera etapa de separación, ya que el caudal medio que se debe tratar en cada módulo es de 65 kmol/h y esta corriente tiene un caudal medio de 95 kmol/h. Se empleará un divisor de corrientes para repartirlas equitativamente entre los dos módulos. El flowsheet del caso de estudio se muestra en la Figura 21.

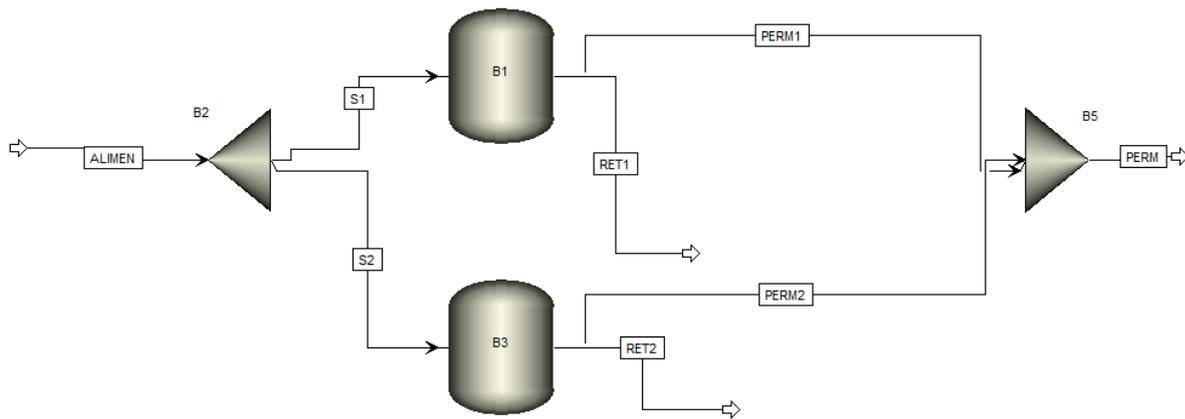


Figura 21. Flowsheet de la separación de COG en una etapa.

Se estudiará la influencia de añadir módulos en serie para conseguir la mejor separación posible, es decir, obtener la máxima recuperación posible de hidrógeno cumpliendo con la especificación de pureza. Los módulos en serie tratarán la corriente de retenido como se comentó anteriormente.

Para emplear módulos en serie, se irán uniendo las corrientes producto de anteriores módulos, con el objetivo de no sobredimensionar equipos que no se utilizarán al completo.

Se muestra como ejemplo el flowsheet de la separación con dos módulos en serie en la Figura 22. En este caso, la primera etapa requería 2 módulos en paralelo para tratar los 95 kmol/h de la corriente de alimentación, sin embargo, en la segunda etapa, la suma de las corrientes de retenido tiene un caudal de 68 kmol/h, por lo que será suficiente con un único módulo de membrana para la siguiente etapa de tratamiento. Se seguirá este esquema para añadir todos los módulos necesarios.

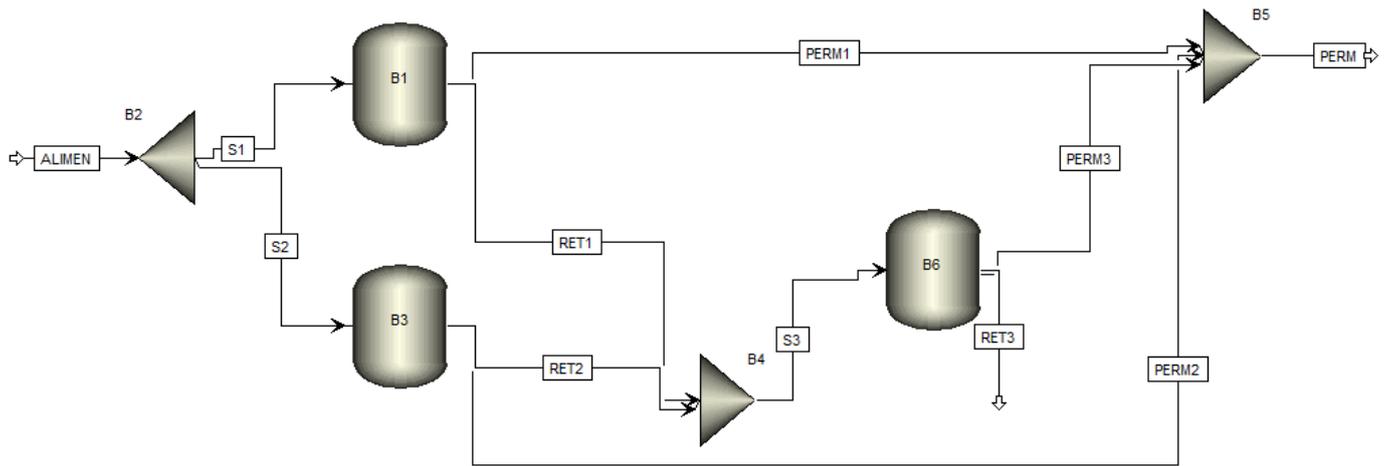


Figura 22. Flowsheet de la separación de COG en dos etapas en serie.

Se añaden sucesivamente módulos de membrana en serie para la comparación de resultados. Se emplearán hasta 8 etapas de tratamiento, como recomienda Monsanto [11]. En la Tabla 7 se muestra cómo varían las recuperaciones y purezas de hidrógeno al aumentar el número de módulos en serie.

Tabla 7. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie (COG).

MÓDULOS EN SERIE	X_{H_2} Permeado	% Recuperación H_2
1	0,985	44,8
2	0,983	61,8
3	0,980	74,9
4	0,977	84,2
5	0,974	90,2
6	0,970	93,9
7	0,967	96,1
8	0,963	97,3

La recuperación del hidrógeno aumenta progresivamente con el aumento del número de módulos, alcanzando cerca del 100% al emplear 8 módulos en serie.

La pureza disminuye progresivamente al añadir nuevos módulos en serie, ya que estos tratan la corriente de retenido cada vez menos rica en hidrógeno, obteniendo un producto también de concentración decreciente. El requisito del 98% deja de cumplirse a partir del 3º módulo en serie.

Con el fin de aumentar la pureza de estos casos que no cumplen la especificación, se añade un nuevo módulo al final del proceso cuyo objetivo es tratar la corriente final de permeado. De esta forma se pretende aprovechar la alta recuperación de las

configuraciones que no alcanzan la pureza requerida. En la Figura 23 se muestra el esquema flujo del caso con 4 módulos en serie como ejemplo.

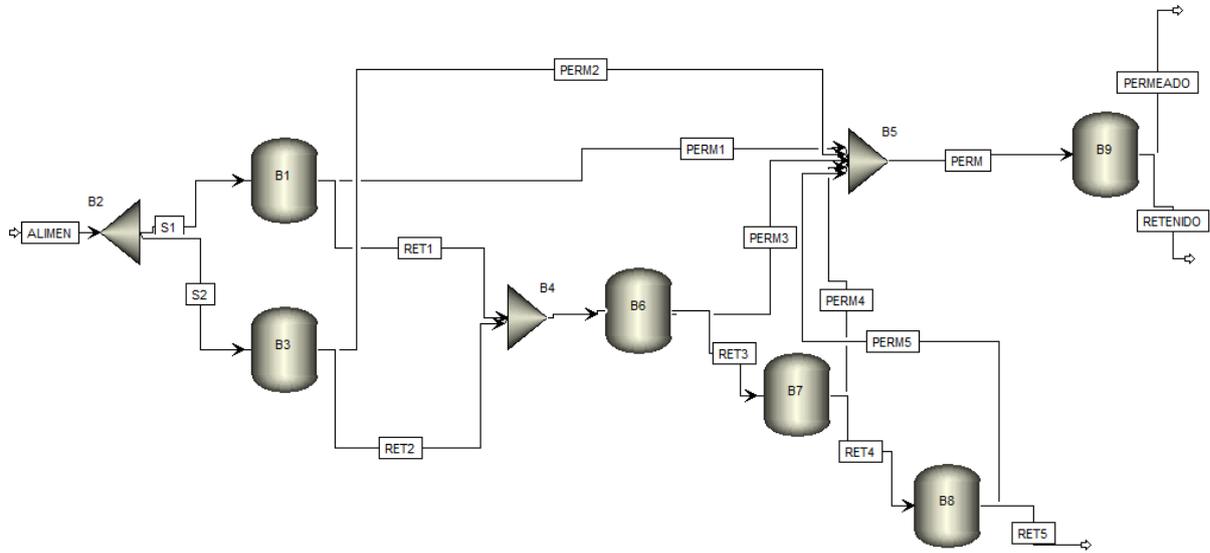


Figura 23. Flowsheet de la separación de COG en cuatro etapas en serie y uno de tratamiento del permeado.

Los resultados de añadir este nuevo módulo para las configuraciones en las que no se alcanzaba la especificación se muestran en la Tabla 8.

Tabla 8. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie añadiendo etapa de tratamiento del permeado (COG).

MÓDULOS EN SERIE	X_{H_2} Permeado	% Recuperación H_2
4	0,996	41,4
5	0,995	41,2
6	0,995	41,0
7	0,994	40,8
8	0,994	40,6

Ahora se ha excedido la pureza necesaria y la recuperación ha caído considerablemente. Además, se observa una tendencia descendente en la recuperación al aumentar el número de módulos en serie, al contrario que ocurría sin tener en cuenta este último módulo donde se purifica el permeado. Esto se debe a que, con el aumento del número de módulos en serie, la concentración de hidrógeno que se alimenta a la última etapa de purificación es cada vez menor, afectando de esta forma tanto a la pureza como a la recuperación.

Con el objetivo de aumentar la recuperación de hidrógeno se colocará un divisor de corrientes delante de la etapa de purificación del permeado. De esta forma, solo se

tratará una parte de la corriente, la necesaria para que el permeado de esta al mezclarse con la corriente no tratada alcance justamente la pureza requerida del 98%. El esquema de flujo se muestra en la Figura 24 como ejemplo para el caso de 4 módulos en serie. Se procederá de igual manera con el resto de las configuraciones.

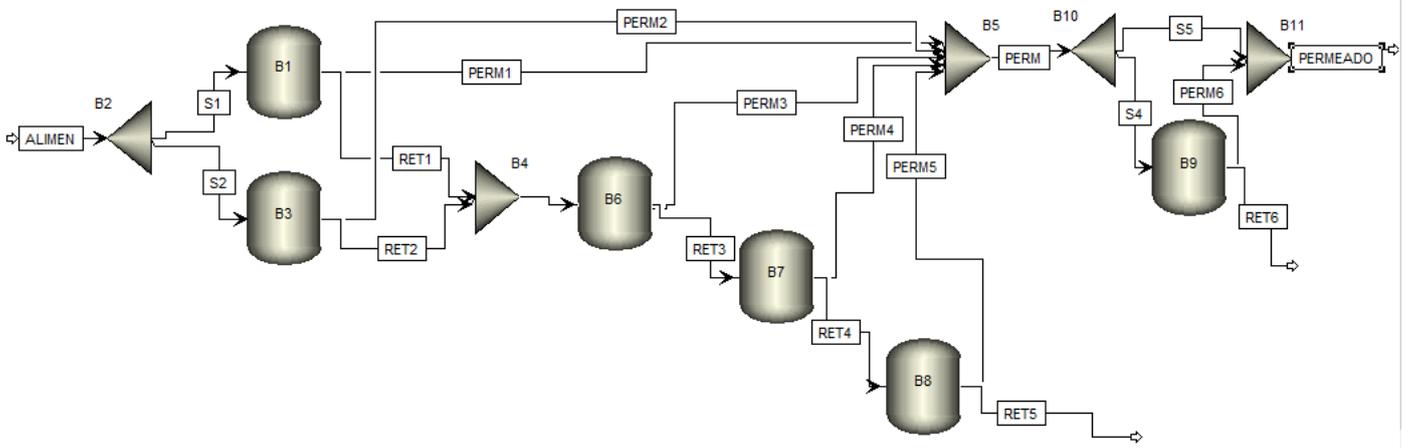


Figura 24. Flowsheet de la separación de COG en cuatro etapas en serie y una de tratamiento de una fracción del permeado.

Para conocer el porcentaje de la corriente que debe tratarse se empleará una herramienta de Aspen Plus, las Especificaciones de Diseño. Se establece como objetivo de la corriente final de permeado la fracción molar de hidrógeno deseada, y para alcanzarla se modificará la fracción de corriente que entra al último módulo de permeado.

Este último módulo trabaja con un gradiente de presión menor, de 30 bares, ya que los caudales a tratar son menores.

Los resultados para cada configuración de módulos en serie se muestran en la Tabla 9.

Tabla 9. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie añadiendo etapa de tratamiento de una fracción del permeado (COG).

MÓDULOS EN SERIE	Tasa de split	X _{H2} Permeado	% Recuperación H ₂
4	0,390	0,982	84,1
5	0,387	0,980	89,1
6	0,510	0,980	80,6
7	0,671	0,981	66,3
8	0,735	0,980	60,4

Nuevamente, se observa una tendencia descendente de la recuperación del hidrógeno, más pronunciada que la que se obtenía sin fijar la pureza de este. Esto se debe a que ahora, la influencia de la disminución de la pureza del permeado al aumentar el número de módulos en serie, ejerce toda su influencia en la recuperación al haber fijado la pureza, por lo que el efecto es mayor.

En el primero de los casos se excede ligeramente la pureza requerida ya que, de emplearse una corriente aún menor para el tratamiento, el flujo de alimentación al módulo sería insuficiente para llevar a cabo la separación.

Ya que es necesario emplear etapas adicionales de purificación del permeado, puede resultar interesante emplear una primera etapa a una presión mayor, 70 bares, de manera que se maximice la recuperación, aunque se afecte ligeramente a la pureza. De esta forma puede ser necesario emplear menor número de módulos para la misma recuperación. Se empleará, en los casos que resulte necesario, una etapa de purificación de permeado junto con la especificación de diseño para conseguir la concentración de hidrógeno necesaria. Los resultados obtenidos de esta simulación se muestran a continuación en la Tabla 10.

Tabla 10. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie añadiendo etapa de tratamiento de una fracción del permeado y empleando 70 bares en la primera etapa (COG).

MÓDULOS EN SERIE	Tasa de split	X_{H2} Permeado	% Recuperación H₂
1	-	0,981	76,4
2	0,390	0,982	85,1
3	0,390	0,980	89,3
4	0,466	0,980	84,8
5	0,649	0,980	68,4

La recuperación obtenida a partir del quinto módulo en serie empleando 70 bares en la primera etapa es menor que la que le corresponde sin elevar la presión.

Se ha elaborado un gráfico, Figura 25, que muestra la recuperación obtenida en función del número de módulos empleados con el objetivo de elegir la mejor configuración posible. Esta configuración será la que emplee menor número de módulos para obtener la mayor recuperación posible, minimizando así los costes de inversión. Todos los datos representados alcanzan la pureza requerida para emplear el hidrógeno como vector

energético. Se incluyen en el número de módulos todos los empleados, tanto en paralelo para la primera etapa, como en serie para el tratamiento del permeado y el retenido:

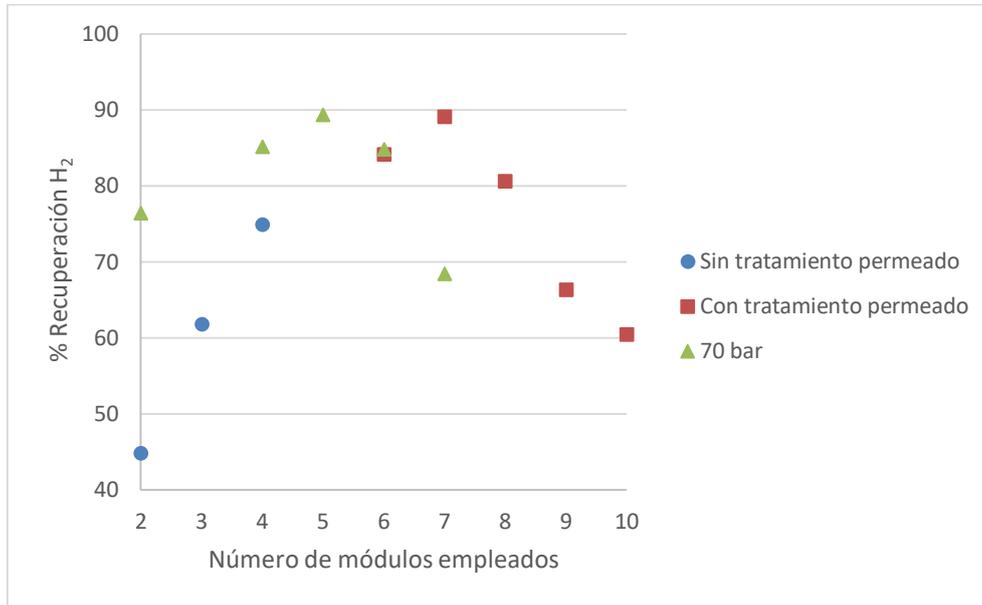


Figura 25. Recuperación de hidrógeno obtenida en función del número de módulos de membrana empleados (COG).

No se emplearán más de 7 módulos en la separación ya que es posible obtener igual o incluso mejor recuperación de hidrógeno con menor número de estos, requiriendo de esta manera menor coste.

El mejor resultado de recuperación de hidrógeno en la corriente de COG se obtiene en el caso de emplear 5 etapas en serie para el tratamiento sucesivo del retenido y uno adicional donde se trata el 38.7% del permeado, es decir, empleando un total de 7 módulos. Un resultado similar se obtiene al emplear 3 etapas en serie con una presión de 70 bares en la primera etapa de tratamiento, con una etapa de purificación donde se trata el 39% del permeado, es decir, un total de 5 módulos.

La elección final de la mejor configuración deberá tener en cuenta consideraciones económicas de inversión en equipos, costes de presurización y valor de las corrientes producto.

4.2. Estudio del Ammonia Purge Gas

La corriente de APG tiene un caudal muy bajo, de 230.5 kg/h (23 kmol/h), por lo que no será necesario emplear módulos en paralelo.

Se ha definido anteriormente que el caudal más conveniente para el tratamiento de gases en los módulos de membrana es de 65 kmol/h, por lo que un caudal tan bajo puede no ser adecuado para emplear estas dimensiones en los módulos de membrana.

Se operará con 35 bares de presión en el retenido, pero se estudiará la influencia en los resultados de emplear módulos de 3 o 6 metros, con el objetivo de no sobredimensionar los equipos al tener un caudal tan escaso.

Al igual que se hizo en la corriente de COG, se irán añadiendo sucesivamente módulos en serie de tratamiento del retenido con el objetivo de obtener la máxima recuperación posible del hidrógeno.

Los resultados de variación de pureza y recuperación de hidrógeno en función del número de módulos en serie empleados y de su longitud se muestran en la Tabla 11.

Tabla 11. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie en función de la longitud del módulo (APG).

MÓDULOS EN SERIE	L = 3 m		L = 6 m	
	X _{H2} Permeado	% Recuperación H ₂	X _{H2} Permeado	% Recuperación H ₂
1	0,996	45,8	0,994	76,3
2	0,994	76,2	0,987	96,4
3	0,991	88,0	0,980	98,8
4	0,987	96,3	-	-
5	0,983	98,1	-	-

La especificación de pureza de la corriente de permeado se alcanza en todos los casos por lo que no será necesario emplear módulos adicionales en serie para el tratamiento del permeado.

Para el caso de 3 metros, no se puede emplear más de 5 módulos en serie ya que el caudal de alimentación se vuelve demasiado pequeño. Además, con estos ya se alcanza una recuperación prácticamente completa. Esta situación ocurre de igual forma con más de 3 módulos en el caso de emplear una longitud de 6 metros.

Se ha estudiado el caso de emplear una presión de 70 bares en la primera etapa de tratamiento al igual que se hizo en el caso de la corriente de COG. Se he encontrado que con una única etapa que opere a esta presión y con un módulo de 6 metros, se obtiene una recuperación del 97.524% y una pureza de hidrógeno del 0.987. No se van a emplear

más etapas en serie empleando esta presión de operación ya que se obtiene una recuperación suficientemente alta con una única etapa.

En la Figura 26 se compara la recuperación obtenida en función del número de módulos empleados con el objetivo de determinar la mejor configuración para la separación de hidrógeno de la corriente.

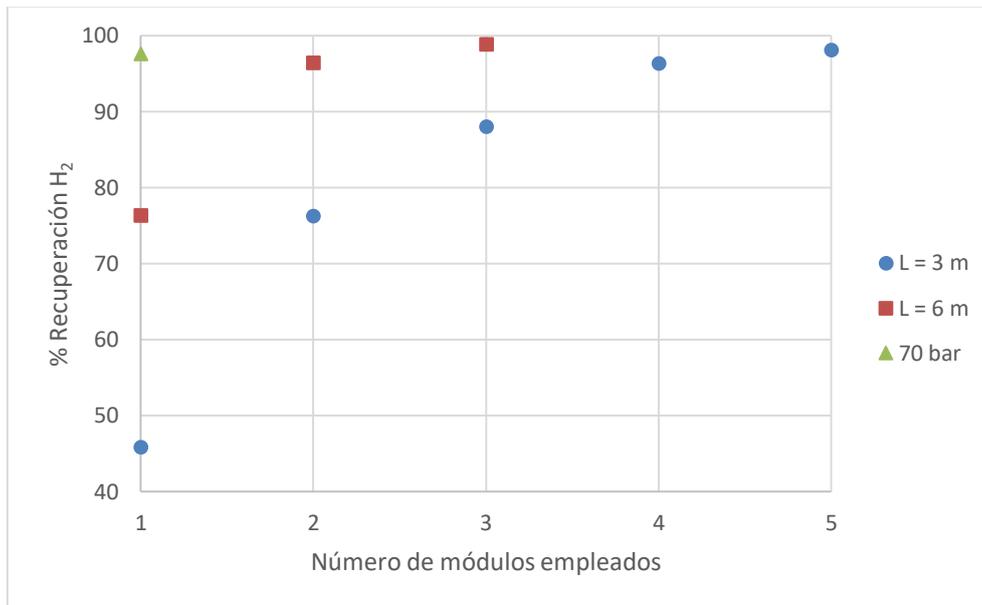


Figura 26. Recuperación de hidrógeno obtenida en función del número de módulos de membrana empleados (APG).

Las mejores recuperaciones se obtienen en el caso de emplear 5 módulos en serie de 3 metros de longitud, 3 módulos en serie con 6 metros de longitud o un único módulo de 6 metros que opere a 70 bares de presión, siendo esta recuperación ligeramente mejor. Se deberá estudiar económicamente cuál es la mejor opción, aunque intuitivamente se puede asegurar que será el caso de emplear 70 bares de presión. La recuperación que se obtiene del hidrógeno de la corriente es prácticamente completa, del 98%.

4.3. Estudio del Methanol Purge Gas

La corriente de MPG tiene un caudal muy superior al resto de las corrientes estudiadas, con lo que se puede presuponer que necesitará un número mucho mayor de módulos de membrana para alcanzar una recuperación de hidrógeno similar a la conseguida en los otros casos.

Además, recordando los resultados de pureza obtenidos al emplear un único equipo (Tabla 4), donde no se alcanzaba la pureza requerida para emplear el hidrógeno como

vector energético, resulta claro que serán necesarias etapas de purificación del permeado. La pureza va disminuyendo al ir añadiendo módulos en serie, por lo que el caso de un único módulo es el mejor resultado de pureza que se va a obtener. Es decir, ninguna de las configuraciones alcanzará la especificación sin necesidad de incluir una etapa de purificación del permeado.

El caudal de esta corriente es de 3932 kg/h (326 kmol/h), por lo que para una primera etapa serán necesarios 5 módulos en paralelo para abordar la totalidad del caudal.

Para incluir una segunda etapa, se deben tratar 203 kmol/h de retenido, por lo que serán necesarios 4 módulos en paralelo. Siguiendo con las simulaciones para el resto de las etapas, la tercera y cuarta etapa de separación necesitarían 3 equipos en paralelo, mientras que para las etapas quinta, sexta y séptima ya será suficiente con 2 módulos de membrana en paralelo.

Los resultados de la pureza y recuperación obtenidas mediante estas configuraciones se muestran en la Tabla 12. Se ha añadido también el dato del número de módulos empleados para tomar constancia de la magnitud de la instalación que es necesaria.

Tabla 12. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie (MPG).

MÓDULOS EN SERIE	X_{H2} Permeado	% Recuperación H₂	Número de módulos
1	0,952	34,2	5
2	0,945	56,8	9
3	0,939	70,4	12
4	0,931	80,9	15
5	0,925	86,2	17
6	0,919	90,2	19
7	0,913	93,1	21
8	0,906	95,2	23

Se comprueba que es necesario añadir una etapa de purificación del permeado en todas las configuraciones ya que no se alcanza el 98% requerido para el uso del hidrógeno como vector energético.

Para la purificación de hidrógeno también se hace necesario emplear más de un módulo en la mayoría de los casos. Para las configuraciones anteriores de entre 1 y 4 módulos en serie resulta suficiente con una única etapa de purificación, sin embargo, el caudal de permeado es demasiado alto para tratarlo en un único módulo en todos los casos a

excepción del primero. La configuración de 2 y 3 módulos en serie de tratamiento del retenido necesita dos módulos en paralelo para purificar el permeado, mientras que la configuración de 4 módulos necesita 3 módulos en paralelo para tratar el permeado.

Además, para las configuraciones de 5-8 módulos en serie de tratamiento de retenido se necesitan dos etapas de purificación del permeado en serie. Todas ellas necesitan 3 módulos en paralelo para la primera etapa de purificación y uno en serie para la segunda.

Al igual que se hizo con la corriente de COG, se llevará a cabo una división de corrientes previa al tratamiento con el objetivo de alcanzar exactamente la pureza deseada y no sobrepasarla, de manera que se pueda conseguir la máxima recuperación posible. Nuevamente, esto se consigue mediante la herramienta de especificaciones de diseño de Aspen Plus.

Para las configuraciones que requieren dos etapas de purificación, la división de las corrientes se realizará una vez se ha purificado la corriente completa en la primera etapa.

En este caso no resulta necesario disminuir la presión de alimentación de las etapas de purificación como se hizo con la corriente de COG ya que el caudal es mucho más elevado.

En la Tabla 13 se recogen los resultados finales de recuperación y pureza del hidrógeno obtenidos, así como el número de módulos totales empleados y el tanto por uno de la corriente de permeado que se somete a tratamiento.

Tabla 13. Variación de la pureza y la recuperación de hidrógeno con el uso de módulos en serie y etapas de purificación del permeado (MPG).

MÓDULOS EN SERIE	Tasa de Split	X_{H2} Permeado	% Recuperación H₂	Número de módulos
1	0,919	0,980	14,0	6
2	0,950	0,980	24,9	11
3	0,972	0,980	24,0	14
4	0,995	0,980	33,0	18
5	0,343	0,982	32,4	21
6	0,345	0,980	32,1	23
7	0,350	0,980	31,8	25
8	0,402	0,980	30,2	27

Se observa que, a pesar del gran número de módulos empleados para el tratamiento de esta corriente, la recuperación es notablemente menor en comparación con las otras corrientes industriales.

Se comprueba también para esta corriente, si empleando una presión de 70 bares en la primera etapa de separación se mejora la recuperación empleando menos módulos de membrana. Solo resultan favorecedoras estas condiciones en el caso de emplear una única etapa de tratamiento en serie del retenido, donde se alcanza una recuperación del 25.241% manteniendo la pureza en la especificación. Sin embargo, al emplear módulos en serie la recuperación obtenida empleando 70 bares de presión en la primera etapa es menor que con 35 bares.

En la Figura 27 se compara la recuperación obtenida con distinto número de módulos de membrana con el objetivo de elegir la opción que más optimiza el proceso.

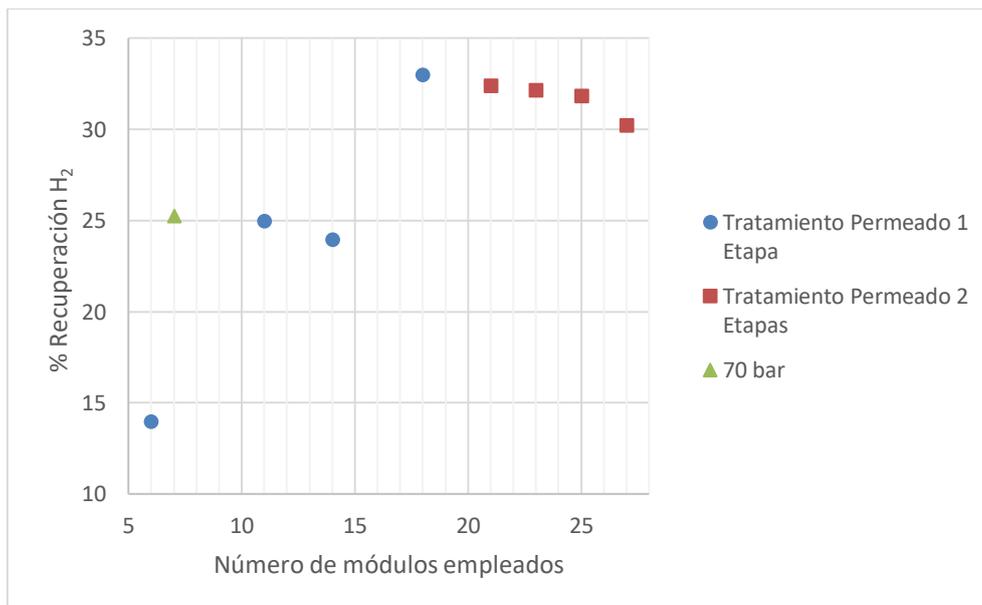


Figura 27. Recuperación de hidrógeno obtenida en función del número de módulos de membrana empleados (MPG).

No se emplearán las configuraciones que requieran dos etapas de purificación del permeado ya que requieren muchos más módulos para obtener un resultado peor del que se puede tener con una única etapa.

La mejor recuperación se obtiene empleando 18 módulos y una única etapa de purificación, donde la recuperación obtenida es del 32.975%.

Al igual que en el resto de los casos, se deberá estudiar la viabilidad económica de todas las opciones para determinar cuál es la más rentable económicamente, o incluso si se debe utilizar esta corriente para la obtención de hidrógeno, dado que los resultados con las otras corrientes residuales dan rendimientos mucho mayores.

A modo de resumen, se han recogido las configuraciones óptimas en la Tabla A1 del Anexo V. Por último, se llevará a cabo una comparación de los resultados obtenidos del tratamiento de las corrientes residuales.

4.4. Comparación de las corrientes residuales

Dejando a un lado las diferencias en el caudal de cada una de las corrientes residuales, se ha observado que se obtienen purezas y recuperaciones de hidrógeno muy diferentes con cada una de ellas, a pesar de tener una concentración de partida similar.

La corriente de APG es la que proporciona una separación más sencilla, mientras que la de MPG es la separación más problemática, empleando muchas más etapas de separación para conseguir una recuperación mucho menor. La corriente de COG se encuentra en un punto intermedio.

La causa de estas diferencias reside en la selectividad. La permeabilidad del CO_2 es la mayor después de la del H_2 , por tanto, la selectividad es baja. Cuanto mayor concentración de dióxido de carbono tenga en la alimentación al módulo de membrana, menor pureza de hidrógeno se obtiene en el permeado debido al flujo de dióxido de carbono. Como consecuencia, para una pureza fijada, se emplearán más etapas de permeación en serie y se obtendrá una recuperación menor de hidrógeno.

La corriente de APG no contiene dióxido de carbono y la selectividad del hidrógeno respecto al resto de contaminantes es mucho mayor, por lo que fácilmente se obtiene la pureza deseada con una recuperación alta.

La corriente de MPG tiene la mayor concentración de CO_2 , con un 11.2%, mientras que la corriente de COG tiene un 2.1%. Debido a estas concentraciones, la separación del hidrógeno de la primera de ellas es notablemente más complicada. Se deberá estudiar económicamente la viabilidad de la separación de hidrógeno de la corriente residuales de las plantas de metanol.

5. Conclusiones

En primer lugar, se ha modelado con éxito el comportamiento de los gases en el interior de un módulo de membrana de fibra hueca mediante los balances de materia y energía para las distintas configuraciones de flujo: cocorriente, contracorriente y flujo cruzado. A continuación, se ha implementado satisfactoriamente en un software de simulación, donde se ha analizado la influencia de las variables del proceso para determinar la mejor configuración de operación.

El material de la membrana más adecuado entre los estudiados es la polieterimida, ya que ofrece las mayores purzas. La pureza es el cuello de botella de la separación, ya que para cumplir la normativa esta debe ser mayor del 98%.

Se empleará una presión en el retenido de 35 bares, ya que es la mayor posible que no afecta negativamente a la pureza. Se busca que sea lo mayor posible para maximizar la recuperación de hidrógeno.

La longitud de los módulos de membrana será de 6 metros, ya que cuanto mayor sea esta mayor será la recuperación. La pureza no se ve afectada por el aumento de esta. El resto de las dimensiones del módulo vienen dadas por el fabricante (radio exterior de $2 \cdot 10^{-4}$ m, 10.000 fibras, espesor activo de 10^{-7} m). La configuración de flujo más eficiente es en contracorriente.

La corriente de coke oven gas se tratará empleando 3 etapas de separación en serie para el tratamiento del retenido. La primera de ellas estará compuesta por dos módulos de membrana en paralelo y operará a 70 bares de presión en el retenido, para el resto bastará con un único módulo y 35 bares de presión. Además, se añadirá finalmente una etapa de purificación que tratará el 39% del permeado obtenido, esta etapa debe operar a 30 bares. Con estas consideraciones, se obtiene una pureza final de hidrógeno de 0.98 y una recuperación del 89.32%, lo que equivale a un flujo de producto de 52.11 kmol/h.

La corriente de ammonia purge gas se tratará bien con 3 módulos de 6 metros de longitud en serie que traten sucesivamente el retenido de la etapa anterior, con 5 módulos de 3 metros de longitud dispuestos de la misma forma o con un único módulo de 6 metros que opere con una presión del retenido de 70 bares. La elección final

dependerá de cuestiones económicas, en una primera instancia se puede considerar que el último caso será el más favorable. En todos los casos, la pureza obtenida es de 0.98 y la recuperación es del 98% para el primero, 98.8% para el segundo y 97.5% para el último, lo que equivale a unos flujos finales de producto de 14, 14.15 y 13.85 kmol/h respectivamente.

La corriente de methanol purge gas necesitará 18 módulos de membrana para su tratamiento. De estos, 17 se emplearán para el tratamiento del retenido y tan solo uno para la purificación de la corriente de permeado. Para el tratamiento del retenido, se emplearán 4 etapas de separación, la primera de ellas empleará 5 módulos en paralelo, la segunda 4, la tercera y la cuarta necesitarán 3 módulos. El módulo de tratamiento del permeado será alimentado con el 99.5% del permeado obtenido. La pureza obtenida en este caso también es de 0.98 para el hidrógeno y el porcentaje de recuperación es de 33%, lo que equivale a un flujo de 69 kmol/h de corriente producto. Debido al gran número de módulos necesarios para el tratamiento de esta corriente, se deberá someter a un estudio económico para determinar su rentabilidad.

Se ha observado una relación directa entre el contenido de dióxido de carbono en la alimentación y la dificultad de la separación, debido a la baja selectividad del hidrógeno respecto al CO₂. De esta forma, la corriente más adecuada para la recuperación de hidrógeno es la de ammonia purge gas, que no contiene dióxido de carbono, donde se alcanza una recuperación alta con pocos módulos de membrana. Por otro lado, la corriente de methanol purge gas tiene el contenido más alto de CO₂ de las tres, siendo necesarios muchas más etapas de separación en serie para conseguir una recuperación mucho menor. Por tanto, se deberá estudiar la viabilidad económica de emplear la corriente residual MPG como fuente de hidrógeno.

De cara al trabajo futuro, se debe incluir las condiciones reales de temperatura y presión de cada una de las corrientes residuales, así como las necesidades de compresión o de intercambio de calor del sistema planteado o la influencia de las impurezas. Además, se debe realizar un estudio económico acerca de las soluciones propuestas. Para alcanzar todas las especificaciones de la normativa se deben plantear sistemas híbridos optimizados que alcancen la pureza requerida sin contaminantes con el menor coste.

6. Nomenclatura

L_k	Flujo molar total de retenido que abandona la etapa k , kmol/h.
$l_{j,k}$	Flujo molar del componente j del retenido que abandona la etapa k , kmol/h.
$x_{j,k}$	Fracción molar del componente j en la corriente de retenido que abandona la etapa k , adimensional.
V_k	Flujo molar total de permeado que abandona la etapa k , kmol/h.
$v_{j,k}$	Flujo molar del componente j del permeado que abandona la etapa k , kmol/h.
$v_{j,total}$	Flujo molar del componente j del permeado global, que abandona el módulo de membrana en el caso de flujo cruzado, kmol/h.
$y_{j,k}$	Fracción molar del componente j en la corriente de permeado que abandona la etapa k , adimensional.
$m_{j,k}$	Flujo molar del componente j que atraviesa la membrana en la etapa k , kmol/h.
M	Número de componentes presentes en el sistema, adimensional.
N	Número de etapas en que se discretiza la longitud del módulo de membrana, adimensional.
A_k	Área de membrana correspondiente a la etapa k , m^2 .
R_o	Radio exterior de la fibra hueca, m.
L	Longitud activa de la fibra hueca, m.
N_f	Número de fibras huecas que conforman el módulo de membrana, adimensional.
Q_j	Permeancia del compuesto j , GPU.
P_j	Permeabilidad del compuesto j , Barrer o kmol/(h bar m).

D_j	Coeficiente de difusión del compuesto j , m^2/h .
S_j	Coeficiente de sorción del compuesto j , $kmol/m^3 \text{ bar}$.
δ	Espesor activo de la membrana, m .
P_{V_k}	Presión absoluta en la carcasa, bar
P_{L_k}	Presión absoluta en el interior de las fibras, bar .
H_k^L	Entalpía de la corriente de retenido que abandona la etapa k , $GJ/kmol$.
H_k^V	Entalpía de la corriente de permeado que abandona la etapa k , $GJ/kmol$.
Q_{membR}	Flujo de calor neto que atraviesa la membrana desde el permeado hacia el retenido, GJ/h .
U_o	Coeficiente global de transmisión de calor de la membrana, $GJ/h \text{ m}^2 \text{ K}$.
T_k^V	Temperatura de la corriente de permeado que abandona la etapa k , K .
T_k^L	Temperatura de la corriente de retenido que abandona la etapa k , K .
Cp_{v_k}	Capacidad calorífica de la corriente de permeado que abandona la etapa k , $kJ/kmol \text{ K}$.
$Cp_{V \text{ total}}$	Capacidad calorífica de la corriente de permeado que abandona el equipo, $kJ/kmol \text{ K}$.
V_{total}	Flujo de permeado total que abandona el equipo, $kmol/h$.
ACM	Aspen Custom Modeler.
AP	Aspen Plus.
MPG	Corriente de purge de las plantas de producción de metanol.
APG	Corriente de purga de las plantas de producción de amoniaco.
COG	Corriente de purga de las acerías y plantas de producción de coque.

7. Referencias

- [1]: LAUERMANN, G. [et al.]. 2012. Hydrogen, 1. Properties and Occurrence. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 7th, electronic release.
- [2]: CENTRO NACIONAL DEL HIDRÓGENO. 2018. Pilas de combustible. [Consulta: 06-08-2019]. Disponible en: <https://www.cnh2.es/pilas-de-combustible/>
- [3]: LINARES J.I.; MORATILLA B. Y. 2007. El hidrógeno y la energía. *Análisis de situación y prospectiva de nuevas tecnologías energéticas*. ed: ICAI, Asociación Nacional de Ingenieros del ICAI.
- [4]: INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. 2006. *UNE-ISO 14687:2006: Hidrógeno como combustible: Especificaciones de Producto*. Genève: ISO.
- [5]: HÄUSSINGER, P. [et al.]. 2012. Hydrogen, 2. Production. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 7th, electronic release.
- [6]: YÁÑEZ DÍAZ, M. 2020. *Recuperación de hidrógeno de corrientes gaseosas residuales de origen industrial para su aplicación en pilas de combustible*. Tesis Doctoral. Universidad de Cantabria.
- [7]: RAZZAQ R. [et.al.]. 2013. Coke oven gas: Availability, properties, purification, and utilization. *Fuel, ELSEVIER*,. **113**, pp. 287–299.
- [8]: E-PRTR FACILITIES. AAI de cada industria. [Consulta: 14-10-2019]. Disponible en: <http://prtr.eea.europa.eu/#/home>
- [9]: RAHIMPOUR, M.R., ASGARI A. 2009. Production of hydrogen from purge gases of ammonia plants. *International Journal Of Hydrogen Energy, ELSEVIER*, **34**, pp. 5795–5802.
- [10]: ZHANG D. [et. al.]. 2017. Modeling of purge-gas recovery using membrane separation. *Chemical Engineering Research and Design, ELSEVIER*, **125**, pp. 361-366.
- [11]: HÄUSSINGER , P. [et al.]. 2012. Hydrogen, 3. Purification. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 7th, electronic release.

- [12]: WINDMEIER C., BARRON R. 2012. Cryogenic Technology. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 7th, electronic release.
- [13]: BART H.J., VON GEMMINGEN U. 2012. Adsorption. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 7th, electronic release.
- [14]: SUSHIL A., SANDUN F. 2006. Hydrogen membrane separation techniques. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **45**, pp. 875-881.
- [15]: SHAO L. 2009. Polymeric membranes for the hydrogen economy: Contemporary approaches and prospects for the future. *Journal of Membrane Science*, *ELSEVIER*, **327**, pp. 18-31.
- [16]: BAKER R. W., LOW B. T. 2014. Gas Separation Membrane Materials: A Perspective. *Macromolecules*, **47**, pp. 6999-7013.
- [17]: BRINKMANN T., SHISHATSKIY S. 2016. Hydrogen Separation with Polymeric Membranes. *Hydrogen Science and Engineering: Materials, Processes, Systems and Technology*, **1**, pp. 509-541.
- [18]: DAVID O.C. [et. al.]. 2011. Mixed gas separation study for the hydrogen recovery from H₂/CO/N₂/CO₂ post combustion mixtures using a Matrimid membrane. *Journal of Membrane Science*, *ELSEVIER*, **378**, pp 359-368.
- [19]: COKER, D.T.; FREEMAN , B.D. 1998. Modeling Multicomponent Gas Separation Using Hollow-Fiber Membrane Contactors. *AIChE Journal*, **44**(6), pp. 1289-1302.
- [20]: COKER, D.T. [et al.]. 1999. Nonisothermal Model for Gas Separation Hollow-Fiber Membranes. *AIChE Journal*, **45**(7), pp 1451-1468.
- [21]: AIR PRODUCTS. 2016. PRISM Membrane System for Oil Refinery Applications: Data Sheet. [Consulta:04-11-2019]. Disponible en: <http://www.airproducts.com/~media/Files/PDF/products/supply-options/prism-membrane/en-prism-process-gas-brochure.pdf?la=en>
- [22]: LAGUILLO REVUELTA, S. 2014. *Evaluación de Configuraciones en Sistemas Híbridos Destilación/Membrana Aplicados a la Separación de Mezclas Propano-Propileno*. Trabajo de Fin de Carrera. Universidad de Cantabria.

8. Anexos

8.1. Anexo I: Modelado en Aspen Custom módulo de membrana en configuración de fibra hueca en cocorriente

Model MembranaCocorriente

```

/* Asumo presion constante a ambos lados de la membrana*/
/* Asumo que toda la resistencia al transporte de materia en la membrana se
encuentra en la capa activa*/
/* Asumo que no hay mezcla axial*/
/* Asumo flujo piston en todo el modulo*/
/* Asumo que todas las fibras se comportan igual, por lo que se puede escalar
el comportamiento de una*/
/* Asumo operacion en estado estacionario*/
/* Asumo que no existen deformaciones de las fibras por la presion*/
/* Asumo que las dimensiones de las fibras son constantes e iguales en todas
ellas*/
/* Asumo que Peng-Robinson describe adecuadamente las propiedades de los
gases*/
/* Asumo un módulo de membrana adiabatico*/
/* Asumo que la transferencia de calor convectiva en el eje axial es
despreciable*/
/* Asumo que los efectos de disipacion viscosa y trabajo reversible son
despreciables*/
/* Asumo que no ocurre condensacion en el proceso de expansion y
enfriamiento*/

/*PERMEABILIDAD Y PERMEANCIA CONSTANTES CON TEMPERATURA*/

//VARIABLES Y PARAMETROS

N as IntegerParameter (Description:"Numero de etapas en que discretizo
la membrana (adim)", 100);

Nf as Notype (Description:"Numero de fibras que componen el modulo
(adim)", fixed);

Ro as length (Description:"Radio exterior de la fibra hueca(m)", fixed);

L as length (Description:"Longitud activa de la fibra (m)", fixed);

d as length (Description:"Espesor activo de la membrana(m)", fixed);

A as Area (Description:"Area total de la membrana (m2)", free);

AEtapa as Area (Description:"Area activa de cada etapa(m2)", free);

FRetenido([1:N+1]) as Flow_Mol (Description:"Flujo molar de retenido que
sale de cada etapa (kmol/h)", lower:0, value:1);

FPermeado([1:N+1]) as Flow_Mol (Description:"Flujo molar de permeado que
sale de cada etapa (kmol/h)", lower:0, value:1);

XRetenido(ComponentList,[1:N+1]) as Molefraction (Description:"Fraccion
molar de cada componente en el retenido de cada etapa (adim)", lower:0,
upper:1);

XPermeado(ComponentList,[1:N+1]) as Molefraction (Description:"Fraccion
molar de cada componente en el permeado de cada etapa (adim)", lower:0,
upper:1);

Permeabilidad(ComponentList) as Notype (Description:"Permeabilidad de
cada componente(barrer)", fixed);

```

```

PMolar(ComponentList) as Notype (Description:"Permeancia de cada
componente en base molar (kmol/h m2 bar)", free);

Permeancia(ComponentList) as Notype (Description:"Permeancia de cada
componente (GPU)", free);

PRetenido as Pressure (Description:"Presion en el lado del retenido
(bar)", fixed);

PPermeado as Pressure (Description:"Presion en el lado del permeado
(bar)", fixed);

TRetenido([1:N+1]) as Temperature (Description:"Temperatura de la
corriente de retenido en cada etapa, °C", free);

TPermeado([1:N+1]) as Temperature (Description:"Temperatura de la
corriente de permeado en cada etapa, °C", free);

EntalpiaRetenido([1:N+1]) as Enth_Mol_Vap (Description:"Entalpia de la
corriente de retenido en cada etapa, GJ/kmol", free);

EntalpiaPermeado([1:N+1]) as Enth_Mol_Vap (Description:"Entalpia de la
corriente de permeado en cada etapa, GJ/kmol", free);

RhoRetenido([1:N+1]) as Dens_Mol (Description:"Densidad molar de la
corriente de retenido en cada etapa, kmol/m3", free);

RhoPermeado([1:N+1]) as Dens_Mol (Description:"Densidad molar de la
corriente de permeado en cada etapa, kmol/m3", free);

QmembR([1:N]) as Heat (Description:"Flujo de calor neto que atraviesa la
membrana desde el permeado hacia el retenido, GJ/h", free);

U as HeatCoefTrans (Description:"Coeficiente de transmision de calor de
la membrana, GJ/h m2 K", fixed);

//CORRIENTES

Alimentacion as Input MoleFractionPort;

Purga as Input MoleFractionPort;

Retenido as Output MoleFractionPort;

Permeado as Output MoleFractionPort;

//CONDICIONES DE ENTRADA

/*Alimentacion igual a Retenido en etapa N+1*/

TRetenido(N+1)=Alimentacion.T;

FRetenido(N+1)=Alimentacion.F;

For comp in ComponentList Do

    XRetenido(comp, N+1)=Alimentacion.z(comp);

Endfor

/*Purga igual a Permeado en etapa N+1*/

TPermeado(N+1)=Purga.T;

FPermeado(N+1)=Purga.F;

For comp in ComponentList Do

```

```

XPermeado (comp, N+1)=Purga.z (comp) ;

Endfor

//ECUACIONES BALANCE DE MATERIA

/*Area total de membrana calculada a partir de sus dimensiones*/

A=2*3.1416*Ro*L*Nf;

/*Area de cada etapa como cociente del area entre las etapas*/

AEtapa=A/N;

/*Transformar Barrer a GPU*/

Permeancia (ComponentList)=Permeabilidad (ComponentList)/d/1000000;

/*Transformar GPU a base molar, kmol/h m2 bar*/

PMolar (ComponentList)=Permeancia (ComponentList) *0.0001207;

/*Balances de materia*/

For k in [1:N] Do

    /*Balance global de cada etapa*/

    FRetenido (k+1)+FPermeado (k+1)=FRetenido (k)+FPermeado (k);

    For comp in ComponentList Do

        /*Ecuacion Barrer et al*/

        FRetenido (k+1) *XRetenido (comp, k+1)-FRetenido (k) *
        XRetenido (comp, k)=PMolar (comp) *AEtapa* (FRetenido *
        XRetenido (comp, k+1)-PPermeado*XPermeado (comp, k+1));

        /*Balance de materia de cada componente en cada etapa*/

        FRetenido (k+1) *XRetenido (comp, k+1)+FPermeado (k+1) *
        XPermeado (comp, k+1)=FRetenido (k) *XRetenido (comp, k)
        +FPermeado (k) *XPermeado (comp, k);

    Endfor

    /*Sumatorio de fracciones molares en el permeado = 1*/

    sigma (foreach (comp in ComponentList) XPermeado (comp, k))=1;

Endfor

//ECUACIONES BALANCE DE ENERGIA

/*Calcular entalpias y densidades*/

For k in [1:N+1] Do

    call (EntalpiaRetenido (k))=pEnth_mol_vap (TRetenido (k), PRetenido,
    XRetenido (ComponentList, k) ) ComponentList;

```

```

    call (EntalpiaPermeado(k))=pEnth_mol_vap(TPermeado(k), PPermeado,
    XPermeado(ComponentList, k))ComponentList;

    call (RhoRetenido(k))=pDens_Mol_Vap(TRetenido(k), PRetenido,
    XRetenido(ComponentList, k))ComponentList;

    call (RhoPermeado(k))=pDens_Mol_Vap(TPermeado(k), PPermeado,
    XPermeado(ComponentList, k))ComponentList;

endfor;

/*Balance de energía*/

For k in [1:N] Do

    EntalpiaRetenido(k+1)*FRetenido(k+1)=EntalpiaRetenido(k)*FRetenid
    o(k)+EntalpiaRetenido(k+1)*(FRetenido(k+1)-FRetenido(k))-
    QmembR(k);

    QmembR(k)=U*AEtapa*((TPermeado(k)+273.15)-(TRetenido(k)+273.15));

    EntalpiaRetenido(k+1)*FRetenido(k+1)+EntalpiaPermeado(k+1)*
    FPermeado(k+1)=EntalpiaRetenido(k)*FRetenido(k)+EntalpiaPermeado(
    k)*FPermeado(k);

endfor;

//CONDICIONES DE SALIDA

/*Retenido igual a retenido en etapa 1*/

TRetenido(1)=Retenido.T;

FRetenido(1)=Retenido.F;

For comp in ComponentList Do

    XRetenido(comp, 1)=Retenido.z(comp);

Endfor

/*Permeado igual a permeado en etapa 1*/

TPermeado(1)=Permeado.T;

FPermeado(1)=Permeado.F;

For comp in ComponentList Do

    XPermeado(comp, 1)=Permeado.z(comp);

Endfor

End

```

8.2. Anexo II: Modelado en Aspen Custom módulo de membrana en configuración de fibra hueca en contracorriente

Model MembranaContracorriente

```

/* Asumo presion constante a ambos lados de la membrana*/
/* Asumo que toda la resistencia al transporte de materia en la membrana se
encuentra en la capa activa*/
/* Asumo que no hay mezcla axial*/
/* Asumo flujo piston en todo el modulo*/
/* Asumo que todas las fibras se comportan igual, por lo que se puede escalar
el comportamiento de una*/
/* Asumo operacion en estado estacionario*/
/* Asumo que no existen deformaciones de las fibras por la presion*/
/* Asumo que las dimensiones de las fibras son constantes e iguales en todas
ellas*/
/* Asumo que Peng-Robinson describe adecuadamente las propiedades de los
gases*/
/* Asumo un módulo de membrana adiabatico*/
/* Asumo que la transferencia de calor convectiva en el eje axial es
despreciable*/
/* Asumo que los efectos de disipacion viscosa y trabajo reversible son
despreciables*/
/* Asumo que no ocurre condensacion en el proceso de expansion y
enfriamiento*/

/*PERMEABILIDAD Y PERMEANCIA CONSTANTES CON TEMPERATURA*/

//VARIABLES Y PARAMETROS

N as IntegerParameter (Description:"Numero de etapas en que discretizo
la membrana (adim)", 100);

Nf as Notype (Description:"Numero de fibras que componen el modulo
(adim)", fixed);

Ro as length (Description:"Radio exterior de la fibra hueca(m)", fixed);

L as length (Description:"Longitud activa de la fibra (m)", fixed);

d as length (Description:"Espesor activo de la membrana(m)", fixed);

A as Area (Description:"Area total de la membrana (m2)", free);

AEtapa as Area (Description:"Area activa de cada etapa(m2)", free);

FRetenido([1:N+1]) as Flow_Mol (Description:"Flujo molar de retenido que
sale de cada etapa (kmol/h)", lower:0, value:1);

FPermeado([0:N]) as Flow_Mol (Description:"Flujo molar de permeado que
sale de cada etapa (kmol/h)", lower:0, value:1);

XRetenido(ComponentList,[1:N+1]) as Molefraction (Description:"Fraccion
molar de cada componente en el retenido de cada etapa (adim)", lower:0,
upper:1);

XPermeado(ComponentList,[0:N]) as Molefraction (Description:"Fraccion
molar de cada componente en el permeado de cada etapa (adim)", lower:0,
upper:1);

```

```

Permeabilidad(ComponentList) as Notype (Description:"Permeabilidad de
cada componente(barrer)", fixed);

PMolar(ComponentList) as Notype (Description:"Permeancia de cada
componente en base molar (kmol/h m2 bar)", free);

Permeancia(ComponentList) as Notype (Description:"Permeancia de cada
componente (GPU)", free);

PRetenido as Pressure (Description:"Presion en el lado del retenido
(bar)", fixed);

PPermeado as Pressure (Description:"Presion en el lado del
permeado(bar)", fixed);

TRetenido([1:N+1]) as Temperature (Description:"Temperatura de la
corriente de retenido en cada etapa, °C", free);

TPermeado([0:N]) as Temperature (Description:"Temperatura de la
corriente de permeado en cada etapa, °C", free);

EntalpiaRetenido([1:N+1]) as Enth_Mol_Vap (Description:"Entalpia de la
corriente de retenido en cada etapa, GJ/kmol", free);

EntalpiaPermeado([0:N]) as Enth_Mol_Vap (Description:"Entalpia de la
corriente de permeado en cada etapa, GJ/kmol", free);

RhoRetenido([1:N+1]) as Dens_Mol (Description:"Densidad molar de la
corriente de retenido en cada etapa, kmol/m3", free);

RhoPermeado([0:N]) as Dens_Mol (Description:"Densidad molar de la
corriente de permeado en cada etapa, kmol/m3", free);

QmembR([1:N]) as Heat (Description:"Flujo de calor neto que atraviesa la
membrana desde el permeado hacia el retenido, GJ/h", free);

U as HeatCoefTrans (Description:"Coeficiente de transmision de calor de
la membrana, GJ/h m2 K", fixed);

```

//CORRIENTES

```

Alimentacion as Input MoleFractionPort;

Purga as Input MoleFractionPort;

Retenido as Output MoleFractionPort;

Permeado as Output MoleFractionPort;

```

//CONDICIONES DE ENTRADA

```

/*Alimentacion igual a Retenido en etapa N+1*/

TRetenido(N+1)=Alimentacion.T;

FRetenido(N+1)=Alimentacion.F;

```

```

For comp in ComponentList Do
    XRetenido(comp, N+1)=Alimentacion.z(comp);
Endfor

/*Purga igual a Permeado en etapa 0*/
TPermeado(0)=Purga.T;
FPermeado(0)=Purga.F;
For comp in ComponentList Do
    XPermeado(comp, 0)=Purga.z(comp);
Endfor

//ECUACIONES BALANCE DE MATERIA

/*Area total de membrana calculada a partir de sus dimensiones*/
A=2*3.1416*Ro*L*Nf;
/*Area de cada etapa como cociente del area entre las etapas*/
AEtapa=A/N;
/*Transformar Barrer a GPU*/
Permeancia(ComponentList)=Permeabilidad(ComponentList)/d/1000000;
/*Transformar GPU a base molar, kmol/h m2 bar*/
PMolar(ComponentList)=Permeancia(ComponentList)*0.0001207;
/*Balances de materia*/
For k in [1:N] Do
    /*Balance global de cada etapa*/
    FRetenido(k+1)+FPermeado(k-1)=FRetenido(k)+FPermeado(k);
    For comp in ComponentList Do
        /*Ecuacion Barrer etal*/
        FRetenido(k+1)*XRetenido(comp, k+1)-FRetenido(k)*
        XRetenido(comp, k)=PMolar(comp)*AEtapa*(PRetenido*
        XRetenido(comp, k+1)-PPermeado*XPermeado(comp, k-1));
        /*Balance de materia de cada componente en cada etapa*/
        FRetenido(k+1)*XRetenido(comp, k+1)+FPermeado(k-1)*
        XPermeado(comp, k-1)=FRetenido(k)*XRetenido(comp, k)
        +FPermeado(k)*XPermeado(comp, k);
    Endfor
Endfor

```

```

/*Sumatorio de fracciones molares en el permeado = 1*/
    sigma (foreach (comp in ComponentList) XPermeado(comp, k))=1;
Endfor

//ECUACIONES BALANCE DE ENERGIA

/*Calcular entalpias y densidades*/

For k in [1:N+1] Do

    call(EntalpiaRetenido(k))=pEnth_mol_vap(TRetenido(k), PRetenido,
XRetenido(ComponentList, k)ComponentList;

    call(RhoRetenido(k))=pDens_Mol_Vap(TRetenido(k), PRetenido,
XRetenido(ComponentList, k)ComponentList;

endfor;

For k in [0:N] Do

    call(EntalpiaPermeado(k))=pEnth_mol_vap(TPermeado(k), PPermeado,
XPermeado(ComponentList, k)ComponentList;

    call(RhoPermeado(k))=pDens_Mol_Vap(TPermeado(k), PPermeado,
XPermeado(ComponentList, k)ComponentList;

endfor;

/*Balance de energia*/

For k in [1:N] Do

    EntalpiaRetenido(k+1)*FRetenido(k+1)=EntalpiaRetenido(k)*FRetenido(k)+EntalpiaRetenido(k+1)*(FRetenido(k+1)-FRetenido(k))-QmembR(k);

    QmembR(k)=U*Aetapa*((TPermeado(k)+273.15)-(TRetenido(k)+273.15));

    EntalpiaRetenido(k+1)*FRetenido(k+1)+EntalpiaPermeado(k-1)*FPermeado(k-1)=EntalpiaRetenido(k)*FRetenido(k)+EntalpiaPermeado(k)*FPermeado(k);

endfor;

//CONDICIONES DE SALIDA

/*Retenido igual a retenido en etapa 1*/

TRetenido(1)=Retenido.T;

FRetenido(1)=Retenido.F;

For comp in ComponentList Do

```

```
XRetenido(comp, 1)=Retenido.z(comp);  
  
Endfor  
  
/*Permeado igual a permeado en etapa N*/  
  
TPermeado(N)=Permeado.T;  
  
FPermeado(N)=Permeado.F;  
  
For comp in ComponentList Do  
  
    XPermeado(comp, N)=Permeado.z(comp);  
  
Endfor  
  
End
```

8.3. Anexo III: Modelado en Aspen Custom módulo de membrana en configuración de fibra hueca en flujo cruzado

Model MembranaFlujoCruzado

```

/* Asumo presion constante a ambos lados de la membrana*/
/* Asumo que toda la resistencia al transporte de materia en la membrana se
encuentra en la capa activa*/
/* Asumo que no hay mezcla axial*/
/* Asumo flujo piston en todo el modulo*/
/* Asumo que todas las fibras se comportan igual, por lo que se puede escalar
el comportamiento de una*/
/* Asumo operacion en estado estacionario*/
/* Asumo que no existen deformaciones de las fibras por la presion*/
/* Asumo que las dimensiones de las fibras son constantes e iguales en todas
ellas*/
/* Asumo que Peng-Robinson describe adecuadamente las propiedades de los
gases*/
/* Asumo un módulo de membrana adiabatico*/
/* Asumo que la transferencia de calor convectiva en el eje axial es
despreciable*/
/* Asumo que los efectos de disipacion viscosa y trabajo reversible son
despreciables*/
/* Asumo que no ocurre condensacion en el proceso de expansion y
enfriamiento*/

/*PERMEABILIDAD Y PERMEANCIA CONSTANTES CON TEMPERATURA*/

//VARIABLES Y PARAMETROS

N as IntegerParameter (Description:"Numero de etapas en que discretizo
la membrana (adim)", 100);

Nf as Notype (Description:"Numero de fibras que componen el modulo
(adim)", fixed);

Ro as length (Description:"Radio exterior de la fibra hueca(m)", fixed);

L as length (Description:"Longitud activa de la fibra (m)", fixed);

d as length (Description:"Espesor activo de la membrana(m)", fixed);

A as Area (Description:"Area total de la membrana (m2)", free);

AEtapa as Area (Description:"Area activa de cada etapa(m2)", free);

FRetenido([1:N+1]) as Flow_Mol (Description:"Flujo molar de retenido que
sale de cada etapa (kmol/h)", lower:0, value:1);

FPermeado([1:N]) as Flow_Mol (Description:"Flujo molar de permeado que
sale de cada etapa (kmol/h)", lower:0, value:1);

XRetenido(ComponentList,[1:N+1]) as Molefraction (Description:"Fraccion
molar de cada componente en el retenido de cada etapa (adim)", lower:0,
upper:1);

XPermeado(ComponentList,[1:N]) as Molefraction (Description:"Fraccion
molar de cada componente en el permeado de cada etapa (adim)", lower:0,
upper:1);

```

```

Permeabilidad(ComponentList) as Notype (Description:"Permeabilidad de
cada componente (barrer)", fixed);

PMolar(ComponentList) as Notype (Description:"Permeancia de cada
componente en base molar (kmol/h m2 bar)", free);

Permeancia(ComponentList) as Notype (Description:"Permeancia de cada
componente (GPU)", free);

PRetenido as Pressure (Description:"Presion en el lado del retenido
(bar)", fixed);

PPermeado as Pressure (Description:"Presion en el lado del permeado
(bar)", fixed);

TRetenido([1:N+1]) as Temperature (Description:"Temperatura de la
corriente de retenido en cada etapa, °C", free);

TPermeado([1:N+1]) as Temperature (Description:"Temperatura de la
corriente de permeado en cada etapa, °C", free);

EntalpiaRetenido([1:N+1]) as Enth_Mol_Vap (Description:"Entalpia de la
corriente de retenido en cada etapa, GJ/kmol", free);

EntalpiaPermeado([1:N+1]) as Enth_Mol_Vap (Description:"Entalpia de la
corriente de permeado en cada etapa, GJ/kmol", free);

RhoRetenido([1:N+1]) as Dens_Mol (Description:"Densidad molar de la
corriente de retenido en cada etapa, kmol/m3", free);

RhoPermeado([1:N+1]) as Dens_Mol (Description:"Densidad molar de la
corriente de permeado en cada etapa, kmol/m3", free);

QmembR([1:N]) as Heat (Description:"Flujo de calor neto que atraviesa la
membrana desde el permeado hacia el retenido, GJ/h", free);

U as HeatCoefTrans (Description:"Coeficiente de transmision de calor de
la membrana, GJ/h m2 K", fixed);

CpPermeado as Cp_mol_vap (Description:"Capacidad calorifica molar del
permeado, KJ/kmol K", free);

CpPerm([1:N+1]) as Cp_mol_vap (Description:"Capacidad calorifica molar
del permeado que abandona cada etapa, KJ/kmol K", free);

```

//CORRIENTES

```

Alimentacion as Input MoleFractionPort;

Purga as Input MoleFractionPort;

Retenido as Output MoleFractionPort;

Permeado as Output MoleFractionPort;

```

//CONDICIONES DE ENTRADA

```

/*Alimentacion igual a Retenido en etapa N+1*/
TRetenido(N+1)=Alimentacion.T;
FRetenido(N+1)=Alimentacion.F;
For comp in ComponentList Do
    XRetenido(comp, N+1)=Alimentacion.z(comp);
Endfor

/*Purga igual a Permeado en etapa N+1*/
TPermeado(N+1)=Purga.T;
FPermeado(N+1)=Purga.F;
For comp in ComponentList Do
    XPermeado(comp, N+1)=Purga.z(comp);
Endfor

//ECUACIONES BALANCE DE MATERIA

/*Area total de membrana calculada a partir de sus dimensiones*/
A=2*3.1416*Ro*L*Nf;

/*Area de cada etapa como cociente del area entre las etapas*/
AEtapa=A/N;

/*Transformar Barrer a GPU*/
Permeancia(ComponentList)=Permeabilidad(ComponentList)/d/1000000;

/*Transformar GPU a base molar, kmol/h m2 bar*/
PMolar(ComponentList)=Permeancia(ComponentList)*0.0001207;

/*Balances de materia*/
For k in [1:N] Do
    /*Balance global de cada etapa*/
    FRetenido(k+1)=FRetenido(k)+FPermeado(k);
    For comp in ComponentList Do
        /*Ecuacion Barrer et al*/
        FPermeado(k)*XPermeado(comp,k)=PMolar(comp)*AEtapa*
        (PRetenido*XRetenido(comp, k)-PPermeado*XPermeado(comp,k));
    Endfor
    /*Balance de materia de cada componente en cada etapa*/

```

```

FRetenido(k+1)*XRetenido(comp,k+1)=FRetenido(k)*
XRetenido(comp,k)+FPermeado(k)*XPermeado(comp,k);

Endfor

/*Sumatorio de fracciones molares en el permeado = 1*/
sigma (foreach (comp in ComponentList) XPermeado(comp,k))=1;

Endfor

//ECUACIONES BALANCE DE ENERGIA

/*Calcular entalpías y densidades*/

For k in [1:N+1] Do

    call(EntalpiaRetenido(k))=pEnth_mol_vap(TRetenido(k), PRetenido,
XRetenido(ComponentList,k))ComponentList;

    call(EntalpiaPermeado(k))=pEnth_mol_vap(TPermeado(k), PPermeado,
XPermeado(ComponentList,k))ComponentList;

    call(RhoRetenido(k))=pDens_Mol_Vap(TRetenido(k), PRetenido,
XRetenido(ComponentList,k))ComponentList;

    call(RhoPermeado(k))=pDens_Mol_Vap(TPermeado(k), PPermeado,
XPermeado(ComponentList,k))ComponentList;

endfor;

/*Balance de energia*/

For k in [1:N] Do

    EntalpiaRetenido(k+1)*FRetenido(k+1)=EntalpiaRetenido(k)*FRetenid
o(k)+EntalpiaRetenido(k+1)*(FRetenido(k+1)-FRetenido(k))-
QmembR(k);

    QmembR(k)=U*AEtapa*((TPermeado(k)+273.15)-(TRetenido(k)+273.15));

    EntalpiaRetenido(k+1)*FRetenido(k+1)=EntalpiaRetenido(k)*
FRetenido(k)+EntalpiaPermeado(k)*FPermeado(k);

endfor;

//CONDICIONES DE SALIDA

/*Retenido igual a retenido en etapa 1*/

TRetenido(1)=Retenido.T;

FRetenido(1)=Retenido.F;

For comp in ComponentList Do

```

```

XRetenido(comp, 1)=Retenido.z(comp);

Endfor

/*Permeado igual a permeado en etapa 1*/

For k in [1:N+1] Do

    Call(CpPerm(k))=pCp_Mol_Vap(TPermeado(k), PPermeado,
    XPermeado(ComponentList, k) ComponentList;

endfor;

Call(CpPermeado)=pCp_Mol_Vap(Permeado.T, PPermeado, Permeado.z);

(Permeado.T+273.15)*CpPermeado*Permeado.F=sigma(Foreach(k in [1:N+1])
FPermeado(k)*CpPerm(k)*(273.15+TPermeado(k)));

sigma(FPermeado)=Permeado.F;

For comp in ComponentList Do

    Sigma(foreach (k in [1:N+1]) FPermeado(k)*XPermeado(comp,k))=
    Permeado.F*Permeado.z(comp);

Endfor

End

```

8.4. Anexo IV: Exportar modelo desde Aspen Custom Modeler (ACM) a Aspen Plus (AP)

A continuación, se describirán los pasos seguidos para exportar los modelos desarrollados en ACM a AP [22]:

- 1) Abrir el programa que contiene el modelo de ACM. A la izquierda del flowsheet, en el panel *Exploring – Simulation*, dentro de *Simulation*, abrir *Custom Modelling*, y en su interior *Models*. Haciendo click con el botón derecho del ratón sobre el modelo a exportar, se abre un menú, donde se elegirá *Exported Model Properties*.
- 2) En la ventana que se ha abierto se puede cambiar el nombre del modelo y añadir una descripción. No se debe cambiar el campo llamado *Model Library Category*. Una vez completada la ventana, se pulsa siguiente.
- 3) La ventana que se muestra ahora muestra las corrientes que intervienen en el equipo. Se puede elegir cuáles de ellas exportar, todas en este caso. La siguiente columna muestra el tipo de corriente que es, la siguiente su nombre. La última columna sirve para marcar cuáles de ellas será necesario que existan para utilizar el modelo en Aspen Plus. En este caso, la única que se marca como no necesaria es la corriente de arrastre. Cuando esté todo completado, pulsar siguiente.
- 4) En esta pantalla se pueden modificar las opciones de visualización de las variables y modelos. En este caso no se modificará nada, es decir, se permite que se vean todas las variables. Pulsar siguiente.
- 5) Una vez completadas las opciones de exportación, se pasa a exportar el modelo. Para ello nuevamente se hace click con el botón derecho sobre el modelo que se quiere exportar, pero esta vez se elige la opción *Package Model For Aspen Plus/HYSYS*. Se guarda el archivo en formato *.bareslz*.
- 6) Cuando se ha guardado el modelo, pregunta si se quiere instalar, pulsar sí.
- 7) Cerrar Aspen Custom Modeler y abrir Aspen Plus. Crear una simulación en blanco e ir a la parte de simulación.

- 8) En la barra superior, abrir el menú *Customize*. En el apartado *Model Library*, abrir *Manage ACM Models*. Aquí se ve los modelos que están instalados, debería estar el modelo instalado anteriormente. Sino, al final de la ventana hay un botón llamado *Install Exported Model Package*, donde se pueden instalar más modelos. Cerrar la ventana una vez esté instalado.
- 9) Pulsar ahora *Manage Libraries*, activar el campo *ACM Models*.
- 10) Ahora en la parte inferior al flowsheet, donde se muestran todos los modelos, si nos desplazamos en las categorías hasta la última, *ACM Models*, dentro de ella aparecen los modelos exportados. Ya se puede arrastrar al flowsheet y utilizar.

8.5. Anexo V: Resumen de las configuraciones óptimas para la separación de hidrógeno en cada corriente residual.

Tabla A 1. Resumen de las configuraciones óptimas.

	Coke Oven Gas	Ammonia Purge Gas	Methanol Purge Gas
<i>Número de módulos</i>	5 o 7	1	18
<i>Paralelo</i>	2 en primera etapa	No	5 en la primera, 4 en la segunda, 3 en la tercera y cuarta
<i>Serie</i>	3 o 5 etapas	1 única etapa	4 etapas
<i>Presión en la primera etapa</i>	70 o 35 bar	70 bar	35 bar
<i>Módulo purificación</i>	Sí	No	Sí
<i>Recuperación</i>	89%	98%	33%