

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Ingeniería Química

Escola Técnica Superior de Enxeñaría

Universidade de Santiago de Compostela



Escola
Técnica
Superior
de Enxeñaría

**DISEÑO DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE
AMONÍACO VERDE A MICROESCALA**

Guillermo Martínez Loreiro

Uxía Mata Rivas

Julio de 2022

ÍNDICE GENERAL

DOCUMENTO I: MEMORIA

Anexo I: Balances de materia y de energía

Anexo II: Cálculos justificativos

Anexo IV: Análisis de viabilidad económica

DOCUMENTO II: PLANOS

DOCUMENTO III: ESTUDIOS CON ENTIDAD PROPIA

DOCUMENTO IV: PLIEGO DE CONDICIONES

DOCUMENTO V: PRESUPUESTO

Anexo: Dimensionado básico de equipos

DOCUMENTO I: MEMORIA

ÍNDICE

1. OBJETO	3
2. ALCANCE	3
3. JUSTIFICACIÓN DEL PROYECTO	3
4. INTRODUCCIÓN	5
4.1. Amoníaco.....	5
4.2. Aire	7
4.3. Nitrógeno	8
4.4. Agua.....	9
4.5. Hidrógeno	10
5. ANÁLISIS DE MERCADO	11
5.1. Usos del amoníaco	15
6. ESTUDIO DE ALTERNATIVAS.....	18
6.1. Síntesis convencional de amoníaco	18
6.2. Síntesis de amoníaco verde y selección de tecnologías.....	21
7. EMPLAZAMIENTO Y LOCALIZACIÓN	35
7.1. Disponibilidad de materia prima.....	35
7.2. Disponibilidad de energías renovables	36
7.3. Selección de la localización	37
7.4. Selección de la parcela.....	41
8. ANÁLISIS DE VIABILIDAD TÉCNICA.....	44
8.1. Viabilidad del proceso de producción.....	44
8.2. Disponibilidad de recursos.....	45
8.3. Viabilidad económica	48
8.4. Seguridad en el proceso	49
8.5. Análisis de factores externos	49
9. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO.....	50
9.1. Descripción detallada del proceso	50
9.2. Descripción de la instalación	53

9.3. Descripción de equipos	56
10. CONTROL E INSTRUMENTACIÓN.....	60
10.1. Introducción	61
10.2. Lazos más comunes	63
10.3. Algoritmo de control.....	64
10.4. Nomenclatura.....	65
10.5. Descripción de los lazos de control	66
10.6. Válvulas de alivio, indicadores y alarmas	77
11. SEGURIDAD.....	80
11.1. Inventario de sustancias	80
11.2. Clasificación según el Reglamento CLP	81
11.3. Clasificación según la NFPA	83
11.4. Estudio de reactividad química descontrolada.....	84
11.5. Clasificación de la instalación según la Directiva Seveso	88
11.6. Distancias de seguridad	90
11.7. Índice Dow de incendio y explosión.....	94
11.8. Válvulas de alivio	97
12. LEGISLACIÓN APLICABLE, REGLAMENTOS Y CÓDIGOS	98
12.1. Legislación eléctrica	98
12.2. Legislación ambiental	98
12.3. Legislación de seguridad e higiene	99
12.4. Códigos de diseño	100
12.5. Legislación para obra civil.....	100
12.6. Otros.....	101
13. Bibliografía.....	101

1. OBJETO

El presente proyecto tiene como finalidad diseñar una planta de producción de amoníaco verde a microescala a partir de agua y aire, de los cuales se obtendrán hidrógeno mediante electrólisis y nitrógeno a través de la destilación criogénica del aire, respectivamente. Una vez obtenidos el nitrógeno y el hidrógeno, tras ser acondicionados, se llevará a cabo el proceso Haber-Bosch.

La planta propuesta producirá 16.500 t/año de amoníaco con una pureza del 99,8% de acuerdo con el grado de pureza comercial requerido y operará en régimen continuo durante 24 horas, 330 días al año. (1)

Los equipos principales del proceso son el electrolizador alcalino, la torre de destilación criogénica y el reactor de síntesis de amoníaco, de los cuales Guillermo Martínez Loureiro diseñará el electrolizador de agua ELE-201 y Uxía Mata Rivas, el reactor de síntesis R-301.

Mediante la realización de este Trabajo Fin de Grado, los alumnos Guillermo Martínez y Uxía Mata optan a la obtención del título de graduado en Ingeniería Química otorgado por la Escola Técnica Superior de Enxeñaría de la Universidad de Santiago de Compostela.

2. ALCANCE

Los objetivos principales de este trabajo son los siguientes:

- Definición y justificación de la capacidad de producción, así como la justificación de la necesidad del proyecto.
- Estudio de mercado y localización de la planta.
- Estudio de alternativas y justificación de la alternativa seleccionada.
- Estudio de la viabilidad técnica, económica, medioambiental y de seguridad del proyecto propuesto.
- Identificación de equipos, instrumentación, accesorios y materiales necesarios para llevar a cabo el proceso.
- Descripción general de la planta industrial a diseñar.
- Diseño básico de equipos generales y diseño riguroso de los equipos seleccionados.
- Estimación de requerimientos de servicios auxiliares.
- Planos de la distribución en planta, diagramas de flujo, diagrama de tuberías e instrumentación (P&ID) y planos de los equipos diseñados.
- Especificaciones técnicas de los equipos a diseñar.
- Evaluación económica del proyecto.

3. JUSTIFICACIÓN DEL PROYECTO

En España, la superficie agraria útil es superior a 23 millones de hectáreas, siendo la superficie total del país de unos 50 millones, por lo que representa más de la mitad del

territorio español. De estos 23 millones de hectáreas, en torno a 17 millones de hectáreas son de cultivo. (2)

En el año 2020, en España fueron necesarias 1.059.299 toneladas de fertilizantes nitrogenados inorgánicos. En concreto, el amoníaco, es el fertilizante comercial que mayor contenido de N presenta, el cual representa un pilar fundamental en la industria de los fertilizantes nitrogenados, pudiendo ser directamente aplicado al suelo como nutriente o transformado en una gran variedad de fertilizantes nitrogenados. Del total de la demanda del año 2020, en España se produjeron 729.848 toneladas, mientras que 912.869 t fueron importadas, lo cual demuestra la elevada demanda en el país. (3)

Actualmente, el amoníaco se produce a partir del nitrógeno de la atmósfera, y de hidrógeno obtenido a partir de combustibles fósiles. En España, el hidrógeno se obtiene a partir del gas natural mediante el reformado con vapor. De acuerdo con los datos aportados por el Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación, en el año 2017 se emitieron principalmente 324,78 kt de CO₂, 488,58 t de NO_x y 580,16 t de SO_x entre otros. (4)

Frente a la alternativa actual de producción de amoníaco, con este proyecto se trata de enfocar la producción de amoníaco de una forma más sostenible, reduciendo las emisiones de CO₂ asociadas al proceso al sustituir los combustibles fósiles por energías renovables para la obtención del hidrógeno. De esta forma, se pretende apoyar y conseguir la neutralidad climática para 2050 que defiende la UE en el Pacto Verde Europeo. Por tanto, a través de la producción de hidrógeno verde se busca descarbonizar la economía, además de que se considera una inversión prioritaria en el plan de recuperación económica y contribuye a la competitividad de la UE. (5) (6)

Asimismo, la Hoja de Ruta del Hidrógeno Renovable contribuye al desarrollo de la Estrategia Nacional frente al Reto demográfico promoviendo la aparición de focos de producción de energía para evitar la despoblación rural. (7)

Por otra parte, también se busca conseguir la independencia energética, ya que la dependencia de otros países conlleva a alteraciones en el suministro como consecuencia de la competencia con otros importadores. Esto a su vez provoca fluctuaciones en el precio de la energía continuamente que pueden provocar un déficit en la balanza comercial de los países. La Unión Europea es especialmente dependiente del gas natural y el petróleo, por lo que teniendo en cuenta que España es uno de los países con mayor potencial de la UE en energía eólica, se pretende paliar dicha situación produciendo H₂ verde en lugar de emplear el proceso de reformado con vapor.

Finalmente, se ha optado por una producción a microescala en lugar de a gran escala (mayoría de plantas), ya que de esta forma se reduce el consumo de agua en la localización de la planta para producir hidrógeno y por tanto, también se disminuyen los daños ambientales. Además, la producción distribuida permite satisfacer la necesidad de autosuficiencia localizada y reduce los costes y emisiones de transporte. (8)

En el PERTE (Proyectos Estratégicos para la Recuperación y Transformación Económica) de Energías Renovables, Hidrógeno Renovable y Almacenamiento emitido por el Gobierno de España, se presenta la necesidad de un nuevo modelo energético en el que uno de los objetivos es la descentralización, mediante la cual se pretende cambiar el sistema lineal y unidireccional, en el cual la energía se genera en pocos centros y se transporta y distribuye a centros de consumo, a un sistema descentralizado y multidireccional que apuesta por una generación distribuida para aportar flexibilidad y optimizar el uso de la energía segundo la generación de energía renovable. (9)

4. INTRODUCCIÓN

A continuación, se recopilan los aspectos más importantes de los compuestos que intervienen en el proceso.

4.1. Amoníaco

El amoníaco es uno de los productos químicos sintéticos con mayor producción a nivel mundial y una gran parte es elaborada a través de proceso catalítico originalmente diseñada por Fritz Haber y Carl Bosch, sin grandes cambios en el proceso a lo largo de los años. Actualmente, el proceso de síntesis sigue siendo prácticamente el mismo, con ligeras modificaciones. La reacción consiste en someter una mezcla de hidrógeno y nitrógeno sobre un catalizador de hierro a elevadas temperaturas en el rango de 400-500 °C, aunque originalmente se empleaban temperaturas superiores. El amoníaco de forma natural se encuentra en forma de sales de amonio, formadas a partir de la descomposición de materia orgánica con contenido en nitrógeno en áreas de actividad volcánica. (11)

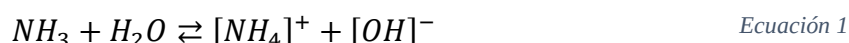
4.1.1. Propiedades físicas

El amoníaco es un compuesto inorgánico formado por tres átomos de hidrógeno y un átomo de nitrógeno y cuya fórmula se representa como NH_3 . La Estructura de Lewis de la molécula de amoníaco se puede ver en la Figura 1 junto con una representación de la estructura tridimensional, en la cual la esfera azul hace referencia al átomo de nitrógeno y las blancas a los átomos de hidrógeno, como se puede ver, forma una estructura piramidal según la teoría de repulsión de los electrones en la capa de valencia (TRECVC). Debido a la diferencia de electronegatividad entre el hidrógeno y el nitrógeno la molécula de amoníaco se considera que posee un momento dipolar considerable.



Figura 1. Estructura de Lewis (izquierda) y representación tridimensional (derecha) de la molécula de NH_3

A temperatura ambiente, el amoníaco es un gas incoloro, más ligero que el aire, altamente irritante con un olor sofocante y penetrante. En su forma pura se conoce como amoníaco anhídrido y se caracteriza por ser higroscópico, es decir, absorbe rápidamente la humedad. El amoníaco presenta propiedades alcalinas, por lo que puede neutralizar a los ácidos, al aumentar el pH del medio. El gas se puede disolver fácilmente en el agua formando un enlace covalente con un de los protones H^+ dando lugar al ion amonio (Ecuación 1). Esto se da puesto que la molécula de amoníaco y la de agua poseen la misma configuración electrónica y un ángulo de enlace muy similar. Sus disoluciones acuosas son corrosivas frente a metales de manera que se produce una reacción oxidación-reducción que provoca que el metal se destruya o se disuelva.



En su estado líquido, el amoníaco es un buen disolvente para numerosas sales junto con algunos metales y no metales de forma similar a como lo hace la molécula de agua. Las propiedades físicas más importantes del amoníaco se recogen en la Tabla 1.

Tabla 1. Propiedades del amoníaco (11) (12)

Propiedad	Valor	Unidades
Masa Molar	17,0312	g/mol
Densidad del líquido (a 0 °C, 101,3 kPa)	0,6386	g/cm ³
Densidad del gas (a 0 °C, 101,3 kPa)	0,7714	g/L
Calor de fusión (a 101,3 kPa)	332,3	kJ/kg
Presión de Vapor (Punto Triple)	6,077	kPa
Punto de Ebullición (a 101,3 kPa)	-33,43	°C
Calor de vaporización (a 101,3 kPa)	1370	kJ/kg
Temperatura de autoignición según DIN 51794	651	°C
Límites de Inflamabilidad		
Mezcla $NH_3 - O_2$ (a 20 °C, 101,3 kPa)	15 – 79	vol% NH_3
Mezcla NH_3 –aire (a 0 °C, 101,3 kPa)	16 – 27	vol% NH_3

4.1.2. Propiedades Químicas

Las soluciones acuosas de amoníaco funcionan como bases débiles, estando el equilibrio muy inclinado hacia el amoníaco. Además, puede ser oxidado por el oxígeno o el aire, en unas ciertas condiciones de reacción, a NO, NO₂, N₂O o a nitrógeno y agua. En fase gas, el amoníaco puede reaccionar violentamente, incluso de forma exclusiva, con óxidos de nitrógeno para formar nitrógeno, agua, nitratos amónicos y nitritos.

4.1.3. Aplicaciones

Anualmente, alrededor del 80% del amoníaco es empleado en la producción de fertilizantes, como urea o nitrato amónico o incluso aplicado directamente en el suelo.

Además, prácticamente la totalidad del nitrógeno empleado en la industria química procede del amoníaco directa o indirectamente. Puede ser empleado en la fabricación de plásticos, fibras o resinas, tras ser convertido a ácido nítrico. Otra importante aplicación es la producción de explosivos o intermediarios para la producción de distintos fármacos. La urea consume alrededor del 40% del amoníaco producido en el mundo. (11)

También puede ser utilizado para la eliminación de SO₂ en corrientes gaseosas formando un sulfato de amonio que puede ser a su vez empleado como fertilizante. Debido a su capacidad como disolvente, puede ser empleado en ciertos procesos como disolvente. Además, puede ser empleado como refrigerante, destacando en ahora por el detrimento de los CFCs. Algunos nuevos usos están siendo estudiados, destacando su uso como *carrier* de hidrógeno y, por lo tanto, de energía. (13)

4.2. Aire

El aire es una mezcla de gases que forma la atmósfera terrestre, los gases más importantes que forman parte de ella son nitrógeno y oxígeno (de forma aproximada, 79 % y 21 % respectivamente), sin tener en cuenta las cantidades de vapor de agua que puede haber, las cuales difieren dependiendo de la ubicación geográfica y la climatología. Se detalla la composición en la Tabla 2. Se trata de una materia prima natural renovable. Se puede observar que el tercer componente está presente con una composición menor al 1%, puesto que el N₂ y el O₂ suman más del 99%. Debido a que los demás compuestos presentes, se encuentran en una cantidad tan baja, no es estimada necesaria tenerlos en cuenta para un análisis a este nivel, por lo que tan solo se analizarán los componentes mayoritarios N₂ y O₂.

Tabla 2. Composición del aire seco en la atmósfera (11)

Componente	Concentración
Componentes Principales	
N ₂	78.09 %
O ₂	20.95 %
Ar	0.93 %
CO ₂	0.033 %
Otros componentes (concentración constante)	
Ne	18 ppm
He	5 ppm
Kr	1 ppm
Xe	0.09 ppm
CH ₄	1.5 ppm
CO	0.1 ppm
H ₂	0.5 ppm
N ₂ O	0.25 ppm
Otros componentes (concentración variable)	
	≤10 ppm (Estratosfera)
O ₃	5 – 50 ppb (Aire puro)
	≤500 ppb (Aire contaminado próximo a la superficie)
H ₂ S	0.2 ppb (superficie)

SO ₂	0.2 ppb (superficie)
NH ₃	6 ppb (superficie)
NO ₂	1 ppb (superficie)
	100 ppb (aire contaminado cerca de la superficie)
CH ₂ O	0 – 10 ppb

4.3. Nitrógeno

El nitrógeno es el elemento con el número atómico 7, forma una molécula diatómica estable conocida como dinitrógeno, nitrógeno molecular o simplemente nitrógeno. La configuración electrónica de este compuesto ya fue comentada en la descripción del amoníaco, presenta 5 electrones en la capa de valencia, de los cuales, 2 se encuentran en un orbital s y los otros 3 se encuentra en orbitales p con distintas direcciones espaciales, de forma que según la TRECIV se pueden formar hasta 3 enlaces simples de forma que se obtendría una estructura tetraédrica.

4.3.1. Propiedades Físicas

El nitrógeno presión atmosférica y temperatura ambiente se trata de un gas incoloro, inodoro y no combustible. Es diamagnético sea cual sea el estado de agregación. Es ligeramente soluble en líquidos, siendo especialmente importante su para la producción de algunos aceros.

Tabla 3. Propiedades del nitrógeno (11) (12)

Propiedad	Valor	Unidades
Masa molar	28,0134	
Calor de Fusión	25,8	kJ/kg
Punto de Ebullición (101,3 kPa)	77,35	K
Calor de Vaporización	199	kJ/kg
ρ (0 C, 101,3 kPa)	1,2505	g/L
Viscosidad Dinámica (0 C, 101,3 kPa)	$15,9 \cdot 10^{-6}$	Pa · s

4.3.2. Propiedades Químicas

El nitrógeno posee un al alto calor de disociación debido a que su triple enlace N-N es no polar y posee un mayor potencial de ionización comparado con otros triples enlaces, de esta forma la molécula N₂ es muy inerte. Una reacción muy importante es la que realiza con hidrógeno para formar amoníaco, como será desarrollado en esta memoria. También puede reaccionar con oxígeno, dando lugar al monóxido de nitrógeno que puede ser empleado para producir ácido nítrico. (11)

4.3.3. Aplicaciones

La mayor cantidad de nitrógeno es empleado en la producción de amoníaco. Además, puede ser empleado en la metalurgia como constituyente de algunas aleaciones

y para tratamientos térmicos. Aunque otro de sus principales usos es como inertizador tanto con industria química para controlar riesgos de explosividad como en la industria alimentaria para conservar los alimentos, gracias a que permite reducir la cantidad de oxígeno presente. También es utilizado en la industria alimentaria para la conservación en frío, gracias a la baja temperatura del nitrógeno líquido. (11)

4.4. Agua

El agua es la sustancia más abundante en la tierra y la tercera más abundante en el universo. Tiene una gran importancia en el desarrollo de la vida en el planeta Tierra. Tiene propiedades muy diferenciadas y sensibles a cambios en la temperatura y presión. Tiene numerosas aplicaciones en la industria puesto que puede ser empleado a diferentes temperaturas y presiones. (11) Se trata de una materia prima básica y renovable.

Tan solo una pequeña parte del agua presente en el mundo es agua dulce, y una gran parte se encuentra en estado sólido, por lo que no está disponible, dejando una pequeña parte del agua dulce disponible para su uso, lo que lo convierte en una materia prima que debe ser empleada de forma responsable.

4.4.1. Propiedades Físicas

La molécula de agua está formada por 2 átomos de hidrógeno unidos a uno de oxígeno mediante un enlace covalente. En la naturaleza se puede encontrar en forma sólida, líquida y gaseosa, debido a sus puntos de fusión (0°C) y ebullición(100°C), que se pueden ver en la Tabla 4.

Tabla 4. Propiedades del agua (11) (12)

Propiedad	Valor	Unidades
Masa molar	18,0153	
Densidad	1.00293	g/cm ³
Punto de fusión (101,3 kPa)	0	°C
Punto de ebullición (101,3 kPa)	1000	0°C
Conductividad Eléctrica	$1,228 \cdot 10^{-3}$	S/cm
Calor latente de fusión	0,334	kJ/g
Calor latente de vaporización	2,23	kJ/g
Calor específico medio del líquido	4,18	kJ/g °C
Viscosidad Dinámica	$15,9 \cdot 10^{-6}$	Pa · s

4.4.2. Propiedades químicas

En muchas reacciones de combustión se genera agua siempre que esté presente un compuesto que contenga hidrógeno. También puede reaccionar, violentamente en algunos casos, con algunos metales alcalinos y alcalino térreos para producir el hidróxido y liberando hidrógeno. Mediante un proceso de electrólisis se puede romper la molécula de agua en fase líquida a una molécula de hidrógeno y media de oxígeno en fase gas.

4.4.3. Aplicaciones

El agua en la industria es ampliamente utilizada tanto como refrigerante, al ser usada en estado líquido, como elemento calefactor, al ser usada como vapor, principalmente debido a su bajo coste y posible obtención directa de la naturaleza. Además, el agua puede ser empleada, como será descrito en este documento, para la obtención de hidrógeno a partir de hidrólisis.

4.5. Hidrógeno

El hidrógeno se corresponde con el elemento químico con número 1, es decir, el que tiene menor peso atómico de todos los átomos, se representa con el símbolo H y forma una molécula diatómica que se llama de la misma forma y se simboliza como H₂.

Se trata del elemento más común en el universo, constituyendo aproximadamente el 75% de la materia visible. El hidrógeno verde hace referencia a la producción de hidrógeno a partir de fuentes renovables, en el caso de estudio se empleará energía renovable a través de una electrólisis.

4.5.1. Propiedades físicas

El hidrógeno se trata de un gas incoloro, no tóxico, inodoro e insípido. La densidad energética de 1 kg de hidrógeno equivale a 2,75 kg de gasolina, mientras que la de 1 m³ de hidrógeno equivale a 0,27 m³ de gasolina.

El hidrógeno es ligeramente soluble en líquidos, aunque su solubilidad se incrementa con la temperatura. Los electrolitos disminuyen la solubilidad en agua debido al efecto de las sales. El hidrógeno es el elemento con la mayor capacidad de difusión. Las propiedades más relevantes se recogen en la Tabla 5.

Tabla 5. Propiedades del hidrógeno (11) (12)

Propiedad	Valor	Unidades
Masa Molar	2,0159	g/mol
Densidad (vapor)	0,13	kg/m3
Punto de ebullición (a 101,3 kPa)	20,369	K
Calor de vaporización	904,6	J/mol
Límites de inflamabilidad en aire		
Inferior	4	%
Superior	75	%
Límites de inflamabilidad en oxígeno		
Inferior	4,65	%
Superior	93,9	%
Propiedades de la IUPAC STP (273,15 K, 100 kPa)		
Calor específico, Cp	20,301	J/mol K
Viscosidad	8,3969·10 ⁻³	mPa · s
Densidad	0,08871	kg/m3

4.5.2. Propiedades químicas

El hidrógeno no es excepcionalmente reactivo, aunque los átomos reaccionan con otros átomos de hidrógeno y con otros elementos excepto con los gases nobles. El hidrógeno oxida a los elementos menos electropositivos y reduce a los más electronegativos. La fuerza del enlace covalente entre el hidrógeno con otros elementos depende de la electronegatividad y el tamaño del elemento.

Con el oxígeno se produce una combustión produciendo 286,02 kJ/mol. Para estas reacciones es necesaria añadir una energía térmica para iniciar la combustión (energía de ignición).

4.5.3. Aplicaciones

El hidrógeno es ampliamente utilizado en la hidrogenación y reducción en petroquímica, incrementando el contenido en hidrógeno en el crudo pesado obtenido fracciones más ligeras. También tiene un papel importante en la producción de amoníaco.

En metalurgia se usa para reducir el hierro mineral y en otros procesos de metalurgia como la producción de metalurgia en polvo. También es utilizado el hidrógeno, en una combustión estequiométrica de con oxígeno para obtener temperaturas en el rango de 3000 a 3500 K.

Se puede usar el hidrógeno como *carrier* energético, de forma que se pueda aprovechar la energía producida por las energías renovables para la producción de hidrógeno y utilizar este hidrógeno en la producción de energía en momentos de menor producción de energías renovables.

5. ANÁLISIS DE MERCADO

El amoníaco es uno de los productos químicos sintéticos con mayor producción en el mundo y una gran cantidad de esta es empleada en la producción de fertilizantes. La producción mundial actual es de 191 millones de toneladas al año de las cuales menos del 10% son vendidos fuera de sus respectivos países de producción. (14)

Existe una gran capacidad de producción en el mundo, superior a la actual demanda gracias a la gran expansión e inversión en los años 2011 a 2015. La capacidad de producción actual según la proveedora de información IHS Markit (14) es de aproximadamente 230 millones de toneladas de NH_3 anuales, y se puede observar que los parámetros de la página Statista (15) concuerdan con estos valores, como se ve en la Figura 2.

También se puede observar en la Figura 2 que la capacidad de producción mundial se mantendría en crecimiento a lo largo de la década, alcanzando casi 290 millones de toneladas en 2030. En base a esto, se puede decir que se trata de una industria con una gran esperanza de crecimiento en los próximos años.

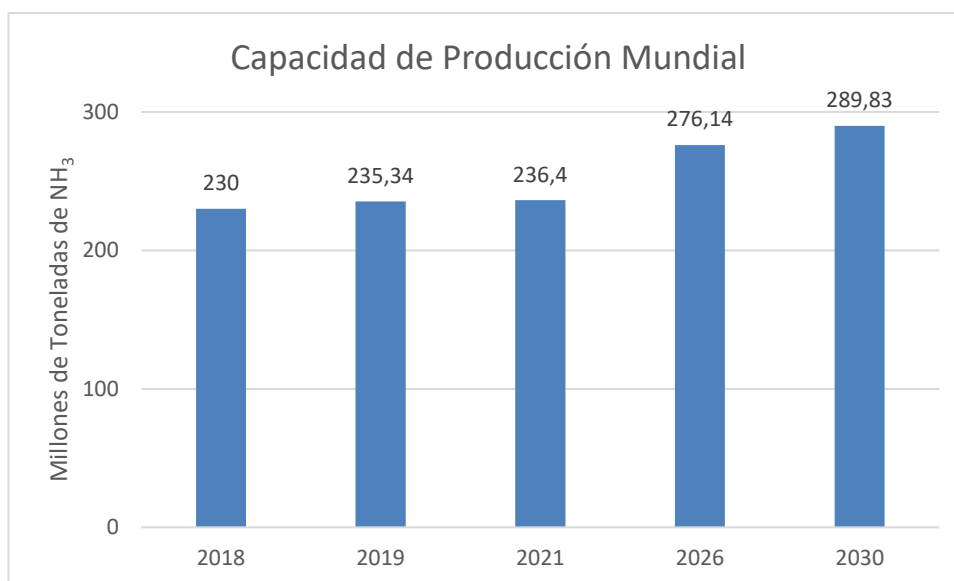


Figura 2. Capacidad de producción mundial de amoníaco. Elaboración propia en base a datos de Statista (15)

Además, se espera que el mercado mundial de amoníaco verde crezca desde los 16 millones de dólares en 2021 hasta 5.415 millones en 2030, con una CAGR (tasa de crecimiento anual compuesta) del 90,2% en este período. (16)

Debido a que una gran parte de la producción de amoníaco se realiza a partir de gas de síntesis, y este está aumentando su precio (Figura 3), el precio del amoníaco y sus derivados, en este caso representados por la urea, está subiendo. Se observa en la Figura 3 que el precio de la urea (línea amarilla) y el amoníaco (línea violeta) es muy similar a lo largo del tiempo y que estos, a su vez, siguen la tendencia, con un tiempo de retraso, de los precios del gas de síntesis (línea azul).

El gas de síntesis ha aumentado su precio debido las crisis actuales, como son la crisis del coronavirus y la invasión rusa en Ucrania, y a circunstancias geopolíticas. Pese a esto, las variaciones son similares a lo largo del mundo.

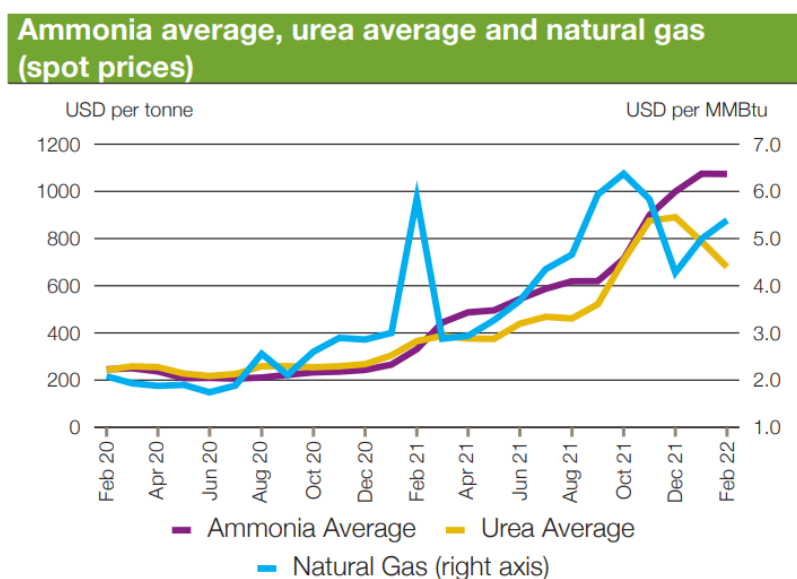


Figura 3. Precios promedio de amoníaco, urea y gas natural desde 2020. Fuente: AMIS (17)

Documento I. Memoria
Plata de producción de amoníaco verde

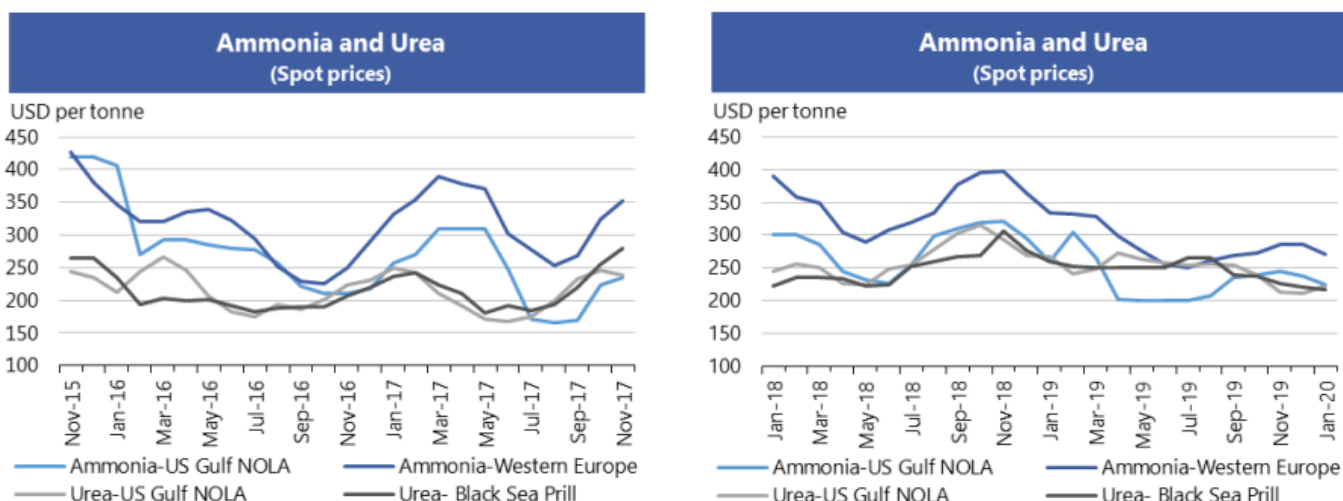


Figura 4. Evolución del precio del amoníaco desde noviembre de 2015 hasta la enero 2020. Fuente: AMIS (16)

Se observa que, en años anteriores a las crisis actuales, el precio del amoníaco se mantenía estable desde hacía tiempo, fluctuando entre los 450 y 150 \$/tonelada, como se puede observar en la Figura 4 para los años 2018 y 2019 (derecha), y para los años 2016 y 2017 (derecha). En ambos casos también se comparan dos regiones (Europa del Este y la Costa del Golfo de EEUU) y se contrastan con los precios de la urea.

Los mayores productores de amoníaco en el mundo son China, Rusia, India y Estados Unidos, destacando entre ellos China que ha llegado a quintuplicar la producción de cada uno de estos países en los últimos años. La mayor parte de los países productores tienen un ligero crecimiento a lo largo de los años, mientras que China ha crecido en mucha mayor medida, como se puede apreciar en la Figura 5, en la cual se presenta la lista de los mayores productores en la leyenda.

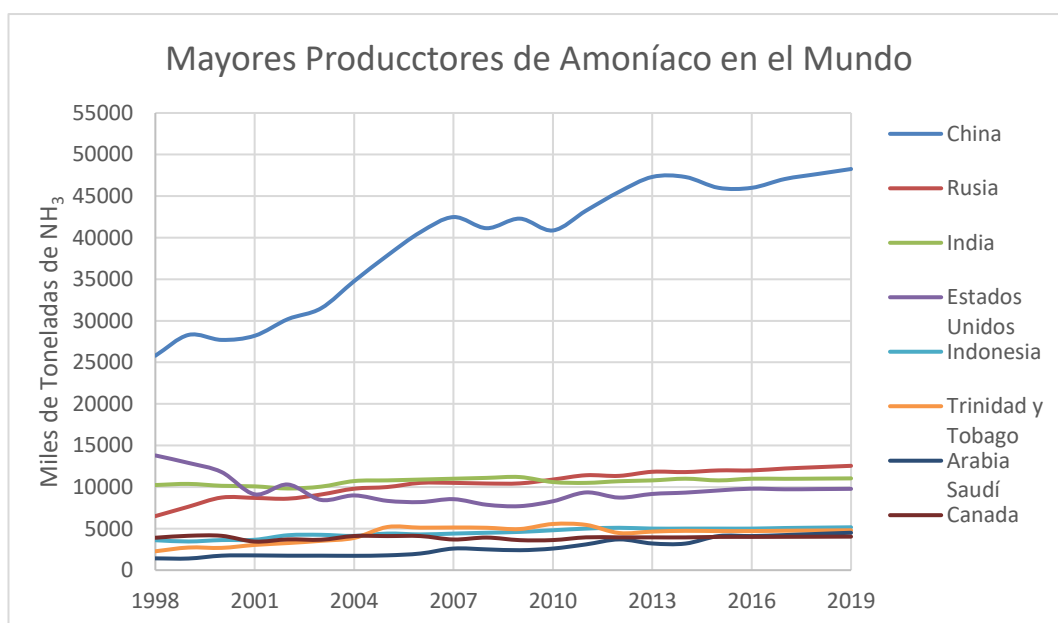


Figura 5. Mayores productores de amoníaco en el mundo. Elaboración Propia. Fuente: NationMaster (18)

Los países con mayor volumen de negocio en exportaciones en el año 2019 fueron Arabia Saudita, Rusia y Trinidad y Tobago, con un 26%, 17,6% y 14,6% del total exportado a nivel mundial contabilizado como el valor económico intercambiado en dólares, con un valor total de 6,86 miles de millones de dólares. Dentro de Europa cabe destacar como exportadores a Países Bajos (2,17%), Alemania (1,50%) y Reino Unido (1,08%). (19) Por otro lado, los principales importadores son India, Estados Unidos y Brasil, que representan el 18,6%, 11,1% y 5,32%, respectivamente, también del total de 6,86 miles de millones de dólares.

En la Unión Europea los mayores importadores son Bélgica (4,30%), Francia (2,38%) y Alemania (2,67%), que a pesar de ser uno de los miembros europeos que más exporta, es principalmente un importador. Cabe destacar también a España como importador representando el 1,68%, mientras que como exportador sólo representa el 0,37% del total. (19)

Si se tiene en cuenta el valor del amoníaco a lo largo del 2019, a partir de la , se puede estimar un precio medio de 275 \$/tonelada, lo que hace un total de 25 millones de toneladas de amoníaco aproximadamente. Esta cantidad sería una pequeña parte (algo más de un 10%) del total producido en el año 2019 según IHS Markit. En este proveedor de información se afirmaba que menos de un 10% era dedicado al comercio exterior, y puesto que el precio utilizado para la aproximación realizada ha sido un valor promedio, todas las fuentes de información indican los mismos valores. (14)

España exporta, principalmente a Portugal, una cantidad equivalente a 25,5 millones de dólares e importa por un valor de 112 millones de dólares en su mayoría de Argelia. (19) Debido a que el balance de exportaciones e importaciones no es beneficioso para el territorio y que las importaciones vienen de un país con grandes reservas de gas natural sería adecuado aumentar la producción tratando de diferenciarse de la vía convencional. Puesto que en Europa se trata de avanzar hacia una industria con menor producción de gases de efecto invernadero, la planta a diseñar cumpliría con esos requisitos, de forma que los beneficios serán numerosos: menores costes de materia prima y menor dependencia con el comercio exterior, menor producción de gases de efecto invernadero y menor necesidad de importaciones.

Las empresas con mayor producción de amoníaco en el mundo son las mencionadas en la Tabla 6 destacando Yara Internacional como la compañía con mayor producción en el mundo y la cual comercializa cerca de un tercio del amoníaco en el mundo. (20)

Tabla 6. Compañías con mayor producción de amoníaco en el mundo. (21)

Compañía	Ubicación
Yara International ASA	Oslo, Noruega
BASF SE	Ludwigshafen, Alemania
CF Industries Holdings, Inc.	Illinois, EEUU
Nutrien Ltd.	Saskatoon, Canadá
SABIC	Riyadh, Arabia Saudí
Qatar Petroleum	Doha, Qatar
EuroChem Group	Zug, Suiza

Koch Fertilizer, LLC	Kansas, EEUU
Praxair Technology, Inc.	Connecticut, EEUU
China National Petroleum Corporation	Beijing, China
Rashtriya Chemical and Fertilizers Limited (RCFL)	Mumbai, India

Por otro lado, algunos de los actores clave que operan en el mercado de amoníaco verde son Siemens (Alemania), NEL Hydrogen (Noruega), ITM Power (Reino Unido), McPhy Energy (Francia), ThyssenKrupp (Alemania) y Haldor Topsoe (Dinamarca), entre otros. (22)

5.1. Usos del amoníaco

El amoníaco es empleado principalmente en la producción de fertilizantes para la agricultura, alcanzando un 80% de su uso como se puede observar en la Figura 6 elaborada a partir de los datos del proveedor de información Mordor Intelligence (23). Se puede observar que su segundo mayor uso, sería el farmacéutico y la minería, en esta última representando la producción de explosivos. Su uso en agricultura ha aumentado en los últimos años, dando lugar a que actualmente el crecimiento en esta rama se esté ralentizando en la actualidad, en parte debido a las crisis actuales. (23) (21)

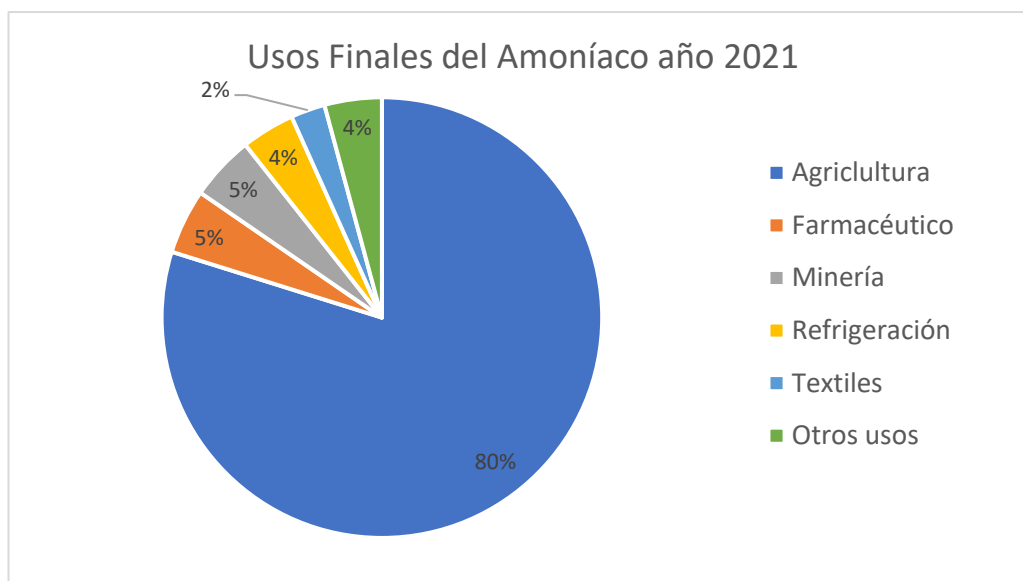


Figura 6. Usos finales del amoníaco según el volumen de mercado en el año 2021. Elaboración propia a partir de datos de Mordor Intelligence. (23)

5.1.1. 4.2.1. Amoníaco para fertilizantes

En España destaca la empresa Fertiberia en la producción de amoníaco, a partir del cual produce fertilizantes y demás derivados, como ácido nítrico o urea. Además, aunque en menor medida, también distribuye amoníaco con otras aplicaciones industriales. Esta empresa tiene 2 centros de producción en los cuales se producen un total de 600.000 toneladas/año, localizadas en Puertollano y en Palos de la Frontera. Además, tiene otro centro con una producción de 570.000 toneladas/año en Ile-et-Vilaine, Francia. (20)

Según datos del Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación, los fertilizantes más empleados son los nitrogenados, derivados del amoníaco siendo empleados en su

Documento I. Memoria
Plata de producción de amoníaco verde

mayor cantidad en Castilla y León y Andalucía, destacando también Aragón y Castilla la Mancha (Tabla 7). En menor medida, siendo sus totales en todo el estado inferiores a la mitad del tonelaje de los fertilizantes nitrogenados, se emplean los fertilizantes fosfatados y potásicos. (24)

En el informe elaborado por el Ministerio de Agricultura sobre el año 2020 (24) los datos de producción nacional de fertilizantes nitrogenados eran de cerca de 2,15 millones de toneladas, mientras que el consumo era de aproximadamente 2,5 millones de toneladas, lo cual generaba una necesidad de importaciones para suplir la demanda nacional, sin tener en cuenta que una parte de los fertilizantes producidos son exportados (algo más de 1 millón de toneladas) dando lugar a que las importaciones sean de casi 2 millones de toneladas, casi tanto como la producción nacional

Tabla 7. Fertilizantes inorgánicos (en toneladas) con destino al consumo agrícola por comunidades autónomas (Enero 2020-Diciembre 2020). Elaboración propia a partir de datos del Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación. (24)

	NITROGENADOS	FOSFATADOS	POTÁSICOS
	N	P ₂ O ₅	K ₂ O
GALICIA	25.034	10.951	7.196
PRINCIPADO DE ASTURIAS	3.854	1.986	3.133
CANTABRIA	14.757	5.518	2.778
PAÍS VASCO	18.133	5.023	7.463
NAVARRA	28.634	20.644	7.177
LA RIOJA	21.710	3.837	3.091
ARAGÓN	140.442	65.870	32.513
CATALUÑA	49.488	24.189	37.937
BALEARES	2.693	615	724
CASTILLA LEÓN	249.493	115.762	76.123
MADRID	16.236	19.940	9.380
CASTILLA LA MANCHA	82.280	46.744	27.213
COMUNIDAD VALENCIANA	76.686	34.694	39.169
MURCIA	33.614	21.808	17.957
EXTREMADURA	48.439	16.780	24.737
ANDALUCÍA	242.524	91.341	99.627
CANARIAS	5.282	971	3.271
TOTAL ESPAÑA	1.059.299	486.673	399.489

Cabe destacar además el Grupo Fertiberia, con Fertiberia como compañía líder, cuya actividad se centra principalmente en la producción de fertilizantes, así como de amoníaco y derivados. En la Figura 7, se presenta la localización de sus centros de producción en la península. (25) (26)



Figura 7. Centros de producción del Grupo Fertiberia (25)

5.1.2. 4.2.2. Otros usos

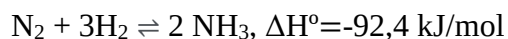
Aparte de la industria de fertilizantes, el amoníaco también es muy importante en otras aplicaciones industriales como se mencionó anteriormente, por lo que también existe mercado en industria de disolventes para la eliminación de pinturas; industria metalúrgica; industria de adhesivos, sellantes, gomas y látex; industria farmacéutica, cosmética y de detergentes; industria de papel, para el tratamiento de la pulpa de papel y de la madera; industria textil; industria dedicada a la fabricación de productos de limpieza; industria de polímeros (nylon, poliuretano, resinas, metacrilato de metilo a partir de caprolactama); y empresas dedicadas a refrigeración, climatización y frío industrial. (27) (28)

En España, destaca la empresa Ercros como productora de amoníaco con fines distintos a la producción de fertilizantes, como derivados del cloro, química intermedia y farmacia. En concreto, en la fábrica de Sabiñánigo, Huesca, se produce agua oxigenada, amoníaco, carbonato potásico, clorato y clorito sódico, y cloro entre otros, siendo la capacidad de producción de 200.000 t/año. En esta planta se produce tanto amoníaco anhidro como disoluciones amoniacaes al 25%, que son transportados en cisternas de 23 y 25 toneladas respectivamente. (28)

El proceso de producción de Ercros se basa en el aprovechamiento del hidrógeno que se obtiene como subproducto de la electrólisis de cloro-potasa y clorato sódico, por lo que no depende de combustibles fósiles para la fabricación de amoníaco. Actualmente, esta planta posee una capacidad de producción 12.500 t/año de amoníaco destinado a la industria química. (28) (29)

6. ESTUDIO DE ALTERNATIVAS

El amoníaco se obtiene mediante la reacción química de hidrógeno y nitrógeno, la cual a temperatura y presión estándar no es espontánea. Para poder producir amoníaco a escala industrial, son necesarias elevadas temperaturas y presión en presencia de un catalizador metálico. Dicha reacción (Ecuación 2), se caracteriza por ser exotérmica, con una entalpía de reacción de -46,2 kJ/mol de NH₃. (30)



Ecuación 2

Las diferentes alternativas difieren principalmente en el proceso de obtención de hidrógeno, siendo las materias primas más empleadas el gas natural y el petróleo. Se estima que en torno a un 48% se emplea gas natural como materia prima, mientras que el petróleo representa un 30%, el carbón, un 18% y el agua el 4% restante.

A continuación, se presentan los aspectos más relevantes de las diversas alternativas existentes que, a pesar de ser diferentes, presentan una serie de etapas comunes: purificación de la alimentación, producción, purificación y compresión del gas de síntesis y finalmente el lazo correspondiente a la síntesis de amoníaco. (30)

6.1. Síntesis convencional de amoníaco

6.1.1. Reformado con vapor

En España, el reformado con vapor de gas natural o hidrocarburos ligeros es la alternativa más empleada para la obtención de hidrógeno. Este proceso consta de una serie de etapas: la desulfuración de gas natural, el reformado, la purificación y la compresión y síntesis de amoníaco. (4) Mediante la desulfuración de gas natural se pretende reducir la concentración de azufre presente, para evitar el envenenamiento del catalizador de níquel. (4) (30) Una vez eliminado el azufre de la corriente de alimentación se procede con el reformado, que consta de dos reformadores: el reformador primario, donde se genera el gas de síntesis (CO e H₂), y el reformador secundario, donde se completa la conversión de metano y se añade el aire comprimido precalentado, que aporta el nitrógeno necesario para que la reacción tenga lugar. En la Figura 8, se presenta un esquema simplificado del proceso anteriormente descrito. (4) (32)

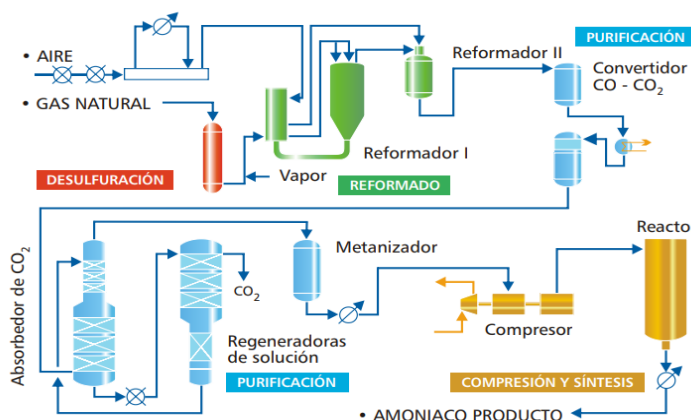


Figura 8. Esquema simplificado del proceso de producción de amoníaco (12)

6.1.2. Oxidación parcial de hidrocarburos

La oxidación parcial de hidrocarburos es la segunda alternativa más empleada que consiste en obtener gas de síntesis a partir de los hidrocarburos a temperaturas elevadas y en presencia de una cantidad de oxígeno restringida. La oxidación parcial es un proceso complejo, por lo que es necesario tener en cuenta algunos aspectos como la naturaleza del catalizador y las condiciones de reacción que pueden afectar al mecanismo de reacción. (33)

Esta alternativa permite reducir los costes asociados al aporte energético y el coste de capital, puesto que los materiales de construcción exigen menores especificaciones. Sin embargo, todavía es necesario seguir desarrollando el diseño de catalizador para equilibrar la actividad, la durabilidad, efectividad y el coste de este. (33)

6.1.3. Gasificación de carbón

La producción de amoníaco a partir de carbón es la alternativa más empleada en China. En este caso, el gas de síntesis es obtenido mediante la gasificación de carbón. En primer lugar, se acondiciona el carbón que a continuación es introducido en un gasificador donde el carbón se transforma en H_2 , CO, CO_2 (gas de síntesis) y metano. Una vez gasificado el carbón, es necesario eliminar las partículas del gas de síntesis. Para ello se emplea la unidad SGS (Sour Gas Shift), en la cual se inyecta vapor de agua, y se emplea un catalizador apto para ambientes sulfurosos. El vapor de agua reacciona con el CO dando lugar a CO_2 e H_2 , por lo que se consigue reducir la presencia de CO. (34) (35)

Tras disminuir la concentración de CO, el gas se alimenta a una unidad destinada a la eliminación de gases ácidos (AGRU, Acid Gas Removal Unit), donde se emplea una disolución de metanol para eliminar el CO_2 y el azufre presente en el gas de síntesis. El CO_2 extraído se puede alimentar a una planta de urea, mientras que el azufre es introducido a una unidad de recuperación de azufre (SRU). (34)

6.1.4. Ciclo convencional de síntesis Haber-Bosch

El ciclo de síntesis de amoníaco suele constar de un reactor o serie de reactores para la síntesis de amoníaco, intercambiadores de calor para condensar el amoníaco y recuperar calor, separadores para recuperar el amoníaco del gas sin reaccionar, unidades de precalentamiento integradas con otras unidades de recuperación de calor para calentar el gas de entrada al reactor, y una purga para evitar la acumulación de inertes como metano y argón presentes en el gas de síntesis. Además, son necesarios compresores en la corriente de recirculación para comprimir el gas que no ha reaccionado y que se ha de reintroducir en el convertidor. (30)

El gas reaccionante, formado principalmente por H_2 y N_2 , se comprime a elevadas presiones antes de ser alimentado al reactor. Normalmente, en las plantas modernas se emplean compresores centrífugos para presurizar el gas entre 150 y 250 bares, puesto que son fácilmente escalables y más económicos. En el reactor de síntesis de amoníaco sólo se logra una conversión de entre el 20 y el 35% por paso debido a las limitaciones termodinámicas y de equilibrio cinético. A continuación, el amoníaco se separa del gas

sin reaccionar por condensación y el gas no reaccionado se recicla, se comprime y se alimenta de nuevo al convertidor junto a gas de síntesis fresco. Para evitar la acumulación de inertes en el ciclo de síntesis, es necesario introducir una corriente de purga, lo cual provoca una dilución progresiva del gas de síntesis. La mejor opción es purgar a la concentración de inerte más alta, el contenido de amoníaco más bajo y a la más baja presión. (30) (36) (37)

En función de la composición y pureza del gas reaccionante, existen diferentes configuraciones que difieren principalmente en la localización de la etapa de condensación del amoníaco y que se presentan en la Figura 9. (37)

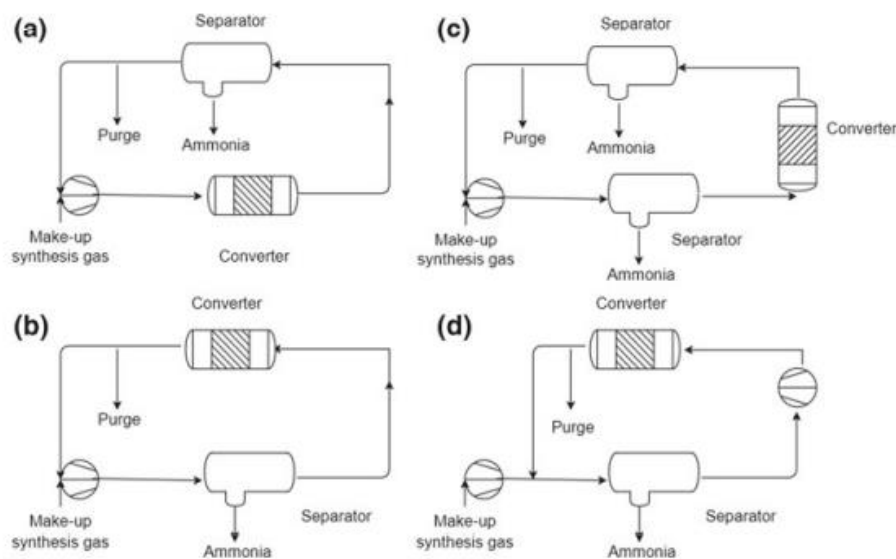


Figura 9. Configuraciones para la síntesis de amoníaco (37)

La configuración (a) se debe emplear cuando el gas de síntesis está libre de compuestos que pueden afectar al catalizador como el agua y el dióxido de carbono. Con esta configuración, el gas de síntesis tras ser purificado mediante deshidratación con tamices moleculares para secar el gas y lavado con nitrógeno para retirar el dióxido de carbono, es introducido en el reactor, y a continuación se condensa. El gas sin reaccionar se recicla hasta un compresor, siendo purgada parte de esta corriente antes de entrar al compresor. Esta configuración es la más ventajosa dado que se consigue la concentración más baja de amoníaco a la entrada del reactor (amoníaco no recuperado en la etapa de separación que es recirculado con el gas de síntesis no reaccionado), por lo que el equilibrio se encontrará más desplazado hacia el producto (NH_3). Por otro lado, garantiza la concentración más alta de amoníaco para la condensación y se purga cuando la concentración de inertes es más baja. Cabe destacar que esta opción también consigue ahorrar energía en la compresión, ya que el amoníaco es separado previamente. (36)

En caso de que el gas de síntesis no sea muy puro es posible emplear las configuraciones (b) y (d) para reducir la concentración de inertes a la entrada del reactor. En este caso, se realiza la separación previamente a la etapa de reacción, de manera que esto permite separar el CO_2 y agua residual en el amoníaco líquido, aunque esto provoque

una dilución de la mezcla a separar. Además, presenta como otros inconvenientes una menor eficiencia energética, puesto que se necesita mayor energía en el compresor al no realizar la separación después del reactor; y una pérdida de amoníaco mayor. Sin embargo, permite ahorrar la purificación del gas de síntesis necesaria en la configuración anterior. (37)

La configuración (c) es similar a la configuración (b), sólo que en este caso se emplean dos separadores, uno previo y otro posterior al reactor. De esta manera se consigue purgar a una concentración de impuros más elevada, ya que se separa previamente el amoníaco reaccionado, por lo que se pierde menor cantidad de producto. También permite reducir los costes de energía asociados al compresor. Sin embargo, emplea una mayor cantidad de equipos, lo que encarece el coste de la inversión. (37)

6.2. Síntesis de amoníaco verde y selección de tecnologías

En este apartado se presentan las diversas alternativas existentes para la producción de hidrógeno verde y de nitrógeno, así como se justifican las tecnologías escogidas.

6.2.1. Tecnología para la producción de hidrógeno verde

Actualmente existen dos fuentes renovables para la obtención de hidrógeno verde: la biomasa y el agua.

6.2.1.1. Procesado de biomasa

La biomasa se considera como una fuente competitiva para la producción de energía y de productos químicos. La forma mediante la cual se obtiene el hidrógeno a partir de esta permite diferenciar dos grupos: procesos biológicos y procesos térmicos.

a) Procesos biológicos

Dentro de los procesos biológicos se pueden distinguir tres alternativas: la biofotólisis, la fotofermentación y la fermentación oscura. (38)

- **Biofotólisis**

Este proceso consiste en la producción de hidrógeno mediante la hidrólisis de agua por fotosíntesis gracias a microorganismos autótrofos fotosintéticos. (38)

La biofotólisis indirecta resulta de gran interés como captador de emisiones de CO₂, ya que permite convertir un contaminante en una fuente de energía. Sin embargo, al igual que la biofotólisis directa, necesita reactores de gran superficie. Además, todavía no representa una solución a escala industrial.

La biofotólisis todavía no es competitiva frente a la vía fermentativa debido a su bajo rendimiento y grandes necesidades de área, mientras que es foco de estudio en los procesos biológicos, puesto que ofrece una mayor versatilidad en cuanto a las materias primas que requiere. (38)

- **Fotofermentación**

En este proceso se utilizan bacterias púrpuras no sulfurosas *Rhodospseudomonas* y *Rhodobacter*, microorganismos heterótrofos, cuya fuente de electrones procede del carbono de ácidos grasos orgánicos, recurso presente en muchas corrientes residuales. Para transformar dicha materia orgánica en hidrógeno se emplea la luz solar como catalizador del metabolismo. Al igual que la biofotólisis, los reactores requieren grandes superficies para aprovechar lo máximo posible la luz solar y no se suele usar el proceso sólo, sino que su interés radica en su aplicación como una segunda etapa tras la fermentación oscura. (38)

- **Fermentación oscura**

Esta alternativa es la más utilizada dado que permite transformar una gran variedad de sustratos como azúcares, residuos alimenticios, lignocelulósicos en hidrógeno, por lo que constituye un factor clave para la transición hacia una economía circular, permitiendo la revalorización de residuos. Aparte de presentar una gran versatilidad de sustrato es la alternativa biológica que mayor productividad ofrece.

Teóricamente a partir de 1 mol de glucosa es posible obtener 12 moles de hidrógeno, sin embargo, a nivel microbiológico el hidrógeno representa un subproducto de la fermentación de materia orgánica que da lugar a diferentes ácidos grasos como el ácido acético, butírico o propiónico. Por eso, para conseguir un mayor rendimiento, lo ideal sería llevar a cabo en primer lugar una fermentación oscura en la que se obtendría ácidos grasos e hidrógeno, seguida de una fotofermentación en la cual se consumirían los ácidos grasos, dando así lugar a hidrógeno. (38)

- **Consideraciones**

Las alternativas biológicas constituyen una vía importante para la valorización de residuos y alcanzar una economía circular, así como para la recuperación CO₂. Sin embargo, actualmente todavía no han sido llevadas a escala industrial, siendo relevadas a escala piloto. Entre sus principales limitaciones se encuentran: (38)

- Lenta velocidad de producción en comparación con fuentes renovables
- Muy bajo volumen de producción de biohidrógeno, especialmente en la biofotólisis
- Elevado coste de producción

Algunos estudios acerca de la viabilidad económica sobre la fermentación oscura estiman que la producción de hidrógeno puede superar los 50 \$/kg H₂, mientras que mediante el reformado de metano supone entre 1-2\$/kg H₂ y la electrólisis del agua entre 4-6\$/kg, por tanto, las alternativas para la producción de hidrógeno mediante procesos biológicos de biomasa han sido descartadas. (39) (40)

b) Procesos térmicos

Dentro de los procesos térmicos de biomasa existen diferentes métodos: gasificación, pirólisis, combustión, los cuales difieren principalmente en la cantidad de oxígeno que está presente en el proceso. La pirólisis se realiza en ausencia de oxígeno,

mientras que la combustión requiere la presencia de este, y la gasificación permite la presencia de oxígeno, pero en niveles restringidos. (33)

En concreto, los procesos más empleados para la producción de hidrógeno verde son la gasificación, la pirólisis y el reformado. (41)

- **Gasificación de biomasa**

La gasificación de biomasa es la alternativa que mejores rendimientos presenta entre los procesos térmicos de biomasa para la producción de hidrógeno. Puede emplear como materia prima fuentes muy diversas como residuos agrícolas, forestales, cultivos especiales y la fracción orgánica de los residuos urbanos municipales entre otros. Si el CO₂ que emite durante el proceso es capturado, el hidrógeno producido también se considera verde. Las etapas más importantes de la gasificación son: precalentamiento hasta 100°C para evaporar el agua de la biomasa, una etapa de pirólisis, y finalmente gasificación de la fracción carbonosa al entrar en contacto con el agente gasificante (aire, oxígeno o vapor de agua).

Los principales inconvenientes de esta alternativa son la formación de las cenizas y del alquitrán, los elevados costes de inversión debido al elevado número de equipos necesarios, la necesidad de aprovisionamiento de la materia prima, los costes asociados a la producción de oxígeno y la separación de hidrógeno del resto de productos. Además, como se ha mencionado para que el hidrógeno producido se considere verde requiere de sistemas de captura de CO₂. (42) (43) (44)

- **Pirólisis de biometano**

El biogás está compuesto principalmente por metano y dióxido de carbono y procede de la descomposición biológica en ausencia de oxígeno de residuos ganaderos y agroindustriales, los lodos de depuradoras y la fracción orgánica de residuos sólidos urbanos (RSU). A partir de la depuración de este es posible obtener un gas más rico en metano (biometano), normalmente con un porcentaje mayor al 96%, que mediante pirólisis da lugar a hidrógeno gaseoso. (42)

La pirólisis tiene lugar en ausencia de oxígeno y dado que no emplea ningún agente oxidante como el agua que contiene oxígeno en su estructura no produce óxidos de carbono como el CO₂ o el CO. El biometano se debe inyectar a un reactor de borboteo y a continuación se descompone en la fase líquida. Este proceso presenta como inconveniente la formación de carbón sólido dentro del reactor que afecta a la hidrodinámica de este, además de bloquear los poros del catalizador. Sin embargo, esto se puede remediar si se emplean metales estables a muy altas temperaturas. El carbón producido al ser menos denso flotaría en la superficie del líquido fundido, de forma que así se favorece la separación del carbón, el cual se puede recuperar, y además se evita el contacto con el líquido catalítico. (43)

Por otro lado, la energía necesaria para la reacción puede ser eléctrica procedente de fuentes renovables en vez de térmica. Sin embargo, cabe destacar que estas tecnologías todavía están en desarrollo, por lo que no están implantadas a escala industrial. (43)

- **Consideraciones**

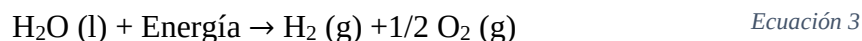
Frente a los procesos asociados a los combustibles fósiles, la combustión de biomasa se considera neutra en emisiones de CO₂, puesto que el CO₂ emitido es el mismo que ha sido fijado por las plantas mediante la fotosíntesis. (31)

Una de las principales controversias de la biomasa es la utilización de cultivos comestibles para la producción de energía, puesto que los biocombustibles más importantes como el bioetanol es producido principalmente por fermentación de maíz, cebada, avena o caña de azúcar. La utilización de este tipo de cultivos para fines energéticos provoca una competición de precios entre la industria alimentaria y la energética, lo que provoca un aumento de precios en los alimentos, dificultando así la adquisición de comestibles, especialmente en país en vías de desarrollo. Por tanto, esta alternativa sólo se contemplaría como una solución a la gestión de residuos agrícolas, lignocelulósicos, restos orgánicos, etc, que no se consideren como una fuente de alimento.

6.2.1.2.Descomposición del agua

- **Electrólisis de agua**

La electrólisis del agua consiste en la ruptura del enlace entre los hidrógenos y el oxígeno gracias a la aplicación de voltaje y corriente continua al agua que provocan que estos se liberen en estado gaseoso tal y como se muestra en la Ecuación 3. En este proceso, la energía eléctrica es esencial para que se lleven a cabo las reacciones químicas que provocan la rotura molecular del agua. Si la electricidad se genera mediante energías renovables como la eólica, solar, etc, entonces, dado que no se producen emisiones de CO₂ en el proceso, el hidrógeno obtenido se clasifica como hidrógeno verde. (43)



Los dispositivos que permiten convertir la energía eléctrica en energía química se conocen como electrolizadores. Actualmente, existen tres tipos de electrolizadores que se pueden clasificar en base al electrolito empleado en la celda de electrólisis: electrolizadores alcalinos (AWE), electrolizadores de membrana polimérica (PEM) y electrolizadores de alta temperatura (SOEC) donde el electrolito empleado es un óxido sólido. (45)

Cabe destacar que estos electrolizadores requieren de agua desionizada, que puede proceder de masas superficiales de agua dulce o salada. Actualmente todavía están en desarrollo los electrolizadores de agua de mar, que presentan la gran ventaja de ahorrar los costes de desalinización en caso de emplear agua procedente de mares u océanos (plataformas offshore). (45)

En la Tabla 8, se recogen las reacciones químicas y el rango de temperatura en el que operan los distintos electrolizadores. (45)

Tabla 8. Reacciones químicas y rango de operación de temperatura de diferentes electrolizadores de agua (45)

Tecnología de electrólisis	Electrólisis alcalina (AWE)	Electrólisis de membrana (PEM)	Electrólisis de alta temperatura (SOEC)
Reacción en el ánodo	$2 \text{ OH}^- \rightarrow \frac{1}{2} \text{ O}_2 + \text{ H}_2\text{O} + 2 \text{ e}^-$	$\text{ H}_2\text{O} \rightarrow \frac{1}{2} \text{ O}_2 + 2 \text{ H}^+ + 2 \text{ e}^-$	$\text{ O}^{2-} \rightarrow \frac{1}{2} \text{ O}_2 + 2 \text{ e}^-$
Reacción en el cátodo	$\text{ H}_2\text{O} + 2 \text{ e}^- \rightarrow \text{ H}_2 + 2 \text{ OH}^-$	$2 \text{ H}^+ + 2 \text{ e}^- \rightarrow \text{ H}_2$	$\text{ H}_2\text{O} + 2 \text{ e}^- \rightarrow \text{ H}_2 + \text{ O}^{2-}$
Portador de carga	 OH^-	 H^+	 O^{2-}
Rango de operación de temperatura (°C)	40-90	20-100	700-1000

✓ Electrólisis alcalina (AWE)

La electrólisis de agua alcalina es una de las tecnologías más maduras y consolidadas en el mercado gracias además de ser el método más simple para producir hidrógeno verde. El electrolizador alcalino permite descomponer el agua en el cátodo en hidrógeno e iones hidroxilo. Los iones OH^- migran desde el cátodo y atraviesan una membrana o diafragma para llegar hasta el ánodo, donde se transforman en agua y libera oxígeno gaseoso. Los electrodos están inmersos en un electrolito que se trata de una disolución alcalina de entre un 20-40% en peso de una sal alcalina como KOH o NaOH, siendo preferida el KOH gracias a su mayor conductividad. La temperatura de operación ronda entre los 343 y 363 K, mientras que la presión de operación puede ser de hasta 3 MPa. (45)

El hidrógeno y el oxígeno gaseosos que salen de la celda electrolítica deben ser separados de restos del electrolito que los acompaña, que a continuación es devuelto a la celda. A pesar de que el electrolito no se consume en la reacción es necesario reponerlo cada cierto período de tiempo, ya que puede haber pérdidas a lo largo del proceso. En la Figura 10, se presenta un esquema de un electrolizador alcalino. (43)

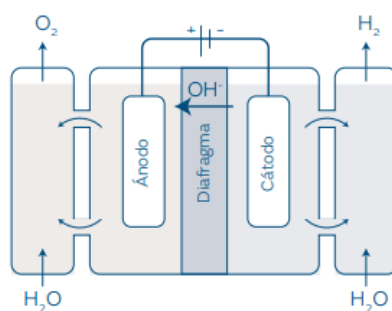


Figura 10. Esquema de un electrolizador alcalino (43)

La electrólisis alcalina es la tecnología más madura y consolidada actualmente, además de que está desarrollada industrialmente a escala de MW. Además, frente al resto de electrolizadores, los electrolizadores alcalinos presentan un menor coste de inversión y de mantenimiento, así como ofrecen una mayor durabilidad. Sin embargo, presentan un tiempo de respuesta lenta a la entra de energía, lo cual afecta negativamente a la reacción,

por lo que produce bajas densidades de corriente y por tanto, una menor producción de hidrógeno en comparación con el resto de tecnologías. (43) (45)

✓ Electrólisis de membrana polimérica electrolítica (PEM)

Los electrolizadores de electrolito de membrana polimérica buscan mejorar la eficiencia de la producción de hidrógeno al conseguir altas densidades de corriente. Estos electrolizadores emplean un polímero sólido ácido en lugar de un electrolito líquido, por eso se conoce como electrólisis de membrana polimérica electrolítica (PEM) o electrólisis de membrana de intercambio de protones. (45)

En este caso se alimenta agua desionizada a la celda, donde la membrana polimérica actúa como electrolito y separador de gas. Al no haber un electrolito líquido, lo cual implica la necesidad de bombas y un separador de gases, el electrolizador PEM es normalmente más compacto. El hidrógeno producido es muy puro, superior al 99%, y se presuriza directamente en el sistema. (43) (45)

Otra de las ventajas de este sistema es la respuesta rápida y dinámica y el modo de operación flexible. Sin embargo, presenta una serie de inconvenientes como los elevados costes de inversión, dado que el material de los electrodos está basado en metales nobles y las placas que componen el sistema son de titanio, que aparte de ser caro existen problemas de escasez. (43) (45)

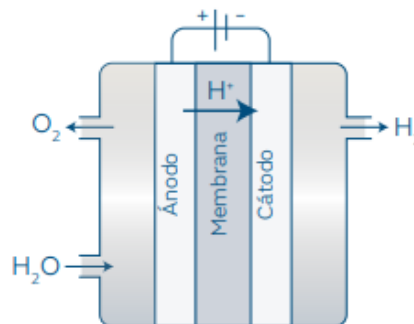


Figura 11. Esquema de un electrolizador PEM (43)

✓ Electrólisis de alta temperatura

La electrólisis de alta temperatura es la tecnología más prometedora, puesto que es la que mejor eficiencia presenta. Esto se debe a que la electrólisis a alta temperatura es favorable termodinámicamente, pues a altas temperaturas la demanda de electricidad total disminuye de forma considerable en comparación con el aumento de la energía térmica demandada, y la conductividad iónica del electrolito y la velocidad de las reacciones electroquímicas aumentan. (45)

El electrolizador que se basa en este tipo de electrólisis se conoce como electrolizador de electrolito de óxido de sólido (SOEC). El electrolito consiste en un

compuesto cerámico sólido que permite conducir selectivamente iones de oxígeno que han sido cargados negativamente a altas temperaturas. A diferencia de los electrolizadores anteriores, el agua reacciona en el cátodo y se combina con los electrones para producir hidrógeno gaseoso en el cátodo, dando lugar a iones de oxígeno cargados negativamente. (43)

A pesar de presentar la mejor eficiencia entre los electrolizadores anteriores, cabe destacar que todavía está en fase de investigación. En la Figura 12, se presenta un esquema del electrolizador SOEC. (43)

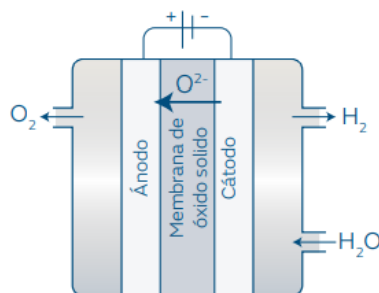


Figura 12. Esquema de un electrolizador SOEC (43)

En la Tabla 9, se presenta un resumen de las principales características de los electrolizadores comentados anteriormente. (43) (46)

Tabla 9. Características generales de los electrolizadores actuales (43) (46)

Electrolizador	Alcalino	PEM	SOEC
Electrolito	Solución KOH	Membrana polimérica	Óxido sólido
Densidad de corriente (A/cm ²)	0,5	2,0	2,0
Voltaje (V)	1,75-2,4	1,6-2,0	1,2-1,3
Pureza del gas (%)	99,5	99,99	99,9
Presión de trabajo (bar)	<1-30	30-80	<25
Eficiencia eléctrica (kWh/Nm ³ de H ₂)	4,3-5,5	4,5-5,4	3,2-3,7
Vida útil de la pila (h)	60.000-90.000	20.000-60.000	10.000
Madurez	Tecnología madura	Comercial	Fase de demostración
Coste capital (€/kW)	750	1.200-2.000	1.200-4.500

- **Termólisis**

La separación del hidrógeno del agua también es posible gracias al craqueo termoquímico bien de agua dulce o agua de mar. Mediante la termólisis se rompe el enlace de hidrógeno y oxígeno mediante una serie de reacciones químicas que necesitan aporte de energía inicial, que bien puede ser suministrado por electricidad y/o calor. La

temperatura necesaria para la termólisis directa es de aproximadamente 3000 K, lo cual es muy complicado, por lo que normalmente, en su lugar, se emplean complejos ciclos químicos que son capaces de reducir la temperatura del proceso a 1000 K. (47) (48)

Dos tecnologías posibles para llevar a cabo la termólisis de agua son los reactores nucleares y centrales de torre central (CSP), ya que ambos permiten producir electricidad y elevadas temperaturas. Sin embargo, actualmente la termólisis no resulta competitiva frente a otras alternativas como la electrólisis, ya que supone costes muy elevados como consecuencia de las altas temperaturas, altas presiones y agentes muy reactivos, por lo que necesita materiales especiales que no se vean afectados por esta combinación de factores. Por tanto, aunque se considera una solución prometedora, actualmente su desarrollo comercial está muy limitado, siendo preferible la electrólisis en aplicaciones a escala industrial. (47)

- **Fotólisis**

A diferencia de la termólisis en la que la energía necesaria para romper los enlaces es térmica, en la fotólisis se consigue la ruptura de los enlaces de oxígeno e hidrógeno por absorción directa de los fotones. A pesar de que esta tecnología ha aportado eficiencias superiores al 80%, todavía no está implantada a escala industrial. Además, aún no es competitiva frente a los electrolizadores, puesto que mientras que estos pueden trabajar 24 horas diarias, los sistemas fotoelectroquímicos dependen de la irradiación solar efectiva. (43)

6.2.1.3.Comparación y selección de alternativas

En la Tabla 10 se recogen las ventajas e inconvenientes comentadas anteriormente.

Tabla 10. Comparación entre las diferentes alternativas para la producción de hidrógeno verde (33) (45) (46)

Alternativa obtención H ₂	Ventajas	Inconvenientes
A partir biomasa		
Biofotólisis	✓ Libre de emisiones (biofotólisis directa) ✓ Transforma el CO₂ en energía ✓ Agua como única materia prima	✗ Reactores de gran superficie ✗ Rendimiento muy bajo ✗ No competitivo debido al elevado coste ✗ Depende de la luz solar ✗ Inhibición de enzimas
Fotofermentación	✓ Versatilidad de sustrato ✓ Balance neutro de CO₂	✗ Inhibición de enzimas ✗ Depende de la luz solar ✗ Requiere de reactores de grandes superficies ✗ Bajo volumen de producción
Fermentación oscura seguida	✓ Versatilidad de sustrato	✗ Inhibición de enzimas ✗ Velocidad de reacción lenta

Documento I. Memoria
Plata de producción de amoníaco verde

	✓ Mayor productividad frente al resto de procesos biológicos ✓ Transforma residuos en productos ✓ Balance neutro de CO₂	✗ Bajo volumen de producción ✗ Control estricto de las condiciones de operación ✗ Elevados costes de producción
Gasificación de biomasa	✓ Balance neutro de CO₂ ✓ Materia prima abundante y económica ✓ Versatilidad de materias primas ✓ Mejor rendimiento entre las alternativas de biomasa	✗ Formación de cenizas y alquitrán ✗ Elevados costes de inversión ✗ Requiere sistemas de captura y secuestro de carbón ✗ Disponibilidad de materia prima estacional
Pirólisis de biometano	✓ No produce óxidos de carbono ✓ Versatilidad de materias primas ✓ Libre de emisiones	✗ Altas temperaturas ✗ Producción de carbono sólido que actúa como inhibidor ✗ Elevados costes de material
Reformado de fuentes renovables	✓ Especialmente para la valorización de subproductos de refinería	✗ Reacciones complejas ✗ Reacciones indeseadas que afectan la selectividad del hidrógeno
A partir de agua		
Electrólisis	✓ Energía limpia y renovable ✓ O₂ como único subproducto	✗ Elevado coste de capital ✗ Elevado consumo de agua desionizada
Electrolizadores alcalinos (AEC)	✓ Tecnología más madura y bien establecida ✓ Menores constes de inversión ✓ Durabilidad a largo plazo ✓ Eficiencia del 70 % ✓ Comercializado ✓ Rango de MW ✓ No emplea catalizadores nobles	✗ Baja densidad de corriente ✗ Bajo grado de pureza del hidrógeno en comparación con el resto de tecnologías ✗ Electrolito líquido y corrosivo ✗ Baja presión de operación ✗ Dinámica de operación baja
Electrolizadores de membrana de	✓ Alta densidad de corriente ✓ Sistema de diseño compacto	✗ Tecnología más reciente y parcialmente establecida ✗ Altos costes de componentes

intercambio de protones (PEM)	✓ Elevada pureza del gas ✓ Sistema de respuesta rápida	✗ Catalizadores nobles ✗ Durabilidad a corto plazo ✗ Membrana costosa y limitada ✗ Corrosión debido al ambiente ácido
Electrolizadores de estado sólido o de alta temperatura (SOEC)	✓ Eficiencia del 100% ✓ Presión de operación alta ✓ Elevada eficiencia térmica ✓ Elevada densidad de corriente ✓ No emplea catalizadores nobles	✗ En fase de laboratorio ✗ Menor tiempo de vida frente a las otras tecnologías ✗ Coste de inversión muy elevado
Termólisis	✓ Puede abastecerse de energía renovable ✓ Agua como única materia prima	✗ Elevas temperaturas y presiones ✗ Agentes muy reactivos ✗ Elevado coste de capital ✗ Materiales especiales
Fotólisis	✓ Elevadas eficiencias (>80%) ✓ Energía limpia y renovable	✗ Tecnología en desarrollo ✗ Dependen de la radiación solar efectiva ✗ Materiales especiales

En base a la explicación de las diferentes alternativas y observando las ventajas e inconvenientes de cada una de ellas se ha optado por la electrólisis como vía para producir hidrógeno verde. Cabe destacar que actualmente esta es la forma más empleada a nivel industrial para la obtención de hidrógeno sin emitir CO₂ en el proceso.

Por otro lado, dentro de las tecnologías que engloba la electrólisis, aunque presente una peor eficiencia y una baja densidad de corriente y de presión de operación, se ha optado por la electrólisis alcalina por ser la tecnología más madura a nivel industrial, de mayor durabilidad y que menores costes de inversión presenta, además de ser la que produce mayor caudal de hidrógeno.

Como consecuencia de la escala de producción, no resulta rentable captar agua procedente del mar, ya que esto implicaría, aparte de la etapa de deionización, incorporar una planta de desalinización. Por tanto, este factor condicionará la localización de la planta, que deberá abastecerse de agua dulce sin afectar al caudal ecológico.

6.2.2. Tecnología para la obtención de N₂

Los tres métodos más importantes para la obtención de nitrógeno son la destilación criogénica, la adsorción por cambio de presión y la separación mediante membranas (hollow fibre membranas).

- Destilación criogénica

La destilación criogénica, también conocida como unidad de separación de aire (ASU), es la tecnología más empleada, siendo entre el 65-70% del nitrógeno producido obtenido mediante esta. La destilación criogénica está basada en la diferencia de la temperatura de condensación de los tres compuestos principales del aire (oxígeno, nitrógeno, argón). Para separar el aire, se licúa gran parte de este, por lo que es necesario trabajar por debajo del punto crítico, de 132,5 K, y a 37,7 bar. (49) (50)

El proceso más simple es el que posee una columna que permite únicamente la separación del nitrógeno del aire y que se presenta en la Figura 13. En primer lugar, el aire es comprimido y a continuación se filtra y se enfría para condensar el agua del aire. Una vez se elimina la humedad del aire, se eliminan los contaminantes de este mediante absorbentes con zeolita, donde se retira principalmente el CO₂. A continuación, se enfría la corriente casi hasta la temperatura de licuefacción, se comprime y finalmente licúa. El gas licuado se introduce en la columna de destilación criogénica, donde se obtiene el nitrógeno por la parte superior de la columna. (30) (49)

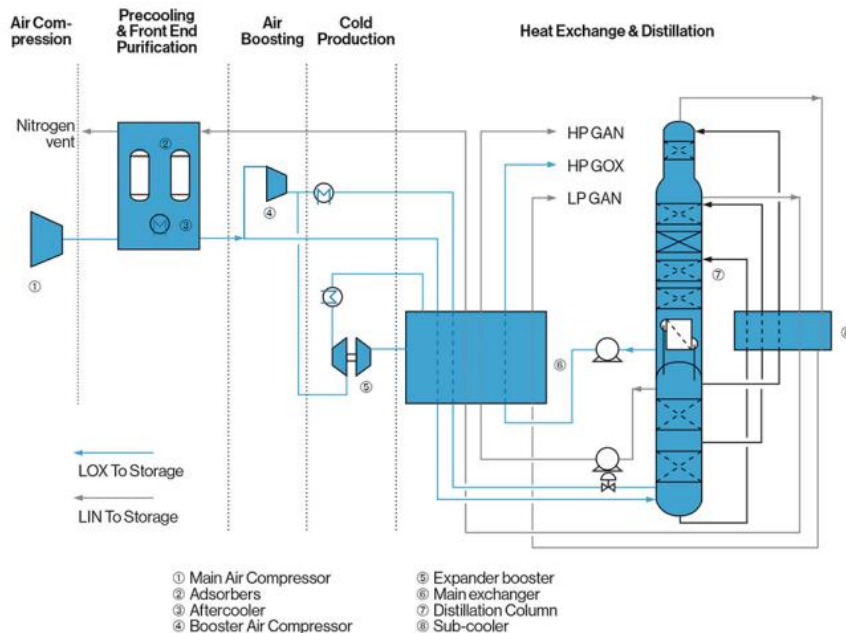


Figura 13. Diagrama de flujo de la destilación criogénica de Air Liquide (51)

- Adsorción por cambio de presión

El proceso de adsorción por cambio de presión (PSA, Pressure Switch Adsorption) se basa en la difusión cinética más rápida de las moléculas de oxígeno en los poros de un tamiz molecular de carbono frente a las moléculas de nitrógeno, lo cual permite la separación de este último. (30)

La adsorción de las moléculas de oxígeno ocurre en dos recipientes a distinta presión que contienen el tamiz molecular de carbono, lo cual permite llevar a cabo la separación del nitrógeno del aire y la regeneración de los tamices. Para ello, el aire de alimentación, tras ser comprimido y purificado, se alimenta al primer tanque con el tamiz molecular y se produce la adsorción del oxígeno, mientras que gran parte del nitrógeno

atraviesa el primer depósito sin ser adsorbido. Este nitrógeno abandona por tanto el primer depósito y ya puede ser almacenado. Sin embargo, una pequeña parte de este es dirigido hasta el siguiente recipiente donde circula en sentido contrario al primer depósito. Esto permite liberar el oxígeno que ha sido adsorbido en el primer tanque, de manera que, al liberar la presión del segundo depósito, los tamices moleculares dejan de retener el oxígeno anteriormente capturado. El oxígeno desadsorbido es arrastrado y expulsado mediante el sistema de escape. Esta segunda etapa se conoce como regeneración de la torre saturada de oxígeno. (52)

La función de los tanques se alterna a lo largo del proceso, de manera que, al principio, en el primer tanque se produce de adsorción, mientras que el segundo se regenera. A continuación, se iguala la presión en ambos depósitos, y se cambia la presión de estos, de forma que ahora en el segundo tanque se genera nitrógeno y el primero se regenera. (52)

Uno de los principales problemas de este proceso es la dependencia de la pureza del nitrógeno ante ajustes de presión de funcionamiento, temperatura, la velocidad de flujo a través de los tamices moleculares y la frecuencia con que estos se cambian. Cabe destacar que este sistema presenta fluctuaciones de presión en la entrada y salida del sistema, así como fluctuación del flujo. Otro inconveniente es el alto nivel sonoro debido al venteo de oxígeno. Sin embargo, en comparación con la destilación criogénica presenta un arranque mucho más rápido y supone un coste de inversión inicial más bajo. (30) (52)

En la Figura 14, se presenta un esquema del proceso de adsorción por cambio de presión. (49)

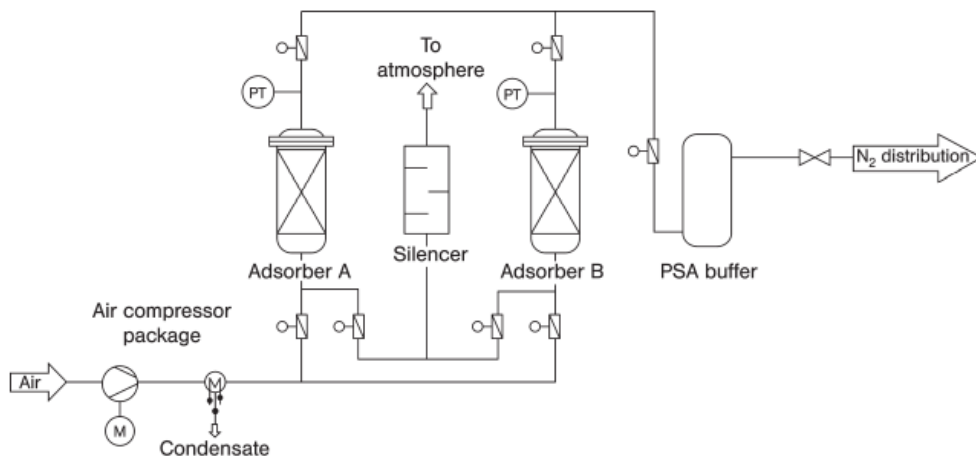


Figura 14. Esquema del proceso de adsorción por cambio de presión (49)

- Separación por membranas

Este sistema consiste en un haz de fibras de polímero de pequeño diámetro que se encuentran dentro de una cubierta exterior protectora que permite separar el nitrógeno del oxígeno del aire gracias al fenómeno de permeación. En primer lugar, el aire se comprime, se purifica y se seca, antes de ser alimentado a las membranas. Gracias a que los gases penetran a distintas velocidades es posible separar el nitrógeno, ya que el oxígeno penetra

más rápido, por lo que abandona antes el sistema. De esta forma, el aire de alimentación se separa en dos corrientes, una de oxígeno y otra de nitrógeno, tal y como se muestra en la Figura 15. (30) (53)

Frente al sistema de adsorción por cambio de presión, este sistema arranca con mayor rapidez y es más silencioso, además de que los costes de mantenimiento son menores y también requiere un menor espacio. Sin embargo, tanto el caudal de nitrógeno que se puede obtener como la pureza es más bajo. (53)

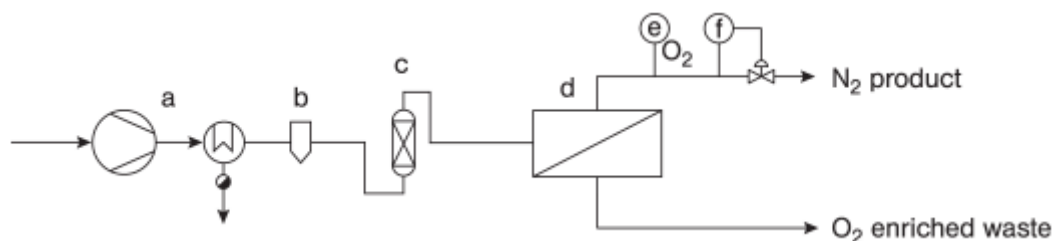


Figura 15. Esquema de un sistema de membranas para producción de nitrógeno (49)

6.2.2.1.Comparación y selección de alternativas

La elección de una u otra tecnología depende principalmente de la capacidad de producción de nitrógeno necesaria, la pureza requerida y de los costes económicos asociados. En la Tabla 11, se recogen las características principales de cada tecnología. (30) (54)

Cabe destacar que tanto para adsorción por cambio de presión como para la separación por membranas se requiere un sistema DEOXO para eliminar el oxígeno antes del ciclo de síntesis de amoníaco. (54)

Tabla 11. Resumen de las características principales de cada tecnología (54)

Tecnología	Destilación criogénica de aire (ASU)	Adsorción por cambio de presión (PSA)	Separación por membranas
Temperatura (°C)	-195 a -170	20-35	40-60
Presión (bar)	1-10	6-10	6-25
Pureza (%)	99,999	<99,99	99,5
Tiempo de arranque	Horas	Minutos	Minutos
Consumo de energía (kWh/kg N ₂)	0,1	0,2-0,3	0,2-0,6
Capacidad de producción (m ³ /h)	250-50000	25-3000	3-3000
Coste de inversión (k€/tpd NH ₃)	<8	4-25	25-45

Teniendo en cuenta que se producen 50 t/día de amoníaco, estequiométricamente de acuerdo con la Ecuación 2, aplicando la ecuación de los gases ideales para condiciones estándar (0°C y 10⁵Pa), se requiere un flujo volumétrico de nitrógeno de

aproximadamente 1392 m³/h. Por tanto, atendiendo al criterio de capacidad de producción, las tres tecnologías son válidas.

Por otro lado, para la producción de amoníaco verde se requiere nitrógeno pureza superior al 99,9%, por lo que tanto la destilación criogénica como la adsorción por cambio de presión podrían ser empleadas. Sin embargo, en la Figura 16, se presenta la rentabilidad relativa actual de las diferentes tecnologías para capacidades más pequeñas en función de la capacidad y la pureza requerida, donde se recomienda la destilación criogénica para los requisitos del proceso. (49)

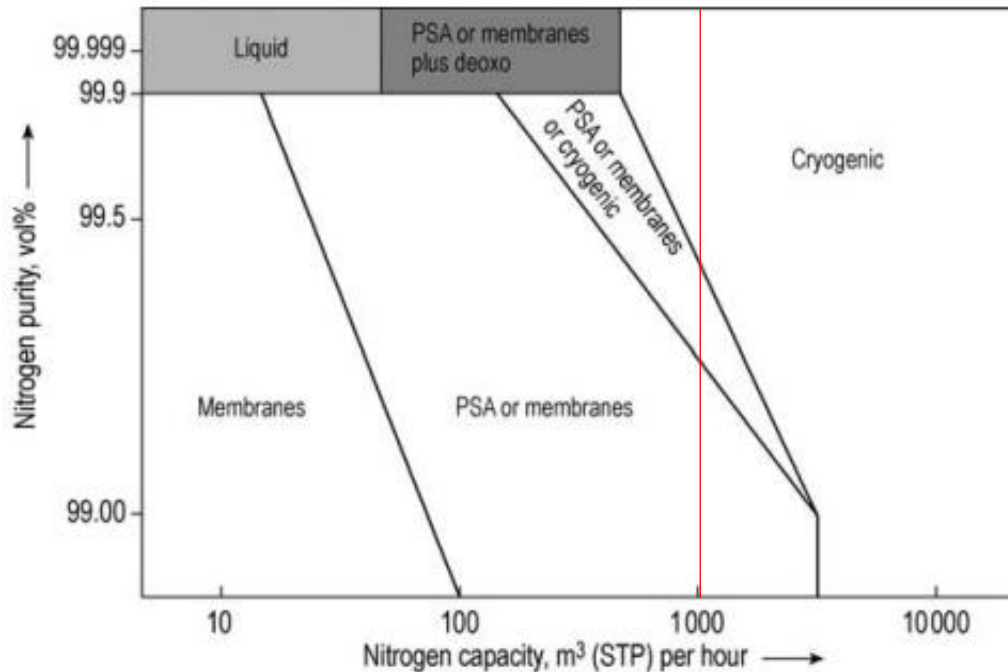


Figura 16. Selección de la tecnología de separación de aire en función de la capacidad de producción y pureza de N₂ (49)

Por tanto, a pesar de que la unidad de separación del aire (ASU) requiera mayor tiempo de inicio y aunque el coste de inversión inicial pueda ser mayor al sistema de adsorción por cambio de presión (PSA), como cumple con los requisitos de capacidad y de pureza y además es la que menor consumo de energía presenta para la misma cantidad de nitrógeno, es la alternativa escogida.

6.2.3. Síntesis de amoníaco verde

En base a lo mencionado anteriormente, los procesos de síntesis de amoníaco verde existentes difieren principalmente en la forma en la que se obtiene el hidrógeno y el nitrógeno, siendo escogidos finalmente la producción de hidrógeno y nitrógeno a partir de la electrólisis alcalina y destilación criogénica del aire, respectivamente.

Otro de los aspectos en los que puede diferir la síntesis de amoníaco es el ciclo de síntesis empleado. Actualmente, tras obtener el hidrógeno y el nitrógeno, se concluye el proceso aplicando el ciclo de síntesis de amoníaco convencional Haber-Bosch, donde las condiciones de operación concretas, dentro de los rangos de este proceso, vendrán dadas

por el catalizador a emplear. Este proceso, que combina la aplicación de la electrólisis de agua con el proceso Haber-Bosh, se denomina *Power-to-ammonia*.

Por otro lado, de las configuraciones de ciclo de síntesis propuestas en el apartado 7.1.4. *Ciclo convencional de síntesis Haber-Bosch*, dado que el hidrógeno es purificado tras la electrólisis, eliminándose el agua y el oxígeno de este, atendiendo a las consideraciones explicadas, la configuración (a) mostrada en la Figura 9 es la más apropiada para este proceso.

7. EMPLAZAMIENTO Y LOCALIZACIÓN

Para poder escoger una localización adecuada para la planta deben tenerse en cuenta una serie de factores como la proximidad a las materias primas y mercados de consumo, disponibilidad de terreno edificable y energía, consideraciones ambientales y leyes reguladoras, etc. A continuación, se presenta una discusión de estos factores que han llevado a elegir el lugar de construcción de la planta de amoníaco.

7.1. Disponibilidad de materia prima

Las materias primas de este proceso son el agua y el aire a partir de las cuales se obtendrán el hidrógeno y el nitrógeno respectivamente. Dado que el aire es un recurso abundante que no depende de la localización de la planta, el agua será el único condicionante. Como se ha comentado anteriormente, el agua necesaria para la electrólisis debe ser dulce, por lo que se ha de comprobar la presión hídrica en el país, siendo favorables aquellos lugares donde la captación del agua no altere el caudal ecológico del cauce. Se entiende como presión hídrica cualquier actividad humana que trasgreda el estado de las aguas, lo cual, en función de la presión que se ejerza sobre un medio, puede llevar al riesgo de los recursos hídricos naturales. En la Figura 17, se presenta la ratio entre los recursos disponibles y la demanda para las diferentes cuencas hidrográficas de España, obtenida de un estudio sobre el balance hídrico en España del 2020. (55) (56)

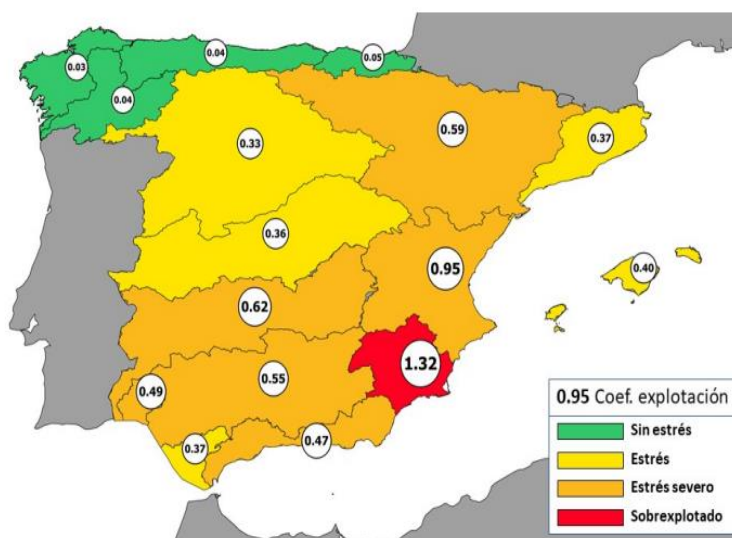


Figura 17. Ratio recursos/demandas para las demarcaciones hidrográficas en España (56)

Como se puede observar, las demarcaciones hidrográficas menos afectadas por la demanda de agua en relación con su disponibilidad son la Demarcación Hidrográfica de Galicia-Costa, del Miño-Sil, del Cantábrico, y la Demarcación Hidrográfica de las Cuencas Internas del País Vasco, por lo que estas zonas son candidatas para la localización de la planta. Por otro lado, cabe destacar que en la bibliografía se indica que la probabilidad de cambio en el grado de estrés hídrico de estas demarcaciones, de acuerdo con el coeficiente de explotación (*Water Exploitation Index*, WEI), es muy bajo. (56)

Aparte de este estudio, una vez escogida la localización, se consultará el Plan Hidrológico de Cuenca y se corroborará el impacto de captación de agua. En la Tabla 12, se recogen los costes unitarios del agua por comunidad autónoma correspondientes a las demarcaciones hidrográficas con menor estrés hídrico en 2018 en base al Instituto Nacional de Estadística y se puede observar que por economía resultarían Galicia y Asturias. (57)

Tabla 12. Coste unitario del agua por comunidad autónoma sin estrés hídrico en 2018 (57)

Comunidad autónoma	Coste unitario del agua (€/m ³)
Galicia	1,28
Asturias	1,40
Cantabria	1,67
País Vasco	2,05
Navarra	1,43

7.2. Disponibilidad de energías renovables

A 31 de diciembre 2021, de acuerdo con los avances del sistema eléctrico español elaborado por la Red Eléctrica de España (ree), la potencia instalada en la península rondaba los 107.505 MW, siendo el 58,4% procedente de fuentes renovables. De estas, la energía eólica supone un 25,7%, seguida de la energía hidráulica con un 15,9%. Cabe destacar, el aumento de la potencia fotovoltaica, que se sitúa como la tercera energía renovable más demandada con un 13,7%. (58)

En la Figura 18, se presenta la potencia renovable instalada en MW por comunidad autónoma elaborada a partir de datos del 11 de abril de 2021. Como se puede observar, Galicia supera con creces a la potencia instalada en Asturias, Cantabria, País Vasco y Navarra, siendo además la tercera comunidad autónoma con mayor potencia procedente de renovable tras Castilla León y Andalucía. (59)

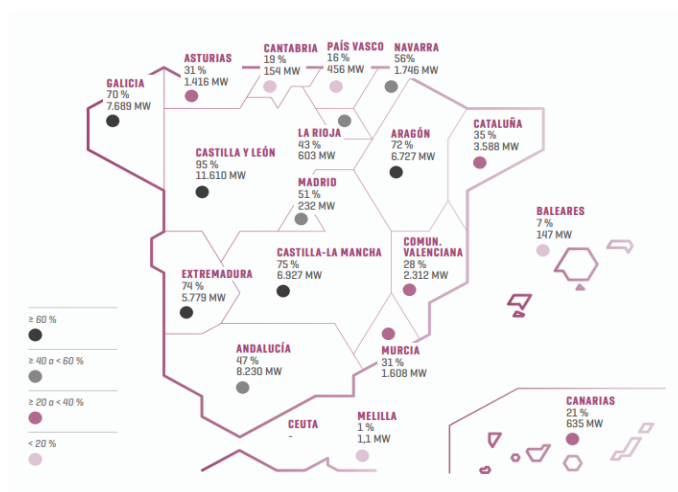


Figura 18. Ratio potencia renovable/potencia (%) y potencia renovable (MW) a 31/12/2020 (59)

7.3. Selección de la localización

En base a la disponibilidad de materias primas y energías renovables, se ha decidido construir la planta en Galicia. Para escoger la localización se han analizado distintos factores atendiendo al Plan Hidrológico de la cuenca Galicia-Costa y Miño-Sil como zonas de captación sensible, espacios protegidos, calidad del agua, etc, comentados en el Estudio de Impacto Ambiental, Documento III. Además, también se ha tenido en cuenta la proximidad a los mercados de consumo, detallado en el apartado 7.3.1.

Dado que Fisterre Energy prevé la construcción de una planta de producción y almacenamiento de amoníaco e hidrógeno verde en el puerto exterior de Langosteira, Arteixo, para usos industriales y energéticos, se ha optado por localizar la planta en el Sur de Galicia.

En la demarcación Miño-Sil, cabe destacar el río Miño con un caudal medio en torno a 7.068 hm³/año y su principal afluente el río Sil, con 5.976 hm³/año, siendo el primero el río más caudaloso de Galicia. (60)

En concreto se ha decidido instalar la planta en el Área Metropolitana de Vigo, en la comarca de O Condado, en los municipios de Salvaterra de Miño y As Neves (Figura 19), dado que el polígono escogido se encuentra en ambos. De esta forma la planta se encuentra situada próxima a las orillas del río Miño. Además, constituye una eurociudad con Monção, en Portugal, a la cual tiene acceso a través del Puente Internacional Salvaterra de Miño-Monção. Tal y como se ha comentado en el estudio de mercado, este lugar presenta una gran ventaja ya que Portugal es uno de los mayores importadores de amoníaco de España.

7.3.1. Proximidad a mercados de consumo

Dado que el amoníaco anhidro de 99,8% presenta numerosas aplicaciones con este proyecto se busca abastecer la demanda de diversos mercados locales. Salvaterra de Miño y As Neves se encuentran cerca de los polígonos más importantes tanto en el sur de Galicia como en el norte de Portugal. Algunos de estos son el Polígono Industrial A

Documento I. Memoria
Plata de producción de amoníaco verde

Granxa y el Polígono Industrial de As Gándaras, ambos en O Porriño, el Parque Tecnológico y Logístico de Vigo, el Parque Empresarial de Pereiro de Aguiar en Ourense, el Polígono Industrial de Baión en Vilanova de Arousa, Polígono Industrial de A Pasaxe en Pontevedra, el Parque empresarial de Fulão en Vila Nova de Cerveira o la Zona Industrial do Entroncamento en Ribeira da Pena en Portugal, entre muchos otros. En la Figura 19, se puede observar a la derecha la distribución de los diferentes polígonos industriales más próximos a estos municipios.

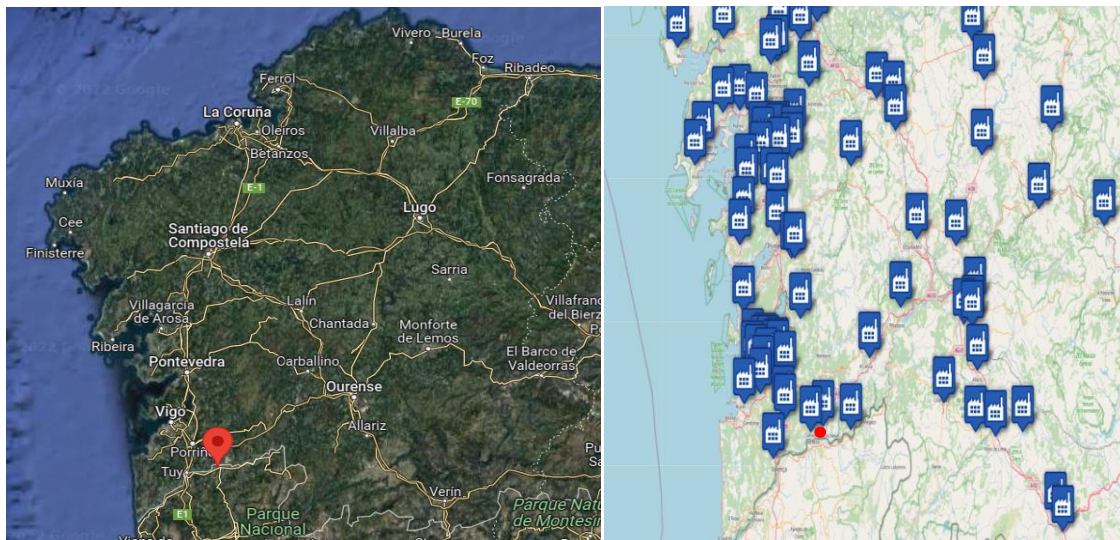


Figura 19. Polígonos industriales en el centro-sur de Galicia (61) (62)

En los diversos polígonos industriales se encuentran empresas con objetivos sociales diferentes que emplean el amoníaco en sus procesos productivos: industrias dedicadas a la fabricación de productos de limpieza, caucho, madera, papel, pinturas, barnices, fibras y plásticos, fibras textiles y fertilizantes. En la Tabla 13 se recogen algunas empresas consumidoras de amoníaco.

Tabla 13. Empresas consumidoras de amoníaco (63)

Empresa	Objeto Social	Polígono industrial
Actega Artística S.A.	Fabricación de sellantes metálicos	A Granxa
Industrias Proa S.A.	Fabricación de pinturas, barnices y lacas	A Granxa
Zelnova Zeltia S.A.	Fabricación y distribución de productos para la limpieza, higiene, desinfección y desinsectación	Torneiros
Impor Am Galicia	Fabricación de productos de limpieza para automóviles	Sur Ppi-7
Geraway S.L.	Fabricación de perfumes y cosméticos	A Pasaxe
Sociedad Agrícola Gallega S.A. (SOAGA)	Fabricación de abonos y compuestos nitrogenados, fertilizantes	Baión
System Paper City S.L.	Fabricación de papel, cartón y otras materias	Moaña
Tintex Textiles S.A.	Fabricación de productos textiles	Parque do Fulão
MOCARSIL	Fabricación de productos químicos auxiliares para uso industrial	Zona Industrial do Entroncamento

7.3.2. Leyes reguladoras

Para poder construir la planta se han consultado una serie de documentos entre los que cabe mencionar el Plan Hidrológico Miño-Sil, en el que se describen los diferentes usos del agua, las repercusiones de la actividad humana en el estado de las aguas, el consumo de agua para diferentes usos, el proyecto de plan hidrológico de la demarcación y el análisis económico del uso del agua, entre otros. (60)

Por otro lado, dado que discurre una red ferroviaria que se encuentra entre el río Miño y la parcela donde se construirá la planta, ha sido necesario consultar la Ley 38/2015, de 29 de septiembre, del sector ferroviario, para poder conocer las condiciones necesarias para construir una canalización de agua sin afectar a las vías de ferrocarril. Para ello, se necesita pedir autorización previa al Administrador de Infraestructura Ferroviarias (Adif) y la instalación de la conducción se realizaría mediante martillos de compactación para el movimiento de tierras y se emplearía la misma técnica que se ejecutó para la canalización de la depuradora situada en el polígono industrial escogido. (64) (65)

Además, también se ha revisado el Código de Urbanismo de Galicia, especialmente la Ley 4/2012, de 12 de abril, del Área Metropolitana de Vigo, y la Ley 2/2016, de 10 febrero, del suelo de Galicia. (66)

7.3.3. Consideraciones estratégicas y políticas

España es un país importador de amoníaco, por lo que el negocio del amoníaco en la península presenta poca competencia. El amoníaco es producido principalmente por el Grupo Fertiberia y por Ercros, siendo el centro de producción más próximo tanto a Galicia como al norte de Portugal la planta de Fertiberia en Avilés (Asturias). En Galicia, actualmente no está operando ninguna planta de amoníaco, sin embargo, se prevé la puesta en marcha de una planta de amoníaco verde en Langosteira (Arteixo), aunque cabe destacar que este estará dirigido principalmente a fines energéticos, siendo el excedente para uso industrial.

Salvaterra de Miño forma una eurociudad con Monção, por lo que se han establecido una serie de relaciones comerciales y personales, facilitando así el intercambio económico entre ambos municipios. Además, se encuentran interconectadas desde 1995 a través del Puente Internacional sobre el río Miño, lo que facilita las comunicaciones entre ambos. (67)

Tal y como se comenta en el estudio de viabilidad técnica, el proyecto requiere de ayudas y subvenciones para ser económicamente viable. Algunas de las ayudas que se pueden solicitar son:

- Innovation Fund: Innovación con bajas emisiones de carbono de la Unión Europea, cuya financiación podría ascender hasta 20.000 millones de euros en el período 2020-2030 y que ofrece ayudas a tecnologías y procesos con bajas emisiones de carbono en las industrias energéticas de uso intensivo, con un

volumen de ayuda de hasta el 60% del total CAPEX para proyectos a pequeña escala. (68)

- Fondos europeos de Next Generation EU, mediante el cual España recibirá 72.000 millones de euros, de los cuales 1.500 millones serán destinados a impulsar el hidrógeno renovable hasta 2023, a través del Fondo de Recuperación Europeo. (69)
- Ayudas de la Xunta de Galicia por más de 128 M€ para favorecer el ahorro energético y el uso de energías renovables en hogares y empresas. (70)
- Ayudas a empresas de nueva creación por AVANSUM (Vigo). Fomento del empleo y consolidación de pequeñas empresas, que busca apoyar y dinamizar el desarrollo de nuevas iniciativas empresariales en Galicia, especialmente a ayuntamientos del rural gallego. (71)

7.3.4. Disponibilidad mano de obra

En 2021, en Salvaterra de Miño se ha registrado una población de 10.048 habitantes, donde más de la mitad se encuentran en la segunda franja de edad (de 16 a 64 años), tal y como se recoge en la Tabla 14. El número de nacimientos registrados y muertes en el 2020 ha sido de 71 y 123 respectivamente, lo que resulta en un saldo vegetativo de -52. En 2021, el número de personas inscritas en el paro fue de 704, de las cuales el 97,4% representaba a la población mayor de 25 años. En concreto el sector industrial representa un 16,4 % del total de parados (116 personas), mientras que el sector de construcción supone el 7,4%. (72)

Tabla 14. Población empadronada en Salvaterra de Miño en 2021 (72)

	Total	Hombres	Mujeres
Población	10.048	5.027	5.021
De 0 a 15 años	1.397	708	689
De 16 a 64 años	6.361	3.310	3.051
De 65 y más años	2.290	1.009	1.281
Población extranjera	825	465	360
Edad media	45,16	43,88	46,55

Por otro lado, en 2021, As Neves cuenta con un número de habitantes de 3.770, de los cuales, 314 están inscritos en el paro. Cabe destacar que a diferencia de Salvaterra de Miño, que a pesar de tener un saldo vegetativo negativo logra mantener su población, As Neves tiende a perder habitantes cada año, por lo que la construcción de la planta podría atraer a nueva población al municipio al crear nuevos puestos de empleo. (73)

En cuanto a la formación, en Vigo existe la Escuela de Ingeniería Industrial, donde se imparte el Grado de Ingeniería Química Industrial, Tecnologías Industriales, Mecánica, Electrónica Industrial y Automática, Eléctrica. Además, la Universidad de Vigo también oferta el Grado en Ingeniería de la Energía, Administración y Dirección de Empresas, Economía, etc, así como la mayoría másteres correspondientes a los diferentes grados. (74)

Por otro lado, en Vigo se cuentan con diversos centros de formación profesional donde se imparte el Grado Medio de Equipos e Instalaciones Electrónicas, el Grado Superior de Regulación y Control Automático, el Grado Medio en Montaje y Mantenimiento de Instalaciones de Frío, Climatización y Producción de Calor, Grado Medio en Instalación y Mantenimiento Electromecánico de Maquinaria y Conducción de Líneas, Grado Superior en Administración y Finanzas, Grado Superior en Eficiencia energética y energía solar térmica.

7.4. Selección de la parcela

La parcela escogida se encuentra en el polígono de PLISAN (Plataforma Logística Industrial de Salvaterra-As Neves) también conocido como Puerto Seco de Vigo. Se trata de un complejo multifuncional de 298 Ha, que se encuentra situado entre Salvaterra de Miño y As Neves. En concreto posee una superficie bruta de 2.978.776 m² y una superficie neta de 1.568.790 m² de suelo industrial. (75)

Esta plataforma se ha diseñado para la prestación conjunta de servicios tanto a escala regional, nacional como internacional en la que se espera la concentración de empresas y servicios logísticos, transporte de mercancías e intermodalidad, actividades industriales, empresariales y de servicios generales. (75)

En la En la Figura 20, se muestra la distribución parcelaria de la Plataforma Logística Industrial de Salvaterra-As Neves, en la que se pretende incorporar 1.000.000 m² (zona grisácea a la derecha del plano, Zona MI) a través del plan sectorial de áreas empresariales de Galicia. (76)

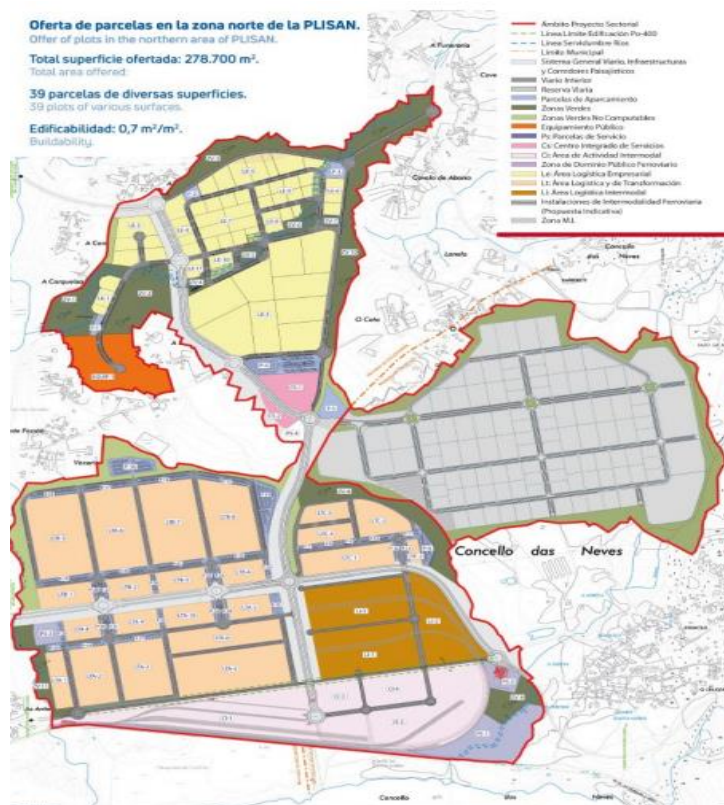


Figura 20. Distribución de parcelas en la Plataforma Logística Industrial de Salvaterra-As Neves (76)

Dado que todas las parcelas están clasificadas como terreno industrial, se ha escogido aquella parcela que mejor se ajusta a las necesidades de la planta. En concreto se han seleccionado las parcelas sombreadas en violeta presentada en la Figura 21 por ser una de las pocas disponibles que satisface el espacio requerido por la planta. Las parcelas amarillas si bien están disponibles no garantizan el espacio suficiente para la planta, mientras que las parcelas anaranjadas ya han sido reservadas y las marrones, adjudicadas por compraventa. (76)

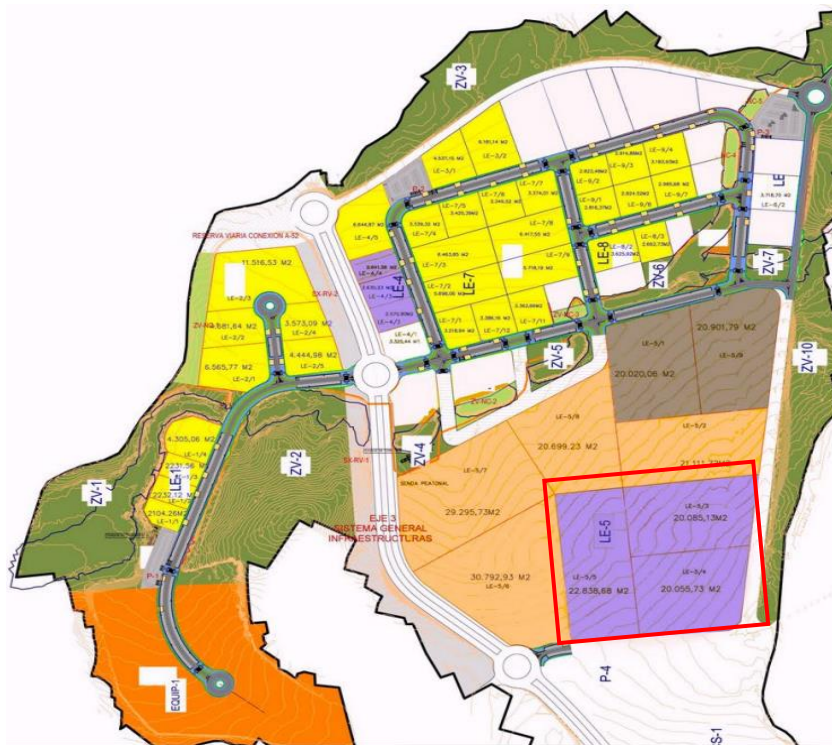


Figura 21. Selección de la parcela en el polígono PLISAN (76)

En total las parcelas LE-5/3, LE-5/4 y LE-5/5 constituyen un total de 62.979,54 m², por lo que teniendo en cuenta el precio unitario por m² para parcelas mayores de 20.000 m² (53,21€/m²), el precio total del terreno será de 3.351.141€. En la Tabla 15, se recoge la superficie de cada una de las parcelas, así como el precio individual. (76)

Tabla 15. Superficie y precio por parcela

Parcela	Superficie (m2)	Precio (€)
LE-5/3	20.085,13	1.068.730
LE-5/4	20.055,73	1.067.165
LE-5/5	22.838,68	1.215.246
TOTAL	62.979,54	3.351.141

7.4.1. Comunicaciones

El polígono se encuentra a 35 km de Vigo a través de la autovía A-52 (38 min), por la que también se llega a O Porriño a 20 km de distancia (17 min), además de estar a 78,5

km de SOAGA por la AP-9 (59 min). PLISAN está a 59,7 km de Pontevedra por la AP-9 y a 70,3 km de Ourense (48 min). También presenta conexiones con el norte de Galicia mediante la Autopista del Atlántico (AP-9) y el norte de Portugal a través de la autovía A-55. En concreto, se encuentra próxima al Parque Empresarial de Fulão a tan sólo 32 minutos.

Además, cuenta con la línea ferroviaria FFCC Madrid-Ourense-Vigo-Puerto de Vigo, por lo que tiene acceso directo desde la línea Vigo-Ourense y conexión directa con el Puerto de Vigo. En cuanto a la vía aérea, el polígono se encuentra a 33 km del aeropuerto internacional de Vigo, a 138 km del aeropuerto internacional de Oporto y a 129 km del aeropuerto internacional de Santiago de Compostela. (75)

En la Figura 20, se presentan las comunicaciones desde PLISAN más significativas.



Figura 22. Comunicaciones desde la Plataforma Logística Industrial de Salvaterra-As Neves (75)

7.4.2. Servicios disponibles

La Plataforma Logística Industrial de Salvaterra-As Neves, cuenta con suministro de agua y electricidad. Recientemente se ha puesto en marcha la depuradora y potabilizadora de PLISAN, que abastecerá a los diferentes proyectos instalados en el polígono. Las condiciones de abastecimiento a los usuarios de PLISAN para la sección LE se recoge en la Tabla 16.

Dado que el consumo de agua para la producción de hidrógeno es de aproximadamente 0,92 L/s, teniendo en cuenta la superficie de las parcelas de 6,298 ha, el caudal medio diario que se abastecerá a la planta será de 2,141L/s, por lo que el agua suministrada a la parcela sería suficiente para el proceso. Además, cabe destacar que los caudales específicos son de referencia, por lo que en caso de necesidad se podría aumentar, siempre y cuando se evalúe la disponibilidad y sea aprobado por la PLISAN. (77)

Tabla 16. Condiciones de suministro de servicios a los usuarios de la PLISAN (77)

SERVICIO			Parcela LE
ABASTECIMIENTO	Caudal específico de referencia (multiplicar por la superficie bruta parcela)	Caudal medio diario (l/(s.ha))	0,34
		Caudal punta ³ (l/(s.ha))	0,73
	Presiones mínimas en los puntos de acometida con grupo de presión	MPa	0,25

Por otro lado, el polígono dispone de una depuradora de aguas residuales, así como de una instalación eléctrica, que distribuye corriente tanto de alta como de baja a cada parcela.

Las condiciones meteorológicas como precipitaciones, temperaturas y viento, etc, se presentan el *Estudio de Impacto Ambiental*.

7.4.3. Otras consideraciones

Cabe destacar que, para facilitar el asentamiento de nuevas industrias en el polígono, el Gobierno gallego dará incentivos, además de ofrecer condiciones favorables a las empresas para que estas se instalen y desarrollen su actividad en Galicia. Además, de acuerdo con el presidente de la Autoridad Portuaria de Vigo, ya se ha presentado el proyecto constructivo al Administrador de Infraestructura Ferroviarias (Adif), lo cual ahorraría tanto trámites como tiempo de espera, ya que estos suelen tardar en gestionarse un año como muy pronto. (78)

8. ANÁLISIS DE VIABILIDAD TÉCNICA

Para poder determinar si un proyecto se debe llevar a cabo o no, es preciso estudiar la viabilidad técnica y económica del mismo. Para ello, se debe comprobar si existen los recursos necesarios, así como estimar los requerimientos de capital, mano de obra, para comprobar si el proyecto es posible tanto técnica como económicamente. Además, se contemplarán otros aspectos como la seguridad y factores externos como la localización de la planta, normativas y ayudas que conceda la comunidad y el país.

8.1. Viabilidad del proceso de producción

El proceso de producción escogido para la planta de amoníaco, discutido en el estudio de alternativas, ha sido el conocido como *Power-to-Ammonia*, que consiste en la obtención de hidrógeno mediante electrólisis de agua, para la cual se emplea energía procedente de fuentes renovables, y la obtención de nitrógeno a partir de unidad de separación del aire, seguido del proceso Haber-Bosch convencional. En concreto, se ha decido que la planta produzca 16.500 toneladas anuales de amoníaco, ya que estas son mucho más flexibles en el mercado, pudiendo satisfacer diversas necesidades locales que abarcan desde los fertilizantes hasta el almacenamiento de energía, y permiten desarrollar

una cadena de suministro más sólida. Además, es importante destacar que a pequeña escala existe tecnología probada que permite que el proceso de producción de amoníaco sea mucho más económico. (79)

El lazo de síntesis de amoníaco del proceso Haber-Bosch ha sido estudiado e integrado en numerosos procesos comerciales a lo largo de estos años. Algunos de estos son el proceso de amoníaco de Haldor Topsoe, Ammonia Casale, Linde Ammonia Concept, ThyssenKrupp y KBR (Kellogg Brown and Root), que empleaban gas natural como materia prima. Sin embargo, algunas de estas empresas han apostado por la síntesis de amoníaco verde en la que también se incluye el proceso Haber. (80)

El proceso *Power-to-Ammonia* está tomando gran importancia a nivel industrial como una solución a las emisiones durante el proceso convencional de amoníaco. Proton Ventures es una compañía proveedores de soluciones energéticas que ha diseñado plantas de amoníaco verde con capacidades de entre 3,10 y 60 t/d ya implantadas en países como Argentina, Suiza y China. (30)

Otro ejemplo de la viabilidad de este proceso es la implantación de la tecnología ThyssenKrupp en Kizad, Abu Dhabi, donde la planta producirá 200.000 toneladas anuales de amoníaco verde. Esta empresa proporciona tecnología tanto para pequeña como para grande escala, presentando dos conceptos ya comercializados: plantas de producción de 50 t/d con electrolizadores alcalinos de agua de 20 MW y plantas con capacidad de 300 t/d con electrolizadores de 120 MW. (30)

8.2. Disponibilidad de recursos

Para poder llevar a cabo el proyecto se debe conocer si existen suficientes recursos englobando desde las materias primas hasta la disponibilidad de mano de obra y que se comentan a continuación.

8.2.1. Disponibilidad de materias primas

El aire es una materia prima abundante que se puede obtener en cualquier lugar donde se localice y sin ningún coste. Está compuesto aproximadamente de un 99% de nitrógeno y oxígeno y un 1% de diferentes gases como el argón (0,93%) y el dióxido de carbono (0,035%). En concreto, el nitrógeno supone el 78,08%, mientras que el oxígeno está presente en un 20,95%. (81)

El agua está presente en la Tierra alrededor de 1.386 millones de kilómetros cúbicos, lo cual supone que el 70% del planeta es agua. Sin embargo, el 96,5% del agua es salada, siendo tan sólo un 3,5% agua dulce. Del agua dulce disponible, el 70% se encuentra congelada en glaciares, por lo que el 30% constituye parte de la humedad del suelo y de acuíferos. Cabe destacar que tan sólo el 1% de agua dulce se encuentra en cuencas hidrográficas, arroyos y ríos, por lo que, para poder garantizar el abastecimiento de agua de la planta, se debe comprobar en primer lugar la presión hídrica del lugar y el Plan Hidrológico de las distintas cuencas, ya comentadas en el apartado de localización. Por tanto, la localización escogida permite abastecer el consumo de agua diario de la instalación. (82)

8.2.2. Disponibilidad de energía renovable

La demanda de energía de la planta debe cubrir las necesidades del electrolizador, la unidad de separación de aire, los requerimientos energéticos para el almacenamiento de hidrógeno, amoníaco y el ciclo de síntesis de este último. Como primera estimación, se han consultado diversas plantas de amoníaco verde a pequeña escala, entre ellas se encuentra la propuesta por Thyssenkrupp, en la que se estima que el consumo eléctrico de la planta ronda los 10 MWh/t_{NH₃}, tanto para la capacidad de 50 como de 300 t/día de amoníaco. Por tanto, teniendo en cuenta que la producción de amoníaco es de 50 t/día, el consumo eléctrico diario de la planta será de 500 MWh. Dado que la energía se calcula como la potencia multiplicada por el tiempo, la potencia necesaria para poder abastecer la planta se obtendrá al dividir los 500 MWh entre 24 horas (1 día), que resulta de 20,8 MW. El proyecto de esta compañía propone emplear dos turbinas de gas con una potencia eléctrica de 16 MW cada una, basada en la combustión de hidrógeno. (83)

Como se ha comentado anteriormente en el apartado de localización, Galicia presenta en torno a 7689 MW de potencia procedente de fuentes renovables, por lo que no existe problema de disponibilidad de energía eléctrica renovable.

8.2.3. Disponibilidad de servicios auxiliares

En base a los requerimientos del proceso, los servicios auxiliares que ha de disponer la planta serán:

- Vapor de baja presión, entre 1-2 bar empleado para calentar la corriente de agua a la entrada del electrolizador. Para estimar la cantidad de vapor de baja presión se considerará una temperatura de entrada de 135°C y una temperatura de salida de 120°C.

- *Chilled water*, para refrigerar por debajo de los 32°C que permite el agua de refrigeración, y para la que se toma como temperatura de entrada al intercambiador 7°C y una salida de 32°C.

- Propano, empleado en la licuación del amoníaco para separar la mezcla reaccionante del producto y cuyo rango de temperatura está entre los -40 y -6°C. Para poder refrigerar el propano tras ser calentado hasta -40°C es necesario incorporar ciclos de refrigeración basados en el principio de expandir para enfriar, tal y como se ha propuesto en la licuación de aire. Este refrigerante ha sido escogido frente a otros por su bajo precio en comparación con los refrigerantes sintéticos, su bajo índice GWP (Global-warming potential), y un elevado valor de desplazamiento facilita el diseño y el funcionamiento del intercambiador de calor.

- Aire comprimido. Aparte del aire comprimido empleado como materia prima del proceso, es necesario otra instalación de aire comprimido para el control de procesos, ya que se emplearán transmisores y actuadores neumáticos por ser estos más eficaces en la regulación de las válvulas de control y seguros.

- Agua empleada en el *off site* de la planta (oficinas, aseos, limpieza, taller, etc).

Todos estos servicios auxiliares son habituales en cualquier tipo de proceso químico industrial, por lo que no existe ningún problema de disponibilidad. Otro de los servicios claves en la planta es la electricidad mediante la cual se llevará a cabo la electrólisis. Dado que el objetivo de la planta es ser lo más neutra en carbono posible, para poder considerarse “verde” ha de garantizarse que la electricidad proceda de fuentes renovables como energía eólica, hidráulica o solar. Si bien es cierto que el polígono PLISAN dispone de líneas de alta, media y baja tensión, no se ha podido comprobar que toda la energía proceda de fuentes renovables, siendo lo más probable que esta sea una combinación entre distintas fuentes. Por eso, en caso de ser necesario se contratará energía exclusivamente de origen verde con empresas que ofrezcan este servicio, como puede ser Endesa, Nexus Energy, Feníe Energía. En concreto, la empresa Electricidad Condado de Salvaterra de Miño ofrece la instalación y contratación de energía 100% verde con Feníe Energía, mientras que Nexus Energía ya ha ofrecido su servicio a CEAGA (Vigo, Clúster de Empresas de Automoción de Galicia), garantizando que todas las empresas miembros del clúster estén suministradas por electricidad verde. (84) (85)

8.2.4. Disponibilidad de equipos y tecnología

El proceso de síntesis de amoníaco incluye tanto equipos frecuentes de la ingeniería química como otros más específicos. Entre los equipos más empleados en la industria química presentes en este proceso se encuentran bombas centrífugas, compresores, intercambiadores de calor, tanques de almacenamiento y otros equipos para la purificación de corrientes como adsorbedores o el sistema de purificación DEOXO, todos disponibles en el mercado. Por otra parte, la destilación criogénica del aire está totalmente estudiada y desarrollado a nivel comercial, siendo esta la tecnología más empleada para la obtención de nitrógeno. Algunas empresas comercializadoras de esta tecnología son Air Liquide y Ingersoll Rand. (86)

Actualmente, también existe una serie de empresas que proveen tecnologías necesarias para la electrólisis del agua alcalina como ThyssenKrupp, Ariema, IHT (Industrie Haute Technologie SA), con potencias adecuadas a la capacidad propuesta. En cuanto al reactor de síntesis de amoníaco, es necesario encontrar la mejor tecnología disponible que sea adecuada para la producción de amoníaco establecida. Por ello, se ha escogido a la empresa Casale como proveedor, dado que esta dispone de reactores para capacidades de entre 50 y 100 t/d de amoníaco, permitiendo una utilización de catalizador óptima con respecto a otras ofertas en el mercado. (87) (88)

8.2.5. Disponibilidad de mano de obra

En la localización escogida, como ya se ha comentado anteriormente en el apartado de emplazamiento, se cuenta con una serie de profesionales desde grados de formación profesional hasta másteres universitarios. Además, cabe destacar la existencia de cursos online o semipresenciales sobre hidrógeno verde como ser los que ofrecen la Escuela de Organización Industrial (EOI), TECPA, etc. El número de empleados se estimará en el Presupuesto, Documento V.

8.3. Viabilidad económica

La viabilidad económica del proyecto se presenta más adelante en detalle en el Documento V, correspondiente al presupuesto. Sin embargo, existen estudios de factibilidad para plantas de amoníaco verde a pequeña escala. En concreto, se ha tomado como referencia el *QNP Green Ammonia Project*, ya que la capacidad de producción de amoníaco verde es de 20.000 t/año, muy similar a la capacidad propuesta en este trabajo (16.500 t/año), que será producido a partir de 3.500 t/año de hidrógeno verde. (89)

En este estudio se concluye que el proyecto sólo es viable económicamente si se cuenta con el apoyo del gobierno, a través de subvenciones, y mediante préstamos en condiciones favorables. Esto se debe a los elevados costes de inversión y costes operativos, especialmente debido a los costes de la electricidad. (89)

El coste de capital del proyecto QNP oscila entre los 150 y 200 millones de dólares. En la Figura 23, se presenta la distribución de los costes de inversión en las distintas secciones implicadas en la planta. (89)

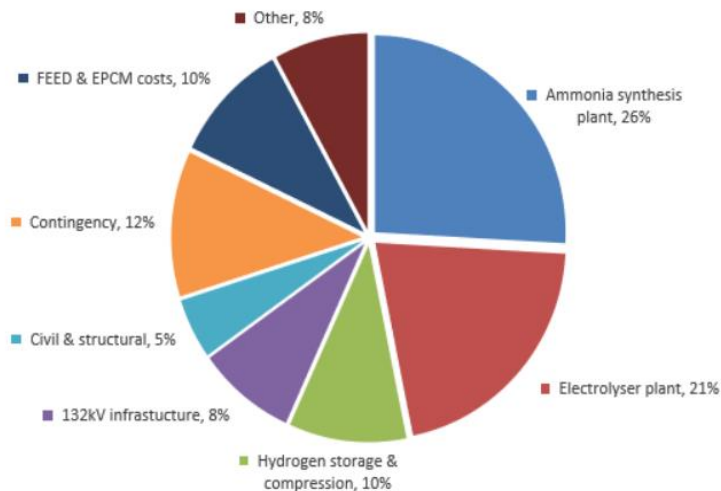


Figura 23. Distribución de los costes de capital del proyecto QNP para la planta de amoníaco verde de 20.000 t/año (89)

Como se puede observar, los costes de capital están representados principalmente por la planta de electrólisis, la planta de síntesis de amoníaco y los equipos asociados al almacenamiento y compresión de hidrógeno. Por otro lado, los costes operativos de la planta ascienden hasta 15 millones de dólares anuales. (89)

Del análisis de viabilidad económica del proyecto consultado se han sacado una serie de conclusiones: (89)

- El estudio de viabilidad concluye que el proyecto es técnicamente viable, sin embargo, requiere de un importante apoyo en forma de subvenciones y préstamos para que sea comercialmente viable.
- A pesar de que las plantas de amoníaco verde son menos complejas que las convencionales, la complejidad no reduce significativamente el coste.

- Los costes de la planta de amoníaco verde todavía no son equiparables a las de una planta convencional.
- Los costes de electricidad deben disminuir o el impuesto sobre carbono debe aumentar para que los costes de los proyectos verdes sean equiparables a los convencionales.

Como ya se ha comentado en la localización de la planta, existen una serie de subvenciones y ayudas concedidas por la Unión Europea, el Estado e incluso la Xunta de Galicia, para facilitar la transición verde, por lo que, tal y como se comprobará en el apartado de Presupuesto, Documento V, el proyecto resulta rentable económicamente.

8.4. Seguridad en el proceso

Otro aspecto que se debe contemplar en la viabilidad de un proyecto, aparte de los ya mencionados, es la seguridad del proceso. En este proceso, las sustancias químicas que se manejan son el hidrógeno, el nitrógeno y el amoníaco.

El hidrógeno se considera un gas no tóxico, pero extremadamente inflamable, además de poseer una densidad muy baja, por lo que en caso de fuga se difunde muy rápido. Por otro lado, el nitrógeno, a pesar de no considerarse tóxico, puede llegar a causar asfixia por desplazamiento del oxígeno. Al igual que el hidrógeno, el amoníaco también es inflamable, y además es un gas tóxico que puede causar quemaduras. Dado que se trabaja con sustancias químicas que presentan cierta peligrosidad, es necesario tomar una serie de medidas que garanticen la prevención frente al riesgo de explosión, así como se requiere implementar sistemas de detección de fugas, especialmente para el amoníaco por ser perjudicial para la salud y el medio acuático, etc. (90)

Las condiciones de operación del proceso llegan a ser severas en algunos casos. Cabe destacar las bajas temperaturas que se alcanzan en la columna de destilación criogénica, la elevada temperatura en el reactor de síntesis, próxima a los 500°C, y la presión a la que se lleva a cabo la reacción, que, para el catalizador escogido (indicado en los cálculos justificativos del reactor, Anexo II) ronda las 100 atm. Por tanto, la selección de los materiales de los equipos, los sistemas de control y los sistemas de seguridad, como válvulas de alivio, aislantes de equipos, etc, juegan un papel fundamental y deben realizarse simultáneamente a la hora de diseñar los equipos y no de forma independiente.

En el apartado correspondiente a Seguridad, se indica más en profundidad la clasificación de las sustancias en base a la normativa vigente, su compatibilidad, las condiciones de almacenamiento, etc, así como se presentan las medidas que se deben tomar para prevenir accidentes.

8.5. Análisis de factores externos

Uno de los factores externos más importantes a tener en cuenta para que el proyecto sea viable es la localización de la planta, ya que esta debe ofrecer buenas comunicaciones, especialmente teniendo en cuenta que con esta propuesta se busca reforzar el mercado local en Galicia y el norte de Portugal. Además, para el emplazamiento de la planta se ha tenido en cuenta la competencia en el negocio de amoníaco a nivel nacional y que tanto

como Galicia y Portugal son importadores, siendo este último el mayor importador de amoníaco de España.

Por otro lado, dado que la producción de amoníaco no está destinada principalmente al consumo de fertilizantes, si no a otros usos industriales como la fabricación de productos de limpieza, sellantes, disolventes, etc, se ha decidido una capacidad de producción relativamente baja en comparación con la producción de amoníaco de Fertiberia, pero que en base a datos de consumo de este tipo de industrias se considera suficiente para abastecer el mercado.

En base a lo mencionado en el apartado de viabilidad económica, se han de tener en cuenta todas las ayudas posibles para poder llevar a cabo el proyecto, garantizando así su viabilidad económica. Aparte, es necesario consultar la legislación vigente en relación con el diseño y construcción de equipos, infraestructuras, almacenamiento de las sustancias químicas, instalaciones eléctricas y otras, comentadas en el apartado *LEGISLACIÓN APLICABLE, REGLAMENTOS Y CÓDIGOS*, sobre legislación, normas, referencias y códigos de diseño.

9. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

9.1. Descripción detallada del proceso

9.1.1. Sección 100

Para poder licuar el aire se ha decidido emplear el proceso Linde-Claude que combina el proceso Linde y el proceso Claude en uno solo. El proceso Linde está basado en una compresión isoterma seguida de un enfriamiento a presión constante y una expansión isoentálpica que permite obtener una fracción líquida y otra vapor, sin embargo, la eficiencia que presenta el proceso es muy baja y requiere operar a presiones muy elevadas para poder licuar el aire. Por otro lado, el proceso Claude propone reemplazar la expansión isoentálpica del proceso Linde por una turbina consiguiendo así una mayor fracción licuada que en el caso del proceso Linde. Mediante este último proceso se consiguió reducir las presiones de operación del proceso Linde y aumentar la eficiencia energética. Como inconveniente de la implantación de este proceso surgieron problemas asociados a la erosión en la expansión debido a las gotas de aire líquido condensado. Para solucionar los problemas que ambos procesos suponen se combinaron los dos procesos dando lugar al proceso Linde-Claude que se caracteriza por integrar lo siguiente de cada proceso: (91)

- Válvula isoentálpica: empleada en el proceso para generar la fase líquida mediante la expansión de la corriente ya enfriada
- Máquina expansora: empleada como generador de frío del proceso

De esta manera, mediante integraciones energéticas se enfría el aire con parte del mismo (corriente de bypass) que es expandido mediante un expansor llegándolo enfriar lo suficiente, pero sin provocar la licuefacción en la turbina. A continuación, el gas que se enfría en contracorriente en un intercambiador de calor con el aire expandido es

expandido en la válvula isoentálpica provocando así la licuefacción del aire. En la Figura 24, se presenta el esquema del proceso: (91)

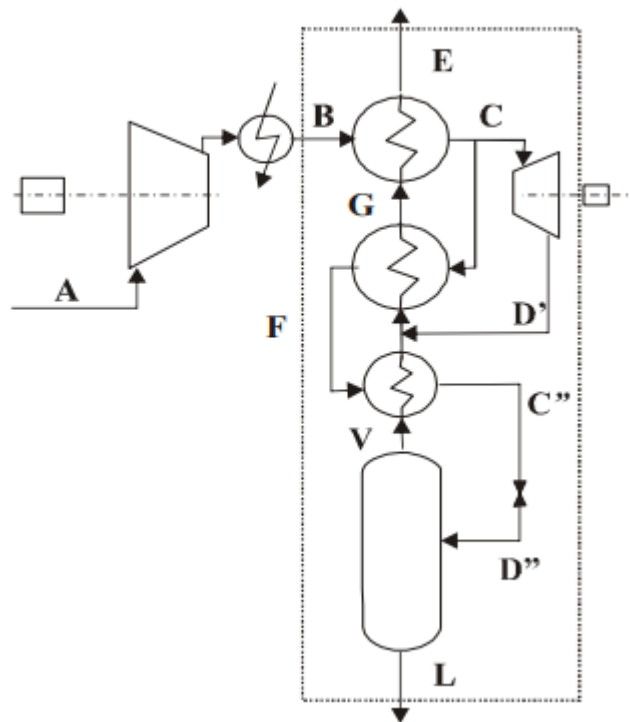


Figura 24. Esquema del proceso Linde-Claude (91)

El bypass realizado de la corriente C que entra en la turbina mostrada en la Figura 24 suele ser del 50 al 60%, mientras que la presión a la cual se lleva la corriente de entrada (A) ronda los 45 bar. Tanto la presión de salida de la turbina como de la válvula son característicos de cada proceso en función de los requerimientos energéticos que se precisen. (91)

Se comienza captando aire (corriente 1) filtrándola para eliminar posibles impurezas en forma de partículas en el filtro FT-101 antes de comprimirla hasta los 7,5 bar en el compresor C-101, refrigerándolo con el intercambiador E-101 empleando *chilled water* (agua enfriada) hasta los 25 °C. En el tanque V-101 equipado con un *demister* para retirar parte del agua que sale por la corriente 6 mientras que el aire restante (corriente 5) entra a la torre de secado de aire (T-101 A/B) con zeolitas para retirar el agua restante. La cantidad de agua a la salida de las zeolitas será muy baja, por lo que se tomará como nula en la corriente 7.

Posteriormente se mezcla con la corriente de aire recirculado (corriente 24) obteniendo la corriente 8 que será comprimida hasta 45,2 bar en el compresor C-102. Se refrigerará con el oxígeno de la salida de la torre de destilación en el intercambiador E-102 que será utilizado como gas de limpieza en los equipos con zeolitas. Posteriormente se refrigera la corriente 10 hasta los 25 °C en el intercambiador E-103 antes de entrar a los intercambiadores de integración energética.

En el intercambiador E-104 se enfriará la corriente 11 hasta obtener la corriente 12 a -5,6 °C, que será dividida en las corrientes 13 y 16 (un 40 y un 60% respectivamente). La corriente 13 se introducirá en el intercambiador de calor E-105 para obtener la corriente 14 a -137,88 °C empleando el aire de recirculación. La corriente 14 se expandirá en la válvula VLV-101 hasta 6,5 bar para introducirlo en el tanque de licuefacción V-102 del cual saldrá una corriente gaseosa (corriente 18) y una corriente líquida (corriente 25).

La corriente gaseosa se expande en la válvula VLV-102 hasta 4,5 bar (corriente 19) para mezclarlo con la corriente 17 que ha sido expandido en la turbina TUR-101 hasta la misma presión, combinándose en la corriente 20 a -143,98 °C. La corriente 20 es la que se usa en E-105 para enfriar el aire de entrada y a continuación (corriente 21) en el intercambiador E-104 con la misma función alcanzando los 30 °C (corriente 22). Esta corriente será comprimida (C-103) y enfriada (E-106) mediante agua enfriada hasta una corriente con 25 °C y 7,1 bar que se unirá con la corriente 7.

La corriente 25 se introduce en la torre de destilación criogénica T-102 de la cual saldrá nitrógeno gaseoso por cabezas (corriente 26) siendo una parte recirculada como reflujo. Este reflujo se condensará empleando la corriente de salida de colas tras ser expandida en la válvula VLV-103. La corriente de oxígeno usada para enfriar (corriente 29) será empleada para refrigerar también en el intercambiador E-102, resultando la corriente 30 que será usada en la limpieza de las torres de secado de la planta.

9.1.2. Sección 200

La sección 200 consistirá en la obtención de hidrógeno a partir de agua, obteniéndose con una pureza que se asumen del 100%, ya que la concentración de oxígeno y de agua sería de menor a 2 ppm.

El agua de entrada a 1 bar, que vendrá de la depuradora cercana (corriente 31) se bombeará con la bomba P-201 A/B hasta los 4 bar para posteriormente introducirse en el desmineralizador DES-201 en el cual se retirarán los iones (Na^+ , K^+ , Cl^- , etc.) del agua para obtener un agua lo más pura posible con el fin de evitar impurezas a la entrada del electrolizador. Se calentará la corriente de salidas del desmineralizador (E-201) hasta la temperatura de funcionamiento del electrolizador (80 °C en la corriente 34) y se introducirá en el electrolizador ELE-201 del cual se obtendrán dos corrientes.

La corriente 35 contendrá hidrógeno y una pequeña cantidad de agua, se comprimirá hasta los 6,7 bar en el compresor C-201 y se enfriará hasta los 25 °C en el intercambiador E-202 empleando agua enfriada (corriente 37). A continuación, para retirar el agua se empleará una torre de secado de aire con zeolitas T-201 A/B dando lugar a la corriente 38 con hidrógeno que se asumirá puro.

La corriente de oxígeno (corriente 39) se enfriará hasta los 25 °C empleando agua enfriada en el intercambiador E-203 para luego retirar el agua en la torre de secado T-202 A/B dando lugar a la corriente 41 de oxígeno puro que podrá ser almacenado o emitido a la atmósfera según se considere su venta o no.

9.1.3. Sección 300

La sección 300 se corresponde con el ciclo de síntesis del amoníaco, el ciclo Haber-Bosch convencional, modificando las condiciones de operación convencionales por las seleccionadas debido al tipo de catalizador empleado.

Se mezclan las corrientes de nitrógeno e hidrógeno gas provenientes de la sección 100 y 200 respectivamente, en la corriente 42, que será comprimida en el compresor C-301 hasta los 100,3 bar (corriente 43) para mezclarlo con la corriente de recirculación 54 dando lugar a la corriente 44. Esta corriente se calentará con la corriente de salida del reactor (corriente 46) que está a 469,59 °C en el intercambiador E-301 antes de entrar al reactor R-301.

Tras recuperar su energía en el intercambiador E-301 la corriente 47 se introduce en el intercambiador E-302 para calentar la corriente de recirculación dando lugar a la corriente 48 que se introducirá en el intercambiador E-303 para enfriarse con la corriente de almacenamiento de amoníaco. Finalmente, para que la corriente alcance los -20 °C (corriente 50) se introduce en el intercambiador E-304 que emplea propano como utilidad.

La corriente 50 se introduce en el tanque flash V-301 del cual se obtiene una corriente gaseosa (corriente 51) compuesta principalmente de hidrógeno y nitrógeno que será la corriente de recirculación y una corriente líquida de amoníaco con pureza comercial (corriente 56) la cual será expandida hasta la presión de almacenamiento en la turbina TUR-301 y será almacenada (corriente 58).

La corriente de recirculación tras enfriar la salida del reactor R-301 en el intercambiador E-302 se dividirá en una corriente de purga que será enviada al sistema de tratamiento de gases (corriente 55) y en otra que irá al compresor C-302, en el cual se comprimirá hasta 100,3 bar.

9.2. Descripción de la instalación

Aparte de las unidades del proceso, se deben tener en cuenta las construcciones auxiliares y servicios requeridos como los parques de tanques y almacenes para el almacenamiento de las materias primas, los talleres de mantenimiento, laboratorios destinados al control de calidad del

Aparte de las unidades del proceso, se deben tener en cuenta las construcciones auxiliares y servicios requeridos como los parques de tanques y almacenes para el almacenamiento de las materias primas, los talleres de mantenimiento, laboratorios destinados al control de calidad del proceso, la sala de control de procesos, las estaciones de bomberos y servicios auxiliares asociados con la instalación de aire comprimido, generación de electricidad, refrigeración, oficinas para la administración, plazas de aparcamiento, etc. A continuación, se describe brevemente las distintas áreas que componen la planta. (92)

9.2.1. Área de almacenamiento y parques de tanques

Dado que las materias primas del proceso son el aire y el agua captada que proporciona el polígono no es necesario un espacio cerrado para almacenar las materias primas. Sin embargo, si se debe disponer de un área para el almacenamiento del amoníaco producido. Dado que el amoníaco será almacenado a una presión de 18 bar y estará expuesto a la temperatura ambiente del lugar, no es necesario contar con un espacio totalmente cerrado y aislado, por lo que los tanques de almacenamiento estarán al aire libre constituyendo el parque de tanques.

9.2.2. Taller de mantenimiento, laboratorios de control de calidad y salas de control

En el proceso existen numerosos equipos asociados con requerimientos energéticos como los intercambiadores, compresores, bombas y turbinas. En el caso de los intercambiadores de calor es necesario realizar una limpieza de tubos, mientras que para los compresores se requiere el cambio de aceite, del filtro de aire y comprobar el correcto funcionamiento de las válvulas de control asociadas. Por otro lado, también se ha de realizar el mantenimiento del reactor para la limpieza del intercambiador y de las paredes perforadas, así como de la torre de destilación criogénica entre otros, por lo que en este taller se dispondrá de las herramientas necesarias para poder realizar las tareas de mantenimiento.

Todo proceso necesita comprobar que el producto final cumple con las especificaciones exigidas. Es por ello, que se necesita de un laboratorio de control que supervise el producto final atendiendo principalmente a la composición del mismo. Cabe destacar que en este caso el amoníaco, al no estar dirigidas a aplicaciones donde se exige un grado de pureza determinado como puede ser el sector farmacéutico, la composición del producto no ha de ser tan estricta pudiendo permitir una ligera variación entre las centenas de 99,80-99,85. Sin embargo, si ha de controlarse que esta no sea inferior a la pureza especificada, puesto que si bien existe amoníaco de grado comercial del 99,7%, esto afectaría a las condiciones de almacenamiento del amoníaco, ya que las trazas de nitrógeno, hidrógeno y oxígeno afectan a la temperatura de ebullición del compuesto, por lo que una menor pureza indicaría mayores requisitos energéticos para mantener el amoníaco licuado. Por otro lado, es necesario determinar las propiedades del producto mediante diversas pruebas, ya que cada fabricante ha de elaborar sus propias fichas de seguridad.

Para poder controlar las variables claves del proceso como la temperatura y la presión en cada uno de los equipos se necesita una sala de control que permita monitorizar el proceso, por lo que está dispondrá de los equipos informáticos necesarios, así como, paneles de visualización de las variables claves del proceso.

9.2.3. Estaciones de bomberos y otros servicios de emergencia

Dado que la planta trabaja con condiciones de operación extremas, especialmente en el reactor, es necesaria una estación contra incendios que disponga de medios generales

contra la lucha contra incendios como una estación de bombeo de agua, espuma, extintores, protección personal, que permita actuar lo más rápido posible.

9.2.4. Área de servicios auxiliares

Esta área hace referencia al espacio dedicado a los servicios auxiliares empleados en la operación y que incluyen la electricidad, el agua de refrigeración, el aire comprimido, los ciclos de refrigeración del propano y la refrigeración de la *chilled water*, y el horno necesario para calentar la corriente de entrada al reactor en la puesta en marcha, que después será sustituido por la integración energética propuesta. Dado que el amoníaco producido es ‘verde’, el horno empleado en la puesta en marcha ha de ser eléctrico para evitar la combustión de combustibles como fuel gas que conllevan emisiones.

9.2.5. Área de proceso

El área de proceso abarca todos los equipos correspondientes a las secciones que integran el proceso y que se describen en el apartado *Descripción de equipos*. Esta ha de ser la primera área que se disponga en el plano y ha de permitir la circulación de la materia prima hasta al almacenamiento del producto minimizando lo máximo posible la longitud de las tuberías que conectan los equipos y respetando las distancias de seguridad. La ubicación de los equipos del proceso determinará los caminos de acceso a cada instalación para su operación y mantenimiento. (92)

9.2.6. Área de servicios

En esta área se incluyen las oficinas para la administración y la gestión de la empresa, aseos, comedor, vestuarios y otras salas destinadas a los trabajadores de la planta.

9.2.7. Área de aparcamiento

El área de aparcamiento está destinada al estacionamiento de los vehículos de los trabajadores de la planta, así como otro personal autorizado al acceso de la misma.

9.2.8. Área de carga y descarga

Para poder trasladar el amoníaco o abastecerse de nuevo adsorbente o catalizador, se debe incluir una zona dedicada exclusivamente a la entrada, estacionamiento y salida de camiones relacionados con el transporte. Además, esta ha de incorporar un monitor de puesta a tierra de vehículos para minimizar cualquier fuente de ignición que provoque la inflamación de los productos. El área de carga y descarga, si es posible, ha de situarse próxima al área de almacenamiento para minimizar el tiempo en la operación.

9.2.9. Área de tratamiento de aguas

Las corrientes de residuos acuosos abarcan tres tipos de corrientes diferentes: aguas del proceso, agua residual generada durante la limpieza de los equipos y derrames. En este proceso las corrientes de agua residuales que se generan son la correspondiente a la deshumidificación del aire, las trazas de agua que salen con los productos obtenidos en el

electrolizador que luego son separados mediante las zeolitas y la corriente de agua residual correspondiente al tratamiento de la purga para retirar el amoníaco de la mezcla gaseosa. Además, han de tenerse en cuenta las corrientes asociadas a la limpieza de los intercambiadores de calor y del reactor si están contaminadas con amoníaco, así como las muestras tomadas del producto necesarias para el control de calidad también han de gestionarse adecuadamente. Es por ello, que se recomienda recoger las corrientes residuales líquidas de la planta, no sólo del proceso, sino también del agua de lluvia, las bocas de incendio y de los equipos de lavado para ser tratadas adecuadamente.

9.3. Descripción de equipos

A continuación, se hará una breve descripción de los equipos incluidos en las distintas secciones del proceso de producción de amoníaco a partir de agua y aire.

9.3.1. Equipos de la sección 100

En este apartado se describen los equipos pertenecientes a la sección 100.

9.3.1.1. Filtro FT-101

El filtro electrostático FT-101 permite retirar de la corriente de aire a la entrada las impurezas del aire, ya sean partículas o polvos, para que los equipos posteriores no sufran erosiones ni problemas de funcionamiento debidos a estos contaminantes.

9.3.1.2. Compresor C-101

Se trata de un compresor reciprocante o tipo pistón que se encargará de impulsar el aire de entrada procedente de la atmósfera aumentando la presión desde 1 bar hasta 7,5 bar.

9.3.1.3. Intercambiador de calor E-101

Este intercambiador tiene como función reducir la temperatura aumentada por el compresor C-101 para que la torre de secado T-101 A/B funcione en condiciones óptimas. La corriente de entrada estará a 139,85 °C mientras que la de salida estará a 25 °C. Se empleará agua enfriada como refrigerante.

9.3.1.4. Tanque de retirado de humedad V-101

En este tanque se separará la humedad en forma de gotas para reducir la cantidad de zeolitas necesarias a continuación. Retirando un caudal de 0,96 kmol/h de agua.

9.3.1.5. Torre de secado T-101 A/B

Esta torre que emplea zeolitas será empleada para retirar la humedad y el CO₂ del ambiente, para evitar la corrosión y la contaminación en los equipos a continuación. Se retira un caudal de 8 kg/h. Constará de 2 torres que se turnarán en ciclos de absorción y desorción o limpieza cada 6 horas y serán la T-201 A y T-201 B.

9.3.1.6. Compresor C-102

Se empleará este compresor para aumentar la presión para poder realizar el proceso Linde-Claude. Se aumentará la presión del aire desde 7,1 bar a 45,2 bar.

9.3.1.7. Intercambiador de calor E-102

Se emplea para integración energética, se enfriará la corriente de aire desde 180 °C hasta 170 °C empleando la corriente de colas de la torre de destilación criogénica T-102 después de la primera integración. Esta última corriente aumenta de 29,29 °C hasta 160 °C y será empleada como gas de limpieza de las zeolitas. Su limpieza se realizará con el gas de limpieza el cual se obtiene más adelante.

9.3.1.8. Intercambiador de calor E-103

En este intercambiador de calor se empleará para reducir la temperatura de salida del intercambiador E-102 hasta los 32 °C antes de la integración energética posterior.

9.3.1.9. Intercambiador de calor E-104

En este intercambiador de calor enfriará la corriente de aire empleando la recirculación de aire salida del intercambiador E-105. Se enfriará la corriente principal de 32 a -5,6 °C, mientras de la corriente de recirculación se calienta de -17 a 30 °C.

9.3.1.10. Intercambiador de calor E-105

El segundo intercambiador de la integración energética disminuye la temperatura de corriente principal, después de ser dividida, de -5,6 a -137,8 °C, mientras que la corriente de recirculación aumenta desde -143,98 a -17 °C.

9.3.1.11. Válvula de expansión VLV-101

La válvula de expansión isoentálpica hace descender la presión de 44,4 bar a 6,5 bar y la temperatura de -137,8 a -173,5 °C.

9.3.1.12. Tanque de licuefacción V-102

En este tanque se separan la fase líquida y gaseosa del aire, recirculando la fase gaseosa y obteniendo la fase líquida por colas.

9.3.1.13. Turbina TUR-101

El turboexpansor servirá para reducir la presión desde 44,6 a 4,5 bar recuperando energía en el proceso. El aire empleado es una parte del enfriado en el intercambiador E-104 y el fluido será enviado a la recirculación de aire. Estará equipado con un *demister* para evitar que gotas de líquido sean arrastradas por el gas.

9.3.1.14. Válvula VLV-102

Esta válvula de expansión reducirá la presión de la corriente a la salida del tanque V-102 desde 6,5 bar a 4,5 bar. Esto también reducirá la temperatura desde -173,5 °C hasta -174,9 °C.

9.3.1.15. Compresor C-103

En este compresor se comprimirá el aire de recirculación tras las integraciones energéticas aumentando la presión desde 4,1 hasta 7,1 bar.

9.3.1.16. Intercambiador de calor E-106

En este intercambiador se empleará agua enfriada para bajar la temperatura de la corriente a la salida del compresor C-103, desde 81,59 °C hasta 32 °C.

9.3.1.17. Torre de destilación criogénica T-102

En la torre de destilación se separará la corriente de aire licuado en una corriente de nitrógeno que se asumirá como puro y tendrá un caudal de 65,2 kmol/h que saldrá por cabezas en fase gas a una temperatura de -175,8 y de la cual existirá un reflujo. Por colas saldrá una corriente de oxígeno con una cierta cantidad de nitrógeno con un caudal total de 37,97 kmol/h y una temperatura de -169 °C.

9.3.1.18. Válvula VLV-103

La válvula sirve para expandir, y por lo tanto enfriar la corriente de colas de la torre de destilación T-102. Se expande hasta una presión próxima a 2,4 bar desde la presión de salida de la torre de destilación (6,6 bar).

9.3.1.19. Ciclo de refrigeración CR-101

En este ciclo de refrigeración para condensar el reflujo de la torre de destilación criogénica se empleará un conjunto de compresores y turbinas (turboexpansores) e intercambiadores necesarios para, que empleando la corriente de colas de la torre T-102, se puede licuar el nitrógeno de la recirculación. Se asume que el nitrógeno mantendrá la temperatura de la entrada al ciclo (-175,8 °C) mientras que el oxígeno subirá su temperatura absorbiendo la energía necesaria para licuar el reflujo, alcanzando los 29,29 °C.

9.3.2. Equipos de la sección 200

9.3.2.1. Bomba P-201 A/B

Se trata de una bomba centrífuga que se encargará de impulsar el agua de entrada procedente de la captación del río Miño aumentando la presión desde 1 bar hasta 4 bar. Con un flujo de 197,2 kmol/h de agua. Se consta de 2 bombas en paralelo A y B para que ante una avería o similar pueda seguir funcionando la planta con la otra bomba.

9.3.2.2. Desmineralizador DES-201

En este equipo se retirarán los distintos iones presentes en el agua de forma que esta entre lo más pura posible a los posteriores equipos reduciendo las deposiciones de ellos y su acumulación en el electrolizador, lo cual modificaría las condiciones de operación del mismo.

9.3.2.3. Intercambiador de calor E-201

En este intercambiador se empleará vapor de baja presión para aumentar la temperatura del agua desde la temperatura ambiente (15 °C) de la entrada hasta 80 °C necesarios para la operación del electrolizador.

9.3.2.4. Electrolizador ELE-201

Este equipo será empleado para producir una corriente de hidrógeno con un caudal de 196,69 kmol/h del cual 1 kmol/h es de agua. También se obtiene un caudal de oxígeno de 98,12 kmol/h del cual 0,92 kmol/h son de agua.

9.3.2.5. Compresor C-201

El compresor permite aumentar la presión de la corriente de hidrógeno previa entrada a la torre de secado para mejorar su efectividad y también igual la presión de la corriente con la que se mezclará a continuación. Se aumenta la presión desde 3,2 hasta 6,7 bar.

9.3.2.6. Intercambiador de calor E-202

Este intercambiador de calor enfriará la corriente de salida del compresor C-201 para mejorar la efectividad de la torre de secado de gas T-201 A/B. Se enfriará hasta 25 °C empleando como utilidad agua enfriada.

9.3.2.7. Torre de secado de gas T-201 A/B

Permite retirar el agua de la corriente de hidrógeno gaseoso que será empleada a continuación, extrayendo un caudal de agua de 18,44 kg/h. Se asumirá que la corriente de salida de hidrógeno es pura. Se empleará para la limpieza gas de limpieza obtenido como se mencionó anteriormente. Constará de 2 torres que se turnarán en ciclos de absorción y desorción o limpieza cada 6 horas y serán la T-201 A y T-201 B.

9.3.2.8. Intercambiador de calor E-203

Permite enfriar la corriente de oxígeno de salida del electrolizador desde 80 °C hasta 25 °C para mejorar la eficiencia de la torre de secado de gas T-202 A/B. Se empleará como utilidad agua enfriada.

9.3.2.9. Torre de secado de gas T-202 A/B

Permite retirar el agua de la corriente de oxígeno gaseoso que será almacenada a continuación, extrayendo un caudal de agua de 9,25 kg /h. Se asumirá que la corriente de salida de oxígeno es pura. Se empleará para la limpieza gas de limpieza obtenido como se mencionó anteriormente. Constará de 2 torres que se turnarán en ciclos de absorción y desorción o limpieza cada 6 horas y serán la T-201 A y T-201 B.

9.3.3. Equipos de la sección 300

9.3.3.1. Compresor C-301

Se usa para comprimir las materias primas provenientes de las secciones anteriores desde 6,4 bar hasta 100,3 bar.

9.3.3.2. Intercambiador E-301

En este intercambiador se recuperará la energía de la corriente de salida del reactor R-301 para aumentar la temperatura de la corriente de entrada. Se aumenta la temperatura de la corriente de entrada desde 172,93 a 317,55 °C, mientras que se reduce la temperatura de la corriente de salida de 469,59 a 321,61 °C.

9.3.3.3. Reactor de síntesis R-301

Reactor de síntesis de amoníaco que empleará el nitrógeno y el hidrógeno para obtener el amoníaco, que será el producto final, mediante el proceso Haber-Bosch. La cinética de reacción de equilibrio es dependiente del catalizador seleccionado (wüstita). Se opera a una temperatura entre 400 °C y 500 °C y se obtiene un caudal 1240,64 kmol/h de los cuales 149,96 kmol/h.

9.3.3.4. Intercambiador de calor E-302

Este intercambiador permite enfriar más la corriente de salida del reactor R-301 desde 321,61 hasta 158,85 °C. Para ello se empleará la corriente de recirculación que se calienta desde -20 a 170 °C.

9.3.3.5. Intercambiador de calor E-303

Este intercambiador se emplea para aprovechar la corriente de almacenamiento de amoníaco. Se disminuye la temperatura de la corriente de salida del reactor enfriada anteriormente desde 158,85 hasta 144 °C, mientras que la corriente de almacenamiento asciende desde -117,06 a 15 °C.

9.3.3.6. Intercambiador de calor E-304

En este intercambiador enfría la corriente salida del reactor hasta la temperatura necesaria para la separación efectiva del amoníaco obteniendo la pureza requerida comercialmente, empleando como utilidad propano proveniente de su ciclo de refrigeración. Se enfría la corriente desde 144 hasta -20 °C.

9.3.3.7. Tanque flash V-301

En el se separará el amoníaco licuado de los gases que serán recirculados obteniendo un caudal de salida de amoníaco licuado de 122,52 kmol/h. Está equipado con un *demister* para reducir la posibilidad de que gotas de líquido salgan con el gas.

9.3.3.8. Compresor de recirculación C-302

Permite comprimir de la corriente de recirculación para poder mezclarla con la entrada al reactor. Se aumenta la presión desde 98,9 bar a 100,3 bar.

10. CONTROL E INSTRUMENTACIÓN

En las plantas químicas existen un gran número de equipos, cada cual con sus características diversas, como bombas, compresores, intercambiadores de calor, columnas de destilación, adsorbedores, reactores, y un largo etc. Se trata de que todos ellos desarrollen un funcionamiento lógico y sistemático de forma que el objetivo

principal de la planta química se cumpla en base a ciertas medidas de seguridad y respecto hacia el medio ambiente. (93)

Para lograr esto, las instalaciones habrán de satisfacer todos los requerimientos en materia de seguridad, especificaciones medioambientales y las especificaciones del producto o productos, como puede ser la pureza del compuesto a producir. Puesto que a lo largo del funcionamiento de los equipos se producen pequeñas perturbaciones de diversa índole que afecten al proceso, dificultando la tarea de mantener los requerimientos anteriormente nombrados, es necesario el empleo de un sistema de control capaz de vigilar continuamente el proceso e interviniendo en caso de ser necesario.

El sistema de control ha de satisfacer tres necesidades básicas: contrarrestar la influencia de las perturbaciones externas, garantizar la estabilidad del proceso y optimizar el rendimiento de la planta. Debido a lo descrito anteriormente, se planteará a continuación un sistema de control para la planta de producción de amoníaco verde, que se complementará con el diagrama de tuberías e instrumentación (*P&I*) recogido en el documento de Planos en el cual se muestra su esquema detallado.

10.1. Introducción

El sistema control de procesos puede ser descrito como el conjunto de equipos mediante los cuales se pueden mantener las condiciones deseadas de un sistema, mediante el ajuste de ciertas variables (variables manipuladas) de dicho sistema, pudiendo ser de forma manual o automática. Cuando el sistema de control se encuentra abierto o en modo manual, el controlador no está conectado al proceso, por lo tanto, no se está llevando a cabo la acción correctora que este ha calculado. En esta situación el operador puede actuar manualmente sobre el proceso, forzando un valor a la salida del controlador que será recibido por el elemento final de control. (94)

El caso contrario sería cuando el sistema de control está cerrado o en automático, estando en este caso el controlador conectado al resto del sistema, de forma que su acción correctora se está aplicando al elemento de control final. Esta acción correctora la calcula el controlador a través de la información que obtiene a través de los transmisores que comunican la información de los distintos sistemas de medida en el proceso y empleando la ley de control implementada. (94)

La variable controlada es aquella cuyo valor se desea mantener en el valor preestablecido. El valor de esta variable es medido a través de un equipo de medida que comunica la información al controlador mediante un transmisor. El valor deseado se denomina punto de consigna o referencia (en inglés *set point*) y se mantiene normalmente constante a lo largo de la operación salvo en casos puntuales como los arranques y parados o cuando se quiere realizar un aumento de producción. (94)

Para llevar la variable controlada al punto de consigna se utiliza la variable manipulada. La variable manipulada es otra variable del proceso a la cual se le aplica la acción correctora dictada por el controlador para compensar las perturbaciones en la variable controlada. Puesto que normalmente el elemento final de control es una válvula

(para regular caudales) la variable manipulada sería el porcentaje de apertura de esta válvula.

Las perturbaciones son modificaciones en variables externas o internas del proceso que provocan cambios en la variable controlada. Estas perturbaciones no se pueden prever ni controlar, puesto que vienen impuestas con el ambiente que rodea al equipo. De forma normal pueden distinguirse tres tipos de perturbaciones: (95)

- Perturbaciones de entrada: variaciones en la masa o energía de entrada del proceso.
- Perturbaciones de carga: otras alteraciones de alejan a la variable controlada del valor consigna.
- Perturbaciones del punto de consigna: modificaciones en el punto de consigna, dando lugar a que el proceso tenga que adaptarse a este nuevo valor requerido.

Cabe destacar los distintos elementos que forman parte de los sistemas de control y que forman los lazos de control. De forma general se tienen en cuenta 5 elementos básicos, aunque en algunos casos algunos de ellos puede aparecer agrupados. (94)

El primer elemento de control sería el sensor, el cual es el elemento encargado de medir el valor de variable controlada o variables perturbación u otras variables a partir de las cuales se pueden obtener valores de otras variables que no pueden ser medidas o que resultan más complejas de medir y por lo tanto más costosas. Su funcionamiento consiste en la medición de un fenómeno físico el cual puede relacionarse con la variable a medir. Por ejemplo, destacan termopares o termorresistencias para la medición de temperatura, placas de orificio para la medición de caudales y cromatógrafos para la medición de composiciones entre muchos otros.

A continuación, el transmisor o transductor es el equipo encargado de transformar la magnitud del efecto físico producido en el sensor a una señal eléctrica, neumática o digital que puede ser transmitida hasta el controlador e interpretada por este sin haber sido modificada a lo largo del recorrido. De forma general, se suele emplear una señal eléctrica entre 4 y 20 mA o una señal neumática entre 3 y 15 psi.

El controlador es el equipo encargado de calcular, mediante la señal recibida desde el transmisor y en base al algoritmo de control programado, una acción correctora frente a las perturbaciones que sucedan. Este cálculo, que se trata de un valor determinado, se transmite al elemento final de control mediante una señal de forma similar al caso anterior.

El elemento final de control recibe la señal del controlador, la cual le indicará como debe actuar sobre la variable manipulada. El equipo más empleado como elemento de control la válvula, aunque se pueden emplear otros equipos de control como variadores de velocidad.

Finalmente, el proceso es el sistema en el cual ocurren las operaciones químicas y físicas y del cual se está realizando control, conformado por el equipo material como bombas, tanques, reactores, etc. Suelen ser de acción directa.

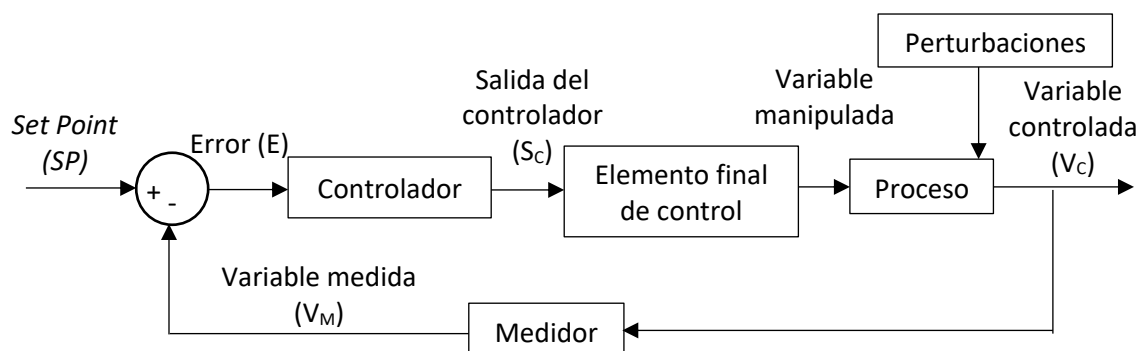
Cada uno de estos elementos de control pueden ser de acción directa o inversa, siendo la acción directa la más común en todos los casos, sobre todo en el primer elemento y el elemento final. La acción directa se refiere a un elemento de control el cual al aumentar su entrada provoca un incremento en su salida. A esto se le llama relación incremento-incremento (I/I). (93)

Por el contrario, si un elemento de control, cuando se aumenta su entrada, disminuye el valor de su salida, se define como un elemento de acción inversa, y tendrá una relación incremento-disminución (I/D). La acción de controlador es crítica para el funcionamiento del lazo de control, cuando se emplea la acción directa ante un aumento en la variable controlada, la señal del controlador aumentará, mientras que si es de acción inversa se actuará de forma contraria.

Además, es importante tener en cuenta que el control de procesos es dinámico, y por lo tanto es necesario tener en cuenta tanto la capacitancia como el tiempo muerto. La capacitancia simboliza la capacidad de un sistema para almacenar materia o energía, y el tiempo muerto representa el intervalo de tiempo entre que se produce una perturbación en el sistema y el sistema responde ante ella.

10.2. Lazos más comunes

El lazo de control más ampliamente utilizado y más simple es el lazo de realimentación o *feedback*, suele emplearse para controlar variables de proceso como temperatura, presión, caudal, composición y nivel. Este tipo de lazos basa su funcionamiento en la comparación entre la medida de la variable controlada con el valor de consigna, calculando, en función del error que exista en cada momento, un valor para la acción correctiva en función de la ley de control con la cual esté programado el controlador. Puede verse una representación de un lazo de control de realimentación en



la Figura 25, se trata de un lazo de SISO (*Single Input – Single Output*). (95)

Figura 25. Lazo de control *feedback* con una entrada y una salida. Fuente: Elaboración propia.

Existen otros tipos de lazos menos utilizados entre los que destacan los denominados *feedforward* o de control anticipativo, en los que se emplean medidas de las

perturbaciones para ajustar los valores de las variables manipuladas, permitiendo actuar sobre la variable manipulada antes de que esta sufra cambios. También es muy utilizado el control en cascada, el cual consiste en un lazo de realimentación anidado dentro de otro, por lo que se emplean dos controladores. De esta forma el primer lazo actúa como el punto de consigna mientras que el segundo estará actuando sobre el elemento final del lazo. (96)

10.3. Algoritmo de control

El algoritmo de control o ley de control hace referencia a las ecuaciones internas del controlador, existiendo para los controladores de realimentación tres tipos de acciones básicas: la acción proporcional (P), la acción integral (I) y la acción derivativa (D). Estas tres acciones pueden ser combinadas de forma que se obtienen los algoritmos de control más empleados.

El algoritmo más simple sería el controlador proporcional (P) en el cual se emplea solo la acción proporcional. Permite eliminar las oscilaciones, pero no devuelve el proceso al valor de consigna, si no que se obtiene un error sostenido a lo largo del tiempo, el cual se conoce como *offset*. Este tipo de controladores son los que poseen una mayor velocidad de respuesta. (94)

Para la eliminación del *offset* se puede aplicar la acción integral (I) dando lugar a un controlador proporcional-integral (PI). La acción integral permite eliminar el error, aunque hace que la respuesta sea más lenta. Normalmente no se usa esta acción por sí sola ya que la respuesta sería muy lenta y se tardaría demasiado en corregir el error, por eso se suele utilizar junto con la acción proporcional, siendo este el tipo de controlador más empleado. (94)

Por último, la acción derivativa (D) se emplea para solventar el problema de ralentización de respuesta ocasionado por la acción integral, aumentando la señal favoreciendo la velocidad de cambio de error. Esto permite que se actúe de forma rápida frente a errores pequeños y además permite estabilizar el sistema cuando la variación en el error es muy baja. Pese a sus ventajas, esta acción no es aconsejable cuando existe ruido en la medición (es decir, señales de baja amplitud y alta frecuencia) puesto que amplifica el error hasta producir un comportamiento inaceptable del lazo. Este tipo de acción no puede emplearse por sí sola, si no que suele usarse conjuntamente con las otras dos acciones dando lugar a los controladores proporcionales-integrales y derivativos. (94)

En la Ecuación 4 se puede ver como se calcula la salida de controlador (S_C) a partir de un valor de base al que se le suma el valor de la ganancia (K_C) multiplicada por los distintos términos, dependiendo de la acción empleada. Si se emplea la acción proporcional se multiplicará por el error (E); si se emplea la acción integral se empleará el segundo término, en el que está presente el tiempo integral (T_I); y si se usa la acción derivativa también se añade el tercer término, con el tiempo derivativo (T_D).

$$S_C(t) = \overline{S_C} + K_C \cdot \left[E(t) + \frac{1}{T_I} \cdot \int E(t) dt + T_D \frac{dE(t)}{dt} \right] \quad \text{Ecuación 4}$$

10.4. Nomenclatura

El diagrama *P&I* (*pipng and instrumentation*) es un documento de gran importancia en el cual están recogidos de manera gráfica información sobre los equipos, los algoritmos y las configuraciones de los lazos de control del proceso. En estos diagramas se emplean una serie de símbolos, etiquetas identificativas y líneas con un significado establecido por la norma *ISA-S5.1-1984*, la cual es una guía ampliamente aceptada en el mundo de la industria, razón por la que se hará uso de dicha norma a lo largo de este documento y los planos asociados.

En base a la norma, los lazos se pueden identificar mediante un código alfanumérico, el cual conta de 3 números y 3 letras; de forma que se identifica a un lazo (XYZ) siendo X la letra que hace referencia a la variable controlada y las otras dos letras (YZ) las que hacen referencia a la función del elemento de control. La nomenclatura a la cual se refiere la norma se puede observar en la Tabla 17.

Tabla 17. Letras identificativas de la función del lazo de control (Tabla de elaboración propia a partir de norma ISA-S5.1-1984)

Letra	Primera posición	Posiciones sucesivas
A	Composición	Alarma
C	-	Controlador
F	Caudal	-
H	-	Alto
I	-	Indicador
L	Nivel	Bajo
P	Presión	-
S	Seguridad	Interruptor
T	Temperatura	Transmisor
V	-	Válvula
Y	-	Transductor

Además, es posibles identificar el lazo y sus equipos a partir de la primera letra y el número, por lo que a cada instrumento se le asocia el mismo número que el lazo junto con la misma primera letra, de forma que cada equipo puede reconocerse ya que es nombrado de forma única.

En la norma *ISA-S5.1-1984* también se recogen los símbolos para indicar los documentos en planta y que se muestran en la Figura 26. La imagen a representa que el equipo se sitúa en la sala de control y el operador puede acceder a él; la imagen b representa que no se encuentra accesible para el operador, aunque se sitúa en la sala de control. Finalmente, si el equipo se encuentra en planta se representa por la imagen c.

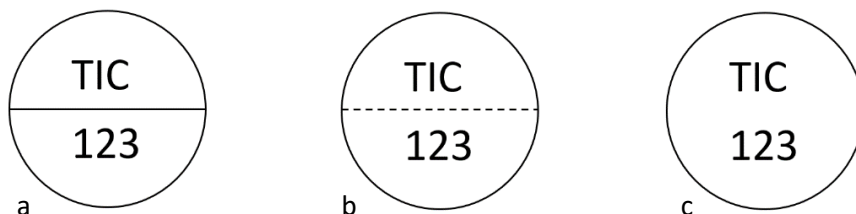


Figura 26. Simbología para la localización de los equipos (Imagen de elaboración propia)

Cabe destacar también que el tipo de línea que una los distintos elementos del lazo de control denotará el tipo de conexión, siendo las más normales la conexión eléctrica (línea a trazos) y la señal neumática (línea con parejas de líneas diagonales inclinadas)

10.5. Descripción de los lazos de control

10.5.1. Lazos de control de la sección 100

La sección 100 es la sección de obtención de nitrógeno a partir de la destilación criogénica de aire.

10.5.1.1. Lazo PIC-101

El lazo de control PIC-101, tendrá como objetivo controlar la presión de salida del compresor C-101, de forma que indirectamente se controlará el flujo en la conducción de salida.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida del compresor C-101 mediante un transmisor de presión PT-101, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-101. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-101 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-101, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de recirculación al compresor C-101, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.2. Lazo TIC-103

El lazo de control TIC-103, tendrá como objetivo controlar la temperatura de salida del intercambiador de calor E-101.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador de calor E-101 mediante un transmisor de temperatura TT-103, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-103. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-103 empleando una señal neumática generada por el

transductor I/P TY-103, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de agua de refrigeración (utilidad) que entrará también al intercambiador de calor E-101, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.3. Lazo LIC-105

El lazo de control LIC-105, tendrá como objetivo controlar el nivel de líquido en el tanque V-101.

La variable controlada será el nivel de líquido del tanque V-101 mediante un transmisor de nivel de líquido LT-105, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de nivel de líquido LIC-105. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de nivel LCV-105 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P LY-105, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de salida de líquido del tanque V-101, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.4. Lazo PIC-106

El lazo de control PIC-106, tendrá como objetivo controlar la presión de salida del tanque V-101, de forma que indirectamente se controlará el flujo en la conducción de salida de gas.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida del tanque V-101 mediante un transmisor de presión PT-106, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-106. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-106 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-106, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de salida de gas del tanque V-101, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.5. Lazo MIC-108

El lazo de control MIC-108, tendrá como objetivo controlar la humedad a la salida de las torres de secado T-101 A/B, controlando indirectamente la concentración de agua en la conducción de salida.

La variable controlada será la humedad de la corriente de salida de las torres de secado T-101 A/B mediante un transmisor de humedad MT-108, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de humedad MIC-108. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de humedad MCV-108 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P MY-108, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de entrada a las torres de secado T-101 A/B, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.6. Lazo PIC-110

El lazo de control PIC-110, tendrá como objetivo controlar la presión de salida del compresor C-102, de forma que indirectamente se controlará el flujo en la conducción de salida.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida del compresor C-102 mediante un transmisor de presión PT-110, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-110. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-110 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-110, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de recirculación al compresor C-102, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.7. Lazo TIC-112

El lazo de control TIC-112, tendrá como objetivo controlar la temperatura de salida del intercambiador de calor E-102.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador de calor E-102 mediante un transmisor de temperatura TT-112, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-112. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-112 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-112, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de gas de limpieza (principalmente oxígeno) que entrará también al intercambiador de calor E-102, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.8. Lazo TIC-115

El lazo de control TIC-115, tendrá como objetivo controlar la temperatura de salida del intercambiador de calor E-103.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador de calor E-103 mediante un transmisor de temperatura TT-115, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-115. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-115 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-115, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de agua de refrigeración (utilidad) que entrará también al intercambiador de calor E-103, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.9. Lazo TIC-117

El lazo de control TIC-117, tendrá como objetivo controlar la temperatura de la corriente 10 (gas que se está refrigerando) a la salida del intercambiador de calor E-104.

La variable controlada será la temperatura de la corriente 11 a la salida del intercambiador de calor E-104 mediante un transmisor de temperatura TT-117, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-117. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-117 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-117, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de gas de recirculación que se está calentando que entrará también al intercambiador de calor E-104, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.10. Lazo TIC-120

El lazo de control TIC-120, tendrá como objetivo controlar la temperatura de la corriente 12 (gas que se está refrigerando) a la salida del intercambiador de calor E-105.

La variable controlada será la temperatura de la corriente 14 a la salida del intercambiador de calor E-105 mediante un transmisor de temperatura TT-120, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-118. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-120a (que será la válvula VLV-102) empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-120a, para aumentar o disminuir la presión de la corriente de gas de recirculación que se está calentando y que entrará también al intercambiador de calor E-105, hasta alcanzar el valor de consigna. El controlador también ha de actuar sobre otra válvula de control de temperatura TCV-120b la cual modificará el caudal de recirculación de la turbina TUR-101 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-120b, gracias a lo cual podrá modificar la presión a la salida y por lo tanto la temperatura a la salida de esta turbina.

Se ha seleccionado un controlador *feedback* con 1 entrada y 2 salidas en este caso puesto que la presión, y por lo tanto la temperatura, de la corriente de entrada al intercambiador E-105 está regulada por la válvula VLV-102 y la turbina TUR-101, de modo que modificando las caídas de presión en ambos equipos se puede controlar la temperatura de la corriente a enfriar (corriente 14) en la salida del intercambiador E-105.

10.5.1.11. Lazo PIC-124

El lazo de control PIC-124, tendrá como objetivo controlar la presión de salida de la válvula VLV-101, de forma que indirectamente se controlará la temperatura en la conducción de salida.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida de la válvula VLV-101 mediante un transmisor de presión PT-124, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-124. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-124 (también válvula VLV-101) empleando una señal neumática generada por el transductor

I/P PY-124, para aumentar o disminuir la caída de presión en la válvula VLV-101, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.12. Lazo LIC-125

El lazo de control LIC-125, tendrá como objetivo controlar el nivel de líquido en el tanque V-102.

La variable controlada será el nivel de líquido del tanque V-102 mediante un transmisor de nivel de líquido LT-125, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de nivel de líquido LIC-125. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de nivel LCV-125 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P LY-125, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de salida de líquido del tanque V-102, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.13. Lazo PIC-126

El lazo de control PIC-126, tendrá como objetivo controlar la presión de salida del gas del tanque V-102.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida de gas del tanque V-102 mediante un transmisor de presión PT-126, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-126. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-126 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-126, para aumentar o disminuir el caudal de salida de gas del tanque V-102, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.14. Lazo LIC-128

El lazo de control LIC-128, tendrá como objetivo controlar el nivel de líquido en la torre de destilación criogénica T-102.

La variable controlada será el nivel de líquido de la torre de destilación criogénica T-102 mediante un transmisor de nivel de líquido LT-128, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de nivel de líquido LIC-128. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de nivel LCV-128 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P LY-128, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de salida de líquido de la torre de destilación criogénica T-102, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.15. Lazo TIC-129

El lazo de control TIC-129, tendrá como objetivo controlar la temperatura del reflujo de la torre de destilación criogénica T-102.

La variable controlada será la temperatura del reflujo de la torre de destilación criogénica T-102 mediante un transmisor de temperatura TT-129, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-129. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-129 (también válvula VLV-103) empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-129, para aumentar o disminuir la caída de presión de la corriente de colas de la torre T-102, con lo cual se podrá modificar la temperatura de esta, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.16. Lazo PIC-131

El lazo de control PIC-131, tendrá como objetivo controlar la presión de salida del compresor C-103, de forma que indirectamente se controlará el flujo en la conducción de salida.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida del compresor C-103 mediante un transmisor de presión PT-131, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-131. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-131 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-131, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de recirculación al compresor C-103, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.1.17. Lazo TIC-133

El lazo de control TIC-133, tendrá como objetivo controlar la temperatura de salida del intercambiador de calor E-106.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador de calor E-106 mediante un transmisor de temperatura TT-133, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-133. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-133 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-133, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de agua de refrigeración (utilidad) que entrará también al intercambiador de calor E-106, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.2. Lazos de control de la sección 200

En la sección 200 se obtendrá hidrógeno a partir de la electrólisis de agua.

10.5.2.1. Lazo FIC-201

El lazo de control FIC-201, tendrá como objetivo controlar el flujo de salida de las bombas P-201 A/B, de forma que indirectamente se controlará la presión en la conducción de salida.

La variable controlada será el flujo de la corriente de salida de las bombas P-201 A/B mediante un transmisor de flujo FT-201, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de flujo FIC-201. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de flujo FCV-201 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P FY-201, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de recirculación a las bombas P-201 A/B, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.2.2. Lazo CIC-202

El lazo de control CIC-202, tendrá como objetivo controlar la conductividad a la salida del desmineralizador DES-201, controlando indirectamente la concentración de sales en la conducción de salida.

La variable controlada será la conductividad de la corriente de salida del desmineralizador DES-201 mediante un transmisor de conductividad CT-202, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de conductividad CIC-202. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de conductividad CCV-202 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P CY-202, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de entrada al desmineralizador DES-201, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.2.3. Lazo TIC-203

El lazo de control TIC-203, tendrá como objetivo controlar la temperatura a la salida del intercambiador de calor E-201.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador E-201 mediante un transmisor de temperatura TT-203, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-203. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-203 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-203, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de vapor de baja presión (utilidad) de entrada al intercambiador de calor E-201, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.2.4. Lazo PIC-205

El lazo de control PIC-205, tendrá como objetivo controlar la presión a la salida de la corriente de hidrógeno del electrolizador ELE-201, controlando indirectamente la concentración de hidrógeno en la conducción de salida y por lo tanto el flujo del mismo.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida de hidrógeno del electrolizador ELE-201 mediante un transmisor de presión PT-205, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-205. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-205 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-205, para

aumentar o disminuir el flujo de la corriente de entrada al electrolizador ELE-201, hasta alcanzar el valor de consigna.

Se ha seleccionado la corriente de salida de hidrógeno por ser la que mayor importancia tendrá en el resto de la planta, con controlar una de ellas la otra también será controlada puesto que sus propiedades están estrechamente relacionadas.

10.5.2.5. Lazo PIC-206

El lazo de control PIC-206, tendrá como objetivo controlar la presión a la salida del compresor C-201, controlando indirectamente el flujo en la conducción de salida.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida del compresor C-201 mediante un transmisor de presión PT-206, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-206. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-206 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-206, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de recirculación al compresor C-201, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.2.6. Lazo TIC-208

El lazo de control TIC-208, tendrá como objetivo controlar la temperatura a la salida del intercambiador de calor E-202.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador E-202 mediante un transmisor de temperatura TT-208, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-208. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-208 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-208, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de agua de refrigeración (utilidad) de entrada al intercambiador de calor E-202, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.2.7. Lazo MIC-210

El lazo de control MIC-210, tendrá como objetivo controlar la humedad a la salida de las torres de secado T-201 A/B, controlando indirectamente la concentración de agua en la conducción de salida.

La variable controlada será la humedad de la corriente de salida de las torres de secado T-201 A/B mediante un transmisor de humedad MT-210, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de humedad MIC-210. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de humedad MCV-210 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P MY-210, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de entrada a las torres de secado T-201 A/B, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.2.8. Lazo TIC-212

El lazo de control TIC-212, tendrá como objetivo controlar la temperatura a la salida del intercambiador de calor E-203.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador E-203 mediante un transmisor de temperatura TT-212, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-212. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-212 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-212, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de agua de refrigeración (utilidad) de entrada al intercambiador de calor E-203, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.2.9. Lazo MIC-214

El lazo de control MIC-214, tendrá como objetivo controlar la humedad a la salida de las torres de secado T-202 A/B, controlando indirectamente la concentración de agua en la conducción de salida.

La variable controlada será la humedad de la corriente de salida de las torres de secado T-202 A/B mediante un transmisor de humedad MT-214, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de humedad MIC-214. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de humedad MCV-214 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P MY-214, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de entrada a las torres de secado T-202 A/B, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3. Lazos de control de sección 300

En la sección 300 se obtendrá amoníaco mediante un ciclo de síntesis Haber-Bosch partiendo de las materias primas obtenidas anteriormente.

10.5.3.1. Lazo PIC-301

El lazo de control PIC-301, tendrá como objetivo controlar la presión a la salida del compresor C-301, controlando indirectamente el flujo en la conducción de salida.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida del compresor C-301 mediante un transmisor de presión PT-301, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-301. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-301 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-301, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de recirculación al compresor C-301, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3.2. Lazo TIC-303

El lazo de control TIC-303, tendrá como objetivo controlar la temperatura a la salida del intercambiador de calor E-301.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador E-301 y entrada al reactor R-301 mediante un transmisor de temperatura TT-303, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-303. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-303 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-303, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de salida del reactor R-301 y entrada al intercambiador de calor E-301, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3.3. Lazo TIC-306

El lazo de control TIC-306, tendrá como objetivo controlar la temperatura a la salida del intercambiador de calor R-301.

La variable controlada será la temperatura de dentro del reactor R-301 mediante un transmisor de temperatura TT-306, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-306. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-306 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-306, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de entrada al reactor R-301.

10.5.3.4. Lazo TIC-308

El lazo de control TIC-308, tendrá como objetivo controlar la temperatura de la corriente de recirculación a la salida del intercambiador de calor E-302.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de recirculación a la salida del intercambiador E-302 mediante un transmisor de temperatura TT-308, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-308. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-308 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-308, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de salida del reactor R-301 enfriada previamente en el intercambiador E-301, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3.5. Lazo TIC-311

El lazo de control TIC-311, tendrá como objetivo controlar la temperatura de la corriente de salida del intercambiador de calor E-303 y que posteriormente irá al intercambiador E-304.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador de calor E-303 y que posteriormente irá al intercambiador E-304 mediante

un transmisor de temperatura TT-311, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-311. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-311 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-311, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de amoníaco a almacenar que también entra en el intercambiador de calor E-303, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3.6. Lazo TIC-314

El lazo de control TIC-311, tendrá como objetivo controlar la temperatura de la corriente de salida del intercambiador de calor E-304.

La variable controlada será la temperatura de la corriente de salida del intercambiador de calor E-304 mediante un transmisor de temperatura TT-314, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de temperatura TIC-314. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de temperatura TCV-314 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P TY-314, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de propano (utilidad) que también entra en el intercambiador de calor E-304, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3.7. Lazo LIC-317

El lazo de control LIC-317, tendrá como objetivo controlar el nivel de líquido en el tanque V-301.

La variable controlada será el nivel de líquido del tanque V-301 mediante un transmisor de nivel de líquido LT-317, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de nivel de líquido LIC-317. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de nivel LCV-317 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P LY-317, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de salida de líquido del tanque V-301, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3.8. Lazo PIC-318

El lazo de control PIC-318, tendrá como objetivo controlar la presión de salida del gas del tanque V-301.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida de gas del tanque V-301 mediante un transmisor de presión PT-318, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-318. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-318 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-318, para aumentar o disminuir el caudal de salida de gas del tanque V-301, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3.9. Lazo PIC-320

El lazo de control PIC-320, tendrá como objetivo controlar la presión a la salida del compresor C-302, controlando indirectamente el flujo en la conducción de salida.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida del compresor C-302 mediante un transmisor de presión PT-320, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-320. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-320 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-320, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de recirculación al compresor C-302, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.5.3.10. Lazo PIC-322

El lazo de control PIC-322, tendrá como objetivo controlar la presión a la salida de la turbina TUR-301, controlando indirectamente el flujo en la conducción de salida.

La variable controlada será la presión de la corriente de salida de la turbina TUR-301 mediante un transmisor de presión PT-322, que por medio de una señal eléctrica llevará la información al controlador e indicador de presión PIC-322. El controlador comparará el valor recibido con el valor de consigna y realizará los cálculos necesarios para conocer si es necesario actuar sobre la válvula de control de presión PCV-322 empleando una señal neumática generada por el transductor I/P PY-322, para aumentar o disminuir el flujo de la corriente de recirculación a la turbina TUR-301, hasta alcanzar el valor de consigna.

10.6. Válvulas de alivio, indicadores y alarmas

10.6.1. Válvulas de alivio

Se recogen en las próximas tablas las válvulas de alivio pertenecientes a las distintas secciones de la planta: la sección 100 en la Tabla 18, la sección 200 en la Tabla 19 y la sección 300 en la Tabla 20.

Tabla 18. Válvulas de alivio de la sección 100

PSV-102	Válvula de alivio del compresor C-101
PSV-104	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-101
PSV-107	Válvula de alivio del tanque V-101
PSV-109	Válvula de alivio de las torres de secado T-101 A/B
PSV-111	Válvula de alivio del compresor C-102
PSV-113	Válvula de alivio de la carcasa del intercambiador E-102
PSV-114	Válvula de alivio de los tubos del intercambiador E-102
PSV-116	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-103

PSV-118	Válvula de alivio de la carcasa del intercambiador E-104
PSV-119	Válvula de alivio de los tubos del intercambiador E-104
PSV-121	Válvula de alivio de la carcasa del intercambiador E-105
PSV-122	Válvula de alivio de los tubos del intercambiador E-105
PSV-123	Válvula de alivio de la turbina TUR-101
PSV-127	Válvula de alivio del tanque V-102
PSV-130	Válvula de alivio de la torre de destilación criogénica T-102
PSV-132	Válvula de alivio del compresor C-103
PSV-134	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-106

Tabla 19. Válvulas de alivio de la sección 200

PSV-204	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-201
PSV-207	Válvula de alivio del compresor C-201
PSV-209	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-202
PSV-211	Válvula de alivio de la torre de secado T-201 A/B
PSV-213	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-203
PSV-215	Válvula de alivio de la torre de secado T-202 A/B

Tabla 20. Válvulas de alivio de la sección 300

PSV-302	Válvula de alivio del compresor C-301
PSV-304	Válvula de alivio de la carcasa del intercambiador E-301
PSV-305	Válvula de alivio de los tubos del intercambiador E-301
PSV-307	Válvula de alivio del reactor R-301
PSV-309	Válvula de alivio de la carcasa del intercambiador E-302
PSV-310	Válvula de alivio de los tubos del intercambiador E-302
PSV-312	Válvula de alivio de la carcasa del intercambiador E-303
PSV-313	Válvula de alivio de los tubos del intercambiador E-303
PSV-315	Válvula de alivio de la carcasa del intercambiador E-304
PSV-316	Válvula de alivio de los tubos del intercambiador E-304
PSV-319	Válvula de alivio del tanque V-301
PSV-321	Válvula de alivio del compresor C-302

10.6.2. Indicadores

Los indicadores permitirán a los trabajadores conocer el valor de ciertas variables a lo largo del proceso. Se ha considerado poner un indicador de presión en el filtro F-100 y será PI-135. Los demás equipos poseen su propio sistema de control o no se ve necesario ningún indicador.

10.6.3. Alarmas

Las alarmas se emplean para hacer saber a los operadores de grandes desviaciones en el proceso que pueden llegar a ser peligrosas. Estos instrumentos activarán señales visibles y/o audibles para los operadores en los paneles de control. Se recogen las alarmas por secciones en la Tabla 21 para la sección 100 y en la Tabla 22 para la sección 300.

Tabla 21. Alarmas de la sección 100

LAH-135	Alarma de alto nivel en el tanque V-101
LAL-136	Alarma de bajo nivel en el tanque V-101
PAH-137	Alarma de alta presión en el tanque V-101
PAL-138	Alarma de baja presión en el tanque V-101
LAH-139	Alarma de alto nivel en el tanque V-102
LAL-140	Alarma de bajo nivel en el tanque V-102
PAH-141	Alarma de alta presión en el tanque V-102
PAL-142	Alarma de baja presión en el tanque V-102
LAH-143	Alarma de alto nivel en la torre de destilación criogénica T-102
LAL-144	Alarma de bajo nivel en la torre de destilación criogénica T-102
PAH-145	Alarma de alta presión en la torre de destilación criogénica T-102
PAL-146	Alarma de baja presión en la torre de destilación criogénica T-102

Tabla 22. Alarmas de la sección 300

PAH-324	Alarma de alta presión en el reactor R-301
PAL-325	Alarma de baja presión en el reactor R-301
TAH-325	Alarma de alta temperatura en el reactor R-301
TAL-326	Alarma de baja temperatura en el reactor R-301
LAH-327	Alarma de alto nivel en el tanque V-301
LAL-328	Alarma de bajo nivel en el tanque V-301
PAH-329	Alarma de alta presión en el tanque V-301
PAL-330	Alarma de baja presión en el tanque V-301

11.SEGURIDAD

Para poder minimizar el riesgo de la planta, así como establecer un plan de actuación en caso de emergencia, es necesario identificar todas las posibles causas que puedan ser origen de explosiones, detonaciones, degradaciones, fugas, etc. Para eso se deben conocer las características de las sustancias con las que se trabaja no sólo de forma aislada, sino también evaluando la interacción con el resto de los compuestos implicados en el proceso. Además, han de tenerse en cuenta las condiciones de operación a las que estas están sometidas. Con el fin de cualificar y cuantificar el riesgo de una planta industrial existen diversos decretos, directivas, normas y reglamentos que permiten clasificar tanto los compuestos como la instalación en su conjunto.

A continuación, se clasifican las sustancias y la instalación de acuerdo con los reglamentos y normativas referentes explicados brevemente en cada uno de los siguientes apartados.

11.1. Inventario de sustancias

Los compuestos que intervienen en el proceso son el agua, el aire, el nitrógeno, el oxígeno, el hidrógeno, y el amoníaco y para conocer la inflamabilidad y la peligrosidad de cada uno de ellos ha de consultarse una serie de parámetros: el punto flash, la temperatura de autoignición, el límite superior de inflamabilidad (%volumen en aire) y el límite inferior de inflamabilidad (%volumen en aire). A continuación, se presenta una breve definición de cada uno: (97)

- **Punto flash/temperatura de inflamación/Punto de inflamación:** temperatura mínima a la cual, bajo determinadas condiciones, un material desprende la cantidad suficiente de gases inflamables para producir su inflamación en presencia de una fuente de incendio. La inflamación es súbita y se apaga cuando se retira la fuente citada.

- **Temperatura de autoignición/temperatura de autoinflamación:** temperatura mínima a la que una sustancia combustible es capaz de inflamarse y mantener la combustión, sin necesidad de una fuente de ignición.
- **Límite inferior de inflamabilidad (% volumen):** concentración de una materia inflamable en aire u otro comburente en condiciones de operación por debajo de la cual no puede iniciarse la combustión.
- **Límite superior de inflamabilidad (% volumen):** concentración de una materia inflamable en aire u otro comburente en condiciones de operación por encima de la cual no puede iniciarse la combustión.

Se ha despreciado la presencia de otros compuestos en el aire como el argón, se ha considerado únicamente el nitrógeno y el oxígeno, dado que este sólo actúa como inerte y no presenta incompatibilidades con ninguno de los compuestos citados. En la Tabla 23 se recogen los parámetros anteriormente citados consultados en el apartado de propiedades físicas y químicas de sus respectivas fichas de seguridad.

Tabla 23. Parámetros críticos para detectar la inflamabilidad y la peligrosidad de los compuestos (Fichas de seguridad)

	Punto flash (°C)	Temperatura de autoignición (°C) a 1013 Pa	Límite inferior de inflamabilidad (% volumen)	Límite superior de inflamabilidad (% volumen)
Agua				
Aire	No aplica	No inflamable	No inflamable	No inflamable
Oxígeno				
Nitrógeno				
Hidrógeno	No aplica	560	4	77
Amoníaco anhidro	No aplica	630	15	30

11.2. Clasificación según el Reglamento CLP

La clasificación de peligrosidad se establece en base al **Reglamento (CE) 1272/2008** también conocido por las siglas **CLP** (Classification, Labelling and Packaging) que trata de estandarizar la clasificación y el etiquetado de las sustancias químicas internacionalmente. Dicho reglamento busca comunicar de forma clara los peligros de las sustancias apoyándose mediante pictogramas. Por tanto, cada proveedor debe incluir los pictogramas de seguridad CLP en la etiqueta y en las fichas de seguridad. Además, en este reglamento se recogen las frases H (Hazard) y las frases P (Precaution). (98) (99)

Las frases H son aquellas que indican la clase de peligro asociado a la sustancia o mezcla química. Se representan como HXYZ, donde la H hace referencia al peligro y XYZ son números. El valor de X puede ser 2 si se trata de un peligro físico, 3 si existen

peligros para la salud humana y 4 si existen peligros para el medio ambiente. Los valores de YZ son número secuenciales que van desde el 00 hasta el 99. (98) (99)

Por otro lado, las frases P son consejos de prudencia que describen las medidas recomendadas para evitar o minimizar los efectos adversos debidos a la exposición a una sustancia durante su manipulación. Al igual que las frases H, están representadas por la inicial P y 3 números (PXYZ), donde la P indica que se trata de una frase de tipo prudencia. En este caso, X puede oscilar desde 1 hasta 5, donde el 1 indica que se trata de consejos generales; 2, de consejos de prevención; 3, de consejos respuesta; 4, de consejos de almacenamiento; y 5, de consejos de eliminación. (98) (99)

Las fichas de seguridad han de ser elaboradas por los fabricantes y distribuidores de los productos químicos en base al Reglamento Reach, donde se especifica qué ha de especificarse. (100)

En la Tabla 24 se recogen las indicaciones de peligro empleadas para las sustancias involucradas en el proceso y que han sido consultadas en sus respectivas FDS.

Tabla 24. Indicaciones de peligro de las frases H (Fichas de seguridad)

Frase	Indicación de peligro
H220	Gas extremadamente inflamable
H221	Gas inflamable
H270	Puede provocar o agravar un incendio; comburente
H280	Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento
H314	Provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves
H331	Tóxico en caso de inhalación
H400	Muy tóxico para los organismos acuáticos

En la Tabla 25, se presenta la clasificación de las sustancias de acuerdo con el Reglamento 1272/2008/CE (CLP) obtenidas a partir de sus fichas de seguridad.

Tabla 25. Clasificación CE de acuerdo con 1272/2008/CE (CLP) (Fichas de seguridad)

	Clase de peligro	Categoría de peligro	Frase H	Pictograma
Aire comprimido	Gas a presión	C	H280	
Oxígeno	Gas comburente	1	H270	
	Gas a presión	C	H280	

Nitrógeno	Gas a presión	C	H280	
Hidrógeno	Gas inflamable	1	H220	
	Gas comprimido	C	H280	
Amoníaco	Gas a presión	C	H280	
	Gas inflamable	2	H221	
	Toxicidad aguda	3	H331	
	Corrosión cutánea	1B	H314	
	Toxicidad aguda para organismos acuáticos	1	H400	

11.3. Clasificación según la NFPA

Para estudiar la reactividad química, las sustancias son clasificadas mediante la norma **NFPA 704 de fuego** desarrollada por la asociación estadounidense *National Fire Protection Association* (NFPA), la cual establece un sistema de identificación de riesgos que se basa en un rombo dividido en 4 secciones con diferentes colores (azul: asociado a peligros para la salud, rojo: asociado a peligros de inflamabilidad, amarillo: asociado al peligro de inestabilidad, blanco: empleado para riegos específicos que dependerán del tipo de sustancia que se maneje). La peligrosidad se establece en base a una escala numerada del 0 al 4, siendo el 0 el nulo o más bajo, y el 4, el mayor peligro. (101) (99)

En la Figura 27, se muestra un rombo NFPA donde se indica el significado del valor de la escala en función del color (tipo de peligrosidad). (102)



Figura 27. Rombo NFPA 704 (102)

En la Tabla 26, se presenta la clasificación NFPA 704 para las sustancias implicadas en el proceso.

Tabla 26. Clasificación NFPA 704

	Peligros para la salud	Inflamabilidad	Reactividad	Peligro específico
Agua	0	0	0	-
Oxígeno	0	0	0	OX
Nitrógeno	0	0	0	SA (asfixiante simple)
Hidrógeno	0	4	0	-
Amoníaco	3	1	0	-

Como se puede observar los compuestos más peligrosos son el hidrógeno y el amoníaco, siendo este último el único en ser peligroso para la salud. Sin embargo, para poder determinar la seguridad del proceso no basta con analizar las características individuales de las sustancias, por lo que se requiere analizar el comportamiento de la mezcla presentado en el siguiente apartado.

11.4. Estudio de reactividad química descontrolada

Para poder afirmar que un proceso es seguro es necesario conocer los riesgos asociados a las reacciones químicas y a la compatibilidad de los compuestos que intervienen en el proceso.

La reacción de amoníaco se trata de una reacción exotérmica. En las reacciones exotérmicas se puede producir el fenómeno conocido como *runway* en el que la reacción química al liberar calor acelera la velocidad de reacción provocando un aumento descontrolado de la masa de los productos y con ello un aumento desmesurado en la presión del reactor. Aparte de la exotermicidad de la reacción ha de tenerse en cuenta la capacidad del equipo para eliminar el calor y la posible generación de gases, así como la influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción. Como se ha mencionado anteriormente, la velocidad de reacción del amoníaco es muy lenta a bajas temperaturas,

por lo que requiere de temperaturas superiores a los 300°C para que el proceso sea factible. Sin embargo, las elevadas temperaturas desfavorecen la conversión.

Un aumento en la temperatura del reactor disminuiría la producción de amoníaco, por lo que, teniendo en cuenta que la presión disminuye hacia la formación del producto, la presión del reactor sería mayor a la prevista provocando así una sobrepresión en el reactor a medida que entra el gas reaccionante al reactor. Sin embargo, no se ha de referir a *runaway*, puesto que al aumentar la temperatura no se produciría más producto, ya que como se ha comentado, la conversión disminuye y por tanto, el calor liberado por la reacción será menor y no se producirá un incremento de temperatura tan importante como en reacciones exotérmicas reversibles.

Para poder determinar un proceso químico seguro se ha de atender a tres factores principales. (103)

El primer factor está relacionado con la energía liberada al producir cualquier producto químico, por lo que un diseño seguro requerirá el conocimiento de la energía inherente durante la reacción. El cálculo del potencial energético se determinará a través de balances de energía a los diferentes equipos, así como mediante pruebas reales en plantas piloto. (103)

El segundo factor está referido a la velocidad de reacción, siendo esta función de la temperatura, la presión y las concentraciones. La velocidad ha de determinarse tanto para condiciones de operación normal como para condiciones anormales, tomando como referencia el peor de los casos posibles (fallos de refrigeración, cambio en la composición de la corriente de alimentación, fallos de intercambiadores de calor o de compresores, etc). (103)

El tercer factor hace referencia al control del proceso. El aumento de presión en el equipo en reacciones químicas no está asociado únicamente al aumento de la temperatura, sino que pueden producirse fallas de tipo mecánico, taponamientos de las paredes perforadas que dificultan el paso del fluido, obstrucción de las conducciones de salida, etc. Es por eso por lo que ha de garantizarse que el sistema posea válvulas de alivio de presión y los lazos de control pertinentes. (103)

Una vez identificados los riesgos químicos de un proceso ha de decidirse como diseñar y operar el proceso de modo seguro. Para ello se recomienda seguir una serie de pautas: (103)

1. Definir claramente las condiciones de la reacción química y determinar sus riesgos.
2. Definir las condiciones de proceso y de diseño de la planta
3. Definir las condiciones de proceso y de diseño de la planta, lo cual incluye la selección de equipos, de materiales adecuados para su construcción, la disposición de manuales de operación, etc.
4. Seleccionar y especificar medidas de seguridad principalmente asociadas al control del proceso para limitar las condiciones de operación.

5. Implantar y mantener las medidas de seguridad. Es de suma importancia que todo el personal conozca las normas y los planes de seguridad de la planta y los respete. Además, han de establecerse instrucciones de control de proceso tanto para la operación normal como en operación anormal.
6. Incluir medidas de seguridad adicionales ya sean de tipo preventivo o de protección.

Las medidas preventivas abarcan el diseño de los procesos, el diseño mecánico de la planta, el sistema de control y el modo en el que opera el proceso, mientras que las medidas de protección son aquellas destinadas a disminuir las consecuencias derivadas de un accidente.

11.4.1. Matriz de compatibilidad química

Para estudiar la compatibilidad entre los compuestos que intervienen a lo largo del proceso se elaborará la matriz de incompatibilidad química entre sustancias de acuerdo con la norma NFPA, que permite evaluar las interacciones binarias entre los diferentes compuestos. Para ello se empleará el software Chemical Reactivity Worksheet (CRW) desarrollado por el Instituto Americano de Ingenieros Químicos (AIChE), la División de Respuesta a Emergencias de la Administración Nacional Oceánica y Atmosférica y la Oficina de Manejo de Emergencias de la Agencia de Protección Ambiental de EE.UU., en colaboración de la empresa Dow Chemical y el Instituto Tecnológico de Materiales (MTI). (104) (99)

Este programa permite seleccionar los distintos compuestos que forman una mezcla para determinar la compatibilidad de la misma. Para ello emplea un código de colores al que se le asigna una letra. El color verde va acompañado de letra Y, la cual indica que no se esperan problemas de reactividad peligrosa y que la mezcla es compatible; el color rojo, acompañado por la letra N, indica que se esperan problemas de reactividad peligrosa (indicados en el resumen de peligros que realiza el programa) y que la mezcla es incompatible; y finalmente está el color amarillo, al que se le asignan dos letras, la C (*Caution*), que indica que puede que existan riesgos bajo determinadas condiciones, y la SR (*Self-Reactive*), que suele aparecer cuando se trabaja con compuestos que polimerizan y que pueden reaccionar consigo mismos.

En la Figura 28 se presenta la matriz de compatibilidad elaborada para todos los compuestos que intervienen en el proceso. Cabe destacar de nuevo que el programa sólo estudia la mezcla analizando las interacciones entre dos compuestos y no en su totalidad por lo que no tiene en cuenta el comportamiento de toda la mezcla. En este caso se ha obviado el aire, ya que este está formado principalmente por oxígeno y nitrógeno que ya han sido incluidos en la matriz. Por otra parte, se ha decidido incorporar el argón para comprobar que realmente es compatible con los distintos compuestos.

Documento I. Memoria
Plata de producción de amoníaco verde

Y : Compatible N : Incompatible C : Caution SR : Self-Reactive *: Changed by user										
NFPA				Planta de producción de amoníaco verde Compatibility Chart	AMMONIA (ANHYDROUS)	ARGON, COMPRESSED	HYDROGEN, COMPRESSED	NITROGEN, COMPRESSED	OXYGEN, [COMPRESSED]	WATER
Health	Flammability	Instability	Special							
3	1	0		AMMONIA (ANHYDROUS)						
				ARGON, COMPRESSED	Y					
0	4	0		HYDROGEN, COMPRESSED	Y	Y				
				NITROGEN, COMPRESSED	Y	Y	Y			
3	0	0	Oxi	OXYGEN, [COMPRESSED]	N	Y	N	Y		
				WATER	C	Y	Y	Y	N	

Figura 28. Matriz de compatibilidad obtenida a partir del programa CRW4

Como se puede observar en la matriz de compatibilidades prácticamente todos los compuestos son compatibles entre sí, exceptuando el oxígeno. Los peligros asociados a la incompatibilidad se presentan en la Tabla 27:

Tabla 27. Incompatibilidades entre los diferentes compuestos

	Amoníaco	Hidrógeno
Oxígeno	La reacción puede liberar productos gaseosos y puede causar presurización.	Los productos de reacción pueden ser explosivos e inflamables.
		La reacción libera productos gaseosos y puede causar presurización.
	La reacción puede ser particularmente intensa, violenta o explosiva.	Los productos de reacción pueden ser inestables por encima de la temperatura ambiente. La reacción puede ser particularmente intensa, violenta o explosiva.
Agua	La reacción a temperatura ambiente es exotérmica.	-

El agua y el oxígeno comprimido también son compatibles dando lugar a productos de reacción que pueden ser corrosivos. Por otro lado, la reacción libera productos gaseosos que pueden causar la presurización, además de que la reacción es exotérmica a temperatura ambiente y los productos de reacción pueden ser tóxicos.

Una vez comentados los peligros han de tenerse en cuenta los caudales, composiciones y condiciones de proceso.

El oxígeno y el hidrógeno en el electrolizador se encuentran en compartimentos diferentes por lo que no llegan a estar en contacto directamente, por eso, en este caso, se descarta la reacción entre ambos.

Por otro lado, a la salida de la torre de destilación criogénica, el nitrógeno destilado obtenido presenta una pureza del 99,99% en fracción molar, siendo la composición de oxígeno del 0,01%. Realmente esta composición todavía sería inferior ya que se ha despreciado el argón para poder aproximar el aire como una mezcla binaria y aplicar el método de McCabe para calcular el número de etapas de la torre. Por tanto, aunque el hidrógeno esté en contacto con el oxígeno, al estar en cantidades tan pequeñas no se produce ninguna reacción. De la misma forma, esto se puede aplicar al amoníaco, por lo que teniendo en cuenta la naturaleza del proceso se puede afirmar que el riesgo de que se produzcan reacciones con el oxígeno es mínimo.

Al igual que el oxígeno, el agua que sale del electrolizador con el hidrógeno es separada de este mediante las zeolitas, por lo que se puede considerar que el agua sólo está presente en trazas en el hidrógeno que entra al compresor junto al hidrógeno.

11.5. Clasificación de la instalación según la Directiva Seveso

Para la clasificación de la peligrosidad de la planta se debe aplicar la Clasificación Seveso III, **Real Decreto 840/2015** (Anexo I y Anexo II), del 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas. Este real decreto tiene como objetivo prevenir accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas, además de limitar las consecuencias de estos sobre la salud humana, los bienes materiales y el medio ambiente. (105)

En el artículo 3 del decreto se recogen algunas definiciones importantes que han de ser comentadas. Entre ellas cabe destacar la siguientes: (105)

- **Accidente grave**, definido como cualquier suceso que resulte de un proceso no controlado durante el funcionamiento de cualquier establecimiento incluido en el decreto que pueda suponer un riesgo grave para la salud humana, los bienes o el medio ambiente tanto dentro como fuera del establecimiento y en el que intervengan una o varias sustancias peligrosas.
- **Almacenamiento**, referido a la presencia de una cantidad determinada de sustancias peligrosas con fines de almacenamiento, depósito en custodia o reserva.
- **Peligro**, definido como la capacidad intrínseca de una sustancia peligrosa o la potencialidad de una situación física para ocasionar daños a la salud humana, bienes o al medio ambiente.
- **Presencia de sustancias peligrosas**. Se entiende la presencia de sustancias peligrosas como la presencia actual o anticipada de sustancias peligrosas en el establecimiento, o de sustancias peligrosas que sea razonable prever que puedan generarse como consecuencia de la pérdida del control del proceso,

incluidas las actividades de almacenamiento en cualquier instalación en el interior de un establecimiento, en cantidades iguales o superiores a las cantidades umbral indicadas en las partes 1 o 2 del anexo I.

- **Establecimiento**, entendido como la totalidad del emplazamiento bajo el control de un industrial en el que se encuentren sustancias peligrosas en una o varias instalaciones, incluidas las infraestructuras o actividades comunes o conexas.

Dentro de la definición de establecimiento cabe destacar la siguiente clasificación:
(105)

- **Establecimiento de nivel inferior**

El establecimiento de nivel inferior se define como aquel establecimiento en el que están presentes sustancias peligrosas en cantidades iguales o superiores a las que se especifican en la columna 2 de la parte 1 o de la parte 2 del anexo I, pero inferiores a las cantidades especificadas en la columna 3 de la parte 1 o la parte 2 del anexo I. Todo ello empleando, cuando sea aplicable, la regla de la suma especificada en la nota 4 del anexo

- **Establecimiento de nivel superior**

El establecimiento de nivel superior hace referencia a un establecimiento en el que haya presentes sustancias peligrosas en cantidades iguales o superiores a las especificadas en la columna 3 de la parte 1 o de la parte 2 del anexo I. Todo ello empleando, cuando sea aplicable, la regla de la suma especificada en la nota 4 del anexo I.

Para poder clasificar la planta de acuerdo con la Normativa Seveso, han de consultarse la parte 1 y 2 presentados en el anexo I para consultar los umbrales superior e inferior de las sustancias a las que se puede aplicar la directiva. Las sustancias peligrosas incluidas en las categorías de peligro enumeradas en la columna 1 de la parte 1 del anexo se les debe aplicar las cantidades umbral indicadas en las columnas 2 y 3 de la parte 1, mientras que, si una de las sustancias está incluida tanto en la parte 1 como en la parte 2 del anexo, se aplicarán las cantidades umbral indicadas en las columnas 2 y 3 de la parte 2 de este anexo. (105)

Las sustancias peligrosas recogidas en la parte 1 están clasificadas de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, mientras que las recogidas en la parte 2 son sustancias peligrosas nominadas y cuyos umbrales prevalecen sobre los establecidos en la parte 1. (105)

En las notas del anexo 1 se indica que las cantidades que se han de tener en cuenta para la aplicación de los artículos pertinentes son las máximas que estén presentes en un momento dado. En este caso, el nitrógeno y el hidrógeno presentes en la cantidad máxima se corresponde con el caudal másico correspondiente a la entrada del reactor, mientras que el amoníaco máximo presente se corresponderá con la corriente de salida del reactor. En cuanto al oxígeno, la cantidad máxima de este se encuentra en la corriente de entrada que entra al compresor C-102 del ciclo de licuefacción de aire de Linde-Claude. En el caso del agua y del nitrógeno la Directiva Seveso no es aplicable. (105)

Para calcular la cantidad en toneladas se ha de considerar un tiempo de almacenamiento de 72 horas. En la Tabla 28, se presentan la clasificación, categoría, la cantidad y los umbrales inferior y superior consultados en la directiva.

Tabla 28. Clasificación de la instalación de acuerdo con la Directiva Seveso III. (105)

Sustancia	Parte del anexo I	Categoría	Umbral inferior (t)	Umbral superior (t)	Cantidad (t)
Hidrógeno	2	Nominada	5	50	146,26
Oxígeno	2	Nominada	200	2000	249,64
Amoníaco anhidro	2	Nominada	50	200	150,00

Teniendo en cuenta que la cantidad de hidrógeno presente en un momento dado del proceso es superior al umbral superior indicado en la directiva, se ha de clasificar la instalación como un establecimiento de nivel superior en base a la Directiva Seveso III.

11.6. Distancias de seguridad

Una distribución de planta y distancias entre equipos adecuadas constituye una medida de seguridad pasiva, ya que ayuda a prevenir y controlar posibles pérdidas. En concreto, la consultora estadounidense *Global Asset Protection Services* (GAPS), ha establecido unas pautas de distribución y espaciado (distancias mínimas entre equipos) orientadas a instalaciones petroleras y químicas con el fin de prevenir pérdidas de propiedad. Cabe mencionar que dichas pautas están orientadas a limitar la sobrepresión de explosión y el daño por exposición al fuego y son aplicables principalmente a estructuras abiertas. Las estructuras al aire libre presentan determinadas características que no se dan en espacios cerrados como puede ser una mayor facilidad de disipación de vapor, una mayor ventilación, una reducción del tamaño del área clasificada eléctricamente y un aumento de la accesibilidad para combatir incendios. (106) (99)

11.6.1. Distancia de seguridad entre áreas

En la Figura 29, se recogen las distancias mínimas recomendadas entre las distintas áreas de la planta de acuerdo con las distancias de seguridad recomendadas por la *Global Asset Protection Services*. En la Figura 30, se presentan las distancias entre las áreas marcadas con asteriscos en la Figura 29.

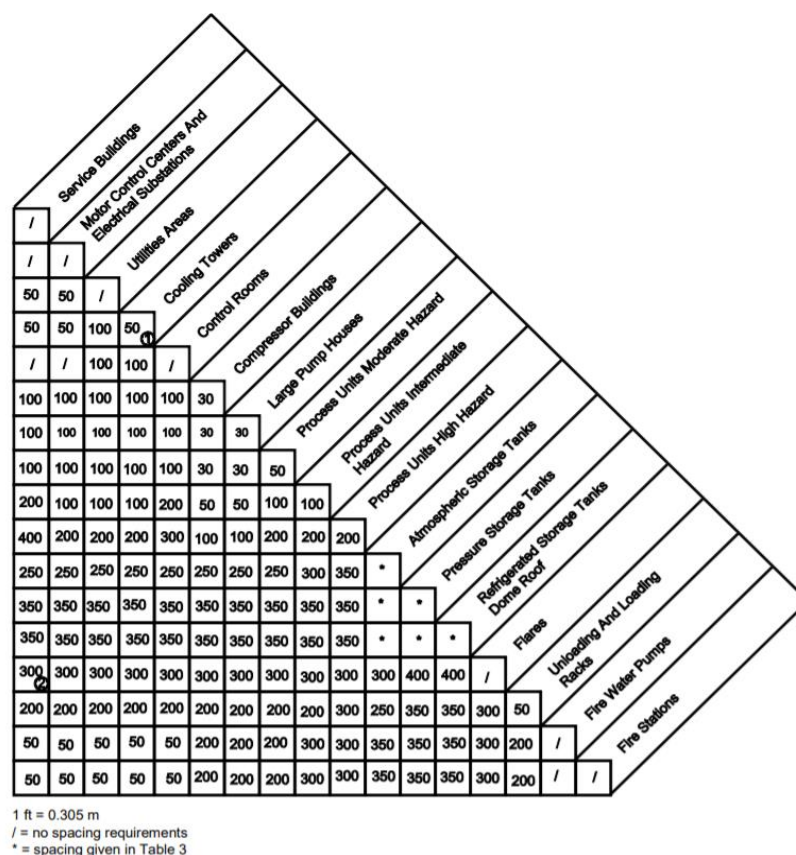


Figura 29. Recomendaciones de espaciado entre áreas para industria petrolera y química (106)

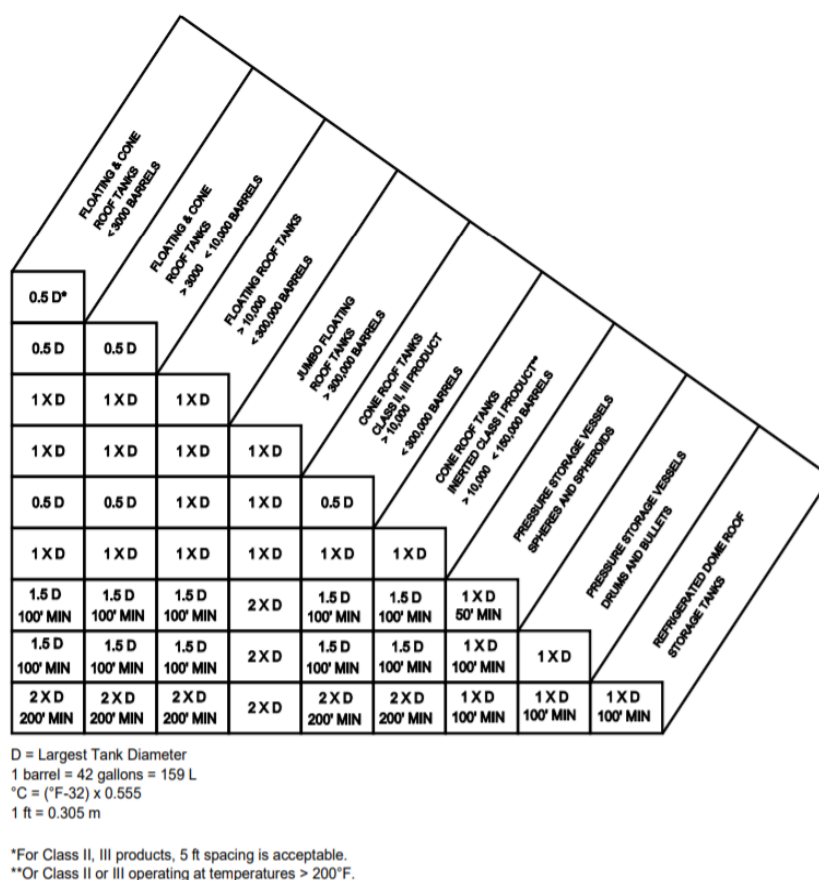


Figura 30. Recomendación de espaciado entre tanques a presión para industria petrolera y química (106)

Documento I. Memoria
Plata de producción de amoníaco verde

Para calcular la distancia entre áreas se ha tenido en cuenta el proceso como altamente peligroso tanto para la Sección 100, 200 como la 300, por trabajar con presiones superiores a 10 bar en el caso de la licuefacción del aire y por ser el oxígeno un compuesto comburente, por ser el hidrógeno altamente inflamable y por las condiciones extremas de temperatura y presión impuestas en el reactor respectivamente. La nomenclatura empleada ha sido la siguiente:

PQ: Parque de tanques

TM: Taller de mantenimiento

LCC: Laboratorio de control de calidad

SC: Sala de control

EB: Estaciones de bomberos y otros servicios de emergencia

AU: Área de utilidades

AP: área de proceso

AS: Área de servicios

CD: Área de carga y descarga

En la Tabla 29, se presenta el cálculo de las distancias de seguridad entre las distintas áreas del proceso expresadas en metros.

Tabla 29. Distancias mínimas de seguridad entre las áreas del proceso en base a las recomendaciones de Global Asset Protection Services

Distancia (m)	PQ	TM	LCC	SC	EB	AU	AP	AS	CD
PQ									
TM	106,75								
LCC	106,75	/							
SC	106,75	/	/						
EB	106,75	15,25	15,25	15,25					
AU	106,75	15,25	15,25	30,50	15,25				
AP	106,75	122,0	122,0	91,50	91,50	61,00			
AS	106,75	/	/	/	15,25	15,25	122,0		
CD	106,75	61,00	61,00	61,00	61,00	61,00	91,50	61,00	

Como se puede observar no existen restricciones de distancia entre el área de servicios, el taller de mantenimiento y el laboratorio de control de calidad por lo que estes estarán juntos.

11.6.2. Distancia de seguridad entre equipos

En la Figura 31, se presentan las distancias mínimas de seguridad entre equipos recomendadas por la *Global Asset Protection Services*. (106)

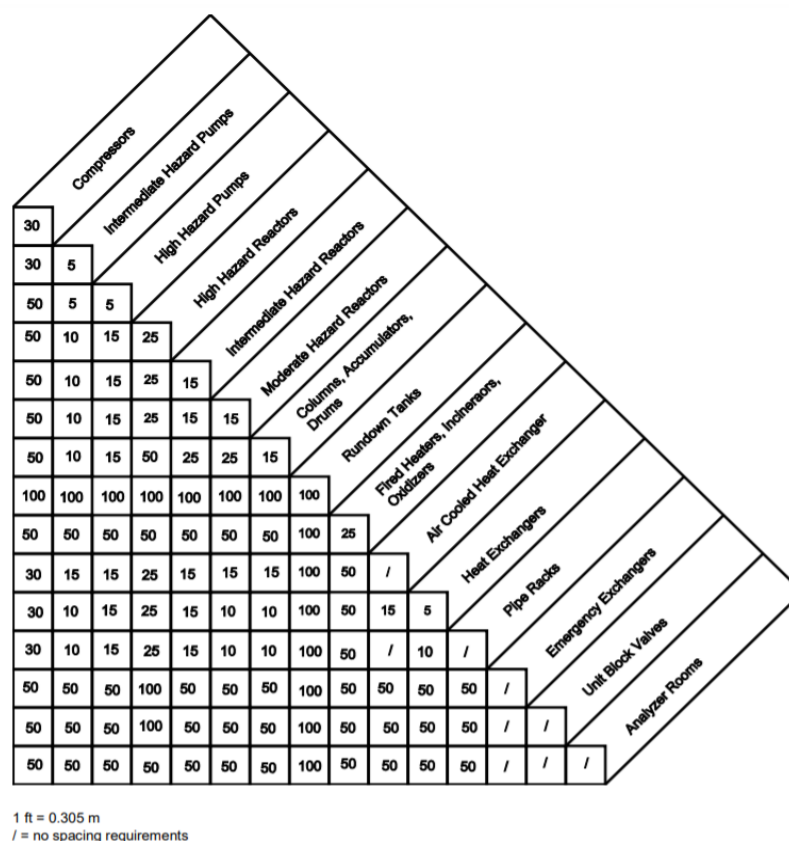


Figura 31. Recomendación de espaciado entre equipos para industria petrolera e industria química (106)

Para la determinación de las distancias mínimas de seguridad entre los equipos del proceso se han agrupado los equipos a través de la siguiente nomenclatura atendiendo al tipo de equipos que hay en la planta (Tabla 30).

Tabla 30. Nomenclatura empleada y listado de equipos asociados

Nomenclatura		Listado de equipos	
C	Compresores y Turbinas	C-101	C-201
		C-102	C-301
		C-103	C-302
		C-104	TUR-301
		TUR-101	
B	Bombas	P-201	
R	Reactores de alta peligrosidad	ELE-201	
		R-301	
T	Columnas de destilación, tanques de separación, tanque de adsorción	V-101	DES-201
		T-101	T-201
		V-102	T-202
		T-102	V-301
ACH	Intercambiadores de calor refrigerados con aire	E-102	
		E-104	
		E-105	

IC	Intercambiadores de calor	E-101	E-301
		E-103	E-302
		E-106	E-303
		E-107	E-304
		E-201	

Se considerará el reactor R-301 como un reactor de alta peligrosidad por contener amoníaco e hidrógeno, clasificados como tóxico y extremadamente inflamables, respectivamente, y debido a las elevadas condiciones de operación del mismo. Dado que en la tabla no se recoge el equipo del electrolizador como tal, este se aproximará como un reactor de alta peligrosidad por ser un reactor electrolítico que contiene hidrógeno.

Por otro lado, en los intercambiadores refrigerados con aire se incluirán los intercambiadores empleados en el proceso de licuefacción de Linde-Claude. Para las distancias de seguridad respecto a las turbinas se emplearán las mismas distancias que se recomiendan para los compresores.

En todo el proceso sólo existe una bomba, la cual se emplea para bombear el agua a temperatura ambiente hasta el electrolizador, por lo que esta se ha considerado de bajo peligro.

En la Tabla 31 se recogen las distancias mínimas recomendadas entre equipos atendiendo a las recomendaciones de *Global Asset Protection Services*.

Tabla 31. Distancias mínimas de seguridad de separación entre equipos en base a las recomendaciones de *Global Asset Protection Services*

Distancias m	C	B	R	T	ACH	IC
C	9,150					
B	/	/				
R	15,25	/	7,625			
T	15,25	/	15,25	4,575		
ACH	9,150	/	7,625	4,575	/	
IC	9,150	/	7,625	3,050	4,575	1,525

11.7. Índice Dow de incendio y explosión

Para poder evaluar el riesgo se emplean distintas metodologías, siendo una de las más empleadas del índice de Explosión e Índice Dow. Este índice es un número que se basa en la naturaleza del proceso, así como en las propiedades de los materiales, y que permite considerar rutas alternativas al proceso menos peligrosa cuando se está comenzando a diseñar el proceso o evaluar el riesgo potencial de una nueva planta. (92)

El índice de explosión e incendio denotado como F&IE indica el nivel de riesgo. Cuanto mayor sea este número mayor será el riesgo asociado a la planta. En la Tabla 32, se presenta una referencia entre la relación del F&IE y el grado de riesgo. (92)

Tabla 32. Relación entre índice de incendio y explosión y el grado de riesgo. (92)

Intervalo F&IE	Grado de riesgo
1-60	Ligero
61-96	Moderado
97-127	Intermedio
128-158	Intenso
>159	Severo

Para determinar el índice Dow se deben identificar las unidades que presentan mayor impacto en la magnitud de cualquier incendio o explosión, que en este proceso se corresponderían con el electrolizador ELE-201 y el reactor R-301, dado que el índice se calcula para estas unidades. Tras seleccionar las unidades más peligrosas del proceso se ha de determinar el factor de material (MF) que se debe multiplicar por un factor de peligro de la unidad (F3), y que es necesario para calcular el F&IE. A su vez el factor de peligro de la unidad se calcula como el producto de dos factores mediante los cuales se expresan los peligros inherentes a la operación de la misma y que se corresponden con el peligro del proceso (F1) en general y en particular (F2). (92)

Dentro de los **procesos en general (F1)** se engloban: reacciones químicas exotérmicas, procesos endotérmicos, manipulación de materiales y su transferencia, unidades de procesos cerrados o internas, acceso a los equipos de emergencia y el control de drenaje y derrames, a los que se le asigna una penalización.

Entre los peligros de **procesos especiales (F2)** se encuentran materiales tóxicos, presión subatmosférica, operación en o cerca del intervalo de flamabilidad, explosión de polvo, alivio de presión, bajas temperaturas, cantidad de material inflamable, corrosión y erosión, fugas, juntas y embalaje, uso de fuego directo para la calentar, sistema de intercambiador de calor a base de aceite caliente y equipos con piezas de rotación.

El factor de material viene tabulado para más de 300 sustancias e indica la velocidad intrínseca de la liberación de energía en explosiones, incendios, etc. Dichos valores se pueden consultar en el manual *Dow's fire & Explosion Index Hazard Classification Guide* elaborado por AIChE y publicado por el Instituto Americano de Ingenieros químicos. Para los compuestos del proceso inflamables se recogen los MF en la Tabla 33, consultados en la bibliografía, ya que el nitrógeno, el agua y el oxígeno no aparecen reflejados en el Apéndice A de la Guía: (107)

Tabla 33. Índices de material para los compuestos del proceso (107)

	MF	Calor de combustión (MJ/kg)
Amoníaco	4	18,6
Hidrógeno	21	120,0

Tal y como se explica en el apartado de determinación del factor de material de la Guía, el MF de una mezcla debería ser obtenido a partir de tests de reactividad química. Sin embargo, como una buena estimación se puede emplear el índice de material del

Documento I. Memoria
Plata de producción de amoníaco verde

compuesto que presenta mayor MF. Por tanto, tanto para el electrolizador ELE-101 como para el reactor R-301, el factor de material será igual al del hidrógeno.

Como se puede observar el índice de Dow obtenido para el electrolizador E-101 es de 85,05, por lo que se encuentra dentro del grado de riesgo moderado. Por otro lado, el valor obtenido para el reactor ha sido de 78,75, por lo que también se encuentra dentro del rango de riesgo moderado.

País: España		Ubicación: Polígono industrial PLISAN, Salvaterra de Miño	
Preparado por: Guillermo Martínez Loureiro Uxía Mata Rivas		Unidad de proceso: Electrolizador ELE-201	
Estado de la unidad del proceso: Diseño		Sección 200	
Compuestos en la unidad H₂, O₂, H₂O		Material básico para el factor de material H₂	
FACTOR DE MATERIAL			21
1. RIESGOS GENERALES DEL PROCESO		Rango de penalidad	Factor de penalidad usado
Base Factor		1.00	1
A. Reacciones químicas exotérmicas		0.30 to 1.25	0
B. Procesos endotérmicos		0.20 to 0.40	0
C. Manejo y transporte de material		0.25 to 1.05	0
D. Unidades de proceso encerradas o interiores		0.25 to 0.90	0,9
E. Acceso		0.20 to 0.35	0,2
F. Drenaje de control y derrames		0.25 to 0.50	0,25
FACTOR DE RIESGO GENERAL DEL PROCESO (F₁)			1,35
2. RIESGOS ESPECIALES DEL PROCESO			
Factor base		1.00	1
A. Materia(es) tóxico(s) [%NH ₃ %]		0.20 to 0.80	0
B. Presión subatmosférica (< 500 mm Hg)		0.50	0
C. Operación cercana al rango inflamable () inertizada (x) sin inertizar			
1. Líquidos inflamables almacenado en tanques		0.50	0,5
2. Fallo en purga o perturbación del proceso		0.30	0,1
3. Operación regular en rango inflamable		0.80	0,8
D. Explosión por polvo		0.25 to 2.00	0
E. Presión Presión de operación (barg): 3,3			
F. Temperatura baja		0.20 to 0.30	0
G. Cantidad de material inflamable/inestable (kg en 10 min)			65,74
1. Líquidos o gases en proceso			0
2. Líquidos o gases almacenados			0
3. Sólidos combustibles almacenados, Polvo en proceso			0
H. Corrosión y erosión		0.10 to 0.75	0,1
I. Fuga. Juntas y empaquetaduras		0.10 to 1.50	1,5
J. Uso de equipos con llama			0
K. Sistema de intercambio de calor con aceite caliente		0.15 to 1.15	0
L. Equipo rotatorio		0.50	0
FACTOR DE RIESGOS ESPECIALES DEL PROCESO (F₂)			3
FACTOR DE RIESGOS DE LA UNIDAD DEL PROCESO (F₁ x F₂) = F₃			4,05
ÍNDICE DE FUEGO Y EXPLOSIÓN (F₃ x MF = F&EI)			85,05

País: España	Ubicación: Polígono industrial PLISAN, Salvaterra de Miño	
Preparado por: Guillermo Martínez Loureiro Uxia Mata Rivas	Unidad de proceso: Reactor R-301	
Estado de la unidad del proceso: Diseño	Sección 300	
Compuestos en la unidad N_2, H_2, O_2, NH_3	Material básico para el factor de material H_2	
FACTOR DE MATERIAL		21
1. RIESGOS GENERALES DEL PROCESO	Rango de penalidad	Factor de penalidad usado
Base Factor	1.00	1
A. Reacciones químicas exotérmicas	0.30 to 1.25	1
B. Procesos endotérmicos	0.20 to 0.40	0
C. Manejo y transporte de material	0.25 to 1.05	0
D. Unidades de proceso encerradas o interiores	0.25 to 0.90	0
E. Acceso	0.20 to 0.35	0
F. Drenaje de control y derrames	0.25 to 0.50	0
FACTOR DE RIESGO GENERAL DEL PROCESO (F_1)		1
2. RIESGOS ESPECIALES DEL PROCESO		
Factor base	1.00	1
A. Materia(es) tóxico(s) [%NH%]	0.20 to 0.80	0
B. Presión subatmosférica (< 500 mm Hg)	0.50	0
C. Operación cercana al rango inflamable () inertizada (x) sin inertizar		
1. Líquidos inflamables almacenado en tanques	0.50	0,5
2. Fallo en purga o perturbación del proceso	0.30	0
3. Operación regular en rango inflamable	0.80	0,8
D. Explosión por polvo	0.25 to 2.00	0
E. Presión Presión de operación (barg): 100,3 Presión de Alivio (barg): 121,11		0,85
F. Temperatura baja	0.20 to 0.30	0
G. Cantidad de material inflamable/inestable (kg en 10 min)		338,55
1. Líquidos o gases en proceso		0
2. Líquidos o gases almacenados		0
3. Sólidos combustibles almacenados, Polvo en proceso		0
H. Corrosión y erosión	0.10 to 0.75	0,1
I. Fuga. Juntas y empaquetaduras	0.10 to 1.50	1,5
J. Uso de equipos con llama		0
K. Sistema de intercambio de calor con aceite caliente	0.15 to 1.15	0
L. Equipo rotatorio	0.50	0
FACTOR DE RIESGOS ESPECIALES DEL PROCESO (F_2)		3,75
FACTOR DE RIESGOS DE LA UNIDAD DEL PROCESO ($F_1 \times F_2$) = F_3		3,75
ÍNDICE DE FUEGO Y EXPLOSIÓN ($F_3 \times MF = F\&EI$)		78,75

Una vez determinado el índice de explosión e incendio es posible conocer el radio y el área de exposición. Para ello, se recurre a la gráfica que relaciona el radio de exposición con el índice de incendio y explosión.

Para el electrolizador E-201 este será aproximadamente igual a 72 ft (21,94 m), mientras que para el reactor R-301 será de 65 ft (19,81). (107)

11.8. Válvulas de alivio

Las válvulas de alivio son dispositivos que permiten aliviar la presión cuando se produce una anomalía en el proceso que provoca una sobrepresión en los equipos de

trabajo. El dimensionamiento de la válvula de alivio del reactor PSV-307, se presenta en el Anexo II, Cálculos justificativos como una medida de seguridad ante posibles escenarios de peligro.

12.LEGISLACIÓN APLICABLE, REGLAMENTOS Y CÓDIGOS

12.1. Legislación eléctrica

- Real Decreto 337/2014, de 9 de mayo, por el que se aprueban el Reglamento sobre condiciones técnicas y garantías de seguridad en instalaciones eléctricas tensión y sus Instrucciones Técnicas Complementarias ITC-RAT 01 a 23.
- Real Decreto 134/2010, de 12 de febrero, por el que se establece el procedimiento de resolución de restricciones por garantía de suministro y se modifica el Real Decreto 2019/1977, de 26 de diciembre, por el que se organiza y regula el mercado de producción de energía eléctrica.
- Orden ITC/1522/2007, de 24 de mayo, por la que se establece la regulación de la garantía del origen de la electricidad procedente de fuentes de energía renovables y de cogeneración de alta eficiencia.
- Orden TED/766/2020, de 3 de agosto, por la que se establecen las bases reguladoras para la concesión, en régimen de concurrencia competitiva, de ayudas a la inversión en instalaciones de generación de energía eléctrica con fuentes de energía renovable, susceptibles de ser cofinanciadas con fondos de la Unión Europea.
- Real Decreto 1106/2020, de 15 de diciembre, por el que se regula el Estatuto de los consumidores electro intensivos.

12.2. Legislación ambiental

12.2.1. Atmósfera y calidad del aire

- Normativa europea

- Directiva 2008/50/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 21 de mayo de 2008, relativa a la calidad del aire ambiente y a una atmósfera más limpia en Europa.

- Normativa española

- Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera.
- Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire.

12.2.2. Prevención y gestión de residuos

- Ley 22/2011, de 28 de julio, de residuos y suelos contaminados
- Directiva 94/31/CE del Consejo, de 27 de junio de 1994, por la que se modifica la Directiva 91/689/CEE relativa a los residuos peligrosos.

12.2.3. Efluentes líquidos

- Ley 10/1993, de 26 de octubre, sobre Vertidos Líquidos Industriales al Sistema Integral de Saneamiento. (BOE-A-1993-31103)
- Real Decreto-Ley 11/1995, de 28 de diciembre, por el que se establecen las normas aplicables al tratamiento de las aguas residuales urbanas (B.O.E. nº 312 30/12/1995).
- Real Decreto Legislativo 1/2001, de 20 de julio, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley de Aguas. (BOE-A-2001-14276)

12.2.4. Contaminación acústica

- Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido (BOE-A-2003-20976)
- Ley 7/2002, de 3 de diciembre, de protección contra la contaminación acústica. (BOE-A-2003-613)
- Real Decreto 1367/2007, de 19 de octubre, por el que se desarrolla la Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido, en lo referente a zonificación acústica, objetivos de calidad y emisiones acústicas. (BOE-A-2007-18397)

12.3. Legislación de seguridad e higiene

- Para el almacenamiento de los productos químicos se debe seguir el **Real Decreto 656/2017**, de 23 de junio, por el que se aprueba el Reglamento de Almacenamiento de Productos Químicos y sus Instrucciones Técnicas Complementarias MIE APQ 0 a 10. (108)
- En lo referente a instalaciones de protección contra incendios y seguridad contra incendios se consultarán el **Real Decreto 513/2017**, de 22 de mayo, por el que se aprueba el Reglamento de instalaciones de protección contra incendio, y el **Real Decreto 2267/2004**, de 3 de diciembre, por el que se aprueba el Reglamento de seguridad contra incendios en los establecimientos industriales, respectivamente. (109) (110)¹
- Para elaborar un plan de emergencia interior o autoprotección para prevenir los accidentes de cualquier tipo y limitar los efectos en la planta, se debe consultar la Directriz básica de protección civil para el control y planificación ante el riesgo de accidentes graves en los que intervienen sustancias peligrosas, aprobada por el **Real Decreto 1196/2003**.
- También se debe consultar la **Ley 31/1995**, de 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales y el **Real Decreto 393/2007**, de 23 de marzo, por el que se aprueba la Norma Básica y de Autoprotección de los centros, establecimientos y dependencias dedicados a actividades que puedan dar origen a situaciones de emergencia. (105) (111)
- Para garantizar la seguridad de la puesta en servicio de las máquinas se debe recurrir al **Real Decreto 166/2008**, de 10 de octubre, por el que se establecen normas para la

¹ Nótese que dichos reglamentos presentan sus respectivas modificaciones, por lo que se debe consultar a mayores el texto consolidado.

comercialización y puesta en servicio de las máquinas. Para evitar la corrosión bajo aislamiento en presencia del agua se recomienda consultar la Guía Estándar para la Simulación en Laboratorio de la Corrosión bajo Aislamiento (ASTMG 189:2007). (112)

- En cuanto a riesgos de tipo eléctrico, se debe acudir al **Real Decreto 337/2014**, de 9 de mayo, por el que se aprueban el Reglamento sobre condiciones técnicas y garantías de seguridad en instalaciones eléctricas de alta tensión y sus Instrucciones Técnicas Complementarias ITC-RAT 01 a 23; y el **Real Decreto 842/2002**, de 2 de agosto, por el que se aprueba el Reglamento electrotécnico para baja tensión. (113) (114)

A mayores cabe mencionar:

- El **Real Decreto 773/1997**, de 30 de mayo, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas a la utilización por los trabajadores de equipos de protección individual
- El **Real Decreto 1215/1997**, de 18 de julio, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud para la utilización por los trabajadores de los equipos de trabajo
- El **Real Decreto 485/1997**, de 14 de abril, sobre disposiciones mínimas en materia de señalización de seguridad y salud en el trabajo
- El **Real Decreto 486/1997**, de 14 de abril, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en los lugares de trabajo
- El **Real Decreto 899/2015**, de 9 de octubre, por el que se modifica el Real Decreto 39/1997, de 17 de enero, por el que se aprueba el Reglamento de los Servicios de Prevención
- El **Real Decreto 614/2001**, de 8 de junio, sobre disposiciones mínimas para la protección de la salud y seguridad de los trabajadores frente al riesgo eléctrico
- El **Real Decreto 374/2001**, de 6 de abril, sobre la protección de la salud y seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo

12.4. Códigos de diseño

- Código ASME Boiler and Pressure Vessel Code
- Normativa TEMA
- Normas UNE
- Normas ISO
- Normas DIN
- Estándar API 520

12.5. Legislación para obra civil

- Ley 38/2015, de 29 de septiembre, del sector ferroviario
- Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen disposiciones mínimas de seguridad y de salud en las obras de construcción.
- ORDEN de 12 de junio de 2019 de aprobación definitiva de la modificación puntual de las normas subsidiarias municipales del Ayuntamiento de Salvaterra de Miño (Pontevedra). (DOG Núm. 132).

- Código de urbanismo de Galicia.
- Ley 4/2012, de 12 de abril, del Área Metropolitana de Vigo
- Ley 2/2016, de 10 febrero, del suelo de Galicia. (66)

12.6. Otros

- Ley 2/2011, de 4 de marzo, de Economía Sostenible. (BOE-A-2011-4117)
- Real Decreto 56/2016, de 12 de febrero, por el que se transpone la Directiva 2012/27/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 25 de octubre de 2012, relativa a la eficiencia energética, en lo referente a auditorías energéticas, acreditación de proveedores de servicios y auditores energéticos y promoción de la eficiencia del suministro de energía.

13. BIBLIOGRAFÍA

1. **Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Wiley Online Library.** Ammonia,1. Introduction. [Online] October 15, 2011. [Cited: febrero 2021, 2022.] https://onlinelibrary-wiley-com.ezbusc.usc.gal/doi/10.1002/14356007.a02_143.pub3.
2. **España., Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico. Gobierno de.** Sector agrícola y ganadero. [Online] [Cited: marzo 2, 2022.] <https://www.miteco.gob.es/es/cambio-climatico/temas/mitigacion-politicas-y-medidas/agricola.aspx#:~:text=La%20superficie%20agraria%20%C3%BAtil%20de,24%25%20al%20cultivo%20en%20regad%C3%ADo..>
3. **Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación. Gobierno de España.** Mercado de fertilizantes: Enero 2020-Diciembre 2020. [Online] [Cited: marzo 2, 2022.] https://www.mapa.gob.es/es/estadistica/temas/estadisticas-agrarias/pdf2020c_tcm30-564677.pdf.
4. **Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico.** Fabricación de amoníaco (Emisiones de proceso). [Online] 2019. [Cited: marzo 2, 2022.] https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/sistema-espanol-de-inventario-sei-/040403-fabricac-nh3_tcm30-502315.pdf.
5. **Consejo Europeo.** Pacto Verde Europeo. [Online] febrero 22, 2022. [Cited: marzo 2, 2022.] <https://www.consilium.europa.eu/es/policies/green-deal/>.
6. **Consejo Europeo.** Energía limpia: estimular la transición a una economía hipocarbónica. [Online] agosto 12, 2021. [Cited: marzo 2, 2022.] <https://www.consilium.europa.eu/es/policies/clean-energy/>.
7. **Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. Gobierno de España.** Hoja de Ruta del Hidrógeno: una apuesta por el hidrógeno renovable. [Online] Julio 2020. [Cited: marzo 2, 2022.] https://energia.gob.es/es-es/Novedades/Documents/hoja_de_ruta_del_hidrogeno.pdf.
8. **Crown Publications.** Green hydrogen, ammonia and urea solutions from thyssenkrupp Uhde. [Online] octubre 7, 2021. [Cited: marzo 2, 2022.] <https://www.crown.co.za/mechchem-africa/industry-innovations/18453-green-hydrogen-ammonia-and-urea-solutions-from-thyssenkrupp-uhde>.

9. **Gobierno de España.** PERTE de Energías Renovables, Hidrógeno Renovable y Almacenamiento. [Online] 2021. [Cited: marzo 10, 2022.] <https://www.lamoncloa.gob.es/presidente/actividades/Documents/2021/151221-Informe-pertes-renovables-2021.pdf>.
10. **Thyssenkrupp.** Green ammonia- Save costs and CO2 by using renewable energy. [Online] 2020. [Cited: marzo 2, 2022.] <https://www.thyssenkrupp-industrial-solutions.com/power-to-x/en/green-ammonia>.
11. **Gerhartz, Wolfgang, et al.** *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*. 2000.
12. **American Chemical Society.** SciFinder. [Online] American Chemical Society. [Cited: Marzo 15, 2022.] <https://scifinder-n.cas.org/?referrer=scifinder.cas.org>.
13. *Ammonia as an effective hydrogen carrier and a clean fuel for solid oxide fuel cells.* **Zhijian Wan, Youkun Tao, Jing Shao, Yinghui Zhang, Hengzhi You.** 113729, 2021, Energy Conversion and Management, Vol. 228. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113729>.
14. **IHS Markit.** Ammonia Fertilizer Market and Price Analysis. *IHS Markit*. [Online] Julio 2022. [Cited: Marzo 4, 2022.] <https://ihsmarkit.com/products/fertilizers-ammonia.html>.
15. **Fernández, Lucía.** statista. *Production capacity of ammonia worldwide from 2018 to 2021, with a forecast for 2026 and 2030*. [Online] Febrero 14, 2022. [Cited: Marzo 4, 2022.] <https://www.statista.com/statistics/1065865/ammonia-production-capacity-globally/>.
16. **CISION PR Newswire.** Green Ammonia Market by Technology, End-user and Region - Global Forecast to 2030. [Online] febrero 3, 2022. [Cited: marzo 20, 2022.] <https://www.prnewswire.com/news-releases/green-ammonia-market-by-technology-end-user-and-region---global-forecast-to-2030-301474942.html#:~:text=The%20global%20green%20ammonia%20market,an%20electrochemical%20Haber%20Bosch%20system..>
17. **Agricultural Market Information System.** Market Monitor. *AMIS*. [Online] 2022. [Cited: Marzo 4, 2022.] <http://www.amis-outlook.org/home/en/>.
18. **NationMaster.** Global Trends, Statistics and Insights for Ammonia. *NationMaster*. [Online] 2019. [Cited: Marzo 4, 2022.] <https://www.nationmaster.com/nmx/sector/ammonia#supply>.
19. **Observatorio de Complejidad Económica.** Amoníaco Anhidro o en Disolución Acuosa. *OEC*. [Online] 2019. [Cited: Marzo 4, 2022.] <https://oec.world/es/profile/hs92/ammonia>.
20. **Yara International ASA.** Ammonia. *Yara Knowledge Grows*. [Online] [Cited: Marzo 13, 2022.] <https://www.yara.com/chemical-and-environmental-solutions/base-chemicals/ammonia/>.
21. **Fortune Business Insights.** The global ammonia market is projected to grow from \$71.98 billion in 2021 to \$110.93 billion in 2028 at a CAGR of 6.4% in forecast period, 2021-2028... Read More at:- <https://www.fortunebusinessinsights.com/industry-reports/ammonia-market-101716>. *Fortune Business Insights*. [Online] Julio 2021. [Cited:

Marzo 13, 2022.] <https://www.fortunebusinessinsights.com/industry-reports/ammonia-market-101716>.

22. **Green Ammonia Market.** Green Ammonia Market by Technology (Alkaline Water Electrolysis (AWE), Proton Exchange Membrane (PEM), and Solid Oxide Electrolysis (SOE)), End User (Transportation, Power Generation, and Industrial Feedstock) and Region - Global Forecast to 2030. [Online] [Cited: marzo 20, 2022.] <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/green-ammonia-market-118396942.html#:~:text=Major%20ammonia%20producing%20companies%20include,Bosh%20process%20for%20producing%20ammonia..>

23. **Mordor Intelligence.** AMMONIA MARKET - GROWTH, TRENDS, COVID-19 IMPACT, AND FORECASTS (2022 - 2027). *Mordor Intelligence*. [Online] 2022. [Cited: Marzo 13, 2022.] <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/ammonia-market>.

24. **Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación.** *Mercado de Fertilizantes*. 2020.

25. **Grupo Fertiberia.** La producción como base del liderazgo. [Online] 2021. [Cited: marzo 18, 2022.] <https://www.grupofertiberia.com/es/estructura/centros-de-produccion/>.

26. —. Una estructura sólida y consolidada. [Online] 2021. [Cited: marzo 18, 2022.] <https://www.grupofertiberia.com/es/estructura/>.

27. **YARA ESPAÑA.** Químicos Nitrogenados. [Online] [Cited: marzo 19, 2022.] [https://www.yara.es/productos-quimicos-nitrogenados-y-soluciones-medioambientales/quimicos-nitrogenados/amoniac-industrial/#:~:text=Aminas%3A%20uno%20de%20los%20usos,\)2C%20poliuretano%2C%20resinas%20y%20pinturas](https://www.yara.es/productos-quimicos-nitrogenados-y-soluciones-medioambientales/quimicos-nitrogenados/amoniac-industrial/#:~:text=Aminas%3A%20uno%20de%20los%20usos,)2C%20poliuretano%2C%20resinas%20y%20pinturas).

28. **Ercros.** Amoníaco. [Online] [Cited: marzo 19, 2022.] http://www.ercros.es/index.php?option=com_content&view=article&id=140&Itemid=373&lang=es#:~:text=La%20f%C3%A1brica%20de%20Sabi%C3%B1igo%20es,y%20clorato%20s%C3%B3dico%20del%20centro..

29. —. Capacidades de producción. División de derivados del cloro. [Online] [Cited: marzo 19, 2022.]

30. **ARENHA.** Advanced materials and Reactors for ENergy storage tHrough Ammonia. [Online] abril 1, 2020. [Cited: marzo 4, 2022.] <https://arenha.eu/sites/arenha.drupal.pulsartecnalia.com/files/documents/ARENHA%20Newsletter%20Issue%202%20-%20June%202021.pdf>.

31. **LLORCA, Jordi.** *El hidrógeno y nuestro futuro energético*. Madrid : Edicions de la Universitat Politècnica de Catalunya, SL, 2010. 978-84-9880-428-7.

32. **FERTIBERIA.** Fábrica de Palos-Huelva. [Online] [Cited: marzo 6, 2022.] https://www.grupofertiberia.com/media/605356/palos_esp.pdf.

33. **GIL CALVO, Myryam.** Producción de hidrógeno por oxidación parcial de metano sobre catalizadores drivados de aluminato de níquel. [Online] Departamento de Ingeniería Química. Universidad del País Vasco, Octubre 2018. [Cited: marzo 6, 2022.] <https://addi.ehu.es/handle/10810/31648>.

34. **PATTABATHULA, Venkkat; RICHARDSON, Jim.** Introduction to Ammonia Production. [Online] AIChE. The global Home of Chemical Engineers, Septiembre 2016. [Cited: marzo 4, 2022.] <https://www.aiche.org/sites/default/files/cep/20160969.pdf>.
35. **GONZALEZ-ROCHA, J.C; LONGORIA-RAMIREZ, R y URQUIZA-BELTRAN, G.** Resultados de la simulación de gasificación del coque de petróleo mexicano de las refinerías de Ciudad Madero y Cadereyta. [Online] Ing. invest. y tecnol. Vol.9, n.2, pp.99-11, 2008. [Cited: marzo 6, 2022.] http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1405-77432008000200002&lng=es&nrm=iso.2594-0732.
36. **Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry.** Ammonia,2. Production Processes. [Online] octubre 15, 2011. [Cited: marzo 7, 2022.] https://onlinelibrary-wiley-com.ezbusc.usc.gal/doi/10.1002/14356007.o02_o11.
37. **ROSSETTI, Ilenia.** Reactor Design, Modelling and Process Intensification for Ammonia Synthesis. [Online] Springer Nature Switzerland AG 2020, enero 10, 2020. [Cited: marzo 8, 2022.] https://doi.org/10.1007/978-3-030-35106-9_2.
38. **DOMÉNECH MARTÍNEZ, M.** Tecnologías de Producción de Hidrógeno basadas en Métodos Biológicos. [Online] Ministerio de Ciencia e Innovación. Gobierno de España. Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (Ciemat), diciembre 2020. [Cited: marzo 8, 2022.] <https://www.ciemat.es/portal.do?TR=A&IDR=1&identificador=848#:~:text=3.1%20BIOFOT%C3%93LISIS,-La%20biofot%C3%B3lisis%20es&text=Se%20trata%2C%20por%20tanto%2C%20de,vez%20de%20electrodos%20como%20mediadores..>
39. **FERREIRA SOARES, J., CONFORTIN, T., TODERO, I., DIAS MAYER, F., MAZUTTI, A.** Dark fermentative biohydrogen production from lignocellulosic biomass: Technological challenges and future prospects. [Online] Renewable Sustainable Energy Reviews, January 2020. [Cited: marzo 8, 2022.] <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032119306926>. 1364-0321.
40. **JAMES, Brian D., DESANTIS, Daniel A., SAUR, Genevieve.** Final Report: Hydrogen Production Pathways Cost Analysis (2013-2016). [Online] Strategic Analysis, septiembre 30, 2016. [Cited: marzo 8, 2022.] <https://www.osti.gov/servlets/purl/1346418>.
41. **CHICA, Antonio, FERNÁNDEZ, Asunción, GRASA, Gemma y otros.** Tecnologías del Hidrógeno. [Online] Boletín Grupo Español Carbón, diciembre 2020. [Cited: marzo 10, 2022.] http://www.gecarbon.org/boletines/articulos/BoletinGEC_058-art5.pdf.
42. **IDAE. Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía.** Biogás. [Online] 2020. [Cited: marzo 10, 2022.] <https://www.idae.es/tecnologias/energias-renovables/uso-termico/biogas>.
43. **MORANTE, Juan, ANDREU, Teresa, GARCÍA, Gozton, GUILERA, Jordi, TARANCÓN, Albert, TORELL, Marc.** Hidrógeno. Vector energético de una economía descarbonizada. [Online] Fundación Naturgy, 2020. [Cited: marzo 10, 2022.] <https://www.fundacionnaturgy.org/publicacion/hidrogeno-vector-energetico-de-una-economia-descarbonizada/>. 978-84-09-22546-0.

44. **IDAE. Ministerio de Industria, Turismo y Comercio.** . Biomasa. Gasificación. [Online] octubre 2007. [Cited: marzo 9, 2022.] https://www.idae.es/sites/default/files/publications/online/31/biomasa%20gasificacion_opf_files/pdfs/biomasa-gasificacion.pdf.
45. **RASHID, M., MESFER, M., NASEEM, H., DANISH, M.** Hydrogen Production by Water Electrolysis: A Review of Alkaline Water Electrolysis, PEM Water Electrolysis and High Temperature Water Electrolysis. [Online] International Journal of Engineering and Advanced Technology (IJEAT), Febrero 7, 2015. [Cited: marzo 11, 2022.] https://www.researchgate.net/publication/273125977_Hydrogen_Production_by_Water_Electrolysis_A_Review_of_Alkaline_Water_Electrolysis_PEM_Water_Electrolysis_and_High_Temperature_Water_Electrolysis/citations.
46. **SCHMIDT, O., GAMBHIR, A., STAFFELL, I., HAWKERS, A., NESLSON, J., FEW, S.** Future cost and performace of water electrolysis: An expert elicitation study. [Online] 2019. [Cited: marzo 12, 2022.] <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.10.045..>
47. **OSMAS, Ola, SGOURIDIS, Sgouris, SLEPTCHENKO, Andrei.** Scaling the production of renewable ammonia: A techno-economic optimization applied in regions with hifh insolation. [Online] Journal of Cleaner Production, june 2020, 2020. [Cited: marzo 10, 2022.] <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.121627>.
48. **ARIEMA.** Producción de Hidrógeno. [Online] julio 16, 2019. [Cited: marzo 10, 2022.] [https://www.ariema.com/produccion-de-h2#:~:text=Term%C3%B3lisis,del%20proceso%20\(%E2%89%881000K\)..](https://www.ariema.com/produccion-de-h2#:~:text=Term%C3%B3lisis,del%20proceso%20(%E2%89%881000K)..)
49. **Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry.** Nitrogen. [Online] octubre 15, 2013. [Cited: marzo 13, 2022.] https://doi-org.ezbusc.usc.gal/10.1002/14356007.a17_457.pub2.
50. **SMITH, A.R., KLOSEK, J.** A review of air separation technologies and their integratin with energy conversion processes. [Online] Fuel Processing Technology, noviembre 30, 2000. [Cited: marzo 13, 2022.]
51. **Air Liquide.** Gran unidad de separación de aire. [Online] 2022. [Cited: marzo 13, 2022.] <https://www.engineering-airliquide.com/es/gran-unidad-separacion-aire#:~:text=Las%20grandes%20unidades%20de%20separaci%C3%B3n,de%20productos%20de%20alta%20presi%C3%B3n..>
52. **Atlas Copco.** Tecnología de generación de nitrógeno con adsorción de nitrógeno por cambio de presión (PSA). [Online] [Cited: marzo 14, 2022.] [https://www.atlascopco.com/es-es/compressors/wiki/compressed-air-articles/what-is-nitrogen#:~:text=La%20adsorci%C3%B3n%20por%20cambio%20de%20presi%C3%B3n%20atrapa%20el%20ox%C3%ADgeno%20de,molecular%20de%20carbono%20\(CMS\)..](https://www.atlascopco.com/es-es/compressors/wiki/compressed-air-articles/what-is-nitrogen#:~:text=La%20adsorci%C3%B3n%20por%20cambio%20de%20presi%C3%B3n%20atrapa%20el%20ox%C3%ADgeno%20de,molecular%20de%20carbono%20(CMS)..)
53. —. Generación de nitrógeno utilizando tecnología de membrana. [Online] [Cited: marzo 14, 2022.] <https://www.atlascopco.com/es-es/compressors/wiki/compressed-air-articles/generating-nitrogen-membrane>.

54. **Ullmann's Encyclopedoa of Industrial Chemistry.** Ammonia, 4. Green Ammonia Production. [Online] mayo 28, 2020. [Cited: marzo 14, 2022.] https://doi-org.ezbusc.usc.gal/10.1002/14356007.w02_w02.

55. **Secretaría General para el Territorio y la biodiversidad. Ministerio de medio ambiente.** Manual para la identificación de las presiones y análisis del impacto en aguas superficiales. [Online] [Cited: marzo 21, 2022.] https://www.miteco.gob.es/es/agua/publicaciones/impress_tcm30-214065.pdf.

56. **PULIDO, Manuel; ESCRIVA, Alvar; MACIÁN, Héctor.** Balance hídrico actual y futuro en las cuencas en España, déficits estructurales e implicaciones socioeconómicas. [Online] fedea, noviembre 2020. [Cited: marzo 22, 2022.] <https://documentos.fedea.net/pubs/eee/eee2020-38.pdf>.

57. **Instituto Nacional de Estadística.** Agricultura y medio ambiente. Coste unitario del agua. [Online] [Cited: marzo 23, 2022.] <https://www.ine.es/dynInfo/Infografia/Territoriales/capituloGraficos.html#!graf>.

58. **Red Eléctrica de España.** El sistema eléctrico español. Avance 2021. [Online] enero 11, 2022. [Cited: marzo 22, 2022.] https://www.ree.es/sites/default/files/publication/2022/03/downloadable/Avance_ISE_2021.pdf.

59. —. Las energías renovables en el sistema eléctrico español en 2020. [Online] junio 2021. [Cited: marzo 23, 2022.] https://www.ree.es/sites/default/files/publication/2021/06/downloadable/informe_renovables_2020_0.pdf.

60. **Confederación Hidrográfica Miño-Sil.** Plan Hidrológico de la parte española de la Demarcación Hidrográfica del Miño-Sil ciclo 2021-2027. [Online] [Cited: marzo 24, 2022.] https://www.chminosil.es/images/planificacion/documentos-iniciales-2021-2027_vdc/01.MEMORIA.pdf.

61. **Google Maps.** Salvaterra do Miño. [Online] [Cited: marzo 27, 2022.] <https://www.google.com/maps/place/36450+Salvatierra+de+Mi%C3%B1o,+Pontevedra/@42.7413628,-8.326793,323886m/data=!3m1!1e3!4m5!3m4!1s0xd2582b24eea70e9:0x380413c40d832f1f!8m2!3d42.0833836!4d-8.5002777>.

62. **Ingestin Real Estate.** Información sobre polígonos industriales de Galicia. [Online] [Cited: marzo 27, 2022.] <https://www.ingestin.com/poligonos-industriales-de-galicia-informacion/#>.

63. **universia.** Listado de empresas. [Online] [Cited: marzo 24, 2022.] <https://guiaempresas.universia.es/>.

64. **Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado.** Ley 38/2015, 29 de septiembre, del sector ferroviario. [Online] marzo 1, 2022. [Cited: marzo 28, 2022.] <https://www.boe.es/eli/es/l/2015/09/29/38/con>.

65. **La Voz de Galicia.** Una segunda tubería bajo las vías evitará cortes de agua prolongados. [Online] diciembre 27, 2017. [Cited: marzo 28, 2022.] https://www.lavozdegalicia.es/noticia/lemos/2017/12/27/segunda-tuberia-bajo-vias-evitara-cortes-agua-prolongados/0003_201712M27C1992.htm.

66. **Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado.** Código de Urbanismo de Galicia. [Online] marzo 7, 2022. [Cited: marzo 28, 2022.] https://www.boe.es/biblioteca_juridica/codigos/codigo.php?id=072_Codigo_de_Urbanismo_de_Galicia&modo=2.
67. **Concello Salvaterra de Miño.** Eurocidade Monçao-Salaterra de Miño. [Online] [Cited: marzo 28, 2022.] <https://turismo.concellodesalaterra.org/eurociudad>.
68. **Comisión Europea.** Innovation Fund. [Online] [Cited: marzo 28, 2022.] https://ec.europa.eu/clima/eu-action/funding-climate-action/innovation-fund_es?etras=es.
69. —. Plan de recuperación para Europa. [Online] [Cited: marzo 28, 2022.] https://ec.europa.eu/info/strategy/recovery-plan-europe_es.
70. **Instituto Enerxético de Galicia (INEGA).** GALICIA ASPIRA A CONVOCAR EN 2022 AXUDAS POR MÁIS DE 128M€ PARA FAVORECER O AFORRO ENERXÉTICO E O USO DE ENERXÍAS RENOVABLES EN FOGARES E EMPRESAS. [Online] marzo 25, 2022. [Cited: marzo 28, 2022.] <http://www.inega.gal/novas/novas/2022/>.
71. **AVANSUM.** Ayudas a empresas de nueva creación. [Online] [Cited: marzo 28, 2022.] <https://avansum.com/ayudas-a-empresas-de-nueva-creacion-tr807i/>.
72. **Instituto Galego de Estatística (IGE).** Salvaterra de Miño. [Online] [Cited: marzo 28, 2022.] https://www.ige.gal/igebdt/esq.jsp?paxina=000&c=-1&idioma=gl&ruta=fichas%2Fbdmunicipal_tablas.jsp%3FESP%3D36050.
73. **datosmacro.com.** Paro por municipios: As Neves (Pontevedra). [Online] [Cited: marzo 28, 2022.] <https://datosmacro.expansion.com/paro/espana/municipios/galicia/pontevedra/neves-as>.
74. **Escola de Enxeñería Industrial. Universidade de Vigo.** Grados. [Online] [Cited: marzo 28, 2022.] <https://eei.uvigo.es/es/estudios/grados/>.
75. **Puerto de Vigo. Autoridad Portuaria de Vigo.** PLISAN. [Online] 2021. [Cited: marzo 29, 2022.] <https://www.apvigo.es/es/paginas/plisan>.
76. **Puerto de Vigo, Autoridad Portuaria de Vigo.Consorcio Zona Franca de Vigo. Xunta de Galicia.** Plataforma Logístico Industrial en Salvaterra-As Neves. [Online] [Cited: marzo 29, 2022.] <https://www.apvigo.es/descargas/descargar/5672/Presentaci%C3%B3n%20comercializaci%C3%B3n%20PLISAN%202022.pdf>.
77. **Puerto de Vigo. Consorcio zona franca de Vigo. Instituto da vivenda e solo.** Condiciones e suministro de servicios a los usuarios de la PLISAN. [Online] [Cited: marzo 29, 2022.] http://igvs.xunta.gal/ipecos-opencms-portlet/export/sites/default/PortalVivenda/Biblioteca/210602_Condiciones_suministro_servicios_a_usuarios_V3.pdf.
78. **La Voz de Galicia.** Oferta de suelo en el puerto seco: 250.000 metros cuadrados a 70 euros el metro como máximo. [Online] abril 10, 2021. [Cited: marzo 29, 2022.] <https://www.lavozdeg Galicia.es/noticia/vigo/2021/04/09/plisan-sigue-oferta-vender-350000-metros-cuadrados/00031617984811405467999.htm>.

79. **Ammonia Energy Association.** Small-scale ammonia: where the economics work and the technology is ready. [Online] septiembre 21, 2018. [Cited: marzo 20, 2022.] <https://www.ammoniaenergy.org/articles/small-scale-ammonia-where-the-economics-work-and-the-technology-is-ready/>.

80. **AICHE. The Global Home of Chemical Engineers.** Introduction to Ammonia Production. [Online] septiembre 2016. [Cited: marzo 20, 2022.] <https://www.aidhe.org/resources/publications/cep/2016/september/introduction-ammonia-production>.

81. **Conselleria d'agricultura, desenvolupament rural, emergència climàtica i transició ecològica.** Calidad ambiental. Composición química. [Online] [Cited: marzo 21, 2022.] <https://agroambient.gva.es/es/web/calidad-ambiental/composicion-quimica>.

82. **AQUAE Fundación.** ¿Cuánta agua hay en la tierra? ¿Y cuánta es apta para consumo? [Online] [Cited: marzo 21, 2022.] <https://www.fundacionaquae.org/cuanta-agua-en-la-tierra/>.

83. **Ammonia Energy Association.** Green Ammonia Plants, Commercially Available Today. [Online] [Cited: marzo 22, 2022.] <https://www.ammoniaenergy.org/articles/green-ammonia-plants-commercially-available-today/>.

84. **Feníe Energía. Electricidad Condado S.L.** Súmese al ahorro energético con Feníe Energía. [Online] [Cited: marzo 25, 2022.] <https://www.electricidadcondado.es/fenie-energia-condado.aspx>.

85. **Canales sectoriales Interempresas.** Nexus Energía y el CEAGA renuevan su acuerdo para suministrar energía verde a sus miembros. [Online] enero 14, 2022. [Cited: marzo 28, 2022.] <https://www.interempresas.net/Energia/Articulos/376802-Nexus-Energia-Cluster-Empresas-Automocion-Galicia-renuevan-acuerdo-suministrar-energia.html>.

86. **Ingersoll Rand.** Separación de aire. [Online] [Cited: marzo 20, 2022.] <https://www.ingersollrand.com/es-es/industries-served/air-separation>.

87. **ARIEMA.** Electrolizadores. [Online] [Cited: marzo 21, 2022.] <http://www.ariema.com/hidrogeno/ariema-equipos-e-instalaciones-h2/electrolizadores>.

88. **Ammonia Process A60TM.** Wide Knowledge condensed in a small plant. [Online] [Cited: marzo 21, 2021.] <https://www.kongrespolskachemia.pl/files/84723514/ammoniaa6020190115.pdf>.

89. **QNP, NEOEN, Worley.** QNP Green Ammonia Project Feasibility Study Knowledge Sharing Report. [Online] Junio 2020. [Cited: marzo 21, 2022.] <https://arena.gov.au/assets/2020/07/qnp-green-ammonia-feasibility-study.pdf>.

90. **MAFRE Global Risks.** La seguridad en la industria del hidrógeno verde. [Online] 2022. [Cited: marzo 23, 2022.] <https://www.mapreglobalrisks.com/gerencia-riesgos-seguros/articulos/la-seguridad-en-la-industria-del-hidrogeno-verde/>.

91. **Chemical Technology Lab.** Tecnología Química Industrial. Componentes del aire y tecnologías para su separación. . [Online] [Cited: junio 14, 2022.] http://www.diquima.upm.es/old_diquima/docencia/tqindustrial/docs/cap_aire.pdf.

92. **SINNOT, Ray, TOWLER, Gavin.** *Diseño en ingeniería química*. Barcelona : Reverté, 2012. 978-84-291-7199-0.
93. **Stephanopoulos, George.** *Chemical Process Control. An Introduction to Theory and Practice*. New Jersey : Prentice Hall, 1984.
94. **Ollero de Castro, Perdo and Fernández Camacho, Eduardo.** *Control e Instrumentación de Procesos Químicos*. Madrid : SINTESIS, 2006. 84-7738-517-3.
95. **Svrcek, William Y., Mahoney, Donald P. and Young, Brent R.** *A Real-Time Approach to Process Control (Third Edition)*. New Delhi, India : John Wiley & Sons, Ltd, 2014.
96. **Acedo Sánchez, José.** *Control Avanzado de Procesos. Teoría y Práctica*. Madrid : Díaz de Santos, 2003. 84-7978-545-4.
97. **Storch de Gracia, J. M^a and García Martín, T.** *Seguridad Industrial en Plantas Químicas y energéticas*. España : Diaz de Santos, 2^aed., 2008. 978-84-7978-864-3.
98. **Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado.** Reglamento (CE) n° 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas, y por el que se modifican y derogan las Directivas 67/548/CEE y 1999/45/CE y se modifica el . [Online] diciembre 31, 2008. [Cited: diciembre 2021, 11.] <https://www.boe.es/buscar/doc.php?id=DOUE-L-2008-82637>.
99. **ARES, José Luis, BOUZAS, Miguel, LAGO, Manuel Ángel, MARTÍNEZ, Guillermo, MATA, Uxía.** *Diseño de una planta de producción de acetaldehído. s.l. : Proyectos y diseño de instalaciones. Escola Técnica Superior de Enxeñería. Universidade de Santiago de Compostela., 2022.*
100. **ECHA.** Guía sobre fichas de datos de seguridad y escenarios de exposición. [Online] junio 2018. [Cited: diciembre 11, 2021.] https://echa.europa.eu/documents/10162/2138220/sds_es_guide_es.pdf.
101. **TP-Laboratorio Químico.** Rombo NFPA 704. [Online] [Cited: diciembre 11, 2021.] <https://www.tplaboratorioquimico.com/laboratorio-quimico/seguridad-industrial-y-primeros-auxilios/rombo-nfpa-704.html>.
102. **National Fire Protection Association.** Standard System for the Identification of the Hazards of Materials for Emergency Response. [Online] [Cited: diciembre 11, 2021.] <https://www.nfpa.org/codes-and-standards/all-codes-and-standards/list-of-codes-and-standards/detail?code=704>.
103. **Instituto Nacional de Seguridad e higiene en el trabajo. Ministerio de trabajo y asuntos sociales. España.** NTP 527: Reacciones químicas exotérmicas (I): factores de riesgo y prevención. [Online] 1999. [Cited: junio 12, 2022.] https://www.insst.es/documents/94886/326853/ntp_527.pdf/4d32ceae-c81f-44c2-97c0-a7a6c736ddbc?version=1.0&t=1614698532952#:~:text=Reacciones%20qu%C3%ADmicas%20fuera%20de%20control&text=Una%20reacci%C3%B3n%20qu%C3%ADmica%20de%20naturaleza,catastr%C3%B3ficos.

104. **AICHE. Center for Chemical Process Safety.** Chemical Reactivity Worksheet. [Online] julio 12, 2019. [Cited: diciembre 11, 2021.] <https://www.aiche.org/ccps/resources/chemical-reactivity-worksheet>.

105. **Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado.** Real Decreto 840/2015, de 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas. [Online] octubre 20, 2015. [Cited: diciembre 11, 2021.] https://www.boe.es/diario_boe/txt.php?id=BOE-A-2015-11268.

106. **GAPS Guidelines GAP.2.5.2 A.** Publication of Global Asset Protection Services LLC OIL AND CHEMICAL PLANT LAYOUT AND SPACING. [Online] [Cited: diciembre 15, 2021.] https://www.academia.edu/40897426/GAPS_Guidelines_GAP_2_5_2_A_Publication_of_Global_Asset_Protection_Services_LLC_OIL_AND_CHEMICAL_PLANT_LAYOUT_AND_SPACING.

107. **AIChE.** *Dow's Fire & Explosion Index Hazard Classification Guide*. U.S.A. : s.n., 1994. 0-8169-0623-8.

108. **Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado.** Real Decreto 656/2017, de 23 de junio, por el que se aprueba el. [Online] julio 25, 2017. [Cited: diciembre 11, 2021.] <https://www.boe.es/buscar/pdf/2017/BOE-A-2017-8755-consolidado.pdf>.

109. —. Real Decreto 513/2017, de 22 de mayo, por el que se aprueba el Reglamento de instalaciones de protección contra incendios. [Online] junio 12, 2017. [Cited: de 11, 2021.] https://www.boe.es/diario_boe/txt.php?id=BOE-A-2017-6606.

110. —. Real Decreto 2267/2004, de 3 de diciembre, por el que se aprueba el Reglamento de seguridad contra incendios en los establecimientos industriales. [Online] diciembre 17, 2004. [Cited: diciembre 11, 2021.] <https://www.boe.es/buscar/doc.php?id=BOE-A-2004-21216>.

111. **Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado.** Real Decreto 393/2007. [Online] marzo 24, 2007. [Cited: diciembre 15, 2021.] <https://www.boe.es/buscar/doc.php?id=BOE-A-2007-6237>.

112. **Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado.** Real Decreto 1644/2008. [Online] octubre 11, 2008. [Cited: diciembre 15, 2021.] <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-2008-16387&tn=1&p=20120317>.

113. —. Real Decreto 337/2014. [Online] junio 9, 2014. [Cited: diciembre 15, 2021.] <https://www.boe.es/buscar/doc.php?id=BOE-A-2014-6084>.

114. —. Real Decreto 842/2002. [Online] septiembre 18, 2002. [Cited: diciembre 15, 2021.] <https://www.boe.es/buscar/doc.php?id=BOE-A-2002-18099>.

115. **Augas de Galicia.** Proposta de Proxecto de Plan Hidrolóxico Galicia-Costa 2021-2027 (Memoria). . [Online] abril 2021. [Cited: marzo 24, 2022.] https://augasdegalicia.xunta.gal/c/document_library/get_file?file_path=/portal-augas-de-galicia/participacion_na_planificacion_hidroloxica/PHGC/Memoria_PPHH_CP2127_GL.pdf.

ANEXO I:

BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

1. ÍNDICE

1.	ÍNDICE	1
2.	BALANCES DE MATERIA	2
2.1.	Introducción	2
2.2.	Balance de materia global.....	2
2.3.	Balances de materia por equipos	3
2.3.1.	Sección 100	3
2.3.2.	Sección 200	9
2.3.3.	Sección 300	11
3.	BALANCES DE ENERGÍA.....	13
3.1.	Sección 100.....	15
3.1.1.	Compresor C-101	15
3.1.2.	Intercambiador de calor E-101	17
3.1.3.	Tanque T-101 A/B.....	19
3.1.4.	Equipos involucrados en el proceso Linde-Claude	20
3.1.5.	Torre de destilación criogénica T-102.....	25
3.2.	Sección 200.....	26
3.2.1.	Bomba P-201 A/B	26
3.2.2.	Intercambiador E-201	27
3.2.3.	Intercambiador E-202	27
3.2.4.	Intercambiador E-203.....	28
3.2.5.	Zeolitas T-201 A/B.....	28
3.2.6.	Zeolitas T-202 A/B.....	29
3.3.	Sección 300.....	29
3.3.1.	Punto de mezcla corriente 38 y corriente 26	30
3.3.2.	Compresor C-301	30
3.3.3.	Punto de mezcla entre la corriente 43 y la corriente 54	30
3.3.4.	Intercambiador E-301	31
3.3.5.	Intercambiador E-302	31
3.3.6.	Intercambiador E-303.....	31
3.3.7.	Intercambiador E-304.....	31
3.3.8.	Compresor C-302 y TUR-301	32
3.3.9.	Reactor R-301.....	32
3.3.10.	Tanque flash V-301	32
4.	BIBLIOGRAFÍA.....	33

2. BALANCES DE MATERIA

2.1. Introducción

Los balances de materia representan una herramienta fundamental en la ingeniería de procesos, puesto que permiten conocer los flujos de materia involucrados en cada una de las corrientes de un proceso. Para poder realizar un balance de materia ya sea un equipo o al proceso en su conjunto se debe delimitar el sistema de estudio de los alrededores para poder establecer las corrientes de entrada y salida del sistema. Mediante estos balances, será posible determinar todos los caudales másicos que entran o salen de un equipo, así como sus composiciones, aplicando para ello el principio de conservación de la materia, por el cual se establece que la cantidad de materia ni se crea ni se destruye, sino que se transforma, presentado en la Ecuación 1. Todos los términos están expresados como caudal másico y no molar, ya que mientras que el número de moles varían, la masa siempre se conserva. (1)

$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación}$	<i>Ecuación 1</i>

El término de generación presentado en la ecuación hace referencia a la generación de un producto, por lo que sólo será aplicable en el balance de materia al reactor por haber reacción química. Por otro lado, el término de acumulación está referido a la cantidad de materia acumulada en función del tiempo para procesos discontinuos. Como en este caso, la planta trabaja en continuo este término será obviado. Por tanto, para equipos en los que no se lleve a cabo reacción química, el balance de materia quedará simplificado a la Ecuación 2. (1)

$\text{Entrada} = \text{Salida}$	<i>Ecuación 2</i>

Para procesos complejos, los balances de materia suelen complementarse con programas de simulación de procesos. En este proceso, se ha empleado como apoyo el programa de simulación ASPEN HYSYS, especialmente para la simulación de la Sección 300, donde la resolución de los balances del ciclo de síntesis requiere un proceso iterativo al depender de múltiples variables.

A continuación, se presentan los balances de materia realizados sólo en aquellos equipos donde se produce un cambio de caudal másico o composición, así como la comprobación del balance de materia global del proceso.

2.2. Balance de materia global

Para realizar el balance global de materia, sólo se han de considerar las corrientes de entrada y salida del proceso, que se corresponden con la entrada de materias primas al proceso (aire y agua) y la salida del producto, la purga realizada en el ciclo de síntesis para evitar la acumulación de inertes, y las corrientes de oxígeno de salida de la torre de destilación criogénica T-102 y el electrolizador ELE-201.

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Si se asume una composición del aire del 79% de N₂ y un 21% O₂, puesto que el resto de compuesto como argón o dióxido de carbono son inferiores al 1%, y teniendo en cuenta que en la torre de destilación criogénica se recupera un 80% del N₂ por cabezas, se puede calcular el aire necesario a partir de la cantidad de nitrógeno necesaria para producir 50 t/d de amoníaco. Por otro lado, el agua necesaria y el oxígeno vendrán dados por la cantidad necesario de hidrógeno en la reacción de síntesis. El caudal de amoníaco viene impuesto por la capacidad de producción fijada, mientras que la cantidad de gas a purgar se determina en base a datos bibliográficos. En la Tabla 1, se presenta el balance global de materia, donde la masa de aire representa la masa de aire seco.

Tabla 1. Balance global de materia

Caudal másico entrada (kg/h)		Caudal másico salida (kg/h)		
Corriente 1	Corriente 31	Corriente 58	Corriente 55	Corriente 30+41
2977,07	3524,97	2086,96	134,57	4280,65
Caudal másico total entrada (kg/h)		Caudal másico total salida (kg/h)		
6502,04		6502,18		
Error entre la entrada y la salida			0,00%	

2.3. Balances de materia por equipos

2.3.1. Sección 100

Dentro de esta sección se producen cambios de composición y caudales másicos en los siguientes equipos: Demister V-101, Zeolitas T-101 A/B, Cámara de licuefacción del aire V-102, Torre de destilación criogénica T-102. Además, se han de tener en cuenta las recirculaciones propuestas para el ciclo de licuefacción del aire que se recogen a continuación. Las masas moleculares empleadas en los balances de materia se presentan en la Tabla 2:

Tabla 2. Masas moleculares de los compuestos moleculares en el proceso

Compuesto/Sustancia	Masa molecular
Oxígeno	32,00
Nitrógeno	28,01
Agua	18,02
Hidrógeno	2,016
Amoníaco	17,03

2.3.1.1. Demister V-101

En el demister V-101 se separa el agua contenida en el aire tras ser condensada en el intercambiador E-101. La estimación de la cantidad de humedad en el aire seco se

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

puede realizar conociendo la temperatura de la zona, la cual se ha tomado como una media anual de la zona de Salvaterra de Miño, próxima a los 15°C. Por otro lado, también se ha de conocer la humedad relativa que ronda entre el 70 y el 80%, para poder determinar la humedad absoluta del aire. La humedad absoluta es una medida del agua presente en el aire en forma de vapor por cantidad de aire seco, la cual puede ser estimada mediante la utilización del diagrama psicrométrico. (2)

A partir del valor de la temperatura del bulbo seco, presentada en el eje de abscisas, y la humedad relativa, representada mediante curvas que van desde el 1 al 100%, se puede obtener el valor de la humedad absoluta en el eje de ordenadas de la derecha. Dado que la planta se encuentra en las proximidades del río Miño se ha empleado una humedad relativa del 80% para realizar los cálculos.

Trazando una horizontal hasta el eje de ordenadas derecho que pase por el punto de corte entre la temperatura del bulbo seco y la humedad relativa se puede leer el valor de la humedad absoluta de la gráfica, que en este caso se encuentra en torno a 8,5 g agua/kg aire seco.

Por tanto, la masa total que entra al desnebulizador V-101 será igual a la suma del aire seco, obtenido como se mencionó anteriormente teniendo en cuenta la composición de nitrógeno volumétrica (molar) necesaria para producir 50 t/d de NH_3 y una recuperación del 80% del nitrógeno en la torre criogénica T-102 del 80%, más el caudal de agua presente en el aire. En la Tabla 3, se presentan los resultados obtenidos para la corriente 4. Cabe destacar que la masa molecular del aire seco se ha calculado teniendo en cuenta una composición del 21% de oxígeno y un 79% del nitrógeno.

Tabla 3. Estimación de la humedad presente en el aire

Corriente 4	Valor
Temperatura de bulbo seco (°C)	15
Humedad relativa (%)	80
Humedad absoluta (kg agua/kg aire)	0,0085
Caudal de nitrógeno necesario (kmol/h)	65,22
Caudal de aire seco (kmol/h)	103,19
Caudal másico de aire seco	2977,07
Caudal de agua presente en el aire (kg/h)	25,31
Caudal de aire húmedo (kg/h)	3002,38

En los separadores gas-líquido se suelen emplear mallas tejidas antivaho para mejorar el rendimiento del desnebulizador en caso de que se requieran altas eficacias de separación tal y como es el caso. Mediante estas mallas es posible reducir el tamaño del equipo y alcanzar eficiencias superiores al 99%, por lo que se ha decidido emplearlas considerando una eficiencia de separación del agua del 99%. (1)

En la Tabla 4, se recoge el balance de materia aplicado al tanque V-101, donde se puede observar que el error del cierre del balance es del 0%.

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 4. Balance de materia al separador gas-líquido V-101

Compuesto	Corriente 4	Corriente 5	Corriente 6
Nitrógeno (kg/h)	2283,63	2283,63	0,00
Oxígeno (kg/h)	693,44	693,44	0,00
Agua (kg/h)	25,31	8,01	17,30
Total (kg/h)	3002,38	2985,08	17,30
Comprobación del cierre	3002,38	3002,38	

2.3.1.2. Zeolitas T-101

Para eliminar el agua que no ha podido separarse en el demister es necesario emplear adsorbentes para deshumidificar por completo la corriente de aire. Los adsorbentes más empleados en la deshumidificación del aire son las zeolitas, en concreto la zeolita 13X, que permite retirar la cantidad del agua hasta 1 ppm a la salida. A efectos de cálculo se ha considera la corriente de salida del equipo totalmente libre de agua. (3)

En la Tabla 5 se recoge el balance de materia aplicado al tanque de zeolitas 13X T-101.

Tabla 5. Balance de materia al tanque de adsorción de zeolitas 13X T-101

Compuesto	Corriente 5	Corriente 7
Nitrógeno (kg/h)	2283,63	2283,63
Oxígeno (kg/h)	693,44	693,44
Agua (kg/h)	8,01	0,00
Total (kg/h)	2985,08	2977,07

Cabe destacar que las zeolitas trabajan por ciclos, por lo que al ser un proceso discontinuo serán necesarios dos equipos para que la operación sea continua. El agua que se retira de la corriente 5 queda retenida en las zeolitas hasta que se termine el ciclo, siendo después liberada al someter las zeolitas a elevadas temperaturas que permiten su desadsorción. Por lo que así se cierra el balance de materia.

2.3.1.3. Proceso de licuefacción Linde-Claude

Para poder resolver el balance de materia del proceso Linde-Claude, dado que inicialmente no se conoce la fracción licuada a la salida de la válvula isoentálpica (VLV-101) del proceso esta ha de suponerse y luego iterar hasta que dicho valor sea lo suficientemente adecuado para poder realizar las integraciones energéticas correspondientes. Para ello se ha implementado el proceso en Aspen HYSYS y una vez comprobado que todas las integraciones eran coherentes se ha tomado ese valor para comenzar los cálculos. El valor tomado del simulador fue de aproximadamente 0,56, mientras que el resultado final calculado en Excel resultó de 0,5.

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

- Cámara de licuefacción del aire V-102

El aire licuado mediante el proceso de licuefacción Linde-Claude comentado en el apartado anterior se separa en la cámara de licuefacción V-102. Dado que la fracción de vapor de la corriente 15 es de aproximadamente 0,5, el balance de materia será el siguiente (Tabla 6), donde se puede comprobar el cierre del balance de materia.

Tabla 6. Balance de materia de la cámara de licuefacción del aire V-102

Compuesto	Corriente 15	Corriente 18	Corriente 25
Nitrógeno (kg/h)	4567,37	2283,74	2283,63
Oxígeno (kg/h)	1386,91	693,47	693,44
Total (kg)	5954,28	2977,21	2977,07
Comprobación del cierre (kg/h)	5954,28	5954,28	

- Recirculación de la corriente 18 a la entrada del compresor C-102

Las corrientes 18 y 17, que se corresponden con las corrientes empleadas para refrigerar el aire que va a entrar a la cámara de licuefacción V-102, son recirculadas de nuevo a la entrada del compresor C-102. Estas corrientes son mezcladas dando lugar a la corriente 20, que tras ser calentada en los diferentes intercambiadores del proceso constituye la corriente 24, que presenta el mismo caudal másico, pero diferentes condiciones de temperatura y presión. El balance del punto de mezcla de la corriente 24 y la corriente de la salida del tanque de adsorción T-101 (corriente 7) se muestra en la

Tabla 7. Balance de materia de la mezcla de corrientes 7 y 24

Compuesto	Corriente 7	Corriente 24	Corriente 8
Nitrógeno (kg/h)	2283,63	9134,79	11418,42
Oxígeno (kg/h)	693,44	2773,84	3467,28
Total (kg)	2977,07	11908,62	14885,70
Comprobación del cierre (kg/h)	14885,70		14885,70

- Bypass de la corriente 12

Para poder licuar parte la corriente de entrada a la cámara de licuefacción se suele derivar en torno a un 50-60% del caudal molar de la corriente comprimida en el compresor C-102 (corriente 8) para expandirla en el expansor y enfriarla lo máximo posible sin que esta llegue a condensar. En la Tabla 8 se muestra el balance correspondiente considerando que se recircula un 60% a la entrada de la turbina.

Tabla 8. Balance de materia de la mezcla de las corrientes 12 y 13

Compuesto	Corriente 12	Corriente 13	Corriente 16
Nitrógeno (kg/h)	11418,42	4567,37	6851,05
Oxígeno (kg/h)	3467,28	1386,91	2080,37
Total (kg)	14885,70	5954,28	8931,42

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Comprobación del cierre (kg/h)	14885,70	14885,70

De nuevo se comprueba el cierre del balance de materia.

- Mezcla de las corrientes 17 y 19

Partiendo del proceso Linde-Claude descrito anteriormente, el gas que sale de la cámara de licuefacción V-102 (corriente 18) y que se encuentra a una temperatura criogénica, es empleado junto al caudal que se refrigera en el expansor TUR-101 (corriente 17) para refrigerar el caudal que entra a la cámara de licuefacción. En la Tabla 9 se recoge la comprobación del cierre del balance de materia del punto de mezcla:

Tabla 9. Balance de materia de la cámara de licuefacción del aire V-102

Compuesto	Corriente 17	Corriente 19	Corriente 20
Nitrógeno (kg/h)	6851,05	2283,73534	9134,79
Oxígeno (kg/h)	2080,37	693,471035	2773,84
Total (kg)	8931,42	2977,21	11908,62
Comprobación del cierre (kg/h)	11908,62		11908,6

2.3.1.4. Torre de destilación criogénica T-102

Teniendo en cuenta que de la corriente 25 se consigue recuperar el 80% del nitrógeno con una pureza del 99,99% en fracción molar, se presenta el balance de materia en la Tabla 10:

Tabla 10. Balance de materia a la torre T-102

Compuesto	Corriente 25	Corriente 26	Corriente 27
Nitrógeno (kg/h)	2283,63	0,21	693,23
Oxígeno (kg/h)	693,44	1826,91	456,73
Total (kg)	2977,07	1827,11	1149,96
Comprobación del cierre (kg/h)	2977,07	2977,07	

La torre de destilación criogénica se ha modelado como una destilación simple binaria de oxígeno e hidrógeno empleando el método gráfico de McCabe. Teniendo en cuenta que la corriente 25 entra como líquido saturado a la columna T-102, se presentan los caudales molares, las rectas de operación y las gráficas llevadas a cabo para obtener el número de etapas. En la Tabla 11 se presenta un resumen de datos necesarios para calcular el número de etapas en la torre. (4)

Tabla 11. Datos de la torre de destilación criogénica T-102

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
F (kmol/h)	103,19	(L/D) _{min}	0,912
x _F	0,79	L/D	1,40
D (kmol/h)	65,22	V (kmol/h)	156,53

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

x_D	0,9999	L (kmol/h)	91,31
B (kmol/h)	37,97	L' (kmol/h)	194,50
x_B	0,4294		

En la Ecuación 3 y Ecuación 4 se presentan las rectas de operación superior e inferior respectivamente:

$y_{n+1} = 0,583 * x_n + 0,417 * x_D$	<i>Ecuación 3</i>
$y_n = 1,243 * x_{n-1} - 0,243 * x_B$	<i>Ecuación 4</i>

El método grafico se presenta desde la Figura 1 hasta Figura 4.

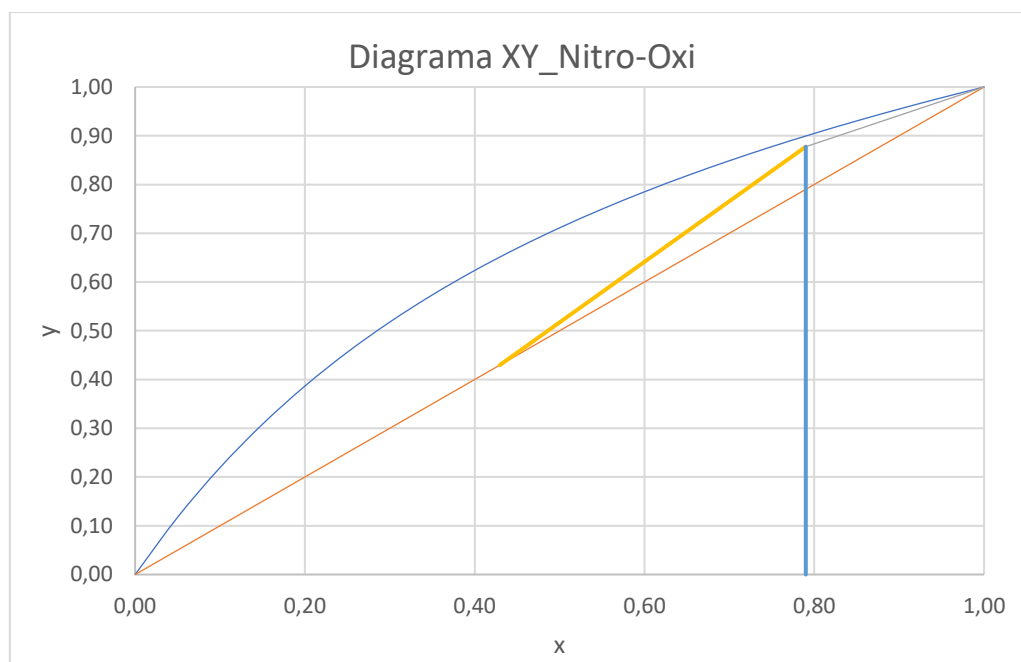


Figura 1. Cálculo de etapas mediante el método McCabe (I)

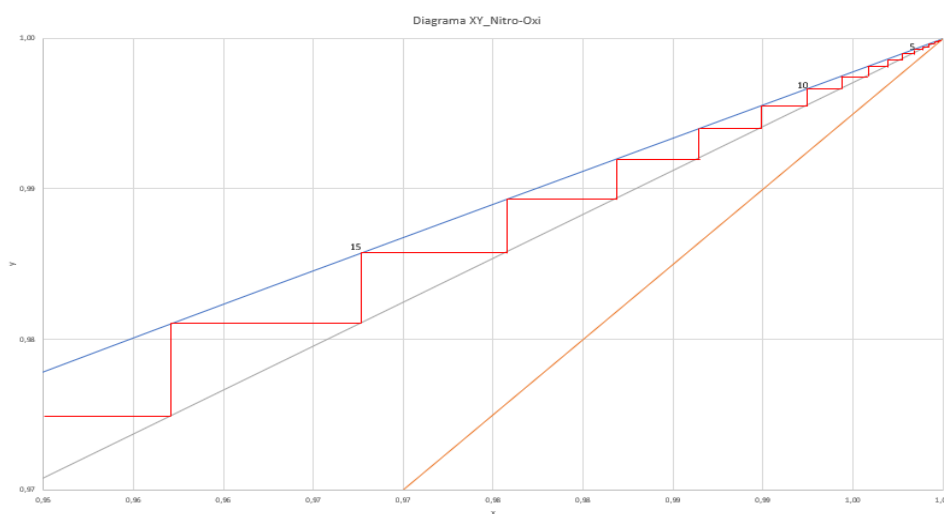


Figura 2. Cálculo de etapas mediante el método McCabe (II)

Anexo I: Balances de Materia y Energía

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

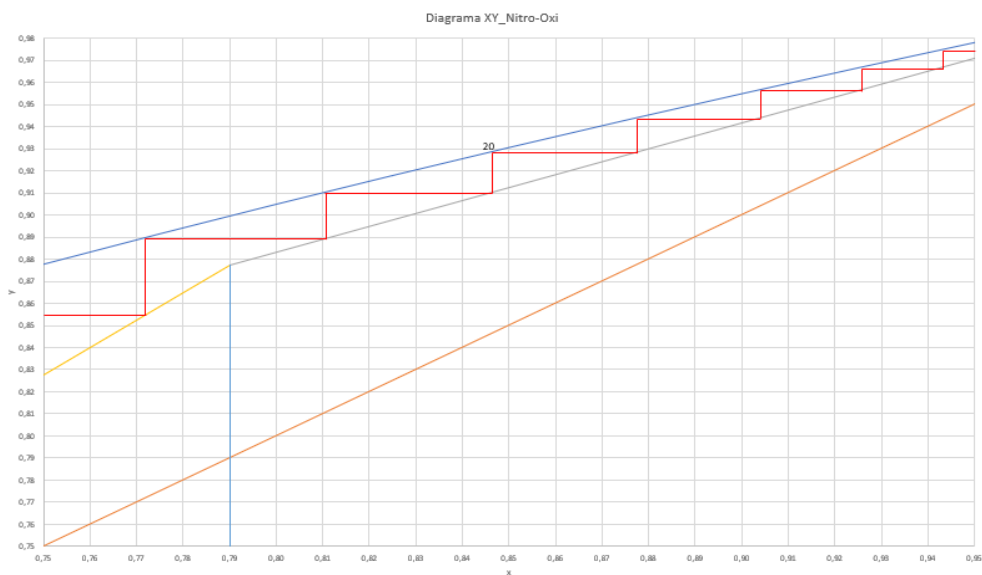


Figura 3. Cálculo de etapas mediante el método McCabe (III)

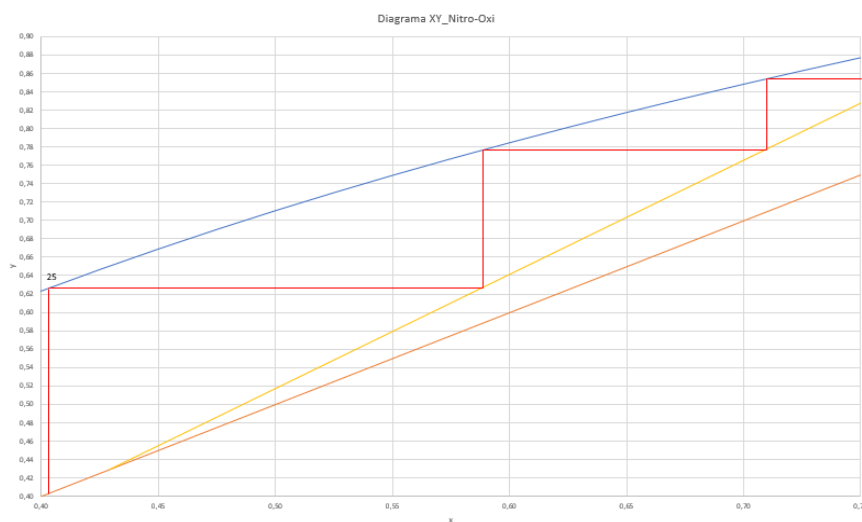


Figura 4. Cálculo de etapas mediante el método McCabe (IV)

Dado que la torre de destilación criogénica no tiene caldera, el número total de etapas será de 25.

2.3.2. Sección 200

En la Sección 200 se llevará a cabo la producción y acondicionamiento de hidrógeno gas a partir de agua en muy buenas condiciones de pureza, que para los balances a realizar se tomarán como puro. La producción del hidrógeno se lleva a cabo en el electrolizador ELE-201 y la limpieza de los gases en las torres de secado T-201 A/B y T-202 A/B para hidrógeno y oxígeno respectivamente. En el desmineralizador DES-201 se retirarán los iones del agua para aumentar su pureza y de esta forma conseguir los equipos posteriores no se vean afectados.

2.3.2.1. Electrolizador ELE-201

Al electrolizador alcalino ELE-201 entra la corriente 34 y salen las corrientes 35 y 39. Su diseño riguroso se presenta en la primera parte del Anexo II: Cálculos

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

justificativos. Como se menciona en el Anexo II se ha tomado como caudal de agua de salida del electrolizador un porcentaje molar de 0,2% de agua, para sobredimensionar este valor puesto que la eliminación de agua es muy relevante se decide emplear un sobre dimensionamiento de esta composición a 0,5% para el caso del hidrógeno y un 0,3% para el caso del oxígeno por no tener una gran importancia en este proceso. En la Tabla 12 se presenta el balance de materia al electrolizador.

Tabla 12. Balances de materia aplicados al electrolizador

Compuesto	Corriente 34	Corriente 35	Corriente 39
Hidrógeno (kg/h)	0	394,40	0
Oxígeno (kg/h)	0	0	3130,50
Agua (kg/h)	3552,59	18,44	9,25
Total (kg/h)	3552,59	412,84	3139,75

Se puede comprobar en base a la Tabla 12 que el balance cierra, puesto que entran 3552,59 kg/h y salen 412,84 kg/h y 3139,85 kg/h.

2.3.2.2. Zeolitas T-201 A/B

Como se ha explicado anteriormente, estos tanques de secado de gas se emplean para retirar el agua de la corriente reteniéndola en el proceso de adsorción y liberándola durante la desadsorción. En la Tabla 13, donde se presenta el balance de materia.

Tabla 13. Balance de materia al tanque de adsorción de zeolitas 13X T-201 A/B

Compuesto	Corriente 37	Corriente 38
Hidrógeno (kg/h)	394,40	394,40
Oxígeno (kg/h)	0,00	0,00
Agua (kg/h)	18,44	0,00
Total (kg/h)	412,84	394,40

2.3.2.3. Zeolitas T-202 A/B

Como se ha explicado anteriormente, estos tanques de secado de gas se emplean para retirar el agua de la corriente reteniéndola en el proceso de adsorción y liberándola durante la desadsorción. En la Tabla 14, se presenta el balance de materia.

Tabla 14. Balance de materia al tanque de adsorción de zeolitas 13X T-202 A/B

Compuesto	Corriente 40	Corriente 41
Hidrógeno (kg/h)	0,00	0,00
Oxígeno (kg/h)	3130,50	3130,50
Agua (kg/h)	9,25	0,00
Total (kg/h)	3139,75	3130,50

2.3.3. Sección 300

Dentro de la Sección 300 se producen cambios de composición y de caudales máxicos en el reactor R-301 y en el tanque flash V-301. Además, también existe una recirculación (corriente 54) correspondiente a los gases no reaccionados que salen del reactor y que vuelven a reintroducirse en el mismo, una purga (corriente 55) para evitar la acumulación de los gases inertes presentes en trazas en la corriente de nitrógeno que sale de la torre de destilación criogénica T-102 (argón, dióxido de carbono, etc), y la mezcla del nitrógeno obtenido de la torre de destilación criogénica T-102 y el hidrógeno obtenido del electrolizador ELE-201.

2.3.3.1. Mezcla de las corrientes 26 y 38

El nitrógeno producido (corriente 26) ha de mezclarse con el hidrógeno procedente de la electrólisis (corriente 38) antes de entrar al reactor R-301 para incrementar su presión a las condiciones de operación del reactor dando lugar así a la corriente 42. En la Tabla 15, se recoge el balance de materia. Los datos de la corriente 42 se han obtenido a partir de las iteraciones realizadas en el ciclo de síntesis del reactor, lo cual explica esa pequeña diferencia entre las composiciones respecto a la corriente 26 y 38.

Tabla 15. Balance de materia de la mezcla de las corrientes 26 y 38

Compuesto	Corriente 26	Corriente 38	Corriente 42
Nitrógeno (kg/h)	1826,91	0,00	1826,85
Oxígeno (kg/h)	0,21	0,00	0,21
Hidrógeno (kg/h)	0,00	394,47	394,46
Total (kg)	1827,11	394,47	2221,52
Comprobación del cierre (kg/h)	2221,58		2221,52

2.3.3.2. Mezcla de las corrientes 43 y 54

El gas que entra al reactor de síntesis de amoníaco R-301, se corresponde con la alimentación fresca (corriente 43) y la recirculación de los gases sin reaccionar que ya pasaron por el reactor (corriente 54). En la Tabla 16 se recogen los balances de materia y su respectiva comprobación (Ecuación 16).

Tabla 16. Balances de materia aplicados al punto de mezcla

Compuesto	Corriente 43	Corriente 54	Corriente 44
Nitrógeno (kg/h)	1826,85	7367,02	9193,93
Oxígeno (kg/h)	0,2087	9,89	10,10
Hidrógeno (kg/h)	394,46	1636,86	2031,32
Amoníaco (kg/h)	0,00	463,91	463,92
Total (kg/h)	2221,52	9477,67	11699,26
Comprobación del cierre (kg/h)	11699,19		11699,26

2.3.3.3. Reactor R-301

Al reactor de síntesis de amoníaco entra la corriente 45 y sale reaccionada la corriente 46. Su diseño riguroso se presenta en la segunda parte del Anexo II: Cálculos justificativos, siendo los caudales másicos que entran y salen del reactor recogidos en la Tabla 17. La relación de alimentación del H₂/N₂ a la entrada de reactor en fracción molar es de aproximadamente 3, en concreto 3,07, por lo que se corresponde con el ratio deseado y al cual fue estudiado la cinética del catalizador empleado en el reactor.

Tabla 17. Balances de materia al reactor R-301

Compuesto	Corriente 45	Corriente 46
Nitrógeno (kg/h)	9193,93	7475,05
Oxígeno (kg/h)	10,10	10,10
Hidrógeno (kg/h)	2031,32	1660,22
Amoníaco (kg/h)	463,92	2553,83
Total (kg/h)	11699,26	11699,20
Error (%)	0,00	

2.3.3.4. Tanque flash V-301

La corriente 46 de salida del reactor ha de ser enfriada por debajo de la temperatura de rocío del amoníaco a esa presión, de forma que así se consiga separar prácticamente todo el amoníaco y con las menores trazas posibles de otros compuestos. En este caso, dado que no es objeto de diseño y existen más de dos compuestos a separar (oxígeno, nitrógeno, hidrógeno y amoníaco), se ha simulado el flash en Aspen HYSYS. Los resultados obtenidos en la simulación se presentan en la Tabla 18:

Tabla 18. Balances de materia del flash V-301 obtenidos a partir de Aspen HYSYS

Compuesto	Corriente 50	Corriente 51	Corriente 56
Nitrógeno (kg/h)	7475,05	7471,62	3,43
Oxígeno (kg/h)	10,10	10,03	0,07
Hidrógeno (kg/h)	1660,22	1660,10	0,12
Amoníaco (kg/h)	2553,83	470,50	2083,33
Total (kg/h)	11699,20	9612,24	2086,96
Comprobación del cierre (kg/h)	11699,20	11699,20	

2.3.3.5. Purga (corriente 55)

En los procesos convencionales de amoníaco es necesario purgar entre un 40 y un 60% de la corriente de recirculación al reactor debido a una mayor cantidad de inertes asociados al proceso de reformado (metano, dióxido de carbono, etc). Sin embargo, en el

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

proceso de producción de amoníaco verde sólo tiene presente los inertes asociados a la composición del aire y algunas trazas de agua que acompañan al hidrógeno de la electrólisis. Es por ello, que la cantidad de purga se ve mucho más reducida y con ello. En base a bibliografía, en los procesos verdes de obtención de amoníaco, el ratio de purga respecto a la corriente de alimentación fresca es de en torno al 6%. Los resultados obtenidos se recogen en la Tabla 19. (5)

Tabla 19. Balance de materia para la corriente de purga

Compuesto	Corriente 52	Corriente 55	Corriente 53
Nitrógeno (kg/h)	7471,62	104,60	7367,02
Oxígeno (kg/h)	10,03	0,14	9,89
Hidrógeno (kg/h)	1660,10	23,24	1636,86
Amoníaco (kg/h)	470,50	6,59	463,91
Total (kg/h)	9612,24	134,57	9477,67
Comprobación del cierre (kg/h)	9612,24	9612,24	

Como se puede observar el ciclo de síntesis presenta cierta complejidad dado que hay muchas variables implicadas como el ratio de purga, la temperatura de entrada al flash, la cual determinará las composiciones, el caudal de entrada al reactor, etc. Para poder resolverlo se comenzó suponiendo el caudal másico de la corriente de entrada al reactor (corriente 45) obtenido mediante las simulaciones en Aspen HYSYS y a continuación se recalcularon las corrientes en base al caudal obtenido a la salida del reactor, teniendo en cuenta el ratio de purga respecto a la corriente de alimentación fresca.

3. BALANCES DE ENERGÍA

Mientras que los balances de materia permiten conocer los flujos másicos de un proceso, los balances de energía permiten determinar los requerimientos energéticos del proceso. Para ello, al igual que con los balances de materia, se puede aplicar el principio de conservación, por lo que de nuevo se puede aplicar la Ecuación 1, teniendo en cuenta que ahora los términos están referidos a flujos de energía. La energía por unidad de masa puede expresarse a través de distintas formas: energía potencial, energía cinética, energía interna, trabajo, calor y energía eléctrica. Todos estos términos se pueden incluir en la ecuación de conservación de energía, tal y como se muestra en la Ecuación 5, donde U_i representa la energía interna en J/kg, P_i la presión (Pa), u_i , la velocidad en m/s, $z_i * g$, la energía potencial y Q , el calor intercambiado, que será positivo o negativo en función de si este entra o sale del sistema. (1)

$U_1 + P_1 * v_1 + \frac{u_1^2}{2} + z_1 * g + Q = U_2 + P_2 * v_2 + \frac{u_2^2}{2} + z_2 * g + W$	Ecuación 5

Sin embargo, en los procesos químicos tanto la energía cinética como la potencial son despreciables en comparación con el calor y el trabajo. Por otro lado, la energía interna y la presión se expresan a través de la entalpía, que se puede determinar a través de la Ecuación 6, donde C_p representa la capacidad específica de la corriente en

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

$\text{kJ}/(\text{kmol}\cdot\text{K})$, T , la temperatura de esta en K, T_{ref} es la temperatura de referencia (K) y h , representa la variación de entalpía respecto al estado de referencia (temperatura y estado de agregación) en kJ/kmol , puesto que la entalpía total de un sistema no se puede medir directamente. (1)

$h = \int_{T_{ref}}^T C_p * dT$	Ecuación 6

En caso de líquidos, dado que el calor específico apenas se ve influenciado por la temperatura esta integral puede aproximarse como la capacidad específico media correspondiente a la media de los C_p de las dos temperaturas, mientras que el diferencial de temperatura se puede tomar como el incremento. Sin embargo, para gases no se puede hacer dicha suposición por lo que ha de emplearse dicha ecuación. La capacidad específica a presión constante, a su vez, se puede expresar en función de la temperatura empleando para ello la Ecuación 7, donde a , b , c , y d , son los coeficientes correspondientes para una determinada sustancia y que pueden consultarse en la bibliografía, y T está expresada en kelvin. (1)

$C_p = a + b * T + c * T^2 + d * T^3$	Ecuación 7

Combinando la Ecuación 6 y la Ecuación 7 y resolviendo la integral se llega a la siguiente expresión (Ecuación 8), que ha sido la empleada para calcular las entalpías de todas las corrientes del proceso. (1)

$h = C_{pm} * (T - T_{ref})$	Ecuación 8
$C_{pm} = \frac{a * (T - T_{ref}) + \frac{b}{2} * (T^2 - T_{ref}^2) + \frac{c}{3} * (T^3 - T_{ref}^3) + \frac{d}{4} * (T^4 - T_{ref}^4)}{T - T_{ref}}$	

Cabe destacar que el C_p presentado anteriormente es válido como una aproximación al gas ideal, dado que el C_p de un gas real se ve afectado por la influencia de la presión y no sólo de la temperatura. El C_p real se puede obtener añadiendo un término al ideal, que se obtiene gráficamente a partir del valor de la presión y la temperatura reducidas. Sin embargo, dado que se ha comprobado con ASPEN HYSYS que la variación entre el C_p ideal calculado y el real es baja, se ha decidido emplear el primero para realizar los balances de energía y agilizar los cálculos.

Conociendo la entalpía específica y el caudal másico de cada corriente podrá determinarse el calor intercambiado entre corrientes empleando la Ecuación 9, donde el subíndice a y b hacen referencia a dos compuestos diferentes:

$q_{absorbido} = -q_{cedido}$	Ecuación 9
$m_a * (h_{sal,a} - h_{e,a}) = -m_b (h_{sal,b} - h_{e,b})$	

En la Tabla 20, se presentan los coeficientes para la determinación de la capacidad específica de los compuestos que intervienen en el proceso. (1)

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 20. Constantes en la ecuación de capacidad calorífica de los gases ideales (1)

Coeficientes	a	b	c	d
N ₂	31,15	-1,357*10 ⁻²	2,6796*10 ⁻⁵	-1,168*10 ⁻⁸
H ₂	27,143	92,738*10 ⁻⁴	-1,381*10 ⁻⁵	76,415*10 ⁻¹⁰
NH ₃	27,315	23,831*10 ⁻³	17,074*10 ⁻⁶	-1,185*10 ⁻⁸
O ₂	28,106	-3,680*10 ⁻⁶	1,746*10 ⁻⁵	-1,065*10 ⁻⁸

En la mayoría de las corrientes, a menos que se indique lo contrario, se ha tomado como estado de referencia el estado gaseoso, ya que la mayoría de las corrientes se encuentran en este estado de agregación, mientras que la temperatura de referencia empleada ha sido de 273 K.

En el caso de corrientes de proceso que están compuestas por varios componentes, tal y como es el caso, se puede calcular el C_{pm} de la corriente a partir de la Ecuación 10, donde x_i , representa la fracción molar de cada componente.

$C_{pm,total} = \sum_{i=1}^n x_i * C_{pm_i}$	Ecuación 10

Por otro lado, el flujo de calor de una corriente se puede calcular como la entalpía específica de cada corriente por el flujo másico, por lo que, teniendo en cuenta que el calor cedido por un cuerpo es igual al absorbido por otro cuando estos están en contacto, es posible determinar los requerimientos de refrigeración y calefacción de la planta.

A continuación, se presentan los balances de energía para los equipos donde ocurre un cambio de energía.

3.1. Sección 100

3.1.1. Compresor C-101

El compresor C-101 es el encargado de comprimir el aire húmedo desde la presión atmosférica tomada como 1 bar hasta 7,5 bar, presión necesaria para la adsorción del agua en las zeolitas, ya que esta se ve favorecida a altas presiones. Además, esta presión permite reducir el tamaño del resto de equipos, ya que la densidad del gas aumenta, y con ello el volumen disminuye. Para poder determinar las etapas de un compresor suele aplicarse la siguiente heurística (6):

Tabla 21. Determinación del número de etapas en base al ratio de presiones final e inicial (6)

Presión final/Presión inicial	Número de etapas
<4	1
4 a 16	2
16 a 64	3
64 a 256	4

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Por otro lado, se menciona que la presión entre etapas óptima se corresponde con aquella que permita obtener la misma potencia en cada compresor y que se calcula en base a la Ecuación 11, donde n representa el número de etapas: (1) (6)

$P_{interstage} = \sqrt[n]{\prod P}$	Ecuación 11

Como el ratio de compresión entre 7,5 y 1 bar es mayor a 4, el compresor C-101 será un compresor de 2 etapas y por tanto la presión entre etapa ha de calcularse como sigue (Ecuación 12):

$P_{interstage} = \sqrt[2]{P_1 * P_2}$	Ecuación 12

La temperatura a la salida del compresor ha de comprobarse que no sea superior a 190-200°C, ya que esta es la temperatura máxima a la que pueden resistir la mayoría de los compresores comerciales. Por eso, es necesario una refrigeración entre etapa para evitar un aumento de temperatura desmesurado en el segundo compresor. Normalmente, entre etapa suele refrigerarse aproximadamente 40°C, aunque esto dependerá de los requerimientos de cada proceso.

Para poder estimar la temperatura a la salida del compresor se puede emplear la Ecuación 13, donde a se calcula de acuerdo con la Ecuación 14, donde γ representa el ratio entre el C_p/C_v del gas y que para gases diatómicos toma el valor de aproximadamente 1,4. La temperatura ha de expresarse en escala absoluta (K).

$T_2 = T_1 * \left(\frac{P_2}{P_1}\right)^a$	Ecuación 13
$a = \frac{\gamma}{\gamma - 1}$	Ecuación 14

Por otro lado, dado que el aire contiene humedad ha de asegurarse que la temperatura a la que se refrigera es superior a la temperatura de rocío para evitar que el agua condense dentro del compresor y dañe al equipo que bien puede consultarse en tablas o calcularse a través de la Ecuación 15, donde P_s representa la presión de saturación del vapor de agua en Pascales, que a su vez se puede expresar en función de la temperatura de rocío, y t la temperatura en grados centígrados (Ecuación 16):

$t_r = \frac{243,12 * \ln(P_s) - 1559,72}{24,035 - \ln(P_s)}$	Ecuación 15
$P_s = \exp\left(\ln(611,2) + \frac{17,62 * t_r}{243,12 + t_r}\right)$	Ecuación 16

La presión parcial de vapor de agua puede determinarse multiplicando la presión total de aire por la fracción molar del agua en el aire.

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Aplicando lo comentado anteriormente se presentan los resultados obtenidos para el compresor C-101 en la Tabla 22, teniendo en cuenta una caída de presión el intercambiador de 20 kPa.

Tabla 22. Estimación de la temperatura de salida del compresor C-101

Compresor C-101	
P ₁ (bar)	1
P ₂ (bar)	7,5
Pentre etapa (bar)	2,74
T ₁ (°C)	15
<i>a</i>	0,286
Compresor 1	
P ₁ (bar)	1
P ₂ (bar)	2,74
T ₁ (°C)	15
T _{sal} (°C)	111,01
Refrigeración entre etapa	
T _{rocío} (°C)	27,57
Ps (Pa)	3677,84
T _{sal} intercambiador impuesta (°C)	30
Qaire (kJ/h)	-2,488*10 ⁵
Masa de <i>chilled water</i> necesaria (kg/h)	2375,436657
Compresor 2	
P ₁ (bar)	2,54
P ₂ (bar)	7,5
T ₁ (=T _{sal,intercambiador})	30
T ₂ (°C)	139,85

El balance de energía se explica detalladamente en el siguiente apartado, ya que se emplearon las mismas ecuaciones que en el intercambiador E-101.

3.1.2. Intercambiador de calor E-101

El intercambiado de calor E-101 se emplea para condensar el agua que a continuación será retirada parcialmente en el tanque V-101. Para la estimar la cantidad que se consigue condensar, en primer lugar, se calculará la temperatura de rocío. Esta temperatura toma un valor de 46,07°C, por lo que se ha decidido enfriar la corriente hasta 25°C, siendo además esta la temperatura recomendada a la entrada de las zeolitas. Para determinar la humedad de salida del agua se comienza calculando la presión parcial de vapor del agua a través de la Ecuación 16 para la temperatura de salida, es decir, 25°C.

Empleando la relación entre presiones y relaciones molares es posible determinar la fracción molar del agua (Ecuación 17), mientras que el número de moles totales se obtiene teniendo en cuenta la masa de aire seco (Ecuación 18), que es conocida, y su fracción molar. De esta forma se puede calcular la humedad de salida (Ecuación 20).

$\frac{P_{\text{parcial vapor}}}{P_{\text{total}}} = \frac{n_{\text{agua}}}{n_{\text{total}}} = X_{\text{auga}}$	Ecuación 17

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

$n_{totales} = \frac{n_{aire\ seco}}{1 - X_{auga}}$	Ecuación 18
$n_{agua} = X_{auga} * n_{total}$	Ecuación 19
$Y_{agua,salida} = \frac{Masa\ agua}{Masa\ aire\ seco}$	Ecuación 20

En la Tabla 23 se presentan los resultados obtenidos para el cálculo de la humedad absoluta en aire tras ser condensada el agua:

Tabla 23. Cálculo de la humedad absoluta en el aire tras condensar el agua

Corriente 4	Valor
T _{rocío} (°C)	46,07
T (°C)	25
Ps (Pa)	3160,06
X _{agua}	0,0042
Moles totales (kmol/h)	103,20
Moles agua (kmol/h)	0,435
Y _{salida} (kg agua/kg aire)	0,0026

Una vez determinada la humedad final es posible calcular el balance de energía para el aire húmedo, en el que se ha de tener en cuenta la energía del aire seco y la energía del agua. A continuación, se muestran las ecuaciones empleadas (Ecuación 21, Ecuación 22, Ecuación 23, Ecuación 24), donde el subíndice *a,s* hace referencia al aire seco, *h_w*, entalpía del agua líquida, *h_{fg}*, la entalpía de vaporización del agua e *Y_i*, la humedad absoluta inicial y final denotada por 1 y 2. Cabe destacar, que en estos balances se toma como referencia una temperatura de 0°C y el estado de agregación líquido para el agua, de ahí que en cálculo de las entalpías aparezca el signo más. Sin embargo, al sustituir las entalpías en la Ecuación 21, el signo del calor latente de vaporización del agua toma el signo menos, por ser mayor la humedad absoluta inicial que la final, por lo que de esta forma se refleja la condensación del agua en el balance de energía. (4)

$q_{aire} = m_{a,s} * (h_{a,s,out} - h_{a,s,in}) + m_{agua, condensada} * h_w$	Ecuación 21
$h_{a,s,in} = [\overline{c_{p,a,s}} * (t_{in} - t_{ref}) + \overline{c_{p,vapor}} * Y_{entrada} * (t_{in} - t_{ref}) + h_{fg} * Y_{entrada}]$	Ecuación 22
$h_{a,s,out} = [\overline{c_{p,a,s}} * (t_{out} - t_{ref}) + \overline{c_{p,vapor}} * Y_{salida} * (t_{out} - t_{ref}) + h_{fg} * Y_{salida}]$	Ecuación 23
$m_{agua, condensada} = m_{a,s} * (Y_1 - Y_2)$	Ecuación 24

En la Tabla 24, se presenta el balance de energía, empleando *chilled water* como refrigerante, donde el *C_{pm}* se calcula respecto la temperatura de referencia tomada como 0°C.

Tabla 24. Balance de energía del intercambiador E-101

	Corriente 3	Corriente 4
m (kg/h)	3002,38	3002,38
T (°C)	139,85	25
C _{pm} (kJ/(kg*K))	1,0124	1,0161
h _{a,s} (kJ/kg)	165,60	32,01
H _{fg} a 0°C (kJ/kg)		2501,4
Q (kJ/h)		-3,96E+05
Masa refrigerante (kg/h)		3779,62

3.1.3. Tanque T-101 A/B

La adsorción de agua en las zeolitas se trata de un proceso que libera calor, por lo que incrementará la temperatura de la corriente de entrada (corriente 5). Para poder estimar el flujo de calor se ha tenido en cuenta que normalmente la energía específica desprendida por mol adsorbido está entre 10 y 40 kJ/mol. En el dimensionamiento básico de equipos presentado en el Documento IV, se recoge el cálculo de la masa de zeolita necesaria, para la cual también se ha tenido en cuenta el caudal másico de CO₂, que, si bien se ha despreciado en el resto de los balances por estar en una concentración al 1%, ha de retirarse del aire para poder obtener nitrógeno puro libre de contaminantes. Teniendo eso en cuenta, la energía total desprendida será igual a la suma de la cantidad de agua y CO₂ retirados, por la energía liberada. Para realizar el cálculo del balance de energía se ha tomado el valor de 40 kJ/mol y se ha asumido que el calor liberado sólo se transfiere al aire seco y que la capacidad calorífica del aire en ese rango de temperaturas no varía. El balance de energía se recoge en la Tabla 25.

Tabla 25. Balance de energía al T-101

Parámetro	Valor
Caudal molar adsorbido (mol/h)	478,57
Q _{liberado} (kJ/h)	1,91*10 ⁴
C _{p,a,s} . (kJ/(kg*K))	1,0127
T _{corriente 5} (°C)	25
T _{corriente 6} (°C)	31,35

La caída de presión en las zeolitas se ha calculado considerando las ecuaciones de caída de presión para un lecho poroso (Ecuación de Ergun, presentada en Cálculos Justificativos), donde la longitud del lecho y el diámetro de partícula es un dato comercial. El factor de esfericidad se ha tomado como 1, ya que las zeolitas presentan forma perlada, pero no se detalla su esfericidad y el resto de variable se corresponden con las propiedades del aire. En la siguiente tabla se recogen todos los parámetros calculados para la estimación de la caída de presión en el lecho.

Tabla 26. Cálculo de caída de presión en el lecho de zeolita

L	Longitud del lecho (m)	1,800
d_p	Diámetro partícula equivalente (m)	0,00205
η	Viscosidad dinámica kg/(m*s)	$1,92 \cdot 10^{-5}$
G	G _{aire seco} (kg/(m ² *s))	3,991
Re	Reynolds	426,24
v_o (m/s)	G _{aire} /Densidad del aire	0,4695
ϕ_s	Factor de esfericidad	1
ρ_{lecho}	Densidad del lecho (kg/m ³)	620
$\rho_{sólidos}$	Densidad del sólido (kg/m ³)	1024,6
ε	Porosidad del lecho	0,3949
Caída de presión (bar)		0,192

3.1.4. Equipos involucrados en el proceso Linde-Claude

El proceso de Linde-Claude requiere la integración energética de las diversas corrientes de las diversas corrientes implicadas en el proceso. A continuación, se presentan los cálculos realizados de los diferentes equipos.

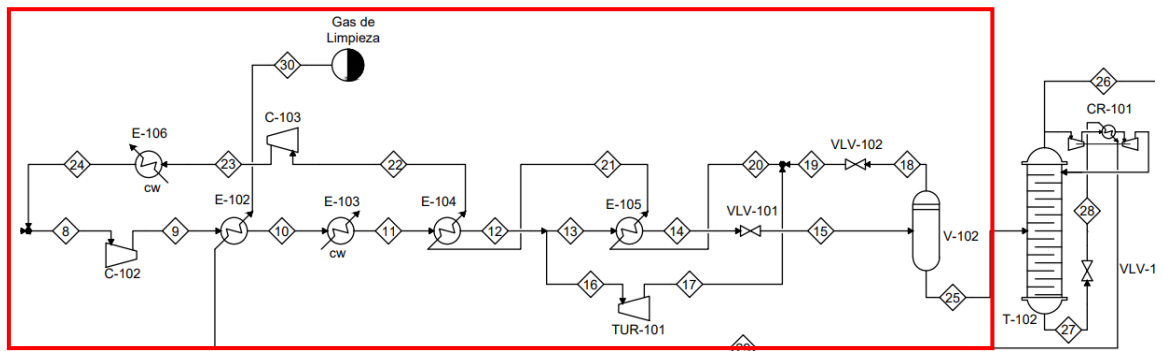


Figura 5. Proceso Linde-Claude

El cálculo de la temperatura de salida del compresor C-102, C-103 y el expansor TUR-101 se calculan empleando la Ecuación 13 anteriormente descrita. Los resultados de cada uno se presentan en la Tabla 27, respectivamente, de nuevo teniendo en cuenta una caída entre intercambiadores de 20 kPa.

Tabla 27. Balance de energía del compresor C-102

Compresor C-102	
P ₁ (bar)	7,11
P ₂ (bar)	45,2
Pentre etapa (bar)	2,53

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

T_1 (°C)	31,87
a	0,286
Compresor 1	
P_1 (bar)	7,11
P_2 (bar)	17,96
T_1 (°C) (Corriente 8)	31,87
T_{sal} (°C)	124,28
Refrigeración entre etapa	
T_{sal} del intercambiador impuesta (°C)	74,28
Q_{aire} (kJ/h)	$-7,61 \cdot 10^5$
Masa de <i>chilled water</i> necesaria (kg/h)	7282,77
Compresor 2	
P_1 (bar)	17,76
P_2 (bar)	45,20
T_1 (= $T_{sal, intercambiador}$)	74,28
T_2 (°C) (Corriente 9)	180,42

Tabla 28. Balance de energía del compresor C-103 y la turbina TUR-101

	Compresor C-103	Expansor TUR-101
P_1 (bar)	4,10	44,6
P_2 (bar)	7,11	4,5
T_1 (°C)	30,00	-5,60
a	0,286	0,286
T_2 (°C)	81,59	-134,10

A continuación, se recogen los balances de energía realizados a los intercambiadores del proceso Linde-Claude. Para ello, se emplearán las ecuaciones comentadas en la introducción de balances de energía.

Las integraciones energéticas se han estimado teniendo en cuenta que la temperatura de salida del fluido caliente ha de ser inferior a la temperatura de entrada del fluido frío, mientras que la temperatura de salida del fluido frío debe ser inferior a la temperatura de entrada del fluido caliente.

Si bien la siguiente integración no aparece reflejada en la descripción del proceso Linde-Claude, en base a las necesidades de esta planta, se ha decidido realizar esta integración con 2 objetivos:

- Enfriar la corriente de salida del compresor para reducir el gasto en caudal de refrigerante.
- Calentar la corriente residual de la torre T-102 que será empleada para la desadsorción del agua y CO₂ en las zeolitas.

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

El balance de energía del intercambiador E-102 se presenta en la Tabla 29. A modo de ejemplo se escribirá la ecuación empleada para su resolución, siendo este balance igual para el resto de los intercambiadores.

$m_9 * (h_{10} - h_9) = -m_{29} * (h_{30} - h_{29})$	<i>Ejemplo</i>

Tabla 29. Balance de energía del intercambiador E-102

	Corriente 9	Corriente 10	Corriente 29	Corriente 30
Caudal másico (kg/h)	14885,70	14885,70	1149,96	1149,96
C _{pm} (kJ/(kg*K))	1,018	1,018	0,966	0,976
T (°C)	180,42	170,82	29,29	160,00
Q (kJ/h)	-1,47*10 ⁵		-1,47*10 ⁵	

El resto de las integraciones se corresponden con las del proceso descrito en la memoria de este documento (Descripción del proceso), presentando como diferencia la necesidad de 2 intercambiadores en lugar de 3 en la integración de la corriente de salida del flash y de la turbina (corriente 20) con la corriente 11, puesto que la capacidad de producción de la planta es inferior a las típicas y por tanto se requieren menores cantidades de energía. A continuación, se presentan los cálculos de todos los intercambiadores del proceso Linde-Claude (Tabla 30 hasta Tabla 34).

Tabla 30. Balance al intercambiador E-103

	Corriente 10	Corriente 11
Caudal másico (kg/h)		14885,70
C _{pm} (kJ/(kg*K))	1,023	1,013
T (°C)	170,82	32,00
Q (kJ/h)		-3,23*10 ⁶
Masa <i>chilled water</i> (kg/h)		30932,01

La temperatura de la corriente 22 se ha supuesto prácticamente igual a la temperatura de la corriente 7 (salida de zeolitas), de unos 30°C, para realizar los balances de energía y se ha comprobado que es aceptable dicho valor, por lo que, realizando una compresión prácticamente isotérmica, la temperatura de la corriente 24 se ha fijado en 32°C. Este valor se ha estimado en base a la simulación del proceso Linde-Claude en Aspen HYSYS, puesto que permite cerrar todos los balances de energía.

Tabla 31. Balance al intercambiador E-106

	Corriente 23	Corriente 24
Caudal másico (kg/h)		11908,62
C _{pm} (kJ/(kg*K))	1,01	1,01
T (°C)	81,59	32,00
Q (kJ/h)		-5,99*10 ⁵

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Masa *chilled water* (kg/h) 5732,89

Dentro del proceso Linde-Claude se desconocen la temperatura de la corriente 12 y por tanto de las corrientes 13, 16, 17 y 20. Es por eso por lo que se debe suponer la temperatura de la corriente 12 o bien de la 20 y recalcularlas hasta que se consiga que la temperatura de salida del intercambiador E-104 (corriente 12), sea igual a la temperatura de entrada obtenida al realizar el balance de energía al intercambiador E-105.

Tabla 32. Datos conocidos/desconocidos para los balances de energía

Intercambiador	Temperaturas de corrientes conocidas	Temperaturas de corrientes desconocidas	Temperatura de corriente supuesta
E-104	11, 22	12 (13,16), 21	21
E-105	14	13, 20, 21	

Suponiendo la temperatura de la corriente 21, que es común a ambas, se puede calcular por un balance al intercambiador E-104 la corriente 12 (13,16). La temperatura de la corriente 17 (salida de la turbina) viene dada realizando el balance al expansor TUR-101, mientras que la temperatura de la corriente 20 se obtiene realizando un balance de energía en el punto de mezcla. Por tanto, conociendo la temperatura de 20, 13 y 14, se realiza un balance al intercambiador E-105 y se obtiene el nuevo valor de la temperatura supuesta de la corriente 21. Esta operación debe realizarse sucesivas veces (iterar) hasta que se consiga que la temperatura supuesta 21, sea igual a la calculada. En este caso se ha admitido un error del 1%.

Tabla 33. Balance de energía del intercambiador E-104

	Corriente 11	Corriente 12	Corriente 21	Corriente 22
Caudal másico (kg/h)	14885,70		11908,62	
C_{pm} (kJ/(kg*K))	1,013	1,013	1,012	1,012
T (°C)	32,00	-5,60	-17,00	30,00
Q (kJ/h)	$-5,67 \cdot 10^5$		$5,67 \cdot 10^5$	

Tabla 34. Balance de energía intercambiador E-105

	Corriente 13	Corriente 14	Corriente 20	Corriente 21
Caudal másico (kg/h)	5954,28		11908,62	
C_{pm} (kJ/(kg*K))	1,013	1,015	1,015	1,012
T (°C)	-5,60	-137,88	-143,98	-17,00
Q (kJ/h)	$-1,54 \cdot 10^6$		$1,54 \cdot 10^6$	

Finalmente, el error obtenido entre la temperatura supuesta y calculada ha sido del 0,52%, siendo la calculada de -16,91°C.

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

A continuación, se presenta el balance de energía realizado en el punto de mezcla de las corrientes 19 y 17, donde la entalpía de la corriente 20 se calculará de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$h_{20} = \frac{m_{17} * h_{17} + m_{19} * h_{19}}{m_{20}}$$

Tabla 35. Balance de energía en el punto de mezcla de las corrientes 17 y 19

	Corriente 17	Corriente 19	Corriente 20
Caudal másico (kg/h)	8931,42	2977,21	11908,62
C _{pm} (kJ/(kg*K))	1,017	1,015	1,015
T (°C)	-134,10	-174,90	-143,98
Q (kJ/h)	-1,74*10 ⁻⁶		-1,74*10 ⁻⁶

Dado que en las válvulas se produce una expansión isoentálpica, para determinar la temperatura sólo sería necesario realizar un balance de energía igualando las entalpías de las corrientes conocidas a las no conocidas. Esto teniendo en cuenta que el gas es ideal conduciría a que la temperatura de la corriente de salida es igual a la corriente de entrada. Por eso, en este caso, dado que esto no tendría sentido tener la misma temperatura teniendo en cuenta que en la bibliografía se especifica que se emplea una válvula isoentálpica para enfriar (no una turbina), hace que no sea posible aplicar el balance. Por eso, para el cálculo de las válvulas se ha recurrido a Aspen HYSYS. Los resultados para la válvula VLV-101 y VLV-102, se recogen en la Tabla 36. La segunda válvula resulta necesaria para igualar las presiones entre la corriente de salida del flash y la corriente que sale de la turbina.

Tabla 36. Balance de energía a la válvula VLV-101 y VLV-102

VLV-101		
	Corriente 14	Corriente 15
P (bar)	44,4	6,5
Entalpía (kJ/kg)	-263,84	-263,84
T (°C)	-137,88	-173,50
VLV-102		
	Corriente 18	Corriente 19
P (bar)	6,5	4,5
Entalpía (kJ/kg)	-176,49	-176,49
T (°C)	-173,50	-174,90

En el caso de la VLV-101, se comprueba que la entalpía no está tan próxima a la temperatura como ocurría hasta ahora con el resto de las corrientes, lo cual indica que el C_p es mayor al supuesto idealmente. En base a esto, se debe asumir que en los cálculos existe cierto error, ya que lo ideal sería emplear todas las capacidades específicas reales,

sin embargo, como en este apartado no exige la misma rigurosidad que el diseño de los equipos se ha aceptado como una primera estimación.

Finalmente se presenta el balance de energía de la cámara de licuefacción, el cual permite obtener la temperatura de la corriente 15 y en consecuencia de la corriente 14. Dado que en la válvula de expansión se licúa parte del aire, la corriente 18 estará compuesta por fase vapor y fase líquida, y la fracción de vapor será determinada mediante la Ecuación 25 y Ecuación 26, donde X representa la fracción de vapor. El estado de referencia se ha tomado a 0°C y estado de agregación gas.

$m_{15} * h_{15} = m_{18} * h_{18} + m_{25} * h_{25}$	<i>Ecuación 25</i>
$h_{15} = C_{p,gas} * (T_{15} - T_{ref}) - (1 - X) * H_{fg}$	<i>Ecuación 26</i>

Tomando las mismas condiciones como estado de referencia la entalpía del líquido se calculará en base a la Ecuación 27:

$h_{25} = C_{p,gas} * (T_{25} - T_{ref}) - H_{fg}$	<i>Ecuación 27</i>

En la Tabla 37, se presenta el balance de energía a la cámara de licuefacción V-102. El valor del calor latente de vaporización de la corriente 15 se obtiene a la temperatura de la cámara de licuefacción mediante Aspen HYSYS. A -173,5°C H_{fg} es igual a 174,7 kJ/kg.

Tabla 37. Balance de energía a la cámara de licuefacción de aire

	Corriente 15	Corriente 18	Corriente 25
Caudal másico (kg/h)	5954,28	2977,21	2977,07
C_{pm} (kJ/(kg*K))	1,017	1,017	1,017
T (°C)	-173,50	-173,50	-173,50
h (kJ/kg)	-263,84	-176,49	-351,19
Q (kJ/h)	-1,57*10 ⁶	-1,57*10 ⁶	

3.1.5. Torre de destilación criogénica T-102

El caudal de reflujo que se devuelve a la torre es condensado mediante un ciclo de refrigeración, que se basa en comprimir, refrigerar la corriente de salida con un refrigerante externo y expandir para enfriar a la corriente hasta licuar el reflujo. Dado que los valores de este ciclo no son necesarios para realizar el resto de los balances, puesto que la integración como se ha visto hasta ahora es bastante compleja, y no es objeto del trabajo, se ha decidido calcular únicamente el calor necesario a retirar del caudal de reflujo para que este se devuelva a la torre en estado líquido. Además, se ha intentado reflejar el proceso de acuerdo con la bibliografía, donde expanden parte de la corriente de oxígeno residual por colas para disminuir su temperatura por debajo de la del reflujo y ayudar a enfriar la corriente de reflujo.

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

El calor a retirar del caudal de reflujo vendrá dado por la Ecuación 28, por lo que sabiendo el caudal de reflujo (91,31 kmol/h), y el valor latente de vaporización por cabezas que a -175,8°C resulta de 4702 kJ/kmol, se puede obtener Q_c , tomando este un valor de $4,293 \cdot 10^5$.

$Q_c = -L * H_{fg}$	<i>Ecuación 28</i>

Dado que la compresión a presiones superiores a 50 bar eleva la temperatura de la corriente de salida, se ha decidido asumir que dicho calor es retirado por la corriente de oxígeno, por lo que como una estimación y por falta de otros datos, se ha asumido que el calor que se ha de liberar del reflujo ha de ser adsorbido por la corriente de oxígeno obteniéndose así una temperatura final de 29,29°C para la corriente 29. Para la válvula de expansión VLV-103 se han tomado los datos a partir de HSYS. En la Tabla 38, se presenta un resumen. Como se desconoce el número de intercambiadores necesarios para realizar la integración se supone una única caída de presión de 20 kPa.

Tabla 38. Resumen corriente de la corriente de salida de colas de la torre T-102

Parámetro	Corriente 27	Corriente 28	Corriente 29
Caudal másico (kg/h)		1149,96	
P (bar)	6,6	2,4	2,2
T (°C)	-169,00	-180,80	29,29

3.2. Sección 200

3.2.1. Bomba P-201 A/B

Las bombas P-201 A/B se encargarán de aumentar la presión del agua de entrada suponiendo que se encuentra a 1 bar, como si se encontrase almacenada en un tanque al aire libre dentro del recinto de la planta, lo cual no es exacto puesto que se empleará agua de la depuradora, pero se tratará como aproximación para el caso en que fuera necesario almacenar una cierta cantidad de agua en planta.

Como se ha mencionado en el Anexo II. Cálculos Justificativos primer parte, al calcular los orificios para el flujo de líquido y gas en el electrolizador, se parte de un balance energía mecánica para cualquier fluido (Ecuación 29). Teniendo en cuenta que el fluido a mover es agua, este será compresible, se supondrá que la velocidad no varía ya que el fluido proviene de la conducción de la depuradora, por lo que el término de velocidad se puede asumir como 0, no se tendrán en cuenta cambios de altura y el valor de W será el valor de energía necesaria para mover un kg de fluido, lo cual si se divide por el caudal másico empleado en (G en kg/s) se obtendrá el valor de potencia de la bomba. Resulta la Ecuación 30 como balance de energía mecánica a utilizar y la ecuación de la potencia será la Ecuación 31. Los resultados finales para este equipo se recogen en la

Tabla 39. Se han tenido en cuenta 400 m de longitud de tubería puesto que la longitud del terreno de la planta son 200 m por lo que la máxima distancia que podría recorrer se estima en el doble de esa distancia.

$$\Delta \frac{v^2}{2\alpha} + \Delta gz + \int \frac{dP}{\rho} + W - \sum F = 0$$

Ecuación 29

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

$$\frac{P_1 - P_2}{\rho} + W - f \frac{v^2 L}{2 D} = 0 \quad \text{Ecuación 30}$$

$$P = \frac{W}{G} \quad \text{Ecuación 31}$$

Tabla 39. Cálculo de la potencia de la bomba P-201 A/B.

Bomba P-201 A/B	
P_1 (bar)	1
P_2 (bar)	4
Q (kg/s)	0,987
D (m)	0,025
v (m/s)	2
L (m)	400
ρ (kg/m ³)	1000
η (Pa·s)	$1 \cdot 10^{-3}$
Re	50129,25
ε (m)	0,000046
f	0,026
W (J/kg)	1141,76
P (W)	1157

3.2.2. Intercambiador E-201

En la Tabla 40 se presenta el balance al intercambiador E-201.

Tabla 40. Balance de energía al intercambiador E-201

	Corriente 33	Corriente 34
Caudal másico (kg/h)		3552,59
C_{pm} (kJ/(kg·K))	4,051	4,069
T (°C)	15	80
Q (kJ/h)		$9,41 \cdot 10^5$
Masa vapor baja presión (kg/h)		33120,41

3.2.3. Intercambiador E-202

En la Tabla 41 se presenta el balance al intercambiador E-202.

Tabla 41. Balance de energía al intercambiador E-202

	Corriente 36	Corriente 37
Caudal másico (kg/h)		412,84
C_{pm} (kJ/(kg·K))	13,84	13,75
T (°C)	80,00	25,00
Q (kJ/h)		$-7,54 \cdot 10^5$

Masa <i>chilled water</i> (kg/h)	7221,78

3.2.4. Intercambiador E-203

En la Tabla 43 se presenta el balance al intercambiador E-203.

Tabla 42. Balance de energía al intercambiador E-203

	Corriente 39	Corriente 40
Caudal másico (kg/h)	3139,75	
C_{pm} (kJ/(kg*K))	0,925	0,918
T (°C)	80,00	25,00
Q (kJ/h)	-6,27*10 ⁵	
Masa <i>chilled water</i> (kg/h)	6000	

3.2.5. Zeolitas T-201 A/B

Aplicando lo ya mencionado para los balances de energía a las zeolitas, en la Tabla 44 se presenta el cálculo de la temperatura de la corriente a la salida del equipo.

Tabla 43. Balance de energía al T-201

Parámetro	Valor
Caudal molar adsorbido (mol/h)	1023,46
$Q_{liberado}$ (kJ/h)	4,094*10 ⁴
$C_{p,a.s.}$ (kJ/(kg*K))	14,33
T _{corriente 37} (°C)	25
T _{corriente 38} (°C)	32,24

En la Tabla 44 se recogen los cálculos asociados con la caída de presión.

Tabla 44. Cálculo de caída de presión en el lecho de zeolita

L	Longitud del lecho (m)	2,400
d_p	Diámetro partícula equivalente (m)	0,00205
η	Viscosidad dinámica kg/(m*s)	8,40*10 ⁶
G	G_{aire} seco (kg/(m ² *s))	0,391
Re	Reynolds	95,34
v_o (m/s)	G_{aire} /Densidad del aire	0,7385
ϕ_s	Factor de esfericidad	1
	Densidad del lecho (kg/m ³)	620
	Densidad del sólido (kg/m ³)	1024,6

ε	Porosidad del lecho	0,3949
Caída de presión (bar)		0,056

3.2.6. Zeolitas T-202 A/B

En la Tabla 45 se recoge el balance de energía realizado al tanque de zeolitas T-202.

Tabla 45. Balance de energía al T-202

Parámetro	Valor
Caudal molar adsorbido (mol/h)	513,28
Q_{liberado} (kJ/h)	$2,053 \cdot 10^4$
$C_{p,a.s.}$ (kJ/(kg*K))	0,918
$T_{\text{corriente 40}}$ (°C)	25,00
$T_{\text{corriente 41}}$ (°C)	32,14

En la Tabla 46 se recoge el cálculo de la caída de presión para el equipo T-202.

Tabla 46. Cálculo de caída de presión en el lecho de zeolita

L	Longitud del lecho (m)	2,20
d_p	Diámetro partícula equivalente (m)	0,00205
η	Viscosidad dinámica kg/(m*s)	2,40E-05
G	$G_{\text{aire seco}}$ (kg/(m ² *s))	5,665
Re	Reynolds	483,92
v_o (m/s)	$G_{\text{aire}}/\text{Densidad del aire}$	1,4738
ϕ_s	Factor de esfericidad	1
	Densidad del lecho (kg/m ³)	620
	Densidad del sólido (kg/m ³)	1024,6
ε	Porosidad del lecho	0,3949
Caída de presión (bar)		0,866

3.3. Sección 300

En este apartado se emplean de nuevo iteraciones para resolver el balance de energía en los intercambiadores cuya temperatura no es conocida. Dado que los conceptos, la forma de resolverlo y las ecuaciones a emplear han sido presentadas anteriormente, a continuación, sólo se recogerán los resultados de los balances.

3.3.1. Punto de mezcla corriente 38 y corriente 26

En la Tabla 47 se presenta el balance de energía realizado al punto de mezcla en el que confluyen la corriente 26 y la corriente 38.

Tabla 47. Balance de energía al punto de mezcla entre las corrientes 26 e 38

	Corriente 26	Corriente 38	Corriente 42
Caudal másico (kg/h)	1827,11	394,40	2221,52
C_{pm} (kJ/(kg*K))	1,054	14,312	3,391
T (°C)	-175,80	32,24	-20,79
Q (kJ/h)	-1,57*105		-1,57*105

3.3.2. Compresor C-301

En la Tabla 48 se presenta el cálculo de la temperatura de salida de la corriente de salida del compresor C-301 (corriente 43).

Tabla 48. Estimación de la temperatura de salida del compresor C-301

Compresor C-301	
P_1 (bar)	6,4
P_2 (bar)	100,3
P_2/P_1	15,70
Pentre etapa (bar)	3,96
T_1 (°C)	-20,79
a	0,286
Compresor 1	
P_1 (bar)	6,4
P_2 (bar)	25,36
T_1 (°C)	-20,79
T_{sal} (°C)	100,71
Refrigeración entre etapa	
T_{sal} intercambiador impuesta (°C)	30,71
Q_{aire} (kJ/h)	$5,33 \cdot 10^5$
Masa de <i>chilled water</i> necesaria (kg/h)	5105,04
Compresor 2	
P_1 (bar)	25,16
P_2 (bar)	100,3
T_1 (= $T_{sal, intercambiador}$)	30,71
T_2 (°C)	177,78

3.3.3. Punto de mezcla entre la corriente 43 y la corriente 54

En la Tabla 49 se recoge el balance de energía para la corriente 44:

Tabla 49. Balance de energía al punto de mezcla de la corriente 43 y 54

Corriente 43	Corriente 54	Corriente 44

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Caudal másico (kg/h)	2221,52	9477,67	11699,26
C_{pm} (kJ/(kg*K))	3,416	3,407	3,409
T (°C)	177,78	171,79	172,93
Q (kJ/h)	6,90*10 ⁶		6,90*10 ⁶

3.3.4. Intercambiador E-301

En la Tabla 49 se recoge el balance de energía para la corriente 44:

Tabla 50. Balance de energía al intercambiador E-301

	Corriente 44	Corriente 45	Corriente 46	Corriente 47
Caudal másico (kg/h)	11699,26		11699,20	
C_{pm} (kJ/(kg*K))	3,409	3,431	3,281	3,237
T (°C)	172,93	317,55	469,59	321,61
Q (kJ/h)	5,85*10 ⁶		-5,85*10 ⁶	

3.3.5. Intercambiador E-302

En la Tabla 51 se presenta el balance de energía al intercambiador E-302:

Tabla 51. Balance de energía al intercambiador E-302

	Corriente 47	Corriente 48	Corriente 51	Corriente 52
Caudal másico (kg/h)	11699,20		9612,24	
C_{pm} (kJ/(kg*K))	3,237	3,192	3,537	3,407
T (°C)	321,61	158,85	-20,00	170,00
Q (kJ/h)	-6,25*10 ⁶		6,25*10 ⁶	

3.3.6. Intercambiador E-303

En la Tabla 52 se presenta el balance de energía al intercambiador E-303:

Tabla 52. Balance de energía al intercambiador E-303

	Corriente 48	Corriente 49	Corriente 57	Corriente 58
Caudal másico (kg/h)	11699,20		2086,96	
C_{pm} (kJ/(kg*K))	3,192	3,184	2,059	2,059
T (°C)	158,85	144,00	-117,06	15,00
Q (kJ/h)	-5,67E+05		5,67E+05	

3.3.7. Intercambiador E-304

En la Tabla 53 se presenta el balance de energía al intercambiador E-304:

Anexo I: Balances de Materia y Energía
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 53. Balance de energía al intercambiador E-304

	Corriente 49	Corriente 50
Caudal másico (kg/h)		11699,20
C_{pm} (kJ/(kg*K))	3,184	3,135
T (°C)	144,00	-20,00
Q (kJ/h)		-6,93E+06
Masa propano (kg/h)		125,00

3.3.8. Compresor C-302 y TUR-301

En la Tabla 54 se presenta el balance de energía al compresor C-302 y a la TUR-301:

Tabla 54. Balance de energía al compresor C-302 y a la turbina TUR-301

	Compresor C-302	Expansor TUR-301
P_1 (bar)	98,89	99,09
P_2 (bar)	100,30	18,2
T_1 (°C)	170,00	-20
a	0,286	0,286
T_2 (°C)	171,79	-117,06

3.3.9. Reactor R-301

El balance de energía al reactor se explica detalladamente en el Anexo II, Cálculos Justificativos, Parte II. Los valores de entalpía a la entrada y a la salida del reactor se presentan en la Tabla 55:

Tabla 55. Balance de energía al reactor R-301

	Corriente 45	Corriente 46
T(°C)	317,55	469,59
ΔH_r (kJ/kmol NH_3)	-49849	-49849

3.3.10. Tanque flash V-301

Para resolver el balance de energía del tanque flash se emplean las mismas ecuaciones que en la cámara de licuefacción V-102. Por lo que se determina la entalpía de la corriente de entrada mediante el balance de energía al tanque y a continuación, a través de la entalpía se determina el valor de la fracción de vapor, que ha resultado de 0,815. El calor latente de vaporización de amoníaco a -20°C ha sido consultado en Aspen HYSYS y toma un valor de 380,70 kJ/kg.

En la Tabla 56, se presenta el balance de energía realizado al tanque flash V-301. De nuevo se ha empleado como estado referencia 0°C y gas, por lo que la entalpía de la

corriente de líquido se calculará como la suma de la energía necesaria para pasar el estado de referencia 0°C gas a -20°C y a continuación teniendo en cuenta el cambio de fase. Cabe destacar que el Cp presentado en la tabla se corresponde con la capacidad específica del gas, y no del líquido, por tal y como se ha tomado el estado de referencia.

Tabla 56. Balance de energía al tanque flash V-301

	Corriente 50	Corriente 51	Corriente 56
Caudal másico (kg/h)	11699,20	9612,24	2086,96
C _{pm} (kJ/(kg*K))	3,203		2,338
T (°C)	-20,00	-20,00	-20,00
h (kJ/kg)	-134,38	-70,75	-427,47
Q (kJ/h)	-6,80*10 ⁵		-6,80*10 ⁵

4. BIBLIOGRAFÍA

1. **SINNOT, Ray, TOWLER, Gavin.** *Diseño en ingeniería química*. Barcelona : Reverté, 2012. 978-84-291-7199-0.
2. **VALCON.** Carta psicrométrica. Temperaturas normales. Unidades del sistema internacional. Al nivel del mar. [En línea] [Citado el: 13 de junio de 2022.] <https://ingenieriaelemental.com/wp-content/uploads/2020/06/CartaPsicrome%CC%81trica2-1200x675.jpg>.
3. **JALON.** Molecular Sieves 13X. [En línea] [Citado el: 13 de junio de 2022.] <https://www.jalonzeolite.com/wp-content/uploads/2020/05/TDS-13X-1.pdf>.
4. **OCON, J., TOJO, G.** *Problemas de ingeniería química: Operaciones básicas*. s.l. : Aguilar, 1967. 8403209975.
5. **EDRISI, A., MANSOORI, Z., DABIR B.** Using three chemical looping reactors in ammonia production process – A novel plant configuration for a green production. [En línea] International Journal of Hydrogen Energy, Volume 39, Issue 16, 27 de mayo de 2014. [Citado el: 13 de junio de 2022.] <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.03.119>.
6. **SEIDER, W., SEADER, J., LEWIN, D., WIDAGDO, S.** *Product and Process Design Principles, 3ªed.* s.l. : WILEY, 2009. 978-0470-04895-5.
7. **KERN S&D.** ELECTROLIZADORES DE HIDRÓGENO. [En línea] KERN S&D. [Citado el: 5 de Mayo de 2022.] <https://kernsd.com/electrolizadores-de-hidrogeno/>.

ANEXO II:
CÁLCULOS
JUSTIFICATIVOS

PARTE I:

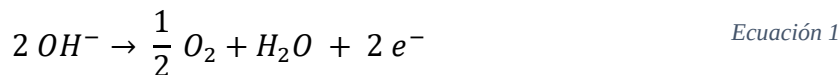
ELECTROLIZADOR ELE-101

ÍNDICE

1.	Introducción	3
1.1.	Selección del tipo de electrolizador	4
1.1.1.	Electrolizador alcalino	4
1.1.2.	Electrolizador de membrana electrolítica polimérica	4
1.1.3.	Electrolizador de celda de óxido sólido	5
1.1.4.	Tecnología Fotoelectrocatalítica	5
1.2.	Forma en que se apilan las celdas	6
1.3.	Selección de materiales	6
1.3.1.	Electrodos	6
1.3.2.	Juntas	7
1.3.3.	Separador	7
1.3.4.	Pernos	7
1.3.5.	Placas fijas	8
2.	Dimensionado del electrolizador	10
2.1.	Intensidad en las celdas	10
2.2.	Presiones parciales en el ánodo y el cátodo	13
2.2.1.	Cálculo de las difusividades	16
2.3.	Tensión de cada celda electrolítica	19
2.3.1.	Tensión de circuito abierto	20
2.3.2.	Sobretensión de activación	20
2.3.3.	Sobretensión por concentración o por difusión	23
2.3.4.	Sobretensión óhmica	24
2.3.5.	Resultado	28
2.4.	Potencia total del equipo y número de stacks necesarios	29
3.	Diseño Mecánico	30
3.1.	Orificios para el flujo de fluidos	30
3.1.1.	Diámetro de las celdas	34
3.2.	Dimensionado de los pernos	35
3.3.	Dimensiones de la junta	36
3.4.	Espesor de las placas fijas	38
3.5.	Longitud del equipo	40
4.	Bibliografía	42

1. INTRODUCCIÓN

Los electrolizadores son conjuntos de celdas electrolíticas en los cuales se aprovecha la energía eléctrica para romper una molécula, en este caso, se romperá la molécula de agua con la intención de obtener hidrógeno, que posteriormente se empleará para la síntesis de amoníaco, según las reacciones del ánodo (Ecuación 1) y del cátodo (Ecuación 2 y Ecuación 3). En cada una de las celdas electrolíticas pueden distinguirse 3 componentes básicos: 2 electrodos, un ánodo y un cátodo, en cuyas superficies ocurren las reacciones, y el electrolito, que es el fluido en el cual se encuentra la molécula que se desea romper y que separa los dos electrodos. (1)



Entre los parámetros más importantes destaca la tensión de cada celda, puesto que en base a esta tensión se puede categorizar el desempeño de un electrolizador, además de que permite conocer el consumo de energía. Cuanto mayor sea la tensión de una celda mayor será la ineficiencia del equipo para unas condiciones de operación dadas.

Otro parámetro muy importante sería la densidad de corriente, siendo este un parámetro de diseño que permitirá obtener el valor de muchos otros parámetros del equipo. Sus valores normales se encuentran entre 100 y 300 mA/cm². (2) Este valor se relaciona directamente con la tasa de producción de gas, por lo que a mayores densidades de corriente, mayor será la producción por área de electrodo, lo cual crea problemas debido a que la generación de burbujas hará aumentar el valor de la tensión en la celda.

Para el modelo de electrolizador seleccionado (electrolizador alcalino) también es muy importante el electrolito a emplear y su concentración, puesto que influirá directamente en la tensión de la celda al permitir que se conduzca mejor o peor la corriente en el medio dependiendo de su concentración. Los electrolitos más usuales son KOH y NaOH con una concentración usual de 30% en peso, aunque también se pueden usar hasta un 25%.

Por último, también son importantes las condiciones de operación, presión y temperatura, teniendo en cuenta que la temperatura favorece la disminución de potencial de la celda, pero también lleva a un aumento de presión en la celda, lo cual provoca que la tensión sea mayor. Debido a esto, normalmente el rango de temperaturas empleado se encuentra entre 60 y 80 °C y la presión puede variar entre la presión atmosférica y 10 bar de presión para electrolizadores alcalinos. (1)

1.1. Selección del tipo de electrolizador

Para llevar a cabo la electrólisis de agua, existen distintas tecnologías disponibles. A continuación, se presentan las distintas tecnologías disponibles, así como sus principales características.

Cabe destacar que en la actualidad se están desarrollando nuevos equipos y perfeccionando los materiales de los ya existentes.

1.1.1. Electrolizador alcalino

Los electrolizadores alcalinos o AWE por sus siglas en inglés (Alkaline Water Electrolyzer) están formados por un ánodo y un cátodo sumergidos en una solución alcalina, normalmente KOH, y operan a temperaturas inferiores a los 100 °C además de a presiones próximas a la atmosférica. En este tipo de equipos también es necesario el uso de un diafragma o separador entre los dos electrodos el cual permite que los iones hidróxido pasen a través, pero mantiene a las fases gaseosa separadas en cada uno de los lados, impidiendo su recombinación y, por lo tanto, pérdidas de energía y eficiencia. (3)

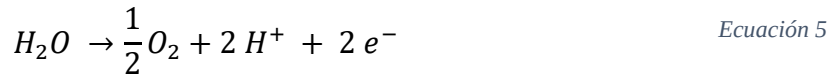
Esta tecnología es la más madura para la producción de hidrógeno a nivel industrial, permitiendo producción a gran escala con equipos que pueden llegar a megavatios. Lleva siendo empleada para la producción de hidrógeno desde principios de siglo pasado. Además, presenta ventajas en los costes del equipo puesto que no requiere materiales de precio muy elevado, debido al medio alcalino pueden emplearse metales como níquel en los electrodos en vez de los metales nobles, como el platino, necesarios en otros casos. El coste del electrolito es también muy asequible. (3)

Pese a estas ventajas, en este tipo de equipos existe una importante desventaja también, relacionada con el separador, puesto que este produce pérdidas de corriente importantes y además no es suficiente para evitar completamente la mezcla de los gases, generando pérdidas de energía. No permite altas densidades de corriente ni altas presiones, lo cual permitiría aumentar la producción en gran escala. (3)

Debido al rango de operación usual del equipo, que está pensado para producciones a gran escala, que es el más comúnmente usado en la industria y existen metodologías más confiables para su diseño, además de su bajo coste comparado con otros tipos, este será el tipo de electrolizador seleccionado para el diseño.

1.1.2. Electrolizador de membrana electrolítica polimérica

Los electrolizadores de membrana electrolítica polimérica o PEME por sus siglas en inglés (Polymer Electrolyte Membrane Water Electrolysis) están formados por un cátodo, un ánodo y una membrana electrolítica polimérica (PEM) y fueron desarrollados en la década de 1960. Operan a temperaturas algo más elevadas que los electrolizadores alcalinos, próximas a los 100 °C y el medio generado debido a sus reacciones es un medio ácido, como se puede observar en la Ecuación 4 para el cátodo y la Ecuación 5 para el ánodo. (3)



La membrana suele estar compuesta por Nafion, el cual tiene una conductividad que le permite alcanzar densidades de corriente elevadas (2 A/cm^2). Además, la membrana permite el uso de altas presiones, hasta los 100 bar, y permite una buena separación de los gases. Para lograr esto la membrana ha de ser gruesa, lo que provoca que se produzca una gran resistencia a la conducción en ella, generando pérdidas de energía. Además, aunque permite mayores producciones debido al efecto de la presión elevada, ya que produce burbujas de gas más densas, los catalizadores que recubran los electrodos han de ser muy estables debido a la alta acidez que se produce. Es necesario emplear cátodos de platino y ánodos de óxido de iridio, o similares, que poseen una gran reactividad y estabilidad, pero que encarece en gran medida el equipo.

1.1.3. Electrolizador de celda de óxido sólido

La electrólisis de óxido sólido, SOEC por las siglas en inglés (Solid Oxide Electrolyzer Cell), fue desarrollada en la década de 1970. Están compuestos por un ánodo y un cátodo separados por un electrolito conductor de O^{2-} , que usualmente son circonios estabilizados con distintos compuestos de forma que pueda ocupar alguna de las tres posiciones. Las ecuaciones desarrolladas en el cátodo (Ecuación 6) y en el ánodo (Ecuación 7) difieren de las tratadas anteriormente puesto que en este caso se intercambian los aniones O^{2-} . (3)



Esta tecnología opera a temperaturas muy elevadas, en el rango de 700 a 900 °C, debido a que a temperaturas más bajas la conductividad del O^{2-} no alcanza un valor suficiente. Se pueden obtener muy buenas eficiencias debido a la elevada temperatura, pero esto implica que los materiales empleados deben ser mucho más estables. Además, debido a la gran generación de oxígeno en el ánodo, el electrodo puede sufrir daños debidos a la corrosión, aunque este efecto puede reducirse reduciendo la densidad de corriente. (3)

1.1.4. Tecnología Foelectrocatalítica

Se trata de una tecnología más reciente, que parte de la premisa de que un cristal de TiO_2 bajo iluminación es capaz de partir las moléculas de agua, produciendo energía química directamente a partir de la energía solar, es decir, de la luz solar. Actualmente, esta tecnología es utilizada en la producción de hidrógeno, reducción de dióxido de carbono, purificación de aire y tratamiento de aguas. (3)

Esta tecnología tiene como problema el diseño y selección del sistema de reacción y esa es la razón por la que aún no se ha llevado a escala industrial.

1.2. Forma en que se apilan las celdas

Las celdas electrolíticas de un electrolizador alcalino consisten en un electrodo positivo (cátodo) y un electrodo negativo (ánodo) separados por un separador sumergido en electrolito. Cada uno de estos grupos constituirá una celda electrolítica y que a continuación tendrá otro separador sumergido en electrolito y el electrodo contrario para dar lugar a otra celda de forma que el electrodo intermedio se encuentre en las dos celdas. Tanto la primera como la última de las celdas ha de estar separada de las palcas fijas por una junta. La conexión eléctrica de las celdas dará lugar a una sucesión en serie de electrodos positivos, de forma que en cada uno exista una determinada caída de tensión. De igual forma los electrodos negativos también han de estar conectados en serie entre sí al polo negativo.

Puesto que resultan un gran número de stacks se ha decidido que se colocarán en serie la mitad de ellos formando dos equipos que constituirán el equipo completo.

1.3. Selección de materiales

A continuación, se detallarán los materiales seleccionados y la razón por la que se emplea cada uno de los materiales para las partes más importantes del equipo: los electrodos, las juntas, el separador, los pernos y las placas fijas.

1.3.1. Electrodos

Los electros son los encargados de conducir la corriente hacia el electrolito. Además, en su superficie es donde se producirán las reacciones que generarán las burbujas de gas durante el proceso de electrólisis. Se diferencia el electrodo positivo llamado cátodo y el electrodo negativo denominado ánodo. Estos electrodos han de resistir la corrosión y deben conducir bien la electricidad, además de mantener la forma a lo largo período de funcionamiento del equipo.

Los materiales ideales para esta aplicación serían metales nobles como el platino, pero debido a su elevado coste no se utilizan a escala industrial. También destaca el níquel, pero debido a la dificultad para obtenerlo en láminas se empleará recubriendo una superficie (4) que tenga buenas propiedades estructurales y eléctricas, como es el acero inoxidable SA-240, recomendando por la norma ASME BPVC Sec. II para recipientes a presión y aplicaciones generales. Ya que va a estar en contacto con el electrolito y con los gases producidos es necesario que el material sobre el que se encuentre el electrolito también sea estable en el medio de reacción y con las condiciones designadas. (3)

En algunos electrolizadores es necesario el empleo de electrodos de distintos materiales, y en ciertos estudios a nivel laboratorio también es usual esta práctica, pero a nivel industrial es común emplear dos electrodos del mismo material. En este caso se usarán electros de acero inoxidable con recubrimiento de una delgada capa de níquel generada mediante electrodeposición u otros métodos. (5) (6)

Debido a esto, se tomará como propiedades las del níquel cuando se traten de propiedades que tengan que ver con su reactividad y las del acero inoxidable cuando se realicen cálculos a nivel estructural.

1.3.2. Juntas

Las juntas empleadas deben ser capaces de soportar las temperaturas y presiones de operación, además de ser estables frente a los reactivos con los que van a estar en contacto. Se puede usar un gran número de materiales distintos destacando los elastómeros y las fibras minerales.

Debido a que en ninguno de los artículos y libros estudiados se ha hecho referencia a los materiales empleados en las juntas, se ha decidido que en este caso se emplearán juntas de grafito flexible que presenta unas grandes propiedades físicas, una gran resistencia a la temperatura, y son completamente inertes en el medio de reacción seleccionado. Además, se ha encontrado una metodología para el diseño de estas juntas de grafito relacionado con la empresa fabricante de las mismas. (7)

1.3.3. Separador

En el proceso de electrólisis se forman hidrógeno en el cátodo y oxígeno en el ánodo, mientras que los iones hidroxilo se mueven en el seno del electrolito. Para evitar la formación de mezclas de gas se emplea un separador poroso (o diafragma). Este debe estar humedecido en el electrolito permitiendo la conducción de los iones a través de él permitiendo que se muevan entre los electrodos. (3)

Las características más relevantes de los separadores son su elevada porosidad y humectabilidad, pequeños diámetros de poro, capacidad de construcción muy fina reduciendo las caídas de tensión y una gran estabilidad química y mecánica.

Actualmente, el material más utilizado para este fin es el Zifron, que se trata de un composite elaborado con circonio y polisulfona, lo cual le otorga la flexibilidad del polímero junto con las propiedades mecánicas y humectabilidad del circonio. Además, este material es muy estable en disoluciones de KOH.

En base a la patente estudiada (8) se colocará el separador dentro de la junta, empleando un corte en el cual se pueda alojar la misma y que se puede ver en el documento de Planos.

1.3.4. Pernos

Para los pernos, cuya finalidad es mantener la integridad estructural del equipo a la vez que comprimen las juntas que se emplean a lo largo del mismo, se ha decidido seguir la norma ASME Sec. II (9), la cual recomienda el uso de SA-307 grado B, que se trata de un acero al carbono, para tornillería de máquinas de uso general. Puesto que los pernos no estarán en contacto con ningún fluido se puede tomar sin problema aceros al carbono, ya que no será necesaria una resistencia a la corrosión elevada, que sí tendrá que tenerse en cuenta para otras partes del equipo. El diámetro de los pernos y sus características se listarán en los apartados correspondientes.

1.3.5. Placas fijas

Para el caso de las placas fijas la norma ASME BPVC recomienda para recipientes a presión acero al carbono SA-285, pero ya que en el electrolizador se trabajará con agua y además estará presente el electrolito, se han de tener en cuenta las necesidades especiales frente a la corrosión, razón por la que se empleará el también recomendado por la norma SA-240, un acero inoxidable al cromo y níquel.

Para comprobar la selección del material por medios externos a la norma se decide emplear la metodología Ashby (10), que se trata de un método de selección de material basado en mapas de propiedades como es el de la Figura 1. Es importante tener en cuenta que en el equipo estará trabajando con agua y en un medio alcalino favorecido por el electrolito (KOH), por lo que se ha de seleccionar un material compatible con este medio corrosivo.

En el método Ashby el objetivo principal es la selección del material de forma sencilla, mediante el empleo de un índice de rendimiento, el cual dependerá de la función a realizar y de las exigencias físicas a las que se encontrará sometido, y de una gráfica acorde a ese índice. De forma general se puede expresar este índice según la Ecuación 8 en la que el índice (P) es función del material (M), de la geometría (G) y de la función que desempeña (F).

$$P = f(M, G, F)$$

Ecuación 8

A través del empleo de esta metodología se definirá un grupo de materiales a emplear y dentro del grupo se seleccionará el material que mejor se adapte a las necesidades. Para aplicar esta metodología es necesario aplicar una o más funciones objetivo, que describen una cantidad a minimizar o maximizar, normalmente maximizar, limitadas por una serie de restricciones. Se han de identificar además las variables libres, es decir, aquellas que pueden ser modificadas, normalmente asociadas a la geometría y al material a emplear.

Para el caso a tratar la función de las placas fijas sería contener la presión y las partes internas del equipo. El objetivo sería maximizar la seguridad al contener la presión y, ya que se trataría de un equipo grande debido a sus dimensiones, el criterio para este objetivo según la metodología sería *leak before break*. Las restricciones serían las dimensiones del equipo y la variable libre en este caso sería el material a emplear. Se va a diseñar el equipo como recipiente a presión puesto que se tratará de un equipo sometido a presión interna y además su geometría es tratada en la norma ASME BPVC. Al aplicar esta metodología a recipientes a presión es necesario hacer una distinción entre los equipos pequeños y los grandes, ya que cada uno tiene un requisito distinto a la hora de contener la presión de forma segura. Los recipientes pequeños emplean el criterio de *yield before break* (ceder antes de romper) de forma que se puedan detectar las deformaciones y que la presión se pueda liberar de forma segura; mientras que los recipientes grandes siguen el criterio de *leak before break* (fuga antes de romper) que permite liberar el exceso de presión gradualmente de forma segura, al mismo tiempo que se detecta la fuga. (10)

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Siguiendo este criterio, los índices a emplear (M_3 y M_4) se recogen en la Ecuación 9 y la Ecuación 10. Siendo K_{1C} la tenacidad a la fractura por deformación plana y σ_f el módulo de Young o límite elástico, dependientes del material a emplear.

$$M_3 = \frac{K_{1C}^2}{\sigma_f} \quad \text{Ecuación 9}$$

$$M_4 = \sigma_f \quad \text{Ecuación 10}$$

El índice M_3 representa el propio criterio de *leak before break*, de ahí su interés por maximizarlo para asegurar la seguridad de los materiales empleados, pero no es suficiente para determinar un material. Si solo se tiene en cuenta este índice se obtendrían materiales que llevarían a elevados espesores, de ahí la necesidad de emplear el índice M_4 , también a maximizar, para asegurar que el material sea lo más delgado posible, ahorrando en costes de material. (10)

En la Figura 1 se presenta un gráfico desarrollado por Ashby en el cual se representa la tenacidad a la fractura frente al módulo de Young en escala logarítmica. Puesto que esta figura relaciona las dos variables que se encuentran en los índices de material, puede emplearse este gráfico para seleccionar los materiales que satisfagan mejor el objetivo. Para poder trasladar el índice al gráfico se ha de tener en cuenta la escala, para el índice M_3 se puede reescribir la Ecuación 9 obteniendo la Ecuación 11, la cual tiene como pendiente 1/2, por lo que si se emplea una recta con esa pendiente y se generan rectas paralelas desde la parte superior hacia abajo, se obtendrá el material que maximiza este valor. Para maximizar el índice M_4 se ha de escoger el material más hacia la derecha, puesto que se trataría de una recta de pendiente infinita cuyo valor se maximiza conforme más se aleja del eje.

$$\log K_{1C} = \frac{1}{2} \log M_3 + \frac{1}{2} \log \sigma_f \quad \text{Ecuación 11}$$

Se puede ver en la Figura 1 que los materiales que maximizan los índices son los metales en concreto aleaciones de níquel, cobre, aceros bajos en carbono y aceros inoxidables, como el seleccionado por la normativa ASME anteriormente. Puesto que ha de ser resistente a la corrosión, parece oportuno seleccionar los aceros inoxidables.

Gracias al empleo de esta metodología se puede justificar la selección del material corroborando que la selección de aceros inoxidables aleados con níquel es una decisión apropiada según la función a desarrollar.

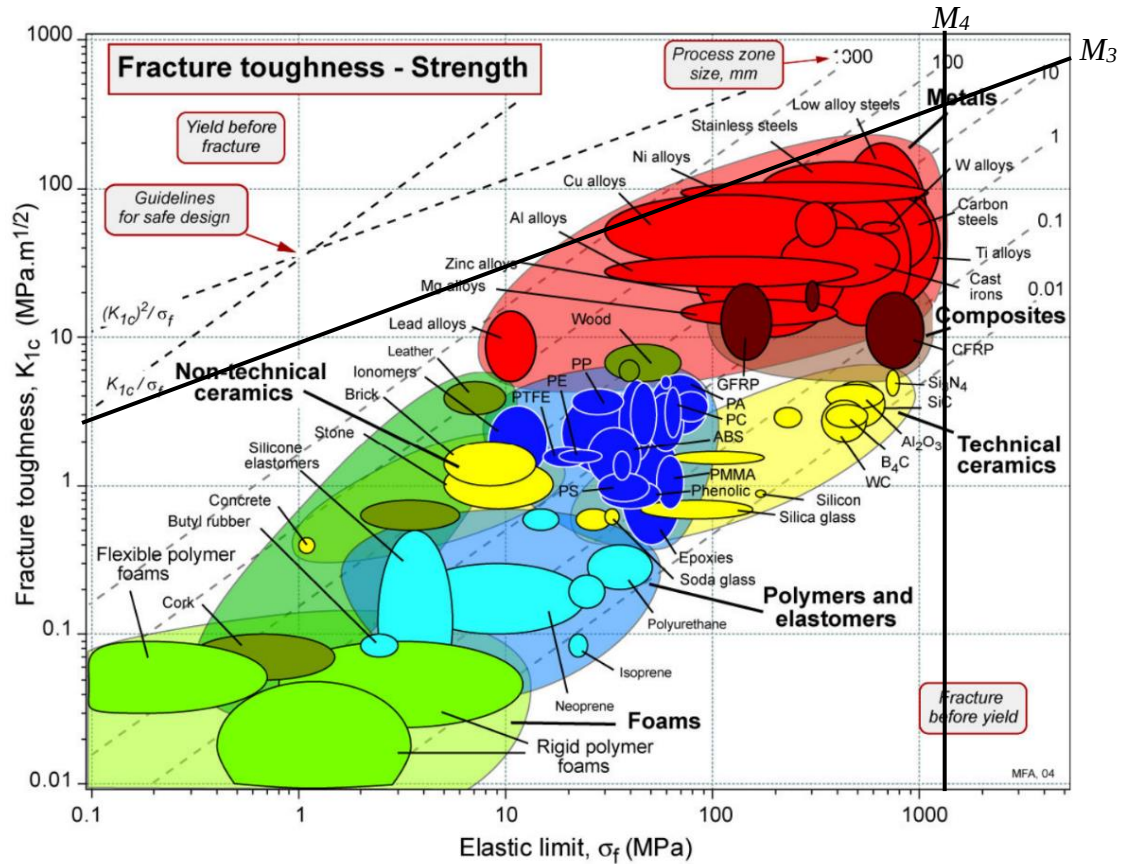


Figura 1. Tenacidad a la fractura frente a módulo de Young (10)

2. DIMENSIONADO DEL ELECTROLIZADOR

Para llevar a cabo el dimensionamiento de un equipo de electrólisis se debe calcular la tensión que recorre cada uno de los conjuntos de electrodos, es decir, la tensión de cada pareja de ánodo y cátodo, de cada celda. Previamente se definirán las propiedades de los materiales a utilizar según los seleccionados anteriormente, las cuales son necesarias para los cálculos.

2.1. Intensidad en las celdas

A partir de los balances de materia calculados previamente, se conoce el caudal necesario de H₂ a producir gracias a lo cual se puede conocer la intensidad total necesaria que requerirá el equipo o los equipos, puesto que si se necesitasen una gran cantidad de celdas sería necesario construir varios equipos, también conocidos como stacks.

A partir de las reacciones que ocurren en el ánodo, Ecuación 1, y el cátodo, Ecuación 2 y Ecuación 3, se pueden realizar balances de materia en ambos electrodos. En el cátodo se formará la molécula de hidrógeno a partir de los iones (H⁺) que se obtienen a partir de la ruptura del agua en el medio alcalino gracias al potencial aplicado. También

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

se utilizarán los electrones provenientes de la reacción en el ánodo, en la que se consiguen a partir del anión (OH^-) junto con oxígeno y agua.

En base a las reacciones anteriormente descritas se plantean los balances para el oxígeno (Ecuación 12) y el agua (Ecuación 13) en el ánodo y los correspondientes para el agua (Ecuación 14) y el hidrógeno (Ecuación 15) en el cátodo. Para el caso de los gases producto, oxígeno e hidrógeno, no se tendrán en cuenta los términos de entrada ($\dot{N}_x^{en}$) ni los de acumulación ($\frac{dN_x}{dt}$), por lo tanto, el caudal de salida ($\dot{N}_x^{sal}$) será igual al caudal generado ($\dot{N}_x^{gen}$) de cada una de las especies. Para el caso del agua, como se ha visto anteriormente existirá generación en el ánodo y consumo en el cátodo, la cantidad de agua de salida será ínfima y la entrada será la suficiente para mantener la concentración del electrolito en el 30%, es decir, reponer el agua consumida en la reacción (2).

$$\frac{dN_{H_2O}}{dt} = \dot{N}_{H_2O}^{en} - \dot{N}_{H_2O}^{sal} + \dot{N}_{H_2O}^{gen} \quad \text{Ecuación 12}$$

$$\frac{dN_{O_2}}{dt} = \dot{N}_{O_2}^{en} - \dot{N}_{O_2}^{sal} + \dot{N}_{O_2}^{gen} \quad \text{Ecuación 13}$$

$$\frac{dN_{H_2O}}{dt} = \dot{N}_{H_2O}^{en} - \dot{N}_{H_2O}^{sal} + \dot{N}_{H_2O}^{cons} \quad \text{Ecuación 14}$$

$$\frac{dN_{H_2}}{dt} = \dot{N}_{H_2}^{en} - \dot{N}_{H_2}^{sal} + \dot{N}_{H_2}^{gen} \quad \text{Ecuación 15}$$

El caudal molar de cada uno de los gases puede calcularse mediante la ley de Faraday en la que el número que multiplica la constante de Faraday (F) depende del número de electrones intercambiados durante el proceso electroquímico (4 en el caso del oxígeno y 2 para el caso del hidrógeno) de forma que el caudal generado de oxígeno en el ánodo se correspondería con la Ecuación 16 y el caudal de hidrógeno producido en el cátodo se calcula con la Ecuación 17 (11). En estas ecuaciones n_c representa el número de celdas necesarias, η_F es la eficiencia de Faraday e I_k es la intensidad de cada una de las celdas. El valor de multiplicar el número de celdas por la intensidad de cada una de las celdas ofrece el valor de intensidad total I_T .

$$\dot{N}_{O_2}^{gen} = \eta_F \frac{n_c I_k}{4 F} \quad \text{Ecuación 16}$$

$$\dot{N}_{H_2}^{gen} = \eta_F \frac{n_c I_k}{2 F} \quad \text{Ecuación 17}$$

El valor de la eficiencia de Faraday (η_F) se obtiene según la Ecuación 18 en la que se tiene en cuenta la intensidad de cada una de las celdas (I_k), el área de cada electrolito (A) y dos constantes de Faraday f_1 y f_2 . Estas dos constantes dependen de los materiales seleccionados y del desgaste del electrolizador. La constante f_1 , con unidades de A^2/m^4 , toma valores en bibliografía que aumentan a medida que se desgasta el equipo, que pueden ir desde 10000 a 20000 A^2/m^4 . Se selecciona para este caso el valor más alto del rango, de forma que se sobredimensiona teniendo en cuenta que estos datos serían

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

experimentales y no se pueden obtener los valores exactos para este trabajo académico. Para el caso de f_2 , que tiene unidades de tanto por 1, el valor varía entre 0,99 a 0,96 en datos bibliográficos para un electrolizador nuevo y uno con un 80% de desgaste, por lo que ya que la variación es muy baja y varía con el tiempo se decidió escoger para el diseño un valor intermedio, en este caso 0,97. (11)

La intensidad en cada una de las celdas puede obtenerse a partir de la superficie del electrodo y de la densidad de corriente que se decida emplear para llevar a cabo la electrólisis según la Ecuación 19.

$$\eta_F = \frac{\left(I_k/A\right)^2}{f_1 + \left(I_k/A\right)^2} f_2$$

Ecuación 18

$$I_k = i \cdot A$$

Ecuación 19

Ya que se han tomado los datos bibliográficos para las constantes de Faraday, se ha comprobado que en el rango de tensiones utilizado en la industria y con áreas grandes, superiores a los 2 m², esta eficiencia toma valores superiores al 95%, por lo que se acepta como correcta al coincidir con las afirmaciones de la bibliografía, puesto que en algunos casos no se tiene en cuenta en los cálculos. (2) (11)

A partir de estas ecuaciones, teniendo en cuenta que se conoce el caudal de hidrógeno necesario a partir del balance de materia, puede calcularse la intensidad de cada una de las celdas y la total necesaria para la producción del caudal requerido. Y una vez obtenida la intensidad se puede calcular el caudal de oxígeno producido en el ánodo mediante su ecuación.

Se pueden ver en la Tabla 1 los valores seleccionados para las variables, junto con los resultados de las ecuaciones anteriores para la eficiencia de Faraday, intensidad total, intensidad de cada celda, el número de celdas totales y caudal de oxígeno. El valor seleccionado para el área se trata de un valor elevado, que se emplea en electrolizadores a nivel industrial. (11) Para el valor de la densidad de corriente se han ido probando varios valores dentro del rango normalmente empleado (100-300 mA/cm²) (11) buscando un valor óptimo de tensión en las celdas, eficiencia y número de celdas que se describirán a continuación.

El valor obtenido para la eficiencia de Faraday, como se ha mencionado anteriormente es próximo a 1. La intensidad total será empleada posteriormente para la obtención de la potencia del equipo, y el número de celdas total es la cantidad de celdas necesarias para la producción del caudal de hidrógeno requerido redondeado al próximo valor superior, las cuales no han de formar parte del mismo stack necesariamente.

Anexo II. Cálculos Justificativos
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 1. Valores de intensidad en las celdas y caudales de gas generados

Variable	Valor	Unidades
$\dot{N}_{H_2}^{gen}$	54,35	mol/s
A	2,5	m ²
i	125	mA/cm ²
I_k	3125	A
f_1	200	mA ² /cm ⁴
f_2	0,97	
η_{Fk}	0,958	
I_T	10.951.191,65	A
n_C	3505	celdas
$\dot{N}_{O_2}^{gen}$	27,18	mol/s

2.2. Presiones parciales en el ánodo y el cátodo

A continuación, se ha de calcular la presión parcial de oxígeno (P_{O_2}) en el ánodo y de hidrógeno (P_{H_2}) en el cátodo, necesarios para la obtención de la tensión de cada celda electrolítica. Para el cálculo de las presiones parciales se puede realizar un balance en base a la composición del gas generado, en este caso resultarían las Ecuación 20 y Ecuación 21 para el oxígeno y el hidrógeno respectivamente. (2)

$$P_{O_2} = \frac{P_{H_2O}}{X_{H_2O}} \cdot (1 - X_{H_2O}) \quad \text{Ecuación 20}$$

$$P_{H_2} = \frac{P_{H_2O}}{X_{H_2O}} \cdot (1 - X_{H_2O}) \quad \text{Ecuación 21}$$

La composición molar de agua (X_{H_2O}), será distinta para el ánodo y para el cátodo. Se ha de suponer que las mezclas de gases (agua y oxígeno en el ánodo y agua e hidrógeno en el cátodo) tienen un comportamiento ideal y la presión está distribuida uniformemente a lo largo de los canales en el electrolizador. Teniendo esto en cuenta y asumiendo geometría unidimensional se puede aplicar la ecuación simplificada de Stefan Maxwell, resultando, tras realizar la integración, en la Ecuación 22. En esta ecuación tiene en cuenta la ratio de porosidad-tortuosidad (ϵ/τ) en el ánodo o cátodo según corresponda, que es el factor más importante para el resultado. En el numerador de la exponencial están la constante de los gases ideales (R en J/mol·K), el valor de la temperatura en la celda (T), la distancia del ánodo o cátodo al separador ($l_{an/cat-s}$) y la densidad de corriente (i),

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

mientras que en el denominador estará el valor de la constante de Faraday, la presión total en el ánodo o cátodo y la difusividad efectiva en el ánodo o cátodo ($D_{ef}^{an/cat}$). La presión total se obtendrá a partir del valor de presión parcial, es decir, requiere del uso de cálculo iterativo a partir de una presión factible, entre 1 y 10 bar usualmente (11). La distancia entre el ánodo (o el cátodo) y el separador es un parámetro de diseño, cuanto mayor sea este valor, mayor será la tensión como se verá en cálculos posteriores, por lo que se ha de utilizar un valor no demasiado elevado pero suficiente. Se han de emplear unidades de forma que la fracción a la que está elevada la exponencial sea adimensional. (2)

$$X_{H_2O} = \frac{\varepsilon_{an/cat}}{\tau_{an/cat}} e^{\frac{R T l_{an/cat-s} \cdot i}{2 F P_{an/cat} D_{ef}^{an/cat}}} \quad \text{Ecuación 22}$$

Como resultado, si se combinan la Ecuación 20 y Ecuación 21 con la Ecuación 22, para el cálculo de las presiones parciales se obtendrá la Ecuación 23 en el caso del oxígeno y la Ecuación 24 en el caso del hidrógeno. Ambas presentan una estructura similar y se diferencia en que los datos de las distintas variables estarán referidos al ánodo o al cátodo respectivamente.

$$P_{O_2} = \left[\frac{1}{\frac{\varepsilon_{an}}{\tau_{an}} e^{\frac{R T l_{an-s} \cdot i}{2 F P_{an} D_{ef}^{an}}} - 1} \right] \cdot P_{H_2O,KOH}^{sat}(T) \quad \text{Ecuación 23}$$

$$P_{H_2} = \left[\frac{1}{\frac{\varepsilon_{cat}}{\tau_{cat}} e^{\frac{R T l_{cat-s} \cdot i}{2 F P_{cat} D_{ef}^{cat}}} - 1} \right] \cdot P_{H_2O,KOH}^{sat}(T) \quad \text{Ecuación 24}$$

Como se ha visto en la Ecuación 20 y la Ecuación 21 es necesario obtener el valor de la presión parcial de agua previamente. Se conoce que los gases tanto del ánodo como del cátodo estarán saturados con vapor de agua, el cual se puede obtener a partir de la temperatura de operación, aunque es necesario tener en cuenta que está presente el electrolito, por lo que se ha de emplear una correlación que ofrezca el valor de la presión de saturación del agua frente a una determinada concentración de electrolito, que para el caso tratado es de un 30% en masa de KOH. Para obtener la presión de saturación del agua en el electrolito seleccionado ($P_{H_2O,KOH}^{sat}$), que será la presión parcial de agua (P_{H_2O}) en la mezcla de gases se ha de emplear la Ecuación 25 en la que m es la molalidad de la disolución de electrolito en moles de soluto por kilogramo de disolvente, que con esta ecuación se puede obtener para un rango de 0 a 18 mol/kg y la temperatura (T) en Kelvin en el rango de 273,15 a 573,15 K; obteniendo como resultado la presión parcial en bar. (12)

Anexo II. Cálculos Justificativos
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

$$\log P_{H_2O,KOH}^{sat} = -0,01508 \cdot m - 0,0016788 \cdot m^2 + 2,25887 \times 10^{-5} \cdot m^3 + (1 - 0,0012062 \cdot m + 5,6024 \times 10^{-4} \cdot m^2 - 7,8228 \times 10^{-6} \cdot m^3) \times (35,4462 - \frac{3343,93}{T} - 10,9 \cdot \log T + 0,0041645 \cdot T)$$

Ecuación 25

Para el cálculo de la presión parcial sin tener en cuenta la presencia del electrolito se puede usar la Ecuación 26 (12) en la que solo se tiene en cuenta la temperatura. Finalmente, a partir de estos dos valores de presión parcial se puede obtener la actividad a (adimensional), que será de utilidad en cálculos posteriores, a través de la Ecuación 27 (13).

$$\log P_{H_2O}^{sat} = (35,4462 - \frac{3343,93}{T} - 10,9 \cdot \log T + 0,0041645 \cdot T)$$

Ecuación 26

$$a = \frac{P_{H_2O,KOH}^{sat}}{P_{H_2O}^{sat}}$$

Ecuación 27

Para aplicar las ecuaciones descritas se emplearán los valores listados en la Tabla 2. El valor de la molalidad se puede calcular a conociendo que la disolución de electrolito es del 30% en masa, dando como resultado 7,64 mol/kg. Se ha escogido la temperatura más elevada del rango ofrecido por la bibliografía (60-80 °C) (2) puesto que cuanto mayor sea la temperatura menor resulta el valor final de tensión por celda. Los valores de porosidad ($\epsilon_{an/cat}$) y tortuosidad ($\tau_{an/cat}$) son los correspondientes a electrodos de níquel o, como será en este caso, electrodos con recubrimiento de níquel. (14) Además se ha seleccionado una distancia del ánodo (o cátodo) al separador (l_{cat-s}) mayor a la empleada en la bibliografía, lo cual producirá mayor sobretensión en algunas partes, debido a razones constructivas como se verá en el diseño mecánico.

Los resultados también aparecen en la Tabla 2 destacando los valores de presión total en el ánodo y el cátodo. Se puede observar que son ligeramente distintos, lo cual es posible debido a la existencia del separador, aunque no debe tratarse de una diferencia muy elevada, como en este caso. También se ha de tener en cuenta que el valor de las presiones parciales de agua se trata de un valor interno del equipo, según la bibliografía y datos comerciales la salida del electrolizador será un hidrógeno muy puro, con contenido de oxígeno menor al 0,2% y de agua inferior a 2 ppm, siendo necesario un equipo de secado de gases para retirar el agua. Se asimilará que las composiciones de agua a la salida del electrolizador será de 0,5% molar para el caso de la corriente de hidrógeno, para sobredimensionar la eliminación de agua debido a su importancia, mientras que para el oxígeno solo se tendrá en cuenta un 0,3% puesto que no es tan relevante para el proceso. (15) Las difusividades necesarias para el cálculo de los parámetros en la Tabla 2 se detallan a continuación.

Anexo II. Cálculos Justificativos
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 2. Presiones y presiones parciales en el ánodo y el cátodo

Variable	Valor	Unidades
m	7,64	mol/kg
T	80	°C
$P_{H_2O,KOH}^{sat}$	0,299	bar
$P_{H_2O}^{sat}$	0,473	bar
a	0,632	
$\epsilon_{an/cat}$	0,4	
$\tau_{an/cat}$	4,25	
$l_{an/cat-s}$	0,004	m
P_{O_2}	2,87	bar
P_{an}	3,17	bar
P_{H_2}	2,88	bar
P_{cat}	3,18	bar

2.2.1. Cálculo de las difusividades

Por último, es necesario obtener el valor de la difusividad de las especies en el ánodo y el cátodo. Primero se obtendrá la difusividad de los gases en el líquido, empleando la Ecuación 28 para el oxígeno ($D_{ef}^{O_2-H_2O}$) y la Ecuación 29 para el hidrógeno ($D_{ef}^{H_2-H_2O}$) en agua (en cm²/s), en las cuales están presentes las masas moleculares del agua (M_{H_2O}), oxígeno (M_{H_2O}) e hidrógeno (M_{H_2}) en g/mol; la temperatura del fluido en el equipo (K); la presión en el ánodo o cátodo respectivamente (bar); el radio molecular medio (σ_{x-y}) del O₂-H₂O o H₂-H₂O (Å); y la integral de colisión de difusión adimensional (Γ_D) para el correspondiente par de especies. (2)

$$D_{ef}^{O_2-H_2O} = 0,00133 \cdot \left(\frac{1}{M_{O_2}} - \frac{1}{M_{H_2O}} \right)^{1/2} \frac{T^{3/2}}{P_{an} \sigma_{O_2-H_2O}^2 \Gamma_D^{O_2-H_2O}} \quad \text{Ecuación 28}$$

$$D_{ef}^{H_2-H_2O} = 0,00133 \cdot \left(\frac{1}{M_{H_2}} - \frac{1}{M_{H_2O}} \right)^{1/2} \frac{T^{3/2}}{P_{cat} \sigma_{H_2-H_2O}^2 \Gamma_D^{H_2-H_2O}} \quad \text{Ecuación 29}$$

Los radios moleculares promedios pueden calcularse a través de la media del radio molecular de las especies implicadas en cada caso, resultando la Ecuación 30, los cuales se pueden obtener de la bibliografía. (2)

$$\sigma_{x-y} = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} \quad \text{Ecuación 30}$$

Para calcular la integral de colisión de difusión adimensional es necesario aplicar la Ecuación 31 referida a cada grupo de especies en la que los valores de τ_{x-y} se obtienen a partir de la Ecuación 32 y a su vez se pueden obtener los valores de las energías de Lennard-Jones (ε_{x-y}) a partir de la Ecuación 33, las cuales dependen de las energías de Lennard-Jones para cada una de las especies (ε_x). A partir de la bibliografía pueden obtenerse valores de ε_x/k , que pueden ser empleadas en la Ecuación 33 para obtener el valor de ε_{x-y}/k necesarios para la Ecuación 32.

$$\Gamma_D = \frac{1,06}{\tau^{0,156}} + \frac{0,193}{e^{0,476 \cdot \tau}} + \frac{1,036}{e^{1,53 \cdot \tau}} + \frac{1,765}{3,894 \cdot \tau} \quad \text{Ecuación 31}$$

$$\tau_{x-y} = \frac{k \cdot T}{\varepsilon_{x-y}} \quad \text{Ecuación 32}$$

$$\varepsilon_{x-y} = \sqrt{\varepsilon_x \cdot \varepsilon_y} \quad \text{Ecuación 33}$$

Una vez obtenidas las difusividades de cada gas en agua se ha de obtener la difusividad del agua en el electrolito, que será la difusividad efectiva de Knudsen (2) y que se calculará mediante la Ecuación 34, ya simplificada, en la que la temperatura está en K; la masa molar está en kg/mol; el radio de poro (r) de electrodo en m ; y la difusividad del agua en el electrolito ($D_{ef}^{H_2O,KOH}$) se obtiene en m²/s. (16)

$$D_{ef}^{H_2O,KOH} = 3,068 \cdot r \sqrt{\frac{T}{M_{H_2O}}} \quad \text{Ecuación 34}$$

Finalmente, para obtener las difusividades en el ánodo y el cátodo se ha de aplicar la Ecuación 35 y Ecuación 36 respectivamente. En las cuales se han de introducir las difusividades en las mismas unidades y se obtendrá la nueva difusividad en las unidades empleadas en las otras 2.

$$\frac{1}{D_{ef}^{an}} = \frac{\varepsilon_{an}}{\tau_{an}} \left(\frac{1}{D_{ef}^{O_2-H_2O}} + \frac{1}{D_{ef}^{H_2O,KOH}} \right) \quad \text{Ecuación 35}$$

$$\frac{1}{D_{ef}^{cat}} = \frac{\varepsilon_{cat}}{\tau_{cat}} \left(\frac{1}{D_{ef}^{H_2-H_2O}} + \frac{1}{D_{ef}^{H_2O,KOH}} \right) \quad \text{Ecuación 36}$$

En la Tabla 3 se recogen los valores necesarios para obtener las difusividades de los gases en agua obtenidos de la bibliografía (2), junto con los parámetros intermedios

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

calculados a partir de estos datos según las ecuaciones anteriores. Además, se recoge también el valor de las difusividades del oxígeno y el hidrógeno en agua para las condiciones de operación, las cuales se ajustan a valores bibliográficos (16) (17).

Tabla 3. Difusividades de los gases en agua

Variable	Valor	Unidades
ε_{O_2}/k	106,7	K
ε_{H_2}/k	59,7	K
ε_{H_2O}/k	809,1	K
$\varepsilon_{O_2-H_2O}/k$	293,8	K
$\varepsilon_{H_2-H_2O}/k$	219,8	K
$\tau_{O_2-H_2O}$	1,2	
$\tau_{H_2-H_2O}$	1,6	
$\Gamma_{D_{H_2-H_2O}}$	1,6810	
$\Gamma_{D_{H_2-H_2O}}$	1,4451	
σ_{O_2}	3,467	Å
σ_{H_2}	2,827	Å
σ_{H_2O}	2,641	Å
$\sigma_{O_2-H_2O}$	3,054	Å
$\sigma_{H_2-H_2O}$	2,734	Å
$D_{ef}^{O_2-H_2O}$	0,0524	cm ² /s
$D_{ef}^{H_2-H_2O}$	0,191	cm ² /s

Para el cálculo de la difusividad efectiva de Knudsen de agua en el electrolito, se recogen en la Tabla 4. El valor del radio de poro para un electrodo de níquel, según la bibliografía, puede variar entre 125 y 750 μm de radio (18); se ha escogido un valor medio entre ambos, aunque debido a que el valor resultante de difusividad es tan elevado comparado con el valor de los gases, este valor será poco importante en comparación. Puesto que se trataba de un valor disparado se ha comparado con la bibliografía (16) (17) y teniendo en cuenta que los valores obtenidos para otros tamaños de poros proporcionalmente más pequeños son más bajos en la misma proporción, se ha tomado como válido este valor. Finalmente, se recogen en la Tabla 4 los valores para las

difusividades en el ánodo y el cátodo obtenidas a partir de las otras difusividades según la Ecuación 35 y la Ecuación 36 respectivamente.

Tabla 4. Difusividades de agua en KOH y de los electrodos

Variable	Valor	Unidades
r	0,0438	cm
$D_{ef}^{H_2O,KOH}$	1878,95	cm ² /s
D_{ef}^{an}	0,556	cm ² /s
D_{ef}^{cat}	2,0297	cm ² /s

2.3. Tensión de cada celda electrolítica

Ya que la ruptura de la molécula de agua por termólisis es desfavorable a temperatura y presión ambientes, es necesario proveer de energía, siendo en este caso el método utilizado la electrólisis, es decir, aplicando una cierta corriente eléctrica. El voltaje termodinámicamente neutro se necesita para mantener la reacción sin añadir energía externa y tiene un valor $V_{tn}=1,48$ V a 25 °C. Normalmente son necesarios sobrevoltajes para contrarrestar las pérdidas producidas en la celda, permitiendo además conseguir ratios de reacción adecuados y proveer de conducción termodinámica lo que favorece la difusividad en los electrodos. (2)

La tensión estándar o reversible de la celda es de $V_{estándar}^0=1,229$ V a 25 °C. Se ha de tener en cuenta que la diferencia existente entre las dos tensiones mencionadas se corresponde a la contribución del cambio total en la energía libre (+237,2 kJ/mol), de forma que el valor mínimo necesario para producir hidrógeno en una celda electrolítica ideal sería el valor de la tensión estándar. (2)

Si se tienen en cuenta estas consideraciones y las posibles pérdidas o fuentes de no idealidad en la celda electrolítica se podría emplear la Ecuación 37 para describir la tensión necesaria en una celda electrolítica. La tensión total de cada celda (V_k) estaría compuesta por la tensión de circuito abierto (V_{OC}) junto con las adiciones de la sobretensión de activación (V_{act}), la sobretensión por concentración o difusividad (V_{con}) y la sobretensión óhmica (V_{ohm}).

$$V_k = V_{OC} + V_{act} + V_{con} + V_{ohm}$$

Ecuación 37

2.3.1. Tensión de circuito abierto

La tensión de circuito abierto se corresponde con la energía para romper la molécula de agua. Esta disminuye con la temperatura debido a la contribución de la energía libre de los gases producidos, pero aumenta a medida que se aumenta la presión en el sistema. Ambas contribuciones aparecen en la Ecuación 38 en la que se describe como obtener el valor de V_{OC} según las condiciones de operación. En el segundo término está presente el cambio de entropía de estado estándar ($\Delta S^0/nF$), cuyo valor viene dado por bibliografía y es de $-9 \cdot 10^{-4}$ J/mol·K, y $a_{H_2O,KOH}$ es la actividad de agua en el electrolito (KOH) que se puede obtener como se vio anteriormente de la Ecuación 27 y cuyo valor se recoge en la Tabla 2. La temperatura de referencia (T_{ref}) se corresponde con la temperatura a la que está definida la tensión estándar o reversible, para este caso sería 25 °C (298,15 K).

$$V_{OC} = V_{estandar}^0 + (T - T_{ref}) \times \frac{\Delta S^0}{nF} + \frac{RT}{2F} \times \left[\ln \frac{P_{H_2} \sqrt{P_{O_2}}}{a_{H_2O,KOH}} \right] \quad \text{Ecuación 38}$$

En base a esta ecuación se puede obtener el valor de tensión de circuito abierto obteniéndose el resultado de la Tabla 5 partiendo de los valores anteriormente citados.

Tabla 5. Tensión de circuito abierto

Variable	Valor	Unidades
$V_{estandar}^0$	1,229	V
T_{ref}	25	°C
$\Delta S^0/nF$	-9,00E-04	J/mol·K
V_{OC}	1,21	V

2.3.2. Sobretenensión de activación

La cinética de reacción es tratada en la sobretensión de activación, la cual proviene del intercambio de cargas entre las especies implicadas en la reacción. Las distintas propiedades de la superficie del electrodo, así como las de la solución electrolítica empleada determinarán la ratio de reacción que tendrá lugar. (2) Si se aplica la teoría del estado de transición, habiendo asumido que la reacción ocurre en una sola etapa, como se ha definido en la Ecuación 1, Ecuación 2 y Ecuación 3, resulta en la ecuación de Butler-Volmer, de forma que las sobretensiones de activación se pueden calcular según la Ecuación 39 aplicando los valores correspondientes para ánodo y cátodo.

$$V_{act}^{an/cat} = \frac{R T}{\alpha_{an/cat} F} \times \left[\ln \frac{i}{i_0^{an/cat}} \right] \quad \text{Ecuación 39}$$

Siendo $\alpha_{an/cat}$ el coeficiente de transferencia de carga referido a cada uno de los electrodos (adimensional), i la densidad de corriente (A/m^2) y $i_0^{an/cat}$ la densidad de intercambio de corriente efectiva para cada electrodo (A/m^2). Se asume que las áreas del cátodo y el ánodo serán iguales, por lo tanto, también lo será la densidad de corriente. Ya que se emplea el mismo material en ambos electrodos también lo serán las demás propiedades exceptuando el coeficiente de transferencia de carga, que no depende del material exclusivamene. La densidad de intercambio de corriente efectiva dependerá de la temperatura y de la rugosidad del electrodo (γ_M), la cual se define como el área efectiva del electrodo dividida por su área geométrica. El valor de $i_0^{an/cat}$ puede obtenerse a partir de la Ecuación 40, en la que el valor de la energía libre (ΔG_C) es el mencionado en el apartado Tensión de cada celda electrolítica (J/mol), el valor de la densidad de intercambio de corriente efectiva de referencia ($i_{0,ref}^{an/cat}$) viene dado por bibliografía a una cierta temperatura de referencia (T_{ref}) y dependen de la reacción que suceda y del material empleado en el electrodo, reportándose en bibliografía que para la reducción del oxígeno los valores se encuentran entre 10^{-7} y 10^{-12} , mientras que para la oxidación del hidrógeno entre 10^{-1} y 10^{-4} . (2)

$$i_0^{an/cat} = \gamma_M e^{-\frac{\Delta G_C}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right)} i_{0,ref}^{an/cat} \quad \text{Ecuación 40}$$

Además, es necesario tener en cuenta que las burbujas generadas en la reacción aíslan la superficie de los electrodos de las especies reactivas, dejándola inactivada. Debido a esto es necesario modificar el área de forma que se añade una nueva contribución, de forma que resulta en la Ecuación 41, en la que se ha de tener en cuenta la fracción de superficie del electrodo cubierta de burbujas ($\Theta_{an/cat}$), la cual se puede calcular mediante la Ecuación 42. Puesto que la obtención de la fracción cubierta de burbujas se trata de un problema complejo, que depende de diversas propiedades físicas, como son la rugosidad del electrodo, la tensión superficial del electrolito o la circulación de fluido en el circuito, se ha desarrollado una expresión empírica para obtenerla de forma sencilla, dependiendo tan solo de la temperatura, densidad de corriente y la presión. También es importante destacar que i_{lim} es la densidad de corriente límite que existiría cuando un 100% del área estuviese cubierta de burbujas y que tiene un valor típico de 300 kA/m^2 según la bibliografía. (2)

$$V_{act}^{an/cat} = \frac{R T}{\alpha_{an/cat} F} \times \left[\ln \frac{i}{i_0^{an/cat} (1 - \Theta_{an/cat})} \right] \quad \text{Ecuación 41}$$

$$\Theta_{an/cat} = \left[-97,25 + 182 \frac{T}{T_{ref}} - 84 \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^2 \right] \times \left(\frac{i}{i_{lim}} \right)^{0,3} \times \frac{P}{P - P_{H_2O,KOH}^{sat}} \quad \text{Ecuación 42}$$

Se ha de obtener el valor de la tensión de activación tanto para el ánodo como para el cátodo y la suma de ambas será la sobretensión de activación para las condiciones de operación.

En la Tabla 6 se recogen los valores de las variables necesarias para el cálculo de la sobretensión de activación descritas anteriormente en las ecuaciones. El valor de rugosidad del electrodo se trata de un valor bibliográfico para electrodo de níquel (2), y los valores de densidad de intercambio de corriente efectiva de referencia también son ofrecidas también por la bibliografía (2) para electrodos de níquel según su posición en el ánodo o el cátodo y están dentro del rango anteriormente descrito.

Según se afirma en la bibliografía, el coeficiente de transferencia de carga no puede ser estimado con certeza, por lo que se escoge el valor empleado en el artículo para electrodos de níquel. (2)

Tabla 6. Variables y resultados de la sobretensión de activación

Variable	Valor	Unidades
γ_M	1,5	
ΔG_C	52,18	kJ/mol
$i_{0,ref}^{an}$	$1 \cdot 10^{-9}$	A/cm ²
$i_{0,ref}^{cat}$	$1 \cdot 10^{-3}$	A/cm ²
i_0^{an}	$3,98 \cdot 10^{-8}$	A/cm ²
i_0^{cat}	$3,98 \cdot 10^{-2}$	A/cm ²
α_{an}	0,85	
α_{cat}	1,65	
i_{lim}	30	A/cm ²
Θ_{an}	0,1011	
Θ_{cat}	0,1011	
$V_{act,e}^{an}$	0,276	V
$V_{act,\theta}^{an}$	0,00197	V
$V_{act,e}^{cat}$	0,041	V
$V_{act,\theta}^{cat}$	0,00382	V
V_{act}	0,323	V

Como se puede ver en las últimas filas de la Tabla 6 se recogen los valores de las sobretensiones subdivididas en la sección con burbujas ($V_{act,\theta}^{an/cat}$) y la sección libre de burbujas ($V_{act,e}^{an/cat}$) para poder comprobar la importancia relativa, además del valor total de la sobretensión de activación. Se puede observar que en ambos casos la aportación de la zona con burbujas es muy baja, pese a que la fracción cubierta de burbujas es del 10% en ambos casos, y además la aportación más relevante entre los dos electrodos es la del ánodo.

2.3.3. Sobretensión por concentración o por difusión

La sobretensión por concentración o por difusión se relaciona con la reposición de los reactivos en las regiones más próximas al electrodo, es decir, en el caso del ánodo, a medida que se consumen los aniones OH⁻ para producir los productos su concentración se verá reducida hasta que se repongan las materias primas por difusión en el electrolito, de forma similar ocurre en el cátodo con las moléculas de agua debido a la generación de los gases. Estas variaciones son muy pequeñas, por lo que su efecto realmente es bajo siempre que exista un flujo de agua y energía suficientes para mantener en funcionamiento el equipo. (13)

En base a lo anteriormente descrito podría escribirse la Ecuación 43 en la que dentro del término logarítmico está presente la ratio entre la concentración real en la celda ($C_{el}^{an/cat}$) entre el valor ideal de referencia ($C_0^{an/cat}$). Puesto que es difícil obtener unos valores de referencia, teniendo en cuenta que para producir los gases de forma que se obtuviera una concentración ideal implicaría emplear una densidad de corriente muy elevada, se puede emplear la Ecuación 44 que relaciona linealmente la concentración real y la ideal con la densidad de corriente empleada y la densidad de corriente límite que también se empleó en el apartado anterior. De esta forma, combinando las dos ecuaciones, se obtiene la Ecuación 45 en la que la constante de los gases (R) ideales se encuentra en J/mol·K, la temperatura (T) en K y la constante de Faraday (F) en C/mol multiplicada por el valor de electrones intercambiados para cada caso (4 para el O₂ y 2 para el H₂). (13)

$$V_{con} = \frac{R T}{4 F} \cdot \ln \frac{C_{O_2,el}^{an}}{C_{O_2,0}^{an}} + \frac{R T}{2 F} \cdot \ln \frac{C_{H_2,el}^{cat}}{C_{H_2,0}^{cat}} \quad \text{Ecuación 43}$$

$$C_{el}^{an/cat} = C_0^{an/cat} \cdot \left(1 - \frac{i}{i_{lim}}\right) \quad \text{Ecuación 44}$$

$$V_{con} = \frac{R T}{4 F} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_{lim}}\right) + \frac{R T}{2 F} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{i_{lim}}\right) \quad \text{Ecuación 45}$$

Aunque es importante aclarar que eso sería una aproximación, también hay que tener en cuenta que la importancia relativa de la sobretensión por concentración es baja debido a que su aportación es baja, de modo que, aunque el valor estuviese ligeramente desviado, no se incurriría en grandes divergencias con los valores reales de forma global.

El resultado de la Ecuación 45, subdividido para el ánodo y el cátodo, además del valor total, queda recogido en la Tabla 7. Como se ha mencionado anteriormente, el valor de esta sobretensión es muy bajo.

Tabla 7. Sobretensión por concentración

Variable	Valor	Unidades
V_{con}^{an}	$6,35 \cdot 10^{-5}$	V
V_{con}^{cat}	$3,18 \cdot 10^{-5}$	V
V_{con}	$9,53 \cdot 10^{-5}$	V

2.3.4. Sobretensión óhmica

Los distintos elementos del equipo pueden generar una cierta caída de tensión debida a la resistividad intrínseca de los materiales, siendo los más relevantes los electrodos, el electrolito y el separador. Teniendo en cuenta que se trata de una sobretensión óhmica y que depende de la resistencia de los materiales, a partir de la ley de Ohm puede obtenerse el valor de V_{ohm} como se ven en la Ecuación 46, en la que se tienen en cuenta la resistencia de los electrodos (R_e), la resistencia del electrolito (R_{el}) y la resistencia del separador (R_s), todas medidas en Ω para que junto con la intensidad en cada celda (I_k) en A el resultado sea una tensión en V.

$$V_{ohm} = I_k \cdot (R_e + R_{el} + R_s) \quad \text{Ecuación 46}$$

La resistencia de un material puede calcularse según sus propiedades y su forma geométrica según la Ecuación 47, en la cual la corriente considerada ha de fluir en la dirección de la longitud (l) a través de una sección (A) determinada de un material con una resistividad (ρ), la cual es la inversa de la conductividad del material (σ). Se ha de tener en cuenta que esta ecuación se cumple para casos en los que la geometría sea simple, una barra larga ($l \gg \sqrt{A}$) o una placa fina ($l \ll \sqrt{A}$), siendo ese último el caso a tratar a continuación.

$$R = \rho \cdot \frac{l}{A} \quad \text{Ecuación 47}$$

Tanto en materiales sólidos, como en electrolitos líquidos es correcto representar al conductor como una resistividad que tan solo varía con la temperatura; puesto que, aunque existen burbujas de gas en el medio, esto solo modificaría la geometría del medio, pero no su resistividad. De forma usual se suele emplear una resistencia efectiva para poder cuantificar los efectos de las inhomogeneidades creadas por las zonas de burbujas en el seno de electrolito en las proximidades de los electrodos y por la porosidad de los electrodos y del separador. (2)

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Para el caso de los electrodos, puesto que el cátodo y el ánodo serán del mismo material y además se encontrarán operando a la misma temperatura se puede calcular el correspondiente a uno de los dos y duplicar la aportación de este. Primero se ha de conocer la resistividad efectiva ($\rho_{ef}^{an/cat}$), que dependerá de la resistividad intrínseca del material ($\rho_0^{an/cat}$) a una temperatura de referencia, ambas en $\Omega \cdot m$, y de la porosidad del mismo ($\epsilon_{an/cat}$); según se observa en la Ecuación 48. (2)

$$\rho_{ef}^{an/cat} = \frac{\rho_0^{an/cat}}{(1 - \epsilon_{an/cat})^{3/2}} \quad \text{Ecuación 48}$$

$$R_{e,an/cat} = \frac{\rho_0^{an/cat}}{(1 - \epsilon_{an/cat})^{3/2}} \cdot \frac{\delta_{an/cat}}{A} \cdot [1 + \kappa_{an/cat} \cdot (T - T_{ref})] \quad \text{Ecuación 49}$$

En el electrolito está presente el problema de la sección con burbujas, de forma que existirá una sección libre de burbujas con una longitud de $l_{an/cat-s}$ - $\beta_{an/cat}$ en la que el primer término es la distancia entre el ánodo y el separador anteriormente citada y el segundo es la longitud con burbujas, el cual se corresponderá con la sección con burbujas. En cada una de las secciones habrá que diferenciar la resistividad del medio, denotando la resistividad en la sección libre de burbujas como $\rho_{KOH-libre}$ y la de la sección con burbujas como $\rho_{KOH-bur}$.

Para obtener la conductividad del electrolito existe una ecuación que relaciona la concentración molar o molaridad (M en mol/m^3) y la temperatura con este parámetro y esta sería la Ecuación 50. Con de esta conductividad se puede obtener la conductividad en la sección con burbujas a partir de la relación descrita en la Ecuación 51 en la cual se emplea un parámetro ($\epsilon'_{an/cat}$) que depende de la fracción de superficie del electrodo cubierta de burbujas ($\Theta_{an/cat}$) según se ve en la Ecuación 52 (14). Teniendo en cuenta que la conductividad es la inversa de la resistividad puede aplicarse la Ecuación 53 con los valores obtenidos aplicados para el ánodo y para el cátodo sumándolos posteriormente. Se afirma que el valor de $\beta_{an/cat}$ oscila entre 0,4 y 0,6 mm según la bibliografía, siendo este un valor elevado teniendo en cuenta la separación usual entre un electrodo y el separador. (2)

$$\sigma_{KOH-libre} = -2,04M - 0,0028M^2 + 0,005332MT + 207,2 \frac{M}{T} + 0,001043M^3 - 0,0000003M^2T^2 \quad \text{Ecuación 50}$$

Anexo II. Cálculos Justificativos
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

$$\frac{\sigma_{KOH-bur}^{an/cat}}{\sigma_{KOH-libre}} = (1 - \varepsilon'_{an/cat})^{3/2} \quad \text{Ecuación 51}$$

$$\varepsilon'_{an/cat} = \frac{2}{3} \Theta_{an/cat} \quad \text{Ecuación 52}$$

$$R_{el,an/cat} = \rho_{KOH-libre} \cdot \frac{l_{an/cat-s} - \beta_{an/cat}}{A} + \rho_{KOH-bur}^{an/cat} \cdot \frac{\beta_{an/cat}}{A} \quad \text{Ecuación 53}$$

Finalmente, el último elemento del cual se calcula su resistividad será el separador, cuya función es permitir la conducción iónica evitando el mezclado de los gases, lo cual se consigue gracias a su estructura porosa (cuantificada mediante la porosidad ε_s) y a una elevada ratio entre su longitud efectiva y su espesor real (δ_s), cuantificado mediante la tortuosidad (τ_s). También es un parámetro importante la humectación del separador (ω_s) que cuantifica el volumen de electrolito absorbido respecto del volumen total. Si se asume una distribución uniforme de la corriente a lo largo del área del separador, que usualmente es igual al área de los electrodos, se puede calcular su resistencia según la Ecuación 54. (2)

$$R_s = \rho_{KOH-libre} \cdot \frac{\tau_s^2 \delta_s}{\omega_s \varepsilon_s A} \quad \text{Ecuación 54}$$

En la Tabla 8 se recogen los valores de las variables necesarios para el cálculo de la resistencia ofrecida por los electrodos. La resistividad intrínseca (19) y el coeficiente térmico de resistividad (20) se escogen para el acero inoxidable puesto que, aunque la parte en la que se produce la reacción es de níquel, el resto de los electrodos será de acero inoxidable. El espesor del electrodo se ha seleccionado a partir de un valor de bibliografía, tomado como referencia comercial. (2)

Tabla 8. Resistencia de los electrodos

Variable	Valor	Unidades
$\rho_0^{an/cat}$	$7,2 \cdot 10^{-7}$	$\Omega \cdot m$
T_{ref}	20	$^{\circ}C$
$\kappa_{an/cat}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$^{\circ}C^{-1}$
$\delta_{an/cat}$	0,2	cm
$R_{cat/an}$	$1,31 \cdot 10^{-9}$	Ω
R_e	$2,63 \cdot 10^{-9}$	Ω

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

En la Tabla 9 se recogen los resultados de conductividades, resistividades y demás parámetros necesarios calculados para obtener el valor de la resistencia ofrecida por el electrolito, según las ecuaciones anteriores. El valor de la molaridad se calcula para una disolución 30% en masa de KOH, el electrolito.

Tabla 9. Resistencia del electrolito

Variable	Valor	Unidades
M	7638,66	mol/m ³
$\sigma_{KOH-libre}$	46.253.087.114	S/m
$\rho_{KOH-libre}$	$2,16 \cdot 10^{-11}$	$\Omega \cdot m$
ϵ_{cat}'	0,0674	
$\sigma_{KOH-bur}^{cat}$	41.656.090.207	S/m
$\rho_{KOH-bur}^{cat}$	$2,40 \cdot 10^{-11}$	$\Omega \cdot m$
ϵ_{an}'	0,0674	
$\sigma_{KOH-bur}^{an}$	41.654.667.258	S/m
$\rho_{KOH-bur}^{an}$	$2,40 \cdot 10^{-11}$	$\Omega \cdot m$
$\beta_{an/cat}$	0,0004	m
$R_{el,cat}$	$3,50 \cdot 10^{-14}$	Ω
$R_{el,an}$	$3,50 \cdot 10^{-14}$	Ω
R_{el}	$6,995 \cdot 10^{-14}$	Ω

En la Tabla 10 se detallan las propiedades del separador, las cuales han sido estudiadas en bibliografía (2) junto con su espesor, empleando el mismo de la bibliografía asumiendo que este sería un valor comercial.

Tabla 10. Resistencia del separador

Variable	Valor	Unidades
δ_s	0,0005	m
ϵ_s	0,42	
τ_s	2,18	
ω_s	0,8	
R_s	$6,12 \cdot 10^{-14}$	Ω

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Finalmente, con el valor de todas las resistencias y la intensidad de cada celda se puede obtener el valor de la sobretensión óhmica que se recoge en la Tabla 11.

Tabla 11. Sobretensión óhmica

Variable	Valor	Unidades
δ_s	0,0005	A
R_e	$2,63 \cdot 10^{-9}$	Ω
R_{el}	$6,995 \cdot 10^{-14}$	Ω
R_s	$6,12 \cdot 10^{-14}$	Ω
V_{ohm}	$8,21 \cdot 10^{-6}$	V

2.3.5. Resultado

Por último, una vez calculadas todas las sobretensiones puede calcularse la tensión de cada celda obteniendo el resultado recogido en la Tabla 12. Se puede observar que las sobretensiones por concentración y óhmica tienen un valor muy bajo comparado con el valor final, de forma que tan solo son destacables la tensión de circuito abierto y la sobretensión de activación. Esto coincide con la bibliografía, de igual forma también coinciden los valores obtenidos con los valores esperados para las condiciones empleadas. Se puede apreciar en la Figura 2, que se trata de un estudio sobre la influencia de la densidad de la corriente sobre la importancia de las distintas sobretensiones, que las distintas sobretensiones tienen una magnitud relativa similar y aunque el valor no es el mismo esto podría deberse a los materiales de construcción y a las condiciones de operación, ya que los valores finales se encuentran próximos.

Tabla 12. Tensión de cada celda

Variable	Valor	Unidades
V_{OC}	1,21	V
V_{act}	0,323	V
V_{con}	$9,53 \cdot 10^{-5}$	V
V_{ohm}	$8,21 \cdot 10^{-6}$	V
V_k	1,53	V

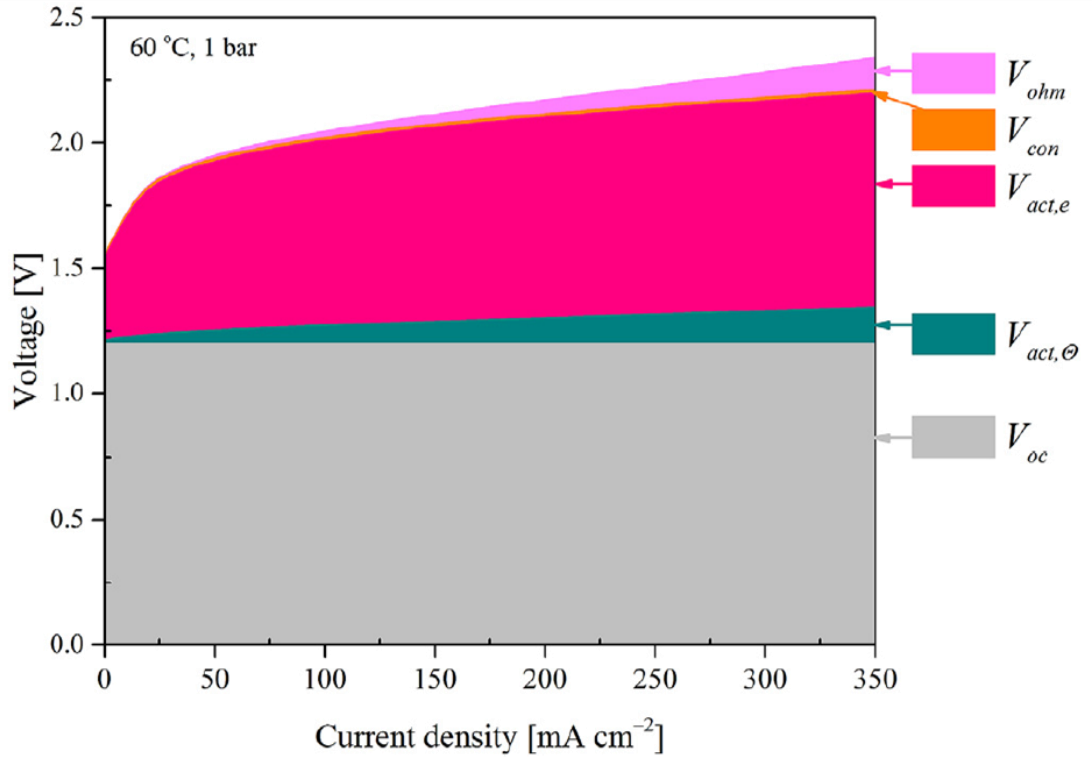


Figura 2. Contribuciones al sobrepotencial detallando las distintas fuentes de sobretensión. Fuente: Modelling and simulation of an alkaline electrolyser cell. (2)

2.4. Potencia total del equipo y número de stacks necesarios

Una vez obtenido el valor de la tensión de cada celda electrolítica se puede calcular el número de celdas por cada stack ($n_{C,stack}$). Para realizar este cálculo se ha de tener en cuenta que el valor de tensión trifásica (V_T) en España es de 400 V de modo que cada equipo puede someterse como máximo a esa diferencia de potencial, por lo tanto, siguiendo la Ecuación 55 puede obtenerse el número de celdas electrolíticas por cada stack, redondeando al número entero inmediatamente inferior. Una vez obtenido el número de celdas por stack, se puede obtener el número de stacks (n_{stack}) dividiendo el número de celdas totales entre el número de celdas por cada stack.

$$n_{C,stack} = \frac{V_T}{V_k} \quad \text{Ecuación 55}$$

$$n_{stack} = \frac{n_C}{n_{C,stack}} \quad \text{Ecuación 56}$$

Por último, para conocer la potencia requerida por el equipo puede obtenerse a través de la Ecuación 57 en la que se relaciona la tensión trifásica en V, la intensidad requerida (I_T) en A para dar un valor de potencia (P_T) en W. (21)

$$P_T = V_T \cdot I_T$$

Ecuación 57

En base a estas ecuaciones pueden obtenerse los valores recogidos en la Tabla 13 en la que también se recoge el valor de la potencia de cada stack (P_k) que se obtendría de dividir la potencia total entre el número de stacks.

Tabla 13. Potencia y número de stacks

Variable	Valor	Unidades
$n_{C,stack}$	260	Celdas
n_{stack}	14	Staks
P_T	17,5	MW
P_k	1250	kW

Por último, si se aplica al flujo molar la ecuación de los gases ideales para condiciones normales, puede obtenerse el valor del flujo volumétrico normal de hidrógeno producido, que resulta ser de 4382,64 Nm³/h y con este valor junto al valor de potencia total se puede obtener la cantidad de energía consumida para producir el gas, el cual suele ser un valor usual para comparar estos equipos, obteniéndose una razón de 4 kWh/Nm³ de hidrógeno producido, dato muy similar a algunos electrolizadores industriales como el de la empresa Kern S&D (15) con un valor de 4,3 kWh/Nm³.

3. DISEÑO MECÁNICO

Una vez están definidos los parámetros más relevantes del electrolizador, es necesario diseñar la estructura que mantendrá unidas las celdas electrolíticas y aisladas, así como los agujeros de los electrodos y las juntas por las que fluirán los fluidos, el agua, que se trata de la materia prima, por un lado y los gases, que son los productos, cada uno por su respectivo orificio.

3.1. Orificios para el flujo de fluidos

Lo primero será dimensionar los orificios por los que fluirá el oxígeno, el hidrógeno y el agua. Para ello se aplicará la metodología del diámetro óptimo de una conducción (22) calculándolo siempre para la velocidad de flujo máxima, teniendo en cuenta que aunque en cada celda se formará una cantidad menor de gas, todo el gas producido fluirá por el mismo orificio que se tratará como una conducción, pese a que no lo será exactamente puesto que habrá secciones con una sección de paso superior a la de la conducción. Esto se tratará como una aproximación para obtener un valor para los

orificios que sea lógico respecto al flujo de gas y una aproximación ligera de la caída de presión en el equipo

Partiendo del balance de energía mecánica para cualquier fluido (Ecuación 58) en el que están presentes los términos de energía cinética, energía potencial, el trabajo por las fuerzas de presión, el trabajo y la fricción en ese orden. Puesto que no habrá diferencias de altura dentro del equipo, no existirá un trabajo realizado por algún equipo externo ni se producirá un cambio en la velocidad, ya que el diámetro de la conducción será el mismo, se puede simplificar tan solo a los términos de trabajo de las fuerzas de presión y de fricción.

Por lo tanto, para el flujo de un fluido incompresible resultará la Ecuación 59 tras haber extendido los dos términos ya mencionados. Siendo P_1 y P_2 las presiones interna y de salida del equipo en Pa, ρ la densidad del líquido (para el agua 1000 kg/m³), v la velocidad del fluido por la conducción (m/s), L la longitud de la conducción en m, D el diámetro de la conducción en m y f el factor de fricción.

Para el caso de un fluido compresible, como serán los gases producidos, se ha de tener en cuenta la simplificación de que se tratará de gases ideales, puesto que se tratarán de gases casi puros a una temperatura no demasiado elevada, resultando la Ecuación 60. En la que G es la velocidad másica en kg/m²·s, M es la masa molecular en g/mol, R la constante de los gases ideales (8.314 J/mol·K) y α tomará valor 1 siempre el flujo sea turbulento.

$$\Delta \frac{v^2}{2\alpha} + \Delta gz + \int \frac{dP}{\rho} + W - \sum F = 0 \quad \text{Ecuación 58}$$

$$\frac{P_1 - P_2}{\rho} - f \frac{v^2 L}{2 D} = 0 \quad \text{Ecuación 59}$$

$$\frac{G^2}{\alpha} \left(\ln \frac{P_2}{P_1} \right) \frac{M}{2 R T} (P_1^2 - P_2^2) - f \frac{G^2 L}{2 D} = 0 \quad \text{Ecuación 60}$$

El valor del coeficiente de fricción se puede obtener a partir de la Ecuación 61 en la que están presente la rugosidad (ϵ) de las paredes de la conducción en m y el Reynolds (Re) el cual se calcula mediante la Ecuación 62. El valor de rugosidad, puesto que no se trata de una conducción y el fluido transcurrirá a través de distintos materiales, acero y las juntas, se ha decidido tomar como un valor medio para estos dos materiales, destacando que el resultado no se ve afectado por usar uno, otro o la media, pero parece más correcto tener en cuenta la diversidad de materiales.

En la Ecuación 62 si se trata de un fluido incompresible se emplea la ratio de densidad, velocidad y diámetro entre la viscosidad del fluido; mientras que si se trata de un fluido compresible se emplea la velocidad másica, la cual se calcula como el producto entre la densidad y la velocidad a una determinada temperatura, en este caso obteniendo

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

la densidad a partir de la ley de los gases ideales. Si el Reynolds es superior a 8000 el régimen de fluido será turbulento, lo cual es necesario para aplicar la simplificación de α . Por último, ya que partiremos del valor del caudal (Q en kg/s), este se puede calcular según la Ecuación 63 ya sea para flujo incompresible o compresible respectivamente.

$$f = \frac{0,25}{\left[\log \left(\frac{\varepsilon}{3,7 D} + \frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right]^2} \quad \text{Ecuación 61}$$

$$Re = \frac{\rho v D}{\eta} = \frac{G D}{\eta} \quad \text{Ecuación 62}$$

$$Q = \rho \cdot v \cdot A = G \cdot A \quad \text{Ecuación 63}$$

Para aplicar estas ecuaciones se tendrán en cuenta las recomendaciones de la bibliografía a la hora de calcular los diámetros óptimos, recogidas en la Tabla 14. Como se ha mencionado anteriormente se seleccionará el valor más elevado de velocidad a la hora de realizar el cálculo para tratar de mantener en todo momento flujo turbulento aunque el caudal pueda ser inferior.

Tabla 14. Recomendaciones para el diseño óptimo de conducciones. (22)

Fluido	Velocidad (m/s)	ΔP (kPa/m)
Líquido	1-3	0,5
Gases y vapores	15-30	0,02% de la presión de la línea

En base a estas consideraciones se pueden obtener los resultados para cada uno de los fluidos. Primero obteniendo el diámetro de orificio necesario para el flujo del caudal correspondiente y posteriormente comprobando que la caída de presión está en valores aceptables. El valor mínimo para la presión de salida se puede obtener a partir de la longitud del equipo y de la caída de presión recomendada, teniendo en cuenta que la longitud de la mitad de los stacks, que se calculará en próximos apartados, es de 20 m. Los valores de viscosidad a la presión y temperaturas de operación fueron obtenidos a partir del simulador de procesos Aspen HYSYS. (23)

En la Tabla 15 se pueden observar los resultados para una velocidad de H_2 de 30 m/s existiendo una caída de presión inferior a la óptima, por lo que se acepta el valor obtenido para el diámetro y la presión de salida.

Anexo II. Cálculos Justificativos
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 15. Diámetro óptimo para el H_2

Variable	Valor	Unidades
Q	0,1087	kg/s
A	0,0166	m ²
D	0,145	m
P_1	317.651,72	Pa
$P_{2,\text{óptimo}}$	316.381,21	Pa
ρ	0,218	g/l = kg/m ³
G	6,55	kg/m ² ·s
η	$8,3969 \cdot 10^{-6}$	Pa · s
Re	113.360,65	
ε	0,00002315	m
f	0,0184	
P_2	317.651,48	Pa

En la Tabla 16 se pueden observar los resultados para una velocidad de O_2 de 30 m/s existiendo una caída de presión inferior a la óptima, por lo que se acepta el valor obtenido para el diámetro y la presión de salida.

Tabla 16. Diámetro óptimo para el O_2

Variable	Valor	Unidades
Q	0,870	kg/s
A	0,00839	m ²
D	0,103	m
P_1	316.692,89	Pa
$P_{2,\text{óptimo}}$	315.426,21	Pa
ρ	3,45	g/l = kg/m ³
G	103,61	kg/m ² ·s
η	$2,40 \cdot 10^{-5}$	Pa · s
Re	446.267,92	
ε	0,00002315	m
f	0,0159	
P_2	316.688,12	Pa

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Puesto que el diámetro para los dos gases es muy similar, se puede utilizar el mayor diámetro para ambas perforaciones de la placa, de forma que se tomará como diámetro de los orificios de gas el obtenido en la Tabla 15.

Finalmente, en el caso del agua para obtener un valor óptimo de caída de presión se ha tenido que bajar la velocidad a 1 m/s de forma que se obtienen los resultados de la Tabla 17, el cual ofrece un valor de diámetro de orificio pequeño y que será incorporado en el electrodo en la sección bañada por el electrolito.

Tabla 17. Diámetro óptimo para el H₂O

Variable	Valor	Unidades
Q	0,979	kg/s
v	1	m/s
A	0,000979	m ²
D	0,0353	m
P_1	317.172,31	Pa
$P_{2,\text{óptimo}}$	307.040,51	Pa
ρ	1000	g/l = kg/m ³
η	$3,50 \cdot 10^{-5}$	Pa · s
Re	100.881,00	
ε	0,00002315	m
f	0,0210	
P_2	311.213,56	Pa

3.1.1. Diámetro de las celdas

Para continuar con el diseño mecánico del equipo se ha de establecer un diámetro de celda, para ello, se tendrá en cuenta que el área mínima debe ser suficiente para albergar el área del electrodo, los orificios de salida del gas y el espesor de la junta. A través de aproximaciones mediante cálculos trigonométricos, partiendo de que $\frac{3}{4}$ partes del área se destinarán al área de electrodo, que son 2,5 m², se ha obtenido que el diámetro de las celdas será de 2 m. De esta forma el espacio es suficientemente grande como para albergar al electrodo y a los orificios de entrada y salida sin comprometer el área de cada uno y sin tener superficie sin ninguna utilidad.

3.2. Dimensionado de los pernos

A continuación, se ha de diseñar el diámetro de los pernos y el número máximo posible a colocar en el equipo. Para su diseño se van a asimilar los pernos como barras cilíndricas largas sometidas a esfuerzos de tracción, puesto que los pernos se emplearán para mantener las juntas comprimidas y para mantener la consistencia del equipo.

Puesto que su tarea más importante será la de mantener las juntas comprimidas y los fabricantes de juntas (24) recomiendan un par de apriete (T) de 100 N·m para este fin, se calculará a partir del par de apriete el diámetro mínimo del perno de acero a emplear. Debido a que es muy importante que las celdas electrolíticas sean estancas se sobredimensionará el par de apriete un 10%. Para obtener la fuerza a la que estará sometido un perno según el par de apriete se ha de emplear la Ecuación 64 en la cual d será el diámetro del perno en m, F la fuerza de precarga en N y k es un coeficiente que para aceros tiene un valor de 0,2 según la bibliografía. (25)

Con el valor de la fuerza aplicada se puede calcular a que tensión estaría sometido un perno bajo esa fuerza y esta ha de ser menor que su límite elástico (L_e) según la Ecuación 65. Los resultados a estas ecuaciones se recogen en la Tabla 18. El valor del límite de elasticidad es el valor recomendado por la norma ASME BPVC Sec. II. (9)

$$T = k \cdot F \cdot d \quad \text{Ecuación 64}$$

$$\sigma = \frac{F}{A} = \frac{F}{\pi \frac{d^2}{4}} \quad \text{Ecuación 65}$$

Tabla 18. Diámetro mínimo de los pernos

Variable	Valor	Unidades
T	110	N·m
F	48.493,72	N
L_e	480.000.000	N/m ²
d_{min}	0,0113	m

El diámetro obtenido no es un valor estandarizado por lo que se ha de emplear el valor normalizado superior, en este caso puesto que el inmediatamente superior es 12 mm se decide aumentar hasta el siguiente valor normalizado, 14 mm o M14, como margen de seguridad debido a posibles aumentos de presión en el equipo. Los valores recogidos por la normativa TEMA (26) para el tamaño de perno seleccionado se recogen en la Tabla 19, siendo B el espaciado recomendado entre centros de los pernos, R_h la distancia del centro del perno a la junta y E la distancia del centro del perno al exterior de la placa.

Anexo II. Cálculos Justificativos

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 19. Dimensiones recomendadas por la normativa TEMA para pernos M14 (26)

Variable	Valor	Unidades
B	35,6	mm
R_h	22,36	mm
E	16,9	mm
d	14	mm

También se puede obtener el número máximo de pernos, teniendo en cuenta la distancia entre centros y la longitud de una circunferencia del diámetro anteriormente descrito (2 m), y aunque no será una cantidad exacta puesto que la longitud en la posición donde se encontrará será ligeramente mayor. A partir de la Ecuación 66 se puede obtener que el número máximo de pernos es 176.

$$N^{\circ} \text{ máx. de pernos} = \frac{\pi \cdot D}{B} \quad \text{Ecuación 66}$$

3.3. Dimensiones de la junta

La junta, cuya función principal es separar los electrodos entre sí, del separador y de las placas fijas asegurando la estanqueidad de las zonas en las que se encuentra el electrolito, puede caracterizarse físicamente a partir de un balance de fuerzas, teniendo en cuenta que sobre estas juntas se ejercerá la fuerza radial de presión del fluido en el interior, la fuerza de apriete de los pernos y la fuerza causada por su resistencia a la tracción. (7)

La fuerza causada por la resistencia a la tracción de las juntas (F_G) se puede calcular a partir de la Ecuación 67 en la que están presentes la resistencia a la tracción de la junta (σ_{GS}), el espesor de la junta (t) y los diámetros interno (d) y externo (D) de la junta. La fuerza radial neta que mantiene la junta en su posición (F_C) se puede obtener de la Ecuación 68 la cual depende a su vez de dos fuerzas: la fuerza con la que aprietan los pernos (F_B) y se calcula a través de la Ecuación 69 en la que está presente la tensión de apriete de los pernos (σ_G , la cual se obtiene de bibliografía (7)); y la fuerza que trata de separar las placas que aprietan la junta (F_{PH}) que se obtiene de la Ecuación 70 teniendo en cuenta que la presión interna (P) será la presión de diseño y no la presión obtenida anteriormente. Finalmente, también se tendrá en cuenta la fuerza radial causada por la presión interna para expulsar a la junta (F_{PR}) que se calcula con la Ecuación 71.

El valor de la presión de diseño se calculará teniendo en cuenta la mayor presión en el equipo y tomando el mayor valor que resulte de aumentarla un 10% o sumarle 25 psi (normativa ASME BPVC Sec. VIII (9)).

Anexo II. Cálculos Justificativos
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

$$F_G = \sigma_{GS} \cdot [t \cdot (D - d)] \quad \text{Ecuación 67}$$

$$F_C = \mu \cdot (F_B - F_{PH}) \quad \text{Ecuación 68}$$

$$F_B = \sigma_G \cdot \pi \cdot \frac{(D^2 - d^2)}{4} \quad \text{Ecuación 69}$$

$$F_{PH} = P \cdot \pi \cdot \frac{d^2}{4} \quad \text{Ecuación 70}$$

$$F_{PR} = P \cdot \pi \cdot d \cdot t \quad \text{Ecuación 71}$$

Tras realizar el balance de fuerzas sobre la junta, se han de tener en cuenta las direcciones de las fuerzas (Ecuación 72) y se pueden combinar las ecuaciones anteriores para obtener la Ecuación 73.

$$F_G + F_C - F_{PR} = 0 \quad \text{Ecuación 72}$$

$$\sigma_{GS} \cdot [t \cdot (D - d)] + \mu \cdot \left[\sigma_G \cdot \pi \cdot \frac{(D^2 - d^2)}{4} - P \cdot \pi \cdot \frac{d^2}{4} \right] - P \cdot \pi \cdot d \cdot t = 0 \quad \text{Ecuación 73}$$

Las medidas definitivas de la junta están descritas en la Tabla 20, junto con los valores empleados para calcularla. Los valores de μ , σ_G y σ_{GS} son valores recomendados para juntas de grafito flexible. (7) Por comparación con otras juntas en el mercado se han aceptado los valores obtenidos para las juntas, los cuales se han calculado de forma iterativa junto con el espesor de las placas fijas que se describe a continuación.

Tabla 20. Variables y resultados de dimensionado de las juntas

Variable	Valor	Unidades
σ_{GS}	4.136.854,38	Pa
t	0,001	m
d	2	m
D	2,00485	m
μ	0,2	
σ_G	33.094.835,01	Pa
P	490.020,65	Pa

3.4. Espesor de las placas fijas

El último elemento a dimensionar para caracterizar el electrolizador serán las placas fijas que contendrán las celdas en su interior y estarán sujetas por los pernos. Para realizar este diseño se empleará la metodología indicada en la norma ASME BPVC Sec. VIII Div.1. (9)

Para el cálculo del espesor de un cabezal plano cerrado mediante juntas se ha de emplear la Ecuación 74 en la que se tienen en cuenta el valor de presión de diseño (P); el factor dependiente de la forma de unión de la tapa (C), que para este caso será de 0,25 puesto que se corresponde la aclaración 11 del subapartado UG-34 (d) de la norma; también la eficiencia de soldadura (E) que debido a que se emplea una junta no se tendrá en cuenta, puesto que en la norma no se trata, dándole un valor de 1 en la ecuación; y la máxima tensión admisible (S) para el material de la placa obtenida de la norma. En el segundo término, que está referido al efecto de las juntas están presentes la carga total generada por los pernos (W), el brazo de momento de la junta (h_G) el cual es igual a la distancia entre el centro de la junta y el centro del perno, que se obtiene de las medidas de la junta y de la norma TEMA (26); y el valor del diámetro hasta la mitad de la junta (d).

$$t_r = d \cdot \sqrt{\frac{C P}{S E} + \frac{1,9 W h_G}{S E d^3}} \quad \text{Ecuación 74}$$

Para obtener el valor de W es necesario aplicar varias ecuaciones, obteniendo en ellas el valor del área mínima de pernos necesaria, que permitirá calcular el número mínimo de pernos a través de la métrica de los pernos anteriormente seleccionada.

El cálculo de la carga de los pernos necesaria se realiza escogiendo el valor más elevado de los obtenidos mediante dos ecuaciones. Mediante la primera (Ecuación 75) se obtiene W_{m1} a través de la presión de diseño, el valor del diámetro hasta la mitad de la junta (G), la mitad del espesor de la junta (b) y el factor de junta m que dependen del material de la junta, tomando en este caso el valor de 2,75 por tratarse de una fibra mineral que tendrá un espesor menor a los 2 mm. W_{m2} se obtiene mediante la Ecuación 76 en la que además de variables anteriores también está la tensión mínima de asiento de diseño (y) que por la misma razón que m toma el valor de 15.000.000 Pa. Con estos valores y junto con la tensión máxima permisible de los pernos a temperatura ambiente (S_b) y de diseño (S_a) se obtienen los valores mínimos de superficie de pernos como se ven en la Ecuación 77 y la Ecuación 78. Puesto que la temperatura de diseño (80 °C) y la ambiente son próximas se empleará en ambos casos el mismo valor de tensión máxima permisible.

$$W_{m1} = 0,785 \cdot G^2 \cdot P + 2 b \times 3,14 G \cdot m \cdot P \quad \text{Ecuación 75}$$

Anexo II. Cálculos Justificativos
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

$$W_{m2} = 3,14 b \cdot G \cdot y \quad \text{Ecuación 76}$$

$$A_{m1} = \frac{W_{m1}}{S_b} \quad \text{Ecuación 77}$$

$$A_{m2} = \frac{W_{m2}}{S_a} \quad \text{Ecuación 78}$$

Una vez seleccionado el valor más elevado entre A_{m1} y A_{m2} , este se tratará como el valor real del área mínima de pernos A_m y se podrá calcular el valor de W mediante la Ecuación 79. En esta ecuación A_b es el valor de área de pernos empleada la cual se obtiene del número de pernos anteriormente calculados y el diámetro de perno seleccionado; este valor siempre ha de ser mayor que A_m . También se puede obtener a partir de la Ecuación 80 el número mínimo de pernos necesarios.

$$W = \frac{(A_m + A_b)}{2} \cdot S_a \quad \text{Ecuación 79}$$

$$N^{\circ} \text{ mínimo de pernos} = \frac{A_m}{\pi \cdot \frac{d_{\text{pernos}}^2}{4}} \quad \text{Ecuación 80}$$

Los resultados de este apartado se pueden observar en la Tabla 21 junto con el valor de las variables empleadas. Los valores de tensiones máximas permitidas son los ofrecidos por la norma ASME para los pernos de acero y para la placa de acero inoxidable.

Tabla 21. Dimensionado de las placas fijas

Variable	Valor	Unidades
G	2,00243	m
P	490020,65	Pa
b	0,00243	m
m	2,75	
W_{m1}	1.583.531,67	N
y	15.000.000	Pa
W_{m2}	228914,22	N
$S_a=S_b$	88.940.000	Pa
A_{m1}	0,0178	m ²
A_{m2}	0,00257	m ²
A_m	0,0178	m ²
A_b	0,0271	m ²
Nº mínimo de pernos	116	pernos
W	1996595,77	N
C	0,25	
S	137.895.000	Pa
h_G	0,0248	m
t	0,0625	m

3.5. Longitud del equipo

Para obtener la longitud del equipo tan solo es necesario tener en cuenta los componentes de cada una de las celdas y multiplicar este por el número de celdas y de stacks. Cada celda estará formada por una junta que separe al electrodo del electrodo de la celda anterior, un electrodo, una junta separando los electrodos y conteniendo el separador. Una vez multiplicado esto por el número de celdas ha de aumentarse al final el espesor de una última junta para separar el equipo de las placas fijas. Además de estas medidas internas, cada stack tendrá dos placas fijas. Con esto se pueden obtener los resultados de la Tabla 22, se ha de tener en cuenta que no todos los stacks deben estar alineados, por lo que la longitud total será solo la suma de sus longitudes individuales. En esta tabla se detallan el valor de longitud de los internos ($L_{interna}$), la longitud de un stack completo (L_{stack}) y la longitud total sumada de los stacks necesarios (L_{total}).

Anexo II. Cálculos Justificativos
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 22. Longitud del equipo

Variable	Valor	Unidades
$L_{interna}$	2,73	m
L_{stack}	2,86	m
L_{total}	40	m

4. BIBLIOGRAFÍA

1. **Fuller, Thomas F. and Harb, John N.** *Electrochemical Engineering*. Hoboken, EEUU : John Wiley & Sons, 2018. 9781119446583.
2. *Modelling and simulation of an alkaline electrolyser cell.* **Abdin, Z., Webb, C.J. and MacA. Gray, E.** 138, Australia : Elsevier. Energy, 2017. <http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2017.07.053>.
3. **Zhang, Lie, et al.** *Electrochemical Water Electrolysis: Fundamentals and Technologies*. Boca Ratón, EEUU : CRC Press, 2020. 9780429447884.
4. *Modeling of advanced alkaline electrolyzers: a system simulation approach.* **Oystein, Ulleberg.** 28, Kjeller, Noruega : International Journal of Hydrogen Energy, 2003. S 0360-3199(02)00033-2.
5. *Development and characterization of new nickel coatings for application in alkaline water electrolysis.* **Kuleshov, V. N., et al.** 1, Moscú, Rusia : International Journal of Hydrogen Energy, 2016, Vol. 41. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.10.141>.
6. *Electrodes modified with Ni electrodeposition decrease hexavalent chromium generation in an alkaline electrolysis process.* **Soriano Moranchell, Froylan Alonso, et al.** 26, Ciudad de México, México : International Journal of Hydrogen Energy, 2020, Vol. 45. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.01.050>.
7. *Initial gasket compression is key to safe, reliable flange joints.* **Drago, Jim.** Nueva York : Feature. Sealing Technology, 2013.
8. **Nakagawa, Kenji, et al.** *GASKET AND ELECTROLYSER. EP 2 993 254 A1* Europa, Abril 23, 2014. Constituyente de equipo.
9. **American Society of Mechanical Engineers.** *ASME boiler and pressure vessel code*. Nueva York : American Society of Mechanical Engineers, Boiler and Pressure Vessel Committee, 2019.
10. **Ashby, Michael.** *Material selection in mechanical design, 2ªed.* Cambridge : Cambridge University Press, 1999.
11. *Design considerations for industrial water electrolyzer plants.* **Rizwan, Md, Alstad, Vidar and Jäschke, Johannes.** 46, Porsgrunn, Noruega : Elsevier. International Journal of Hydrogen Energy, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.09.018>.
12. *Water vapour partial pressures and water activities in potassium and sodium hydroxide solutions over wide concentration and temperature ranges.* **Balej, J.** 4, Jülich : International Association for Hydrogen Energy, 1985, Vol. 10.
13. **Larminie, James, Dicks, Andrew and McDonald, Maurice S.** *Fuel cell systems explained*. Chichester, UK : J. Wiley, 2003. 0-470-84857-X.

14. *Simulation tool based on a physics model and an electrical analogy for an alkaline electrolyser*. **Henao, Christian, et al.** 250, Trois-Rivières, Canada : Journal of Power Sources, 2014.
15. **KERN S&D.** ELECTROLIZADORES DE HIDRÓGENO. [Online] KERN S&D. [Cited: Mayo 5, 2022.] <https://kernsd.com/electrolizadores-de-hidrogeno/>.
16. **D. Do, Duong.** *Adsorption analysis: equilibria and kinetics*. Queensland, Australia : Imperial College Press, 1998.
17. **Poling, Bruce E., Prausnitz, John M. and O'Connell, John P.** *The properties of gases and liquids*. Nueva York : McGraw-Hill, 2001. DOI: 10.1036/0070116822.
18. *Mass Transfer Performance of Porous Nickel Manufactured by Lost Carbonate Sintering Process*. **Zhu, Pengcheng and Zhao, Yuyuan.** 12, Liverpool : Advanced Engineering Materials, 2017, Vol. 19. <https://doi.org/10.1002/adem.201700392>.
19. **MatWeb.** Material Property Data. *301 Stainless Steel*. [Online] MatWek. [Cited: Mayo 15, 2022.] <https://www.matweb.com/search/DataSheet.aspx?MatGUID=0cf4755fe3094810963eaa74fe812895>.
20. **Scott Precision Wire.** Scott Precision Wire. *Stainless Steel 304L*. [Online] [Cited: Mayo 15, 2022.] <https://www.scottprecisionwire.com/technical-data/alloy-data-sheets/stainless-steel-304l/>.
21. **Molina Martíenz, José Miguel, Cánovas Rodríguez, Francisco Javier and Ruz Vila, Francisco Asís.** *Corriente alterna monofásica y trifásica : fundamentos de electrotecnia para ingenieros*. Barcelona : Marcombo, 2012. 978-84-267-1779-5.
22. **White, Frank M.** *Mecánica de fluidos*. Madrid : McGraw-Hill, 2003. 84-481-4076-1.
23. **Aspen Technology.** Aspen Hysys V10. *Process Simulation Software*. 2017.
24. **EPIDOR SRT.** La fluencia en juntas planas. [Online] EPIDOR SEALS AND RUBBER TECHNOLOGY, Febrero 13, 2019. [Cited: Mayo 15, 2022.] <https://epidor-srt.com/blog/la-fluencia-en-juntas-planas/>.
25. **Budynas, Richard G. and Nisbett, J. Keith.** *Diseño en ingeniería mecánica de Shigley*. México : McGraw-Hill, 2008. 970-10-6404-6.
26. **Gaddis, Daniel.** *Standards of the tubular exchanger manufacturers association*. EEUU : Tubular exchanger manufacturers association, 2019.

PARTE II:

REACTOR R-301

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN.....	2
2. ASPECTOS TERMODINÁMICOS	2
3. SELECCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR	5
4. SELECCIÓN DEL TIPO DE REACTOR.....	6
4.1. Tipos de reactores para reacciones gas-sólido.....	6
4.2. Operación isotérmica, no adiabática y adiabática	7
4.3. Disposición de flujo	10
5. CINÉTICA DE REACCIÓN.....	11
6. CONDICIONES DE OPERACIÓN Y OTRAS CONSIDERACIONES.....	14
6.1. Condiciones de operación	14
6.2. Consideraciones para la modelización del reactor	14
7. BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA.....	15
7.1. Balance de materia	15
7.2. Balance de energía	17
7.3. Dimensiones del lecho	17
7.4. Balance de cantidad de movimiento.....	19
7.5. Resolución matemática	22
8. INTERCAMBIADOR DE CALOR.....	30
9. DIMENSIONAMIENTO DEL EQUIPO	37
9.1. Canasta del catalizador.....	37
9.2. Diseño de carcasa	41
9.3. Distribuidor de gas	41
10. DISEÑO MECÁNICO DEL EQUIPO	43
10.1. Presión de diseño.....	43
10.2. Temperatura de diseño	44
10.3. Selección del material	44
10.4. Espesor de carcasa.....	46
10.5. Selección y dimensionamiento de los cabezales	48
10.6. Estimación de espesores del intercambiador de calor	49
10.7. Altura del reactor	51
10.8. Análisis de cargas.....	51
10.9. Análisis de tensiones	57
10.10. Selección del soporte.....	60
11. TUBULADURAS Y CONEXIONES.....	62
12. VÁLVULA DE SEGURIDAD PSV-307.....	63
13. BIBLIOGRAFÍA.....	64

1. INTRODUCCIÓN

El amoníaco se obtiene mayoritariamente mediante el proceso Haber-Bosch, el cual requiere elevadas temperaturas, superiores a los 350°C, y altas presiones (200-400 bar), lo cual hace que sea un proceso muy intensivo energéticamente. Por eso, la selección de las condiciones de operación, el catalizador y la selección del reactor ha de ser aquella que permita reducir el consumo energético, que garantice una mayor seguridad en el proceso y que permita obtener la conversión y velocidad de reacción lo más elevadas posibles.

2. ASPECTOS TERMODINÁMICOS

La reacción de síntesis de amoníaco se trata de una reacción exotérmica reversible que por tanto se verá afectada por la temperatura, la presión y la presencia de inertes y catalizadores. Para poder predecir la evolución de la reacción ante variaciones en estos factores se recurre al principio de Le Chatelier, en el que se manifiesta que, si hay un cambio en el sistema en equilibrio debido a la modificación de algún factor externo como la temperatura, presión y concentración de alguno de los componentes, entonces el equilibrio se desplazará en el sentido en el que se contrarreste el efecto de dicha modificación.

Atendiendo a este principio, se pueden estudiar qué condiciones favorecerán la conversión de amoníaco. De nuevo, se presenta la reacción de síntesis para evaluar los diferentes factores externos:



Al aumentar la presión, el equilibrio contrarresta la modificación desplazándose hacia donde disminuye la presión, es decir, hacia donde hay menor número de moles. Por tanto, la reacción se verá favorecida al trabajar a elevadas presiones, ya que el equilibrio se encontrará más desplazado hacia la formación de amoníaco. Por tanto, desde el punto de vista termodinámico, trabajar a 400 bar sería preferible frente a 100 bar. Además, el trabajar con elevadas presiones permitiría condensar parte del amoníaco empleando agua como refrigerante ya que, a una presión mayor, la temperatura a la que se puede condensar el gas disminuye, por lo que así se evita recurrir a otros refrigerantes como el propano que requieren un circuito de refrigeración. (1)

Sin embargo, han de tenerse en cuenta otros aspectos como la seguridad, el coste de los equipos, para los cuales es recomendable trabajar con menores presiones, ya que así se reduce el coste de material al ser necesario un menor espesor, y los costes de compresión. El gasto energético que se podría ahorrar en refrigeración para condensar el amoníaco a elevadas presiones podría verse sobrepasado por los gastos en compresión, por lo que, en este caso, se ha decidido trabajar a presiones bajas, de en torno a 100-150 bar.

Por otro lado, un aumento en la temperatura tiende a desplazar el equilibrio hacia la formación de los reactivos, dado que la reacción es exotérmica, esta modificación

provoca que la reacción se desplace en el sentido en el que la reacción absorbe calor, es decir, en el sentido en el que la reacción es endotérmica, que se corresponde con la reacción inversa. Por tanto, si se desea incrementar la cantidad de amoníaco producido es necesario trabajar a bajas temperaturas. Sin embargo, el trabajar con temperaturas bajas provoca que la reacción sea demasiado lenta, por lo que en las reacciones exotérmicas se debe buscar un equilibrio entre la conversión y la velocidad de reacción, dado que las condiciones que favorecen a una disminuyen el valor de la otra.

Para evitar velocidades de reacción bajas se suele trabajar a elevadas temperaturas, lo cual lleva a que se alcancen bajas conversiones en el reactor, normalmente entre un 10-25% dependiendo de la presión de operación. Por eso, en todos los procesos de síntesis de amoníaco es necesario recircular el gas no reaccionante. A menor conversión, mayor será la cantidad de gas que se ha recircular y por tanto mayor será el gasto energético en la compresión.

La presencia de inertes disminuye la concentración de los reactivos, por lo que la conversión del nitrógeno alcanzada será menor. Por eso, otra de las ventajas que presenta el proceso *Power-to-ammonia* frente al proceso convencional es la reducción y la ausencia de inertes como el CH_4 , consiguiendo mayores conversiones para la misma alimentación de nitrógeno e hidrógeno. En la Figura 1, se presenta una comparación para el contenido de amoníaco en función de la temperatura, la presión y la presencia de inertes frente a la ausencia a 10 MPa (100 bar) para una relación $\text{H}_2/\text{N}_2=3/1$, corroborando lo mencionado anteriormente. (2)

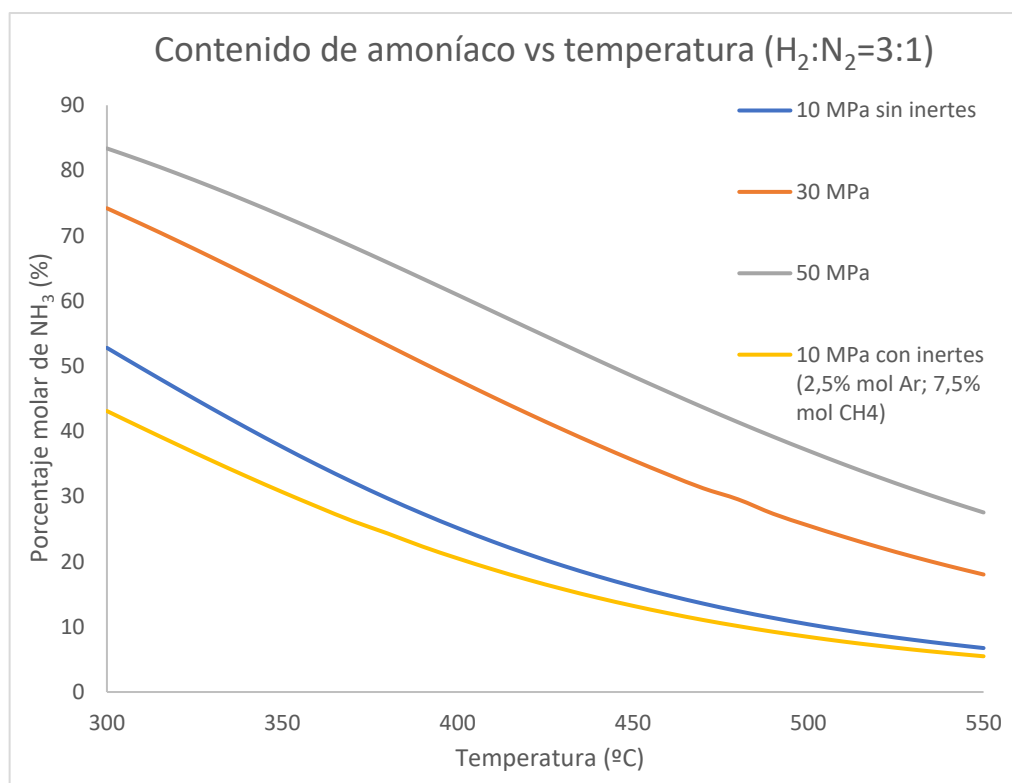


Figura 1. Evolución de la concentración de amoníaco en función de la presión, la temperatura y concentración de inertes. Elaboración propia a partir de (3)

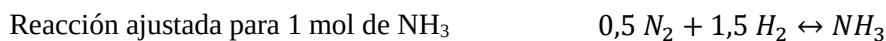
En las reacciones de equilibrio la máxima conversión que se puede alcanzar es la conversión de equilibrio. Sin embargo, dado que en el equilibrio la velocidad de reacción es igual a 0, normalmente se suele trabajar con conversiones entre un 80-90% de la conversión de equilibrio. La conversión de equilibrio para reacciones en fase gaseosa donde se puede aproximar la mezcla como ideal se puede calcular empleando la Ecuación 1, donde f_i , representa la fugacidad de los reactivos y los productos; P° , la presión total estándar a la que se refiere la fugacidad estándar tomada como 1; K_a , la constante de equilibrio; y ν_i , representa el coeficiente estequiométrico de los componentes de la reacción. (3) (4)

$$\prod_i \left(\frac{f_i}{P^\circ} \right)^{\nu_i} = K_a \quad \text{Ecuación 1}$$

Como la fugacidad se puede expresar en función de la composición molar de cada componente implicado en la reacción (y_i), el coeficiente de fugacidad (ϕ_i) y la presión total (PT), tal y como se muestra más adelante en la Ecuación 7, la Ecuación 1, se puede expresar de la siguiente forma (Ecuación 2), donde ν representa la suma de los coeficientes estequiométricos teniendo en cuenta el signo menos para reactivos y más para productos. (4)

$$\prod_i (y_i * \phi_i)^{\nu_i} = \left(\frac{P_T}{P^\circ} \right)^{-\nu} * K_a \quad \text{Ecuación 2}$$

El cálculo de las composiciones molares, las fugacidades y el valor de la constante de equilibrio se presenta en el apartado 7. *CINÉTICA DE REACCIÓN*. Cabe destacar que la constante de equilibrio, que se puede calcular mediante la expresión de Gillespie y Beattie, está expresada para la formación de un mol de amoníaco, donde ν toma el valor de -1, por lo que adecuando la Ecuación 2 a la reacción de amoníaco se llega a la Ecuación 3, la cual se empleará para calcular la conversión de equilibrio.



$$\frac{\phi_{\text{NH}_3} * y_{\text{NH}_3}}{(\phi_{\text{N}_2} * y_{\text{N}_2})^{0,5} * (\phi_{\text{H}_2} * y_{\text{H}_2})^{1,5}} = P_T * K_a \quad \text{Ecuación 3}$$

A partir de las composiciones molares se puede introducir la conversión de equilibrio referida al nitrógeno en la Ecuación 3, por lo que de esta forma se puede obtener el valor de esta conociendo la presión total, la variación de la constante de equilibrio con la temperatura, la variación de los coeficientes de fugacidad con la temperatura y la presión total, y los caudales molares de todos los componentes que entran al reactor. Como se explicará más adelante, la caída de presión en el reactor es mínima, por lo que para calcular la conversión de equilibrio se ha considerado constante e igual a la presión total inicial.

3. SELECCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR

Los catalizadores más ampliamente utilizados en la industria son los catalizadores a base de hierro, entre los que se encuentran los catalizadores a base de magnetita y a base de wüstita; los catalizadores de hierro-cobalto; y los catalizadores a base de rutenio soportados sobre grafito (Ru/C). (1)

Los catalizadores a base de magnetita son los catalizadores convencionales empleados en la síntesis de amoníaco y están compuestos por óxido de hierro (Fe_3O_4) y promotores de óxidos metálicos como aluminio (Al_2O_3), calcio (CaO) y potasio (K_2O). Este catalizador presenta como ventajas su elevada reactividad, una larga vida útil y un bajo costo, aunque a elevadas concentraciones de amoníaco su actividad se ve fuertemente disminuida y en comparación con el resto de los catalizadores mencionados es el que menor actividad catalítica presenta. Para conseguir una mayor actividad, el catalizador de magnetita se puede modificar con cobalto dando lugar así a los catalizadores de hierro-cobalto, aptos para la síntesis de amoníaco a baja presión. Estos catalizadores no están tan inhibidos por altas concentraciones de amoníaco como los catalizadores convencionales, por lo que la tasa de síntesis de amoníaco se ve menos afectada. (5)

Por otro lado, los catalizadores a base de wüstita (Fe_{1-x}O) presentan una estructura cúbica cristalina lo que permite incrementar el tamaño de los poros y por tanto el área específica del catalizador. Por tanto, presentan una mayor actividad que los catalizadores de magnetita, una alta reducibilidad y una alta resistencia mecánica. Los catalizadores de wüstita se pueden emplear a bajas presiones (10-20 MPa), en un amplio rango de proporciones H_2/N_2 y poseen una alta estabilidad a elevadas temperaturas. Además, no contienen metales nobles, por lo que su costo es mucho menor en comparación con otros catalizadores como el de Ru/C y al igual que los catalizadores de magnetita modificados con cobalto presentan resistencia al envenenamiento. Algunos ejemplos de catalizadores industriales a base de wüstita son AmoMax® 10 desarrollado por Clariant, el catalizador A301 y el ZA-5. El tiempo de vida del catalizador, al igual que los catalizadores de magnetita, ronda entre 10 y los 15 años. (5) (6) (7)

Los catalizadores de rutenio, también empleados en la síntesis de amoníaco a baja presión, poseen un área superficial mayor a los catalizadores de hierro y una mayor reactividad, además de presentar una actividad muy elevada, sobre todo a elevadas concentraciones de amoníaco. Sin embargo, su empleo deberá estar justificado dado a su elevado precio, puesto que presenta una amplia aplicación en la industria electrónica. (1)

Por otro lado, en estudios realizados, se ha comparado la actividad de diferentes catalizadores (magnetita, wüstita y rutenio), y se ha comprobado que, para conversiones bajas de nitrógeno, la actividad del catalizador a base de wüstita presenta una actividad similar al catalizador Ru/C, por lo que la wüstita demuestra ser competente frente a los catalizadores de rutenio. Por este motivo junto a un costo más bajo en comparación con el catalizador de rutenio, se ha escogido el catalizador a base de wüstita. (7)

En la Tabla 1, se presenta la composición química de catalizadores a base de wüstita. (8)

Tabla 1. Composición química de catalizadores a base de wüstita previa a la reducción (8)

Composición química de catalizadores a base de Wüstita	
Óxido de hierro (%)	93
Al ₂ O ₃ (%)	2,7
K ₂ O (%)	0,8
CaO (%)	2,8
Otros (%)	0,7

El diámetro equivalente se define como el diámetro de una esfera que posee el mismo volumen que el de las partículas de catalizador y que se puede calcular a través de la Ecuación 4. (9)

$$V_{particula} = V_{esfera} = \frac{4}{3} * \pi * \left(\frac{d_p}{2}\right)^3 \rightarrow$$

$$d_p = 2 \sqrt[3]{\frac{3 V_{particula}}{4 \pi}}$$

Ecuación 4

En la Tabla 2, se recogen las características del catalizador AmoMax®10. (10)

Tabla 2. Características del catalizador AmoMax® 10 (10)

Características del catalizador a base de wüstita	
Fase	Sólida
Forma	Gránulos de forma irregular con extremos redondeados
Diámetro de partícula (mm)	6-10
Densidad de catalizador (kg/m ³)	5900
Densidad de lecho (kg/m ³)	2900-3100
Esfericidad	0,67
Volumen medio partícula (mm ³)	179,62
Diámetro equivalente (mm)	7

4. SELECCIÓN DEL TIPO DE REACTOR

A continuación, se presenta la justificación del tipo de reactor escogido:

4.1. Tipos de reactores para reacciones gas-sólido

Las reacciones gas-sólido se pueden llevar a cabo en reactores de lecho fijo o reactores de lecho fluidizado. (12)

Los reactores de lecho fijo son los reactores más empleados en la industria, especialmente para llevar a cabo reacciones catalíticas. En este tipo de reactores, las partículas de catalizador se encuentran confinadas en el interior de un tubo o una sección anular entre dos tubos concéntricos y el gas reaccionante atraviesa el lecho empacado de catalizador, de forma que este permanece en su posición original. El flujo de este tipo de reactores se puede aproximar por un reactor de flujo en pistón, por lo que se consiguen buenas eficacias de contacto. Además, presenta mayor conversión por peso de catalizador

frente a otro tipo de reactores catalíticos. Como desventajas presenta la formación de puntos calientes en el reactor debido a que la transmisión de calor es menor que en los reactores de lecho fluidizado. (12)

En su contraparte, en el caso de los reactores de lecho fluidizado, el lecho de partículas catalíticas se encuentra suspendido a lo largo del reactor por el propio gas, lo cual requiere velocidades elevadas para poder fluidizar el sólido. Esta configuración facilita el reemplazado del catalizador, por lo que se suelen emplear con catalizadores que sufren una rápida desactivación. Además, este tipo de reactor resulta de especial interés cuando los principales parámetros de diseño son la transferencia de calor y la difusión, ya que permite una mezcla uniforme de partículas y de gradientes de temperatura. Sin embargo, si el diseño radica fundamentalmente en el contacto efectivo, este tipo de reactor no es conveniente, ya que el patrón de flujo difiere del reactor de flujo en pistón, lo cual conlleva a aumentar la cantidad de catalizador para aumentar el contacto entre gas y sólido. Otros inconvenientes son: un mayor volumen de recipiente frente al lecho fijo, mayores requisitos de bombeo, arrastre de partículas de catalizador como consecuencia de las altas velocidades, la erosión de los componentes internos del reactor y la dificultad del modelo de flujo. (13) (12)

Dado que el catalizador que se empleará para la síntesis de amoníaco posee una larga vida de operación, de en torno a 10-15 años, y el reactor de lecho fijo es más fácil de modelizar, más económico tanto en la construcción como en la operación y requiere menor cantidad de catalizador, este ha sido el reactor escogido. Además, la síntesis de amoníaco en reactores de lecho fijo es uno de los procesos más común e importante en la industria química. (12)

4.2. Operación isotérmica, no adiabática y adiabática

Los reactores isotérmicos son aquellos que siempre mantienen en cada punto del reactor la misma temperatura. Dado que la reacción se ve favorecida a bajas temperaturas y es exotérmica, la operación isotérmica sería la ideal, sin embargo, en los reactores industriales es sumamente complejo operar a la misma temperatura, dado que se forman gradientes axiales y radiales de temperatura, y requeriría grandes cantidades de refrigerante, así como un sistema de control de temperatura muy riguroso.

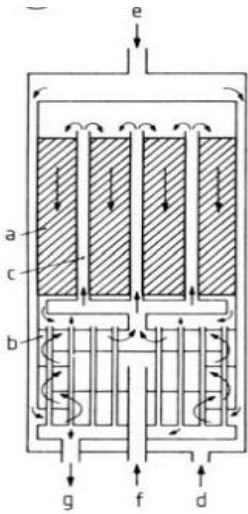


Figura 2. Reactor autotérmico con flujo en contracorriente (2)

La operación más próxima a la isotérmica es la no adiabática, en la cual se retira el calor generado por la reacción de síntesis a medida que esta transcurre, de forma que se regula la temperatura, pero sin tener que mantener condiciones isotérmicas. Este tipo de reactores son similares a los intercambiadores de carcasa y tubos, donde el catalizador se puede situar en el interior de los tubos y el fluido refrigerante circularía por carcasa, o el catalizador se encuentra en la carcasa y el fluido refrigerante circula por los tubos. Este tipo de reactores sólo son recomendados para la producción a baja escala y se suelen diseñar para emplear el calor absorbido de la reacción exotérmica con el fin de aumentar la temperatura del gas de alimentación hasta la temperatura de operación del reactor, por lo que se denotan como reactores autotérmicos. Esta integración energética permite reducir el coste energético de la planta, ya que reduce el caudal de fluido calefactor para calentar el gas reaccionante a la temperatura establecida y, por tanto, los costes de equipo y bombeo asociados. No

obstante, el control de temperatura, así como la amortiguación de las oscilaciones de temperatura, es muy lenta. En la Figura 2, se presenta un esquema de un reactor autotérmico. (2) (14)

Donde *a* representa el catalizador, *b*, el intercambiador de calor donde se calienta el gas de alimentación al reactor, *c*, los tubos por los que circula el fluido refrigerante, y *d*, la entrada del gas de alimentación. En este caso, parte del gas de alimentación se introduce por la parte superior del reactor (*e*), de forma que ayuda a refrigerar el lecho de catalizador. El gas reaccionado que se utiliza para calentar el gas de entrada sale por la parte inferior del reactor (*g*). Por la parte inferior (*f*), se suele introducir un gas refrigerante para ayudar a controlar la temperatura del lecho (cold-shot). (2)

La operación autotérmica es mejor que un reactor adiabático de un solo lecho, ya que la línea de operación es más próxima a la temperatura óptima. Sin embargo, un reactor adiabático de dos etapas con refrigeración intermedia permite alcanzar una conversión mucho mayor y también es posible realizar una integración energética para aprovechar el calor absorbido de la reacción para calentar la corriente de alimentación. Por eso, además de que los reactores adiabáticos son los más comunes en la industria y los más empleados en la síntesis de amoníaco, por ser más económicos y fáciles de operar, se ha seleccionado el reactor adiabático con refrigeración entre etapa. (14)

En este tipo de operación, el lecho donde transcurre la reacción no intercambia calor, por lo que, al tratarse de una reacción exotérmica, la temperatura del lecho se incrementa con la conversión. A continuación, los gases de salida son enfriados antes de entrar al siguiente lecho. Esta configuración suele ser la más empleada en la producción a gran escala, sin embargo, también existen reactores industriales a pequeña escala en los que son empleados por las diferentes ventajas que presenta. (2)

Según el modo de refrigerar los reactores adiabáticos se pueden clasificar como: reactores adiabáticos con refrigeración directa (*quench*) o reactores adiabáticos con refrigeración indirecta.

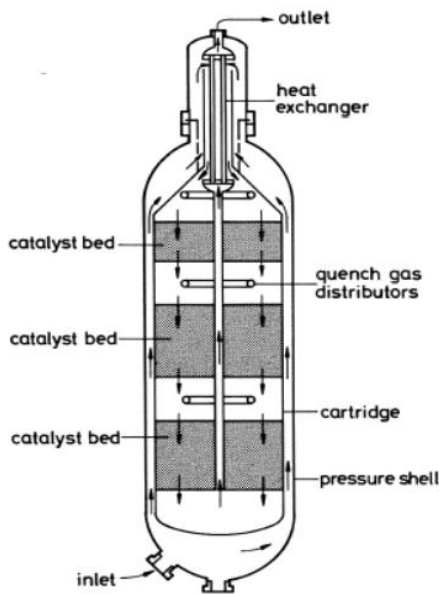


Figura 3. Convertidor con refrigeración directa de Kellogg (2)

Los reactores multilecho con enfriamiento directo refrigeran el gas de salida del lecho mediante la inyección de gas de alimentación sin convertir más frío (*quench*) entre los diferentes lechos de catalizador. De esta forma se consigue enfriar el gas reaccionado mezclándolo directamente con el gas de alimentación frío y a continuación ambos entran al siguiente lecho. Una desventaja de este sistema es que el gas de alimentación que se emplea para realizar el *quench* no pasa por todo el volumen del catalizador, por lo que se necesita emplear mayor cantidad de catalizador en comparación con la refrigeración indirecta. Sin embargo, esta configuración no necesita ningún espacio adicional para intercambiadores de calor. Esta configuración resulta especialmente atractiva para la producción de cantidades de amoníaco muy elevadas, donde se necesitan volúmenes de reactor muy altos. Dado que no es el caso, esta opción ha sido descartada. En la Figura 3, se muestra un ejemplo de un reactor adiabático con refrigeración directa de la compañía Kellogg. (2)

Por otro lado, en los reactores adiabáticos con refrigeración intermedia indirecta, se emplea un intercambiador de calor entre cada uno de los lechos. Para capacidades elevadas los intercambiadores de calor pueden situarse fuera del reactor, mientras que, para menores caudales, el intercambiador de calor se dispone dentro del reactor. Como la producción de amoníaco propuesta es muy baja en comparación con las producciones típicas, se ha decidido diseñar el intercambiador de calor dentro del reactor. (2)

Una de las desventajas que presentan los reactores adiabáticos con refrigeración indirecta es que el diseño y la construcción se vuelve sofisticada y cara con múltiples lechos catalíticos. De acuerdo con los estudios consultados, se considera que un reactor con más de tres lechos y dos intercambiadores de calor no es recomendable, por eso, como máximo el reactor ha de poseer tres lechos para que sea rentable. (15)

Como se trabaja con caudales molares bajos, se emplearán dos lechos de catalizador y un único intercambiador de calor entre ambos lechos. Algún ejemplo de esta configuración con flujo radial es el convertidor S-200 de Haldor Topsoe y el convertidor de Uhde mostrados en la Figura 4. (16)

Los reactores de flujo radial con dos lechos son empleados en las plantas de producción de amoníaco donde se trabaja con bajas presiones, tal y como es el caso, y se requiere refrigeración para separar el amoníaco de los gases sin reaccionar. (17)

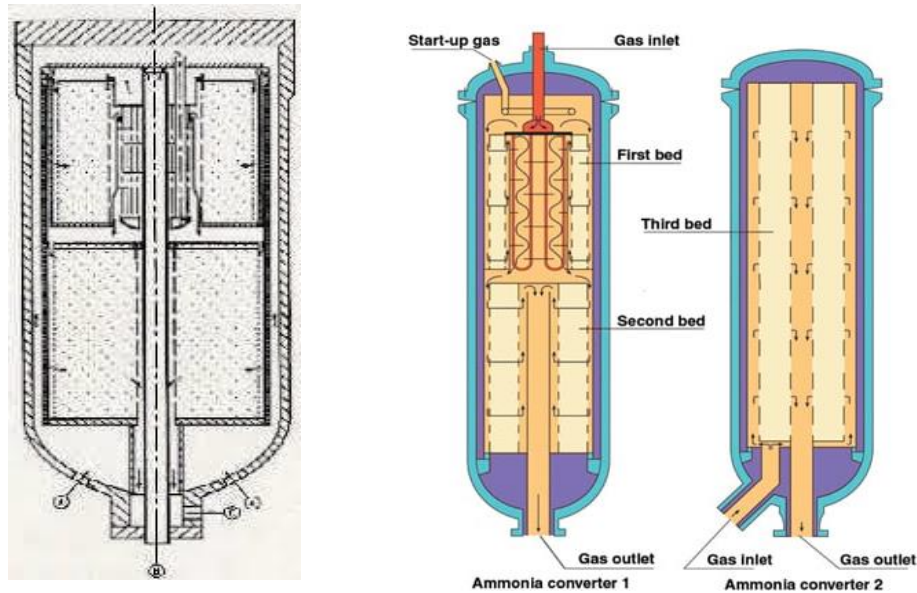


Figura 4. Convertidor de amoníaco S-200 de Haldor Topsoe (izquierda) y convertidor de Uhde (17) (19)

4.3. Disposición de flujo

El flujo que entra al lecho de catalizador puede ser axial, radial o una combinación de ambos. En el caso del reactor con flujo axial, el fluido atraviesa el lecho de catalizador paralelamente al eje del reactor de forma que la conversión aumenta a medida que el gas avanza con la longitud del reactor. Este tipo de configuración presenta la desventaja de que para caudales elevados requiere longitudes de lecho muy elevadas, por lo que se llegan a alcanzar pérdidas de presión muy elevadas. Para solucionar este problema, surgieron los reactores radiales, los cuales permiten aumentar la longitud del reactor en lugar de su diámetro y minimizar así la caída de presión. Esto supone reducir el consumo de energía en torno a un 30%. Puesto que el consumo energético es uno de los puntos críticos de la planta, los reactores radiales serán preferibles frente a los axiales. (18)

En reactores con flujo radial, el fluido atraviesa el lecho perpendicularmente al eje del reactor, de forma que la conversión varía con el radio del reactor. En esta configuración el catalizador se encuentra confinado entre dos paredes cilíndricas perforadas concéntricas y el flujo atraviesa el lecho en la dirección del radio. (18)

Otro patrón de flujo empleado en la síntesis de amoníaco es el axial-radial desarrollado por Ammonia Casale (Figura 5). En este tipo de reactores existe una mezcla del flujo axial y del radial, siendo predominante el flujo radial en un 90%. En los reactores totalmente radiales la parte superior de cada lecho está totalmente cubierta para evitar la entrada de flujo en dirección axial, lo que supone un volumen muerto de catalizador por el que no circula fluido. Las principales características de este reactor son: la utilización total del volumen del catalizador; una caída de presión reducida como consecuencia de un flujo predominantemente radial; un diseño y construcción mecánicos sencillos; y un fácil mantenimiento y sustitución del catalizador. Este tipo de reactor está disponible para diferentes rangos de capacidad. En concreto el reactor A60TM de Casale está diseñado para una capacidad desde 50 hasta 100 toneladas métricas por día de amoníaco. (19)

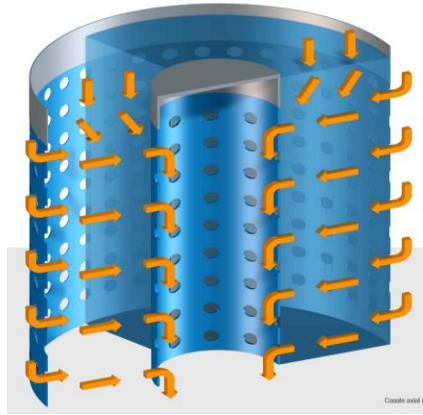


Figura 5. Esquema de la distribución de flujo en el reactor axial-radial de Casale (23)

En base a la revisión bibliográfica expuesta anteriormente, se ha decidido diseñar un reactor adiabático de dos lechos con refrigeración indirecta con flujo axial-radial inspirado en el reactor axial-radial A60TM de Casale, por los beneficios que este presenta.

5. CINÉTICA DE REACCIÓN

En base al estudio del mecanismo de reacción, se presenta la velocidad de reacción intrínseca del amoníaco en la *Ecuación 5* sin tener en cuenta la difusión en los poros del catalizador. Esta expresión se basa en la velocidad de reacción propuesta por Temkin and Pyzhed, la cual es la más utilizada para representar el rendimiento de los catalizadores a base de hierro, aunque ha sido ligeramente modificada en base a estudios cinéticos más recientes (Dyson y Simon). Este modelo considera la adsorción disociativa como paso determinante de la velocidad, mientras que desprecia la influencia del H₂ y NH₃ en la adsorción del N₂. (20) (21)

$$r_{NH_3} = k_2 * \left[K_a^2 * a_{N_2} * \left(\frac{a_{H_2}^3}{a_{NH_3}^2} \right)^\alpha - \left(\frac{a_{NH_3}^2}{a_{H_2}^3} \right)^{1-\alpha} \right] \quad \text{Ecuación 5}$$

Donde:

r_{NH_3} : velocidad de reacción del amoníaco en kmol de NH₃ por hora y por metro cúbico de lecho de catalizador kmol/(m³_{cat}*h).

k_2 : constante de velocidad inversa para la reacción reversible expresada a través de la ecuación de Arrhenius en kmol*atm^{0,25}/(m³_{cat}*h).

K_a : constante de equilibrio en atm⁻¹.

a : actividad de los diferentes componentes en atm.

α : constante que toma el valor de 0,5 a 0,75, que para el caso de la wüstita se recomienda emplear 0,75. (21)

El coeficiente de actividad se puede definir como el ratio entre la fugacidad de un componente (f_i) y la fugacidad de ese mismo componente en estado estándar (f_i^*), el cual se puede tomar arbitrariamente (*Ecuación 6*). Para simplificar los cálculos, esta última se

toma igual al valor de la fugacidad del componente puro a 1 atm y a una temperatura igual al del sistema, siendo así su valor de 1. (20)

$$a_i = \frac{f_i}{f_i^*} \quad \text{Ecuación 6}$$

A su vez la fugacidad puede ser expresada mediante el coeficiente de fugacidad (φ_i), la presión total (P_T) y la fracción molar de cada componente (y_i). Por tanto, la actividad puede calcularse en base a la siguiente expresión (Ecuación 7), siendo sus unidades iguales a la de la presión, ya que los otros parámetros son adimensionales: (20)

$$a_i = f_i = y_i * \varphi_i * P_T \quad \text{Ecuación 7}$$

Los coeficientes de fugacidad del nitrógeno y del amoníaco pueden calcularse mediante las correlaciones de Cooper y Newton, respectivamente (Ecuación 8 y Ecuación 10), mientras que para el hidrógeno se puede emplear la correlación de Cooper, Shaw y Wones (Ecuación 9). Cabe destacar que la temperatura en estas ecuaciones está expresada en kelvin, mientras que la presión se encuentra en atmósferas. (20)

$$\varphi_{N_2} = 0,93431737 + 0,3101804 * 10^{-3}T + 0,295896 * 10^{-3}P_T - 0,2707279 * 10^{-6}T^2 + 0,4775207 * 10^{-6}P_T^2 \quad \text{Ecuación 8}$$

$$\varphi_{H_2} = \exp \left[\exp(-3,8402 T^{0,125} + 0,541) P_T - \exp(-0,1263 T^{0,5} - 15,98) P_T^2 + 300 * \exp(-0,011901 T - 5,941) * \left(\exp\left(\frac{-P_T}{300}\right) - 1 \right) \right] \quad \text{Ecuación 9}$$

$$\varphi_{NH_3} = 0,1438996 + 0,2028538 * 10^{-2}T - 0,4487672 * 10^{-3}P_T - 0,1142945 * 10^{-5}T^2 + 0,2761216 * 10^{-6}P_T^2 \quad \text{Ecuación 10}$$

Por otro lado, la composición molar de cada compuesto puede expresarse en función de la conversión de nitrógeno a través de la estequiometría de la reacción aplicando un balance de materia al reactor, mediante el cual se llega a las siguientes expresiones (Ecuación 11, Ecuación 12 y Ecuación 13), donde $F_{i,in}$ se refiere al caudal molar de cada componente a la entrada del reactor en kmol/h.

$$y_{N_2} = \frac{F_{N_2,in} * (1 - X_{N_2})}{F_{T,in} - 2 * F_{N_2,in} * X_{N_2}} \quad \text{Ecuación 11}$$

$$y_{H_2} = \frac{F_{H_2,in} - 3 * F_{N_2,in} * X_{N_2}}{F_{T,in} - 2 * F_{N_2,in} * X_{N_2}} \quad \text{Ecuación 12}$$

$$y_{NH_3} = \frac{F_{NH_3,in} + 2 * F_{N_2,in} * X_{N_2}}{F_{T,in} - 2 * F_{N_2,in} * X_{N_2}} \quad \text{Ecuación 13}$$

Para calcular la constante cinética reversible (k_2) se emplea la Ecuación 14, dado que en el estudio cinético de la wüstita consultado se recogen los parámetros de la ecuación

de Arrhenius para la constante de velocidad directa de la reacción (k_1), que se puede relacionar con k_2 a través de la constante de equilibrio (K_a). (21)

$$k_2 = \frac{k_1}{K_a} \quad \text{Ecuación 14}$$

En la Tabla 3 se presentan las condiciones a las cuales se obtuvieron los parámetros de la ecuación de Arrhenius (energía de activación y factor de frecuencia) para la constante de reacción directa k_1 . (21)

Tabla 3. Parámetros cinéticos para la ecuación de Arrhenius (21)

Condiciones de operación	
Temperatura (°C)	400-460
Presión (bar)	100
H ₂ /N ₂	3/1
α	0,75
Parámetros cinéticos	
Energía de activación (kcal/kmol)	32400
Factor de frecuencia k_0 (kmol*atm ^{-0,75} /(m ³ _{cat} *h))	1,04*10 ¹⁰

En base a estos valores la constante de velocidad directa se puede expresar de acuerdo con la Ecuación 15 en función de la temperatura expresada en kelvin, donde la constante universal de los gases se ha expresado en kcal/(kmol*K): (21)

$$k_1 = 1,04 * 10^{10} * e^{-\frac{32400}{1,987*T}} \quad \text{Ecuación 15}$$

La ecuación de constante de equilibrio que mejores resultados ofrece en comparación con datos experimentales es la desarrollada por Gillespie y Beattie, la cual fue testada para presiones de hasta 600 atm y temperaturas de hasta 500°C, aunque se ha comprobado para presiones y temperaturas superiores, de hasta 100 atm y 600°C respectivamente, obteniendo también buenas aproximaciones. Dicha expresión se presenta en la Ecuación 16, donde la temperatura está expresada en kelvin y K_a está en atm⁻¹. (20) (22) (23)

$$\log_{10} K_a = -2,691122 * \log_{10} T - 5,519265 * 10^{-5} * T + 1,848863 * 10^{-7} * T^2 + \frac{2001,6}{T} + 2,6899 \quad \text{Ecuación 16}$$

La velocidad de la reacción química en sistemas catalíticos heterogéneos depende principalmente del área de contacto entre las fases, así como las variables que están involucradas en la reacción: presión, temperatura y concentración. Es por ello, que la difusión juega un papel muy importante, dado que los reactantes y el producto han de ser transportados desde su fase de suministro hasta la fase donde tiene lugar la reacción. (24)

El efecto de la difusión sobre el poro del catalizador se puede calcular aplicando un balance diferencial molar para un componente i dentro del catalizador (Ecuación 17),

donde r representa el radio de la partícula sólida, γ_i es el coeficiente estequiométrico, ϵ es la porosidad y N_i representa el flujo molar del componente i en el catalizador expresado en $\text{kmol}/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$. (25)

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 N_i) = \gamma_i \frac{R_{\text{NH}_3}(\gamma, T, P)}{1 - \epsilon} \quad \text{Ecuación 17}$$

Desarrollando la ecuación y transformándola mediante expresiones adimensionales, se puede calcular la concentración intraparticular resolviendo la ecuación diferencial, de manera que el factor de efectividad se puede estimar a través de la *Ecuación 18*: (25)

$$\eta = \frac{\int_0^{R_p} r^2 R_{\text{NH}_3}(\gamma, T, P) dr}{R_{\text{NH}_3} \int_0^{R_p} r^2 dr} \quad \text{Ecuación 18}$$

Sin embargo, este método requiere un método de resolución numérico, por lo que para simplificar los cálculos Dyson y Simon propusieron una expresión empírica para calcular el valor del factor de efectividad. Los coeficientes de dicha expresión varían en función de la presión, por lo que, dado que 150 atm era el valor más próximo a las condiciones de operación de este reactor, se han tomado dichos coeficientes. La expresión que se empleará en la modelización del reactor para el cálculo de la efectividad catalítica se presenta en la *Ecuación 19*, donde la temperatura está en kelvin y X_{N_2} representa la conversión del nitrógeno: (20)

$$\eta = -17,539096 + 0,07697849 * T + 6,900548 * X_{\text{N}_2} - 1,082790 * 10^{-4} * T^2 - 26,42469 * X_{\text{N}_2}^2 + 4,927648 * 10^{-8} * T^3 + 38,93727 * X_{\text{N}_2}^3 \quad \text{Ecuación 19}$$

6. CONDICIONES DE OPERACIÓN Y OTRAS CONSIDERACIONES

6.1. Condiciones de operación

Como se ha mencionado con anterioridad, se ha escogido trabajar a una presión más baja que las habituales del proceso Haber-Bosch, tomándose 100 bar por ser la temperatura a la que se determinó la cinética con el catalizador de wüstita. Por el mismo, motivo, el ratio H_2/N_2 será próximo a 3, y la temperatura inicial a la que entrará el gas de alimentación al lecho será de 400°C. La temperatura de entrada al siguiente lecho suele ser de aproximadamente 80°C menos que la temperatura de salida del primer lecho para obtener un buen balance entre costos de equipo del intercambiador y una buena aproximación a la temperatura óptima. (26)

6.2. Consideraciones para la modelización del reactor

En base a lo explicado anteriormente y con apoyo de la bibliografía consultada, para el planteamiento matemático de la modelización del reactor se han tenido en cuenta los siguientes aspectos: (24) (26) (27)

- Operación en estado estacionario.
- Resistencia al transporte entre las partículas de catalizador y el gas despreciable.
- Temperatura del gas reactante a través del lecho igual al de las partículas del catalizador para cada posición.
- Gradientes interpartícula despreciables como consecuencia de las altas velocidades en el reactor a escala industrial.
- Consideración de la difusión intrafase mediante el factor de efectividad catalítica mediante la *Ecuación 19*.

Las ecuaciones del modelo pseudohomogéneo para un reactor de lecho fijo pueden ser utilizadas para un reactor en flujo radial tan sólo reemplazando la longitud de lecho Z , por la distancia radial r . La posición de entrada al reactor se corresponde con el radio exterior del distribuidor, mientras que la posición de salida se corresponde con el radio interior de la cesta del catalizador. Además, dado que el gasto másico G ($\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$) depende del área, ha de tenerse en cuenta que el área transversal no es constante, siendo esta dependiente de la posición del radio y la longitud del lecho del catalizador en la dirección axial. (9)

7. BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

Para poder evaluar el perfil de concentraciones de los diferentes compuestos en función del radio del reactor, así como el perfil de velocidades, es necesario conocer las dimensiones del mismo: radio interno, radio externo y longitud de lecho. Para ello, en primer lugar, ha de calcularse la cantidad de catalizador necesaria para los 2 lechos. Con las condiciones de operación de este proceso (típicas del proceso Mont Cenís), se sabe que la conversión por paso del nitrógeno está entre el 9 y el 20%. La conversión de cada lecho vendrá dada por la conversión de equilibrio, considerando que se consigue una conversión de entre el 80-90% de la de equilibrio. (28)

7.1. Balance de materia

Partiendo del balance general de materia para uno de los reactivos presentado en la *Ecuación 20*, se realiza un balance de materia para un elemento infinitesimal del lecho radial del catalizador expresada en la *Ecuación 21*. (29) (30)

$$\text{Entrada-Salida+Generación=Acumulación} \quad \text{Ecuación 20}$$

$$F_A|_W - F_A|_{W+\Delta W} + r'_A * \Delta W = 0 \quad \text{Ecuación 21}$$

Siendo F_A el flujo molar del reactivo A; r'_A , la velocidad de formación del reactivo A expresada por masa de catalizador; y W , la masa del catalizador. (30)

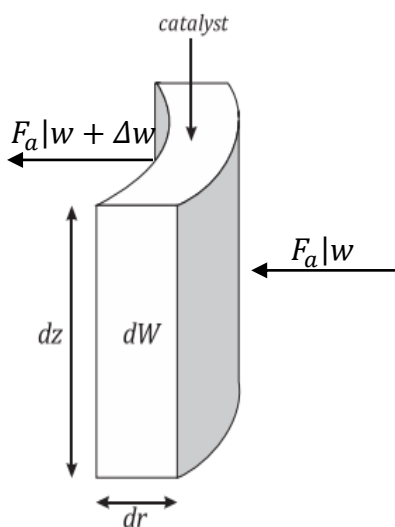


Figura 6. Incremento de volumen del lecho de catalizador (15)

Si se divide la expresión anterior entre el incremento de la masa de catalizador ΔW y esta se hace tender el límite a 0, entonces se obtiene la ecuación diferencial presentada en la *Ecuación 22*. (30)

$$-dF_A + r'_A * dW = 0 \quad \text{Ecuación 22}$$

Para poder calcular la masa de catalizador es necesario que la ecuación cinética esté expresada en unidades de masa de catalizador, expresada como r'_{NH_3} . Dado que la velocidad de formación de amoníaco viene dada por metros cúbicos de lecho de catalizador y se conoce la densidad aparente del catalizador, denotada por ρ_b , es posible calcular r'_{NH_3} mediante la *Ecuación 23*: (29)

$$r_{NH_3} = \rho_b * r'_{NH_3} \quad \text{Ecuación 23}$$

Combinando la Ecuación 22 y la Ecuación 23 se llega a la expresión siguiente (Ecuación 24):

$$\frac{dF_{NH_3}}{dW} = \frac{\eta * r_{NH_3}}{\rho_b} = \eta * r'_{NH_3} \quad \text{Ecuación 24}$$

Realizando un balance de materia al reactor se puede obtener el flujo molar de amoníaco en función de la conversión del nitrógeno, tal y como se muestra en la *Ecuación 25*, que expresada de forma diferencial toma la forma de la *Ecuación 26*.

$$F_{NH_3} = F_{NH_3 in} + 2 * F_{N_2 in} * X_{N_2} \quad \text{Ecuación 25}$$

$$dF_{NH_3} = 2 * F_{N_2 in} * dX_{N_2} \quad \text{Ecuación 26}$$

Substituyendo la Ecuación 26 en la Ecuación 24 se obtiene el balance de materia en función de la masa de catalizador en forma diferencial (*Ecuación 27*):

$$\frac{dX_{N_2}}{dW} = \frac{\eta * r'_{NH_3}}{2 * F_{N_2 in}} \quad \text{Ecuación 27}$$

Donde:

W_b : masa de catalizador del lecho en kg

X_{N_2} : conversión de nitrógeno en fracción molar

$F_{N_2, in}$: flujo molar de nitrógeno a la entrada del reactor en kmol/h

r'_{NH_3} : velocidad de producción de amoníaco en kmol/(h*kg_{cat})

Para calcular la masa de catalizador necesaria del segundo lecho se emplea la misma ecuación teniendo en cuenta que parte del gas reactivo ya ha reaccionado hasta la conversión X_1 , por lo que los límites de integración irán desde X_1 hasta X_2 .

Dado que la velocidad de reacción es dependiente de la temperatura, para poder resolver estas ecuaciones es necesario plantear el balance de energía en estado estacionario y para lecho adiabático.

7.2. Balance de energía

Al igual que el balance de materia, el balance de energía se aplica a un elemento infinitesimal de catalizador de manera que se obtiene la siguiente expresión (Ecuación 28):

$$F_T * C_{p,mix} * (T - T_{ref}) \Big|_W - F_T * C_{p,mix} * (T - T_{ref}) \Big|_{W+\Delta W} + \eta * r'_{NH_3} * \Delta H_r = 0 \quad \text{Ecuación 28}$$

De nuevo dividiendo la expresión anterior por ΔW cuando el límite tiende a 0, se obtiene la Ecuación 29, donde el numerador hace referencia exclusivamente a los componentes que intervienen en la reacción, mientras que el denominador incluye la presencia de los inertes: (30)

$$\frac{dT}{dW} = \frac{-\eta * r'_{NH_3} * \Delta H_r}{\sum_{i=1}^n F_i * C_{pi}} \quad \text{Ecuación 29}$$

La entalpía de reacción (ΔH_r) se puede calcular como la suma de la entalpía de reacción estándar de los compuestos que intervienen en la reacción (ΔH_r°) más el calor sensible necesario para pasar de la temperatura de referencia, la cual se corresponde con la temperatura a la cual vienen dadas las entalpías de formación estándar, hasta la temperatura final T. Sin embargo, para el caso del amoníaco, ya que este ha sido muy estudiado a escala industrial debido a su gran relevancia en la industria química, existen ecuaciones empíricas que permiten calcular la entalpía de reacción en las cuales también se incluye el efecto de la presión. En concreto, se ha decidido usar la expresión de Gillespie and Beattie (Ecuación 30) descrita en la bibliografía donde la presión está en atmósferas, la temperatura en kelvin y ΔH_r en kJ/kmol NH_3 . (26)

$$\Delta H_r = \left[P * \left(0,5426 + \frac{840,609}{T} + \frac{4,5973 * 10^8}{T^3} \right) - 5,34685 * T - \frac{2,525 * 10^{-4}}{T^2} + 1,69167 * 10^{-6} * T^3 - 9157,09 \right] * 4,184 \quad \text{Ecuación 30}$$

La capacidad específica de la mezcla en J/(mol*K) se puede calcular a través de la ecuación presentada anteriormente en el Anexo I. A pesar de trabajar a elevada presión y temperatura, se han comparado los calores específicos obtenidos a través de la ecuación ideal con los del simulador Aspen Hysys, pudiéndose afirmar que la mezcla presenta un comportamiento muy próximo al ideal. (31)

7.3. Dimensiones del lecho

A partir de la masa de catalizador se pueden hallar las dimensiones del lecho relacionando la masa del catalizador con el volumen del lecho, tal y como se muestra en la Ecuación 31.

$$dW = \rho_b * dV_{lecho} \quad \text{Ecuación 31}$$

A su vez el volumen del lecho del catalizador se puede obtener empleando la ecuación *Ecuación 32*. Como se puede observar en la Figura 7, la masa de catalizador se encontraría encerrada entre la pared interna de radio R_i , la cual se corresponde con el radio externo de la tubería central donde llega la mezcla gaseosa tras atravesar el lecho, y la pared externa de radio R_o , siendo esta el radio interno del canal anular.

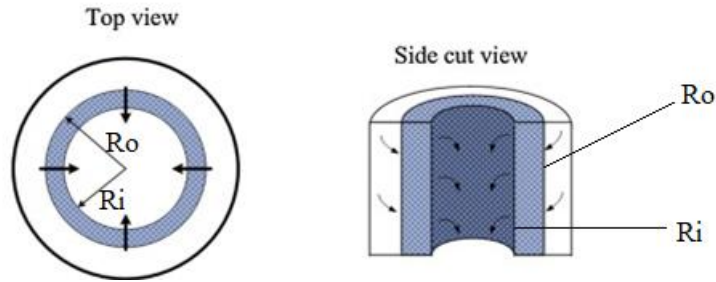


Figura 7. Vistas de la configuración del reactor, en color azul se representa el lecho catalítico (36)

$$V_{lecho} = \pi * r^2 * L \quad \text{Ecuación 32}$$

Si se fija una longitud de lecho, entonces el diferencial de volumen se debe calcular respecto a la variación del radio del reactor r como se indica en la *Ecuación 33*, donde r toma valores entre R_o y R_i .

$$\frac{dV_{lecho}}{dr} = 2 * \pi * L * r \quad \text{Ecuación 33}$$

Sustituyendo la *Ecuación 33* en la *Ecuación 31* se puede relacionar la masa del catalizador en función de la variación del radio:

$$dW = \rho_b * 2 * \pi * L * r * dr \quad \text{Ecuación 34}$$

Reorganizando la expresión anterior se llega a la *Ecuación 35*, la cual será la empleada para resolver el problema:

$$\frac{dr}{dW} = \frac{1}{\rho_b * 2 * \pi * L * r} \quad \text{Ecuación 35}$$

De nuevo se ha empleado el método de Euler para resolver la ecuación diferencial estableciendo como condición inicial el radio externo del lecho, R_o , que se puede proponer a partir de dimensiones típicas comentadas en el apartado *Canasta del catalizador*, y la longitud del lecho. La selección de R_o se basa en la obtención de velocidades típicas a través del lecho y en los espacios anulares (entre la pared del recipiente del reactor y la pared externa del lecho, y entre la pared interna del lecho y la pared externa del intercambiador de calor), además de que se ha tenido en cuenta que el radio interno del primer lecho ha de ser superior al radio externo del intercambiador de calor y el espacio entre estos ha de ser pequeño para conseguir velocidades superiores a 1 m/s, ya que así se facilita la circulación del fluido gaseoso hasta la entrada del

intercambiador de calor. Algunas dimensiones típicas de radios estandarizados son 2, 4, 6 ft.

Por otro lado, la longitud del primer lecho viene impuesta por la longitud estándar de los tubos del intercambiador de carcasa y tubos, mientras que la longitud del segundo lecho se basa en dimensiones estándar de paredes cilíndricas. Además, se han tenido en cuenta las relaciones típicas L/D_{externo} para recipientes verticales a presión en base al Ro calculado, los cuales oscilan entre 2 y 5.

7.4. Balance de cantidad de movimiento

La caída de presión en el lecho se puede determinar a partir de la ecuación de Ergun de forma que así se calculará la caída de presión en función del radio del lecho tal y como se muestra en la *Ecuación 36*: (12)

$$\frac{dP}{dr} = \left(\frac{150(1 - \varepsilon)^2 \mu_f u_r}{\varepsilon^3 d_p^2 \Phi_s^2} + \frac{1,75(1 - \varepsilon) \rho_f u_r^2}{\Phi_s \varepsilon^3 d_p} \right) * 9,869 * 10^{-6} \quad \text{Ecuación 36}$$

Donde ε es la porosidad del lecho; μ_f , la viscosidad dinámica del fluido en Pa*s; u_r , la velocidad superficial del gas en m/s; d_p , el diámetro equivalente de partícula en metros; Φ_s , la esfericidad del catalizador; ρ_f , la densidad del fluido en kg/m³; P , la presión en atmosferas; y r , el radio variable entre Ro y Ri en metros.

La porosidad del lecho o fracción de huecos se define como el volumen del lecho que no está ocupado por el catalizador y se calcula como la relación entre el volumen de huecos y el volumen total. A su vez, el volumen de huecos es igual a la diferencia del volumen del lecho menos el volumen que ocupan las partículas de catalizador, y se este se expresa en función de la masa y la densidad se llega a la *Ecuación 37*. Se ha denotado a la densidad del lecho por ρ_b y la densidad de las partículas por ρ_p , ambas en las mismas unidades, dado que la porosidad es un factor adimensional. Teniendo en cuenta que la densidad del lecho dada por el comerciante varía entre 2900 y 3100 kg/m³ se ha decidido emplear un valor medio para calcular la porosidad. (9)

$$\varepsilon = \frac{V_{\text{huecos}}}{V_{\text{lecho}}} = \frac{V_{\text{lecho}} - V_{\text{partículas}}}{V_{\text{lecho}}} = \frac{\frac{m}{\rho_b} - \frac{m}{\rho_p}}{\frac{m}{\rho_b}} = 1 - \frac{\rho_b}{\rho_p} \quad \text{Ecuación 37}$$

La velocidad superficial del gas se corresponde con la velocidad del gas cuando este atraviesa el lecho vacío y se calcula como el ratio entre caudal de gas (Q_f) y el área transversal (A_t) que traspasa. Dado que el flujo es radial, el área transversal varía en función del radio por lo que la velocidad radial vendrá expresada a través de este. (12)

La velocidad radial que entra al lecho ha de ser igual a la velocidad que existe a la salida de la pared externa denotada por u_{r0} . Dado que la pared cilíndrica está perforada, tal y como se detalla en el apartado *Canasta del catalizador*, ha de tenerse en cuenta que el área de paso será igual a la superficie abierta de la chapa perforada, presentada en la *Ecuación 38*. Por tanto, debe tenerse en cuenta un factor que representa el porcentaje de

área abierta sobre el área total de la pared y que se ha denotado como Ω , la cual toma valores de entre 0 y 1 en la expresión. A su vez el caudal de gas se puede expresar mediante el caudal molar del fluido, la masa molecular y su densidad, los cuales varían con la conversión, la temperatura y la presión. En la Ecuación 39 se presenta la expresión empleada para calcular la velocidad radial del gas. (12) (32)

$$\Omega * \dot{A}_{total} = \dot{A}_{agujero} * N^{\circ}_{agujeros} \quad \text{Ecuación 38}$$

$$u_{ro} = \frac{Q_f}{A_t} = \frac{F_{total} * M_r}{\rho_f 2\pi r L \Omega} \quad \text{Ecuación 39}$$

La velocidad de un reactor radial se puede calcular empleando la Ecuación 40, donde R_o representa el radio externo; ε , la expansión referida al nitrógeno; y P_o y T_o son las condiciones de presión y temperatura, respectivamente. (3)

$$u_r = \frac{u_{ro} * R_o}{r} * (1 + \varepsilon * X_{N_2}) * \frac{P_o}{P} * \frac{T}{T_o} \quad \text{Ecuación 40}$$

La masa molecular de la mezcla puede calcularse como la suma de la multiplicación de la fracción molar de cada compuesto a lo largo de la reacción por su respectiva masa molecular tal y como se expresa en la Ecuación 41, donde el subíndice i representa un compuesto y n es el número total de compuestos.

$$M_r = \sum_{i=1}^n y_i M_{r,i} \quad \text{Ecuación 41}$$

La densidad de la mezcla se puede calcular a través de la ecuación de los gases ideales presentada en la Ecuación 42:

$$\rho_f = \frac{P * M_r}{R * T} \quad \text{Ecuación 42}$$

Mediante la herramienta Case Study de Hysys se ha observado la variación de la viscosidad dinámica (Pa.s) de la mezcla gaseosa desde 100 bar hasta 90 bar y se ha concluido que la influencia de la presión es despreciable en comparación con la temperatura. Por eso, se calculará la viscosidad de la mezcla únicamente en función de la temperatura, concluyendo de nuevo que el comportamiento de la mezcla se puede aproximar por un gas ideal.

La viscosidad de un gas en función de su temperatura se pueda calcular empleando la fórmula de Sutherland, en la que se establece una relación entre la viscosidad inicial del gas y la final a través de la temperatura y dos parámetros a y b dependientes de una constante C conocida como la constante de Sutherland, la cual está definida para una serie de compuestos. Dicha expresión se presenta en la Ecuación 43. (33)

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{a}{b}\right) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \quad \text{Ecuación 43}$$

Siendo a y b definidas en la *Ecuación 44* y la *Ecuación 45* respectivamente, mientras que T_0 representa la temperatura de referencia a la cual se obtuvo la constante de Sutherland. (33)

$$a = 0,555 * T_0 + C \quad \text{Ecuación 44}$$

$$b = 0,555 * T + C \quad \text{Ecuación 45}$$

La ecuación de Sutherland es un ajuste empírico de datos medidos, por lo que el valor de C puede consultarse en función del compuesto:

Tabla 4. Datos de referencia y constantes de Sutherland para los gases implicados (33)

Gas	Constante de Sutherland (C)	T_0 (°R)	$\mu_0 * 10^{-6}$ (Pa*s)
Amoníaco	370	527,67	9,82
Hidrógeno	72	528,93	8,76
Nitrógeno	111	540,99	17,8
Oxígeno	127	526,05	20,2

Para poder calcular la viscosidad de la mezcla en función de la viscosidad de cada fas se ha aplicado la ecuación de Wilke, definida en la *Ecuación 46*, la cual permite calcular la viscosidad de mezclas gaseosas multicomponente. (34) (35)

$$\mu_m = \sum_{i=1}^n \frac{y_i * \mu_i}{\sum_{j=1}^n y_j * \Phi_{ij}} \quad \text{Ecuación 46}$$

Donde y_i representa la fracción molar del compuesto en la mezcla, siendo μ_i la viscosidad correspondiente, y Φ_{ij} es un factor que se calcula a través de la *Ecuación 47*, donde M representa la masa molecular. (34) (35)

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} * \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2} * \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i}\right)^{1/4}\right]^2 \quad \text{Ecuación 47}$$

Dado que la composición del oxígeno es siempre inferior al 0,01% se ha despreciado para simplificar los cálculos. Los resultados se han comparado con la viscosidad de la mezcla obtenida a partir del simulador de Aspen Hysys, consiguiendo resultados muy similares (0,0211 cP en Hysys a 400°C y 0,0251 cP con las ecuaciones implementadas en Matlab).

La caída de presión en el lecho se puede calcular en función de la masa de catalizador mediante la regla de la cadena, de forma que la presión a lo largo del lecho se puede obtener a través de la *Ecuación 48*:

$$\text{Regla de la cadena} \quad \frac{dP}{dr} \frac{dr}{dW}$$

$$\frac{dP}{dW} = \frac{1}{\rho_b * 2 * \pi * L * r} * \left(\frac{150(1 - \varepsilon)^2 \mu_f u_r}{\varepsilon^3 d_p^2 \Phi_s^2} + \frac{1,75(1 - \varepsilon) \rho_f u_r^2}{\Phi_s \varepsilon^3 d_p} \right) * 9,869 * 10^{-6} \quad \text{Ecuación 48}$$

7.5. Resolución matemática

7.5.1. Metodología

Para resolver el sistema de ecuaciones, se debe partir de valores supuestos del radio externo y de la longitud del lecho. Por tanto, estos son los parámetros variables que se irán modificando hasta obtener un radio interno que, en el caso del primer lecho, sea mayor al radio externo del intercambiador, y en el segundo, satisfaga valores de espesor del lecho coherentes. Además, se ha intentado que el radio externo del primer lecho y el segundo fueran los mismos, dado que un mismo diámetro de carcasa para el reactor supondrá menores costes en su fabricación.

Para poder trabajar con conversiones de entre el 80 y el 90% de la conversión de equilibrio, primero ha de suponerse una conversión dentro del rango típico (10-20%) para estimar la temperatura de salida del lecho, y se llevará a cabo un proceso iterativo hasta que la temperatura de salida calculada y la conversión sean próximas al 80-90% a las del equilibrio.

La resolución del reactor se basa por tanto en un proceso iterativo, donde han de tenerse en cuenta varios factores como una adecuada velocidad del lecho, espesores del lecho, dimensiones típicas, etc.

El método numérico empleado ha sido el método de Euler, debido a que es sencillo de programar y no necesita emplear derivadas de la función. Además, permite precisar los resultados disminuyendo el valor del paso. Se ha escogido un paso de 0,1 para la masa de catalizador, ya que se ha comprobado que se obtiene la misma masa de catalizador que con un paso de 0,01, por lo que así se resuelven las ecuaciones en menos tiempo.

7.5.2. Código en Matlab

A continuación, se presenta el código en Matlab para la resolución del primer lecho. Este mismo código se puede emplear para el segundo lecho cambiando las condiciones iniciales, siendo el caudal de alimentación igual al caudal de salida del primer lecho; la temperatura de entrada aproximadamente 80°C menos que la temperatura de salida del primer lecho; y la presión de entrada igual a la diferencia de la presión de entrada del primer lecho (100 bar) menos la caída de presión a través de las paredes perforada, la caída de presión en el lecho, y la caída de presión en la carcasa del intercambiador de calor.

Además, para el segundo lecho, el lazo *while* se ha realizado hasta que se consiguiese el caudal molar de amoníaco necesario para obtener el caudal de producción propuesto teniendo en cuenta la eficacia de separación del equipo flash (*while* FNH3<149,961).

Anexo II: Cálculos justificativos: Parte II: Reactor R-301

```
clear ALL
clc
% Condiciones de entrada al reactor
Ptotal0=100*0.986923; %Se define la presión total inicial en atm
T0=400+273; %Se define la temperatura inicial en kelvin

%Se definen los caudales de entrada de los componentes
FN2_in=328.202; FH2_in=1007.601; FNH3_in=27.241; FO2_in=0.315; %kmol/h
Ftotal_in=FN2_in+FH2_in+FNH3_in+FO2_in; %kmol/h

%Definición de las masas moleculares de los diferentes componentes
MrN2=28.01; MrH2=2.02; MrNH3=17.03; MrO2=32.00; %kg/kmol

%Catalizador y otros parámetros
rho_lecho=3000; %Densidad del lecho en kg/m3
rho_p=5900; %Densidad del catalizador en kg/m3
alfa=0.75; %Introducción del valor de alfa
dp=0.007; %Diámetro equivalente de la partícula
Esf=0.67; %Esfericidad del catalizador
Pb=1-rho_lecho/rho_p; %Porosidad del lecho
omega=0.12; %Fracción de área abierta sobre el área total de la pared externa perforada

%RESOLUCIÓN BALANCES DE MATERIA, ENERGÍA Y CANTIDAD DE MOVIMIENTO
%Definición del paso para la masa de catalizador
dW=0.1;
% Condiciones iniciales
W0=0; %Condición inicial para la masa de catalizador
XN20=0; %Extremo inferior dos valores de conversión do nitrógeno
r0=0.6072; %Condición inicial radio externo
L=1.219;
%Inicializamos los vectores de las diferentes variables
W(1)=W0;
XN2(1)=XN20;
FN2(1)=FN2_in; FH2(1)=FH2_in; FNH3(1)=FNH3_in; FO2(1)=FO2_in; Ftotal(1)=Ftotal_in;
Ptotal(1)=Ptotal0;
T(1)=T0;
r(1)=r0;
i=1; % Se inicia el lazo
while XN2<0.127
    % Se comienza definiendo la fugacidad de los diversos componentes (atm)
    fN2(i)=0.93431737+0.3101804e-3*T(i)+0.295896e-3*Ptotal(i)-0.2707279e-6*T(i).^2+0.4775207e-6*Ptotal(i).^2;
    fH2(i)=exp(exp(-3.8402*T(i).^0.125+0.541).*Ptotal(i)-exp(-0.1263*T(i).^0.5-15.98).*Ptotal(i).^2+300*exp(-0.011901*T(i)-5.941)*(exp((-Ptotal(i)/300)-1))));
    fNH3(i)=0.1438996+0.2028538e-2*T(i)-0.4487672e-3*Ptotal(i)-0.1142945e-5*T(i).^2+0.2761216e-6*Ptotal(i).^2;
    % Se calculan las composiciones molares
    yN2(i)=FN2_in*(1-XN2(i))/(Ftotal_in-2*FN2_in*XN2(i));
    yH2(i)=(FH2_in-3*FN2_in*XN2(i))/(Ftotal_in-2*FN2_in*XN2(i));
    yNH3(i)=(FNH3_in+2*FN2_in*XN2(i))/(Ftotal_in-2*FN2_in*XN2(i));
    yO2(i)=1-yN2(i)-yH2(i)-yNH3(i);
    %Definición de las actividades
    aN2(i)=yN2(i).*fN2(i).*Ptotal(i);
    aH2(i)=yH2(i).*fH2(i).*Ptotal(i);
    aNH3(i)=yNH3(i).*fNH3(i).*Ptotal(i);
    %Constantes de velocidad directa, de equilibrio y reversible
    k1(i)=1.04e10*exp(-32400./(1.987*T(i)));
```

Anexo II: Cálculos justificativos: Parte II: Reactor R-301

```

Ka(i)=10^(-2.691122*log10(T(i))-5.519265e-5*T(i)+1.848863e-7*T(i).^2+2001.6./T(i)+2.6899); %En
atm^-2
k2(i)=k1(i)./Ka(i);
%Cálculo de la velocidad de formación del amoníaco
rNH3(i)=k2(i).*(Ka(i).^2.*aN2(i).*(aH2(i).^3./aNH3(i).^2).^alfa-(aNH3(i).^2./aH2(i).^3).^ (1-alfa));
%Reacción en kmol NH3/(m3 lecho catalizador*h)
rNH3_W(i)= rNH3(i)/rho_lecho; %Reacción en kmol NH3/(kg catalizador*h)
% Efectividad
E(i)=-17.539096+0.07697849*T(i)+6.900548*XN2(i)-1.082790e-4*T(i).^2-
26.42469*XN2(i).^2+4.927648e-8*T(i).^3+38.93727*XN2(i).^3;
% Propiedades del fluido dependientes de la temperatura/composición
Mr(i)=yN2(i)*MrN2+yH2(i)*MrH2+yNH3(i)*MrNH3+yO2(i)*MrO2;
rho_f(i)=Ptotal(i).*Mr(i)./(0.08206*T(i)); % En kg/m3 con R=0.08206 atm.m3/(kmol*K)
Q(i)=Ftotal(i)*Mr(i)/rho_f(i)/3600; %En m3/s
ur0=(Ftotal(1)*Mr(1)/(rho_f(1)*2*pi*L*r0*omega))/3600; %En m/s
%Cálculo de la viscosidad individual de cada componente en Pa*s
viscoN2(i)=17.8e-6*(0.555*540.99+111)./(0.555*T(i)*1.8+111).*(T(i)*1.8/540.99).^1.5;
viscoH2(i)=8.76e-6*(0.555*528.93+72)./(0.555*T(i)*1.8+72).*(T(i)*1.8/528.93).^1.5;
viscoNH3(i)=9.82e-6*(0.555*527.67)./(0.555*T(i)*1.8+370).*(T(i)*1.8/527.67).^1.5;
%Cálculo del factor adimensional de Wilke considerando 1 el N2, 2 el H2 y 3 el NH3
I12(i)=1/sqrt(8)*(1+MrN2/MrH2)^(-0.5)*(1+(viscoN2(i)./viscoH2(i))^0.5*(MrH2/MrN2)^(1/4))^2;
I13(i)=1/sqrt(8)*(1+MrN2/MrNH3)^(-0.5)*(1+(viscoN2(i)./viscoNH3(i))^0.5*(MrNH3/MrN2)^(1/4))^2;
I21(i)=1/sqrt(8)*(1+MrH2/MrN2)^(-0.5)*(1+(viscoH2(i)./viscoN2(i))^0.5*(MrN2/MrH2)^(1/4))^2;
I23(i)=1/sqrt(8)*(1+MrH2/MrNH3)^(-0.5)*(1+(viscoH2(i)./viscoNH3(i))^0.5*(MrNH3/MrH2)^(1/4))^2;
I31(i)=1/sqrt(8)*(1+MrNH3/MrN2)^(-0.5)*(1+(viscoNH3(i)./viscoN2(i))^0.5*(MrN2/MrNH3)^(1/4))^2;
I32(i)=1/sqrt(8)*(1+MrNH3/MrH2)^(-0.5)*(1+(viscoNH3(i)./viscoH2(i))^0.5*(MrH2/MrNH3)^(1/4))^2;
%Cálculo de la viscosidad de la mezcla
visco_f(i)=yN2(i).*viscoN2(i)./(yN2(i)+yH2(i).*I12(i)+yNH3(i).*I13(i))+yH2(i).*viscoH2(i)./(yH2(i)+yN2(i).*I2
1(i)+yNH3(i).*I23(i))+yNH3(i).*viscoNH3(i)./(yNH3(i)+yN2(i).*I31(i)+yH2(i).*I32(i)));

% RESOLUCIÓN DE LAS EDOs MEDIANTE EL MÉTODO DE EULER
%Cálculo de la conversión de nitrógeno
i=i+1;
W(i)=W(i-1)+dW;
XN2(i)=XN2(i-1)+(E(i-1).*rNH3_W(i-1)/(2*FN2_in))*dW;
%Cálculo de los caudales molares
FN2(i)=FN2_in*(1-XN2(i));
FH2(i)=FH2_in-3*FN2_in*XN2(i);
FNH3(i)=FNH3_in+2*FN2_in*XN2(i);
FO2(i)=FO2_in;
Ftotal(i)=FN2(i)+FH2(i)+FNH3(i)+FO2(i);

%Cálculo de la temperatura
CpN2(i-1)=31.15-1.357e-2*T(i-1)+2.6796e-5*T(i-1).^2-1.168e-8*T(i-1).^3; %kJ/(kmol*K)
CpH2(i-1)=27.143+92.738e-4*T(i-1)-1.381e-5*T(i-1).^2+76.415e-10*T(i-1).^3; %kJ/(kmol*K)
CpNH3(i-1)=27.315+23.831e-3*T(i-1)+17.074e-6*T(i-1).^2-1.185e-8*T(i-1).^3; %kJ/(kmol*K)
CpO2(i-1)=28.106-3.680e-6*T(i-1)+1.746e-5*T(i-1).^2-1.065e-8*T(i-1).^3; %kJ/(kmol*K)
deltaHr(i-1)=(Ptotal(i-1).*(0.5426+840.609./T(i-1)+4.5973e8./T(i-1).^3)-5.34685*T(i-1)-2.525e-4./T(i-
1).^2 +1.69167e-6*T(i-1).^3-9157.09)*4.184; %kJ/(kmol NH3)
T(i)=T(i-1)-E(i-1)*rNH3_W(i-1).*deltaHr(i-1)./(FN2(i-1).*CpN2(i-1)+FH2(i-1).*CpH2(i-1)+FNH3(i-
1).*CpNH3(i-1)+FO2(i-1).*CpO2(i-1))*dW; %Kelvin

%Cálculo del radio interno
r(i)=(r(i-1)-1./(rho_lecho*2*pi*r(i-1)*L))*dW; % En metros
%Cálculo de la presión a lo largo del lecho en atm
ur(i-1)=ur0*r0./r(i-1).*(1-0.5014*XN2(i-1))*Ptotal0./Ptotal(i-1).*T(i-1)/T0; %En m/s

```

Anexo II: Cálculos justificativos: Parte II: Reactor R-301

```
Ptotal(i)=Ptotal(i-1)-1./(rho_lecho*2*pi*r(i-1)*L)*(150*(1-Pb)^2*visco_f(i-1).*ur(i-1)/(Pb^3*dp^2*Esf^2)+1.75*(1-Pb)*rho_f(i-1).*ur(i-1).^2/(Esf*Pb^3*dp))*9.869e-6*dW; %En atm
end
%Para que todos los vectores tengan la misma longitud
W(:,i)=[]; XN2(:,i)=[];FN2(:,i)=[]; FH2(:,i)=[]; FNH3(:,i)=[];FO2(:,i)=[]; Ftotal(:,i)=[]; T(:,i)=[];
r(:,i)=[];Ptotal(:,i)=[];
%Se crea una hoja en Excel con la temperatura y la conversión para comparar los datos con la conversión
de equilibrio calculada a parte en una hoja Excel
n=(i-2)/20;%20 nº de pasos que queremos
T_intervalos=T(1:n:(i-1)); T_t=T_intervalos';
XN2_intervalos=XN2(1:n:(i-1)); XN2_t=XN2_intervalos';
Tabla=table(T_t,XN2_t);
writetable(Tabla,'Equilibrio.xlsx','sheet','WriteTable','Range','A3');
%Representaciones caudales vs radio
plot(r,FN2)
title('Evolución de los caudales de N2 y NH3 en función del radio')
xlabel('Radio desde Ri a Ro (m)')
ylabel('Caudal de N2 (kmol/h)')
hold on
yyaxis right
plot(r,FNH3)
ylabel('Caudal de NH3 (kmol/h)')
legend('Caudal de N2','Caudal NH3')
hold off
%Representación velocidad, presión vs radio
plot(r,ur)
title('Evolución de la velocidad y la presión total en función del radio')
xlabel('Radio desde Ri a Ro (m)')
ylabel('Velocidad superficial (m/s)')
hold on
yyaxis right
plot(r,Ptotal)
xlabel('Radio desde Ri a Ro (m)')
ylabel('Presión final (atm)')
legend('Velocidad superficial del gas','Presión total')
hold off
%Representación de la temperatura vs radio
plot(r,T)
title('Evolución de la temperatura en función del radio')
xlabel('Radio desde Ri a Ro (m)')
ylabel('Temperatura (K)')
%Representación catalizador vs caudales
plot(W,FN2)
title('Caudales vs masa de catalizador')
hold on
plot(W,FH2)
plot(W,FNH3)
xlabel('Masa de catalizador (kg)')
ylabel('Caudales en kg/h')
legend('Caudal de N2','Caudal de FH2','Caudal de NH3')
```

El primer lecho se ha resuelto en 17271 iteraciones, mientras que el segundo ha requerido 53856 iteraciones.

7.5.3. Resultados y validación de datos

- DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Los valores de las dimensiones finales para los dos lechos se presentan en la Tabla 5, donde la longitud y el radio externo se han propuesto en base a las dimensiones típicas recogidas en el apartado *Canasta del catalizador*.

Tabla 5. Valores finales de las dimensiones del reactor

	Longitud propuesta (m)	Radio externo propuesto, R_o (m)	Radio interno calculado, R_i (m)
Primer lecho	1,219	0,6072	0,4674
Segundo lecho	1,829	0,6072	0,2371

A partir del valor de R_o y la longitud del lecho se obtuvieron los siguientes resultados para los balances realizados y que se presentan en la Tabla 6.

Tabla 6. Resolución matemática de la modelización del reactor adiabático de 2 lechos con refrigeración intermedia

	Primer lecho	Segundo lecho
T_{in} (°C)	400	420
P_{in} (atm)	98,692	98,603 ¹
$F_{N_2,in}$ (kmol/h)	328,20	286,52
$F_{H_2,in}$ (kmol/h)	1.007,60	882,56
$F_{NH_3,in}$ (kmol/h)	27,24	110,60
$F_{O_2,in}$ (kmol/h)	0,315	0,315
$\Delta H_{r,in}$	-49849	-50167
W (kg)	1727	5386
V_{lecho} (m ³)	0,576	1,795
X_{N_2} (%)	12,7	6,87
$\Delta H_{r,out}$	-51293	-50874
T_{out} (°C)	503,36	469,59
P_{out} (atm)	98,688	98,588
$F_{N_2,out}$ (kmol/h)	286,52	266,84
$F_{H_2,out}$ (kmol/h)	882,56	823,52
$F_{NH_3,out}$ (kmol/h)	110,60	149,96
$F_{O_2,out}$ (kmol/h)	0,315	0,315

Dado que para el primer y el segundo lecho se obtuvieron perfiles similares, a continuación, se presentan algunas de las gráficas más relevantes obtenidas para el primer lecho. En la Figura 8, se presenta la evolución de los caudales molares de los reactivos y el producto en función de la masa de catalizador. Como se puede observar, el caudal de hidrógeno y de nitrógeno tienden a disminuir mientras que, al aumentar la masa de

¹ Teniendo en cuenta la caída de presión en lado de la carcasa del intercambiador de calor, el lecho y las paredes cilíndricas

catalizador, y con ello, el radio del reactor, el caudal de amoníaco producido se incrementa.

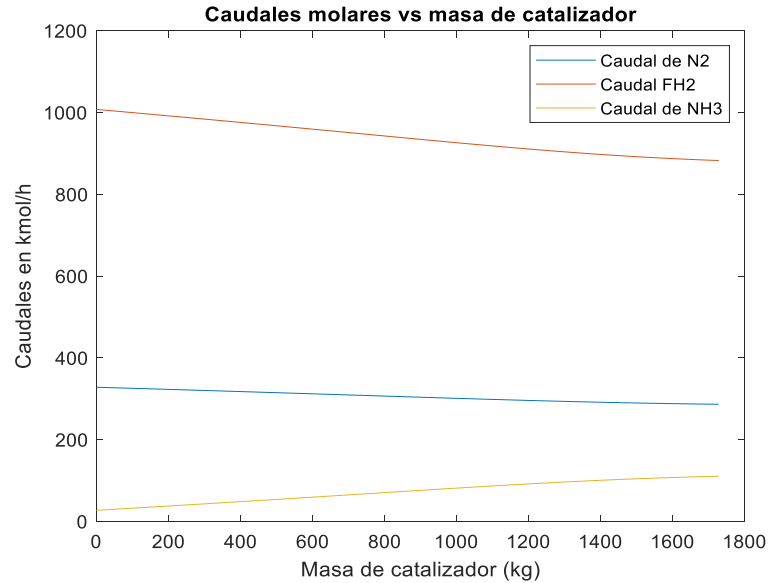


Figura 8. Caudales máxicos frente a la masa de catalizador

Debida a la diferencia entre los caudales de nitrógeno y de hidrógeno esta tendencia no se puede observar claramente en esta gráfica, por lo que, dado que el nitrógeno es el reactivo limitante, se ha decidió representar sólo la evolución del caudal molar de nitrógeno y de amoníaco, pero de esta vez en función del radio. Como era de esperar, el caudal de nitrógeno va disminuyendo desde R_o hasta R_i , mientras que el caudal de amoníaco aumenta a medida que el flujo atraviesa el lecho desde la pared externa hasta la interna, tal y como se puede observar en la Figura 9.

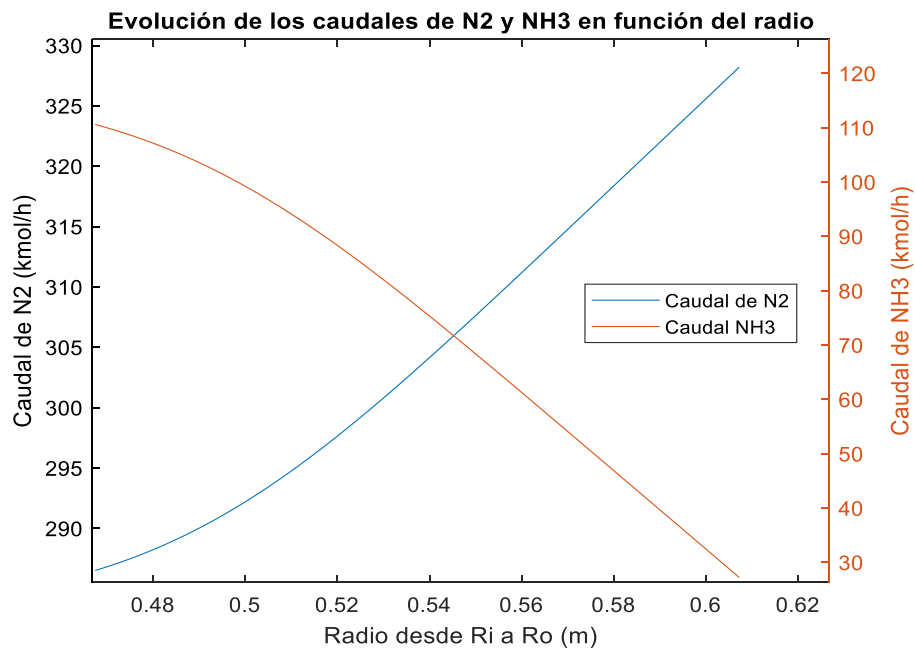


Figura 9. Evolución del caudal de nitrógeno y amoníaco en función del radio para el primer lecho

En la Figura 10, se presenta la evolución de la velocidad superficial del lecho en función del radio. Dado que la relación de la temperatura final e inicial incrementa y la variación del radio disminuye, la velocidad debe aumentar desde R_o hasta R_i . Por otro lado, la presión ha de disminuir a medida que el gas atraviesa el lecho, ya que la velocidad se incrementa. Tal y como cabría esperar para un reactor radial, la caída de presión en el lecho es muy baja, de aproximadamente 0,01 bar, puesto que, en lugar de obtener la caída de presión por longitud se obtiene por radio. La gráfica para el siguiente lecho es similar, aunque presenta un perfil de velocidad y caída de presión más acusados, puesto que el radio interno es menor que el del primer lecho, por lo que se produce un cambio más brusco en el perfil de velocidades.

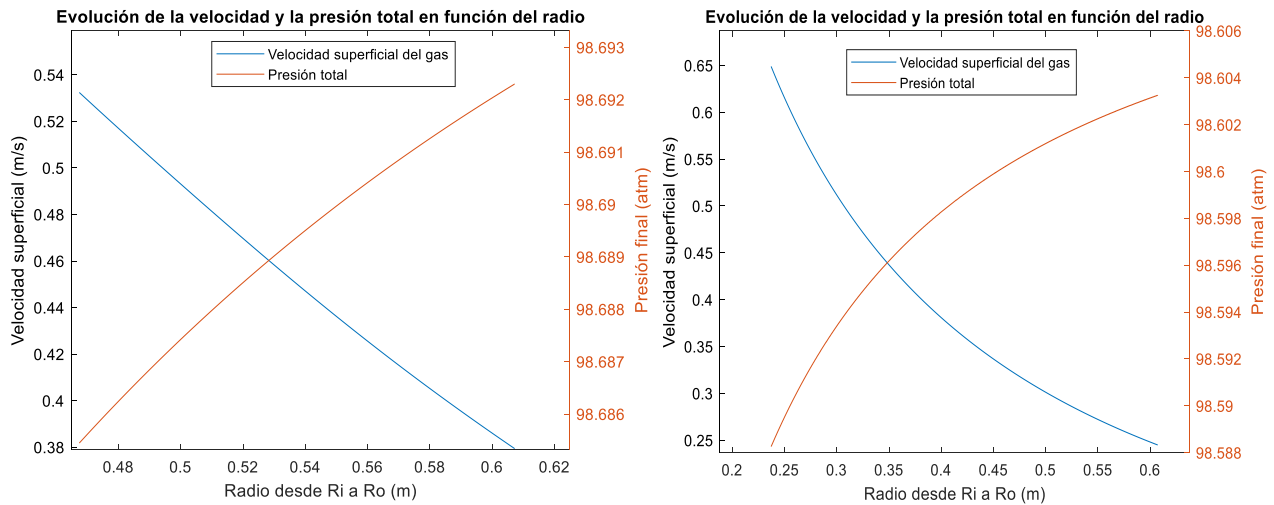


Figura 10. Evolución de la presión y la velocidad en función del radio del lecho para el primer (izquierda) y segundo lecho (derecha)

A medida que la conversión se incrementa desde 0 hasta 12,7, la reacción desprende mayor cantidad de energía, por lo que la temperatura ha de incrementarse a medida que la reacción avanza desde R_o hasta R_i . En la Figura 11, se presenta dicho comportamiento.

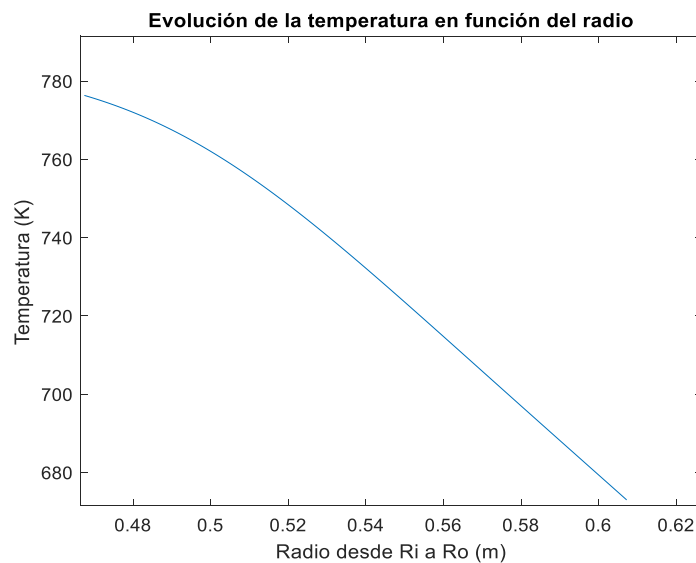


Figura 11. Evolución de la temperatura en función del radio del primer lecho

- VALIDACIÓN DE RESULTADOS

Como se puede observar en la Figura 12, la conversión alcanzada en ambos lechos está próxima a la conversión de equilibrio, calculada a partir de la *Ecuación 3*, pero sin llegar a ser igual. En el primer lecho la relación entre la conversión alcanzada y la del equilibrio es aproximadamente del 85%, mientras que en el segundo lecho toma un valor del 92%, prácticamente dentro del rango recomendado.

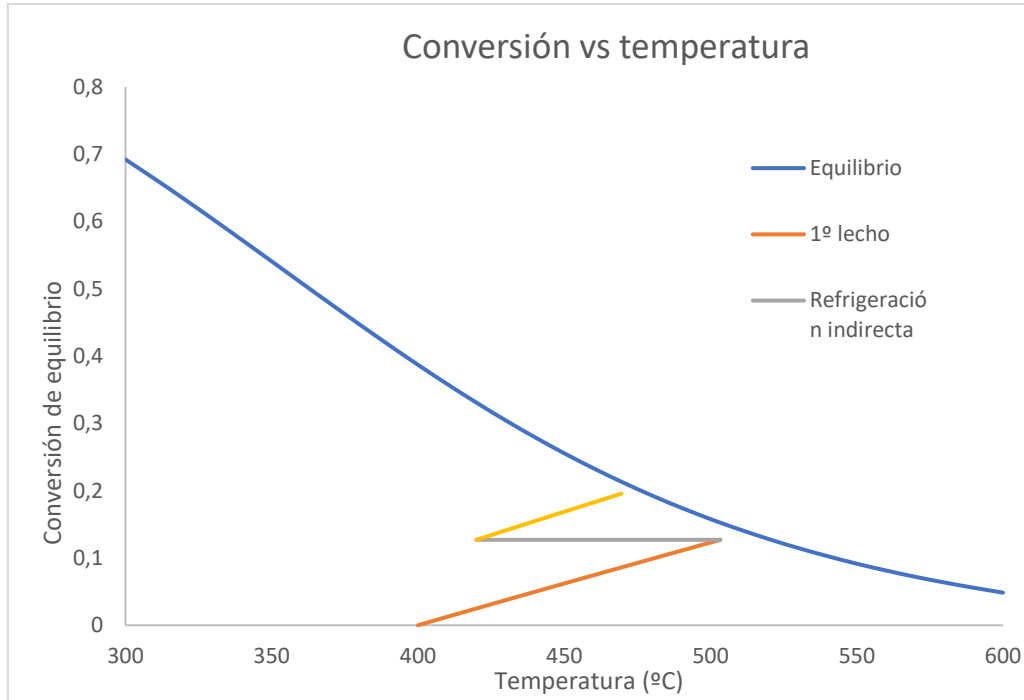


Figura 12. Conversión frente a temperatura

En la Tabla 7, se presentan la masa de catalizador, el volumen del lecho y la conversión total del reactor. La conversión total se encuentra dentro de los rangos típicos para las condiciones de operación impuestas. Por otro lado, se ha comparado el volumen de lecho obtenido con datos disponibles de plantas de producción de amoníaco. En concreto se han tomado los datos del diseño y la operación de un convertidor radial de Haldor-Topsoe, por ser muy similar al reactor diseñado. Para la producción de 200 toneladas diarias, el volumen de catalizador necesario es de 238ft³ (6,74 m³), por lo que teniendo en cuenta una producción de 50 tpd, aplicando un factor de conversión, el volumen de lecho sería aproximadamente de 1,685 m³, próximo al calculado de 1,206 m³. (17)

Tabla 7. Cantidad de catalizador necesaria y conversión total alcanzada a la salida del reactor

Cantidad de catalizador necesaria y conversión alcanzada	
W_{total} (kg)	7113
$V_{\text{catalizador}}$ (m ³)	1,206
$V_{\text{lecho,total}}$ (m ³)	2,371
X_{N_2}	19,57

En la Tabla 8, se presenta el balance de materia al reactor y se comprueba el cierre de los balances.

Tabla 8. Comprobación del cierre del balance de materia del reactor R-301

	Primer lecho		Segundo lecho	
	Entrada	Salida	Entrada	Salida
F_{N_2} (kg/h)	9193,93	8026,30	8026,30	7475,05
F_{H_2} (kg/h)	2031,32	1779,23	1779,23	1660,22
F_{NH_3} (kg/h)	463,92	1883,59	1883,59	2553,83
F_{O_2} (kg/h)	10,10	10,10	10,10	10,10
F_{total} (kg/h)	11699,26	11699,22	11699,22	11699,20
Error de cierre	0,00 %		0,00%	

8. INTERCAMBIADOR DE CALOR

En los reactores axial-radial o radiales que emplean refrigeración indirecta entre lechos, suelen emplear intercambiadores de carcasa y tubos, por lo que este será el tipo de intercambiador a diseñar. Como se ha mencionado con anterioridad, en los reactores con refrigeración indirecta también se puede realizar integración energética, empleando el calor del fluido reaccionado para incrementar la temperatura del gas de alimentación hasta la temperatura del lecho. (15)

En primer lugar, se ha de definir que fluido circulará por tubos y cual por carcasas. En el diseño del intercambiador de carcasa y tubos de este tipo de reactor, para facilitar el diseño, el gas de alimentación circula por los tubos (fluido frío), mientras que el gas ya reaccionado (fluido caliente), circula por la carcasa. Una vez asignado los fluidos a tubos y a la carcasa, se deben definir los caudales y las temperaturas de los fluidos para poder realizar el balance de energía al intercambiador de calor. En la Tabla 9, se presenta el balance de energía, donde a partir de los datos conocidos, se calcula la temperatura de entrada del gas de alimentación al intercambiador. T_1 representa la temperatura de entrada al intercambiador del fluido caliente; T_2 , la temperatura de salida del fluido caliente; t_1 , la temperatura de entrada al intercambiador del fluido frío; y t_2 , la temperatura de salida del fluido frío. (15)

Tabla 9. Balance de energía al intercambiador de calor del primer lecho

Balance de energía al intercambiador de calor			
Caudal molar del gas reaccionado (kmol/h)	1280,0	Qabsorbido (kJ/h)	$3,369 \cdot 10^6$
T_1 (°C)	503,36	Caudal molar del gas de alimentación (kmol/h)	1.363,4
T_2 (°C)	420,00	t_1 (°C)	317,55
T_{media} (°C)	461,68	t_2 (°C)	400,00
C_p , medio (kJ/(kmol*K))	31,580	T_{media} (°C)	358,78

Qcedido (kJ/h)	-3,369*10 ⁶	Cp, medio (kJ/(kmol*K))	29,970

Una vez conocidos los datos anteriores se puede aplicar la ecuación general de transferencia de calor, donde Q está expresado en J/s (W), U representa el coeficiente de transferencia de calor global en W/(m²*°C), A es el área de transferencia de calor en m², y ΔT_{ml} es la temperatura media logarítmica en °C. (15)

$$Q = U * A * \Delta T_{ml} \quad \text{Ecuación 49}$$

El valor del coeficiente de transferencia global se comienza suponiendo en base a valores recomendados y finalmente se recalcula hasta que el error entre el U supuesto y el calculado sea inferior al 5%. Para gases a elevada presión el rango típico del valor del coeficiente global de transferencia de materia oscila entre 150 y 500 W/(m²*°C). (36)

A su vez la temperatura media logarítmica se puede calcular a través de la Ecuación 50. (15)

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{(T_1 - t_2)}{(T_2 - t_1)}} \quad \text{Ecuación 50}$$

Sin embargo, en el diseño de intercambiadores de tubo y carcasa se suele estimar la diferencia de temperaturas real aplicando un factor de corrección de temperatura y que para un intercambiador con un paso por carcasa y dos pasos por tubos se puede calcular empleando la Ecuación 51. Como se ha considerado un paso por carcasa y dos pasos por tubos para el diseño se podrá obtener dicho factor mediante esta ecuación. (15)

$$F = \frac{\sqrt{(R^2 + 1) * \ln \left[\frac{(1 - S)}{(1 - R * S)} \right]}}{(R - 1) * \ln \left[\frac{2 - S * [R + 1 - \sqrt{R^2 + 1}]}{2 - S * [R + 1 + \sqrt{R^2 + 1}]} \right]} \quad \text{Ecuación 51}$$

Donde R y S son dos relaciones adimensionales de temperaturas y que se calculan a través de la Ecuación 52 y Ecuación 53, respectivamente. (15)

$$R = \frac{T_1 - T_2}{t_2 - t_1} \quad \text{Ecuación 52}$$

$$S = \frac{t_2 - t_1}{T_1 - t_1} \quad \text{Ecuación 53}$$

Dado que el calor intercambiado se obtiene previamente a partir del balance de energía al fluido, U es un valor supuesto y ΔT_{ml} y F se pueden calcular con sus respectivas ecuaciones, se puede obtener el área (A) a partir de la Ecuación 49. En la Tabla 10, se presentan los resultados obtenidos para el último valor de U supuesto en las iteraciones.

Tabla 10. Determinación del área de intercambio de calor

Q (W)	935926
$U_{\text{supuesto}} \text{ (W/(m}^2\text{*}^\circ\text{C))}$	389,0
$\Delta T_{ml} \text{ (}^\circ\text{C)}$	102,9
F	0,8804
$\Delta T_{ml, \text{modificada}} \text{ (}^\circ\text{C)}$	90,60
A (m ²)	26,56

Como se puede observar, el valor de F es superior a 0,85, lo cual indica que el diseño es viable económicamente, mientras que si este es inferior no se justifica.

A partir del área se puede calcular el número de tubos total suponiendo un diámetro exterior y longitud de tubos. De acuerdo con la normativa TEMA, algunas longitudes típicas de tubos son 6 ft, 8 ft, 12 ft, 16 ft, 20 ft y 24 ft, mientras que se recomienda emplear un diámetro externo de tubo de ¾" (19mm) para inicializar los cálculos. Dado que la longitud de 6 ft, conduce a un espesor de lecho muy bajo, se empleará una longitud de tubo de 4 ft (1,22 m) y el diámetro externo propuesto por la normativa. El número de tubos totales se puede calcular empleando la Ecuación 54. (31)

$$N_{\text{tubos}} = \frac{A}{\pi * D_o * L} \quad \text{Ecuación 54}$$

En la Tabla 11, se presentan las dimensiones estandarizadas escogidas para el diseño del intercambiador entre lecho.

Tabla 11. Dimensiones estándar de tubos y cálculo del número de tubos

Diámetro interno tubo (mm)	15,75
Espesor (mm)	1,65 (Gauge 16)
Diámetro externo tubo (mm)	19,05
Longitud de tubo (m)	1,219
Número de tubos	364

Una vez determinado el número de tubos y sus dimensiones se puede calcular la separación entre tubos. Para una disposición de tubos triangular, la separación entre centros, conocida como pitch, se puede estimar como 1,25*d_o, siendo d_o el diámetro externo del tubo. A partir del pitch, el número de tubos y el diámetro externo se puede calcular el diámetro de haz de tubos mediante la Ecuación 55, donde n y K₁ se encuentran tabulados en función de la disposición de tubos, en este caso triangular, y el número de pasos por tubo, que se ha tomado de 2. (31)

$$D_b = d_o * \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{1/n} \quad \text{Ecuación 55}$$

En la Tabla 12, se presentan los resultados obtenidos para la disposición de tubos y el diámetro de haz de tubos.

Tabla 12. Disposición de tubos y diámetro de haz de tubos

Pitch triangular (mm)	23,813
K1	0,249
n	2,207
D _b (m)	0,518

El diámetro interno de la carcasa se ha de dimensionar teniendo en cuenta una separación respecto al diámetro de haz de tubos calculada. Para un intercambiador de tubos con cabezal flotante de anillo partido y un diámetro de haz de 518 mm, el margen se establece en 58 mm, el cual se puede obtener gráficamente conociendo el diámetro de haz y el tipo de intercambiador a partir de la bibliografía. Una vez obtenido el diámetro interno de la carcasa este se ha de estandarizar. El diámetro superior más próximo al calculado en base a la normativa TEMA es de 591 mm. (31)

A partir del diámetro interno estandarizado de la carcasa se puede estimar la separación entre los baffles (B), ya que estos se consideran entre un 20-100% del diámetro interno de la carcasa. En este caso, se ha supuesto un 50% para obtener velocidades dentro del rango recomendado, por lo que la distancia entre baffles resulta de 0,296 m.(31)

Una vez determinadas las dimensiones del intercambiador ha de comprobarse que las velocidades del gas se encuentran dentro de los rangos típicos recomendados. Para ello ha de comprobarse la velocidad por tubos y por carcasa. La velocidad por tubos se puede calcular a través de la Ecuación 56, donde d_i representa el diámetro interno de los tubos del intercambiador; N_{tubos} , el número de tubos; m , el caudal másico; y P el paso por tubos.

$$v_{tubos} = \frac{\dot{m}}{\rho * \pi * \frac{d_i^2}{4} * N_{tubos} * P} \quad \text{Ecuación 56}$$

Para calcular la velocidad por carcasa ha de calcularse el diámetro equivalente del diámetro de carcasa que para pitch triangular de tubos se calcula de acuerdo con la Ecuación 57, donde P_T hace referencia al pitch, y d_o , el diámetro externo de tubos.

$$D_e = 4 * \left(\frac{P_T^2 * \frac{\sqrt{3}}{2} - \pi * d_o^2 / 8}{\pi * d_o} \right) \quad \text{Ecuación 57}$$

Para calcular el área de paso ha de emplearse la Ecuación 60, que será utilizada para determinar el gasto másico a través de la Ecuación 59, y esta a su vez, se empleará en la determinación de la velocidad (Ecuación 76).

$$A_s = D_s * B \left(\frac{P_T - d_o}{P_T} \right) \quad \text{Ecuación 58}$$

$$G_s = \frac{m}{A_s} \quad \text{Ecuación 59}$$

$$v_{carcasa} = \frac{G_s}{\rho} \quad \text{Ecuación 60}$$

En la Tabla 13, se presentan los resultados obtenidos para la comprobación de la velocidad tanto por carcasa como por tubos.

Tabla 13. Comprobación de la velocidad en tubos

Comprobación de velocidad en carcasa		Comprobación de velocidad en tubos	
D _e (m)	0,0233	Caudal másico (kg/s)	3,25
As (m ²)	0,0349	Densidad (kg/m ³)	15,88
C ₂	0,0048	Sección (m ²)	1,95*10 ⁻⁴
Caudal másico (kg/s)	93,04	Velocidad (m/s)	5,77
G _s (kg/(m ² *s))	3,25		
Velocidad (m/s)	6,37		

Finalmente ha de comprobarse que el coeficiente de transferencia de calor global supuesto es igual al calculado, admitiéndose un error del 5%. Para ello ha de emplearse la Ecuación 77:

$$\frac{1}{U_o} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o * \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2 * k_w} + \frac{d_o}{d_i} * \frac{1}{h_{id}} + \frac{d_o}{d_i} * \frac{1}{h_i} \quad \text{Ecuación 61}$$

Donde U_o representa el coeficiente global basado en el área exterior del tubo; h_o , el coeficiente de la película del fluido exterior, h_i , el coeficiente de la película del fluido interior, h_{od} , el coeficiente de suciedad exterior, h_{id} , el coeficiente de suciedad interior, k_w , la conductividad térmica del material de la pared del tubo, d_i , el diámetro interno del tubo y d_o , el diámetro externo.

El cálculo de los coeficientes de película depende de las propiedades del fluido y la naturaleza de la transferencia de calor. Para conocer si se da convección natural, forzada o una combinación de ambas, se ha determinado el Grashof y el Reynolds, ya que para $Gr/Re^2 < 1$ se puede despreciar la convección natural, si es mucho mayor que 1 entonces prevalecerá la convección natural, y si el valor obtenido es próximo a 1 se dará una combinación entre ambas. El valor calculado a partir de las propiedades del fluido y teniendo en cuenta el valor del diámetro equivalente ha sido de $2,76 \cdot 10^{-6}$, por lo que se han de tomar las correlaciones para convección forzada tanto en tubos como en carcasa.

El coeficiente de la película del lado de tubos se puede calcular empleando la correlación de Seider-Tate, teniendo en cuenta que se cumplen las condiciones que impone ($L/D_{tubo} > 60$), que sirve tanto para disposición vertical como horizontal. Cabe destacar que el intercambiador estará dispuesto verticalmente y situado entre las paredes de la pared cilíndrica interna del primer lecho. (37)

El coeficiente de convección se calcula empleando la Ecuación 62:

$$h_i = \frac{Nu}{d_i} \quad \text{Ecuación 62}$$

La correlación que permite calcular el Nusselt se presenta en la Ecuación 63, donde el Reynolds se ha obtenido mediante la Ecuación 76, el Pr es el Prandtl, que se ha obtenido a partir de la Ecuación 77, donde el resto de los datos han sido obtenidos a partir de Aspen HYSYS, y μ_B y μ_w representan la viscosidad dinámica del fluido referidas a la temperatura media y a la temperatura de la pared. La temperatura de la pared ha de recalcularse y comprobar que es próxima a μ_B siguiendo las ecuaciones propuestas en la bibliografía. (31)

$$Nu = 0,023 * Re^{0,8} * Pr^{0,33} * \left(\frac{\mu_B}{\mu_w}\right)^{0,14} \quad \text{Ecuación 63}$$

$$Re = \frac{\rho * d_i * v_{tubos}}{\mu} \quad \text{Ecuación 64}$$

$$Pr = \frac{C_p * \mu_B}{k_{fluido}} \quad \text{Ecuación 65}$$

En la Tabla 14, se presentan los datos obtenidos para el cálculo del coeficiente de la película del fluido interno: (37)

Tabla 14. Determinación del coeficiente de la película del fluido interno

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
T _{media} (°C)	358,78	$\left(\frac{\mu_B}{\mu_w}\right)^{0,14}$	1,000
Densidad (kg/m ³)	15,88	k (W/(m*K))	0,189
C _p (J/(kg*K))	3493,03	Velocidad tubos (m/s)	5,77
μ_B (Pa*s)	2,01*10 ⁻⁵	Re	71981,58
T pared (°C)	384,905	Pr	0,370
μ_w (Pa*s)	2,01*10 ⁻⁵	Nu	127,32
h_i (W/(m ² *K))	1531,96		

Para calcular el coeficiente de la película del fluido externo se empleará la ecuación de Donohue (Ecuación 78), apta tanto para disposición vertical como horizontal, donde el término G_c, se calcula en base a la Ecuación 79; G_b representa el gasto másico a través de los baffles (Ecuación 68); S_b se calcula a través de la Ecuación 69; f_b toma el valor de 0,1955 y Nb se calcula a través de la Ecuación 70. (38)

$$h_o = 0,2 * \left(\frac{d_o * G_c}{\mu}\right)^{0,6} * \left(\frac{C_p * \mu}{k}\right)^{0,33} * \frac{k}{d_o} \quad \text{Ecuación 66}$$

$$G_c = \sqrt{G_b * G_s} \quad \text{Ecuación 67}$$

$$G_b = \frac{m}{S_b} \quad \text{Ecuación 68}$$

$$S_b = f_b * \left(\frac{\pi * D_s^2}{4} \right) - N_b * \left(\frac{\pi * d_o^2}{4} \right) \quad \text{Ecuación 69}$$

$$N_b = \frac{L_{tubo}}{B} - 1 \quad \text{Ecuación 70}$$

En la Tabla 15 se presentan los resultados para la determinación del coeficiente de la película del fluido externo.

Tabla 15. Determinación del coeficiente de la película del fluido h_{externo}

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
Tmedia (°C)	461,68	Nb	3,129
G _c (kg/(m ² *s))	75,897	D _o (m)	0,019
G _b (kg/(m ² *s))	61,912	G _s (kg/(m ² *s))	93,042
m _s (kg/s)	3,250	A _s (m ²)	0,035
S _b (m ²)	0,052	k (W/(m*K))	0,199
f _b	0,196	Viscosidad (Pa*s)	2,23*10 ⁻⁵
D _s (m)	0,591		
h _o (W/(m ² *K))	1177,891		

Para el coeficiente de suciedad interno y externo se ha tomado el valor correspondiente al del aire, por ser el fluido más semejante. El valor del coeficiente del coeficiente de ensuciamiento para el aire es igual a 2500 W/(m²*K), mientras que la conductividad del acero inoxidable es de 21,20 W/(m*K), por lo que resolviendo la Ecuación 61 se obtiene un valor de U de 383,44 W/(m²*K), siendo el error relativo respecto al valor supuesto de 1,45%.

Finalmente se ha calculado la caída de presión a través de la carcasa y los tubos empleando sus respectivas ecuaciones (Ecuación 71 a Ecuación 75): (37)

$$\Delta P_{\text{carcasa}} = \frac{f_{\text{carcasa}} * G_c^2 * D_s * (N_b + 1)}{2 * g * \rho * D_e} \quad \text{Ecuación 71}$$

$$f_{\text{carcasa}} = \exp(0,576 - 0,19 * \ln(Re_s)) \quad \text{Ecuación 72}$$

$$Re_s = \frac{D_e * G_c}{\mu} \quad \text{Ecuación 73}$$

$$\Delta P_{\text{tubos}} = \left[4 * f_{\text{tubos}} * \frac{P}{d_i} + 4 * P \right] * \frac{1}{2} * \rho * v_{\text{tubos}}^2 \quad \text{Ecuación 74}$$

$$f_{\text{tubos}} = (1,58 * \ln(Re) - 3,28)^{-2} \quad \text{Ecuación 75}$$

A continuación, se presentan los resultados obtenidos en la Tabla 16. Los datos no reflejados en la tabla se corresponden con los anteriormente calculados. (37)

Tabla 16. Determinación de las caídas de presión en el intercambiador

Caída de presión en el lado de carcasa		Caída de presión en el lado de carcasa	
ΔP _{carcasa} (Pa)	7541,34	ΔP _{tubos} (Pa)	202,38

f_{carcasa}	0,201	f_{tubos}	0,00483
Re_{carcasa}	97133,17	Densidad	15,88
Viscosidad (Pa*s)	$2,23 \cdot 10^{-5}$	(kg/m ³)	
Nb	4,000		
Densidad (kg/m ³)	14,61		

Los valores de caída de presión son inferiores a los límites recomendados, por lo que se da por válido el diseño del intercambiador.

9. DIMENSIONAMIENTO DEL EQUIPO

9.1. Canasta del catalizador

El catalizador se encuentra encerrado entre dos paredes cilíndricas concéntricas, que permiten su sujeción y el paso del flujo a través de este. Los accesorios más comúnmente utilizados como pared exterior en los reactores radiales son: las cestas o canastas (imagen de la derecha) y un conjunto de tubos con forma prácticamente semicircular con perforaciones (imagen de la izquierda), presentadas en la Figura 13. (18)

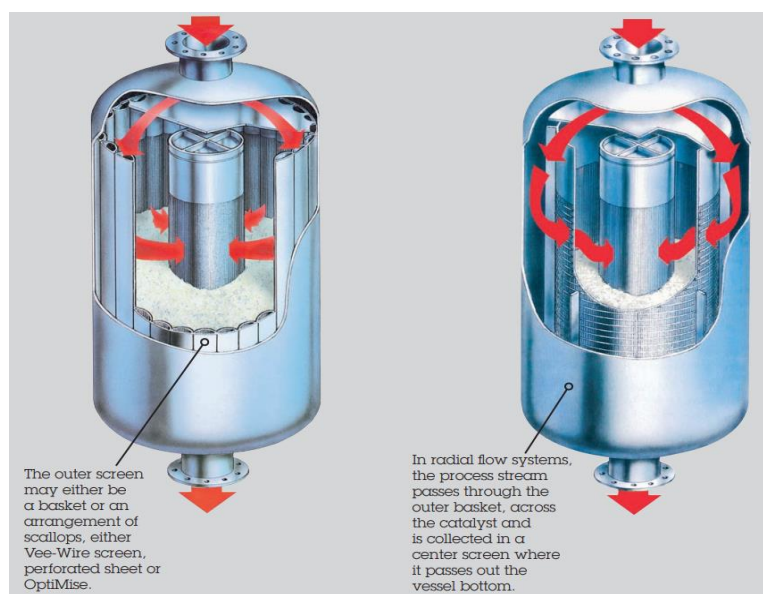


Figura 13. Configuraciones de la pared externa del anillo cilíndrico. (42)

Las cestas de catalizador se colocan paralelamente al colector o tubería central en forma de círculo con radio interno igual al radio externo calculado para el catalizador. De esta forma, la superficie interior de las cestas delimita el lado exterior del lecho del catalizador y permite distribuir el flujo. Las canastas más comunes son aquellas formadas por una chapa metálica que posee perforaciones a lo largo de la pared lateral, a través de las cuales circula el fluido, y el mallado metálico. En ambos casos, las dimensiones de las aberturas están estandarizadas, así como el espesor del material y el porcentaje de área de paso respecto al área total.

La elección de una u otra depende de algunos factores:

- Coste

Un accesorio con mayor soldadura incrementa notablemente el coste del producto final, por lo que el mallado metálico es mucho más caro que la chapa perforada. Esta última tiene menos puntos de contacto que deben de ser soldados en comparación con la malla perforada, especialmente si se necesita un espacio abierto mínimo. (39)

En el caso del reactor de amoníaco, como se maneja un caudal mucho menor en comparación con las grandes escalas, la velocidad radial también se ve reducida, por lo que para que esta se encuentre en rangos recomendados, ha de minimizarse el área de paso del fluido que entra al lecho.

- Área de paso

En general, el área de paso del mallado metálico oscila entre el 20 y el 80% del área lateral total de la canasta, mientras que en las chapas perforadas se encuentra en torno al 50%, por lo que el mallado permite aumentar el área de paso. Además, en caso de aumentar la producción, este permite aumentar el área de paso más fácilmente, ya que en la chapa perforada implica realizar más cortes en la hoja. Sin embargo, dado que en este proyecto se busca la implantación de la pequeña escala y se necesita una menor área de paso, las hojas metálicas perforadas son la mejor opción. (39)

- Aplicación

En procesos donde se trabajen con fluidos sucios y se requiera una limpieza regular, las mallas metálicas son mucho más prácticas y fáciles de limpiar. Dado que no es el caso, las canastas constituidas por una chapa metálica perforada constituyen una posible opción frente a los tubos semicirculares (con forma de concha).

Por tanto, en base a lo discutido anteriormente se escoge la chapa perforada. Otro factor que influye en el coste son la forma y la disposición de las perforaciones. Dado que los orificios circulares son los más económicos y el patrón escalonado de 60° es el más fuerte y versátil, debido a la amplia variedad de área de paso que proporciona, por lo que esta disposición será la seleccionada. (40)

Como se mencionó anteriormente, existen estándares para el diámetro de las perforaciones, el espesor, la disposición y el área de paso total. La Asociación de Perforadores Industriales (IPA) establece distintos estándares de los cuales se ha escogido la pared perforada de un diámetro de 3/32'' (2,381 mm) con una separación entre centros de 1/4'' (6,35 mm) y un área abierta del 12%, ya que permite obtener velocidades de entre 0,3 y 0,5 m/s, las cuales se encuentran dentro del rango consultado. En base a datos bibliográficos, en los reactores radiales para pequeña escala, que operan con caudales volumétricos de entre 0,02 y 0,12 m³/s, próximos al caudal de operación (0,21-0,23 m³/s), la velocidad radial a la entrada del lecho debe estar en el rango de 0,05-0,7 m/s. (41)

El espesor de chapa puede variar desde los 0,3 mm hasta los 25,4 mm y se encuentran estandarizados. El tamaño del orificio depende del espesor de la chapa y del material escogido. Un mayor espesor implicará un diámetro de agujero más grande,

mientras que cuanto menor sea el espesor del plato, más pequeños serán los orificios. Para acero al carbono el tamaño de orificio que se puede punzar es igual al espesor, mientras que, en el caso del acero inoxidable, el tamaño mínimo de orificio que se puede punzar ronda el doble del espesor de la chapa. (31)

En cuanto a las dimensiones de la chapa y el usuario pueden ser escogidas por el usuario. Como se presenta en el apartado de *Selección de material*, el material será acero inoxidable 304. Algunas dimensiones típicas de chapas metálicas son 1x4ft, 2x4ft, 4x4ft, 4x6ft y 4x8ft, aunque existe más variedad en el mercado. Para el tipo de chapa perforada escogida (IPA 111) el espesor de plato será de aproximadamente 1,2 mm (Gauge 18). (31) (42) (43)

Para poder escoger las dimensiones se ha supuesto una longitud y un radio externo de lecho en la modelización del reactor. La longitud de lecho se ha basado en las longitudes estándar de tubos del intercambiador de calor de carcasa y tubos, y en el resultado del valor del radio interno de lecho. Por otro lado, el valor del radio externo también se ha escogido en base a dimensiones típicas de chapas y además se ha comprobado que el radio interno obtenido para este valor supuesto fuese mayor que el radio externo de la carcasa del intercambiador.

Otras consideraciones geométricas han sido:

- El ancho de la chapa se corresponde con el valor del perímetro de la pared cilíndrica ($\text{Ancho} = \pi * D_o$)
- Para la pared cilíndrica externa, el radio externo del lecho (R_o) será igual al radio interno de la pared cilíndrica, que se calculará como el diámetro externo menos 2 veces el espesor (D_i) entre 2.
- Para la pared cilíndrica interna, el radio interno del lecho (R_i) será igual al radio externo de la pared perforada.

En base a las iteraciones realizadas, se han seleccionado las dimensiones para las chapas perforadas, presentadas en la Tabla 17. En caso del radio de la pared cilíndrica interna, se ha aproximado por aquellas medidas que ofrezcan un radio interno inferior al calculado.

Tabla 17. Dimensiones de la chapa perforada para los dos lechos (31) (42) (43)

Dimensiones 1 ^{er} lecho			
Pared cilíndrica exterior		Pared cilíndrica interior	
Diámetro de agujero (in)	3/32	Diámetro de agujero (in)	3/32
Área de paso (%)	12	Área de paso (%)	12
Espesor de chapa (mm)	1,200	Espesor de chapa (mm)	1,200
Longitud (ft)	4 (1,219 m)	Longitud (ft)	4 (1,219 m)
Radio externo estándar (ft)	2	Radio externo calculado	467,4
		(R_i) (mm)	
Radio externo estándar (mm)	609,6	Ancho (in)	114 (2,896 m)

		Radio externo estandarizado (mm)	460,9
		Radio interno (mm)	459,7
Dimensiones 2º lecho			
Pared cilíndrica exterior		Pared cilíndrica interior	
Diámetro de agujero (in)	3/32	Diámetro de agujero (in)	3/32
Área de paso (%)	12	Área de paso (%)	12
Espesor de chapa (mm)	1,200	Espesor de chapa (mm)	1,200
Longitud (ft)	6 (1,829 m)	Longitud (ft)	6 (1,829 m)
Radio externo estándar (ft)	2	Radio externo calculado (Ri) (mm)	237,1
Radio externo estándar (mm)	609,6	Ancho (in)	56 (1,422 m)
Radio interno (R _o) (mm)	608,4	Radio externo estandarizado (mm)	226,3
		Radio interno (mm)	225,1

La distribución de flujo en un reactor radial está gobernada por los perfiles de presión en el centro de la tubería y la zona anular que se encuentra entre la pared del reactor y la canasta del catalizador. La diferencia entre las presiones en el tubo central y el anillo exterior es igual a la suma de las caídas de presión a través de la pared perforada externa (ΔP_o), el lecho de catalizador (ΔP_b) y la pared perforada interior (colector) (ΔP_i), tal y como se presenta en la *Ecuación 76*: (18)

$$P_i - P_o = \Delta P_i + \Delta P_b + \Delta P_o \quad \text{Ecuación 76}$$

La caída de presión a través de las paredes perforadas puede ser calculada a partir de la *Ecuación 77* y *Ecuación 78*, donde ξ representa el coeficiente de resistencia de las paredes, V , la velocidad radial y Ω , la fracción hueca de las paredes. La caída de presión en el lecho se calculará como la diferencia entre la presión en la entrada y la presión de salida del fluido en el lecho. (18)

$$\Delta P_i = \xi_i * \frac{\rho_{fi}}{2} * \left(\frac{V_i}{\Omega_i}\right)^2 = \xi_i * \frac{\rho_{fi}}{2} * (u_{ri})^2 \quad \text{Ecuación 77}$$

$$\Delta P_o = \xi_o * \frac{\rho_{fo}}{2} * \left(\frac{V_o}{\Omega_o}\right)^2 = \xi_o * \frac{\rho_{fo}}{2} * (u_{ro})^2 \quad \text{Ecuación 78}$$

El coeficiente de resistencia viene tabulado en función del área de paso y en caso de un área abierta de 0,12 toma un valor de 165,385. (44)

La caída de presión del lecho se ha calculado a través de la ecuación de Ergun presentada anteriormente en la *Ecuación 48*. Los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 18.

Tabla 18. Caída de presión a través de las paredes perforadas

Caída de presión a través de las paredes perforadas 1º lecho

ξ_o	165,4	Ω_o	0,12
ξ_i	165,4	Ω_i	0,12
ρ_{fo} (kg/m ³)	15,34	ΔP_o (Pa)	480,8
ρ_{fi} (kg/m ³)	14,16	ΔP_b (Pa)	699,1
u_{ro} (m/s)	0,3790	ΔP_i (Pa)	301,4
u_{ri} (m/s)	0,5320	$P_i - P_o$ (Pa)	1213
Caída de presión a través de las paredes perforadas 2º lecho			
ξ_o	165,4	Ω_o	0,12
ξ_i	165,4	Ω_i	0,12
ρ_{fo} (kg/m ³)	15,85	ΔP_o (Pa)	78,67
ρ_{fi} (kg/m ³)	15,26	ΔP_b (Pa)	1520
u_{ro} (m/s)	0,2450	ΔP_i (Pa)	531,5
u_{ri} (m/s)	0,6490	$P_i - P_o$ (Pa)	2130

9.2. Diseño de carcasa

Las paredes cilíndricas que contienen a los lechos del catalizador se encuentran confinadas entre la pared del recipiente a presión. La carcasa del reactor, como se menciona posteriormente, se trata de una chapa metálica de acero inoxidable 304, cuyas dimensiones (espesor, cabezales, diámetro, etc) se presentan en el apartado 10. *DISEÑO MECÁNICO DEL EQUIPO*.

9.3. Distribuidor de gas

El fluido que circula por tubos en el intercambiador calor debe de ser dirigido hacia al primer lecho. Para ello, es necesario incorporar un distribuidor de gas que permita repartir la alimentación a lo largo del espacio anular que se encuentra entre la pared del reactor y el lecho del catalizador. En concreto, en este tipo de reactores se suele emplear tuberías dispuestas horizontalmente que se encuentran perforadas por la parte inferior, ayudando así a distribuir el fluido hacia abajo.

Como se ha comentado anteriormente, la distribución del gas a través del lecho está facilitada por las paredes cilíndricas perforadas, que aparte de actuar como soporte de catalizador, realizan la función de distribuidores de gas. (18)

Cabe destacar, que en los reactores axial-radial y radiales disponibles consultados, no se hace referencia a otro distribuidor entre lecho, dado que el gas que sale por la parte inferior de la carcasa del intercambiador se trata de un gas a presión que sale a elevadas velocidades del intercambiador y que ya presenta la dirección de flujo deseada (descendente). (18)

La caída de presión en el distribuidor, al igual que en la pared cilíndrica perforada se puede calcular a través de la Ecuación 77, donde el coeficiente de resistencia se puede calcular mediante la ecuación de O'Connell and Hughmark presentada en la Ecuación 79; donde d_s representa el diámetro del orificio y s , el espesor del distribuidor. (45)

$$\xi = \frac{1 - \Omega^2}{C^2}; \quad C = 0,835 * \left(\frac{d_s}{s}\right)^{-0,133} \quad \text{Ecuación 79}$$

Para distribuidores de orificios con pitch triangular algunas dimensiones típicas se son diámetros entre 6-10 mm y espesores de entre 2 y 3 mm, con áreas abiertas desde el 10-30%. Para reducir la caída de presión, el coeficiente de resistencia debe ser lo más bajo posible, por lo que se ha de escoger aquella combinación de diámetro, espesor y área abierta que minimice este parámetro.

En cuanto a la velocidad empleada en la ecuación de la caída de presión, esta está referida a la velocidad del fluido que atraviesa los agujeros, que se puede calcular mediante la Ecuación 80, donde Q_{gas} es el caudal que circula por los tubos del intercambiador de calor; N_{tubos} , representa el número de tuberías por las que componen el distribuidor en su totalidad; $N_{agujeros}$ son los buratos de paso de cada tubo; y $d_{agujero}$, se corresponde con el diámetro de los orificio. Dicha velocidad ha de tomar valores de entre 20-45 m/s, para evitar la erosión de los distribuidores. (46)

$$v_{agujeros} = \frac{Q_{gas}}{N_{tubos} * N_{agujeros} * \frac{\pi}{4} * d_{agujero}^2} \quad \text{Ecuación 80}$$

El número de tubos se ha fijado en 6, y todos han de tener la misma longitud, de forma que estos estarán unidos a la tubería central que recoge el fluido que circula por tubos en el intercambiador de calor y se dispondrán a su alrededor formando un ángulo de 60° entre ellos (en forma de estrella). De esta forma se asegurará la distribución alrededor del diámetro del lecho.

El número de orificios por tubo ha de ser aquel que permita conseguir las velocidades recomendadas a través del distribuidor y se puede calcular conociendo el área abierta de la tubería, su diámetro interno y su longitud, y el diámetro de los agujeros, aplicando de nuevo la Ecuación 38. A partir de los parámetros escogidos se han obtenidos los siguientes resultados, presentados en la Tabla 19.

Tabla 19. Selección de los tubos del distribuidor y cálculo de caída de presión 51 (47)

Características constructivas del distribuidor escogido			
ds (mm)	6,000	Número de agujeros por tubo	52,00
s (mm)	3,020	Q_{gas} (m ³ /s)	0,2120
Ω (%)	20,02	Velocidad en los agujeros (m/s)	24,02
Tubos de acero inoxidable 304, SCH 80, DN (mm) 8		C	0,7620
Diámetro externo tubo (mm)	13,71	ρ_f (kg/m ³)	15,34
Diámetro interno tubo (mm)	7,670	ξ	1,653
Longitud de tubo (m)	0,3048 (1 ft)	$\Delta P_{distribuidor}$ (Pa)	7313

10. DISEÑO MECÁNICO DEL EQUIPO

El reactor opera en torno a 100 bar, por lo que se ha de diseñar como un recipiente a presión. El código más empleado se corresponde con el ASME BPVC (Boiler and Pressure Vessel Code), el cual cuenta con 12 secciones. En concreto, en la Sección VIII de este, se presentan una serie de reglas para el diseño y construcción de recipientes a presión. Este estándar no es apto para todo tipo de recipientes a presión, por lo que se ha de verificar que el diámetro del recipiente a presión sea superior a 152 mm y que la presión interna a la que está sometido sea superior a 100 kPa y menor a 20 MPa. (31)

Dado que el reactor cumple esas condiciones, el código empleado de diseño será el ASME BPVC, Sección VIII, División 1. Al igual que el reactor, el intercambiador de calor dispuesto entre el primer lecho cumple estos requisitos, por lo que también se empleará este estándar para el cálculo de los espesores de la carcasa y los cabezales del intercambiador de calor necesarios () para los planos del equipo. (48)

El reactor será diseñado como un recipiente sujeto a presión interna, mientras que el intercambiador, se considerará como un recipiente sujeto a presión externa, ya que se encuentra sometido a la presión del reactor.

10.1. Presión de diseño

En el apartado UG-28 del código escogido se define una unidad combinada como un recipiente a presión que consiste en más de una cámara de presión independiente o dependiente, que opera a la misma presión y temperatura o diferentes. Las partes que separan cada cámara de presión son denotadas como elementos comunes. Cada elemento debe ser diseñado como mínimo para las condiciones más severas de presión y temperatura coincidentes que se esperan en una operación normal. (48)

En el reactor se pueden diferenciar 3 partes con condiciones de operación diferentes: el primer lecho, el intercambiador de calor, y el segundo lecho. En unidades donde existen grandes diferencias respecto a las condiciones de operación entre lechos, para ahorrar costo en material, se suele emplear diferentes espesores para el primer lecho y el segundo. Sin embargo, dado que con este tipo de reactor se ha minimizado la caída de presión y el rango de temperatura entre los dos lechos están dentro del mismo rango, las condiciones de operación son muy similares, por lo que, en este caso, económicamente compensa tener un único espesor a lo largo del reactor, ya que la diferencia entre los espesores calculados individualmente para cada lecho es despreciable, siendo más costosa la unión entre los distintos lechos.

Por otro lado, el reactor y el intercambiador de acuerdo con el estándar se clasifica como una unidad combinada, por lo que como mínimo, la presión y temperatura de diseño, se corresponderá con la presión y temperatura de los elementos comunes, es decir, la carcasa del intercambiador. Dado que la máxima presión que se alcanza en el intercambiador es de 100,1 bar y la presión máxima en el reactor es de 100 bar, se ha decido escoger la más alta, ya que no existen grandes diferencias entre ambas. La temperatura más elevada tanto en el intercambiador como en el reactor se corresponde

con la temperatura del gas que sale del primer lecho, por lo que esta se corresponde con la máxima temperatura de operación.

La presión de diseño de recipientes a presión sujetos a presión interna se corresponde con aquella de las siguientes opciones que ofrezca un valor mayor: la presión de operación máxima en el reactor sumada a 25 psi, o la presión de operación máxima de operación sobredimensionada un 10%. En la Tabla 20, se presenta la presión de diseño para el reactor R-301.

Tabla 20. Presión interna de diseño del reactor R-301

Parámetro	Valor
Presión máxima de operación (bar)	100,10
Criterio +10% (bar)	110,11
Criterio+25 psi (bar)	101,82
Presión de diseño interna (Pi) (bar)	110,11

10.2. Temperatura de diseño

De acuerdo con el código ASME, el esfuerzo máximo permisible del material dependerá de la temperatura de este, por lo que este ha de ser consultado a la temperatura máxima de operación más un cierto margen que suele tomar de 50°F (10°C) por la incerteza de las temperaturas de la pared del recipiente. (31)

Tabla 21. Temperatura de diseño del reactor R-301

Parámetro	Valor
Temperatura operación máxima (°C)	503,36
Temperatura de diseño (°C)	513,36

10.3. Selección del material

El material de construcción del reactor debe ser aquel que cumpla una serie de requisitos referentes a las propiedades mecánicas, la resistencia a la corrosión, la facilidad de fabricación y disposición de tamaños estándares, y el coste. Para poder escoger un material adecuado se debe tener en cuenta varios criterios de selección: la experiencia, a partir de la cual se conoce que materiales son más compatibles con determinadas sustancias químicas; los mapas de propiedades, como puede ser el método Ashby; y la economía del material.

10.3.1. Compatibilidad química con materiales típicos de construcción

Para estudiar la compatibilidad química de las sustancias presentes en el reactor con diferentes materiales de construcción se ha empleado el software Chemical Reactivity Worksheet 4.0.2. (CRW) cuando ha sido posible, dado que sólo está disponible para algunas sustancias, además de bibliografía complementaria.

Las sustancias químicas implicadas en la reacción son el nitrógeno, el hidrógeno, inertes (argón y oxígeno) y el amoníaco. Este último resulta corrosivo para aleaciones a

base de cobre y algunas a base de níquel y puede causar agrietamiento por corrosión bajo tensión. Se recomienda evitar el uso de acero al carbono con un 0,5% de molibdeno (K11522 y otros) para resistir la descarburación por hidrógeno y fisuración. A pesar de que el aluminio es resistente al amoníaco anhidro y ser utilizado en tuberías o unidades de refrigeración, no tiene aplicación comercial en el reactor, por lo que este también se ha descartado. (49)

En el caso de trabajar con oxígeno se recomienda trabajar con aceros inoxidables austeníticos, dado que estos presentan una buena resistencia a la oxidación, y son más resistentes a la corrosión que los aceros martensíticos y ferríticos. (49) (50)

Algunos materiales más empleados en procesos que trabajan con hidrógeno son los aceros inoxidables austeníticos, las aleaciones de aluminio y los aceros ferríticos de baja aleación, mientras que se evita trabajar con aceros ferríticos y martensíticos, aleaciones de níquel y aleaciones de titanio. En el caso del nitrógeno se pueden emplear diferentes materiales de construcción metálicos. (51)

10.3.2. Método de Ashby

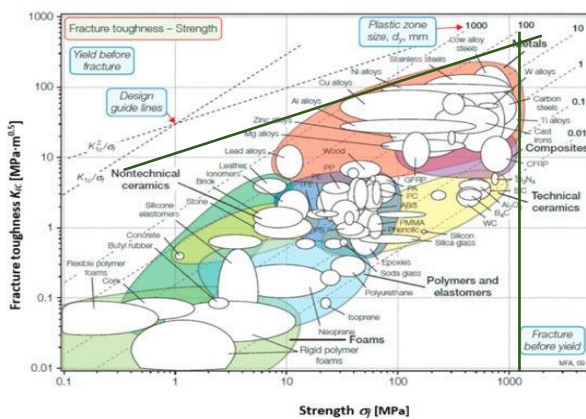


Figura 14. Rigidez a la fractura vs límite elástico (30)

Como se puede observar los materiales que maximizan M_3 siguiendo este orden son: las aleaciones de cobre, las aleaciones de níquel, los aceros inoxidables y los aceros de baja aleación. Por otra parte, los materiales que maximizan M_4 son las aleaciones de titanio, los aceros al carbono, las aleaciones de níquel, los aceros de baja aleación y los aceros inoxidables.

Los materiales que más maximizan ambos índices son las aleaciones de níquel, los aceros inoxidables y los aceros de baja aleación. Sin

embargo, algunas aleaciones de níquel, como la Alloy 718, puede ser susceptible de fragilizarse por el hidrógeno provocando el debilitamiento de sus propiedades mecánicas, por lo que, a pesar de que existen superaleaciones de níquel capaces de resistir al debilitamiento por hidrógeno (encareciendo más su precio), se han descartado. (52)

10.3.3. Experiencia y economía del material

Como se ha comentado anteriormente, los posibles materiales de construcción son los aceros inoxidables y los aceros de baja aleación. Ambos son capaces de soportar elevadas de temperaturas de hasta 650°C y altas presiones. Sin embargo, en los aceros de baja aleación se forman nitruros en la capa del material que llega a alcanzar un espesor de varios milímetros (nitruración), mientras que este fenómeno en los aceros austeníticos tiene un menor efecto. (53)

Por otro lado, por la bibliografía consultada se sabe que el acero inoxidable 304 o el 347 se suelen emplear como material de construcción en reactores catalíticos que trabajan con amoníaco, nitrógeno, hidrógeno, y otros gases, por su gran resistencia a la

corrosión a elevadas temperaturas. El SS347 presenta propiedades similares al 304, aunque se diferencia principalmente en la capacidad de resistir a la corrosión intergranular, lo cual lo hace más caro, por eso se empleará el acero inoxidable 304. (20)
(53)

10.4. Espesor de carcasa

El espesor mínimo carcasa del reactor se puede calcular empleando las ecuaciones propuestas en el apartado UG-27 del código, donde este se corresponde con el mayor de los espesores de entre los calculados para el esfuerzo longitudinal y el esfuerzo radial, presentados en la Ecuación 81 y Ecuación 82, respectivamente. En el caso de recipientes cilíndricos, el esfuerzo radial siempre es mayor que el longitudinal, por lo que este será el que determine el espesor de la carcasa.

$$t = \frac{P_i * R_i}{S * E - 0,6 * P_i} \quad \text{Ecuación 81}$$

$$t = \frac{P_i * R_i}{2 * S * E + 0,4 * P_i} \quad \text{Ecuación 82}$$

Donde:

t : espesor de la carcasa en mm

P_i : presión interna de diseño en N/mm^2

R_i : radio interno de la carcasa del reactor en mm

S : esfuerzo máximo permisible a la temperatura de diseño en N/mm^2

E : eficiencia de la unión soldada

El esfuerzo máximo permisible se puede consultar en el código ASME, Sección II, Parte D, donde se recogen los valores de este en función de diferentes valores de temperatura y el material de construcción del recipiente. Para acero inoxidable 304 (SA-240, Tipo 304,18Cr8Ni) el valor de S a 500°C y 525°C es de 73,6 y 72,96 respectivamente. Tal y como se recomienda en el código se ha interpolado para obtener el valor del esfuerzo máximo permisible a 513,36°C. (54)

Por otro lado, la eficiencia de la unión soldada tiene en cuenta diferentes configuraciones de unión y la calidad de la soldadura, por lo que el valor de esta dependerá del tipo de unión y la cantidad el grado de examen radiográfico. Los exámenes radiográficos consisten en un tipo de ensayo no destructivo que permite la inspección de los materiales para detectar defectos no visibles. Una eficiencia mayor permitirá reducir el costo en materiales, puesto que el espesor obtenido será inferior, sin embargo, esto también supondrá costes en inspección asociados. Algunos tipos de uniones se presentan en la Tabla 22. Como la presión de diseño es muy elevada se recomienda la selección de la unión a tope doblemente soldada. A pesar de que el examen radiográfico puntual ahorraría costes en inspección, se ha decidido escoger el grado de examen radiográfico completo, ya que así se reduce el valor de la carga por peso asociado a la carcasa del

reactor, al reducir el espesor, que es elevado como consecuencia de la alta presión de operación. Por tanto, el valor de E será 1. (27)

Tabla 22. Tipos de uniones más comunes y valor de la eficiencia de soldadura (31)

Tipo de unión\ Grado de examen radiográfico	Completo	Puntual	Ninguno
Unión a tope doblemente soldada	1,0	0,85	0,7
Unión a tope, soldadura única con tira de apoyo	0,9	0,8	0,65

Por otro lado, al espesor determinado a través de las ecuaciones anteriores se ha de adicionar un término que hace referencia al espesor necesario para permitir la pérdida del material como consecuencia de la erosión y la corrosión y que se denota como corrosión permisible. Para sustancias muy corrosivas se debe sumar un espesor de 4 mm al calculado, mientras que para sustancias menos corrosivas se adicionará un valor de 2 mm. Los gases de proceso si bien son corrosivos, no se pueden considerar como sumamente corrosivos en comparación con ácidos como el ácido clorhídrico o el sulfúrico, por se ha considerado una corrosión permisible de 2 mm.

En cuanto al radio interno del reactor, este todavía no es conocido. Sin embargo, se conoce el radio externo del primer lecho y por bibliografía consultada se sabe que para bajas capacidades normalmente la separación entre la pared externa del lecho y la pared interna del reactor es de 20-50mm. El radio interno del recipiente se calculará por tanto como la suma del radio externo del primer lecho (igual al segundo) más la media de la separación típica (35 mm). Por tanto, en primer lugar, se empleará este valor para calcular el espesor del reactor y luego de estandarizar los diámetros del recipiente, se volverá a recalcular el espesor con el nuevo valor del radio interno de lecho. (55)

En la Tabla 23, se presentan los parámetros comentados anteriormente, donde D_o representa el diámetro externo de la carcasa y D_i , el diámetro interno, calculado como D_o menos 2 veces el espesor. En los valores de espesor presentados ya se ha tenido en cuenta el valor de la corrosión permisible.

Tabla 23. Determinación del espesor de la carcasa del reactor R-301 (56) (57)

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
R_i inicial (m)	0,6446	t estándar (mm)	110
P_i (N/mm ²)	11,01	D_o estándar carcasa (mm)	1524
S (N/mm ²)	72,96	D_i carcasa (mm)	1304
Corrosión permisible (mm)	2,00	R_i estándar (mm)	652
t_{radial} (mm)	109,0	Separación R_i - R_{lecho} (mm)	42,4
$t_{longitudinal}$ (mm)	49,2	t_{radial} recalculada (mm)	108,2

Como se puede observar, el espesor recalculado con el radio interno del recipiente estandarizado sigue siendo inferior al estandarizado. Además, la separación entre el radio interno estándar del recipiente y el radio externo del lecho se encuentra dentro del intervalo típico, obteniendo así una velocidad del fluido en el espacio anular de 1,26 m/s.

Por tanto, el espesor de la carcasa del reactor será de 110 mm, que supera al mínimo exigido, 7 mm para recipientes de entre 1-2 m. (31)

10.5. Selección y dimensionamiento de los cabezales

Los cabezales aptos para presiones mayores a 15 bar son los elípticos y los hemisféricos. Mientras que el cabezal hemisférico es el que menor espesor ofrece, es más caro de fabricar, ya que es más complejo unir a la carcasa. Por este motivo, se ha escogido el cabezal elíptico, ya que el espesor obtenido es similar al de la carcasa facilitando así la unión, y en comparación con el hemisférico es más barato, además de que es el cabezal más empleado para presiones elevadas. En la Ecuación 83 y Ecuación 84, se presentan las expresiones para calcular el espesor de los cabezales hemisférico y elíptico, respectivamente. (31)

$$t = \frac{P_i * D_i}{4 * S * E - 0,4 * P_i} \quad \text{Ecuación 83}$$

$$t = \frac{P_i * D_i}{2 * S * E - 0,2 * P_i} \quad \text{Ecuación 84}$$

En la Tabla 24, se presentan los espesores calculados teniendo de nuevo en cuenta una corrosión permisible de 2mm.

Tabla 24. Determinación de espesor del cabezal del reactor R-301

Cabezal	Espesor calculado (mm)
Hemisférico	49,40
Elíptico	101,9
Elíptico (espesor estandarizado)	110

Como se puede observar, al estandarizar el espesor de los cabezales es igual al espesor de la carcasa, lo cual facilitará la unión a la carcasa.

El dimensionamiento de los cabezales se recoge en el estándar DIN 28013, donde se definen varios parámetros en base a la Figura 15. D se corresponde con el diámetro externo del reactor; mientras que r_1 , r_2 y h son calculados mediante sus respectivas ecuaciones. A partir del diámetro interno, r_1 , r_2 , y H se determina gráficamente el valor de h , teniendo en cuenta que r_1 es tangente a las dos circunferencias de radio r_2 . (58)

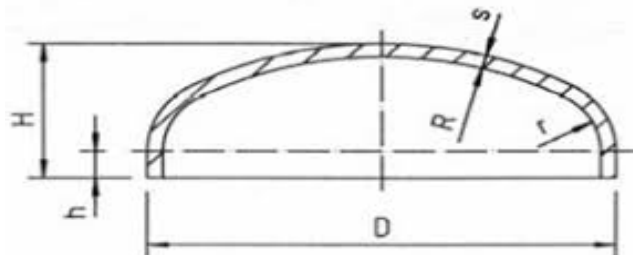


Figura 15. Dimensionamiento de cabezal elíptico de acuerdo con el estándar DIN 28013 (62)

En la Tabla 25, se presenta el dimensionamiento del cabezal de reactor de acuerdo con el estándar DIN 28013. (58)

Tabla 25. Dimensionamiento del cabezal del reactor R-301 en base al estándar DIN 28013 (58)

Parámetro	Ecuación	Valor
D_i (m)	$D-2*s$	1,304
D (m)	Diámetro externo carcasa	1,524
s (m)	Espesor del cabezal	0,110
r_1 (m)	$0,9*D_i$	1,174
r_2 (m)	$0,17*D_i$	0,222
h (m)	$\geq 3*s$	0,332
H (m)	$3*s+0,25*D_i$	0,656

10.6. Estimación de espesores del intercambiador de calor

Dado que el intercambiador de calor está sometido a la presión del reactor, el espesor de los cabezales y de la carcasa del intercambiador han de calcularse teniendo en cuenta el criterio de diseño para presión externa.

El espesor del cabezal del intercambiador elíptico escogido, de acuerdo con el apartado UG-33, será el mayor de los siguientes métodos: el espesor calculado mediante la metodología de presión interna considerando la presión de diseño 1,67 veces mayor y asumiendo una eficiencia de unión igual a 1 independientemente del tipo de unión; y un método iterativo descrito en el código ASME. Como primera aproximación se ha decidido emplear la Ecuación 84 aplicando el criterio de diseño para recipientes sometidos a presión interna, donde se ha de corregir la presión interna de diseño multiplicándola por un valor de 1,67. El dimensionamiento del cabezal se realizará siguiendo el estándar DIN 28013. En la Tabla 26, se presentan los resultados obtenidos para el diseño del cabezal del intercambiador de calor, donde en este caso D_i , se corresponde con el diámetro interno del intercambiador y D_o , con el diámetro externo. La temperatura de diseño del intercambiador coincide con la del reactor, por lo que se empleará el mismo esfuerzo máximo permisible. (48)

Tabla 26. Dimensionamiento del cabezal del intercambiador de calor (56) (58)

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
D_i (mm)	591	D_o (mm)	751
P_i corregida (N/mm ²)	18,40	r_1 (mm)	532
S (N/mm ²)	72,96	r_2 (mm)	100
Corrosión permisible (mm)	2,00	h_1 (mm)	241
t (mm)	78,40	h_3 (mm)	388
$t_{\text{estándar}}$ (mm)	80,00		

El espesor de la carcasa del intercambiador debe calcularse en base al apartado UG-28 del estándar, donde se presenta un método iterativo para recipientes cilíndricos en el

cual se distingue entre recipientes cilíndricos con una relación $D_o/t \geq 10$ o un ratio inferior a 10. El primer paso del método consiste en suponer un espesor de carcasa y calcular los ratios D_o/t y L/D_o , siendo L la longitud de la carcasa. Una vez determinadas estas relaciones es necesario emplear la Sección II, Parte D del código ASME, donde en la Subparte 3, se debe consultar la Figura G para determinar el valor del parámetro A que se empleará posteriormente. Una vez determinado este valor, se debe consultar otro gráfico específico para el material de construcción (SS 304) donde con el valor de A y la temperatura de diseño se puede obtener el parámetro B . (48)

Con este último parámetro se calculará la presión P_{a1} en N/mm^2 presentada en la Ecuación 85: (48)

$$P_{a1} = \left[\frac{2,167}{D_o/t} - 0,0833 \right] * B \quad \text{Ecuación 85}$$

A través de la Ecuación 86, se ha de calcular el valor de P_{a2} : (48)

$$P_{a2} = \frac{2 * 0,9 * S}{D_o/t} * \left[1 - \frac{1}{D_o/t} \right] \quad \text{Ecuación 86}$$

La menor presión entre P_{a1} y P_{a2} se corresponderá con la máxima presión de diseño permisible, por lo que se ha de garantizar que esta sea mayor a la presión externa a la que está sometida el intercambiador, es decir, a la presión de diseño del reactor. En la Tabla 27, se presentan los resultados, donde la longitud de carcasa se ha tomado de 42'' (1,067 mm), dejando así una abertura en la parte superior e inferior del intercambiador de aproximadamente 8 mm para permitir la entrada y salida del gas de la carcasa. (48)

Tabla 27. Determinación del espesor de la carcasa del intercambiador de calor sujeto a presión externa

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
t (mm)	130	A	0,065
D_i (mm)	591	B	50
D_o (mm)	851	P_{a1} (N/mm^2)	12,39
L (mm)	1067	P_{a2} (N/mm^2)	17,00
D_o/t	6,55	P (N/mm^2)	11,01
L/D_o	1,25		

Por tanto, el radio externo del intercambiador de calor será de 425,5 mm, por lo que es inferior al radio interno de la pared cilíndrica del primer lecho (459,7 mm), dejando una separación entre radios de aproximadamente 34,2 mm. La velocidad de entrada al intercambiador será por tanto de 2,42 m/s, teniendo en cuenta que el caudal de salida del primer lecho es de aproximadamente 0,23 m^3/s y el área de paso que atraviesa el gas es una corona circular. (41)

10.7. Altura del reactor

Para calcular la altura total del reactor se han de tener en cuenta las alturas de las paredes de ambos lechos, el espacio entre lechos, el espacio en la parte superior para el distribuidor de gas y la altura del cabezal superior e inferior. El espacio entre lechos vendrá dado por la altura que sea mayor entre las siguientes: la boca de hombre entre los lechos necesaria para el reemplazo del catalizador y otras operaciones de mantenimiento y supervisión, y la altura del cabezal del intercambiador inferior y el tramo de tubería vertical que conduce el gas de alimentación hasta el intercambiador. Las dimensiones estándar para entradas de hombre son 508 mm, 610 mm, 762 mm y 914 mm para recipientes de menor a mayor diámetro. En este caso la boca de hombre será de 508 mm. En este caso, la altura de la conducción más del cabezal del intercambiador supera a la altura de la boca de hombre, por lo que esta más un cierto margen serán la que determinen el espacio entre lechos. El espacio para el distribuidor se ha considerado de 9 mm. En la Tabla 28, se presentan las diferentes alturas, donde H_v , representa la altura de costura a costura en el reactor, es decir, desde la unión del cabezal superior al inferior. La altura H_v ha de ser estandarizada, por lo que se ha de tomar el valor estandarizado inmediatamente superior al calculado. La altura total será igual a la suma de la altura estandarizada de la carcasa del reactor más la altura de los dos cabezales ($H+t$). (59)

Tabla 28. Determinación de la altura del reactor

Parámetro	Valor
Altura lecho 1 (m)	1,219
Altura lecho 2 (m)	1,829
Espaciado entre lechos (m)	0,800
Espaciado superior para el distribuidor (m)	0,090
H_v (m)	3,938
H_v estándar (m)	(156'') 3,9624
$2*H+2*t_{cab, reactor}$ (m)	1,532
Altura total (m)	5,494

La altura total del reactor será por tanto de 5,494 metros, mientras que el diámetro externo de la carcasa de este es de 1,524 m, por lo que la relación L/D_o obtenida es de aproximadamente 3,61, la cual se encuentra dentro del rango L/D típico para recipientes verticales a presión, que suele estar entre 2-5. (31)

10.8. Análisis de cargas

Una vez propuestas las medidas del reactor es necesario realizar el análisis de cargas para comprobar que realmente el diseño es adecuado y capaz de soportar las cargas a las que está sometido. Las principales cargas que se han considerado son las debidas al peso de los elementos más importantes que constituyen el reactor y las cargas por viento. Dado que la zona donde se construirá la planta no se trata de una zona sísmica, no se han considerado cargas por terremotos.

10.8.1. Cargas por peso

Las cargas que se considerarán serán: peso de carcasa del reactor y otros accesorios, peso del catalizador, peso de las paredes cilíndricas de lecho, peso de tubos y carcasa del intercambiador de calor, peso del aislante y una aproximación del peso del gas en el recipiente.

10.8.1.1. Peso de carcasa

Para poder estimar el peso de la carcasa y accesorios del recipiente como boquillas o soportes internos, se puede emplear la Ecuación 87, donde W_v , representa el peso de la carcasa del reactor en N (newton); C_w , un factor que considera accesorios internos como anillos de soporte de las paredes cilíndricas, boquillas, etc y que para muchos accesorios internos toma el valor de 1,15; H_v , representa la altura entre líneas tangentes anteriormente calculada en metros; g es la aceleración de la gravedad, $9,81 \text{ m/s}^2$; ρ_m , se corresponde con el valor de la densidad del material, en este caso, acero inoxidable 304; D_m es el diámetro medio del recipiente que se calcula de acuerdo con la Ecuación 88, también en metros; y t es espesor de la carcasa del reactor en metros. (31)

$$W_v = C_w * \pi * \rho_m * D_m * g * (H_v + 0,8 * D_m) * t \quad \text{Ecuación 87}$$

$$D_m = D_i + t \quad \text{Ecuación 88}$$

En la Tabla 29, se presentan los resultados obtenidos a partir de la Ecuación 87:

Tabla 29. Determinación del peso de la carcasa del reactor y otros accesorios internos

Parámetro	Valor
C_w	1,15
ρ_m SS 304 (kg/m ³)	7930
D_m (m)	1,414
W_v (kN)	222,67

10.8.1.2. Peso de catalizador

A partir de la masa total de catalizador calculada se puede calcular el peso del catalizador multiplicando la masa total por la aceleración de la gravedad. En la Tabla 30, se recoge el valor obtenido.

Tabla 30. Determinación de la carga debido al peso del catalizador

Parámetro	Valor
W_{total} (kg)	7713
Peso catalizador (kN)	69,78

10.8.1.3. Peso de paredes cilíndricas

El peso de las paredes cilíndricas se ha de calcular teniendo en cuenta que parte de la pared se encuentra perforada, por lo que la masa de cada corona circular se calculará tal y como se expresa en la Ecuación 89.

$m = \rho_m * \pi * (R_o^2 - R_i^2) * L * (1 - \Omega)$	<i>Ecuación 89</i>

Aplicando la ecuación a las cuatro paredes para cada ancho y largo de pared se obtuvo la carga presenta en la Tabla 31.

Tabla 31. Determinación del peso de las paredes cilíndricas perforadas

	Primer lecho	Segundo lecho
Masa pared cilíndrica externa (kg)	39,09	58,64
Masa pared cilíndrica interna (kg)	29,55	21,73
Masa total (kg)	149,0	
Peso paredes cilíndricas (kN)	1,462	

10.8.1.4. Peso del intercambiador de calor

El peso del intercambiador se corresponde principalmente con el peso asociado a los tubos y el peso de la carcasa. La masa de tubos y de carcasa se puede calcular con la Ecuación 90, donde d_e , d_i , L y N hacen referencia al diámetro externo, el diámetro interno, la longitud y el número de tubos para los tubos o la carcasa. En el caso de la carcasa N tomará el valor de 1.

$$m_i = \rho_m * \frac{\pi}{4} * (d_o^2 - d_i^2) * L_i * N_i \quad \text{Ecuación 90}$$

Multiplicando la masa por $9,81 \text{ m/s}^2$ se obtendrán los pesos de ambos, presentados en la Tabla 32. Tabla 32. Determinación del peso del intercambiador

Tabla 32. Determinación del peso del intercambiador

Parámetro	Valor
Masa tubos (kg)	317,80
Masa carcasa (kg)	2491,06
Peso del intercambiador (kN)	27,55

10.8.1.5. Peso del aislante

Dado que se trabaja en torno a 500°C es necesario aislar el reactor tanto por motivos de seguridad como para conseguir llevar a cabo la operación adiabática en cada lecho. Para ello se han evaluado diferentes aislantes capaces de soportar temperaturas tan elevadas como el de fibra cerámica, capaz de soportar hasta 1260°C , y el de lana de roca, uno de los aislantes más comúnmente empleados en la industria, cuya temperatura máxima de operación es de hasta 700°C . Sin embargo, dado que los aislantes de fibra

cerámica pueden resultar nocivos y requieren que los operarios empleen mascarillas para su manipulación, se ha decidido aislar con lana de roca. (60)

En primer lugar, se ha determinado el radio crítico, para el cual la transmisión de calor es máxima, de forma que se ha de verificar que el radio externo del aislante sea superior a este, o bien, que el radio crítico sea menor al radio exterior del reactor. El radio crítico (r_{cr}) se puede hallar mediante la ecuación expresada en la tabla, donde k , representa la conductividad del aislante obtenida para la temperatura de diseño y h , el coeficiente de convección del aire para convección natural (5-20 W/(m²*K)). (37)

Tabla 33. Cálculo del radio crítico para el aislante lana de roca (ISOVER) (60)

Parámetro	Ecuación	Valor
k lana de roca (W/(m*K))	-	0,119
h del aire (W/(m ² *K))	-	5,24
r_{cr} (m)	k/h	0,024

Para la manta de roca Tech Wired Mat MT 5.2. indica para depósitos, reactores, chimeneas, etc, el espesor del aislante que se ofrece va desde los 30 mm hasta lo 120 mm. Dado que las temperaturas elevadas lo requieren, se ha escogido un espesor de aislante estandarizado de 120 mm a partir del cual se realizarán los balances de energía para determinar cuál es el calor que se transfiere y la temperatura final del aislante. Para ello, se empleará la nomenclatura de la Figura y se aplicará el balance de energía al reactor.

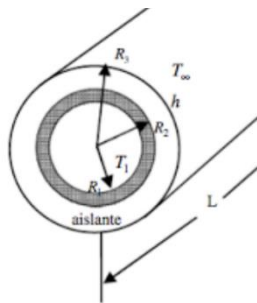


Figura 16. Esquema del reactor y el aislante

Desde R_1 (radio interno del reactor) hasta R_2 (radio externo del reactor) se producirá transmisión de calor por conducción a través de la pared de SS 304; desde R_2 hasta R_3 (radio externo del aislante, $R_2+t_{aislante}$) también se transmitirá el calor por conducción, pero a través del espesor del aislante; y desde R_3 al ambiente, se transmitirá el calor por convección con el aire ambiente, considerando que se encuentra a 15°C. Teniendo esto en cuenta, la resistencia total a la transmisión de calor vendrá dada por la Ecuación 91. Cabe destacar que no se ha tenido en cuenta la transmisión de calor por convección desde el gas reaccionante hasta

la pared interna del reactor, asumiendo de partida que la pared interna se encuentra a la temperatura más elevada del fluido que está en contacto con ella, es decir, el fluido que entra el segundo lecho y el cual se encuentra a 420°C y que se ha sobredimensionado en un 10%. (37)

$$R_{total} = \frac{\ln \frac{R_2}{R_1}}{2 * \pi * H_v * k_{SS\ 304}} + \frac{\ln \frac{R_3}{R_2}}{2 * \pi * H_v * k_{illante}} + \frac{1}{h_{aire} * 2 * \pi * R_3 * H_v} \quad \text{Ecuación 91}$$

Teniendo en cuenta que el flujo de calor de R_1 a R_2 , de R_2 a R_3 son iguales y que este a su vez se puede calcular empleando la Ecuación 92, se puede resolver el sistema, donde la temperatura T_2 y la temperatura T_3 son desconocidas.

$$q = q_{cond,1} = q_{cond,2} = q_{cond,3}$$

$$q = \frac{T_1 - T_2}{R_1} = \frac{T_2 - T_3}{R_2} = \frac{T_3 - T_{amb}}{R_3} = \frac{T_1 - T_{amb}}{R_{total}}$$

Ecuación 92

El coeficiente de convección del aire se puede calcular aplicando las correlaciones de convección natural sobre una placa vertical (Correlación de Churchill y Chu) siempre y cuando se cumpla que $D/L \geq 35/Gr^{1/4}$, donde Gr representa el Grashof, un parámetro adimensional que se calcula mediante la Ecuación 93, y que permite calcular otro parámetro conocido como Raleigh (Ecuación 94), que a su vez permite calcular el valor del Nusselt (Ecuación 95) para así poder determinar el factor de convección a través de la Ecuación 96 que, dado que la relación D/L calculado es superior al segundo término, se puede emplear, El parámetro β se puede calcular como la inversa de la temperatura absoluta, mientras que el Prandtl (Pr) suele tomar un valor de 0,7 para el aire a temperatura ambiente y ν representa la viscosidad cinemática del aire, la cual es igual a $1,48 \cdot 10^{-5}$ m²/s. El valor de la conductividad del aire se ha tomado de 0,024 W/(m*K). (37)

$$Gr = \frac{g * \beta * (T_3 - T_{amb}) * L^3}{\nu^2}$$

Ecuación 93

$$Ra = Gr * Pr$$

Ecuación 94

$$Nu = \left\{ 0,825 + \frac{0,387 * Ra^{1/6}}{[1 + (0,492(Pr)^{9/16})^{8/27}]} \right\}^2$$

Ecuación 95

$$h = \frac{Nu * k_{aire}}{H_v}$$

Ecuación 96

En la Tabla 34, se presentan los resultados obtenidos:

Tabla 34. Resultados del balance de energía para el cálculo de la temperatura del aislante

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
T ₁ (°C)	462	k _{SS 304} (W/(m*K))	21,2
T ₂ (°C)	459,7	β (1/K)	0,0035
T ₃ (°C)	84,1	Gr	$6,86 \cdot 10^{11}$
T _{amb} (°C)	15	Pr	0,7
R ₁ (m)	0,652	RaL	$4,68 \cdot 10^{11}$
R ₂ (m)	0,762	Nu	863,06
taislante (m)	0,120	h _{aire} (W/(m ² *K))	5,227
R ₃ (m)	0,882	q (W)	7928,46

Como se puede observar, con el aislante se consigue reducir la temperatura desde los 460°C a los que se encuentra la pared externa del reactor hasta 84,1°C.

Calculando el área de la corona circular y multiplicándola por la longitud del aislante se obtendrá el volumen de este, a partir del cual se hallará el peso del aislante, presentado en la Tabla 35.

Tabla 35. Cálculo del peso del aislante del reactor R-301

Parámetro	Valor		
Volumen (m3)	2,46	Masa del aislante (kg)	221
Densidad aislante (kg/m3)	90,0	Peso del aislante (kN)	2,17

10.8.1.6. Peso del gas

Para estimar el peso del gas en el reactor se ha considerado la masa de gas en el espacio anular del primer y segundo lecho, la masa de gas en el primer y segundo lecho, la masa de gas a través de los tubos del intercambiador y la masa de gas a través del intercambiador considerando una densidad media del fluido en el reactor de 15,2 kg/m³. En la Tabla 36, se presenta el valor del peso del gas estimado en el reactor.

Tabla 36. Determinación del peso del gas en el reactor R-301

Parámetro	Primer lecho	Segundo lecho
Masa de gas en el espacio anular (kg)	3,11	4,67
Masa de gas en el lecho (kg)	9,41	27,70
Masa de gas en los tubos del intercambiador (kg)		1,31
Masa de gas en la carcasa del intercambiador (kg)		3,13
Masa total (kg)		49,34
Peso de gas (kN)		0,48

10.8.1.7. Peso total estimado de las cargas por peso

La carga total por peso a la que se encontrará sometido el reactor será la suma de todos los pesos calculados anteriormente, obteniéndose un valor final de **324,12 kN**.

10.8.2. Cargas por viento

En caso de recipientes altos situados al aire libre es necesario analizar las cargas a las que está sometido el recipiente. Para ello se considera el recipiente como una viga en voladizo sobre la que actúa el viento a lo largo de su longitud y para la cual el momento flector se puede calcular empleando la Ecuación 97, donde W representa la carga por unidad de longitud en N/m, H , la altura total en metros del reactor calculada anteriormente, y M_H el momento de flexión en N*m. (31)

$$M_H = \frac{W * H^2}{2} \quad \text{Ecuación 97}$$

La carga por unidad de longitud se puede calcular a través de la Ecuación 98, donde P_w es la presión del viento expresada en N/m² y D_{eff} representa el diámetro efectivo del reactor, que, a su vez, se pueden calcular empleando la Ecuación 99 y Ecuación 100,

respectivamente. La velocidad del viento representada por u_w se ha considerado de 150 km/h teniendo en cuenta que se han llegado a alcanzar de rachas de viento en Galicia de esa velocidad de acuerdo con un estudio de rachas máximas y temporales de viento en Galicia. (61)

$$W = P_w * D_{eff} \quad \text{Ecuación 98}$$

$$P_w = 0,05 * u_w^2 \quad \text{Ecuación 99}$$

$$D_{eff} = D_m + 2 * t_{aislante} \quad \text{Ecuación 100}$$

En la Tabla 37, se recoge el análisis de cargas por acción del viento.

Tabla 37. Cálculo de cargas por viento para el reactor R-301

Parámetro	Valor
u_w (km/h)	150,0
P_w (N/m ²)	1125
D_{eff} (m)	1,654
W (N/m)	1861
M_H (kN*m)	28,09

10.9. Análisis de tensiones

Una vez calculadas las cargas es posible determinar las tensiones y si estas están dentro del límite permisible para así poder validar el diseño mecánico del equipo. A continuación, se presenta el análisis de los esfuerzos primarios, principales y los compresivos.

10.9.1. Esfuerzos primarios

Los esfuerzos primarios a los que se encuentra sometido el reactor son el esfuerzo radial y el longitudinal como consecuencia de la presión interna, los cuales se calculan de acuerdo con la Ecuación 101 y Ecuación 102 respectivamente. (31)

$$\sigma_{radial} = \frac{P_i * D_i}{2 * t_{carcasa}} \quad \text{Ecuación 101}$$

$$\sigma_{longitudinal} = \frac{P_i * D_i}{4 * t_{carcasa}} \quad \text{Ecuación 102}$$

Por otro lado, cabe destacar el esfuerzo debido al peso total del reactor calculado anteriormente y que se puede determinar mediante la Ecuación 103, donde W_z se corresponde con el peso total del reactor y está expresado en N, y el resto de las dimensiones del reactor en mm. Para puntos por encima del soporte el esfuerzo será compresivo, lo cual se indicará con un signo negativo. (31)

$$\sigma_w = \frac{W_z}{\pi * (D_i + t_{carcasa}) * t_{carcasa}} \quad \text{Ecuación 103}$$

El esfuerzo de pandeo (σ_b) puede calcularse a través de la Ecuación 104, donde M_H representa el momento total de flexión en N*mm calculado previamente en el apartado de cargas por viento, e I_v , se corresponde con el segundo momento del área del recipiente alrededor del plano de flexión en mm⁴ (Ecuación 105). (31)

$$\sigma_b = \pm \frac{M_H}{I_v} * \left(\frac{D_i}{2} + t_{carcasa} \right) \quad \text{Ecuación 104}$$

$$I_v = \frac{\pi}{64} * (D_o^4 - D_i^4) \quad \text{Ecuación 105}$$

En la Tabla 38, se presenta el análisis de tensiones primarios, donde σ_b será positivo o negativo en función de si está a favor o en contra del viento.

Tabla 38. Análisis de esfuerzos primarios del reactor R-301

Parámetro	Valor
σ_{radial} (N/mm ²)	65,27
$\sigma_{longitudinal}$ (N/mm ²)	32,63
σ_w (N/mm ²) (Compresivo)	-0,6633
I_v (mm ⁴)	1,229*10 ¹¹
σ_b (N/mm ²)	±0,1742

10.9.2. Esfuerzos principales

Los esfuerzos principales se pueden calcular a partir de las siguientes ecuaciones (Ecuación 106, Ecuación 107, Ecuación 108), donde σ_z es el esfuerzo total longitudinal y se calcula de acuerdo con la Ecuación 109, donde se ha de considerar el signo de σ_w . Dado que τ , el esfuerzo de corte de torsión no suele ser significativo se ha despreciado en el cálculo. El tercer esfuerzo principal será compresivo.

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} * \left[\sigma_{radial} + \sigma_z + \sqrt{(\sigma_{radial} - \sigma_z)^2 + 4 * \tau^2} \right] \quad \text{Ecuación 106}$$

$$\sigma_2 = \frac{1}{2} * \left[\sigma_{radial} + \sigma_z - \sqrt{(\sigma_{radial} - \sigma_z)^2 + 4 * \tau^2} \right] \quad \text{Ecuación 107}$$

$$\sigma_3 = 0,5 * P_i \quad \text{Ecuación 108}$$

$$\sigma_z = \sigma_{longitudinal} + \sigma_w + \sigma_b \quad \text{Ecuación 109}$$

El esfuerzo total longitudinal tomará un valor u otro en función de si se considera a favor o en contra del viento. En caso de que se encuentre a favor del viento el σ_b , al igual que σ_w , será negativo, mientras que si se encuentra en contra será positivo. En la Tabla 39 se presentan los esfuerzos principales tanto a favor como en contra del viento. Dado que σ_1 toma el mismo valor en los dos casos sólo se indicará su valor una única vez.

Tabla 39. Determinación de esfuerzos principales

Parámetro	Valor
σ_z en contra del viento (N/mm ²)	32,14
σ_z a favor del viento (N/mm ²)	31,80
σ_1 (N/mm ²)	65,27
σ_2 en contra del viento (N/mm ²)	32,14
σ_2 a favor del viento (N/mm ²)	15,06
σ_3 (N/mm ²)	-5,506

A partir de los esfuerzos principales se puede calcular la intensidad máxima de esfuerzo permitida, que será igual al valor numérico más elevado de la diferencia entre los esfuerzos principales tal y como se muestra en la Tabla 40. (31)

Tabla 40. Determinación de la intensidad máxima de esfuerzo permitida

	En contra del viento	A favor del viento
$\sigma_1 - \sigma_2$ (N/mm ²)	33,12	50,21
$\sigma_1 - \sigma_3$ (N/mm ²)	70,77	70,77
$\sigma_2 - \sigma_3$ (N/mm ²)	37,65	20,57
S (N/mm ²)	72,96	

Para poder garantizar que el espesor de la pared del reactor es capaz de soportar las tensiones a las que se encuentra sometido, se ha de verificar que la intensidad máxima de esfuerzo, en este caso, $\sigma_1 - \sigma_3$ con un valor de 70,77 sea inferior al esfuerzo máximo permisible. Como se puede observar el esfuerzo máximo permisible es mayor a la intensidad máxima, por lo que se puede afirmar que el espesor del reactor es adecuado para soportar las tensiones. (31)

10.9.3. Esfuerzos compresivos y estabilidad elástica

El pandeo puede producirse en recipientes esbeltos que se encuentran sometidos a presión y que se origina como consecuencia de desplazamientos transversales a la dirección principal de compresión. Es por ello, que se debe garantizar que el valor del esfuerzo máximo compresivo resultante sea inferior el valor crítico en el que se puede producir el pandeo. (31)

En el caso de aceros el pandeo crítico se puede calcular aplicando la Ecuación 110, donde se incluye un factor de seguridad de 12. Por tanto, si σ_c es mayor a la suma del esfuerzo de pandeo y el esfuerzo por cargas debido al peso total del reactor (Ecuación 111) (ambos con mismo signo), se puede afirmar que el diseño mecánico es correcto.

$$\sigma_c = 2 * 10^4 * \left(\frac{t}{D_o} \right) \quad \text{Ecuación 110}$$

$$\sigma_c > \sigma_b + \sigma_w \quad \text{Ecuación 111}$$

En la Tabla 41, se muestran los resultados obtenidos, a partir de los cuales se puede afirmar que el diseño mecánico es válido para el espesor del reactor propuesto.

Tabla 41. Comprobación de la estabilidad elástica (pandeo)

Parámetro	Valor
σ_c (N/mm ²)	1444
$\sigma_b + \sigma_w$ (N/mm ²)	0,8375

10.10. Selección del soporte

Los soportes tipo falda son los soportes recomendados para soportar recipientes verticales altos, ya que no imponen cargas concéntricas en la carcasa del recipiente. Estos consisten en una carcasa cilíndrica o cónica que se encuentra soldada a la base del reactor, mientras que el fondo de la falda se encuentra anclada a los cimientos mediante una brida. En la Figura 17, se presentan dos diseños típicos con soporte de falda. (31)

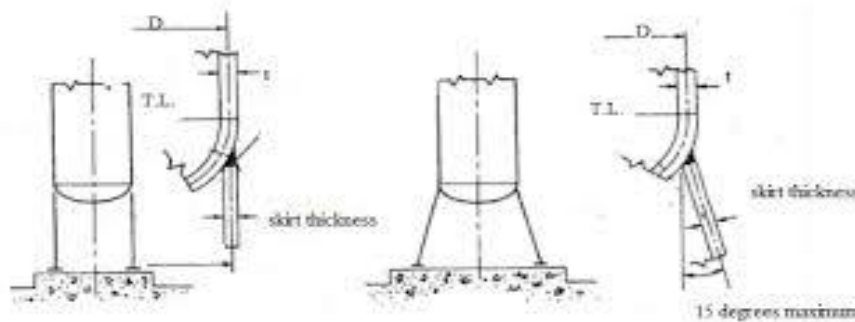


Figura 17. Diseños típicos con soporte de falda: falda recta (izquierda) y falda cónica (derecha) (62)

La soldadura de la falda al recipiente se puede de distintas formas: soldando el cabezal inferior del recipiente a la falda (a), soldando la falda a ras de la carcasa (b), o soldarla al exterior de la carcasa (c), tal y como se puede observar en la Figura 18, siendo más común la segunda opción. (31)

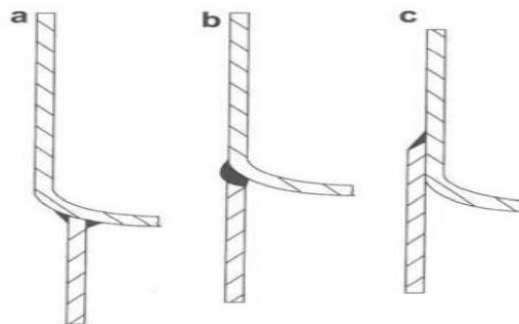


Figura 18. Soldaduras en un soporte de falda (31)

El espesor de la falda deber ser diseñado para soportar el peso total del reactor, las cargas y los momentos de flexión por viento, por lo que se ha de comprobar que el diseño garantice que las concentraciones de esfuerzo resultantes sean inferiores al esfuerzo máximo de diseño permisible. (31)

Los esfuerzos resultantes en la falda se presentan en la Ecuación 112 y Ecuación 113, donde σ_{bs} representa el esfuerzo de flexión en la falda, y σ_{ws} , el esfuerzo debido al peso del reactor en la falda. (31)

$$\sigma_s (\text{tensión}) = \sigma_{bs} - \sigma_{ws} \quad \text{Ecuación 112}$$

$$\sigma_s (\text{compresivo}) = \sigma_{bs} + \sigma_{ws} \quad \text{Ecuación 113}$$

El esfuerzo de flexión de la falda se puede calcular aplicando la Ecuación 114, donde D_s se corresponde con el diámetro interno de la falda y que se considerará igual al diámetro externo del reactor, y t_{sk} representa el espesor de la falda.

$$\sigma_{bs} = \frac{4 * M_H}{\pi * (D_s + t_{sk}) * t_{sk} * D_s} \quad \text{Ecuación 114}$$

Por otro lado, el esfuerzo debido al peso del reactor sobre la falda se puede calcular a través de la Ecuación 119.

$$\sigma_{ws} = \frac{W_z}{\pi * (D_s + t_{sk}) * t_{sk}} \quad \text{Ecuación 115}$$

El espesor de la carcasa se comenzará suponiendo, sabiendo que este no ha de ser inferior a 6 mm. Sin embargo, para facilitar la soldadura, teniendo en cuenta el espesor del reactor, se ha tomado un valor más alto, de 18 mm. Teniendo en cuenta una corrosión permisible de 2 mm, el espesor de la carcasa con los que se empezará el diseño será de 20 mm.

Para comprobar que el espesor de la falda es capaz de soportar las cargas se han de cumplir los siguientes requisitos (Ecuación 116 y Ecuación 117):

$$\sigma_s (\text{tensión}) < S_s * E * \text{sen } \theta_s \quad \text{Ecuación 116}$$

$$\sigma_s (\text{compresivo}) < 0,125 * E_\gamma * \left(\frac{t_{sk}}{D_s} \right) * \text{sen } \theta_s \quad \text{Ecuación 117}$$

Siendo S_s el esfuerzo de diseño máximo permisible para el material de la falda, E_γ , el módulo de Young del material y θ_s , el ángulo base de una falda cónica, que suele estar entre 80 y 90°.

En la KSKS se presentan los resultados obtenidos:

Tabla 42. Comprobación del diseño del soporte tipo falda

Parámetro	Valor	Criterios de diseño	
t_{sk} (mm)	20	S_s (N/mm ²)	72,96
D_s (mm)	1524	E	1
M_H (N*mm)	28086562	E_γ (N/mm ²)	193000
W_z (N)	324115	θ_s	90°

σ_{bs} (N/mm ²)	0,760	$S_s * E * \text{sen } \theta_s$ (N/mm ²)	72,96
σ_{ws} (N/mm ²)	3,341	$0,125 * E_\gamma * \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) * \text{sen } \theta_s$ (N/mm ²)	316,6

Tabla 43. Cálculos de los esfuerzos resultantes en la falda

Esfuerzos resultantes en la falda	
σ_s (tensión) (N/mm ²)	-2,581
σ_s (compresivo) (N/mm ²)	4,101

Como se puede observar ambos esfuerzos son inferiores a la condición impuesta para que el diseño sea válido, por lo que dado que se cumplen la Ecuación 116 y la Ecuación 117 se da el diseño por finalizado, siendo el espesor de 8 mm adecuado.

11.TUBULADURAS Y CONEXIONES

El reactor R-301 presenta diversas aberturas entre las que se encuentran: la entrada de la tubería del gas de alimentación, la salida de la tubería de descarga del gas reaccionado y tres bocas de hombre. Las bocas de hombre son necesarias tanto para las operaciones de mantenimiento del reactor y del intercambiador como para el recambio de catalizador que llevará a cabo aproximadamente cada 10 años. De esta forma, la primera boca de hombre se colocará en el cabezal superior para así permitir introducir el nuevo catalizador al primer lecho, mientras que el viejo será descargado por la parte inferior del lecho y sacado por la boca de hombre situada entre lechos. Esta segunda boca de hombre también tiene la misma finalidad que la primera, recargar con nuevo catalizador el segundo lecho, mientras que, por la parte inferior del reactor, a través de la última boca de hombre, se descargará el catalizador viejo.

También son necesarias las conexiones relacionadas con el lazo de control TIC-306, los relacionados con las alarmas PAH-324 y PAL-325 y otra abertura para la válvula de control del reactor.

Para poder realizar el plano del equipo se han dimensionado las conducciones de entrada y de salida del gas al reactor en base a las velocidades típicas de gases a presión en conducciones (5-10 m/s). Para ello se ha partido de valores de conducciones estándar de acero inoxidable 304 y se ha calculado la velocidad del gas a través de la conducción empleando la Ecuación 118, donde el caudal de gas para la tubería de entrada se corresponderá con el caudal del gas de alimentación, el caudal de salida del reactor será igual al caudal del gas que abandona el segundo lecho y d_i , representa el diámetro interno de la conducción calculado como el radio externo estándar menos 2 veces el espesor.

$$v_{gas} = \frac{Q_{gas}}{\pi * \frac{d_i^2}{4}} \quad \text{Ecuación 118}$$

En la Tabla 44, se recoge el dimensionamiento de ambas conducciones en base a medidas estandarizadas. (47)

Tabla 44. Dimensionamiento de las conducciones de entrada y de salida del reactor R-301 (47)

Conducción de entrada, Sch 80, Acero inox 304, DN 8''		Conducción de entrada, Sch 80, Acero inox 304, DN 8''
Q_{gas} (m ³ /s)	0,205	0,213
d_o (m)	0,219	0,219
Espesor (m)	0,013	0,013
d_i (m)	0,194	0,194
v_{gas} (m/s)	6,94	7,68

12.VÁLVULA DE SEGURIDAD PSV-307

El reactor R-201 se trata de un equipo sometido a una presión muy elevada, por lo que, en caso de falla, por ejemplo del intercambiador calor, se puede producir una sobrepresión en el equipo que, si supera la presión de diseño, provocará el estallido del recipiente. Es por eso que resulta indispensable cumplir una serie de medidas como la medición constante de las condiciones de operación (presión y temperatura), revisión y supervisión de maniobras de mantenimiento tanto del equipo como de los instrumentos de medida, la instalación de un dispositivo de relevo de presión, etc. En este apartado se presentará el diseño básico de una válvula reductora de presión y la selección de esta en base al estándar API RP 250: *Sizing, Selection, and Installation of Pressure-relieving Devices*. (63)

Las ecuaciones básicas de diseño de la válvula de alivio dependen de si se trabaja con flujo crítico, si la presión de operación es inferior o igual a la presión crítica, o con flujo subcrítico, si es superior. Por tanto, el primer paso será calcular la presión crítica presentada en la Ecuación 119, donde P_{cf} , representa la presión crítica; P_1 , se corresponde con la presión de diseño del equipo sobredimensionada un 10%, ambas en unidades de presión absoluta ($P_{man}+P_{atm}$); y k , representa el ratio de las capacidades específicas para gases ideales (C_p/C_v). Los valores obtenidos se presentan en la Tabla 45, donde k se ha obtenido mediante el simulador Aspen Hysys. (63)

$$\frac{P_{cf}}{P_1} = \left[\frac{2}{k+1} \right]^{\frac{k}{k-1}} \quad \text{Ecuación 119}$$

Dado que P_1 es superior a la presión crítica, se ha de dimensionar la válvula para fluido supercrítico para gases.

Tabla 45. Determinación de la presión crítica del fluido

Parámetro	Valor
P_1 (kPa _a)	11.111,1
k	1,358
P_{cf} (kPa _a)	59.4954,6

El área efectiva de descarga requerida para una válvula PRV (Pressure Reducing Valve) se puede calcular mediante la Ecuación 120, donde A representa dicha área en

mm²; W , el caudal másico del fluido que atraviesa dicho dispositivo en kg/h; F_2 , el coeficiente del fluido supercrítico (Ecuación 121); r es la relación entre la contrapresión P_2 y la presión de descarga aguas arriba P_1 ; K_d es el coeficiente efectivo de descarga y que para diseños preliminares toma el valor de 0,62 cuando la válvula todavía no está instalada; K_c es un factor de corrección para instalaciones con disco de ruptura y que toma el valor de 1 cuando aún no está instalada; M_r representa la masa molecular, tomada como el valor medio; T es la temperatura absoluta a la que se descarga el fluido, considerada como la temperatura de diseño; y Z , el factor de compresibilidad, se ha tomado como 1. El valor de P_2 se ha determinado como la suma de la presión atmosférica y el 10% de la presión de descarga P_1 . (63)

$$A = \frac{17,9 * W}{F_2 * K_d * K_c} * \sqrt{\frac{Z * T}{M_r * P_1 * (P_1 - P_2)}} \quad \text{Ecuación 120}$$

$$F_2 = \sqrt{\left(\frac{k}{k-1}\right) * r^{2/k} * \left(\frac{1 - r^{\frac{k-1}{k}}}{1 - r}\right)} \quad \text{Ecuación 121}$$

En la Tabla 46, se presentan los resultados obtenidos, que permitirán seleccionar una válvula comercial en base al área del orificio de descarga.

Tabla 46. Dimensionado básico de la válvula de seguridad PSV-307

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
P_1 (kPa)	11.111,1	K_c	1,0
P_2 (kPa)	1.211,1	Z	1,0
r	0,11	T (K)	786,36
F_2	0,29	M_r (kg/kmol)	9,05
W (kg/h)	11699,2	A (mm ²)	1118,66
K_d	0,62		

A partir de un catálogo comercial para válvulas de seguridad con bridas que sigue el estándar de API 526 se han consultado las especificaciones de orificio, siendo el valor más próximo por encima del calculado 1,838 in² (1185,8 mm²), el cual se corresponde con una válvula con un orificio tipo K. (64)

13. BIBLIOGRAFÍA

1. **Industrial Efficiency Technology Database.** Using Low-Pressure Ammonia Synthesis Catalysts. [En línea] Institute for Industrial Productivity. [Citado el: 23 de mayo de 2022.] <http://www.iipinetwork.org/wp-content/letd/content/using-low-pressure-ammonia-synthesis-catalysts.html>.

2. **APPL, Max.** Ammonia, 2. Production Processes. [En línea] Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 15 de octubre de 2011. [Citado el: 30 de abril de 2022.] https://doi-org.ezbusc.usc.gal/10.1002/14356007.o02_o11.

3. **FOGLER, H. S., GÜRMEN, M. N.** Elements of Chemical Reaction Engineering. Strategies for Creative Problem Solving Website. *Additional Homework Problems*. [En línea] [Citado el: 28 de abril de 2022.] <http://websites.umich.edu/~essen/html/06chap/html/cdp4g.htm>.
4. **SMITH, J. M., VAN NESS, H. C., ABBOTT, M. M., SWIHART, M. T.** *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. Nueva York : Mc Graw Hill Education, 2018. 978-1-259-69652-7.
5. **LIU, Huazhang, HAN, Wenfeng.** Wüstite-based catalyst for ammonia synthesis: Structure, property and performance. [En línea] *Catalysis Today* 297, 13 de junio de 2017. [Citado el: 23 de mayo de 2022.] <http://dx.doi.org/10.1016/j.cattod.2017.04.062>.
6. **RINGER, Norbert, STOCKWELL, Rob.** AmoMax-10. A novel Ammonia Synthesis Catalyst. [En línea] *Ammonia Technical Manual*. http://www.iffcokandla.in/data/polopoly_fs/1.2466925.1439387260!/fileserver/file/523557/filename/018.pdf.
7. **Huazhang Liu, Wenfeng Han, Chao Huo, Yaqing Cen.** Development and application of wüstite-based ammonia synthesis catalysts. *Institute of Industrial Catalysis of Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China*. [En línea] 24 de octubre de 2019. [Citado el: 20 de noviembre de 2022.] <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2019.10.031>.
8. **N. Pernicone, F. Ferrero, I. Rossetti, L. Forni, P. Canton, P. Riello, G. Fagherazzi, M. Signoretto, F. Pinna.** Wustite as a new precursor of industrial ammonia synthesis catalysts. [En línea] *Applied Catalysis A: General*, Volume 251, Issue 1, Pages 121-129, 25 de septiembre de 2003. [Citado el: 28 de abril de 2022.] [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(03\)00313-2](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(03)00313-2).
9. **RASE, Howard F.** *Fixed-Bed Reactor Design and Diagnostics Gas-Phase Reactions*. London : Butterworths, 1990. 0-409-90003-6.
10. **CLARIANT.** Catalysts for Ammonia Synthesis AMOMAX. [En línea] [Citado el: 8 de mayo de 2022.] <https://www.clariant.com/es/Solutions/Products/2014/07/22/10/58/AMOMAX10>.
11. **APPL, Max.** Ammonia, 2. Production Processes. [En línea] *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, 15 de octubre de 2011. [Citado el: 23 de mayo de 2022.] https://doi-org.ezbusc.usc.gal/10.1002/14356007.o02_o11.
12. **TRAMBOUZE, Pierre, EUZEN, Jean-Paul.** *Chemical Reactors from Design to Operation*. Paris : Technip, 2004. 2-7108-0845-5.
13. **Parr Instrument Company.** Reactores de Lecho Fluidizado. [En línea] [Citado el: 24 de mayo de 2022.] <https://www.parrinst.com/es/products/tubular-reactor-systems/fluidized-bed-reactors/>.

14. **KOLIOS, G., FRAUHAMMER, J., EIGENBERGER.** Autothermal fixed-bed reactor concepts. *Chemical Engineering Science, Volume 55, Issue 14.* [En línea] diciembre de 2000. [Citado el: 24 de mayo de 2022.] [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(00\)00183-4](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(00)00183-4).

15. **RIZZI, Enrico, FILIPPI, Ermanno.** Adiabatic multi-bed catalytic converter with inter-bed cooling. *Casale S.A.* [En línea] International Application Published under the Patent Cooperation Treaty (PCT), 29 de enero de 2013. [Citado el: 25 de mayo de 2022.] <https://patentimages.storage.googleapis.com/da/f9/aa/ec740701708ffa/EP2759338A1.pdf>.

16. **TOPSOE S-200 concerter without lower heat exchanger.** [En línea] [Citado el: 25 de mayo de 2022.] https://encrypted-tbn0.gstatic.com/images?q=tbn:ANd9GcRtPrgF5aFNZXirg9lFfPIi2dwYEUH_lfj05ZXFORt3LJgY1UPBkpeivrThoxN300KzIQ4&usqp=CAU.

17. **SLACK, A., JAMES, R.** *Ammonia (in four parts). Part III.* Nueva York : Fertilizer Science and Technolgy Series, 1997. 0-8247-6188-X.

18. **LI, J. C. H.** Radial-Flow Packed-Bed Reactors. [En línea] Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 15 de julio de 2007. [Citado el: 9 de mayo de 2022.] https://doi.org/10.1002/14356007.l22_l01.

19. **CASALE.** Ammonia Process A60TM. Wide knowledge condensed in a small plant. [En línea] [Citado el: 25 de mayo de 2022.] <https://www.casale.ch/downloads/ammonia/7-ammonia-process-a60/file>.

20. **D.C. Dyson , J.M. Simon.** Kinetic Expression with Diffusion Correction for Ammonia Synthesis on Industrial Catalyst. [En línea] Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals. 1968, 7, 4, 605–610, 1 de Noviembre de 1968. [Citado el: 25 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.1021/i160028a013>.

21. **Ilenia Rossetti, Nicola Pernicone, Francesco Ferrero, Lucio Forni.** Kinetic Study of Ammonia Synthesis on a Promoted Ru/C Catalyst. Comparison with Commercial Fe-Based Catalysts. *I&EC research. Industrial & Engineering Chemistry Research.* [En línea] 2006, 16 de abril. [Citado el: 28 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.1021/ie051398g>.

22. **Muhhammad Mahmoud, Fatma Khalifa, Walaa Mahmoud.** Simple new correlation for the prediction of equilibrium constant (Kp) of Haber reaction covering the industrial conditions. [En línea] Egyptian Journal of Petroleum, marzo de 2021. [Citado el: 28 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2020.12.003>.

23. **Louis J. Gillespie, James A. Beattie.** The thermodynamic treatment of chemical equilibria in systems composed of real cases. An aproximate equation for the mass action function applied to the existing data on the Haber equilibrium. *Research Laboratory of Physical Chemistry, Massachusetts Institue of Technology.*

[En línea] 30 de junio de 1930. [Citado el: 28 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.1103/PhysRev.36.743>.

24. Carberry, James J. *Ingeniería de las Reacciones Químicas y Catalíticas*. Buenos Aires : Editorial Géminis S.R.L., 1980. 0-07-009790-9.

25. Foad Farivar, Habib Ale Ebrahim. Simulation of an axial-radial ammonia synthesis reactor by linking COMSOL-MATLAB software. *Royal Society of Chemistry*. [En línea] 14 de septiembre de 2014. [Citado el: 30 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.1039/C4RA05622A>.

26. M.R. Panahandeh, J. Fathikaljahi, M. Taheri. Steady-State Modeling and Simulation of an Axial-Rafial Ammonia Synthesis Reactor. *Chemical Engineering & Technology*. [En línea] 11 de junio de 2003. [Citado el: 20 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.1002/ceat.200390101>.

27. Md. Burhan Kabir, Md. Naimur Rahman, M.A.A. Shoukat Choudhury, Md. Ali Akkas, Mohaiminul Islam. Optimal Design of Ammonia Synthesis Reactor for a Process Industry. *Journal of King Saud University- Engineering Sciences*. [En línea] 29 de agosto de 2020. [Citado el: 30 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.1016/j.jksues.2020.08.004>.

28. Kevin H. R. Rouwenhorst, Anthony S. Travis, Leon Lefferts . 1921-2021: A century of Renewable Ammonia Synthesis. *Sustainable Chemistry*. [En línea] 7 de abril de 2022. [Citado el: 1 de mayo de 2022.] <https://doi.org/10.3390/suschem3020011>.

29. FOGLER, Scott H. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. s.l. : 4ª ed. PEARSON Prentice Hall, 208. 978-970-26-1198-1.

30. Sim Yee Chin, Anwaruddin Hisyam, Haniif Prasetyawan. Modeling and Simulation Study of an Industrial Radial Moving Bed Reactor for Propane Dehydrogenation Process. [En línea] International Journal of Chemical Reactor Engineering, 4 de noviembre de 2015. [Citado el: 1 de mayo de 2022.] <https://doi.org/10.1515/ijcre-2014-0148>.

31. SINNOT, Ray, TOWLER, Gavin. *Diseño en ingeniería química*. Barcelona : Reverté, 2012. 978-84-291-7199-0.

32. CHANG, Hsueh-Chia, SAUCIER, Michael, CALO, J. M. . Design Criterion for Radial Flow Fixed-Bed Reactors. [En línea] AIChE Journal , noviembre de 1983. [Citado el: 30 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.1002/aic.690290624>.

33. HyperPhysics. Viscosidad de los Gases. [En línea] Department of Physics and Astronomy. Georgia State University. [Citado el: 7 de mayo de 2022.] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/Kinetic/visgas.html>.

34. DAVIDSON, Thomas A. A Simple and Accurate Method for Calculating Viscosity of Gaseous Mixtures. [En línea] 1993. [Citado el: 7 de mayo de 2022.] https://stacks.cdc.gov/view/cdc/10045/cdc_10045_DS1.pdf.

35. MARCANO, Rubén. Viscosidad. Ley de Newton. . *Cálculo de la viscosidad de gases*. [En línea] [Citado el: 7 de mayo de 2022.] <https://marcanord.files.wordpress.com/2013/01/viscosidad-rdmc.pdf>.

36. Engineers EDGE. Overall Heat Transfer Coefficient Table Chart. . [En línea] [Citado el: 28 de mayo de 2022.] https://www.engineersedge.com/thermodynamics/overall_heat_transfer-table.htm.

37. INCROPERA, Frank, DE WITT, David. *Fundamentos de Transferencia de Calor*, 4ªed. México : Prentice Hall, 1999. 970-17-0170-4.

38. ZHU, J., ARAYA, S., CUI, X., LENNART, S., KNUDSEN, S. Modeling and Design of a Multi-Tubular Packed-Bed Reactor for Methanol Steam Reforming over a Cu/ZnO(Al₂O₃ Catalyst. [En línea] Energies, 31 de enero de 2020. [Citado el: 22 de abril de 2022.] <https://doi.org/10.3390/en13030610>.

39. MARLIN STEEL. Wire Mesh or Perforated Sheet Metal, Which is Better for Your Needs? [En línea] Custom Wire Baskets, 27 de marzo de 2014. [Citado el: 14 de mayo de 2022.] <https://www.marlinwire.com/blog/wire-mesh-or-perforated-sheet-metal-which-is-better-for-your-needs>.

40. IPA. Industrial Perforators Association. Designers, Specifiers & Buyers. Handbook for Perforated Metals. [En línea] [Citado el: 14 de mayo de 2022.] <https://www.marcospecialtysteel.com/content/uploads/2017/01/Perforated-Handbook-for-designers-min.pdf>.

41. SYCHEVA, A.M., ABROSIMOV, B.Z., MEL'NIKOV, S.M., FADEEV, I.G. Effect of ratio of catalyst bed height to vessel diameter on distribution of flow in reactors with radial inlet. [En línea] Chemistry and Thecnology of Fuels and Oils, 9, 372-375, mayo de 1973. [Citado el: 15 de mayo de 2022.] <https://doi.org/10.1007/BF00729148>.

42. BOEGGER. Perforated Stainless Steel Sheet. [En línea] [Citado el: 14 de mayo de 2022.] <https://www.perforated-sheet.com/perforationmaterial/perforated-stainless-steel-sheet.html>.

43. YIECH CORP. Tabla de conversión de Gauge (calibre). [En línea] [Citado el: 17 de mayo de 2022.] <https://www.yieh.com/es/CustomerService/GaugeSizeChart>.

44. Design Resource Library. Resistance of Perforated Plates. [En línea] [Citado el: 15 de mayo de 2022.] https://www.design1st.com/Design-Resource-Library/engineering_data/AirFlowResistanceofPerforatedPlates.pdf.

45. SOBOLEWSKI, A., BANDROWSKI, J. Determination of pressure drop through gas distributors in multistage fluidized-bed vessels. [En línea] Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 27 de julio de 2022. [Citado el: 29 de mayo de 2022.] [https://doi.org/10.1016/0255-2701\(94\)00534-6](https://doi.org/10.1016/0255-2701(94)00534-6).

46. Koch-Glitsch. Packed Tower Internals. [En línea] [Citado el: 29 de mayo de 2022.] <https://koch-glitsch.com/technical-documents/brochures/packed-tower-internals>.

47. ACINESGON. TUBOS>>TUBERIA SCHEDULE ASTM ACERO INOXIDABLE. [En línea] [Citado el: 30 de mayo de 2022.] <https://www.acinesgon.com/productos/tubos/tuberia-schedule-astm/>.

48. ASME. ASME Boiler and Pressure Vessel Code. An International Code. Section VIII. Division 1. [En línea] 2019. [Citado el: 3 de junio de 2022.] <https://123sanat.com/d/catalogue/ASME-VIII-8-div.1-2019.pdf>.

49. DILLON, C.P. *Materials Selection for the Chemical Process Industries*. s.l. : McGraw-Hill Inc, 1991. 978-0070169845.

50. Valbruna. Aceros Inoxidables Austeníticos. [En línea] [Citado el: 13 de mayo de 2022.] <http://valbruna.com.mx/clasificacion-de-los-acero-inoxidables/aceros-inoxidables-austeniticos/>.

51. Hydrogen Tools. Material Compatibility. *Materials for Hydrogen Gas Applications*. [En línea] [Citado el: 13 de mayo de 2022.] <https://h2tools.org/bestpractices/material-compatibility>.

52. Tech Briefs. Nickel-Based Superalloy Resists Embrittlement by Hydrogen. [En línea] 2022. [Citado el: 13 de mayo de 2022.] <https://www.techbriefs.com/component/content/article/tb/pub/briefs/materials/2867#:~:text=It%20has%20excellent%20strength%20and,tensile%20properties%20in%20gaseous%20hydrogen..>

53. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Ammonia, 3. Production Plants. [En línea] 15 de octubre de 2011. [Citado el: 13 de mayo de 2022.] https://doi-org.ezbusc.usc.gal/10.1002/14356007.o02_o12.

54. ASME. ASME. Boiler and Pressure Vessel Code An International Code. Section II. Materials. [En línea] 2019. [Citado el: 3 de junio de 2022.] <https://nexnor.com/wp-content/uploads/2020/02/ASME-II-PART-D-METRIC-2019.pdf>.

55. FILIPPI, Ermanno, RIZZI, Enrico, TAROZZO, Micro. Walls for catalytic beds of radial or radial-axial-flow reactors. CASALE SA. [En línea] European Patent Application, 20 de septiembre de 2017. [Citado el: 10 de abril de 2022.] <https://patentimages.storage.googleapis.com/97/d5/9f/c55c516ff5331c/EP3219384A1.pdf>. EP 3 219 384 A1.

56. The Engineering ToolBox. Steel Plates-Size & Wight. *Steel Plate Thickness and Wigth-Metric Units*. [En línea] [Citado el: 3 de junio de 2022.] https://www.engineeringtoolbox.com/steel-plates-weight-d_1561.html.

57. Engineers's Aide Reference Guide. Pressure Vessel-Tank Sizing. *Standard shell diameters*. [En línea] [Citado el: 3 de junio de 2022.] <http://www.k2-encon.com/FileUpload/bs650089/File/pvtanksizing.pdf>.

58. DIN. German Institute for Standardization. DIN 28013. Ellipsoidal 2:1 Heads . [En línea] [Citado el: 3 de junio de 2022.] <https://i.pinimg.com/originals/a2/c0/e1/a2c0e1fd72e1732002d8c7023f8221f3.png>.

59. INGLESA. Diseño y Cálculo de Tanques de Almacenamiento. [En línea] [Citado el: 4 de junio de 2022.] <https://www.fnmt.es/documents/10179/10666378/Dise%C3%B1o+y+c%C3%A1lculo+de+tanques+de+almacenamiento.pdf/cf73a420-13f2-248f-034a-d413cb8a3924>.

60. ISOVER. Soluciones de aislamiento para aplicaciones de industria. Lanás Minerales ISOVER. [En línea] [Citado el: 4 de junio de 2022.] https://www.isover.es/sites/isover.es/files/assets/documents/manual_sol_aisl_aplicaciones_industria-1.pdf.

61. MARTÍ, Alberto, GARCÍA, Eduardo, MIRAGAYA, Antonio. Rachas máximas y temporales de viento en Galicia. [En línea] Departamento de Xeografía. Universidade de Santiago de Compostela. [Citado el: 4 de junio de 2022.] <https://www.divulgameteo.es/uploads/Rachas-temporales-viento-Galicia.pdf>.

62. Pictures showing types of skirt constructions. [En línea] [Citado el: 5 de junio de 2022.] https://www.google.com/url?sa=i&url=http%3A%2F%2Fwww.ijmer.com%2Fpapers%2FVol3_Issue4%2FCG3422152218.pdf&psig=AOvVaw1sbfPkE9VI2uh_WCVNGoVT&ust=1654528004210000&source=images&cd=vfe&ved=0CAwQjRxqFwoTCNiwr6PLlvGCFQAAAAAdAAAAABAI.

63. Sizing, Selection, and Installation of Pressure-relieving Devices. Part I- Sizing and Selection. *API STANDARD 520*. [En línea] diciembre de 2013. [Citado el: 3 de junio de 2022.] http://ballots.api.org/cre/scprs/ballots/docs/520part1/520%20part%201%20with%20corrections_2013_02-19.pdf.

64. Leser. Serie API. Válvulas de Seguridad con Bridas. Serie 526. [En línea] [Citado el: 3 de junio de 2022.] <https://www.bvalve.es/wp-content/uploads/2013/05/serieapivalvuladeseguridad.pdf>.

ANEXO III:
VIABILIDAD
ECONÓMICA

ÍNDICE

1. Introducción.....	3
2. Inversión inicial.....	3
3. Financiación	3
4. Costes de producción	5
4.1. Costes de materias primas.....	5
4.2. Coste de las utilidades.....	5
4.3. Coste de mano de obra.....	7
4.4. Costes obtenidos por factores	7
5. Beneficio por ventas.....	8
6. Amortizaciones.....	8
7. Flujos de caja.....	8
8. VALOR NETO Actual (VAN)	12
9. Tasa Interna de Retorno (TIR)	12
10. Plazo de Recuperación (payback).....	12
11. Análisis de sensibilidad.....	13
11.1. Variación de coste de energía	13
11.2. Variación de coste de energía y de costes variables	13
12. Conclusión de la viabilidad económica	14
13. Bibliografía.....	15

1. INTRODUCCIÓN

A la hora de diseñar un proceso es necesario conocer cuál será la evaluación económica del mismo, pues los procesos industriales tienen como objetivo producir beneficios para aquellos que invierte en él. Esta evaluación económica se realiza en base a dos indicadores de rentabilidad del proyecto: el VAN (Valor Actual Neto) y la TIR (Tasa Interna de Retorno). Además, se evaluarán los ingresos y gastos a través de los flujos de caja, determinando el año en que se recupera la inversión inicial, criterio conocido como *payback*. (1)

Para poder obtener los parámetros anteriores será necesario calcular previamente la inversión inicial (formado por el capital fijo y el circulante), los ingresos por la venta del producto (amoníaco) y subproducto (oxígeno), junto con los costes de producción de este, relacionados con las utilidades y la energía. Para terminar, comprobará como afectan los parámetros más relevantes a la viabilidad del proceso: precio de la energía, precio del amoníaco y la inversión inicial.

2. INVERSIÓN INICIAL

La inversión inicial para la planta de producción de amoníaco verde a microescala se ha calculado en base a métodos factoriales para el coste de equipos y para el coste de las demás estructuras, accesorios y tuberías. Será el valor monetario que se desembolsará cuando se desee construir dicha planta. La forma de cálculo se detalla en el *Documento V. Presupuesto* alcanzando el valor de 221.874.223,08 €.

3. FINANCIACIÓN

Para poder realizar el proyecto es necesario disponer de la cantidad de dinero estimada para la construcción y puesta en marcha de la planta, además de los fondos de contingencia y el capital circulante. Para obtener el dinero se empleará un Bono Sostenible ICO (2) del cual se puede negociar la cantidad y el interés. Se tomará como que la cantidad negociada es el total y el interés será el valor típico de interés del 6%. Se llevará a cabo el sistema de amortización francés, en el cual las cuotas pagadas serán siempre las mismas a lo largo de los años y se pagará una vez al año, siendo el método más empleado a nivel español.

En este método, las proporciones de devolución de préstamo varían al mantenerse constante los valores de las mensualidades, puesto que los intereses se calculan en base al capital vivo restante a devolver, siendo mayores en los primeros años y más bajos en los últimos, a medida que disminuye la deuda. La amortización del préstamo variará de forma contraria. (1)

El cálculo de la anualidad se realizará mediante la Ecuación 1 en la que la anualidad se obtiene a partir de C_0 que será la cantidad total prestada por la entidad, i será el tipo de interés anual y n el número de pagos a realizar, el cual por recomendaciones de ICO (Instituto de Crédito Oficial) será un plazo largo, por lo que se tomará el tiempo de vida de la planta, 20 años.

Anexo III. Viabilidad Económica
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

$$anualidad = C_0 \cdot \left(\frac{i}{1 - (1 + i)^{-n}} \right) \quad \text{Ecuación 1}$$

Se ha de tener en cuenta también que al tratarse de una empresa existirá un cierto ahorro de impuestos del 25% sobre el valor de los intereses pagados cada año. Se pueden observar los distintos flujos de caja resultado de la devolución del bono en la Tabla 1.

Tabla 1. Devolución del préstamo por el método francés

Año	Capital Vivo	Intereses	Principal	Anualidad	Ahorro Impuestos	Flujos
0	221.874.223,08					221.874.223,08
1	215.842.670,62	13.312.453,38	6.031.552,46	19.344.005,84	3.328.113,35	-16.015.892,50
2	209.449.225,01	12.950.560,24	6.393.445,61	19.344.005,84	3.237.640,06	-16.106.365,78
3	202.672.172,67	12.566.953,50	6.777.052,34	19.344.005,84	3.141.738,38	-16.202.267,47
4	195.488.497,18	12.160.330,36	7.183.675,48	19.344.005,84	3.040.082,59	-16.303.923,25
5	187.873.801,17	11.729.309,83	7.614.696,01	19.344.005,84	2.932.327,46	-16.411.678,39
6	179.802.223,40	11.272.428,07	8.071.577,77	19.344.005,84	2.818.107,02	-16.525.898,83
7	171.246.350,96	10.788.133,40	8.555.872,44	19.344.005,84	2.697.033,35	-16.646.972,49
8	162.177.126,17	10.274.781,06	9.069.224,79	19.344.005,84	2.568.695,26	-16.775.310,58
9	152.563.747,90	9.730.627,57	9.613.378,27	19.344.005,84	2.432.656,89	-16.911.348,95
10	142.373.566,93	9.153.824,87	10.190.180,97	19.344.005,84	2.288.456,22	-17.055.549,62
11	131.571.975,10	8.542.414,02	10.801.591,83	19.344.005,84	2.135.603,50	-17.208.402,34
12	120.122.287,77	7.894.318,51	11.449.687,34	19.344.005,84	1.973.579,63	-17.370.426,22
13	107.985.619,19	7.207.337,27	12.136.668,58	19.344.005,84	1.801.834,32	-17.542.171,53
14	95.120.750,50	6.479.137,15	12.864.868,69	19.344.005,84	1.619.784,29	-17.724.221,56
15	81.483.989,68	5.707.245,03	13.636.760,81	19.344.005,84	1.426.811,26	-17.917.194,59
16	67.029.023,22	4.889.039,38	14.454.966,46	19.344.005,84	1.222.259,85	-18.121.746,00
17	51.706.758,77	4.021.741,39	15.322.264,45	19.344.005,84	1.005.435,35	-18.338.570,50
18	35.465.158,45	3.102.405,53	16.241.600,32	19.344.005,84	775.601,38	-18.568.404,46
19	18.249.062,12	2.127.909,51	17.216.096,34	19.344.005,84	531.977,38	-18.812.028,47
20	0,00	1.094.943,73	18.249.062,12	19.344.005,84	273.735,93	-19.070.269,91

4. COSTES DE PRODUCCIÓN

Dentro del análisis económico es muy relevante tener en cuenta que a lo largo del período de explotación los costes principales serán los costes de producción. Estos costes engloban costes de materias primas, las utilidades y la energía principalmente. También se ha de contabilizar la mano de obra, costes de laboratorio y aquellos asociados a la investigación y desarrollo.

4.1. Costes de materias primas

Para el caso de la planta actual, el aire será una materia prima que se obtendrá de forma gratuita de la atmósfera, por lo tanto su coste será nulo. Mientras que el agua sí tendrá un coste. Ya bien se emplee el agua ofrecida por la estación depuradora para el polígono PLISAN o se realice una captación directa del río Miño previo requerimiento a las pertinentes administraciones, la obtención del agua tendrá un coste y este se estimará a partir del coste ofrecido por la bibliografía que es 1,24 €/m³. (3) El caudal de agua empleado en la planta es de 3,6 m³/h y teniendo en cuenta que la planta funcionará las 24 horas del día durante 330 días al año se obtiene un consumo de agua de 28.136,51 m³ y por lo tanto un coste de 34.889,28 €

4.2. Coste de las utilidades

Las utilidades son un coste importante en la planta, por lo tanto también lo serán en el coste anual de la misma. Su coste no es fácil de estimar de forma precisa, por lo que se aplicará una aproximación como energía eléctrica, es decir, todo el calor intercambiado en equipos de intercambio de calor que empleen utilidades (se excluyen aquellos de recuperación energética) se convertirán en potencias y se calculará su coste a partir del coste de la energía eléctrica.

Los calores intercambiados se recogen en la Tabla 2 junto con los valores de potencia finales.

Tabla 2. Potencia eléctrica equivalente de los intercambiadores de calor que emplean utilidades.

Intercambiador	Q (kJ/h)	Potencia (kW)
E-101	-396.000,00	110
E-103	-3.230.000,00	897,22
E-106	-599.000,00	166,39
E-201	941.000,00	261,39
E-202	-754.000,00	209,44
E-203	-627.000,00	174,17
E-304	-6.930.000,00	1925
Total		3.743,61

Anexo III. Viabilidad Económica

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Con estos valores de potencia y añadiendo los demás equipos con consumo eléctrico se puede obtener el consumo energético anual de la planta. Se presentan en la Tabla 3 los distintos equipos de impulsión con consumo eléctrico de la planta de producción de amoníaco, en la Tabla 4 los equipos generadores de energía, y en la Tabla 5 un resumen de todos los equipos junto con la potencia total final.

Tabla 3. Equipos de impulsión con consumo eléctrico

Equipo	Potencia (kW)
C-101	231,00
C-102	1.104,74
C-103	229,63
C-201	177,92
C-301	755,57
C-302	21,33
P-201 A/B	1,98
Total	2.521,18

Tabla 4. Equipos generadores de energía eléctrica

Equipo	Potencia (kW)
TUR-101	428,90
TUR-301	128,21
Total	557,11

Tabla 5. Resumen de consumo y producción eléctrica

Equipo	Potencia (kW)
Intercambiadores	3.743,61
Equipos de impulsión	2.521,18
Electrolizador	17.500,00
Turbinas	-557,11
Total	23.207,68

Teniendo en cuenta las horas de trabajo de los equipos (24 horas durante 330 días) resulta en un consumo de energía de 183.804,83 MWh. El coste de la energía eléctrica se

encuentra actualmente en valores muy elevados comparados con los de unos años atrás, además fluctúa en gran medida en los últimos meses debido tanto a la crisis de coronavirus como a la guerra en Ucrania. Los valores de un mes promedio más próximos se obtienen en (4) y resultan de 205,8 €/MWh en febrero de 2022, mientras que el valor promedio del 2021 es de 118,83 €/MWh según el BOE del martes 19 de abril de 2022.

Se empleará en principio el valor más elevado para hacer los cálculos, resultando en un coste de electricidad de 37.827.033,11 €/año.

4.3. Coste de mano de obra

Para el cálculo del número de operarios necesarios en la planta se puede usar la Ecuación 2 ofrecida por la bibliografía (5) en la que N_{OL} es la cantidad de operarios necesarios por cada turno, suponiendo un total de 4,5 turnos según la metodología, P es el número de equipos en los que se emplean sólidos (en este caso ninguno) y N_{np} es el número de equipos que operan con fluidos excepto bombas y tanques de almacenamiento.

$$N_{OL} = (6,29 + 31,7 \cdot P^2 + 0,23 \cdot N_{np})^{0,5} \quad \text{Ecuación 2}$$

Teniendo en cuenta que el número de equipos N_{np} será de 35 el número de operarios por turno resulta de 3,79 que de forma global sería un total de 17,04 que se aproxima por 18 operarios. El sueldo más elevado ofrecido en el convenio de de CCOO para la industria química es de 43.782,40 €/año, por lo que el coste total de mano de obra asciende a 788.083,20 €/año.

4.4. Costes obtenidos por factores

Los costes por mantenimiento, de seguros, de administración, por servicios auxiliares (vigilancia, limpieza) y comerciales se estiman por un factor como recomendación por la bibliografía. (5) (6) Los porcentajes, valores sobre los que se toman y los costes se presentan en la Tabla 6.

Tabla 6. Costes de explotación y gestión obtenidos por factores.

Ítem	Referencia	Porcentaje (%)	Coste (€)
Materias primas	Datos calculados	-	34.889,27
Costes Indirectos de producción	Costes de explotación	11,5	94.641,83
Mano de obra	Datos calculados	-	788.083,20
Mano de obra indirecta	Mano de obra directa	21	165.497,47
Costes de mantenimiento	Costes fijos	8	17.749.937,85
Costes de distribución	Costes de explotación	2	16.459,45
Servicios auxiliares	Costes de explotación	5	41.148,62
Costes de Explotación			18.849.509,07
Costes administrativos	Costes de fabricación	3	566.719,73

Anexo III. Viabilidad Económica
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Costes de investigación	Costes fijos	1	2.218.742,23
Seguros	Costes fijos	1	2.218.742,23
Costes de Gestión			5.004.204,19
Total: Costes de Gestión y de Explotación			23.853.713,27

5. BENEFICIO POR VENTAS

El beneficio principal de la planta será proveniente de la venta de amoníaco anhidro. Como se mencionó en el *Documento I. Memoria* el precio de venta promedio del amoníaco se encuentra en 1.078,00 €/t, para el mes de febrero 2022. (7) También se tendrá en cuenta el oxígeno como subproducto, con un precio promedio de 39,2 €/t. (8)

Tabla 7. Beneficios por ventas de productos y subproductos.

Ítem	Masa total a vender (t)	Beneficio (€)
Amoníaco	16.528,72	17.817.963,61
Oxígeno	24.793,56	971.907,55
Total		18.789.871,16

6. AMORTIZACIONES

El capital inmovilizado pierde valor a lo largo de los años, debido a que tiene un tiempo limitado de uso debidos a desgaste físico y/o químico, al envejecimiento o por obsolescencia debido a la implantación de equipos más nuevos. Las amortizaciones reducen la cantidad de impuestos a pagar, pues se considera como un coste total de la planta repartido a lo largo de los años de vida de la misma. Se trata de una partida obligatoria a efectos contables y se obtiene con la Ecuación 3. (1)

$$\text{Amortización} = \frac{\text{Costes fijos} - \text{Coste parcela}}{\text{Vida útil}} \quad \text{Ecuación 3}$$

Se asume que la amortización se realizará a lo largo de 20 años. Se tiene en cuenta que el terreno no es amortizable, por lo tanto, según la ecuación anterior resulta una cuota de amortización anual de 10.926.154,10 €/año.

7. FLUJOS DE CAJA

Tras realizar los cálculos anteriores ya se tiene los datos disponibles para la realización de los cálculos de los flujos de caja. Es necesario tener en cuenta que el valor del dinero cambia con el tiempo, en base a un determinado valor de inflación según la Ecuación 4 en la que i será el valor de la inflación y se estimará de un valor de 7%, se estima mediante el IPC, que actualmente se encuentra en valores de 8,4% pero está

Anexo III. Viabilidad Económica

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

sufriendo grandes variaciones en los últimos meses. (9) El valor de j se corresponde con el año del cual se calcula.

$$Valor\ futuro = Valor\ actual \cdot (1 + i)^j \quad \text{Ecuación 4}$$

También se han de actualizar los valores de los flujos netos descontados teniendo en cuenta una tasa anual de descuento (k) del 12%, la cual será empleada posteriormente también. Se emplea la Ecuación 5 para realizar este cálculo.

$$Flujo\ neto\ de\ caja\ descontado_j = \frac{Flujo\ neto\ de\ caja_j}{(1 + k)^j} \quad \text{Ecuación 5}$$

Se realizarán estos cálculos para los 20 años de vida útil de la planta, partiendo del préstamo necesario para asumir los costes de la planta que se ha descrito anteriormente.

Los ítems considerados para realizar el flujo de caja serán los mencionados en la Tabla 8.

Tabla 8. Ítems considerados para el cálculo de los flujos de caja. (1)

Ítem
Pagos totales (-)
Intereses de la deuda (-)
Costes variables (-)
Cobros totales (+)
Beneficio bruto (antes de impuestos)
Impuestos (-)
Beneficio neto
Amortización del inmovilizado (+)
Flujo neto de caja
Flujo neto de caja descontado
Flujo de caja acumulado

En base a esto se tiene en cuenta que los valores para el año 0, o el estado previo al inicio de la operación serían los recogidos en la Tabla 9.

Anexo III. Viabilidad Económica
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 9. Valores del flujo de caja en el año 0

Ítem	0
Pagos totales	0,00
Intereses de la deuda	0,00
Costes variables	0,00
Cobros totales	0,00
Beneficio bruto (antes de impuestos)	0,00
Impuestos	0,00
Beneficio neto	0,00
Amortización del inmovilizado	0,00
Flujo neto de caja	-221.874.223,08
Flujo neto de caja descontado	-221.874.223,08
Flujo de caja acumulado	-221.874.223,08

Se puede observar el resultado de los flujos de caja en la Tabla 10 y la Tabla 11. Como se puede observar por los valores de flujo de caja, este nunca deja de ser negativo y, lo que es más, crece en valor absoluto. Esto da a entender que se trataría de un proyecto no rentable puesto que nunca se llega a recuperar la inversión realizada.

Según se observa esto se debe a que los costes variables son muy elevados (existe un gran coste de consumo eléctrico) y además los costes de gestión y explotación también son muy elevados en parte debido a que al hacer una estimación a partir del elevado presupuesto del proyecto, estos costes toman un valor muy elevado.

Es probable que la estimación por factores llevada a cabo para obtener el presupuesto no sea adecuada para este caso en el que el coste de los equipos es tan elevado, razón por la que se obtiene finalmente un coste fijo demasiado grade.

Cabe destacar que en base a esto se puede afirmar que el coste de los equipos actualmente no sería determinante para la viabilidad del proceso al menos con los costes variables y beneficios actuales. Los beneficios son muy bajos debidos principalmente a la baja producción, que se trata de una de las condiciones requerida por la planta, lo cual vendría a indicar que un factor de escala en la planta podría ser determinante para poder obtener un proyecto viable.

Tabla 10. Flujos de caja

Año	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Pagos totales	79.354.881,03	83.615.957,82	88.178.928,92	93.065.144,05	98.297.460,48	103.900.349,27	109.900.009,09	116.324.488,04	123.203.814,04	130.570.134,40
Intereses de la deuda	13.312.453,38	12.950.560,24	12.566.953,50	12.160.330,36	11.729.309,83	11.272.428,07	10.788.133,40	10.274.781,06	9.730.627,57	9.153.824,87
Costes variables	66.042.427,65	70.665.397,58	75.611.975,42	80.904.813,69	86.568.150,65	92.627.921,20	99.111.875,68	106.049.706,98	113.473.186,47	121.416.309,52
Cobros totales	20.105.162,14	21.512.523,49	23.018.400,14	24.629.688,15	26.353.766,32	28.198.529,96	30.172.427,06	32.284.496,95	34.544.411,74	36.962.520,56
Beneficio bruto (antes de impuestos)	-59.249.718,89	-62.103.434,33	-65.160.528,78	-68.435.455,91	-71.943.694,17	-75.701.819,31	-79.727.582,03	-84.039.991,09	-88.659.402,30	-93.607.613,84
Impuestos	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Beneficio neto	-59.249.718,89	-62.103.434,33	-65.160.528,78	-68.435.455,91	-71.943.694,17	-75.701.819,31	-79.727.582,03	-84.039.991,09	-88.659.402,30	-93.607.613,84
Amortización del inmovilizado	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10
Flujo neto de caja	-48.323.564,79	-51.177.280,22	-54.234.374,67	-57.509.301,80	-61.017.540,06	-64.775.665,21	-68.801.427,93	-73.113.836,98	-77.733.248,20	-82.681.459,73
Flujo neto de caja descontado	-43.146.039,99	-40.798.214,46	-38.602.956,65	-36.548.200,97	-34.622.990,90	-32.817.367,89	-31.122.271,94	-29.529.452,49	-28.031.388,57	-26.621.217,20
Flujo de caja acumulado	-265.020.263,06	-305.818.477,53	-344.421.434,17	-380.969.635,15	-415.592.626,05	-448.409.993,94	-479.532.265,87	-509.061.718,36	-537.093.106,94	-563.714.324,13

Tabla 11. Flujos de caja (cont)

Año	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Pagos totales	138.457.865,20	146.903.851,28	155.947.537,33	165.631.151,22	175.999.900,08	187.102.180,29	198.989.802,17	211.718.230,55	225.346.842,28	239.939.201,80
Intereses de la deuda	8.542.414,02	7.894.318,51	7.207.337,27	6.479.137,15	5.707.245,03	4.889.039,38	4.021.741,39	3.102.405,53	2.127.909,51	1.094.943,73
Costes variables	129.915.451,19	139.009.532,77	148.740.200,07	159.152.014,07	170.292.655,05	182.213.140,91	194.968.060,77	208.615.825,03	223.218.932,78	238.844.258,07
Cobros totales	39.549.897,00	42.318.389,79	45.280.677,07	48.450.324,47	51.841.847,18	55.470.776,48	59.353.730,84	63.508.492,00	67.954.086,44	72.710.872,49
Beneficio bruto (antes de impuestos)	-98.907.968,21	-104.585.461,49	-110.666.860,26	-117.180.826,75	-124.158.052,90	-131.631.403,81	-139.636.071,33	-148.209.738,56	-157.392.755,85	-167.228.329,31
Impuestos	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Beneficio neto	-98.907.968,21	-104.585.461,49	-110.666.860,26	-117.180.826,75	-124.158.052,90	-131.631.403,81	-139.636.071,33	-148.209.738,56	-157.392.755,85	-167.228.329,31
Amortización del inmovilizado	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10	10.926.154,10
Flujo neto de caja	-87.981.814,10	-93.659.307,39	-99.740.706,15	-106.254.672,65	-113.231.898,80	-120.705.249,70	-128.709.917,22	-137.283.584,45	-146.466.601,75	-156.302.175,21
Flujo neto de caja descontado	-25.292.669,15	-24.040.011,43	-22.857.995,56	-21.741.811,21	-20.687.044,57	-19.689.640,92	-18.745.871,07	-17.852.301,05	-17.005.765,05	-16.203.340,88
Flujo de caja acumulado	-589.006.993,28	-613.047.004,71	-635.905.000,27	-657.646.811,48	-678.333.856,04	-698.023.496,97	-716.769.368,03	-734.621.669,08	-751.627.434,13	-767.830.775,01

8. VALOR NETO ACTUAL (VAN)

El Valor Neto Actual o VAN es una medida de rentabilidad económica para un proyecto en términos absolutos, puesto que el objetivo de este es obtener la diferencia entre el importe de la inversión inicial y el de los flujos netos de caja anuales, según se ve en la Ecuación 6 empleados los flujos de caja descontados de la Ecuación 5. (1)

$$VAN = -Inversión\ Inicial + \sum Flujos\ de\ caja\ descontados_j \quad Ecuación\ 6$$

Las ventajas del VAN son su simplicidad de cálculo y fácil interpretación, además debido que se basa en el criterio de valoración, permite conocer cuál será un proyecto que debe ser rechazado o no según sea positivo o negativo respectivamente. (1)

El valor del VAN para el caso anterior sería de -767.830.775,01 €, que es el mismo valor obtenido en el final de la Tabla 11. Se puede observar que el van para este proyecto es negativo, lo cual nos informa de que el proyecto es no rentable en base a este criterio, son mayores los gastos que las ganancias generadas.

9. TASA INTERNA DE RETORNO (TIR)

Las Tasa Interna de Retorno es otra medida de rentabilidad, de igual manera que el VAN, y se puede obtener a partir de la Ecuación 7. (1)

$$-Inversión\ Inicial + \sum \frac{Flujos\ netos\ de\ caja_j}{(1 + TIR)^j} = 0 \quad Ecuación\ 7$$

La TIR permite indicar la rentabilidad del proyecto en términos de coste financiero. El valor de la TIR puede compararse con la tasa de descuento, de forma que si la TIR es superior a la tasa de descuento (k) el proyecto es viable mientras que no lo será en el caso contrario. (1)

El valor obtenido para la TIR en este proyecto no puede ser calculada debido a que la ecuación no tendría solución. Esto muestra de nuevo la no rentabilidad del proyecto por las razones anteriormente comentadas.

10. PLAZO DE RECUPERACIÓN (PAYBACK)

El plazo de recuperación del caudal invertido será el último método de valoración empleado. Se trata de un método estático puesto que no se emplean valores actualizados, si no que se emplean directamente los flujos de caja sin actualizar. Se han de ir acumulando los flujos de caja hasta que estos superen el valor de inversión inicial empleada, de forma que, en el momento en que se supera este valor de años será el valor del *payback*.

Para el caso de este proyecto, puesto que todos los flujos de caja son negativos es imposible recuperar la inversión inicial, por lo que el *payback* no se puede calcular.

11. ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

En este apartado se estudiará el comportamiento del proyecto frente a variaciones en ciertas variables críticas, comprobando los distintos parámetros económicos para saber cual debería ser el método para hacer este proceso viable a nivel económico.

Es necesario destacar que el amoníaco es muy importante a nivel mundial debido a la producción de fertilizantes principalmente. Durante la guerra entre Rusia y Ucrania, debido al aumento de costes de las materias primas de los procesos convencionales (el gas natural) de forma que se buscan nuevas formas de obtención de sus derivados, entre ellas existe la metodología empleada en este proyecto, la cual puede ser aprovechada para producir amoníaco a nivel local.

Como se ha mencionado anteriormente, en concreto este proyecto no ha resultado viable principalmente debido al empleo de grandes cantidades de energía y a que los costes de la planta han sido tan elevados que las estimaciones de costes variables también son muy elevados, lo cual convierte esta planta en un proyecto no rentable.

Se comprobará si reduciendo el coste de la energía y los costes variables se puede obtener un proceso rentable.

11.1. Variación de coste de energía

Como se mencionó anteriormente, el precio medio del 2021 es inferior al actual, por lo que se comprobará como le afecta a la viabilidad ese valor de coste (118,83 €/MWh; disminución del 40 %). Los valores obtenidos se recogen en la Tabla 12. Se puede observar que de nuevo el proceso es no rentable puesto que los flujos de caja siguen siendo negativos, haciendo que el VAN sea negativo (no rentable) y los demás parámetros no se pueden ni llegar a obtener.

Tabla 12. Parámetros de rentabilidad al disminuir los costes de la energía

Parámetro	Valor	Significado
VAN	-562.972.909,21	No rentable
TIR	-	-
Payback	-	-

11.2. Variación de coste de energía y de costes variables

Se llevará a cabo ahora la variación de los costes variables sobre el cambio efectuado anteriormente, reduciéndolo en un 40 % también. Los valores obtenidos se recogen en la Tabla 13. Se puede observar que de nuevo el proceso es no rentable puesto que los flujos de caja siguen siendo negativos, haciendo que el VAN sea negativo (no rentable) y los demás parámetros no se pueden ni llegar a obtener. Pese a haber reducido ambos costes en gran proporción la planta sigue sin alcanzar la rentabilidad, se encuentra muy lejos de ello. La variación de estos costes variables y la adaptación del coste

Anexo III. Viabilidad Económica

Planta de producción de amoníaco verde a microescala

energético pueden conseguirse gracias a los distintos programas y ayudas a empresas con fines renovables, pero aún así no sería suficiente para que la pequeña producción haga viable la planta finalmente

Tabla 13. Parámetros de rentabilidad al disminuir los costes de la energía y de coste variable

Parámetro	Valor	Significado
VAN	-328.524.045,57	No rentable
TIR	-	-
Payback	-	-

12. CONCLUSIÓN DE LA VIABILIDAD ECONÓMICA

En base a los resultados anteriores se puede observar que la planta de producción de amoníaco verde a microescala no sería rentable con las tecnologías seleccionadas, lo que se debe a que al producir un caudal muy bajo de amoníaco los beneficios son muy bajos, pero los costes de operación son muy elevados, además los equipos de compresión de gases son muy caros, siendo los más caros junto con el electrolizador y el reactor aunque este último en menor medida.

El consumo eléctrico también genera un gran coste, debido tanto a compresores como al electrolizador, se debería buscar una nueva tecnología más eficiente para la ruptura de las moléculas de agua que el electrolizador alcalino seleccionado. Si se pudiesen reducir las potencias de los compresores cambiándolos a un equipo con menor precio sería muy bueno, pues la mayoría de los costes se vería reducido en gran medida.

Por todo esto se concluye que de momento en España, con los precios de la energía, de los productos y de los equipos actuales no sería rentable la creación de esta planta.

13.BIBLIOGRAFÍA

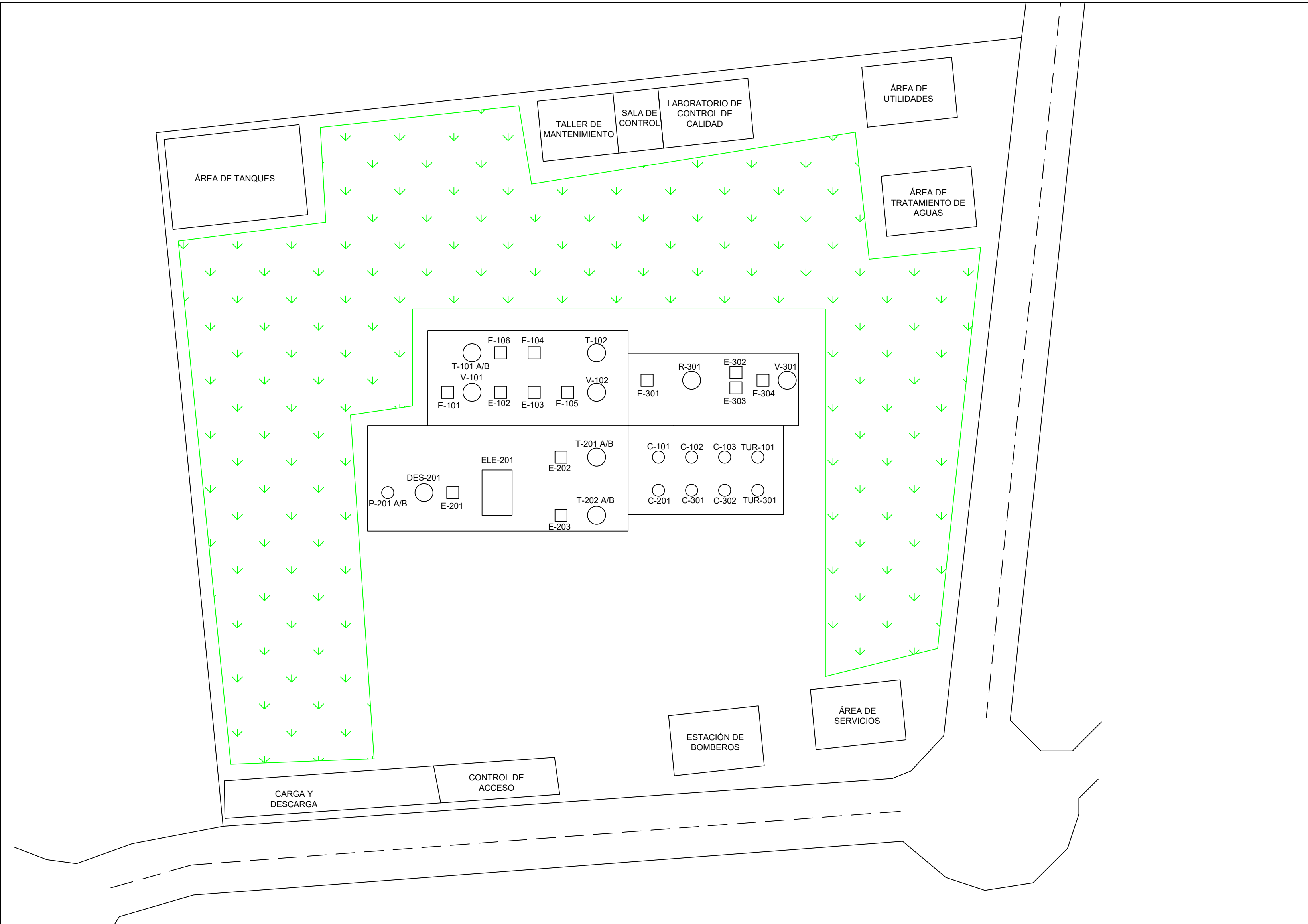
1. **LARRÁN JORGE, Manuel.** *Fundamentos de contabilidad financiera : teoría y práctica*. Madrid : Pirámide, 2008. 978-84-368-2232-8.
2. **MINISTERIO DE ASUNTOS ECONÓMICOS Y TRANSFORMACIÓN DIGITAL.** Bonos Sostenibles ICO. [En línea] Gobierno de España. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] <https://www.ico.es/en/bonos-sostenibles-ico>.
3. **SELECTRA.** Tarifas de agua by Selectra. [En línea] SELECTRA. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] <https://tarifasdeagua.es/info/precio>.
4. **FERNÁNDEZ, Rosa.** *statista. Precio medio final anual de la electricidad en España de 2010 a 2022*. [En línea] 23 de Marzo de 2022. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] <https://es.statista.com/estadisticas/993787/precio-medio-final-de-la-electricidad-en-espana/>.
5. **TURTON, Richard, y otros.** *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. Nueva Jersey : Prentice Hall, 2009. 0-13-512966-4.
6. **SINNOT, Ray, TOWLER, Gavin.** *Diseño en ingeniería química*. Barcelona : Reverté, 2012. 978-84-291-7199-0.
7. **Agricultural Market Information System.** Market Monitor. *AMIS*. [En línea] 2022. [Citado el: 4 de Marzo de 2022.] <http://www.amis-outlook.org/home/en/>.
8. **DORRIS, Chandler, y otros.** High-Purity Oxygen Production Using Mixed Ionic-Electronic Conducting Sorbents. [En línea] Department of Chemical and Biomolecular Engineering School of Engineering and Applied Science University of Pennsylvania, 14 de Abril de 2016. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] https://repository.upenn.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=1080&context=cbe_sdr#:~:text=Based%20on%20an%20oxygen%20selling,a%20loss%20in%20today's%20economy..
9. **INSTITUTO NACIONAL DE ESTADÍSTICA.** Índices de precio de consumo. IPC. Mayo 2022. [En línea] 2022. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] https://www.ine.es/dyngs/INEbase/es/operacion.htm?c=Estadistica_C&cid=1254736176802&menu=ultiDatos&idp=1254735976607#:~:text=consumo%20y%20vivienda-,%C3%8Dndice%20de%20precios%20de,%C3%9A%20altimos%20datos&text=La%20tasa%20de%20variaci%C3%B3n%20anual,de%20la%20

DOCUMENTO II:

PLANOS

ÍNDICE

1. Plano de situación y emplazamiento
2. Plano de implantación
3. Diagrama de flujo de proceso (PFD)
4. Diagrama de control e instrumentación (P&ID)
 - 4.1. P&ID #1: Sección 100
 - 4.2. P&ID #2: Sección 200
5. P&ID #3: Sección 300
6. Plano electrolizador ELE-201
7. Plano reactor R-301



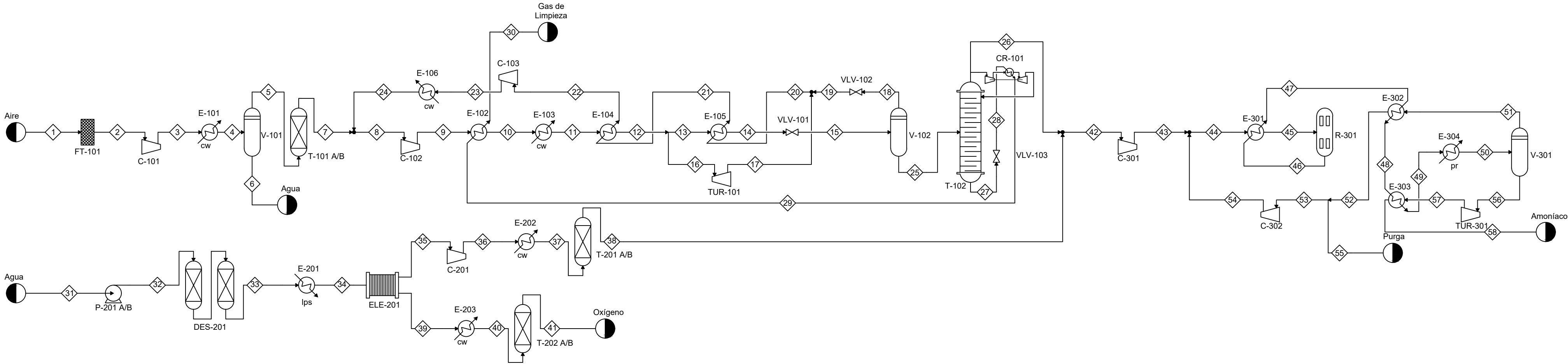
PLANO DE IMPLANTACION O LAYOUT
ESCALA 1:1.000

DATOS
MUNICIPIO: Salvaterra de Miño
PROVINCIA: PONTEVEDRA
POLÍGONO: 71
PARCELAS: 1437, 1438 y 1439
SUPERFICIE: 62.979,54 m²
ORDENANZA MUNICIPAL: OT10092
LEYENDA
Zona verde

F-101	C-101	E-101	V-101	T-101 A/B	C-102	E-102	E-103	E-104	E-105	VLV-101	V-102	TUR-101	VLV-102	C-103	E-106	T-102	VLV-103
Filtro de aire	Compresor	Intercambiador de calor	Tanque de retirado de humedad	Torre de secado de aire	Compresor	Intercambiador de calor	Intercambiador de calor	Intercambiador de calor	Intercambiador de calor	Válvula de expansión	Tanque de licuefacción	Turbina	Válvula de expansión	Compresor	Intercambiador de calor	Torre de destilación criogénica	Válvula de expansión

UTILIDADES:
lps → VAPOR DE BAJA PRESIÓN
cw → AGUA ENFRIADA
pr → PROPANO

CR-101	P-201 A/B	DES-201	E-201	ELE-201	C-201	E-202	T-201 A/B	E-203	T-202 A/B	C-301	E-301	R-301	E-302	E-303	E-304	V-301	C-302	TUR-301
Ciclo de refrigeración	Bomba	Desmineralizador	Intercambiador de calor	Electrolizador alcalino	Compresor	Intercambiador de calor	Torre de secado de hidrógeno	Intercambiador de calor	Torre de secado de oxígeno	Compresor	Intercambiador de calor	Reactor de síntesis	Intercambiador de calor	Intercambiador de calor	Intercambiador de calor	Tanque flash	Compresor de recirculación	Turbina



Corriente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35
Temperatura (°C)	15.00	15.00	139.85	25.00	25.00	25.00	31.35	31.87	180.42	170.82	32.00	-5.60	-5.60	-137.88	-173.50	-5.60	-134.10	-173.50	-174.90	-143.98	-17.00	30.00	81.59	32.00	-173.50	-175.80	-169.00	-180.80	29.29	160.00	15.00	15.00	15.00	80.00	80.00
Presión (bar)	1.0	1.0	7.5	7.3	7.3	7.3	7.1	7.1	45.2	45.0	44.8	44.6	44.6	44.4	6.5	44.6	4.5	6.5	4.5	4.5	4.3	4.1	7.1	7.1	6.5	6.4	6.6	2.4	2.2	2.0	1.0	4.0	3.5	3.3	3.2
Fracción de vapor	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.50	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00	1.00	0.00	0.27	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	1.00	
Flujo total (kg/h)	3002.38	3002.38	3002.38	3002.38	2985.08	17.30	2977.07	14885.70	14885.70	14885.70	14885.70	5954.28	5954.28	5954.28	8931.42	8931.42	2977.21	2977.21	11908.62	11908.62	11908.62	11908.62	11908.62	2977.07	1827.11	1149.96	1149.96	1149.96	1149.96	3552.59	3552.59	3552.59	3552.59	412.84	
Flujo total (kmol/h)	104.60	104.60	104.60	104.60	103.19	0.96	103.19	515.96	515.96	515.96	515.96	206.39	206.39	206.39	309.58	309.58	103.20	103.20	412.77	412.77	412.77	412.77	412.77	103.19	65.22	37.97	37.97	37.97	37.97	197.20	197.20	197.20	197.20	196.69	
Agua (kmol/h)	1.40	1.40	1.40	1.40	0.44	0.96	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.02	
Hidrógeno (kmol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	195.67	
Oxígeno (kmol/h)	21.67	21.67	21.67	21.67	21.67	0.00	21.67	108.35	108.35	108.35	108.35	108.35	43.34	43.34	43.34	65.01	65.01	21.67	21.67	86.68	86.68	86.68	86.68	86.68	21.67	0.01	21.66	21.66	21.66	21.66	21.66	0.00	0.00	0.00	0.00
Nitrógeno (kmol/h)	81.52	81.52	81.52	81.52	81.52	0.00	81.52	407.61	407.61	407.61	407.61	407.61	163.04	163.04	163.04	244.57	244.57	81.52	81.52	326.09	326.09	326.09	326.09	326.09	81.52	65.22	16.30	16.30	16.30	16.30	16.30	0.00	0.00	0.00	0.00
Amoníaco (kmol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

Corriente	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58
Temperatura (°C)	164.23	25.00	32.24	80.00	25.00	32.14	-20.79	177.78	172.93	317.55	469.59	321.61	158.85	144.00	-20.00	-20.00	170.00	170.00	171.79	170.00	-20.00	-117.06	15.00
Presión (bar)	6.7	6.5	6.4	3.2	3.0	2.6	6.4	100.3	100.3	100.1	99.9	99.7	99.5	99.3	99.1	90.1	98.9	98.9	100.3	98.9	90.1	18.2	18.0
Fracción de vapor	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.82	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00
Flujo total (kg/h)	412.84	412.84	394.40	3139.75	3139.75	3130.50	2221.52	2221.52	11699.26	11699.26	11699.20	11699.20	11699.20	11699.20	11699.20	9612.24	9612.24	9477.67	9477.67	134.57	2086.96	2086.96	2086.96
Flujo total (kmol/h)	196.69	196.69	195.67	98.12	98.12	97.83	260.88	260.88	1363.36	1363.36	1240.64	1240.64	1240.64	1240.64	1240.64	1118.12	1118.12	1102.47	1102.47	15.65	122.52	122.52	122.52
Agua (kmol/h)	1.02	1.02	0.00	0.29	0.29	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Hidrógeno (kmol/h)	195.67	195.67	195.67	0.00	0.00	0.00	195.66	195.66	1007.60	1007.60	823.52	823.52	823.52	823.52	823.52	823.46	823.46	811.93	811.93	11.53	0.06	0.06	0.06
Oxígeno (kmol/h)	0.00	0.00	0.00	97.83	97.83	97.83	0.01	0.01	0.32	0.32	0.32	0.32	0.32	0.32	0.32	0.31	0.31	0.31	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00
Nitrógeno (kmol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	65.21	65.21	328.20	328.20	266.84	266.84	266.84	266.84	266.84	266.72	266.72	262.99	262.99	3.73	0.12	0.12	0.12
Amoníaco (kmol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	27.24	27.24	149.96	149.96	149.96	149.96	149.96	27.63	27.63	27.24	27.24	0.39	122.33	122.33	122.33

USC

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

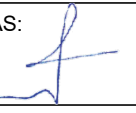
ESUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA - TRABAJO FIN DE GRADO

ETSE

DISEÑO DE UNA PLANTA DE AMONIACO VERDE

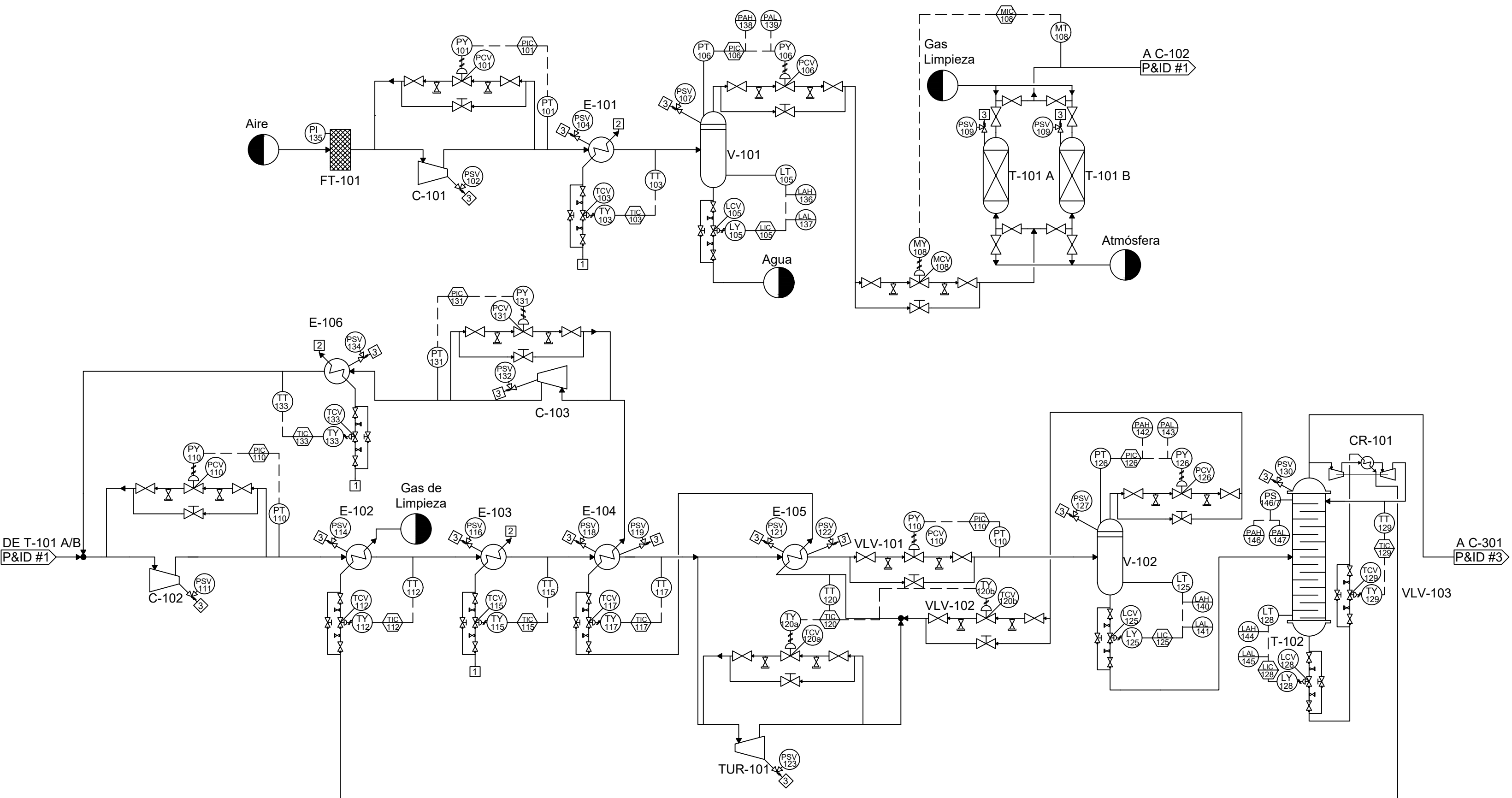
AUTORES:
Guillermo Martínez Loureiro
Uxía Mata Rivas

SINATURAS:



ESCALA:
JUNIO 2022

PFD

3/6



SECCIÓN 100 - P&ID #1							
NOMENCLATURA UTILIDADES							
1	Agua enfriada, alimentación						
2	Agua enfriada, retorno						
3	Sistema de tratamiento de emisiones gaseosas						
4	Vapor de baja presión, entrada						
5	Vapor de baja presión, condensado						
6	Propano, alimentación						
7	Propano, retorno						
NOMENCLATURA LAZOS							
XXX ABB		A: Sección del proceso B: Número identificativo del lazo					
Primera letra (X)			Letras sucesivas (Y)				
P	Presión	L	Nivel	A	Alarma	I	Indicador
T	Temperatura	C	Conductividad	C	Controlador	T	Transmisor
M	Humedad	F	Flujo	H	Alto	V	Válvula
				L	Bajo	Y	Transductor
LOCALIZACIÓN INSTRUMENTOS							
Instrumento situado en planta accesible al operario Ordenador situado en panel frontal, sala de control, accesible al operario				Instrumento situado en panel frontal, sala de control, accesible al operario			
VÁLVULAS							
Válvula manual				Válvula de alivio			
Válvula de control				Drenaje			
Válvula de control manual				V Venteo			
Válvula antirretorno							
LEYENDA LÍNEAS							
				Línea de proceso			
				Conexión eléctrica			
				Conexión neumática			



UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA - TRABAJO FIN DE GRADO



DISEÑO DE UNA PLANTA DE AMONIACO VERDE

AUTORES:
GUILLERMO MARTÍNEZ LOUREIRO
UXÍA MATA RIVAS

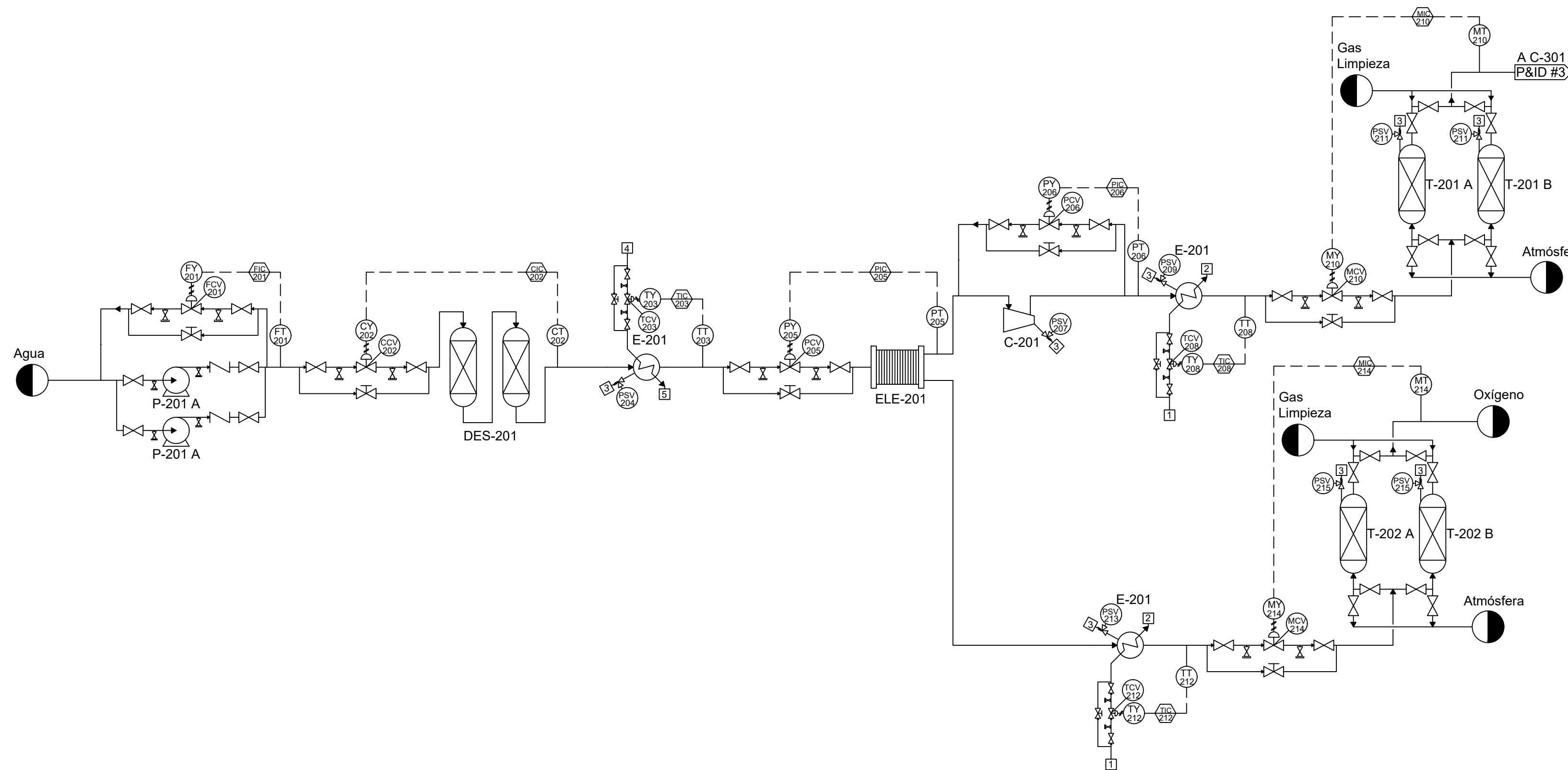
SINATURAS:



ESCALA:
Junio 2022

P&ID

4.1/6



SECCIÓN 200 - P&ID #2

NOMENCLATURA UTILIDADES

1	Agua enfriada, alimentación
2	Agua enfriada, retorno
3	Sistema de tratamiento de emisiones gaseosas
4	Vapor de baja presión, entrada
5	Vapor de baja presión, condensado
6	Propano, alimentación
7	Propano, retorno

NOMENCLATURA LAZOS

XYX A: Sección del proceso
ABB B: Número identificativo del lazo

Primera letra (X)		Letras sucesivas (Y)			
P	Presión	L	Nivel	A	Alarma
T	Temperatura	C	Conductividad	I	Indicador
M	Humedad	F	Flujo	C	Controlador
				T	Transmisor
				H	Alto
				V	Válvula
				L	Bajo
				Y	Transductor

LOCALIZACIÓN INSTRUMENTOS

	Instrumento situado en planta accesible al operario		Instrumento situado en panel frontal, sala de control, accesible al operario
	Ordenador situado en panel frontal, sala de control, accesible al operario		

VÁLVULAS

	Válvula manual		Válvula de alivio
	Válvula de control		Drenaje
	Válvula de control manual		Venteo
	Válvula antirretorno		

LEYENDA LÍNEAS

	Línea de proceso
	Conexión eléctrica
	Conexión pneumática

DISEÑO DE UNA PLANTA DE AMONIACO VERDE

AUTORES:
GUILLERMO MARTÍNEZ LOUREIRO
UXÍA MATA RIVAS

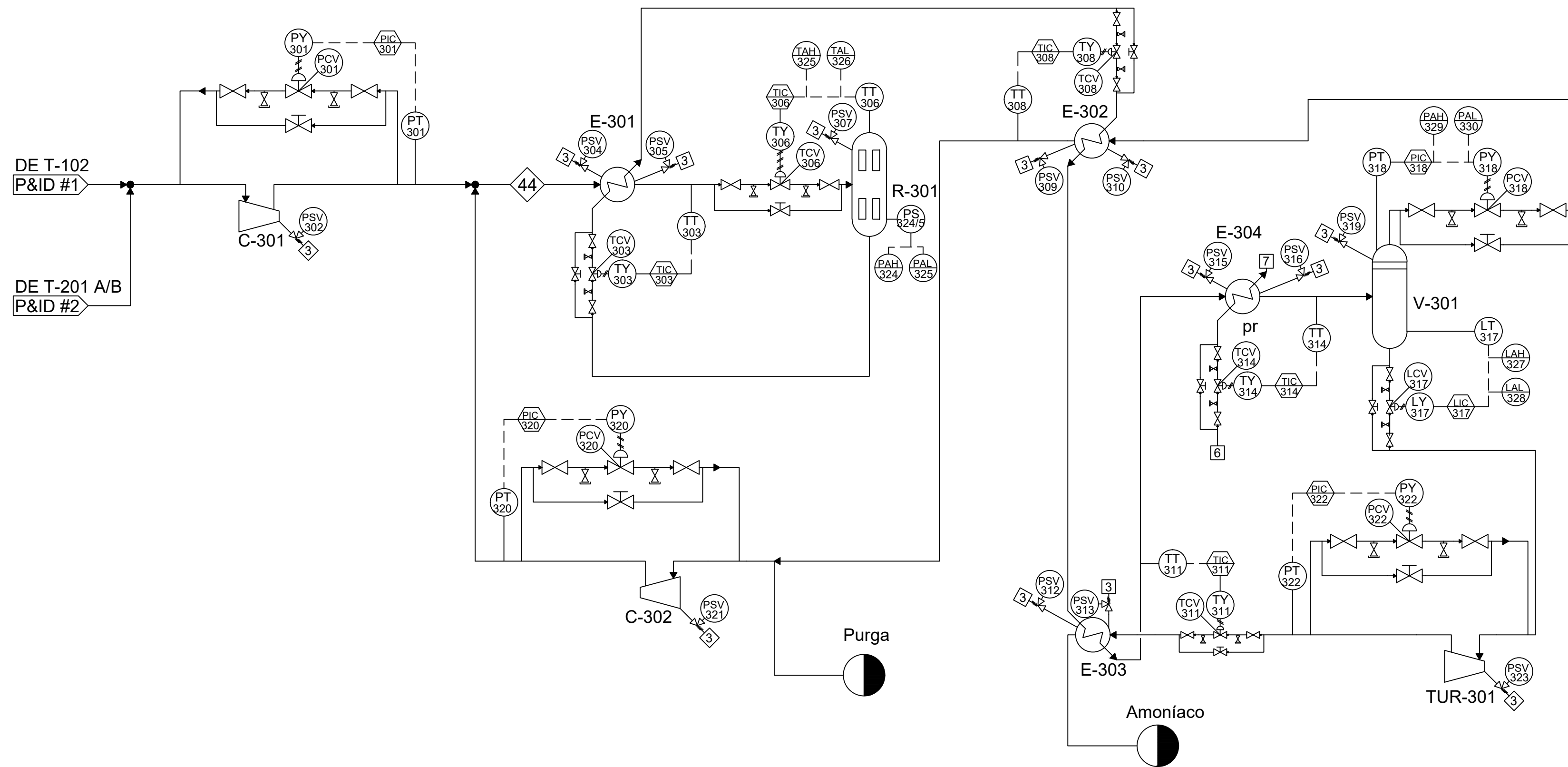
SINATURAS:

ESCALA:

Junio 2022

P&ID

4.2/6



SECCIÓN 300 - P&ID #3

NOMENCLATURA UTILIDADES

1	Agua enfriada, alimentación
2	Agua enfriada, retorno
3	Sistema de tratamiento de emisiones gaseosas
4	Vapor de baja presión, entrada
5	Vapor de baja presión, condensado
6	Propano, alimentación
7	Propano, retorno

NOMENCLATURA LAZOS

YYY A: Sección del proceso
ABB B: Número identificativo del lazo

Primera letra (X)		Letras sucesivas (Y)			
P	Presión	L	Nivel	A	Alarma
T	Temperatura	C	Conductividad	I	Indicador
M	Humedad	F	Flujo	C	Controlador
				T	Transmisor
				H	Alto
				V	Válvula
				L	Bajo
				Y	Transductor

LOCALIZACIÓN INSTRUMENTOS

	Instrumento situado en planta accesible al operario		Instrumento situado en panel frontal, sala de control, accesible al operario
	Ordenador situado en panel frontal, sala de control, accesible al operario		

VÁLVULAS

	Válvula manual		Válvula de alivio
	Válvula de control		Drenaje
	Válvula de control manual		Venteo
	Válvula antirretorno		

LEYENDA LÍNEAS

	Línea de proceso
	Conexión eléctrica
	Conexión neumática

DISEÑO DE UNA PLANTA DE AMONIACO VERDE

AUTORES:
GUILLERMO MARTÍNEZ LOUREIRO
UXÍA MATA RIVAS

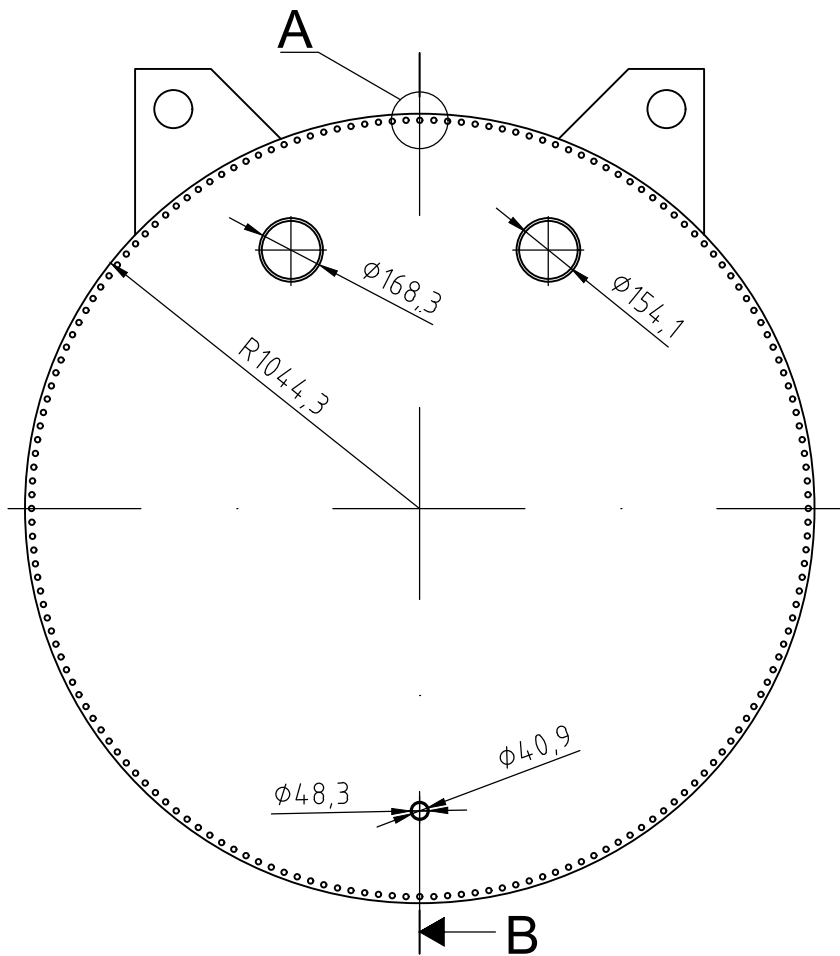
SINATURAS:

ESCALA:

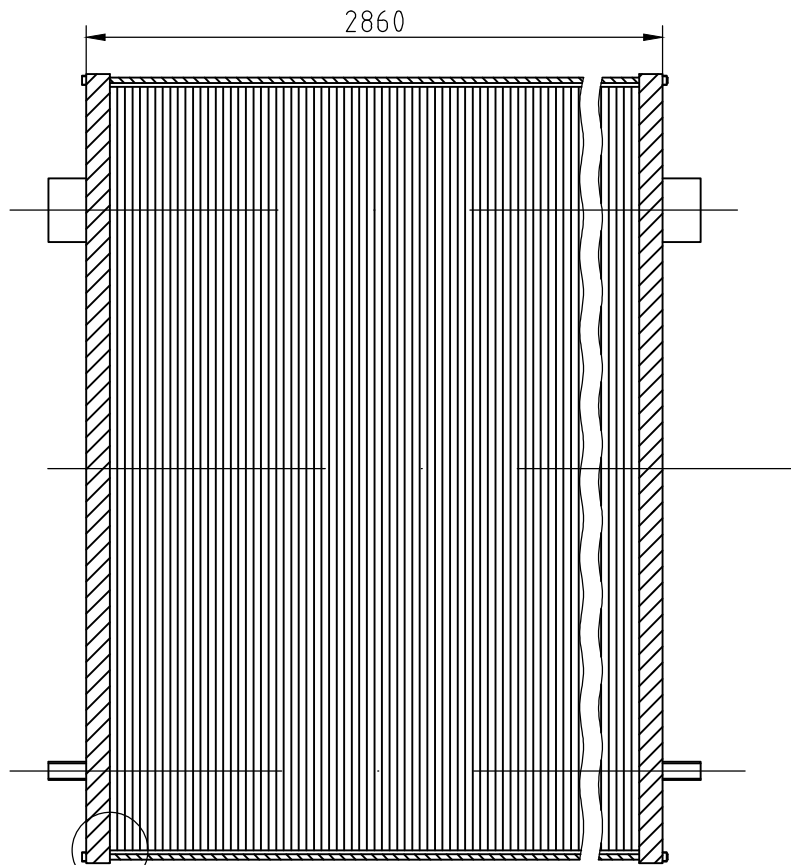
Junio 2022

P&ID

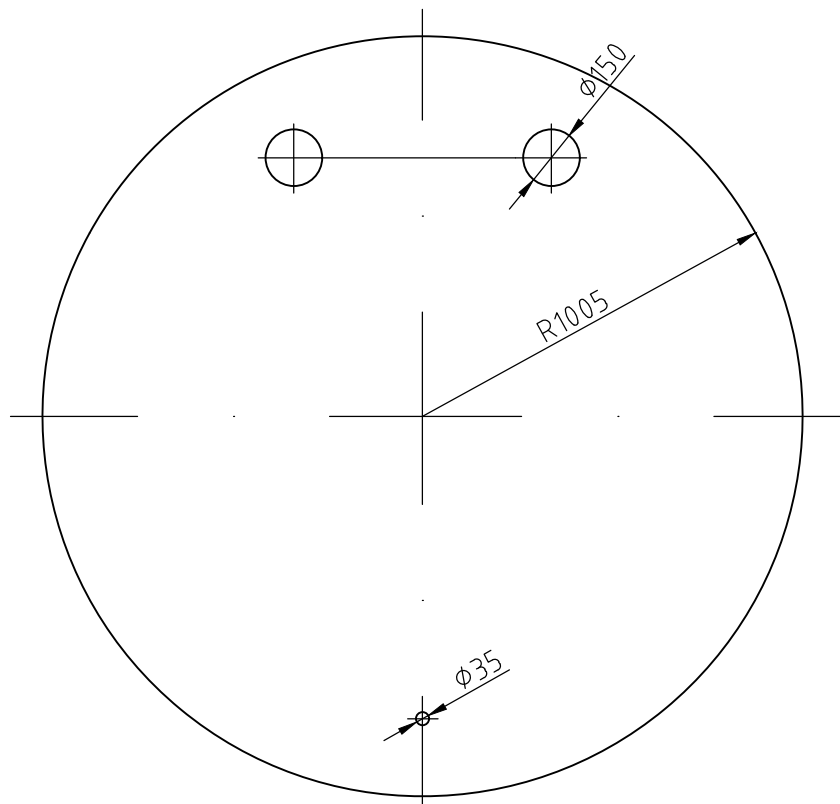
4.3/6



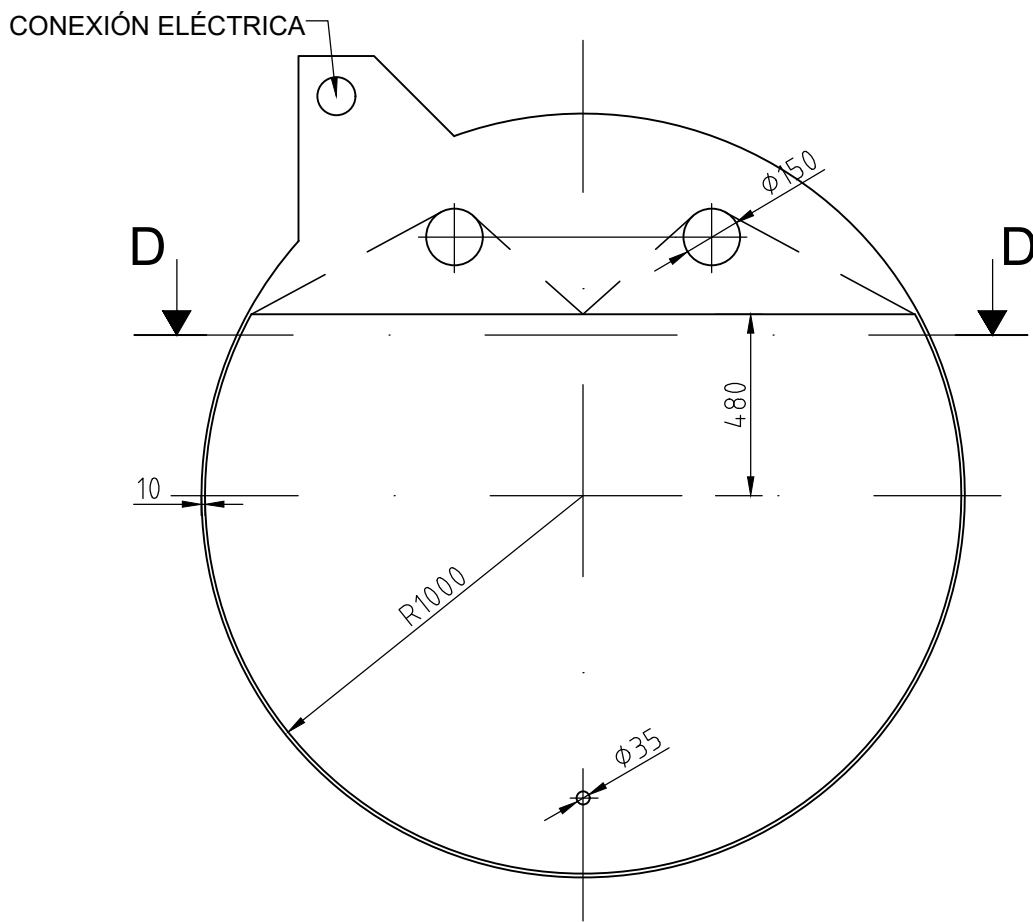
ALZADO



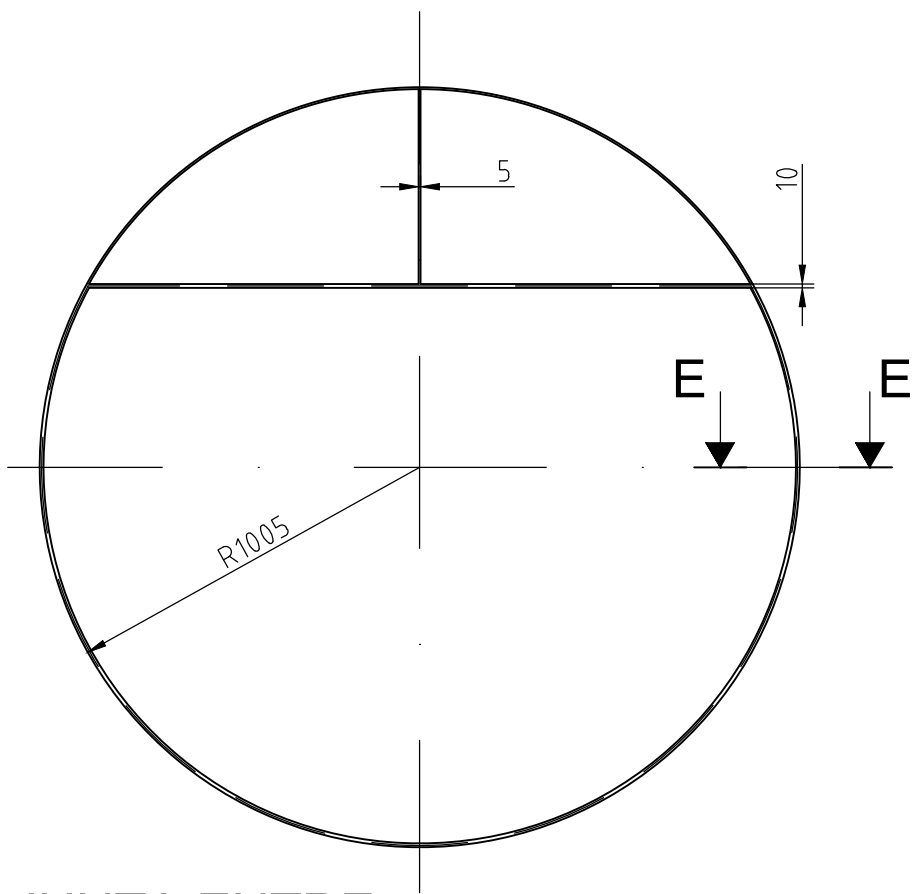
CORTE B-B
VISTA LATERAL



JUNTA ENTRE PLACAS
FIJAS Y ELECTRODO

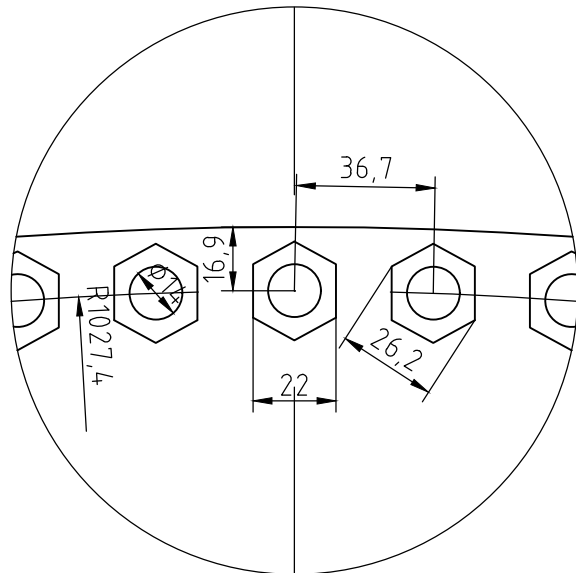


ELECTRODOS (POSITIVO O
NEGATIVO SEGÚN LA ORIENTACIÓN)



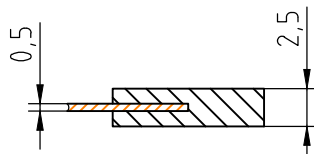
JUNTA ENTRE
ELECTRODOS

CON

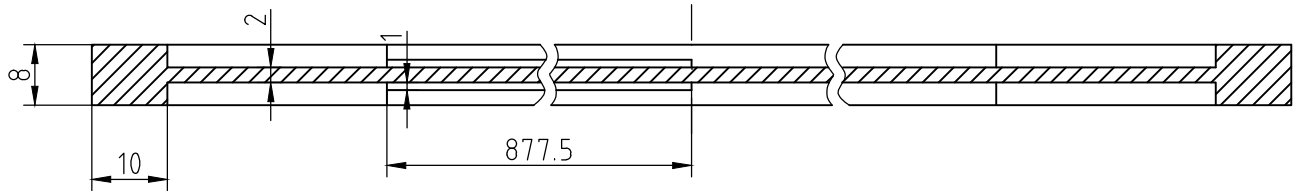


DETALLE A

ESCALA 1:2

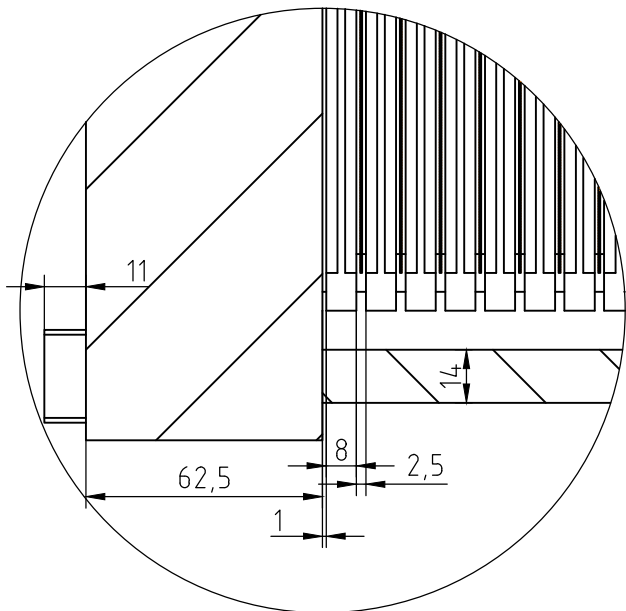


CORTE E-E
ESCALA 2:1



CORTE D-D

ESCALA 1:1



DETALLE C
ESCALA 1:2

DATOS DE DISEÑO	
CÓDIGO DE DISEÑO: ASME BPV SEC. VIII Div. 1 y TEMA	
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN PLACAS FIJAS: Acero inoxidable SA-240	
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN PERNOS: Acero SA-307 grado B	
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN ELECTRODOS: Acero inoxidable SA-240 con recubrimiento de níquel	
JUNTAS: Grafito flexible	
PARÁMETRO	VALOR
Fluidos de entrada	Agua
Fluidos producidos	Hidrógeno y Oxígeno
Caudal de alimentación (kg/h)	3524,9
Presión de diseño (kPa)	490
Temperatura (°C)	80
Electrolito (% en masa)	KOH (30%)
Torque de los pernos (N·m)	110
Carga generada por los pernos (N)	1.996.595,77
NOTAS	
- Todas las medidas están en mm. En caso contrario, se indicará en la propia medida. - La conexión eléctrica representada es orientativa y se ha de adecuar según las necesidades. - Está representado 1 de los 14 stacks necesarios para obtener el caudal requerido. - El número de celdas por <i>stack</i> es de 260. - La escala se detalla en la parte inferior de cada detalle excepto para las que tenga la escala general.	
DESCRIPCIÓN CORTA	
(Detalle A) detalles de los pernos según la norma TEMA Sec. D. (Corte B-B) Corte del electrolizador por el eje marcado, vista lateral del equipo. (Detalle C) Apilamiento y dimensiones de las juntas y electrodos (Corte D-D) Corte de la parte superior del electrodo, se observan los canales hacia los orificios de gas. (Corte E-E) Sección de la junta con el separador colocado.	
 Separador	



UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA - TRABAJO FIN DE GRADO



DISEÑO DE UNA PLANTA DE AMONIACO VERDE

AUTORES:
GUILLERMO MARTÍNEZ LOUREIRO

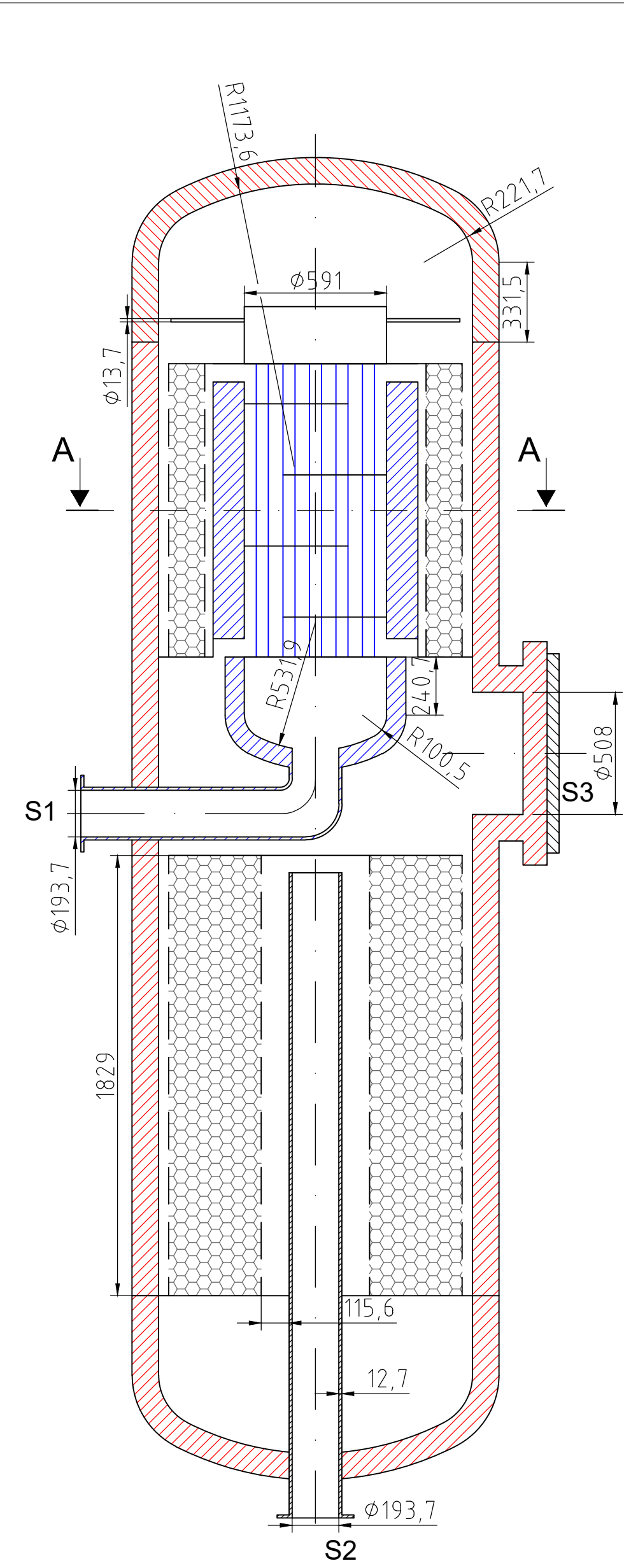
SINATURAS:


ESCALA: 1:20

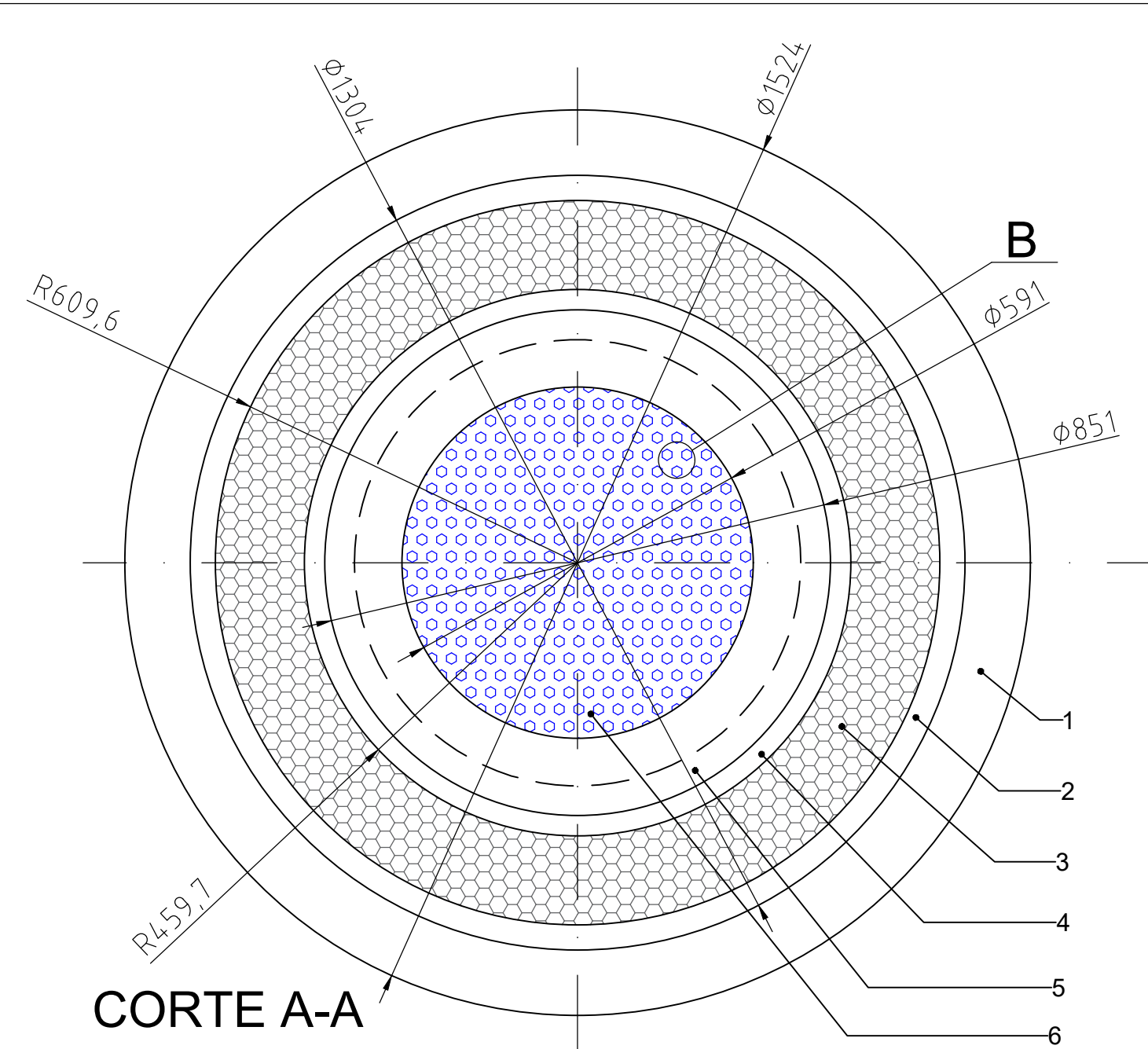
DISEÑO MECÁNICO ELECTROLIZADOR

5/6

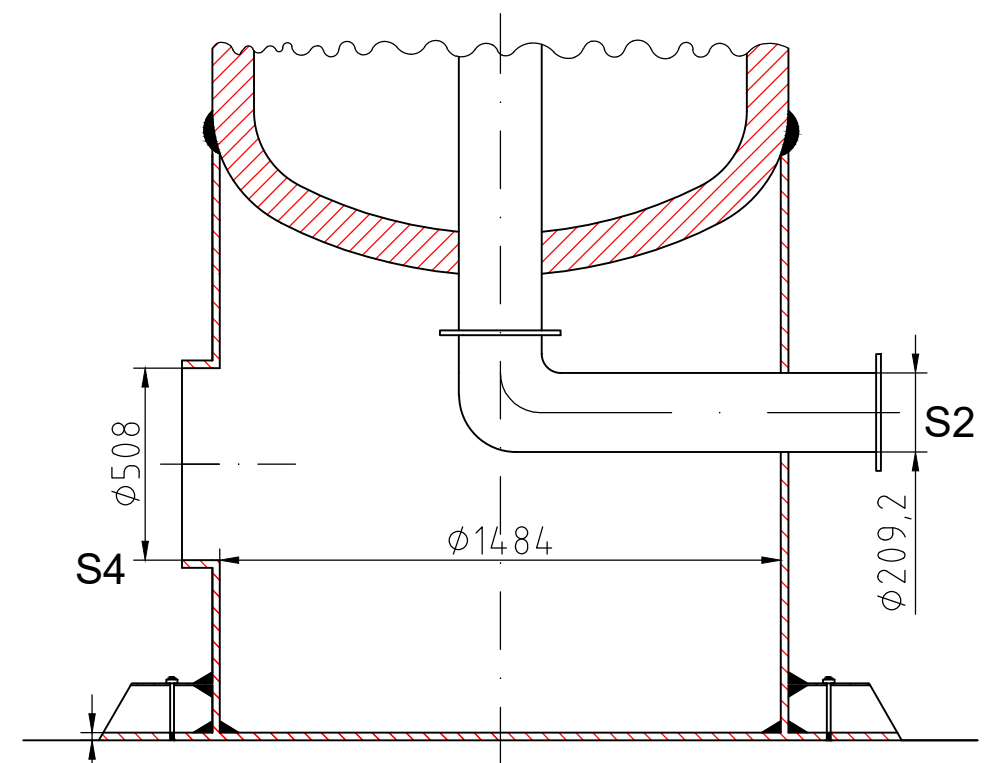
JUNIO 2022



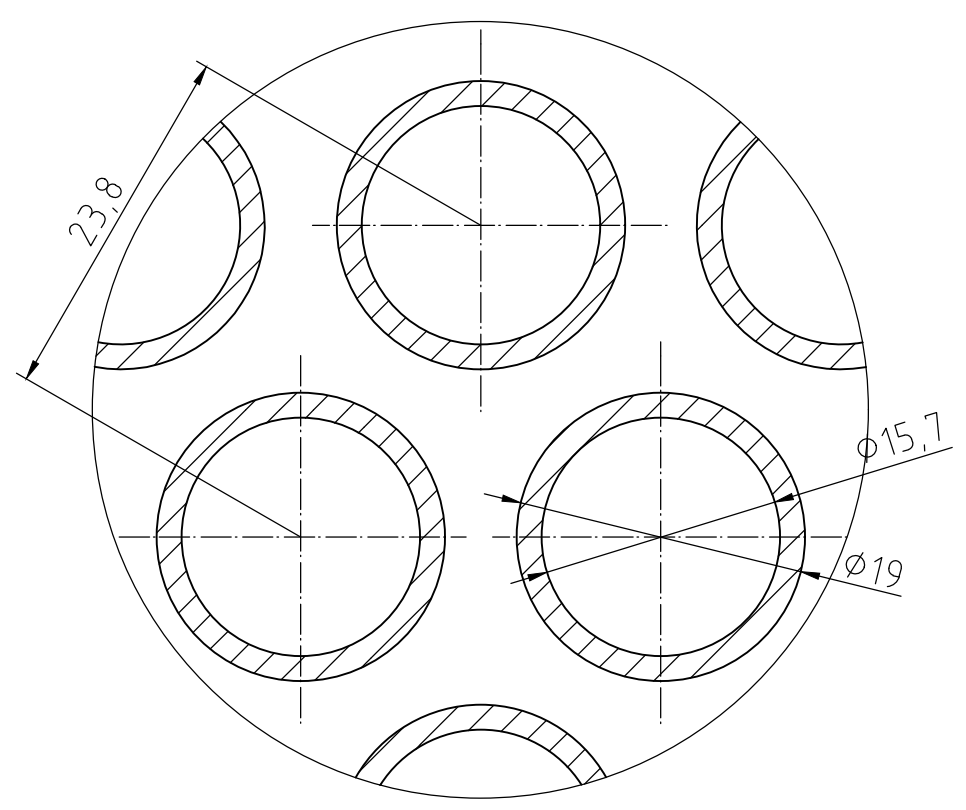
ALZADO
ESCALA 1:20



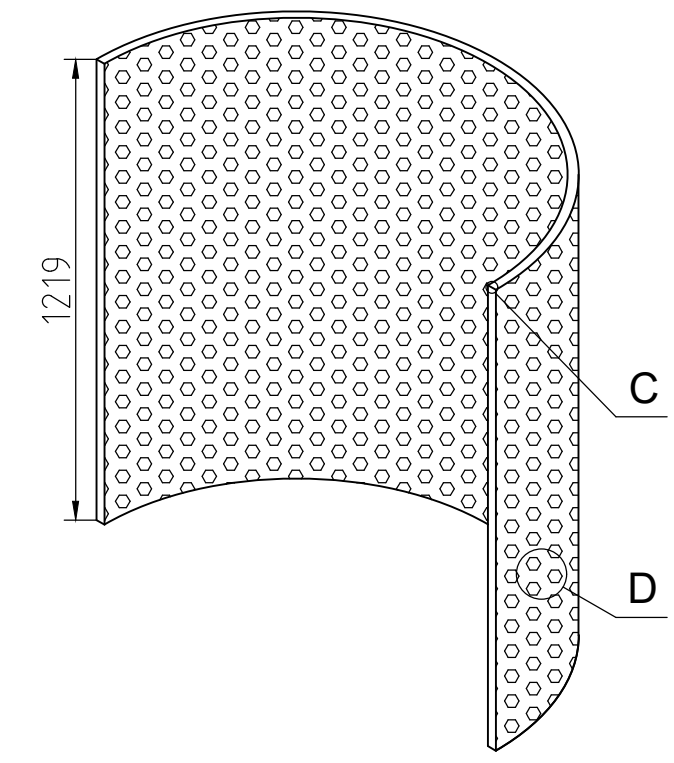
CORTE A-A
CORTE TRANSVERSAL DEL PRIMER LECHO
ESCALA 1:10



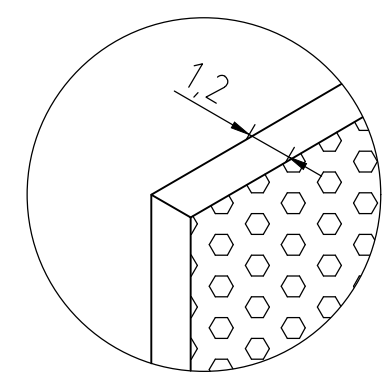
SOPORTE TIPO FALDA RECTA
ESCALA 1:20



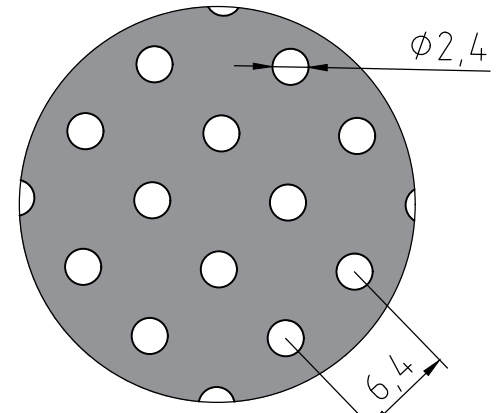
DETALLE B
ESCALA 2:1



PARED PERFORADA EXTERNA
DEL PRIMER LECHO
ESCALA 1:20



DETALLE C
ESCALA 5:1



DETALLE D
ESCALA 2:1

DATOS DE DISEÑO	
CÓDIGO DE DISEÑO: ASME BPV SEC. VIII Div. 1	
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN: ASME SA-240, Acero inoxidable 304	
NÚMERO DE TUBOS DEL INTERCAMBIADOR: 364	
CHAPAS PERFORADAS IPA 111	
EFICIENCIA DE SOLDADURA: 1	
ESFUERZO MÁXIMO PERMISIBLE: 72,96 N/mm ²	
PARÁMETRO	VALOR
Caudal másico (kg/h)	11699,2
Presión de diseño reactor (bar)	110,11
Presión de diseño la carcasa del intercambiador de calor (bar)	123,39
Temperatura de diseño (°C)	511,34
Masa de catalizador (kg)	7113,0
Carga total por peso (kN)	324,12
ESFUERZOS PRIMARIOS	
Esfuerzo radial (N/mm ²)	65,27
Esfuerzo longitudinal (N/mm ²)	32,63
Esfuerzo compresivo debido al peso total del equipo (N/mm ²)	0,6633
Esfuerzo de pandeo (N/mm ²)	0,1742
ESFUERZOS COMPRESIVOS Y ESTABILIDAD ELÁSTICA	
Esfuerzo de pandeo crítico (N/mm ²)	1144
Esfuerzo máximo compresivo (N/mm ²)	0,8375
NOTAS	
- Espesor del reactor de síntesis R-301. - Espacio anular entre la pared del reactor y la pared externa del primer lecho de catalizador. - Espesor de lecho de catalizador. Por motivos de escala, se ha representado la pared externa mediante el radio externo de la pared cilíndrica y la pared interna mediante el radio interno de esta. - Espacio anular entre el lecho y el intercambiador de calor. - Espesor de la carcasa del intercambiador de calor. La vista oculta se corresponde con el diámetro externo del cabezal del intercambiador. - Haz de tubos.	

NOTAS
Todas las medidas se encuentran expresadas en mm. S1 representa la entrada del gas de alimentación al reactor, mientras que S2 se corresponde con la conducción de salida del gas reaccionado. S3 y S4 representan bocas de hombre. En azul se destacan las partes correspondientes al intercambiador de calor.

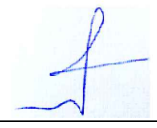


UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA - TRABAJO FIN DE GRADO



DISEÑO DE UNA PLANTA DE AMONÍACO VERDE

AUTORES:
UXÍA MATA RIVAS

SINATURAS:


ESCALA: VER

DISEÑO MECÁNICO DEL REACTOR DE SÍNTESIS R-301

6/6

DOCUMENTO III:
ESTUDIOS CON
ENTIDAD PROPIA

ÍNDICE

1.	OBJETO	3
2.	Descripción general del proyecto	3
2.1.	Justificación de la ubicación.....	5
3.	Evaluación de las principales alternativas.....	5
3.1.	Reformado con vapor	6
3.2.	Oxidación parcial de hidrocarburos	6
3.3.	Gasificación de Carbón	6
3.4.	Procesos biológicos para la obtención de H ₂	7
3.5.	Procesos térmicos para la obtención de H ₂	7
3.6.	Electrólisis de agua.....	8
3.7.	Destilación criogénica de aire	8
3.8.	Adsorción por cambio de presión.....	8
3.9.	Separación por membranas	9
3.10.	Justificación de la alternativa	9
3.11.	Mejores Técnicas Disponibles (MTD).....	9
3.12.	Posibles impactos ambientales y socioeconómicos.....	10
4.	Inventario ambiental.....	11
4.1.	Clima	11
4.2.	Suelo.....	15
4.3.	Medio Biológico.....	16
4.4.	Medio socioeconómico	18
4.5.	Riesgos y molestias	21
5.	Valoración de impactos ambientales.....	21
5.1.	Matriz de Leopold	21
5.2.	Factores ambientales	22
5.3.	Fase de Construcción	22
5.4.	Fase de explotación	24
5.5.	Fase de Desmantelamiento	26
5.6.	Resumen del Impacto Ambiental	28
6.	Medidas para la prevención, corrección o compensación de los impactos ambientales 29	
6.1.	Medidas para la fase de construcción.....	29
6.2.	Medidas para la fase de explotación.....	29
6.3.	Medidas durante la fase de desmantelamiento	31
7.	Programa de Vigilancia Ambiental	31
7.1.	Calidad del aire.....	32
7.2.	Calidad del agua	32
7.3.	Control de la contaminación acústica.....	33
8.	Resumen y conclusiones	33
9.	Bibliografía.....	35

ESTUDIO BÁSICO SOBRE SEGURIDAD Y SALUD (Documento II)

1. OBJETO

En el Estudio de Impacto Ambiental (EIA), documento a elaborar por el promotor y que ha de acompañar al proyecto, se identificarán, describirán, cuantificarán y analizarán los posibles efectos sobre el medio ambiente derivados de las etapas de construcción, operación y desmantelamiento de la planta de producción de amoníaco verde. Se analizarán las alternativas cuya aplicación sea viable, junto con medidas de corrección, prevención o compensación sobre los efectos negativos sobre el medio ambiente.

El EIA ha de realizarse según dicta la Ley 21/2013 del 9 de diciembre de evaluación ambiental, que establece las bases que rigen la evaluación ambiental de proyectos y planes que puedan tener un efecto significativo sobre el medio ambiente y que busca garantizar en todo el Estado español un nivel de protección ambiental con el fin de promover el desarrollo sostenible. (1) Se han de tomar en cuenta también las modificaciones introducidas por la Ley 9/2019 del 5 de diciembre en la cual se transpone la Directiva 2014/52/UE.

En la Ley 21/2013 se recogen en el Anexo I aquellos proyectos que se han de someter a una evaluación ambiental ordinaria regulado en el título II, capítulo II de dicha Ley. Dentro de este anexo, en el Grupo 5 de Industria química, petroquímica, textil y papelera se recoge como 2º grupo de productos los químicos inorgánicos gaseosos, particularizando el caso del amoníaco, caso tratado en este documento. En el artículo 35 de dicha ley se describen los apartados y lo que se ha de tratar en cada uno de ellos y que, por lo tanto, serán tratados a continuación. (1)

2. DESCRIPCIÓN GENERAL DEL PROYECTO

En la planta de producción de amoníaco verde, sobre la cual trata el presente documento, se tratará de producir 16.500 toneladas anuales de amoníaco con una pureza del 99,5% de acuerdo al grado de pureza requerido comercialmente. Se ha de tener en cuenta que operará en régimen continuo, es decir, las 24 horas del día, durante 330 días al año.

Este proceso constará de 3 secciones, las secciones 100 y 200 serán empleadas para el acondicionamiento de las materias primas, mientras que la sección 300 será la empleada para la producción y purificación del amoníaco.

En la sección 100 se comienza con la entrada de aire de la atmosfera, el cual pasará por un filtro, será comprimido hasta unos 7 bar y pasará por un tanque con un eliminador de nieblas para eliminar las partículas sólidas y parte de la humedad ambiente. Posteriormente para eliminar el resto del agua y el CO₂ se hará circular el aire por un equipo con zeolitas. Posteriormente se mezclará con aire procedente de etapas posteriores y se comprimirá hasta 45 bar para hacerlo pasar por una serie de intercambiadores de calor. En los intercambiadores se calentará el oxígeno que sale de la torre para usarlo en la recuperación de las zeolitas (T-101 A/B), y junto con *cool water* será enfriado hasta 32 °C. Posteriormente serán empleado aire, que ha sido expandido para reducir la temperatura, en contracorriente en un tren de intercambiadores consiguiendo finalmente, tras pasar por una válvula, una temperatura de -173,5 °C y una presión de 6,5 bar. Posteriormente, en un tanque (V-102) se separa la parte líquida de la parte gas, saliendo por colas el aire licuado y por cabezas el aire en fase gas que será expandido y empleado para enfriar la corriente de entrada como se mencionó anteriormente. Finalmente, el aire licuado se introduce en la torre de destilación criogénica T-102 para obtener nitrógeno

Documento III. Estudios con entidad propia
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

puro por cabezas (que se empleará en la sección 300) y oxígeno con una parte de nitrógeno por colas, que será empleado para enfriar la recirculación en un ciclo de refrigeración tras ser expandido y se empleará para recuperar las zeolitas calentándolo como se mencionó anteriormente.

La sección 200 está destinada a la obtención de H_2 a partir de agua. Se emplea agua captada del río cercano (Río Miño) la cual ha sido pretratada por una planta depuradora cercana, se comprime empleando una bomba hasta unos 4 bar y se hace pasar por un equipo desmineralizador (DES-201) para obtener un agua lo más pura posible y que no genere residuos ni cambios de composición en el interior del equipo siguiente. Posteriormente se calienta hasta los 80 °C y se introduce en un electrolizador alcalino (EL-201) en el cual se romperá la molécula de agua para obtener hidrógeno y oxígeno. La corriente de oxígeno se hará pasar por zeolitas para retirar su humedad antes de ser almacenado. La corriente de hidrógeno se comprimirá hasta 7 bar y se hará pasar por zeolitas (T-201 A/B) para retirar el agua antes de continuar a la sección 300.

En la sección 300 se mezclan las corrientes de nitrógeno e hidrógeno de las secciones 100 y 200 respectivamente y se emplearán como materia prima del proceso Haber-Bosch. Se comprimen hasta los 100 bar mediante el compresor C-301 y se producirá amoníaco en el reactor R-301. La corriente de salida del reactor se separará una corriente gaseosa de recirculación y otra líquida de producto, tras ser refrigerado con diferentes integraciones energéticas y finalmente con propano, el cual se encuentra en un ciclo de refrigeración cerrado. Una vez separado el amoníaco con pureza comercial se expandirá hasta 18 bar empleando una turbina para su almacenamiento. El gas de recirculación se emplea en las integraciones y antes de ser devuelto al principio de la sección es purgado para la eliminación de oxígeno del sistema y comprimido.

La corriente de purga ha de ser enviada a un sistema de tratamiento de gases en el cual se eliminará el amoníaco empleando un lavado con agua para evitar contaminación del medio natural.

En este proceso se emplean como materias primas aire y agua, siendo el agua captada de un río cercano con una gran importancia medioambiental. Además, se emplean corrientes de agua de refrigeración y vapor de baja presión para acondicionar distintas corrientes en la planta, aunque se trata principalmente de recuperar la máxima cantidad de calor posible. También se ha de tener en cuenta el elevado consumo eléctrico debido a los numerosos compresores, bombas y el electrolizador, teniendo este último el mayor consumo de toda la planta.

Los efectos ambientales generados durante la operación de la planta de amoníaco son principalmente los que se describen a continuación:

- Emisiones gaseosas. En este punto es necesario mencionar que pueden distinguirse las emisiones continuas debidas a la purga en el proceso, que pese a ser tratada puede conllevar emisiones de amoníaco, hidrógeno y nitrógeno, siendo este último inofensivo; y las emisiones puntuales debidas a fugas, por lo que se podrían emitir los mismos gases mencionados anteriormente, pero de forma menos controlada.
- Efluentes líquidos. Los efluentes líquidos mayoritariamente serán del tipo puntual, debidos a fugas de agua, oxígeno y nitrógeno criogénicos, electrolito (disolución de KOH) y amoníaco. De forma continua los efluentes líquidos se tratarán de agua, que podría contener trazas de electrolito y alguno de los gases mencionados anteriormente en muy

pequeñas cantidades. Estas serán derivadas a una planta de gestión de residuos.

- Aguas residuales. Estas serán debidas a limpieza de equipos y al uso general en la planta, junto con las aguas pluviales.
- En lo que respecta a residuos se ha de tener en cuenta el catalizador empleado en el equipo de desmineralización y el del reactor de síntesis de amoníaco. Además de posibles repuestos de algunos equipos como juntas y electrodos para el electrolizador y los residuos de las obras durante la fase de construcción de la planta.
- Finalmente, los ruidos. Se consideran contaminación a un conjunto de sonidos no armónicos o descoordinados que provocan una sensación desagradable. En esta planta destacan los distintos equipos de impulsión de fluidos como son los compresores y las bombas, aunque estas últimas en menor medida.

2.1. Justificación de la ubicación

La localización seleccionada para este proyecto es la Plataforma Lógico e Industrial de Salvaterra e As Neves o PLISAN, situada en la comarca de O Condado, área Metropolitana de Vigo, entre los municipios de Salvaterra de Miño e As Neves, en el sur de la provincia de Pontevedra. Se decide utilizar esta localización debido a su proximidad al río Miño, fuente de una materia prima principal para el proceso, además de presentar una buena calidad del aire, otra importante materia prima, y puesto que tiene buenas conexiones para Galicia y hacia el país vecino, Portugal, que es uno de los mayores importadores de amoníaco de España.

Debido a la proximidad del polígono PLISAN de otros polígonos importantes en el sur de Galicia y en el norte de Portugal, desde este proyecto se tratará de abastecer de amoníaco la demanda en los mercados locales. Algunos de estos polígonos son el Polígono Industrial A Granxa y el Polígono Industrial de As Gándaras, ambos en O Porriño, el Parque Tecnológico y Logístico de Vigo, el Parque Empresarial de Pereiro de Aguiar en Ourense, el Polígono Industrial de Baión en Vilanova de Arousa, Polígono Industrial de A Pasaxe en Pontevedra, el Parque empresarial de Fulão en Vila Nova de Cerveira o la Zona Industrial do Entroncamento en Ribeira da Pena en Portugal, entre otros.

La Plataforma Lógico e Industrial de Salvaterra e As Neves está constituída por dos zonas, norte y sur, siendo la zona norte la más nueva con un total de 276.070,33 m² de superficie destinados a distintos usos industriales y que posee, junto con el resto de la PLISAN conexión con el centro peninsular mediante la A-52, con el norte de Galicia mediante la AP-9 y con el norte de Portugal mediante la A-55; además está conectado con la terminal de ferrocarril en la línea FFCC Madrid-Orense-Vigo-Puerto de Vigo y el puerto de Vigo se encuentra a 35 km.

3. EVALUACIÓN DE LAS PRINCIPALES ALTERNATIVAS

A continuación, se detallarán las diversas alternativas para la producción de amoníaco que se han tenido en cuenta, para finalmente justificar la selección de la alternativa seleccionada, que será la obtención de amoníaco verde mediante el ciclo de síntesis Haber-Bosch partiendo de nitrógeno e hidrógeno, obtenidos a partir de fuentes de materia y/o energía renovables. La principal diferencia entre las distintas alternativas para este proceso es la forma de obtención del hidrógeno y del nitrógeno.

3.1. Reformado con vapor

El reformado con vapor de gas natural o hidrocarburos ligeros es la alternativa más empleada para la obtención de hidrógeno en España. Este proceso consta de una serie de etapas: la desulfuración de gas natural, el reformado, la purificación y la compresión y síntesis de amoníaco. (2)

Mediante la desulfuración del gas natural se busca reducir el contenido de azufre presente, puesto que se emplea un catalizador de azufre que sufre envenenamiento por la presencia de azufre. Para llevar esto a cabo se hace reaccionar el hidrógeno del ciclo de síntesis con los compuestos azufrados para eliminarlo posteriormente haciéndolo pasar por un lecho con partículas de óxido de zinc, produciendo sulfuro de zinc. (2)

A continuación, se produce el reformado, empleando dos reformadores en los cuales se produce gas de síntesis a partir de metano y en el segundo se añade aire para continuar produciendo gas de síntesis y añadir el nitrógeno necesario para la reacción. Por último, en la purificación, el gas de la etapa anterior será alimentado a un convertidor, en el que el CO se convierte en CO₂ mediante una reacción con agua, para posteriormente ser absorbido en otro equipo, las trazas de CO y CO₂ restantes se hacen reaccionar con H₂ para obtener metano.

A lo largo de este proceso se producen diversas emisiones gaseosas, como lo son el CO, CO₂, NO_x, SO₂, NH₃ y COVDM (Compuestos Orgánicos Volátiles Distintos de Metano).

3.2. Oxidación parcial de hidrocarburos

Consiste en obtener gas de síntesis a partir de los hidrocarburos a temperaturas elevadas y en presencia de una cantidad de oxígeno restringida y se trata del segundo método más empleado. (3)

La oxidación parcial es un proceso complejo donde se llevan a cabo varias reacciones de forma simultánea, en las que reacciones distintos compuestos de carbono simples (C_xH_x) dando lugar a monóxido de carbono e hidrógeno. (3)

Esta alternativa permite reducir los costes asociados al aporte energético y el coste de capital, puesto que los materiales de construcción exigen menores especificaciones al ser la unidad de reacción más simple. (3)

3.3. Gasificación de Carbón

La producción de amoníaco a partir de carbón es la alternativa más empleada en China. En este caso, el gas de síntesis es obtenido mediante la gasificación de carbón. Se comienza condicionando el carbón en un gasificador donde este se transforma en gas de síntesis (H₂, CO, CO₂) y metano. Se emplea oxígeno obteniendo desde la unidad de separación de aire (ASU), a partir de la cual también se obtiene el nitrógeno que se empleará en la producción de amoníaco en la reacción Haber-Bosch. (4)

Tras la gasificación, se han de eliminar partículas del gas de síntesis, empleando una unidad SGS (*Sour Gas Shift*), en la que se inyecta vapor de agua que reacciona con el CO para dar dióxido de carbono e hidrógeno, reduciendo la presencia de CO. Es necesario aplicar un catalizador de cobalto-molibdeno apto para ambientes sulfurosos. (4)

A continuación, el gas se alimenta a una unidad destinada a la eliminación de gases ácidos (AGRU, Acid Gas Removal Unit), en la cual se emplea una disolución de metanol

para eliminar el CO₂ y el azufre presente en el gas de síntesis. El CO₂ extraído se puede alimentar a una planta de urea, mientras que el azufre es introducido a una unidad de recuperación de azufre (SRU). (4)

El gas de síntesis obtenido de la unidad AGRU puede ser purificada mediante una unidad de lavado con nitrógeno, mediante el cual se elimina el CO y CH₄ residual, o mediante un sistema PSA (Pressure Swing Adsorption), antes de alimentarlo al reactor. (4)

3.4. Procesos biológicos para la obtención de H₂

Dentro de este tipo de procesos se pueden distinguir 3: la biofotólisis, la fotofermentación y la fermentación oscura. Estas alternativas serán una vía importante para la valorización de residuos, permitiendo alcanzar una economía circular, además de permitir la recuperación de CO₂. Pero actualmente estos procesos no son aplicables a escala industrial, si no que se encuentran relegados a escalas planta piloto. Debido a esto no se hará un análisis más detallado de ellos en este apartado.

3.5. Procesos térmicos para la obtención de H₂

Entre los procesos térmicos para la obtención de hidrógeno pueden distinguirse los métodos de gasificación y pirólisis; las cuales se diferencian en la cantidad de oxígeno empleado. En la gasificación permite presencia de oxígeno en ciertos niveles, mientras que la pirólisis requiere la ausencia de oxígeno.

3.5.1. Gasificación

Es la alternativa con mejor rendimiento dentro de los métodos térmicos para producción de hidrógeno a partir de biomasa. Se puede emplear biomasa de diversas procedencias, como residuos agrícolas, forestales o la fracción orgánica de los residuos urbanos, fomentando la economía circular. Durante el proceso de gasificación, en cual la biomasa ha de alcanzar los 700 °C en presencia de oxígeno inferior al estequiométrico y vapor de agua, se produce gas de síntesis (CO, CO₂ y H₂) entre los cuales hay gases de efecto invernadero, aunque se hace reaccionar una gran parte del CO con agua para producir más dióxido de carbono. Además, se pueden producir otros subproductos de la combustión con gran efecto invernadero como NO_x o SO₂, dependiendo de la biomasa empleada. Además, también se producen residuos sólidos como lo son las cenizas y el alquitrán. (5)

3.5.2. Pirólisis

La pirólisis de biogás es otro método para la producción de hidrógeno a partir de biomasa. Es necesario producir el biogás o biometano mediante la fermentación de biomasa en ausencia de oxígeno, a partir del cual se obtiene metano y dióxido de carbono principalmente, con la posibilidad de tener como subproductos de nuevo NO_x y SO₂, dependiendo de la biomasa empleada. Una vez obtenido y depurado el metano se aplica el proceso de pirólisis, llevando el metano a temperaturas de entre 800 y 1200 °C en ausencia de oxígeno y agua, de forma que se obtiene hidrógeno y como subproducto carbón. Requiere un gran aporte de energía pues la reacción es endotérmica. (5)

3.6. Electrólisis de agua

La electrólisis del agua consiste en la ruptura del enlace entre los hidrógenos y el oxígeno gracias a la aplicación de voltaje y corriente al agua, que provocan que estos se liberen en estado gaseoso, en un equipo conocido como electrolizador. Si la electricidad se genera mediante energías renovables como la eólica, solar, etc, entonces, dado que no se producen emisiones de CO₂ en el proceso, el hidrógeno obtenido se clasifica como hidrógeno verde. (5)

Actualmente, existen tres tipos de electrolizadores que se pueden clasificar en base al electrolito empleado en la celda de electrólisis: electrolizadores alcalinos (AWE), electrolizadores de membrana polimérica (PEM) y electrolizadores de alta temperatura (SOEC) donde el electrolito empleado es un óxido sólido. (6)

Se ha seleccionado esta tecnología para la producción del hidrógeno necesario en el proceso, entre las razones que llevan a esto son su escasez de emisiones de gases y otros residuos, puesto que en caso de emplear energía eléctrica procedente de fuentes renovables como la eólica o la solar, este podría tratarse como neutro en carbono. Los gases de salida del equipo serán oxígeno, hidrógeno y vapor de agua, siendo el hidrógeno el gas empleado en el proceso y el oxígeno podría ser emitido a la atmósfera sin ningún perjuicio.

Pese a esto hay que destacar que el consumo de electricidad será elevado y además se empleará agua en cantidades considerables, aunque siempre se respetará el caudal ecológico del río del cual se obtiene el agua.

En este caso y en las alternativas en base a biomasa, se ha de obtener el nitrógeno por otros medios, puesto que no se empleará aire en la producción del hidrógeno.

3.7. Destilación criogénica de aire

La destilación criogénica de aire también conocida como la unidad de separación de aire o *air separation unit* (ASU) es la tecnología más empleada para obtener nitrógeno y oxígeno. Se sustenta en la diferencia entre las temperaturas de condensación de los distintos compuestos que forman el aire. En el proceso más simple, que solo permite obtener nitrógeno se emplea un filtro para eliminar las partículas, se comprime, se retira la humedad y el CO₂ mediante el uso de zeolitas y se enfría el aire hasta la licuefacción. Este gas licuado se introduce en una columna de destilación criogénica (temperaturas de -173 °C) en la cual se obtiene nitrógeno por cabezas y una mezcla muy rica en oxígeno por colas. (7) (8)

Este será la tecnología empleada pese a que requiere una gran cantidad de energía debido al uso de un gran número de compresores.

3.8. Adsorción por cambio de presión

El proceso de adsorción por cambio de presión (PSA, Pressure Switch Adsorption) se basa en la difusión cinética más rápida de las moléculas de oxígeno en los poros de un tamiz molecular de carbono frente a las moléculas de nitrógeno, lo cual permite la separación de este último. (7)

La adsorción de oxígeno se realiza tras comprimir y purificar el aire. Posteriormente se alimenta a los tanques que contienen el tamiz molecular, en los que se produce la adsorción del oxígeno, mientras que el nitrógeno lo atraviesa y puede ser almacenado.

Parte del nitrógeno se emplea para recuperar el tamiz molecular retirando el oxígeno de uno de los tanques mientras el otro está en funcionamiento, de esta forma se regenera el tamiz molecular. (9)

En esta metodología se necesita también del empleo de compresores, pero en menor cantidad debido a que no se emplean temperaturas criogénicas. No se emplea debido a otros problemas relacionados con su operación

3.9. Separación por membranas

Este sistema consiste en un haz de fibras de polímero de pequeño diámetro que se encuentran dentro de una cubierta exterior protectora que permite separar el nitrógeno del oxígeno del aire gracias al fenómeno de permeación. En primer lugar, el aire se comprime, se purifica y se seca, antes de ser alimentado a las membranas, de forma similar a las metodologías anteriores. Gracias a que los gases penetran a distintas velocidades es posible separar el nitrógeno, ya que el oxígeno penetra más rápido, por lo que abandona antes el sistema. De esta forma, el aire de alimentación se separa en dos corrientes, una de oxígeno y otra de nitrógeno. (7)

De forma similar a la tecnología anterior, tendría menor consumo energético que la destilación criogénica, pero debido a dificultades de proceso no se empleará.

3.10. Justificación de la alternativa

Para la producción de hidrógeno se opta por la electrólisis alcalina pese a su elevado consumo energético debido a que permite obtener H_2 sin emisiones directas de gases contaminantes o de efecto invernadero y es la más viable industrialmente.

Para el caso del nitrógeno la elección de una u otra tecnología depende principalmente de la capacidad de producción de nitrógeno necesaria, la pureza requerida y de los costes económicos asociados. Puesto que tanto la adsorción por cambio de presión como la separación por membranas necesitan de un equipo a mayores para poder emplear la corriente de nitrógeno en el ciclo de síntesis (debido al contenido de oxígeno) y a la menor capacidad de producción se opta por la destilación criogénica, aunque presente un mayor consumo energético.

Por otro lado, aunque sí existen distintas posibilidades en el ciclo de síntesis y presentan distintas condiciones de temperatura y presión, estas no se diferencian demasiado entre sí, por lo que desde un punto de vista medioambiental no serían distintos de forma general, y ya son tratados en el apartado de Estudio de Alternativas en la Memoria del proyecto.

3.11. Mejores Técnicas Disponibles (MTD)

Las mejores técnicas disponibles se definen en el apartado 11 del artículo 2 de la Directiva del Consejo 96/61/CE como “la fase más eficaz y avanzada de desarrollo de las actividades y de sus modalidades de explotación, que demuestren la capacidad práctica de determinadas técnicas para constituir, en principio, la base de los valores límite de emisión destinados a evitar o, cuando ello no sea practicable, reducir en general las emisiones y el impacto en el conjunto del medio ambiente”. (10)

Para las plantas de producción de amoníaco existe un BREF en el cual se tratan las MTD que hacen referencia a sus procesos de producción, Mejores Técnicas Disponibles de referencia europea: Industria Química inorgánica de gran volumen de producción

(Amoníaco, ácidos y fertilizantes). En su apartado 2.4.26 se trata la producción de amoníaco empleando hidrogeno de la electrólisis de agua, se menciona que el hidrógeno empleado es de alta pureza, con un contenido de oxígeno muy bajo (0,1-0,2%), como se ha mencionado en el diseño del electrolizador. Además, menciona que las emisiones directas empleando este proceso de producción son mínimas comparándolo con otras tecnologías, como se ha mencionado anteriormente. Además, se comenta que este tipo de plantas pueden diseñar hasta una capacidad de 500 t/d, pero que no se suele considerar económicamente viable debido al alto coste de la energía eléctrica; lo cual se podría solventar gracias a la disponibilidad y empleo de energías renovables.

En el mismo documento se mencionan las MTD de aplicación general en el apartado 1.5, siendo las más destacables para este proyecto en el ámbito de las mejoras de rendimiento ambiental: (10)

- Reciclaje y redirección de flujos másicos.
- Aumentar la integración de calor.
- Reducir los volúmenes y cargas de aguas residuales reciclando los condensados, las aguas de proceso y las aguas de lavado.
- Aplicar sistemas de control de proceso avanzado.
- Mantenimiento.

En el BREF se reconoce que entre un 2 y un 3 % de la energía total consumida a nivel mundial es empleada en la producción de fertilizantes, siendo los fertilizantes nitrogenados los que más contribuyen a aumentar el gasto energético. Una gran parte de esta energía se emplea para fijar el nitrógeno atmosférico durante la producción de amoníaco. A pesar de que se requieren grandes cantidades de energía debido principalmente al empleo de altas temperaturas y presiones, las mejoras en el rendimiento de los equipos a permitido a este sector reducir el consumo energético y ser más eficaz energéticamente.

Cabe mencionar que, en el caso descrito actualmente, también existirá una parte muy importante de consumo energético a la hora de obtener hidrógeno mediante electrólisis de agua.

3.12. Posibles impactos ambientales y socioeconómicos

Una vez descritos el proceso de producción y las distintas alternativas propuestas, se listarán las acciones que durante el ciclo de vida de la planta de producción de amoníaco podrían producir impactos ambientales significativos. Se distinguirán 3 fases en el ciclo de vida del proyecto: la construcción, la operación y el desmantelamiento. La lista se recoge en la Tabla 1.

Tabla 1. Acciones que pueden causar impactos ambientales a lo largo del ciclo de vida del proyecto

Fase	Acción
Construcción	Acondicionamiento del terreno
	Cimientos y estructuras
	Instalaciones de obra
	Tránsito de vehículos pesados
Fase de Explotación	Ocupación del terreno

	Operación normal de la planta Operación anormal de la planta Tránsito de vehículos Mantenimiento
Fase de Desmantelamiento	Trabajos de demolición Generación y desecho de residuos de obra Tránsito de vehículos pesados

4. INVENTARIO AMBIENTAL

A continuación, se detallarán las condiciones medioambientales del lugar seleccionado junto con el estado actual del mismo, antes de las obras para la instalación de la planta de producción de amoníaco verde. Se tratarán los parámetros más relevantes en los factores considerados a continuación, comentando posibles impactos causados por la construcción y operación de la industria. Se ha de incluir de forma específica la evaluación de las repercusiones sobre espacios de la Red Natura 2000, teniendo en cuenta los objetivos de conservación de cada lugar. (1)

4.1. Clima

La climatología se centra en el estudio de los factores meteorológicos y sus variaciones a lo largo de los años. Para realizar estos estudios emplea un conjunto de variables atmosféricas, como las precipitaciones, la temperatura, los vientos, la humedad, etc. que permiten diferenciar una región. La Agencia Estatal de Meteorología (AEMET) del Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente provee de información para realizar el análisis climatológico mediante el empleo de datos de estaciones meteorológicas representativas de la zona de estudio. (11)

El clima en la Comunidad Autónoma de Galicia es principalmente marítimo, con pequeñas variaciones de temperaturas, lo que implica inviernos suaves y veranos frescos. Se pueden diferenciar las zonas de costa y las más cercanas a la meseta. En la costa las temperaturas oscilan entre los 8 y 10 °C en invierno y los 20 y 25 °C en verano, pero estos valores son muy distintos a medida que se adentra en el interior, con temperaturas más bajas en inviernos y más altas en verano. Teniendo en cuenta que la zona de estudio no se encuentra en la costa, pero tampoco se encuentra demasiado hacia al interior, se puede asimilar que tendrá un clima más similar al costero, pero con unas temperaturas algo más extremas. (11)

La zona de estudio se encuentra al sur de la comunidad de Galicia, en la provincia de Pontevedra próximo a la frontera con Portugal. Principalmente se trata encuentra próximo a terrenos rurales de interior y espacios montañosos forestales, además de con el río Miño.

La estación meteorológica más cercana de la que se pueden obtener datos a partir de la AEMET es la que se encuentra en Vigo Aeropuerto (30 km de distancia) y ofrece los datos detallados a continuación.

4.1.1. Temperatura

Como se ha mencionado anteriormente, en Galicia las temperaturas medias oscilan entre los 8 y 10 °C en invierno y los 20 a 25 °C en verano, lo cual se puede comprobar en la Figura 1, para las zonas costeras, como es el caso de Vigo, para el caso de Salvaterra de Miño, estos valores serán algo más extremos que los presentados aquí, puesto que se encuentra separado de la costa al menos unos 30 km, pero las diferencias no serán demasiado destacables en los valores medios. Podría existir más diferencia en los valores máximos y mínimos (que también se pueden ver en la Figura 1), pudiendo ser algo más extremos.

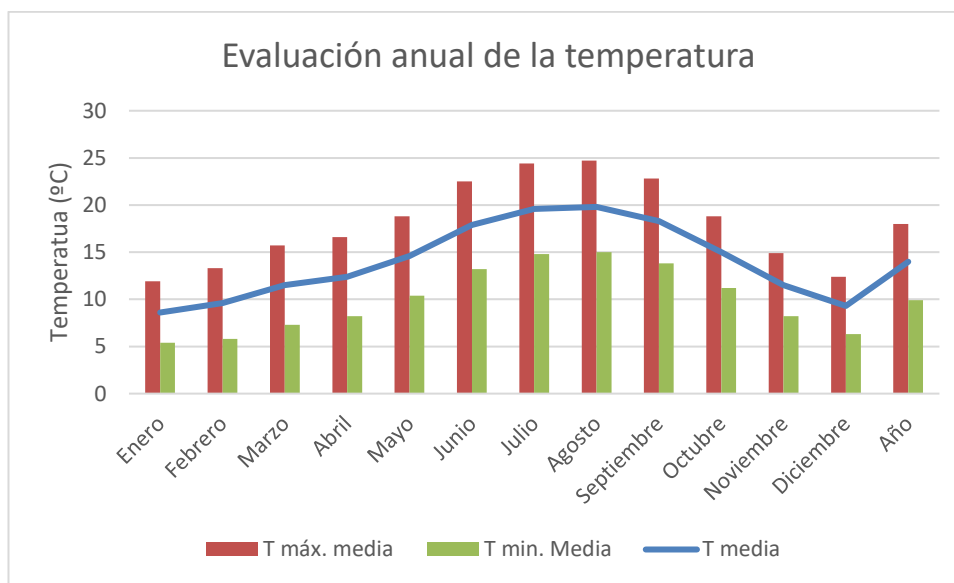


Figura 1. Evolución anual de la temperatura en la estación meteorológica Vigo Aeropuerto. Fuente: AEMET (12)

En Galicia la temperatura media es de unos 13,3 °C, mientras que en zonas del valle del Miño, como el caso de Salvaterra, pueden ser algo mayores, pudiendo alcanzar los 15 °C.

Además, se pueden comprobar el número de días de helada por cada mes, definiendo “día de helada” como aquel en el que se registran temperaturas inferiores a los 0 °C en alturas de 1,5 metros sobre el suelo. (11) Para el caso de Vigo este valor oscila en invierno entre los 0,3 y 3,8 días, teniendo el resto del año un valor de 0. (12)

4.1.2. Pluviometría

Galicia es una de las regiones atlánticas de Europa que presenta una mayor pluviosidad, aunque se presenta una gran irregularidad en su distribución territorial. En Galicia, parte del territorio se encuentra en un dominio oceánico puro, en el cual el reparto de precipitaciones es homogéneo durante todo el año, mientras que otra parte del territorio se correspondería con la tipología suboceánica con tendencia mediterránea. Cabe destacar el factor orográfico, puesto que actúa como intensificador de la descarga hídrica debido al ascenso forzado por los relieves. (11)

Debido a este factor orográfico se pueden distinguir un total de 11 sectores de gradientes pluviométricos en Galicia. En el caso de estudio se encuentra en el sector XI, en el cual las precipitaciones disminuyen de oeste a este. Debido a la configuración orográfica de las Rías Baixas, estas actúan como embudos canalizadores, juntos con las

distintas sierras de la zona con altitudes cercanas a los 1000 metros, provocando que las masas de aire deban realizar un ascenso forzado generando inestabilidad y desencadenando lluvias, lo cual puede generar cuantiosas precipitaciones acumuladas anualmente de más de 2000 mm. De forma general en el territorio gallego las precipitaciones medias anuales varían entre los 1000 y los 1600 mm. (11)

En la Figura 2 puede verse que la mayor concentración de lluvias y de días de lluvia se encuentra en los meses de enero a mayo y octubre a diciembre, con un número de días similar entre ellos, es decir, las lluvias se reparten principalmente en las estaciones de otoño, invierno y primavera, siendo inferiores en cantidad y número de días en el verano. Se puede observar que la precipitación media anual sería de 1.791 mm. (12)

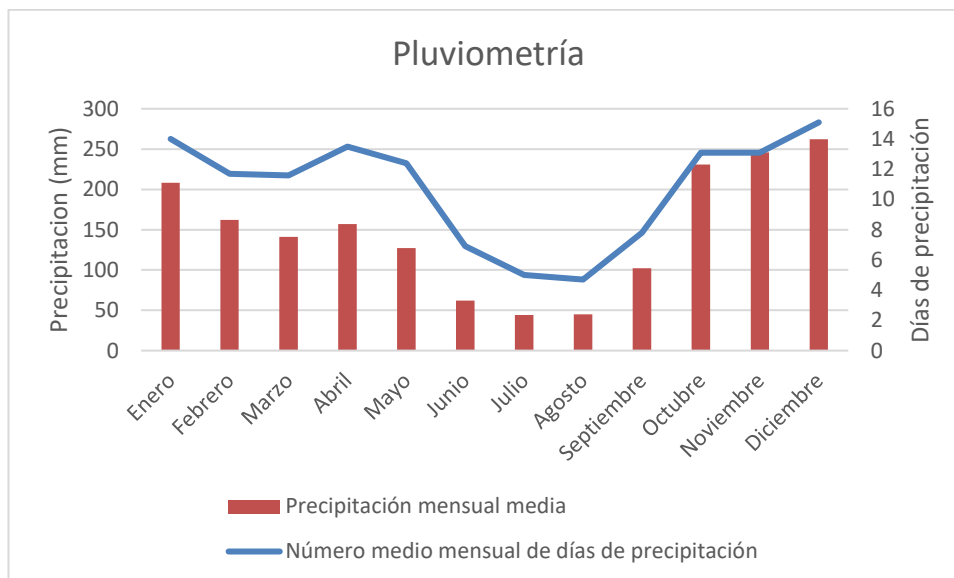


Figura 2. Pluviometría media mensual en la estación meteorológica Vigo Aeropuerto. Fuente: AEMET (12)

4.1.3. Viento

El régimen de vientos en Galicia se define por la circulación global atmosférica y por los efectos de la citada compleja orografía local. En invierno, debido a la entrada de frentes procedentes del océano atlántico en el noroeste, se originan vientos con dirección suroeste constantes y enérgicos; mientras que en verano, el anticiclón de las Azores origina vientos de dirección noroeste, generalmente suaves aunque pueden contener rachas enérgicas. (11)

En zonas de litoral destacan los vientos del oeste y del sur con velocidades medias de 11,7 km/h. Las mayores intensidades de los vientos se dan en el noreste y del suroeste. Ambas afirmaciones se pueden observar en la Figura 3, en las rosas de viento. Cabe destacar que no serán exactamente iguales para Salvaterra de Miño, puesto que tendrá también algo de efecto del interior.

Documento III. Estudios con entidad propia
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

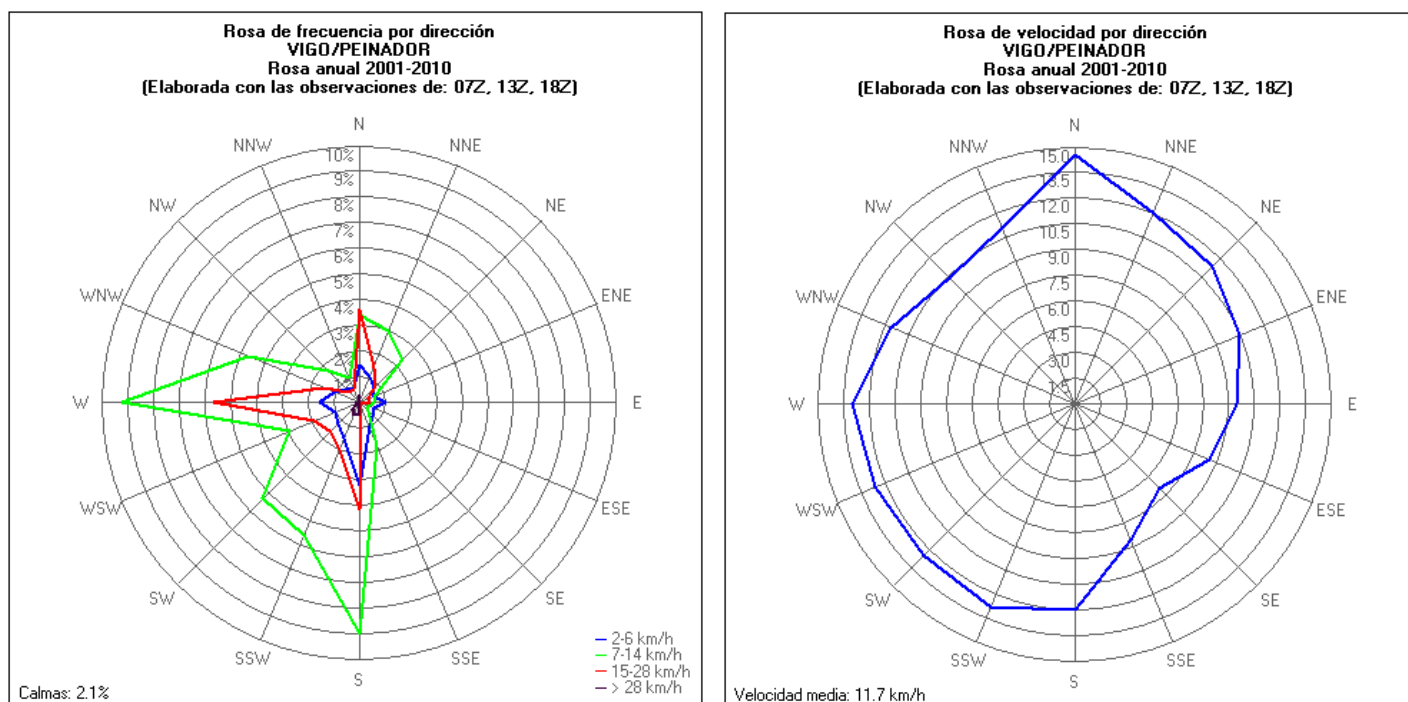


Figura 3. Rosas de frecuencia y velocidad por dirección en la estación meteorológica Vigo Aeropuerto.
Fuente: AEMET (12)

En las zonas de interior resultan más comunes los vientos de dirección oeste y sur con una velocidad media de 3,2 km/h, muy inferior a la de la costa, siendo los vientos del norte aquellos con mayor intensidad.

4.1.4. Calidad del aire

La calidad del aire es un factor muy relevante, sobre todo en esta planta debido a la necesidad de captación del aire ambiente es de especial importancia que esté lo menos contaminado posible con el fin de un mejor funcionamiento de los equipos de proceso. Los contaminantes son aquellas sustancias perjudiciales para la salud o el medio ambiente presentes en el ambiente. En la zona de Salvaterra de Miño la calidad del aire se catalogada como buena, aunque, como se puede observar en la Tabla 2 para Vigo y su zona metropolitana algunos valores son altos, como es el caso del ozono o el número de superaciones de partículas PM_{2,5} a lo largo del año, puesto que se supera en numerosas ocasiones. En la Tabla 2 *VLD* es el valor límite diario, *OLP* el objetivo a largo plazo y *VLA* el valor límite anual. (13)

Tabla 2. Contaminantes valores máximos y medios/superaciones en Vigo y su área metropolitana (13)

Contaminante	Valor máximo según la UE	Valor en la zona
SO₂ VLD	125 µg/m ³ ; 3 veces/año	Nº superaciones: 0
O₃ OLP	120 µg/m ³	Nº superaciones: 1
PM₁₀ VLA	40 µg/m ³	Media anual: 23
PM₁₀ VLD	50 µg/m ³ ; 35 veces/año	Nº superaciones: 4
PM_{2,5} VLA	25 µg/m ³	Media anual: 13

PM2,5 VLD

25 $\mu\text{g}/\text{m}^3$; 3 veces año

Nº superaciones: 38

4.2. Suelo

4.2.1. Geología

La zona de estudio se encuentra en la zona occidental del sector norte de la “Zona Centro Ibérica” como se ve en la Figura 4. Se localiza en el Macizo Hespérico, constituido por materiales precámbricos y paleozoicos de la Península Ibérica, deformados durante la Orogenia Hercínica. Este macizo hercínico es el principal de la Península y estuvo bajo el nivel del mar durante la mayor parte del Paleozoico, teniendo depósitos de materiales con una gran varivilidad litológica y potencia según las zonas y la edad. La orogenia hercínica deformó los materiales y los hizo emerger de forma que pasó a predominar el proceso de erosión.

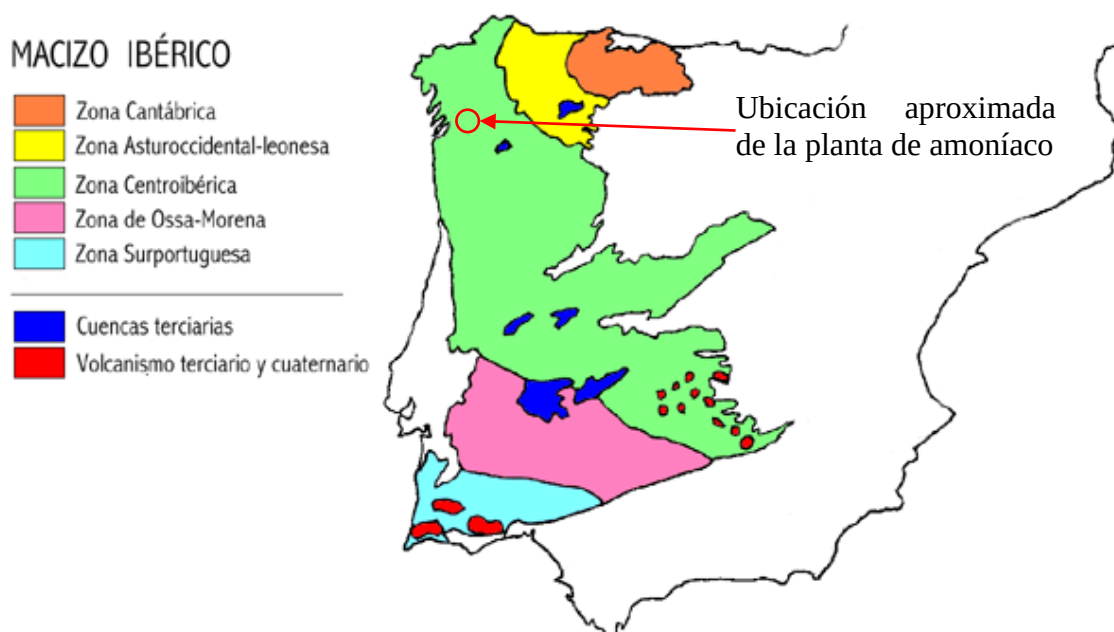


Figura 4. Mapa del Macizo Ibérico según sus zonas. Fuente: GeolIberia.

La zona centroibérica presenta heterogeneidad con metamorfismo variable, siendo caracterizado en la zona de Galicia por la abundancia de granitoides (granitos y rocas plutónicas afienses). El territorio gallego se suele dividir en dos grandes zonas: Galicia interior y Galicia litoral, separados entre sí por las Sierras Centrales o Dorsal Gallega, en las cuales se puede ubicar la zona de estudio. Estas Sierras Centrales actúan como división entre el río Miño y otros ríos atlánticos. En la zona de estudio y su contorna la altitud del terreno varía entre 0 a 200 m zonas próximas a la red fluvial, como es el caso de estudio, a zonas de entre 200 a 400 m en zonas algo alejadas de los ríos, con algunos puntos con alguna elevación mayor.

4.2.2. Hidrología

La zona de estudio está englobada en la demarcación hidrográfica perteneciente a la Confederación Hidrográfica Miño-Sil. Esta abarca las cuencas del río Miño y del río Sil, junto con la parte española del río Lima. El río Miño es el cauce principal de la demarcación y de toda Galicia, naciendo en Pedregal de Irimia, en la sierra de Meira

(Lugo) a unos 700 m de altura hasta desembocar en el Atlántico en A Guardia (Pontevedra), formando un gran estuario, tras haber hecho frontera natural con Portugal en su tramo final conocido como Baixo Miño. Todo su curso alto está declarado Reserva de la Biosfera y junto con el bajo incluido en la Red Natura 2000.

El caudal medio del río Miño es de 340 m³/s de forma que su caudal anual es de unos 7.000 hm³ según datos del plan hidrológico Miño-Sil. (14) (11)

Así mismo, no destaca hidrología subterránea en la zona de estudio debido a las formaciones graníticas mencionadas anteriormente que poseen una baja permeabilidad.

Es importante tener en cuenta que debido a la proximidad al río Miño existe riesgo de inundaciones (sin ser del mayor riesgo), siendo la zona de Salvaterra do Miño una zona en la que existe riesgo de inundación en los márgenes del río. La ubicación actual de la planta no se encuentra en los márgenes, pero sí cerca de ellos. (11)

4.3. Medio Biológico

4.3.1. Flora

En las proximidades de la zona de estudio la vegetación actual es dominada por áreas de matorral y plantaciones, destacando el cultivo de viñedos en la contorna. La zona más importante cubierta de vegetación en las proximidades es la ribera del río Miño, la cual se trata de estrechas franjas en los márgenes de los cursos de los ríos. En los tramos mejor conservados se pueden encontrar *Alnus glutinosa* (aliso), *Betula alba* (abedul), *Salix atrocinerea* (sauce ceniciento) y *Fraxinus excelsior* (fresno europeo).

El marco normativo que regula las especies de flora amenazadas se encuentra representado por la Ley 9/2001 del 21 de agosto de Conservación de la Naturaleza de Galicia en el cual se crea el Catálogo Gallego de Especies Amenazadas. Entre vegetación cuyo hábitat es próximo a la zona de estudio destacan *Nymphoides peltata*, catalogada como en peligro de extinción, y el *Narcissus cyclamineus*, catalogada como vulnerable y endemismo de la Península Ibérica.

4.3.2. Fauna

En la zona de estudio existen un gran número de especies de peces, anfibios, reptiles, aves y mamíferos, destacando la diversidad de las aves siendo el grupo más representativo.

En las zonas de ribera pueden destacar especies como el cormorán grande (*Phalacrocorax carbo*), el somormujo lavando (*Podiceps cristatus*) o el martín pescador (*Alcedo atthis*) como aves. Además, muchas aves antropófilas pueden ser vistas en entornos urbanos como el mirlo común (*Turdus merula*), la urraca (*Pica pica*), el gorrión común (*Passer domesticus*) o distintos estorninos. Gracias a la buena conservación de los cauces de los ríos se pueden encontrar algunos mamíferos como la nutria paleártica (*Lutra lutra*), el turón (*Mustela putorius*) o el murciélago ribereño (*Myotis daubentonii*). (11)

En la fauna piscícola, también con una gran diversidad, destaca la presencia de especies como la lamprea marina (*Petromyzon marinus*) o el salmón (*Salmo salar*), muestra de la buena salud de los ríos de la zona, aun teniendo en cuenta la existencia río arriba de grandes presas y embalses. (11)

Documento III. Estudios con entidad propia
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Es importante tener en cuenta que dentro de esta gran biodiversidad existen algunas especies en peligro de extinción como el milano real (*Milvus milvus*), la cerceta común (*Anas crecca*), avefría europea (*Vanellus vanellus*) y la agachadiza común (*Gallinago gallinago*); y otras vulnerables como el sábalo (*Alosa alosa*), el espinoso (*Gasterosteus gymnaeum*), el murciélago ratonero grande (*Myotis myotis*), el murciélago pequeño de herradura (*Rhinolophus hipposideros*), el murciélago grande de herradura (*Rhinolophus ferrumequinum*) y la chocha perdiz (*Scolopax rusticola*). También se trata de un área potencial para el galápago europeo (*Emys orbicularis*) y del alcaraván común (*Burhinus oedicephalus*) ambos con sus respectivos planes de recuperación y conservación. (11)

En lo que respecta a la flora y la fauna de la zona, esta no debería ser afectada por la construcción de la planta puesto que será construida en terreno destinado a la industria. Además, debido a que no se producen vertidos ni emisiones contaminantes desde la planta de forma normal, la actividad industrial desarrollada no implicaría ningún riesgo para las especies de plantas o animales de las proximidades. (11)

4.3.3. Red Natura 2000

La Red Natura 2000 se trata de un conjunto de espacios naturales protegidos en la Unión Europea. Están forrados por las Zonas de Especial Protección para las Aves (ZEPA) y por Zonas Especiales de Conservación (ZEC) o Lugares de Interés Comunitario (LIC). El objetivo es asegurar la supervivencia a largo plazo de las especies y los hábitat en Europa, fomentando la detención de la pérdida de biodiversidad. Se trata del principal instrumento para la conservación de la naturaleza de la Unión Europea. (15)

En las proximidades del polígono industrial se encuentra la ribera del río Miño (Figura 5) la cual pertenece a la Red Natura 2000 en calidad de Lugar de Interés Comunitario con el código ES1140007, el cual engloba el curso bajo del río Miño, con unos 76 km de longitud, discurriendo sin interrupciones a lo largo de las comarcas del Baixo Miño, O Condado y A Paradanta, entre la presa de A Frieira y la desembocadura en A Guada. Además, incluye numerosos cursos de arroyos cercanos que son afluentes del río Miño.



Figura 5. Zonas pertenecientes la Red Natura 2000 próximos a la zona de estudio. Fuente: Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. (15)

En este tramo el río presenta una baja sinuosidad y una pendiente media escasa, pudiendo superar los 400 metros de ancho en algunas secciones. Se producen cambios geomorfológicos y ecológicos debidos a la influencia de las mareas, lo cual afecta los últimos 35-40 km de cauce. La flora y la fauna, ya descritas anteriormente, destacan por su diversidad. (11)

Cabe destacar que pese a encontrarse cerca de esta área natural protegida y con gran biodiversidad, la industria que se intalará no afectará a la zona protegida, puesto que no se producirán vertidos ni emisiones perjudiciales, pero se ha de tener especial cuidado, sobre todo durante las fases de construcción y desmantelamiento, con las emisiones y cualquier vertido, tratando de preservar el medio natural de las proximidades.

4.4. Medio socioeconómico

La zona de estudio se encuentra en la zona sur de Galicia, concretamente en el sur de Pontevedra, en el límite de la frontera con Portugal. Se muestra un elevado grado de antropización derivada de las actividades llevadas a cabo a lo largo de muchos años. Debido a el aprovechamiento del terreno para la ganadería y la silviculturas se ha modificado en gran medida el suelo no urbanizable, se han aumentando las zonas ocupadas por pasto, matorral y plantaciones en detrimento de las masas forestales autóctonas dominadas por el roble (*Quercus Robur*). En los últimos tiempos destaca la artifiacialización del entorno mediante la construcción de grandes infraestructuras como la autovía de las Rías Baixas (A-52) o la multitud de líneas eléctricas de alta, media y baja tensión.

En cuanto a urbanización, en la zona no ha aumentado de forma considerable desde el punto de vista de núcleos importantes de población, pero éste territorio se caracteriza por la presencia de una urbanización dispersa, habitualmente siguiendo la traza de caminos y carreteras, o bien conformando pequeñas agrupaciones vecinales en entornos rurales congregadas alrededor de una parroquia; lo cual implica que existe una presencia

de zonas habitadas de forma constante, tanto en pequeñas concentraciones como manteniendo una cierta linealidad.

Pese a que una gran parte de la superficie del ámbito de estudio está ocupada por áreas rurales y forestales, las actividades agropecuarias y silvícolas no posee un gran peso en la economía de la zona, si no que una gran parte de la población se ocupa en actividades del sector secundario o terciario, principalmente en la ciudad de Ourense, Vigo o en su área metropolitana.

4.4.1. Población

La evolución de la población de los municipios de Salvaterra de Miño y de As Neves puede verse en la Figura 6. Se puede observar que la población de Salvaterra ha aumentado a lo largo de los años, alcanzando en los últimos años los 10.000 habitantes, mientras que la población de su municipio vecino As Neves ha ido perdiendo población en todo el periodo del que se posee datos. La población en la comunidad autónoma, al igual que en estos dos municipios se encuentra repartida de forma no uniforme a lo largo del territorio.

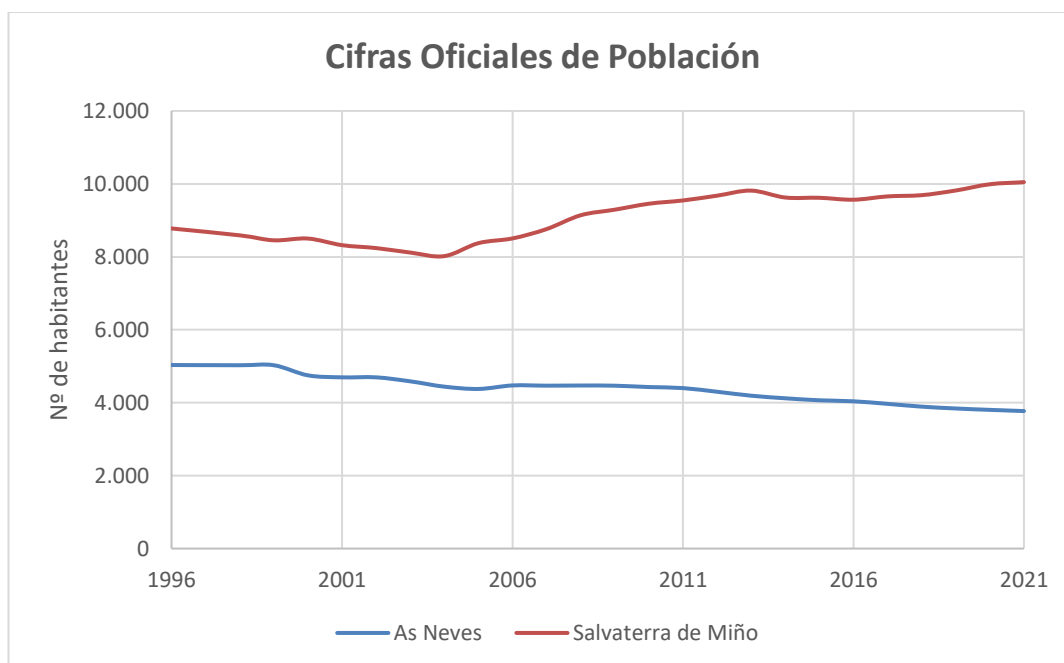


Figura 6. Cifras Oficiales de Población en los municipios de Salvaterra de Miño y As Neves. Elaboración propia a partir de datos del INE. (16)

En Galicia, igual que en As Neves, se está detectando un cierto retroceso demográfico, el cual se debe al descenso de la natalidad y al envejecimiento de la población. De forma general el caso de As Neves, en la mayoría de los municipios de la provincia gallega se está produciendo una despoblación generalizada, con contadas excepciones como en este caso Salvaterra de Miño. El Área Metropolitana de Vigo aporta dinamismo a las áreas cercanas, de forma que algunos municipios se ven beneficiados por ello, como puede ser el caso de Salvaterra. (11)

La creación de empresas fomenta el crecimiento de la población y su empleabilidad lo cual ayudará a acrecentar los aumentos de población y a desarrollarlos en las poblaciones cercanas.

4.4.2. Economía

De forma general, la economía de Galicia se encuentra fuertemente relacionada con los recursos naturales, aunque en los últimos años se han acentuado más las diferencias entre el interior y las áreas de costa, siendo estas últimas las que mayor desarrollo industrial y económico han tenido. Destacan entre estas ciudades A Coruña y Vigo, junto con sus áreas metropolitanas.

De forma histórica, las actividades del sector primario como la pesca, la agricultura y la ganadería presentan una gran importancia en la economía gallega, pero con los años su importancia va disminuyendo, en parte debido que el pequeño tamaño de las explotaciones no las hace competitivas.

El sector secundario aporta el 28,8 % del PIB gallego, con una contribución destacada del sector energético y de la construcción. En el terreno industrial destacan las actividades ligadas a recursos naturales como las conservas y la producción de vehículos a motor y complementos.

De forma más específica, en la comarca de O Condado, en la que se encuentra Salvaterra de Miño, gracias a la proximidad de las áreas industriales y urbanas de Vigo, O Porriño y Mos, una gran parte de la población de esta comarca se desplaza para realizar sus actividades ha estos lugares, dando lugar a que una gran parte de la población activa ocupada se encuentre en el sector terciario, seguido por el sector industrial y la construcción, mientras que en menor medida se encuentran el sector primario.

Existe una complementariedad económica, teniendo una gran relevancia del sector agropecuario en Mondariz, As Neves y Salvaterra do Miño mientras que Mondariz Balneario se centra en el sector servicios. El viñedo es una de las principales producciones agrícolas, aunque también existe cultivo de patata y kiwi. La pesca fluvial se concentra en la lamprea, el salmón y sable, gozando de gran importancia gastronómica en la localidad.

4.4.3. Paisaje

Se entiende por paisaje aquellas partes del territorio que se perciban como tal por el ser humano. Para poder valorar los factores humanos y naturales junto con las interacciones de estos. La ubicación de la planta será dentro de un polígono industrial, el cual se encuentra cerca del curso del río Miño. Este paisaje ofrece enclaves con un gran valor paisajístico que reflejan las buenas condiciones ambientales de las que goza el curso del río Miño, aunque ha sido modificado en gran medida para la realización de plantaciones y prácticas agrícolas diversas. Estas actividades también muestran las buenas condiciones ambientales que lo convierten en un paisaje propicio para ellas. (11)

La construcción de esta planta no se considerará como una variación del paisaje puesto que la zona en la que se encuentra ya respondería actualmente con un paisaje de tipo industrial y no afectará al paisaje fluvial siempre que se respeten las medidas de seguridad y que se lleven a cabo las obras de construcción y posible desmantelamiento con la mayor control posible sobre la generación de polvos y residuos sólidos y líquidos.

4.4.4. Patrimonio cultural

En los municipios de As Neves y de Salvaterra existes varios lugares e inmuebles de interés aqueológico y arquitectónico. En el municipio de As Neves destaca el patrimonio arqueológico como son el Monte Cividade, la Citania de Altamira, la Pedra

Moura, grabados rupestres A Rocha, Monte das Croas y Fental Minada. Mientras que en el municipio de Salvaterra de Miño destaca el patrimonio arquitectónico como el recinto amurallado de Salvaterra y el Castillo de Santiago de Aitona. (11)

Es importante tener en cuenta que, aunque el patrimonio cultural de la zona es cuantioso, ninguno se verá afectado de forma directa o indirecta por las distintas fases de la planta de producción de amoníaco debido a la distancia de la localización de esta a las distintas ubicaciones del patrimonio anteriormente mencionados.

4.5. Riesgos y molestias

4.5.1. Ruido

La legislación estatal vigente en materia de ruidos es la Ley 37/2003 de Ruido y el Decreto 1367/2007, de 19 de octubre, por el que se desarrolla la Ley 37/2003, de 17 de noviembre del Ruido, en lo referente a zonificación acústica, objetivos de calidad y emisiones acústicas. Aunque en esta ley no se establecen valores de emisión máximos, existen referencias de la Organización Mundial de la Salud en la que se establecen los valores máximos permisibles que se describen a continuación: (11)

- Diurnos:
 - 70 dB: incompatibilidad con actividades como hoteles, oficinas, colegios, servicios, etc.
- Nocturnos:
 - 55 dB: sueño alterado con las ventanas abiertas.
 - 60 dB: sueño y conversación alterados.
 - 65 dB: valor (referencia C.E.) que no debe ser sobrepasado en la fachada de los edificios en zonas residenciales.

Teniendo en cuenta que en la planta el ruido estará relacionado principalmente con el funcionamiento de los equipos de impulsión, como máquinas y compresores entre otros, y que en su mayoría se encontrarán en el interior de edificios la influencia de estos será baja. Además, las áreas urbanas más cercanas y las riberas del río se encuentran a una distancia prudencial de la ubicación de la planta, de forma que la molestia por el ruido provocado por la planta debería verse muy reducido o incluso eliminado a la hora de alcanzar esas localizaciones.

5. VALORACIÓN DE IMPACTOS AMBIENTALES

5.1. Matriz de Leopold

Para poder analizar los diversos impactos debidos a la construcción, explotación y desmantelamiento de la planta de producción de amoníaco verde se empleará la Matriz Leopold, la cual consiste en tres elementos principales: una lista de efectos y de factores medioambientales y socioeconómicos que los sufren, una evaluación de importancia de cada uno de los efectos sobre los distintos factores listados y una evaluación global sobre el efecto combinado de todos los efectos, combinando su magnitud y su importancia. (17)

Se han de representar en las columnas de una matriz las actividades que tienen lugar durante el ciclo de vida del proyecto, mientras que en las filas se representarán los factores ambientales considerados que han sido mencionados anteriormente. En las intersecciones se han de emplear 2 valores: el primer valor, M, indicará la magnitud, es decir, la intensidad del impacto considerando el grado o escala del mismo pudiendo tomar valores

entre -5 y 5 cuyo signo será positivo si el impacto es beneficioso y negativo si no lo es; mientras que el segundo valor será la importancia (I) la cual denotará la extensión del impacto y que tomará valores entre 1 y 5. En ambas escalas los valores más elevados (en valor absoluto) denotarán mayor magnitud o importancia respectivamente. (17)

5.2. Factores ambientales

En base al inventario ambiental comentado anteriormente se han tenido en cuenta los factores físicos, biológicos y socioeconómicos siguientes, los cuales serán empleados para evaluar el desempeño ambiental del proyecto en la localización designada y que se recogen en la Tabla 3.

Tabla 3. Factores ambientales y socioeconómicos relacionados con la localización

Medio	Sistema	Impacto
FÍSICO	SUELO	Tasa de erosión Estructuras
	ATMOSFERA	Calidad del aire Ruido
	AGUA	Turbidez Toxicidad
	PAISAJE	Calidad
BIOLÓGICO	FLORA	Estructura y composición Hábitat
	FAUNA	Hábitat
SOCIO ECONÓMICO	POBLACIÓN	Migración
	TERRITORIO	Uso de la Tierra
	ECONOMÍA	Generación de Empleo
	CULTURA	Sitio Arqueológico

5.3. Fase de Construcción

En la fase de construcción, en base a los posibles impactos recogidos en la Tabla 1 se puede generar la Matriz de Leopold para esta etapa, relacionando los impactos con los distintos factores ambientales recogidos en la Tabla 3. Se puede obtener como resultado de las interacciones la Matriz de Leopold recogida en la Tabla 4 teniendo en cuenta lo detallado a continuación.

Tabla 4. Matriz de Leopold sobre la fase de construcción

ACCIONES DEL PROYECTO FACTORES AMBIENTALES			FASE DE CONSTRUCCIÓN							
			Acondicionamiento del terreno		Cimentación y estructuras		Instalaciones de obra		Tránsito de vehículos pesados	
Criterios de Valoración			M	I	M	I	M	I	M	I
FÍSICO	SUELO	Tasa de erosión	-2	1	-1	1			-2	2
		Estructuras			3	2	-1	1		
	ATMOSFERA	Calidad del aire	-2	2	-1	2			-2	2
		Ruido	-2	3	-2	3			-3	2
	AGUA	Turbidez							-1	1
		Toxicidad								
	PAISAJE	Calidad					-1	1		
BIOLÓGICO	FLORA	Estructura y composición	-1	1						
		Hábitat								
	FAUNA	Hábitat	-1	2	-1	3			-1	2
SOCIO ECONÓMICO	POBLACIÓN	Migración								
	TERRITORIO	Uso de la tierra								
	ECONOMÍA	Generación de Empleo	2	1	3	2	1	1	3	2
	CULTURA	Sitio Arqueológico								
INDICADORES con MAGNITUD POSITIVA			1		2		1		1	
INDICADORES con MAGNITUD NEGATIVA			5		4		2		5	
SUMA DE PRODUCTOS (M x I)			-13		0		-1		-11	

5.3.1. Acondicionamiento del terreno

Durante el acondicionamiento del terreno se producirá erosión en el suelo, pudiendo generar polvos que afectarán a la calidad del aire de la zona. Además, la diversa maquinaria en la zona podría suponer la generación de ruidos. Siempre que se respeten las medidas de seguridad el agua y el paisaje no deberían verse afectados por estas acciones. La flora una fauna pueden sufrir en caso de que sea necesario realizar desbroces en la zona, y por los ruidos generados, aunque serán de escasa importancia debido a que el terreno se encuentra ya predestinado y adaptado a usos industriales.

Desde un punto de vista socioeconómico estas actividades atraerán al personal necesario para realizar estas actividades, aunque no de forma permanente generando impactos positivos.

5.3.2. Cimentación y estructuras

En la construcción de la cimentación y las estructuras se ha de tener en cuenta que de nuevo será necesario el tránsito de maquinaria generando de igual manera que en el caso anterior ligeros impactos al suelo, a la calidad del aire y generando ruido, lo cual también puede afectar a la fauna local de igual forma que antes. En este caso se genera un impacto positivo debido a la generación de estructuras, lo cual es positivo tanto para el propio suelo como para el uso del mismo.

En el ámbito socioeconómico de nuevo los empleos generados no serán de carácter permanente, aunque sí serán más relevantes que en el caso anterior.

5.3.3. Instalaciones de obra

Las instalaciones de obra necesarias durante la realización de la fase de construcción se tratarán como estructuras no permanentes, de modo que serán negativas para las estructuras en el suelo y no serán igual de compatibles con el paisaje industrial. De nuevo el empleo generado será temporal.

5.3.4. Tránsito de Vehículos Pesados

Por último, el tránsito de vehículos pesados necesarios para la realización de las obras y el transporte de los materiales y maquinarias de construcción crearán erosión en el suelo, lo cual empeorará la calidad del suelo, debido también a las emisiones de estos vehículos. También implicarán una generación de ruido lo cual podría generar molestias a la fauna local y debido a la cercanía del río podrían generar turbidez en el agua, aunque a muy pequeña escala.

Desde el punto de vista socioeconómico, de forma similar a toda la fase de construcción, el empleo generado será esporádico, solo durante la realización de las obras.

5.4. Fase de explotación

De nuevo, para la fase de explotación y en base a los impactos detallados en la Tabla 1 respecto de los factores ambientales de la Tabla 3 se realizará la Matriz de Leopold. Esta fase será la más relevante, pues su duración se espera que sea la mayor respecto a las otras dos en un funcionamiento normal de la planta. La Matriz de Leopold se recoge en la Tabla 5 en base a lo descrito a continuación.

Tabla 5. Matriz de Leopold sobre la fase de explotación

ACCIONES DEL PROYECTO FACTORES AMBIENTALES			FASE DE EXPLOTACIÓN									
			Ocupación del terreno		Operación normal de la planta		Operación anormal de la planta		Tránsito de vehículos		Mantenimiento	
Criterios de Valoración			M	I	M	I	M	I	M	I	M	I
FÍSICO	SUELO	Tasa de erosión										
		Estructuras	3	2								
	ATMOSFERA	Calidad del aire			-1	1	-2	1	-1	1		
		Ruido			-2	1						
	AGUA	Turbidez					-1	1				
		Toxicidad					-1	1				
	PAISAJE	Calidad	1	1			-1	1				
BIOLÓGICO	FLORA	Estructura y composición										
		Hábitat	-1	1			-1	1				
	FAUNA	Hábitat	-1	1	-1	2	-1	1				
SOCIO ECONÓMICO	POBLACIÓN	Migración			3	2	3	2			2	1
	TERRITORIO	Uso de la tierra	3	2								
	ECONOMÍA	Generación de Empleo			4	3	3	3	3	2	2	2
	CULTURA	Sitio Arqueológico										
INDICADORES con MAGNITUD POSITIVA			3		2		2		1		2	
INDICADORES con MAGNITUD NEGATIVA			2		3		6		1		0	
SUMA DE PRODUCTOS (M x I)			11		13		8		5		6	

5.4.1. Ocupación del terreno

La ocupación del terreno por parte de la planta de producción de amoníaco verde supondrá permanencia de estructuras sobre el suelo, las cuales, al encontrarse en un polígono industrial destinado al uso por parte de empresas fomentará la creación de un paisaje industrial. Pese a estos impactos negativos, se tendrá en cuenta que la flora y la fauna de la zona no podrán ocupar este espacio de terreno.

Desde el punto de vista socioeconómico, el uso del suelo será un impacto positivo importante.

5.4.2. Operación normal de la planta

Durante la operación normal de la planta, no se generará ningún daño al suelo ni al agua, pero sí que se producirán ruidos, y debido a la purga emisiones que podrían reducir la calidad del aire, aunque estas serían mínimas. El ruido podría afectar a los animales, aunque en este punto, ya no se espera que sea muy relevante puesto que el lugar se encuentra en la zona interna del polígono.

Desde el punto de vista socioeconómico se generarán empleos, los cuales sí serán permanentes, por lo que se producirá migración positiva hacia el territorio.

5.4.3. Operación anormal de la planta

En este punto se englobarán tanto posibles fallos de la planta, como la necesidad de prepararse ante ellos. Un posible accidente, podría generar emisiones a la atmósfera, en su mayoría inofensivas, puesto que muchas de las especies empleadas son inofensivas para el medio ambiente. Otros accidentes, como incendios o explosiones podrían afectar a la flora y la fauna de la contorna, aunque son poco probables debido a las medidas de seguridad que se implementarán.

Desde un punto de vista socioeconómico se ha de tener en cuenta que para prevenir estos problemas ha de existir personal cualificado para el control del proceso y garantizar su seguridad.

5.4.4. Tránsito de vehículos

El tránsito de vehículos se corresponderá al transporte de los productos y al movimiento de los empleados. Este tránsito ya que se emplearán vías destinadas a la circulación de vehículos, no generará erosión del suelo en medidas apreciables, y además, las emisiones producidas debido a esto serán mínimas, solo debidas a los gases emitidos por dichos vehículos.

El empleo generado será también relevante, aunque no necesariamente generará migración.

5.4.5. Mantenimiento

Para el mantenimiento de la planta en condiciones normales de operación serán necesarios un cierto número de empleados que podrían llegar a desplazarse a municipios próximos a la instalación. Los demás efectos causados por esto están recogidos en otras acciones.

5.5. Fase de Desmantelamiento

La fase final de la empresa, la cual podría tardar mucho en darse puesto que podrían hacerse ampliaciones y reposiciones de equipos cuando fuera necesario, se ha de tener en cuenta. Los posibles impactos se recogen en la Tabla 1y los factores ambientales y socioeconómicos igual que en los casos anteriores se recogen en la Tabla 3. Finalmente, se obtiene la Matriz de Leopold para esta fase que se recoge en la Tabla 6.

Tabla 6. Matriz de Leopold sobre la fase de desmantelamiento

ACCIONES DEL PROYECTO FACTORES AMBIENTALES			FASE DE DESMANTELAMIENTO					
			Trabajos de demolición		Generación y desecho de residuos de obra		Recuperación del terreno	
Criterios de Valoración			M	I	M	I	M	I
FÍSICO	SUELO	Tasa de erosión			-2	1	2	1
		Estructuras						
	ATMOSFERA	Calidad del aire	-2	2				
		Ruido	-2	2				
	AGUA	Turbidez	-1	1				
		Toxicidad			-1	1		
	PAISAJE	Calidad					2	2
BIOLÓGICO	FLORA	Estructura y composición						
		Hábitat					1	1
	FAUNA	Hábitat	-1	1			1	1
SOCIO ECONÓMICO	POBLACIÓN	Migración						
	TERRITORIO	Uso de la tierra						
	ECONOMÍA	Generación de Empleo	3	2	2	2	2	2
	CULTURA	Sitio Arqueológico						
INDICADORES con MAGNITUD POSITIVA			1		1		5	
INDICADORES con MAGNITUD NEGATIVA			4		2		0	
SUMA DE PRODUCTOS (M x I)			-4		1		12	

5.5.1. Trabajos de Demolición

Los trabajos de demolición de la planta, podrían generar polvos que empeoren la calidad del aire, junto con ruidos. Estos dos factores podrían afectar a la fauna e incluso el agua aunque no serán muy importantes.

Desde un punto de vista socioeconómico, generará empleo no permanente.

5.5.2. Generación y desecho de los residuos de la obra

Teniendo en cuenta que los residuos sean tratados como corresponde generarán, esto podría dañar el terreno, las emisiones de polvo se tuvieron en cuenta en la acción anterior, pero si se filtrasen aguas a través de los desechos también podría generar toxicidad en el agua.

Desde el punto de vista socioeconómico será necesario emplear personal cualificado para correcto tratamiento de estos residuos.

5.5.3. Recuperación del terreno

Por último, será necesario recuperar el terreno a el estado anterior a la construcción de la empresa, para su posible uso por otra empresa o para la recuperación natural del entorno, según se viese necesario en ese momento. Esto mejoraría el suelo, y la calidad del paisaje, junto con los hábitats de flora y fauna, si no se crease otra empresa en su lugar.

Para llevar esto a cabo sería necesaria la contratación de personal, lo cual, desde un punto de vista socioeconómico sería favorable.

5.6. Resumen del Impacto Ambiental

Finalmente, en la Tabla 7 se recogen los resultados de la Matriz de Leopold subdividiendo los efectos de los impactos en sus respectivas fases y sumando los valores que resultan, para obtener finalmente sumando todas las acciones el valor final del impacto ambiental del proyecto. Se puede observar que el impacto resultante es positivo, sobre todo por los impactos socioeconómicos, mientras que los impactos sobre el medio físico y biológico resultantes son negativos, lo cual es de esperar en este tipo de proyectos. Como se había comentado anteriormente, la fase más relevante es la fase de explotación y en ella el impacto es ampliamente positivo. En la fase de desmantelamiento, el impacto resultante es positivo, en parte ayudado por la recuperación que se planifica del entorno. Los mayores impactos negativos se encuentran en la fase de construcción, por lo que las medidas correctoras han de centrarse en esta fase.

Tabla 7. Resultados de la Matriz de Leopold

FASES DEL PROYECTO FACTORES AMBIENTALES			FASE DE CONSTRUCCIÓN	FASE DE EXPLOTACIÓN	FASE DE DESMANTELAMIENTO	IMPACTO POR SUBCOMPONENTE	IMPACTO POR COMPONENTES	IMPACTO TOTAL DEL PROYECTO
FÍSICO	SUELO	Tasa de erosión	-7	0	0	-7	-40	31
		Estructuras	5	6	0	11		
	ATMOSFERA	Calidad del aire	-10	-4	-4	-18		
		Ruido	-18	-2	-4	-24		
	AGUA	Turbidez	-1	-1	-1	-3		
		Toxicidad	0	-1	-1	-2		
	PAISAJE	Calidad	-1	0	4	3		
BIOLÓGICO	FLORA	Estructura y composición	-1	0	0	-1	-13	
		Hábitat	0	-2	1	-1		
	FAUNA	Hábitat	-7	-4	0	-11		
	POBLACIÓN	Migración	0	14	0	14	84	

Documento III. Estudios con entidad propia
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

SOCIO ECONÓMICO	TERRITORIO	Uso de la tierra	4	6	0	10		
	ECONOMÍA	Generación de Empleo	15	31	14	60		
	CULTURA	Sitio Arqueológico	0	0	0	0		
SUMA DE PRODUCTOS (M x I)			-21	43	9	31		

Pese a la necesidad de medias correctoras, se puede observar que el resultado de la Matriz de Leopold es positivo, por lo que ambientalmente la creación de la empresa es beneficiosa.

También cabe destacar, que los efectos sobre los sitios arqueológicos, como se comentó anteriormente, no tiene importancia debido a la distancia a la que se encuentran.

6. MEDIDAS PARA LA PREVENCIÓN, CORRECCIÓN O COMPENSACIÓN DE LOS IMPACTOS AMBIENTALES

En base a los impactos ambientales anteriormente descritos y cuantificados se decidirá tomar en consecuencia distintas acciones que mitiguen los daños causados por ellos. El objetivo de estas medidas será que el daño ambiental que se produzca sea el menor posible.

6.1. Medidas para la fase de construcción

Durante la fase de construcción se prevén los mayores impactos ambientales, por lo que se ha de prestar especial atención a estas medidas.

La erosión del suelo causada por las tareas de limpieza y acondicionamiento del terreno y por el movimiento de maquinaria y vehículos pesados ha de controlarse. Se han de señalar y vallar correctamente las vías de circulación de los vehículos para evitar que se genere polvo de forma innecesaria al reducir la superficie de terreno alterada, asegurándose de que los vehículos circulan exclusivamente por los viales destinados a tal labor.

Los vehículos empleados ha de cumplir con las normativas vigentes en materia de emisiones, acreditando haber superados las revisiones técnicas necesarias. También se ha de adaptar el horario para no llevar a cabo operaciones que generen ruido en horario que no esté permitido lo cual generaría molestias a las poblaciones cercanas. Además, se deberían emplear equipos que minimicen el ruido generado y las vibraciones propagadas.

Se ha de llevar a cabo la construcción de las estructuras de forma que sean lo más respetuosas posible con las ya construidas anteriormente, de forma que no se altere en gran medida el paisaje, aunque este se trate de un polígono industrial, y además ha de seguir la normativa vigente en lo que se refiere a utilización de materiales que desprendan la menor cantidad de partículas al ambiente y que no sean contaminantes. Los residuos que se puedan generar durante la construcción han de ser tratados por un gestor especializado previa clasificación por parte de los que desarrollen el proceso de construcción.

6.2. Medidas para la fase de explotación

Puesto que la fase más relevante es la de explotación, y aunque no se concentran un gran número de efectos adversos sobre el medio ambiente en esta fase, será de especial importancia tener en cuenta varias medidas para la disminución del impacto ambiental desarrollado por la operación de la planta.

Documento III. Estudios con entidad propia
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Teniendo en cuenta que uno de los principales problemas durante la operación de la planta será la generación de polvo por parte del transporte de personas o de mercancías será importante señalar adecuadamente las vías para la circulación de vehículos, a la vez que se mantiene una pavimentación correcta para minimizar la generación de polvos. De ser posible se ha de tratar de optimizar el número de transportes y de vehículos pesados requeridos para el transporte de mercancía a través de un correcto almacenamiento de los productos, puesto que las materias primas no necesitan ser almacenadas. Se ha de asegurar que los vehículos encargados de estos transportes sigan las recomendaciones de emisión de gases necesarias según la normativa vigente, de forma que se reduzcan lo máximo posible la emisión de gases contaminantes y de efecto invernadero.

Otro impacto a tener en cuenta será la generación de ruido, lo cual se puede deber tanto a movimientos de vehículos como a los propios equipos de la planta. En lo que respecta a los vehículos, como se ha mencionado anteriormente, estos han de cumplir las normativas vigentes asegurando la menor generación de contaminación de la atmósfera, tanto de la emisión de gases como de generación de ruidos. Respecto a los equipos de la planta es necesario tener en cuenta que los equipos de impulsión como bombas y compresores son importantes generadores de ruido, por lo que se ha de crear un edificio en el cual estén estos equipos y que se encuentre aislado del exterior para minimizar el ruido que se pueda generar hacia el exterior, tanto para mejorar las condiciones de trabajo de los operarios de la planta como para generar las menores molestias a las instalaciones y poblaciones cercanas.

Esta reducción del ruido generado será importante para reducir los efectos sobre la fauna de los alrededores, por lo que, controlando la generación de ruido, también se estará contrarrestando el efecto negativo sobre la fauna de la zona. Los efectos sobre la flora son inevitables debido a la ocupación del terreno, por lo que sería interesante la creación de espacios verdes en las áreas libres de la planta, para compensar el efecto negativo sobre la vegetación.

Finalmente, para evitar los efectos causados por un posible mal funcionamiento de la planta debido a accidentes como fugas, incendios y etc. se ha de desarrollar un correcto sistema de control el cual sea funcional y permita que los trabajadores puedan conocer el estado de la planta en todo momento y mantenerlo en el estado normal de funcionamiento. Además, se ha de tener en cuenta que todas las operaciones de mantenimiento sean correctamente comunicadas y realizadas por el personal destinado a ese fin y con el equipo correcto para realizar dicha operación. Se han de establecer las correctas medidas de seguridad que permitan actuar de forma rápida ante cualquier accidente y que impidan que un accidente se convierta en un fallo total de la planta con resultados catastróficos.

Además, puesto que la planta tendrá un importante consumo energético, será importante seleccionar equipos cuyo rendimiento sea el mejor posible para tratar de reducir el consumo. También se ha de tratar de emplear lo máximo posible energías renovables, como es la intención en este proyecto, para que las emisiones generadas indirectamente por la obtención de la energía empleada sean nulas o casi nulas.

En cuanto a medidas socioeconómicas, se tratará de fomentar el empleo local y mantener un canal informativo con la población y las instituciones cercanas, dando lugar a una gran transparencia con la comunidad. Mediante estas medidas se tratará de mejorar la visión de la industria en la sociedad, promoviendo además proyectos colaborativos por ejemplo con universidades, como son la prácticas en empresa para estudiantes del sector y el desarrollo de tecnologías más eficientes y sostenibles.

6.3. Medidas durante la fase de desmantelamiento

De forma similar a los casos anteriores, se tratará de minimizar la generación de polvos generados por el tránsito de vehículos mediante una correcta señalización y vallado de las vías. El otro principal problema en esta fase será la alta generación de residuos sólidos, los cuales se han de clasificar y tratar mediante la contratación de una empresa especializada en desechos similares. Aquellos residuos que puedan ser reutilizados o recuperados han de reciclarse en la medida de lo posible para promover la economía circular en los tramos finales del ciclo de vida del proyecto.

También se ha de tener en cuenta de nuevo la generación de ruidos, por lo que se ha de adaptar de nuevo el horario según la normativa vigente.

Finalmente, si se puede se ha de recuperar el terreno empleado mediante la plantación de árboles autóctonos y la creación de un paisaje adecuado y similar al de la contorna.

7. PROGRAMA DE VIGILANCIA AMBIENTAL

El Programa de Vigilancia Ambiental o PVA consiste en establecer un procedimiento que garantice la correcta ejecución y cumplimiento de las medidas preventivas anteriormente descritas. Además, permite la detección y evaluación de impactos difícilmente cuantificables durante la etapa preoperacional, incluso localizando algunos no previstos durante esa etapa. Gracias a esto se comprueban si las medidas correctoras son suficientes o si es necesario elaborar unas nuevas si no son suficientes. (11)

El PVA consiste en la obtención de valores de un conjunto determinado de parámetros fácilmente cuantificables, representativos del sistema, a lo largo de las distintas fases del proyecto. Se recomienda que sea llevado a cabo por una entidad independiente, con el fin de asegurar la veracidad de los datos recabados. (11)

Además, el PVA será una gran fuente de datos, ya que permitirá modificarlas distintas actuaciones en caso de ser necesario, mediante el empleo de nuevas medidas correctoras. Esto ayudará a preservar los medios naturales frente a posibles peligros imprevistos durante las etapas de planificación.

La ejecución del PVA se desarrolla de forma secuencial como se explica en los siguientes puntos:

- Puesta a punto de los medios de vigilancia y preparación del material necesario para su realización.
- Recogida, almacenamiento y clasificación de los datos obtenidos
- Interpretación de los datos obtenidos, evaluando las medidas de corrección e identificando posibles problemas en ellas o en variables a mayores.
- Mejora, de ser necesario, de las medidas correctoras y de identificación de impactos.
- Elaboración de informes.

Los puntos anteriores culminan con la elaboración de informes, estos informes que deben ser elaborados durante la ejecución del Programa de Vigilancia Ambiental son el archivo de medios materiales, el diario de seguimiento ambiental, informes-resumen periódicos y un informe anual de medidas correctoras. (11)

Documento III. Estudios con entidad propia
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

El archivo de medios materiales recoge la información referida a los medios materiales empleados en la realización del Programa de Vigilancia Ambiental, y se incluirán hojas de especificaciones, información técnica, etc.

El diario de seguimiento ambiental recopila la información observada, las posibles acciones correctoras que podrían generar impactos positivos, los impactos negativos e incidencias ocurridas, el nivel de cumplimiento de las medidas correctoras y las medidas de seguridad tenidas en cuenta. Se ha de mantener a disposición de las Autoridades Ambientales para su inspección en todo momento.

Los informes-resumen periódicos se tratan de resúmenes de las observaciones tenidas en cuenta en el diario de seguimiento ambiental, de los resultados obtenidos y de las conclusiones y recomendaciones en base a esos datos.

Por último, el informe anual de medidas correctoras reflejará el desempeño, eficiencia y rendimiento de las medidas correctoras junto con el grado de cumplimiento de las mismas.

Para cada uno de los elementos objetivo del seguimiento, se han de aclarar los aspectos a controlar, la periodicidad, los medios materiales, los objetivos y los medios de control y límites que no se han de superar.

7.1. Calidad del aire

La calidad del aire se ha de controlar tanto en las etapas de construcción de la obra, como a lo largo de la operación de la planta, destacando en la fase de construcción las partículas, mientras que en la fase de explotación es más importante vigilar los distintos contaminantes atmosféricos. Puesto que las etapas de construcción y desmantelamiento son similares, también se podrían aplicar en la fase de desmantelamiento.

Para el control de las emisiones atmosféricas y la calidad del aire:

- Objetivo: Conocer la concentración de partículas en suspensión y gases contaminantes en la atmósfera, controlar las emisiones atmosféricas por parte de la planta y que la calidad del aire de la zona se encuentre dentro de los límites establecidos.
- Parámetros de control: Concentración de partículas en suspensión (PM10, PM2,5, ...) y de gases contaminantes como NO_x, CO o SO₂.
- Medio de control: Equipos para la medida de concentración de contaminantes atmosféricos
- Ubicación de control: En la zona de obra, movimiento de maquinaria y las proximidades de la obra. Durante la fase de operación la obra hará referencia a la planta.
- Duración y periodicidad: Deberá realizarse de forma diaria durante la fase de construcción (y desmantelamiento) y con la periodicidad seleccionada por el agente ambiental durante la explotación.

7.2. Calidad del agua

En principio las masas de agua cercana como el río Miño no se deberían ver afectadas debido a su distancia, pero debido a la utilidad del PVA se llevará a cabo para comprobar que las suposiciones de esta etapa preliminar sean correctas.

Para el control de los vertidos de contaminantes a las aguas:

- Objetivo: control de vertidos y residuos generados y asegurar la calidad de las aguas del entorno durante el ciclo de vida de la planta.
- Parámetros de control: Turbidez, pH, conductividad, temperatura, caudal, DQO, DBO, metales pesados, sólidos de suspensión, aniones, cationes y demás que se consideren relevantes.
- Medio de control: Inspección visual y toma de muestras para análisis en laboratorio acreditado.
- Ubicación de control: Zona de la obra, instalaciones y río Miño.
- Duración y periodicidad: Durante la fase de obra control visual diario y mediciones mensuales, durante la fase de explotación a designar por el agente ambiental.

7.3. Control de la contaminación acústica

Siendo el ruido uno de los problemas ambientales principales de la planta, este control será de suma importancia durante la realización de la obras y durante el funcionamiento de la planta, para asegurar una buenas condiciones de para el personal de la instalación y para las zonas colindantes. En caso de superarse los umbrales marcados por la Ley dentro del recinto será necesario aplicar medidas correctoras, intentando suprimir primero el problema de raíz y en caso contrario aportando EPIs adecuados a los trabajadores.

Para el control de la contaminación acústica:

- Objetivo: Comprobar el nivel de ruido y asegurar que no se superan los valores establecidos por la norma para mantener un confort sonoro durante las distintas fases del proyecto.
- Parámetros de control: Nivel de ruido.
- Medio de control: Equipo para la medición de sonido (sonómetros).
- Ubicación de control: En la zona de la obra (o planta) y las zonas colindantes.
- Duración y periodicidad: Han de realizarse de forma periódica tanto en horario diurno como nocturno.

8. RESUMEN Y CONCLUSIONES

A lo largo de este documento se han desarrollado los distintos factores más relevantes a nivel medioambiental relacionados con la creación de la planta de amoníaco verde en la región sur de la comunidad de Galicia, concretamente en Salvaterra de Miño, en el polígono PLISAN; teniendo en cuenta todo su ciclo de vida (construcción, explotación y desmantelamiento) además de justificar la selección del método de producción en términos ambientales.

Se han recogido las características más importantes partes del ecosistema de la zona, atendiendo a los factores físicos, biológicos y socioeconómicos, incluyendo específicamente las interacciones con la Red Natura 2000. Tras analizar los diversos impactos ambientales se ha encontrado que los principales efectos adversos se provocarán sobre la atmósfera, en forma de partículas y ruido. Para evitar estos efectos y los demás tenidos en cuenta se han propuesto distintas medidas protectoras, las cuales permitirán que los efectos sean menores y se conserve mejor el medio natural.

Documento III. Estudios con entidad propia
Planta de producción de amoníaco verde a microescala

Mediante la Matriz de Leopold se ha llegado a la conclusión que el proyecto es ambientalmente viable y favorable, teniendo en cuenta que la construcción y desmantelamiento podrían provocar impacto negativo sobre el ambiente de forma más significativa, por eso destaca la importancia de aplicar las medidas correctoras en estas fases. De forma positiva, estas fases serían solo temporales, y aquella que se mantiene en el tiempo, la fase de explotación, es ambientalmente positiva.

Aunque se ha obtenido que la planta es favorable ambientalmente será adecuado y necesaria desarrollar un Programa de Vigilancia Ambiental (PVA) gracias al cual se podrán reducir aún mas los impactos negativos y en el mejor de los casos eliminándolos.

9. BIBLIOGRAFÍA

1. *Ley 21/2013 de Evaluación Ambiental*. s.l. : Jefatura del Estado, 9 de Diciembre. BOE-A-2013-12913.

2. Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. Fabricación de amoníaco (Emisiones de proceso). [En línea] 2019. [Citado el: 2 de marzo de 2022.] https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/sistema-espanol-de-inventario-sei/040403-fabricac-nh3_tcm30-502315.pdf.

3. GIL CALVO, Myryam. Producción de hidrógeno por oxidación parcial de metano sobre catalizadores derivados de aluminato de níquel. [En línea] Departamento de Ingeniería Química. Universidad del País Vasco, Octubre de 2018. [Citado el: 6 de marzo de 2022.] <https://addi.ehu.es/handle/10810/31648>.

4. PATTABATHULA, Venkkat; RICHARDSON, Jim. Introduction to Ammonia Production. [En línea] AIChE. The global Home of Chemical Engineers, Septiembre de 2016. [Citado el: 4 de marzo de 2022.] <https://www.aiche.org/sites/default/files/cep/20160969.pdf>.

5. MORANTE, Juan, ANDREU, Teresa, GARCÍA, Gozton, GUILERA, Jordi, TARANCÓN, Albert, TORELL, Marc. Hidrógeno. Vector energético de una economía descarbonizada. [En línea] Fundación Naturgy, 2020. [Citado el: 10 de marzo de 2022.] <https://www.fundacionnaturgy.org/publicacion/hidrogeno-vector-energetico-de-una-economia-descarbonizada/>. 978-84-09-22546-0.

6. RASHID, M., MESFER, M., NASEEM, H., DANISH, M. Hydrogen Production by Water Electrolysis: A Review of Alkaline Water Electrolysis, PEM Water Electrolysis and High Temperature Water Electrolysis. [En línea] International Journal of Engineering and Advanced Technology (IJEAT), 7 de Febrero de 2015. [Citado el: 11 de marzo de 2022.] https://www.researchgate.net/publication/273125977_Hydrogen_Production_by_Water_Electrolysis_A_Review_of_Alkaline_Water_Electrolysis_PEM_Water_Electrolysis_and_High_Temperature_Water_Electrolysis/citations.

7. ARENHA. Advanced materials and Reactors for ENergy storage tHrough Ammonia. [En línea] 1 de abril de 2020. [Citado el: 4 de marzo de 2022.] [https://arenha.eu/sites/arenha.drupal.pulsartecnalia.com/files/documents/ARENH A%20Newsletter%20Issue%202%20-%20June%202021.pdf](https://arenha.eu/sites/arenha.drupal.pulsartecnalia.com/files/documents/ARENH_A%20Newsletter%20Issue%202%20-%20June%202021.pdf).

8. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Nitrogen. [En línea] 15 de octubre de 2013. [Citado el: 13 de marzo de 2022.] https://doi-org.ezbusc.usc.gal/10.1002/14356007.a17_457.pub2.

9. Atlas Copco. Tecnología de generación de nitrógeno con adsorción de nitrógeno por cambio de presión (PSA). [En línea] [Citado el: 14 de marzo de 2022.] [https://www.atlascopco.com/es-es/compressors/wiki/compressed-air-articles/what-is-nitrogen#:~:text=La%20adsorci%C3%B3n%20por%20cambio%20de%20presi%C3%B3n%20atrapa%20el%20ox%C3%ADgeno%20de,molecular%20de%20carbone%20\(CMS\)..](https://www.atlascopco.com/es-es/compressors/wiki/compressed-air-articles/what-is-nitrogen#:~:text=La%20adsorci%C3%B3n%20por%20cambio%20de%20presi%C3%B3n%20atrapa%20el%20ox%C3%ADgeno%20de,molecular%20de%20carbone%20(CMS)..)

10. Ministerio de Medio Ambiente y Medio Rural y Marino. *Mejores Técnicas Disponibles de referencia europea: Industria Química inorgánica de gran volumen de*

producción (Amoníaco, ácidos y fertilizantes). Madrid : Ministerio de Medio Ambiente y Medio Rural y Marino, 2009. 978-84-491-0975-8.

11. RED ELÉCTRICA DE ESPAÑA. *Estudio de Impacto Ambiental. Fontefrái a Frontera Portuguesa*. s.l. : RED ELÉCTRICA DE ESPAÑA, 2013. <https://www.eib.org/attachments/register/53220133.pdf>.

12. MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO. AEMET. *Agencia Estatal de Meteorología*. [En línea] Gobierno de España. [Citado el: 5 de Junio de 2022.] <http://www.aemet.es/es/portada>.

13. —. *Evaluación de la calidad del aire en España*. Madrid : GOBIERNO DE ESPAÑA, 2020.

14. Confederación Hidrográfica Miño-Sil. Plan Hidrológico de la parte española de la Demarcación Hidrográfica del Miño-Sil ciclo 2021-2027. [En línea] [Citado el: 24 de marzo de 2022.] https://www.chminosil.es/images/planificacion/documentos-iniciales-2021-2027_vdc/01.MEMORIA.pdf.

15. MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO. Red Natura 2000. [En línea] Gobierno de España. [Citado el: 5 de Junio de 2022.] <https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000/>.

16. INSTITUTO NACIONAL DE ESTADÍSTICA. Cifras oficiales de población de los municipios españoles: Revisión del Padrón Municipal. [En línea] Gobierno de España, 2021. [Citado el: 5 de Junio de 2022.] https://www.ine.es/dyngs/INEbase/es/operacion.htm?c=Estadistica_C&cid=1254736177011&menu=resultados&idp=1254734710990.

17. *The Use of the Leopold Matrix in Carrying Out the EIA for Wind*. Josimovic, Bosko, Petric, Jasna y Milijic, Sasa. 1, Belgrado : Energy and Environment Research, 2014, Vol. 4. 1927-0569.

DOCUMENTO IV: PRESUPUESTO

ÍNDICE

1.	Introducción	3
2.	Estimación del coste de los equipos.....	3
2.1.	Método factorial para el coste de los equipos.....	3
2.2.	Obtención de costes por catálogo	4
2.3.	Corrección de coste debidos a las condiciones particulares	5
2.3.1.	Condiciones de operación	5
2.3.2.	Corrección por material.....	5
2.4.	Actualización de costes.....	6
2.5.	Coste de los equipos calculados por factores.....	6
3.	Coste total de capital	8
4.	Desglose de partidas.....	9
5.	PRESUPUESTO TOTAL	12
6.	Bibliografía.....	13

1. INTRODUCCIÓN

A continuación, se detallará el presupuesto para la construcción y funcionamiento de la planta de producción de amoníaco verde, objeto de este proyecto. Se llevará a cabo una estimación de clase 4 puesto que se empleará para obtener el valor de muchos de los equipos estimaciones de costes sobre diseños limitados, por lo tanto, la precisión del presupuesto será de $\pm 30\%$ según fuentes bibliográficas. (1)

Por lo tanto, se realizarán métodos aproximados para la estimación de costes, tanto de los equipos y de su colocación en planta como para la inversión de capital fijo, circulante y los costes variables. Se detallará a continuación como estimar los valores monetarios de los equipos partiendo de un dimensionado básico de los mismos la cual se puede ver en el *Anexo I. Dimensionado básico de equipos*.

2. ESTIMACIÓN DEL COSTE DE LOS EQUIPOS

Para realizar las estimaciones a partir de ciertos parámetros característicos e los equipos de la planta la bibliografía (1) ofrece una metodología basada en correlaciones la cual es adecuada para una estimación de clase 4 como la que se va a utilizar. Puesto que para algunos equipos esta metodología no está disponible se tomarán los datos a partir de catálogos de fabricantes.

Además de los métodos descritos existen otros métodos igualmente válidos que no se explicarán ni se emplearán, puesto que mezclar estos métodos puede generar peores estimaciones.

2.1. Método factorial para el coste de los equipos

El método factorial se basa en el empleo de la correlación descrita en la Ecuación 1, en la cual a , b y n son factores dependientes del tipo de equipo a emplear que se pueden obtener de la misma fuente bibliográfica. (1)

$$C_E = a + b \cdot S^n$$

Ecuación 1

S sería el valor de un parámetro característico del equipo el cual es indicado en la bibliografía junto con las unidades a emplear y que se obtendrá como se mencionó anteriormente en el *Anexo I. Dimensionada Básico de Equipos*. Se recogen en la Tabla 1 los valores de los parámetros a , b y n además de los valores máximos para los equipos que se van a diseñar. Se ha de tener en cuenta que estos factores normalmente solo se ofrecen para un material concreto y condiciones de temperatura y presión normales, por lo que se han modificar a partir de otros factores, que serán comentados en APART.

Tabla 1. Factores de coste para equipos. Fuente: (1)

Equipo	S	S_{Low}	S_{Up}	a	b	n
Compresores reciprocantes	Potencia (kW)	100	16.000	240.000	1,33	1,5
Compresores centrífugos	Potencia (kW)	132	29.000	8.400	3.100	0,6
Tanques a presión verticales, acero inoxidable 304	Masa (kg)	90	124.200	-10.000	600	0,6
Intercambiadores de calor doble tubo	Área (m ²)	1	80	500	1100	1
Intercambiadores de calor de carcasa y tubos cabezal flotante	Área (m ²)	10	1.000	11.000	115	1
Bomba centrífuga	Caudal (l/s)	0,2	500	3.300	48	1,2
Plato perforado	Diámetro (m)	0,5	5	100	120	2

Se ha de tener en cuenta que valor de coste obtenido por este método será en dólar (\$) y se ha de realizar el cambio de unidades monetarias empleando el valor de cambio de divisas, para este proyecto se tendrá en cuenta 0,96 €/€ tomado a día 15 de Junio de 2022. (2)

2.2. Obtención de costes por catálogo

Puesto que el cálculo de coste por factores requiere del conocimiento de ciertos parámetros característicos y en algunos casos estos no se conocen o en las distintas metodologías consultadas no se han encontrado valores para ciertos equipo de los parámetros para la estimación del coste, se ha decidido obtener el valor de ciertos equipos a partir de valores comerciales como estimación.

Los equipos que se obtendrán de esta manera serán las zeolitas para T-101 A/B, T-201 A/B y T-202 A/B, el electrolizador ELE-201 y el desmineralizador DES-201.

Equipo	Coste	Fuente
Desmineralizador DES-201	14.400 €	FIRESA (3)
Filtro de aire FT-101	3.200 €	DELSAN Ingenieros S.L. (4)
Zeolitas para torres de secado	1.540 €/ton	JALON Zeolite (5)
Electrolizador	750 €/kW	(6)

2.3. Corrección de coste debidos a las condiciones particulares

Estos factores se aplicarán para las diversas particularidades de cada proceso y equipo seleccionado, aplicándose los factores según la Ecuación 2.

$$C_{EF} = C_E \cdot f_T \cdot f_P \cdot f_M$$

Ecuación 2

2.3.1. Condiciones de operación

Puesto que las condiciones de operación son importantes parámetros a la hora del diseño de un equipo, es lógico corregir el coste de los equipos en base al uso de temperaturas y presiones de trabajo muy altas o bajas. Para ello existen los factores de corrección en base a la temperatura f_T recogidos en la Tabla 2y los referidos a la presión de operación f_P recogidos en la Tabla 3.

Tabla 2. Factores de corrección según la temperatura de diseño. Fuente: (1)

Temperatura de diseño (bar)	Factor de corrección (f_T)
0-100	1
300	1,6
500	2,1

Tabla 3. Factores de corrección según la presión de diseño. Fuente: (1)

Presión de diseño (bar)	Factor de corrección (f_P)
0,01	2
0,1	1,3
0,5 a 7	1
50	1,5
100	1,9

2.3.2. Corrección por material

También es muy relevante el material empleado en el coste de los equipos, puesto que de partida la mayoría de los costes se calculan para acero al carbono, pero en esta planta la mayoría de los equipos serán construidos de acero inoxidable 304. Para algunos equipos ya está especificado su material a la hora de seleccionar los factores, para los demás el factor de material (f_M) de 2,4.

2.4. Actualización de costes

Además de aplicar las correlaciones para estimar los costes y tener en cuenta los distintos factores de corrección para las condiciones especiales de operación, se ha de tener en cuenta que la bibliografía corresponde sus costes con una fecha y por lo tanto con su respectivo índice CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*). Puesto que el valor del dinero aumenta cada año, los costes de los materiales aumentan también a lo largo del tiempo debido a la inflación. Por lo tanto, el cálculo de costes actualizados resulta como se ve en la Ecuación 3.

$$C_{E, \text{Año } A} = C_{E, \text{Año } B} \cdot \frac{\text{Índice de coste}_{\text{Año } A}}{\text{Índice de coste}_{\text{Año } B}} \quad \text{Ecuación 3}$$

El índice CEPCI es publicado mensualmente en la revista *Chemical Engineering*. Puesto que la bibliografía se corresponde con el año 2007 su índice CE será 509,7 (1) mientras que en la actualidad el valor de CE será de 806,9 para marzo de 2022. (7)

2.5. Coste de los equipos calculados por factores

Según lo mencionado anteriormente se procede al cálculo de los costes de los distintos equipos, teniendo en cuenta los rangos de S. En la mayoría de los casos se encuentran dentro de rango o muy próximos, excepto para el compresor C-303. Este tiene un valor muy por debajo del valor mínimo, pero como no se ha conseguido ningún otro valor para aproximarlos y es necesario el tipo de compresor seleccionado se aceptará dentro de la clase de estimación propuesta. Las turbinas se calcularán como si se tratasen de compresores centrífugos por similitud entre los equipos, aunque no sea exacto. En los equipos compuestos por 2 y a se ha multiplicado en la última columna y se presentan los resultados en la Tabla 4 y Tabla 5.

Tabla 4. Estimaciones de costes para los equipos

Nombre Equipo		S	C _E (\$)	f _M	f _T	f _P	C _{EF} (€)	C _{EF} 2022(€)
Bomba	P-201 A/B	0,99	3.347,24	2,4	1	1	7.712,05	24.417,70
	E-101	7,30	8.534,22	2,4	1,6	1	31.460,55	49.804,83
	E-102	2,01	2.708,09	2,4	1,6	1,5	14.974,66	23.706,21
	E-103	45,08	50.085,35	2,4	1,6	1,5	276.951,94	438.439,32
	E-104	89,66	21.310,54	2,4	1	1,5	73.649,22	116.593,20
	E-105	154,97	28.821,61	2,4	1	1,5	99.607,47	157.687,40
	E-106	15,45	17.495,63	2,4	1	1	40.309,94	63.814,18
	E-201	1,23	1.851,74	2,4	1,6	1	6.826,24	10.806,54
	E-202	22,84	25.625,88	2,4	1	1	59.042,03	93.468,74
Intercambiador de calor	E-203	17,51	19.760,00	2,4	1	1	45.527,04	72.073,32

Documento V. Presupuesto
Diseño de una planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 5. Estimaciones de costes para los equipos (continuación)

Intercambiador de calor	E-301	33,25	37.073,12	2,4	2,1	1,9	340.811,69	539.534,93
	E-302	32,39	36.125,27	2,4	1,6	1,9	253.027,20	400.564,35
	E-303	2,47	3.212,76	2,4	1,6	1,9	22.502,71	35.623,77
	E-304	330,08	48.959,58	2,4	1,6	1,9	342.920,73	542.873,72
Compresor	C-101	231,00	243.767,02	2,4	1,6	1	901.949,81	1.427.866,00
	C-102	1104,74	271.719,99	2,4	1,6	1,5	1.597.148,22	2.528.426,33
	C-103	229,63	243.005,92	2,4	1,6	1	901.796,38	1.427.623,10
	C-201	177,92	242.050,14	2,4	1,6	1	896.371,76	1.419.035,46
	C-301	755,57	257.941,36	2,4	1,6	1,9	1.874.471,05	.967.452,80
	C-302	21,33	240.085,13	2,4	1,6	1,9	1.681.916,38	2.662.621,79
Turbina	TUR-101	321,67	107.439,85	2,4	1	1,5	371.312,13	587.819,82
	TUR-301	96,16	56.390,87	2,4	1	1,9	246.856,67	390.795,85
Tanques	V-101	145,87	1.926,95	1	1	1	1.849,87	2.928,51
	T-101 A/B	168,09	2.986,00	1	1	1	2.866,56	9.076,04
	V-102	524,54	15.704,99	1	1	1	15.076,79	23.867,88
	T-201 A/B	291,73	8.077,44	1	1	1	7.754,34	24.551,61
	T-202 A/B	142,34	1.753,10	1	1	1	1.682,97	5.328,59
	V-301	2593,28	57.059,62	1	1	1	54.777,24	86.717,20
Torre de destilación criogénica	Tanque	738,50	21.561,79	1	1	1		
	Platos	0,37	116,60	2,4	1	1		
	T-102	Total	24.476,72	2,4	1	1	56.394,36	89.277,24
Reactor de síntesis	Intercambiador	26,56	14.054,01					
	Carcasa	2465,13	55.051,24					
	R-301		69.105,25	2,4	2,1	1,9	635.281,81	1.005.707,06
Subtotal Equipos Estimados (€)								17.393.250,35

El coste de las Zeolitas de las que se necesita una masa total de 1.716 kg, por lo que se comprarán 2 toneladas, asciende a 3.080,00 €. El coste del electrolizador, con una potencia de 17,5 MW será de 13.125.000,00 €.

3. COSTE TOTAL DE CAPITAL

El coste total de capital hace referencia a la totalidad de la inversión, es decir, la suma del coste de los equipos junto con los costes de diseño, construcción e instalación de la planta en el lugar indicado. Estará formado por las siguientes partidas: (1)

1) Costes Directos

- a) Montaje de equipos, incluidos cimientos y trabajos estructurales menores.
- b) Tuberías, incluidos el aislamiento y la pintura.
- c) Energía eléctrica e iluminación.
- d) Instrumentos y sistemas de control de procesos.
- e) Edificios de proceso.
- f) Edificios auxiliares, oficinas, edificios de laboratorio, talleres, etc.
- g) Almacenamiento de materias primas y producto terminado.
- h) Utilidades (Servicios), provisión de planta para servicios de vapor, agua, aire, extinción de incendios, etc. (si no se cotizan por separado como sitios externos);
- i) Preparación del terreno.

2) Costes Indirectos:

- a) *Offsites*.
- b) Diseño e Ingeniería
- c) Fondos de contingencia.

Ya que se ha decidido emplear una metodología factorial, para el cálculo del coste total de capital también se emplearán factores. Los factores empleados serán los propuestos por la bibliografía (1) para dicho fin seleccionando en este caso los propuestos para plantas que solo emplean fluido que se recogen en la Tabla 6.

Tabla 6. Factores para la estimación de los costes directos. Fuente: (1)

Partida	Factor	Valor
Coste actualizado de equipos	$C_{EF} 2022$	$C_{EF} 2022$
Instalación del equipo	f_{er}	0,3
Tuberías	f_p	0,8
Instrumentación y control	f_i	0,3
Electricidad e iluminación	f_{el}	0,2
Obra civil	f_c	0,3
Estructuras y edificios	f_s	0,2
Revestimientos y pintura	f_l	0,1

El coste de capital directo puede obtenerse a partir de los factores anteriores empleando la Ecuación 4, teniendo en cuenta que f_M sería el valor del factor de material comentado anteriormente con un valor de 2,4.

$$C_D = \sum C_E \cdot [(1 + f_p) \cdot f_M + (f_{er} + f_i + f_{el} + f_c + f_s + f_l)] \quad \text{Ecuación 4}$$

Además, se han de tener en cuenta los costes indirectos, los cuales se pueden obtener empleando los factores de la Tabla 7.

Tabla 7. Factores para la estimación de los costes directos. Fuente: (1)

Partida	Factor	Valor
<i>Offsites</i>	<i>OS</i>	0,3
Diseño e Ingeniería	<i>D&I</i>	0,3
Contingencias	<i>X</i>	0,1

Incorporando estos costes se pueden calcular los costes de inversión del capital fijo (C_{ICF}) empleando la Ecuación 5.

$$C_{ICF} = C_D \cdot (1 + OS)(1 + D\&I + X) + \text{Coste parcela} \quad \text{Ecuación 5}$$

Finalmente, para obtener el coste total de capital debe obtenerse el capital circulante, es decir, el dinero que se empleará para la puesta en marcha de la planta y otros costes hasta que empiece a dar beneficios. Este se obtendrá a partir de recomendaciones de bibliografía (1) como un 15% de la suma $C_D + C_{ICF}$.

4. DESGLOSE DE PARTIDAS

A continuación, se detallarán las distintas partidas anteriormente mencionadas describiendo cada uno de los conceptos indicados en cada una de ellas. En la Tabla 8 se recogen los costes directos. En la Tabla 9 se recogen los costes indirectos. En la Tabla 10 se recogen los costes de adquisición del terreno. Por último, en la Tabla 11 se recoge el capital circulante estimado.

Documento V. Presupuesto
Diseño de una planta de producción de amoníaco verde a microescala

Tabla 8. Costes directos estimados

Partida	Descripción	Medición	Coste (€)
Coste total de Equipos	Adquisición y entrega en planta de los principales equipos del proceso	Partidaalzada	30.538.493,24
Instalación del equipo	Erección, cimentación, pintura y accesorios	Partidaalzada	9.161.547,97
Tuberías	Instalación, aislamiento, pintura y accesorios	Partidaalzada	24.430.794,59
Instrumentación y control	Sensores, transmisores, controladores y actuadores de los sistemas de control	Partidaalzada	9.161.547,97
Electricidad e iluminación	Cableado, iluminación e instalación	Partidaalzada	6.107.698,65
Obra Civil	Carreteras, cimentaciones, muros...	Partidaalzada	9.161.547,97
Estructuras y edificios	Edificios auxiliares, oficinas, talleres, laboratorios...	Partidaalzada	6.107.698,65
Revestimiento y pintura	Compra y colocación de material aislante, pintado de equipos	Partidaalzada	3.053.849,32
Offsites	Costes fuera del límite de la batería (utilidades, subestaciones eléctricas, servicios de emergencia...)	Partidaalzada	29.316.953,51
<i>C_D</i>			127.040.131,87

Tabla 9. Costes indirectos estimados

Partida	Descripción	Medición	Coste (€)
Diseño e Ingeniería	Servicios de ingeniería requeridos para llevar a cabo el proyecto	Partidaalzada	46.907.125,61
Contingencias	Posibles costes no contemplados y variaciones en los presupuestos debidos a imprevistos	Partidaalzada	15.635.708,54
<i>C_I</i>			65.893.975,15

Tabla 10. Costes de adquisición de terreno

Partida	Descripción	Coste (€)
Parcela	Solar ubicado en el área empresarial PLISAN	3.351.141

Tabla 11. Capital Circulante

Partida	Descripción	Medición	Coste (€)
Capital Circulante	Puesta en marcha de la planta y otros costes hasta que empiece a dar beneficios	Partida alzada	28.940.116,05

5. PRESUPUESTO TOTAL

La inversión total de la planta de producción de amoníaco verde estimada como la suma de todas las partidas anteriormente descritas resulta como se ve en la Tabla 12.

Tabla 12. Resumen de costes

Partida	Coste (€)
Coste total de Equipos	30.538.493,24
Instalación del equipo	9.161.547,97
Tuberías	24.430.794,59
Instrumentación y control	9.161.547,97
Electricidad e iluminación	6.107.698,65
Obra Civil	9.161.547,97
Estructuras y edificios	6.107.698,65
Revestimiento y pintura	3.053.849,32
Offsites	29.316.953,51
Diseño e Ingeniería	46.907.125,61
Contingencias	15.635.708,54
Parcela	3.351.141
Capital Circulante	28.940.116,05
Total	221.874.223,08

El presupuesto total para la planta de producción de amoníaco verde a partir de aire y agua es de DOSCIENTOS VEITIUN MILLONES OCHOCIENTOS SETENTA Y CUATRO MIL DOSCIENTOS VEINTITRÉS EUROS Y OCHO CÉNTIMOS (221.874.223,08 €).

En Santiago de Compostela a 16 de Junio de 2022

Los autores del proyecto,

Uxía Mata Rivas

Guillermo Martínez Loureiro

6. BIBLIOGRAFÍA

1. **SINNOT, Ray, TOWLER, Gavin.** *Diseño en ingeniería química*. Barcelona : Reverté, 2012. 978-84-291-7199-0.
2. **ELECONOMISTA.ES.** EUROUSD. [En línea] elEconomista.es, 15 de Junio de 2022. [Citado el: 15 de Junio de 2022.] <https://www.eleconomista.es/cruce/EURUSD>.
3. **FIRESA.** Firesa. Tratamiento de agua. [En línea] FIRESA. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] <https://firessa.com/>.
4. **DELSAN Ingenieros S.L.** Filtros electrostáticos. [En línea] DELSAN Ingenieros S.L. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] <https://delsaningenieros.com/>.
5. **JALON ZEOLITE.** 13X Molecular Sieve. [En línea] JALON ZEOLITE. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] <https://www.jalonzeolite.com/>.
6. **SCHMIDT, O., GAMBHIR, A., STAFFELL, I., HAWKERS, A., NESLSON, J., FEW, S.** Future cost and performace of water electrolysis: An expert elicitation study. [En línea] 2019. [Citado el: 12 de marzo de 2022.] <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.10.045..>
7. **CHEMICAL ENGINEERING.** Chemical Engineering Plant Cost Index. [En línea] CHEMICAL ENGINEERING. ESSENTIALS FOR THE PROFESSIONAL, Marzo de 2022. [Citado el: 10 de Junio de 2022.] <https://www.chemengonline.com/pci>.

ANEXO I:

DIMENSIONAMIENTO BÁSICO DE EQUIPOS

ÍNDICE

1.	INTRODUCCIÓN	3
2.	COMPRESORES Y TURBINAS	3
3.	BOMBA P-201.....	6
4.	INTERCAMBIADORES DE CALOR	6
5.	EQUIPOS DE ADSORCIÓN	7
6.	TANQUES	8
6.1.	Desnebulizador V-101	8
6.2.	Cámara de licuefacción del aire V-102 y flash V-301.....	9
7.	TORRE DE DESTILACIÓN T-102	10
8.	Bibliografía.....	11

1. INTRODUCCIÓN

Como se ha comentado anteriormente algunos de los precios de los equipos han sido consultados en catálogos de empresas. Estos son: el filtro FT-101, las zeolitas de las torres T-101, T-201 y T-202, el desmineralizador DES-201, el electrolizador ELE-201 y por tanto se han obviado en este apartado. Los equipos que se dimensionarán en base a heurísticas, correlaciones y estándares se presentan a continuación.

2. COMPRESORES Y TURBINAS

Para poder aplicar el método factorial de costes tanto en turbinas como en compresores es necesario calcular la potencia real de equipo. Conocidas las presiones de entrada y salida y la temperatura de entrada a estos equipos se puede estimar el trabajo realizado a través de la Ecuación 1, donde Z representa el factor de compresibilidad que se ha tomado como 1, M_r la masa molecular y γ toma un valor de 1,4.

$$W = Z * \frac{R * T_1}{M_r} * \frac{\gamma}{\gamma - 1} * \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} - 1 \right] \quad \text{Ecuación 1}$$

Para estimar la potencia real se ha tenido en cuenta una eficiencia del 75% en ambos por ser un valor comercial habitual. Por otro lado, se han escogido compresores de tipo reciprocante teniendo en cuenta que se trabajan con bajos caudales al proponerse una baja capacidad de producción de amoníaco y elevadas presiones. En la Figura 1 se presenta una gráfica que permite seleccionar el tipo de compresor en función de las necesidades de la planta:

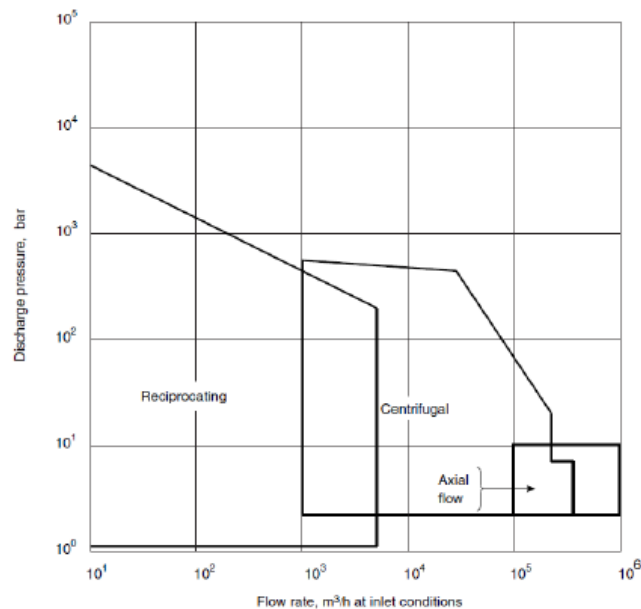


Figura 1. Selección de compresores en base al caudal de operación y la presión de descarga (1)

A continuación, se presenta el cálculo de la potencia para los distintos compresores y expansores involucrados en el proceso:

Anexo I: Dimensionado básico de equipos

Tabla 1. Cálculo de la potencia del compresor C-101

Compresor C-101		
	Compresor 1	Compresor 2
P_e (bar)	1,00	2,540
P_s (bar)	2,74	7,50
T_e (°C)	15,00	30,00
T_s (°C)	111,01	139,85
W (kJ/kg)	96,88	110,85
Flujo (kg/s)	0,83	0,83
Eficiencia (%)	0,75	0,75
W_{real} (kW)	107,73	123,27
W_{total} (kW)	231,00	

Tabla 2. Cálculo de la potencia del compresor C-102

Compresor C-102		
	Compresor 1	Compresor 2
P_e (bar)	7,11	17,76
P_s (bar)	17,96	45,20
T_e (°C)	31,87	74,28
T_s (°C)	124,28	180,42
W (kJ/kg)	93,26	107,12
Flujo (kg/s)	4,13	4,13
Eficiencia (%)	0,75	0,75
W_{real} (kW)	514,17	590,57
W_{total} (kW)	1104,74	

Tabla 3. Cálculo de la potencia del compresor C-103 y C-201

	Compresor C-103	Compresor C-201
P_e (bar)	4,10	3,18
P_s (bar)	7,11	6,70
T_e (°C)	30,00	80,00
T_s (°C)	81,59	164,23
W (kJ/kg)	3,31	1163,61
Flujo (kg/s)	3,31	0,11
Eficiencia (%)	0,75	0,75
W_{real} (kW)	229,63	177,92

Anexo I: Dimensionado básico de equipos

Tabla 4. Cálculo de la potencia del compresor C-201 y C-302

	Compresor C-201	Compresor C-302
P_e (bar)	3,18	98,89
P_s (bar)	6,70	100,30
T_e (°C)	80,00	170,00
T_s (°C)	164,23	171,79
W (kJ/kg)	1163,61	6,08
Flujo (kg/s)	0,11	2,63
Eficiencia (%)	0,75	0,75
W_{real} (kW)	177,92	21,33

Tabla 5. Cálculo de la potencia del compresor C-301

	Compresor C-301	
	Compresor 1	Compresor 2
P_e (bar)	6,40	25,16
P_s (bar)	25,36	100,30
T_e (°C)	-20,79	30,71
T_s (°C)	100,71	177,78
W (kJ/kg)	415,44	502,87
Flujo (kg/s)	0,62	0,62
Eficiencia (%)	0,75	0,75
W_{real} (kW)	341,82	413,75
W_{total} (kW)	755,57	

Tabla 6. Cálculo de la potencia de las turbinas TUR-101 y TUR-301

	TUR-101	TUR-301
P_e (bar)	44,60	99,09
P_s (bar)	4,50	18,20
T_e (°C)	-5,60	-20,00
T_s (°C)	-134,10	-117,06
W (kJ/kg)	-129,66	-165,88
Flujo (kg/s)	2,48	0,58
Eficiencia (%)	0,75	0,75
W_{real} (kW)	-428,90	-128,21

3. BOMBA P-201

La potencia de la bomba P-201 ya ha sido calculada previamente en el Anexo I. Balances de materia y energía, siendo la potencia de la bomba de 1,157 kW.

4. INTERCAMBIADORES DE CALOR

Para poder calcular el coste de los intercambiadores de calor mediante el método factorial es necesario conocer el área de intercambio. Dicha área se puede calcular empleando la Ecuación 2, donde U representa el coeficiente de calor global y se ha supuesto en base a valores típicos para los fluidos que se encuentran en el intercambiador. (2)

$$A = \frac{Q}{U * \Delta T_{ml}} \quad \text{Ecuación 2}$$

El cálculo del área media logarítmica se explica en el Anexo II: Cálculos justificativos: Parte II, en este caso se ha tomado un valor de F igual a 1. El valor de U supuesto para los intercambiadores en los que se refrigera el aire con *chilled water* se ha tomado de 300 W/(m²*K), mientras que en los que se realiza integración energética se ha tomado de 325 W/(m²*K), ya que para gases a alta presión U varía entre 150-500 W/(m²*K). Para el intercambio de calor en el que se emplea vapor de baja presión para calentar el agua líquida de entrada a la bomba P-201 la U estimada ha sido de 2750W/(m²*K) en base al rango típico de 1500-4000. En el caso del intercambiador que se refrigera con propano se ha tomado un valor de 160 W/(m²*K). (2) (3)

En la Tabla 7 se recogen los cálculos realizados para la determinación del área de transmisión de calor, donde Q se corresponde con el valor del calor intercambiado y la ΔT_{ml} se ha calculado teniendo en cuenta las temperaturas de entrada y salida del intercambiador de los dos fluidos.

Tabla 7. Cálculo de la superficie de intercambio de calor para los diversos intercambiadores de la planta

	Q (W)	U (W/(m ² *°C))	ΔT_{ml}	A (m ²)
E-101	-109964,5	300,00	50,19	7,30
E-102	-40815,3	325,00	62,56	2,01
E-103	-897887,5	300,00	66,40	45,08
E-104	-157402,4	325,00	5,40	89,66
E-105	426717,3	325,00	8,47	154,97
E-106	-166413,1	300,00	35,90	15,45
E-201	261305,3	2750,00	77,32	1,23
E-202	209341,9	160,00	57,28	22,84
E-203	174050,3	325,00	30,59	17,51
E-301	1624654,9	325,00	150,35	33,25
E-302	1735211,7	325,00	164,86	32,39
E-303	-157632,0	325,00	196,67	2,47
E-304	-6927280,7	325,00	64,57	330,08

5. EQUIPOS DE ADSORCIÓN

Para equipo de las zeolitas se ha calculado por un lado la masa de zeolitas necesaria para retirar el agua y el dióxido de carbono y por otro el valor de la masa de los tanques para poder emplear el método factorial de costes.

Para estimar la masa de las zeolitas, en base a datos comerciales, se ha empleado un tiempo de ciclo de 6 horas, lo cual supone 4 ciclos diarios. En cada ciclo uno de los equipos se encargará de adsorber los contaminantes, mientras que el otro es desadsorbido. Conociendo la capacidad de retención de agua y dióxido de carbono de las zeolitas es posible determinar la masa necesaria. En la Figura 2, se presenta una especificación comercial de las zeolitas 13X. (4)

Property	Unit	Bead		Pellet		Note
Diameter	mm	1.6-2.5	3.0-5.0	1/16"	1/8"	
Static H ₂ O Adsorption	%wt	≥26.50	≥26.50	≥26.50	≥26.50	RH75%, 25°C
Static CO ₂ Adsorption	%wt	≥18.00	≥18.00	≥18.00	≥18.00	250mmHg, 25°C
Bulk Density	g/ml	≥0.62	≥0.62	≥0.60	≥0.60	Tapped
Loss on ignition	%wt	≤1.50	≤1.50	≤1.50	≤1.50	575°C, 1hr
Loss on Attrition	%wt	≤0.10	≤0.10	≤0.30	≤0.30	~
Crush strength	N	≥30.00	≥80.00	≥30.00	≥70.00	Avg. 25 beads
Particle ratio	%	≥97.00	≥99.00	~	~	~

Figura 2. Especificaciones técnicas de las zeolitas 13X (4)

Multiplicando el caudal másico por el tiempo de ciclo, conociendo la capacidad de adsorción en kg/kg zeolita y asumiendo que se consigue retener toda el agua (CO₂), ya que a la corriente de salida sólo tiene 1 ppm en base a datos bibliográficos, se puede hacer una estimación de la masa de zeolita necesaria. En la Tabla 8 se recogen los cálculos de la masa de zeolita estimada.

Tabla 8. Estimación de la masa de zeolitas necesaria

	T-101 A/B	T-201 A/B	T-202 A/B
Cantidad de agua en 1 ciclo (kg)	48,05	110,63	55,48
Agua adsorbida en el equilibrio (kg agua/kg zeolita)	0,265	0,265	0,265
Masa zeolitas (kg)	181,31	417,45	209,36
Cantidad de CO ₂ en 1 ciclo (kg)	8,99	-	-
CO ₂ adsorbido en el equilibrio (kg agua/kg zeolita)	0,18	-	-
Masa CO ₂ (kg)	49,95	-	-
Masa total zeolitas por torre (kg)	231,27	417,45	209,36
Masa total de zeolitas (kg)		808,13	

Anexo I: Dimensionado básico de equipos

Para calcular el espesor de los tanques de zeolitas se ha empleado el código ASME BPVC Sec.VIII, Div 1, donde se ha determinado el espesor radial por ser mayor al longitudinal. Para el cual es necesario conocer el diámetro del lecho. Este se ha estimado en base a dimensiones comerciales, donde se presentan distintos modelos en función del caudal de entrada dando el ancho, el alto y la profundidad de la instalación. A partir de la altura del equipo seleccionado en base al caudal de operación, se ha determinado el diámetro del tanque teniendo en cuenta el volumen de las zeolitas y la altura del tanque.

En la Tabla 9, se presentan los resultados obtenidos de la determinación de la masa del tanque. Se ha considerado acero inoxidable 304 como material de construcción, una eficiencia de junta del 0,85 y el esfuerzo máximo permisible se ha consultado en el código en función de la temperatura. P_1 hace referencia a la presión obtenida considerando 25 psi a mayores de la presión de operación, mientras que P_2 se corresponde con el valor de la presión tomando un factor de seguridad del 10%. Aquella que dé el valor más alto será la empleada en los cálculos. El espesor calculado ya incluye el factor por corrosión de 2mm. (5)

Tabla 9. Determinación de la masa de los tanques de zeolita

	T-101 A/B	T-201 A/B	T-202 A/B
$V_{\text{zeolitas}} \text{ (m}^3\text{)}$	0,373	0,338	0,338
Altura (m)	1,80	2,40	2,20
Diámetro (m)	0,51	0,60	0,44
$P_{\text{interna}} \text{ (N/mm}^2\text{)}$	0,65	0,65	0,30
$P_1 \text{ (N/mm}^2\text{)}$	2,37	2,37	2,02
$P_2 \text{ (N/mm}^2\text{)}$	0,72	0,72	0,33
T diseño (°C)	41,35	42,24	42,14
$S \text{ (N/mm}^2\text{)}$	137,00	137,00	137,00
E	0,85	0,85	0,85
t (mm)	7,30	8,16	5,87
V (m ³)	0,02	0,04	0,02
Densidad SS 304 (kg/m ³)	7930,00	7930,00	7930,00
Masa (kg)	168,09	291,73	142,34

6. TANQUES

A continuación, se presenta el cálculo de las masas de los tanques empleando el código ASME BPVC, Sec. VIII, Div.1.

6.1. Desnebulizador V-101

Para obtener la masa del tanque de separación gas-líquido se ha de calcular el diámetro del equipo. Dicho diámetro se puede obtener a partir de la Ecuación 3, donde Q

Anexo I: Dimensionado básico de equipos

representa el caudal volumétrico del gas en m³/s; u_s, el valor de u_t siempre y cuando se emplee una malla antivaho. A su vez u_t se puede calcular a través de la Ecuación 4:

$$D_v = \sqrt{\frac{4 * Q}{\pi * u_s}} \quad \text{Ecuación 3}$$

$$u_t = 0,07 * [(\rho_L - \rho_v)/\rho_v]^{1/2} \quad \text{Ecuación 4}$$

La altura de salida del recipiente ha de ser igual al diámetro del recipiente o 1 metro. Por otro lado, el tiempo de residencia del líquido será de 10 minutos a partir del cual se estimará el caudal de líquido del fondo. Además, ha de dejarse como mínimo un espacio de 0,4 metros en la parte superior del demister. La suma de estas tres alturas constituirá la altura total del recipiente. En la Tabla 10, se recogen los datos obtenidos para el desnebulizador:

Tabla 10. Determinación del espesor del tanque V-101

Parámetro	Valor
P (kPa)	730,00
T (K)	298,00
M _r aire (kg/kmol)	28,85
Densidad del aire (kg/m ³)	8,50
Densidad del agua (kg/m ³)	997,11
u _t (m/s)	0,755
Caudal de líquido (m ³ /min)	2,891*10 ⁻⁴
Tiempo de residencia (min)	10
Volumen del líquido en el fondo (m ³)	0,0029
Superficie (m ²)	0,130
Diámetro estandarizado (m)	0,4064
Altura estandarizada (m)	2,286
Pi (N/mm ²)	0,730
P _{diseño} (N/mm ²)	2,453
T diseño (°C)	35,0
S (N/mm ²)	138,0
E	0,850
t (mm)	6,302
V (m ³)	0,018
Densidad SS 304 (kg/m ³)	7930,0
Masa (kg)	145,87

6.2. Cámara de licuefacción del aire V-102 y flash V-301

Para determinar el espesor de la cámara de licuefacción y del tanque flash se ha tenido en cuenta el tiempo de residencia para tanques que alimentan a torres de destilación o tanques de reflujo. Para ello, en base a heurísticas se supone un tiempo de residencia en

función del tipo del tanque, mediante el que se determina el caudal de líquido y a continuación, se determina el diámetro del tanque teniendo en cuenta que el tiempo de residencia dado por heurística se corresponde con la mitad de volumen, por lo que este ha de multiplicarse por 2. En función del rango de operación la heurística recomienda asumir un L/D. Una vez conocido el diámetro se dimensionan los tanques en base al código de recipientes a presión. En la Tabla 11 se presenta el cálculo de la masa para ambos tanques.

Tabla 11. Determinación de la masa del tanque V-102 y el tanque flash V-301

	Tanque V-102	Tanque flash V-301
Tiempo de residencia (s)	600	300
Q (m ³ /s)	0,001	0,0015
Densidad del líquido (kg/m ³)	765,335	410,49
Caudal másico (kg/s)	0,827	0,600
Volumen (m ³) ya multiplicado por 2	1,297	0,877
D (m)	0,819	0,719
P _{interna} (N/mm ²)	0,65	9,91
P ₁ (N/mm ²)	2,37	11,63
P ₂ (N/mm ²)	0,72	10,90
T diseño (°C)	-183,5	-30,00
S (N/mm ²)	137,0	137,00
E	0,9	0,85
t (mm)	10,5	40,22
V (m ³)	0,1	0,33
Densidad SS 304 (kg/m ³)	7930,0	7930,0
Masa (kg)	524,5	2593,23

7. TORRE DE DESTILACIÓN T-102

Para la torre de destilación, al igual que los equipos anteriores, se emplea el código ASME y se calcula el espesor en base a las ecuaciones para un recipiente a presión. El diámetro de plato ha sido obtenido mediante Aspen HYSYS y se ha considerado un espaciado entre platos de 2 ft (0,6096 m). En la sksk se presentan los resultados. El esfuerzo máximo permisible se ha tomado a 40°C, dado que en el código no se recogían temperaturas inferiores y dado que una menor temperatura implica un mayor esfuerzo máximo, el equipo estaría sobredimensionado. En este caso se ha tomado la eficiencia de junta de 1, debido a las bajas temperaturas y altas presiones.

Tabla 12. Determinación de la masa de la columna T-102

Parámetro	Valor
Número de platos	25

Anexo I: Dimensionado básico de equipos

Diámetro a partir de Hysys (m)	0,3719
Espaciado de plato (m)	0,6096
Altura estimada (m)	15,24
P_i (N/mm ²)	0,65
P_1 (N/mm ²)	2,3725
P_2 (N/mm ²)	0,715
T diseño (°C)	-185,7
S (N/mm ²)	138
E	1
t (mm)	5,230
V (m ³)	0,0931
Densidad SS 304 (kg/m ³)	7930,0
Masa (kg)	738,50

8. Bibliografía

1. **Compressor Operating ranges for selection.** [En línea] [Citado el: 13 de junio de 2022.] <https://www.researchgate.net/profile/Isah-Mohammed/publication/274075209/figure/fig5/AS:294670614712323@1447266357262/Compressor-Operating-ranges-for-selection-18-pp-477-and-24-pp-1.png>.
2. **SINNOT, Ray, TOWLER, Gavin.** *Diseño en ingeniería química*. Barcelona : Reverté, 2012. 978-84-291-7199-0.
3. **Engineers Edge.** Overall Heat Transfer Coefficient Table Charts and Equation. [En línea] [Citado el: 13 de junio de 2022.]
4. **Luoyang Jianlong Micro-nano New Materials Co.** Molecular Sieves 13X. [En línea] [Citado el: 13 de junio de 2022.] <https://www.jalonzeolite.com/wp-content/uploads/2020/05/TDS-13X-1.pdf>.
5. **Ultrafilter. The filtration manufacturer.** Adsorption dryer Heatless HL. [En línea] [Citado el: 14 de junio de 2022.] <https://www.ultra-filter.com/compressed-air/adsorption-dryers/adsorption-dryer-heatless-hl/>.