



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

152519

**ESTUDIO DE LA DESTILACION
CERO GRAVEDAD //**

TESIS QUE PRESENTA

EDUARDO ARTEMIO RAMIREZ GONZALEZ

PARA LA OBTENCION DEL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS

SEPTIEMBRE, 1992.

**UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA
DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA**

11-X-75

A mis padres

Alfonso⁺ y Zulema⁺

A mi esposa

Laura María

A mis hijos

Eduardo Héctor y

Laura Mayela

624

"La ciencia del hombre es la medida de su potencia, porque ignorar la causa es no poder producir el efecto".

Francis Bacon

Novum Organum

Agradecimientos

Con el anhelo de que las palabras no limiten, al menos, la intención, deseo expresar mi reconocimiento a quienes de diversas formas me brindaron su apoyo durante la realización del trabajo de doctorado que presento en este documento.

Horas, días y noches dedicadas a este proyecto, que se extendieron en el período de tres años, con estancias y frecuentes viajes a la ciudad de México, significaron el sacrificio de mi esposa y de mis hijos por mis ausencias, debido a lo cual no tengo forma de manifestar mi más profunda gratitud.

Al Dr. Lothar Krause Sennewald, Director General del Centro de Investigación en Química Aplicada (CIQA), agradezco las facilidades que me otorgó durante todo el período que cubrió este trabajo.

Así mismo, expreso mi sincero agradecimiento a la Universidad Autónoma Metropolitana por la oportunidad que me brindó para la realización de este proyecto. Extiendo este reconocimiento a la División de Ciencias Básicas e Ingeniería en Iztapalapa, donde se cultiva, un espíritu de lucha, con visión agresiva y honesta por mejorar el nivel académico y la investigación científica y aplicada en nuestro país. Especial agradecimiento a mi asesor, el Dr. Jesús Álvarez Calderón, quien no descansó en su interés por orientar la filosofía de mi proyecto de tesis y transmitirme su método de razonamiento y de búsqueda de conocimiento, en lecciones valiosas que definitivamente han contribuido a mejorar mi enfoque

de investigación. Al Ing. Carlos Martínez Vera le expreso mi gratitud por su apoyo desinteresado en diversas tareas administrativas que se requirieron durante el período de este trabajo. Incluyo en mis agradecimientos, al personal académico y administrativo de la UAM, ya que siempre encontré un clima amable y cooperativo en las diversas tareas que realicé en esta institución.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología agradezco el soporte que me otorgó en una gran parte del proyecto.

Una valiosa ayuda me brindó Roxana Leticia López Jaime con la transcripción y edición de manuscritos tanto de la tesis, como de las publicaciones y diversos documentos que se generaron en mi trabajo de doctorado. Un infinito agradecimiento por su colaboración.

Deseo también que se sientan participantes de mi reconocimiento todos aquellos que no menciono en esta lista y que de alguna forma me apoyaron y estimularon durante este trabajo.

CONTENIDO

	PAG.
PARTE I. INTRODUCCION	
RESUMEN	1
1.1. INTRODUCCION.	4
PARTE II. TEORIA.	
2.1. REVISION DE LA DESTILACION CONVENCIONAL.	7
2.1.1. FUNDAMENTOS DE LA DESTILACION	8
2.1.2. RELACIONES TERMODINAMICAS	10
2.1.3. DESTILACION INSTANTANEA	19
2.1.4. DESTILACION POR CARGAS	20
2.1.5. DESTILACION CONTINUA POR MULTITAPAS	22
2.1.6. SECUENCIACION DE COLUMNAS	41
2.1.7. ELEMENTOS INTERNOS DE LAS COLUMNAS DE DESTILACION	42
2.1.8. CONTROL DE COLUMNAS DE DESTILACION	53
2.1.9. TENDENCIAS EN DESTILACION	66
2.2. NUEVAS FORMAS DE DESTILACION.	70
2.3. DESTILACION CERO GRAVEDAD.	78
2.3.1. EL TUBO CALIENTE	78
2.3.2. DESCRIPCION DE LA DCG	98
2.3.3. TRABAJO PREVIO EN EL MODELAMIENTO DE LA DCG	101
PARTE III. DESARROLLO.	
3.1. MOVIMIENTO DE FLUIDOS Y TRANSFERENCIA INTERFACIAL	105
3.1.1. MOVIMIENTO DE FLUIDOS	105
3.1.2. TRANSFERENCIA DE MASA	116

3.1.3.	TRANSFERENCIA DE CALOR	125
3.1.4.	DIFUSIVIDAD EN LAS FASES LIQUIDO Y GASES	126
3.2.	MODELO DE COMPORTAMIENTO DE LA DESTILACION CERO GRAVEDAD.	129
3.2.1.	CONSERVACION DE MASA	130
3.2.2.	CONSERVACION DE CALOR	139
3.2.3.	LOS NUMEROS ADIMENSIONALES QUE RIGEN LA DCG	147
3.2.4.	CONDICIONES INTERFACIALES	158
3.2.5.	METODO DE SOLUCION DEL MODELO DCG PARA EL CASO DEL ESTADO ESTABLE.	160
3.2.6.	DATOS Y PARAMETROS DEL MODELO	165
3.2.7.	RESULTADOS DE LA SIMULACION EN ESTADO ESTABLE	172
3.2.8.	COMPORTAMIENTO DINAMICO. RESPUESTA DE LA COLUMNA DCG A UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION	180
3.2.9.	INFORMACION COMPARATIVA EN CONSUMO DE ENERGIA	197
3.3.	CONCLUSIONES DEL MODELO.	204
PARTE IV. CONCLUSIONES.		
4.1.	CONCLUSIONES GENERALES	207
	NOMENCLATURA	211
	BIBLIOGRAFIA	217
	APENDICES	
	APENDICE A. EXPRESIONES PARA EL CALCULO DEL COEFICIENTE DE FUGACIDAD	223

APENDICE B.	MODELOS PARA LOS COEFICIENTES DE ACTIVIDAD	227
APENDICE C.	POLINOMIOS CUBICOS DE HERMITE	233
APENDICE D.	DESARROLLO DE LAS ECUACIONES DE COMPOSICION PARA UTILIZARSE EN EL METODO DE COLOCACION EN ELEMENTO FINITO	238
APENDICE E.	PROCEDIMIENTO INSTRUMENTADO EN LA SOLUCION DEL SISTEMA DE ECUACIONES DEL MODELO DCG.	243

INDICE DE CUADROS

CUADRO 2.1.	PAQUETES COMPUTACIONALES COMERCIALES RELACIONADOS CON DESTILACION.	37
CUADRO 2.2.	EFICIENCIAS DE PLATO PARA SISTEMAS DE DESTILACION REPORTADOS	46
CUADRO 2.3.	CARACTERISTICAS DE EMPAQUES	47
CUADRO 2.4.	COMPARACION DE VENTAJAS DE COLUMNAS DE PLATOS Y EMPACADAS.	50
CUADRO 2.5.	FLUIDOS DE TRABAJO PARA TUBOS CALIENTES.	94
CUADRO 2.6.	DATOS DE MEDIOS POROSOS UTILIZADOS EN TUBOS CALIENTES.	95
CUADRO 2.7.	DATOS DE COMPATIBILIDAD DE FLUIDOS DE TRABAJO CON MATERIALES POROSOS	97

CUADRO 3.1.	ECUACIONES DE CONSERVACION DE MATERIA Y ENERGIA EN DESTILACION CERO GRAVEDAD	145
CUADRO 3.2.	ECUACIONES DE CONSERVACION EN DCG ADIMENSIONALIZADOS.	153
CUADRO 3.3.	ESTIMACION DE LOS NUMEROS ADIMENSIONALES DE LAS ECUACIONES DE CONSERVACION DE DCG PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA.	155
CUADRO 3.4.	ANALISIS DE SENSIBILIDAD DE LAS ECUACIONES DE CONSERVACION	157
CUADRO 3.5.	DATOS UTILIZADOS EN EL MODELO DCG PARA LOS TRES CASOS ESTUDIADOS.	170
CUADRO 3.6.	DATOS DE EFICIENCIA COMPARATIVA EN LA SEPARACION DE MEZCLAS METANOL-AGUA MEDIANTE DESTILACION CERO GRAVEDAD Y DESTILACION CONVENCIONAL EN COLUMNA EMPACADA.	199
CUADRO 3.7.	DATOS DE EFICIENCIA COMPARATIVA EN LA SEPARACION DE MEZCLAS ETANOL-AGUA MEDIANTE DESTILACION CERO GRAVEDAD Y DESTILACION CONVENCIONAL EN COLUMNA EMPACADA.	200

INDICE DE FIGURAS

FIG. 2.1.	DESTILACION INSTANTANEA	18
FIG. 2.2.	TORRE DE DESTILACION CONTINUA POR MULTIETAPAS.	23
FIG. 2.3.	PLATO DE EQUILIBRIO	25

FIG. 2.4.	DIAGRAMA DE MACABE-THIELE PARA EL SISTEMA BENCENO-TOLUENO	27
FIG. 2.5.	PERFIL CORRECTO DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA.	54
FIG. 2.6.	PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA OPERANDO A UNA RAZON DE REFLUJO MUY BAJA.	55
FIG. 2.7.	PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA CON MUY POCOS PLATOS.	56
FIG. 2.8.	PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA OPERANDO A UNA RAZON DE REFLUJO MUY ALTA.	57
FIG. 2.9.	PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA CON UNA POSICION INCORRECTA DEL PUNTO DE ALIMENTACION.	58
FIG. 2.10.	PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA CON BALANCE DE MATERIA INCORRECTO.	59
FIG. 2.11.	PERFIL CON TEMPERATURAS ADECUADO PARA CONTROL EN UNA COLUMNA DE DESTILACION.	60
FIG. 2.12.	PERFIL DE TEMPERATURAS NO ADECUADO PARA CONTROL EN UNA COLUMNA DE DESTILACION.	61
FIG. 2.13.	ESQUEMA BASICO DEL PROCESO DE PERVAPO-RACION.	73

FIG. 2.14.	ESQUEMA BASICO DEL TERMOSIFON.	79
FIG. 2.15.	ESQUEMA DE UN TUBO CALIENTE.	81
FIG. 2.16.	PRINCIPALES REGIONES DE UN TUBO CALIENTE.	82
FIG. 2.17.	TRANSFORMACION DE FLUJO TERMINO DE UN TUBO CALIENTE.	83
FIG. 2.18.	DEFINICION DEL ANGULO DE CONTACTO EN CAPILARES.	86
FIG. 2.19.	CONTACTO EN MOJADO Y NO MOJADO.	88
FIG. 2.20.	ESQUEMA DEL APARATO EMPLEADO EN DESTILACION CERO GRAVEDAD.	99
FIG. 3.1.	TEORIA DE PELICULA.	119
FIG. 3.2.	MEZCLADO DE PELICULA PROMOVIDO POR LAS FLUCTUACIONES DE VELOCIDAD DE ACUERDO CON EL REGIMEN DE FLUJO.	123
FIG. 3.3.	ELEMENTO DIFERENCIAL DEL ANILLO POROSO A TRAVES DEL CUAL FLUYE LA FASE LIQUIDA EN DCG.	132
FIG. 3.4.	ELEMENTO DIFERENCIAL DE VOLUMEN A TRAVES DEL CUAL FLUYE LA FASE GAS EN DCG.	137
FIG. 3.5.	COMPARACION DEL PERFIL CALCULADO CONTRA DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985) PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA. EMPLEO DE LA CORRELACION DE ALTA TRANSFERENCIA DE MASA EN TODA LA COLUMNA.	173

- FIG. 3.6. COMPARACION DEL PERFIL DE COMPOSICION CALCULADO EN LA FASE LIQUIDA DE LA COLUMNA DCG PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA CONTRA DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985) EMPLEO DE LA CORRELACION DE ALTA TRANSFERENCIA DE MASA EN TODA LA COLUMNA. 174
- FIG. 3.7. COMPARACION DEL PERFIL DE COMPOSICION CALCULADO EN LA FASE LIQUIDA DE LA COLUMNA DCG PARA EL SISTEMA ETANOL-AGUA CONTRA DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985). EMPLEO DE LA CORRELACION DE ALTA TRANSFERENCIA DE MASA EN TODA LA COLUMNA. 175
- FIG. 3.8. PERFILES DE TEMPERATURA Y COMPOSICION PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA CON RAZON DE TRANSFERENCIA DE MASA BAJA EN EL LADO DEL EVAPORADOR. COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985). 177
- FIG. 3.9. PERFILES DE TEMPERATURA Y COMPOSICION PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA CON RAZON DE TRANSFERENCIA DE MASA BAJA EN EL LADO DEL EVAPORADOR. COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985). 178
- FIG. 3.10. PERFILES DE TEMPERATURA Y COMPOSICION PARA EL SISTEMA ETANOL-AGUA CON RAZON DE TRANSFERENCIA DE MASA BAJA EN EL LADO DEL EVAPORADOR. COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR

- FIG. 3.11. EVOLUCION DEL PERFIL DE COMPOSICION DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE METANOL. 184
- FIG. 3.12. EVOLUCION DEL PERFIL DE TEMPERATURAS DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE METANOL. 185
- FIG. 3.13. EVOLUCION DE LA COMPOSICION DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE METANOL. 186
- FIG. 3.14. EVOLUCION DE LA TEMPERATURA DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE METANOL. 187
- FIG. 3.15. EVOLUCION DEL PERFIL DE COMPOSICION DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE METANOL. 188
- FIG. 3.16. EVOLUCION DEL PERFIL DE TEMPERATURAS DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 189

0.25 FRACCION MOL DE METANOL.

- FIG. 3.17. EVOLUCION DE LA COMPOSICION DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE METANOL. 190
- FIG. 3.18. EVOLUCION DE LA TEMPERATURA DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE METANOL. 191
- FIG. 3.19. EVOLUCION DEL PERFIL DE COMPOSICION DEL SISTEMA ETANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE ETANOL. 192
- FIG. 3.20. EVOLUCION DEL PERFIL DE TEMPERATURAS DEL SISTEMA ETANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE ETANOL. 193
- FIG. 3.21. EVOLUCION DE LA COMPOSICION DEL SISTEMA ETANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE ETANOL. 194
- FIG. 3.22. EVOLUCION DE LA TEMPERATURA DEL SISTEMA ETANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE

0.2 A 0.25 FRACCION MOL DE ETANOL.

195

FIG. 3.23. COMPARACION DE LA EFICIENCIA EN EL CONSUMO DE ENERGIA DE LA DESTILACION CERO GRAVEDAD CON RESPECTO A LA DESTILACION CONVENCIONAL EN UNA COLUMNA EMPACADA, PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA.

202

FIG. 3.24. COMPARACION DE LA EFICIENCIA EN EL CONSUMO DE ENERGIA DE LA DESTILACION CERO GRAVEDAD CON RESPECTO A LA DESTILACION CONVENCIONAL EN UNA COLUMNA EMPACADA, PARA EL SISTEMA ETANOL-AGUA.

203

PARTE 1.

INTRODUCCION

RESUMEN.

La destilación cero gravedad (DCG) es una operación unitaria reportada recientemente, en la cual la capilaridad es el mecanismo básico del proceso. El nombre de la operación se debe a que las fuerzas de gravedad no intervienen en la separación. Por sus características de alta eficiencia, DCG se considera una opción atractiva para incidir en retos fundamentales de la destilación convencional.

En el marco de las demandas de solución de problemas de la destilación convencional, el presente trabajo se orienta al estudio de la destilación cero gravedad. Para ello se parte de una revisión del conocimiento de la destilación convencional. En esta revisión se observa que la destilación es una tecnología madura y que en la actualidad hay un gran número de paquetes computacionales disponibles en el mercado para apoyar el diseño de columnas. La destilación es una operación unitaria que consume grandes cantidades de energía y debido a ello se buscan diferentes formas de optimizar los diseños. Sin embargo, diversos factores establecen una brecha entre la teoría y la práctica. En primera instancia, la destilación es una operación con comportamiento altamente no lineal que se traduce en dificultades prácticas para instrumentar esquemas óptimos de integración de energía y sistemas de control avanzado. El segundo factor es de gran relevancia en la actualidad: el enfoque de modelamiento, basado en equilibrio. En el presente trabajo se muestra que este enfoque es muy limitado, ya que en la realidad las corrientes de líquido y

vapor que salen de un plato de destilación no están en equilibrio y que los diferentes criterios de eficiencia que actualmente se utilizan no son suficientemente adecuados. Con estas limitaciones la destilación convencional enfrenta grandes retos para reducir sus costos de inversión y operación. Para atacar estos problemas se identifican dos rutas: una en la línea de mejoramiento y otra en la línea de cambio por sustitución. En la línea de mejoramiento la tendencia más importante que se observa es la del modelamiento basado en fenómenos de transporte, que debe sustituir al modelamiento basado en equilibrio. Ya que este enfoque atiende mejor la realidad, deben esperarse beneficios en el mejoramiento de diseños. En la tendencia de cambio por sustitución la destilación cero gravedad se identifica como una operación atractiva, ya que incide en los retos fundamentales de la destilación, debido a su alta eficiencia de separación en columnas pequeñas.

En el presente trabajo se identifican las deficiencias en el conocimiento de la DCG y se justifica la necesidad de un estudio más profundo que permita establecer las bases para el diseño, optimización y control de la operación.

A partir de principios básicos se identifica el efecto de la tensión superficial y del medio poroso en la operación. Así mismo, se demuestra que la alta eficiencia de separación que se logra en DCG sólo se puede explicar con razones altas de transferencia de masa, y por ello, en este trabajo, se propone un mecanismo de mezclado de película interfacial promovida por el medio poroso.

La conceptualización realizada para DCG permite establecer un modelo matemático que consiste de las ecuaciones de conservación de materia y energía para las fases líquida y gaseosa acopladas a través de las ecuaciones interfaciales de equilibrio y de transferencia de masa y calor. Mediante el análisis dimensional de estas ecuaciones se demuestra que el perfil de temperaturas en la columna se puede obtener por medio de cálculos de punto de burbuja. El sistema de ecuaciones diferenciales parciales acopladas resultante, se resuelve por medio de una técnica de colocación en elemento finito, utilizando polinomios cúbicos de Hermite como funciones base.

Los resultados para estado estacionario y estado transitorio demuestran la alta capacidad predictiva de modelo. La congruencia de los resultados justifica las hipótesis planteadas y como consecuencia se logra un mejor conocimiento de la operación.

Finalmente, se establecen comparaciones de consumos de energía de la DCG contra la destilación convencional y se comprueba que DCG es más eficiente en el uso de energía, lo que valida la atractividad de la operación.

1.1. INTRODUCCION.

La destilación es una de las operaciones unitarias más importantes de estudio en la ingeniería química. Su impacto en la purificación de materias primas, materiales en proceso y productos en la industria química es de gran relevancia. Sin embargo, así como contribuye a la solución de problemas importantes en las plantas químicas, también presenta problemas de altos costos de inversión y operación. En la solución de estos problemas, actualmente se abordan varios caminos y en uno de ellos la destilación cero gravedad (DCG) se presenta como una opción atractiva. Esta es una operación reportada recientemente (Seok y Hwang, 1985), que opera bajo los principios de capilaridad de un tubo caliente. Los resultados experimentales obtenidos por Seok y Hwang (1985) demuestran la factibilidad de la operación. Separaciones de mezclas metanol-agua y etanol-agua se lograron en una columna DCG de una longitud equivalente a $1/9$ de la altura de una torre empacada convencional. El modelamiento se realizó estableciendo la analogía con una columna empacada. Aunque se obtuvieron buenas predicciones, el entendimiento de la operación es incompleto. El presente trabajo se orienta al estudio de esta operación. Para ello, en la primera parte del trabajo se busca justificar el estudio con base en el estado del arte de la destilación, dentro de la cual se ubica DCG y se muestra su

atractivo.

La estrategia que se desarrolla en el presente trabajo consiste primero en mostrar la destilación convencional como un conjunto de conocimientos maduros. En esto, al revisar los diferentes temas de la destilación convencional se describen los principios básicos, sus aplicaciones y limitaciones. Así, gradualmente, se busca llegar a la identificación de las causas de los problemas que enfrenta la destilación. Así mismo, se pretende mostrar y justificar los diferentes caminos que se siguen para atacar la resolución de tales problemas. Con esto se identifican los principales retos y se muestran las líneas de acción y tendencias. En esta parte se busca presentar DCG dentro de las líneas más importantes de destilación y se describe cómo reúne los requisitos para considerarla como una opción atractiva.

Con esta base, la siguiente parte de la estrategia, consiste en justificar la necesidad del estudio y el enfoque con el cual se aborda el trabajo. Tal enfoque consiste en lograr un conocimiento superior al alcanzado previamente, partiendo de principios básicos como requisitos para construir un modelo consistente que en sí mismo implique un mayor entendimiento de DCG y que en su aplicación apoye aún más al desarrollo de conocimiento.

Con esta segunda parte establecida, la siguiente parte del trabajo consiste ya en el estudio del comportamiento de la DCG partiendo del análisis de principios básicos y revisando el tema del tubo caliente como el antecedente inmediato de la DCG. En seguida se entra al estudio de los principales fenómenos de la operación como son transporte de cantidad de movimiento (momentum),

transferencia de masa y transferencia de calor, donde los fenómenos característicos de la operación, como la capilaridad, deben desempeñar el papel central y su relación con el equilibrio y los efectos de transferencia de masa debe quedar bien establecida. El objetivo es describir DCG en términos de los fenómenos básicos: movimiento de fluidos originado por fuerzas capilares del medio poroso, dependencia de la tensión interfacial en la temperatura, difusividad efectiva del medio, equilibrio gas-líquido y transferencia de masa a través de la interface gas líquido.

Sin que el tratamiento se vea limitado, y comparando con datos experimentales reportados, se deriva un modelo matemático para una columna DCG binaria. El modelo consiste de ecuaciones diferenciales parciales para las fases líquida y gaseosa acopladas a través de expresiones algebraicas para el equilibrio y la transferencia de masa interfacial así como condiciones de punto de burbuja temperatura-composición.

El estudio de la DCG con el modelo establecido contempla tres aspectos: el análisis de los números adimensionales involucradas, la simulación en estado estacionario y la simulación del comportamiento dinámico. Con una técnica estándar de elemento finito las ecuaciones diferenciales parciales se discretizan y se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales. Con ajustes mínimos en los factores característicos del medio poroso, el modelo predice con buena precisión los perfiles experimentales reportados y proporciona el perfil de temperaturas asociado. Como resultado, se alcanza un mejor entendimiento de la DCG.

PARTE II.

TEORIA

2.1. REVISION DE LA DESTILACION CONVENCIONAL.

En este capítulo se presenta el estado del arte de la destilación convencional con la finalidad de establecer sus posibilidades y limitaciones de desarrollo, con base en los principios que la gobiernan y el avance del conocimiento en metodologías de diseño, optimización y control. Para ello se describen los principales temas de interés, buscando la identificación de los retos fundamentales que enfrenta esta operación y las tendencias de desarrollo para superar tales retos. Finalmente, en este capítulo se sientan las bases para justificar la necesidad de buscar soluciones alternas más eficientes y eficaces para superar los problemas identificados.

En general, una gran parte del material que se presenta en este capítulo, es información madura, disponible en referencias conocidas (Treybal, 1980; Reid, et.al, 1977; Rose, 1985; Hines y Maddox, 1987; Holland, 1988). Esta información tiene la finalidad de sentar las bases para el análisis de temas nuevos o temas en desarrollo, cuyas referencias específicas se presentan en el texto, hasta llegar a las tendencias actuales, de donde se derivan las conclusiones que justifican el presente trabajo.

2.1.1. FUNDAMENTOS DE LA DESTILACION.

La destilación, como operación unitaria, comprende un conjunto de formas de separación de soluciones de componentes volátiles con diferentes puntos de ebullición en fracciones de diferente composición, utilizando, esencialmente, energía calorífica como agente de separación. Se caracteriza porque existe una fase gaseosa y una fase líquida y todos los componentes están presentes en ambas fases. La separación se realiza porque existen gradientes de concentración entre las fases, o expresado en forma más rigurosa, gradientes de potencial químico. Es decir:

$$\nu_i^L \neq \nu_i^V \quad ; \quad (i = 1, \dots, c) \quad (2-1)$$

donde ν_i^L es el potencial químico del componente i en la fase líquida, ν_i^V es el potencial químico del mismo componente en la fase vapor y c es el número total de especies presentes en el sistema líquido-vapor.

La operación se lleva a cabo mediante la vaporización y condensación de la mezcla en un proceso que puede realizarse en un solo paso o en la repetición de tales cambios de fase. El objetivo ideal es la separación de la mezcla en sus componentes puros.

Dependiendo de factores como las características de la mezcla que se quiere separar, las purezas deseadas y las restricciones económicas, entre otros, la destilación convencional presenta las siguientes opciones:

- a). Destilación instantánea
 - isotérmica
 - adiabática
- b). Destilación por cargas
- c). Destilación continua en multietapas.

El éxito, en términos convencionales, de aplicar alguna de las formas de destilación mencionadas arriba, especialmente en la opción de multietapas, depende de varios factores:

1. el diseño de la operación
2. el grado de integración con el proceso total, especialmente en lo que se refiere al uso de energía.
3. la estructura de control utilizada.
4. la construcción del equipo.
5. los materiales de construcción seleccionados
6. la forma práctica de llevar a cabo la operación.

Adicionalmente, factores tales como el haber seleccionado destilación como la operación más adecuada entre las opciones de separación disponibles, aspectos administrativos y otros, son relevantes para la aplicación apropiada de la destilación.

Partiendo de las bases fundamentales, los principios teóricos en los cuales se basa el diseño, optimización y control de la operación consisten, esencialmente, en relaciones termodinámicas de equilibrio y balances de materia y energía que en conjunto

generan sistemas de ecuaciones que se deben resolver para especificar cualquier forma de destilación. A través del tiempo, y con la ayuda de la computadora se han generado diferentes métodos para plantear y resolver tales ecuaciones en la búsqueda de diseños más eficientes.

A continuación se analizan más en detalle estos aspectos.

2.1.2. RELACIONES TERMODINAMICAS.

Cuando dos fases, denotadas por superíndices α y β (v.gr. una fase gas y una fase líquida), están en equilibrio, termodinámico se satisfacen las siguientes condiciones:

$$\text{Igualdad de temperatura:} \quad T^{\alpha} = T^{\beta} \quad (2-2a)$$

$$\text{Igualdad de presión:} \quad P^{\alpha} = P^{\beta} \quad (2-2b)$$

$$\text{Igualdad de potencial químico:} \quad \nu_i^{\alpha} = \nu_i^{\beta} \quad (2-2c)$$

El potencial químico se define en términos de la energía libre de Gibbs por la expresión

$$\nu_i = \left(\frac{\partial nG}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_j} = \bar{G}_i \quad (2-3)$$

donde \bar{G}_i es la energía de Gibbs molar parcial.

De acuerdo con la expresión (2-3), el potencial químico es una propiedad particular de cada especie química de una mezcla, que se define como la energía parcial de Gibbs del componente i en una solución, en condiciones de temperatura, presión y composición

fijas. En realidad, los componentes de una solución están íntimamente entremezclados y no pueden conservar sus propiedades particulares, por lo que la expresión (2-3) es básicamente la definición del potencial químico como una propiedad de solución.

Un criterio alternativo, y de gran utilidad en destilación, se deriva a partir de la relación de la energía de Gibbs con la presión, a temperatura constante:

$$dG = VdP \quad (2-4)$$

o bien, para el caso de gases ideales

$$dG = RT d \ln P \quad (2-5)$$

Para que la expresión anterior pueda aplicarse a fluidos reales se introduce una nueva función que se define como la fugacidad (Smith y Van Ness, 1975). Para un componente en una mezcla a temperatura constante, la expresión resultante es:

$$d\bar{G}_1 = RT d \ln \bar{f}_1 \quad (2-6)$$

Integrando, se obtiene

$$\bar{v}_1 = RT \ln \bar{f}_1 + \psi_1 \quad (2-7)$$

donde la constante de integración ψ_1 es una función de la temperatura solamente. Puesto que en el equilibrio todas las fases están a la misma temperatura, se desprende que en el equilibrio la siguiente condición también se cumple:

$$\bar{f}_i^\alpha = \bar{f}_i^\beta \quad (2-8)$$

Este criterio conduce a la relación generalizada de equilibrio ampliamente utilizada en destilación, la cual se establece considerando, para la fase gas:

$$\bar{f}_i^V = y_i \bar{\phi}_i P \quad (2-9)$$

donde y_i es la fracción mol del componente i en la fase gas, $\bar{\phi}_i$ es el coeficiente de fugacidad y P la presión de la fase gas; para la fase líquida:

$$\bar{f}_i^L = x_i \gamma_i f_i^L \quad (2-10)$$

donde x_i es la fracción mol del componente i en la fase líquida, f_i^L es la fugacidad del componente puro i en esta misma fase. γ_i es el coeficiente de actividad del componente i en la fase líquida y se define como

$$\gamma_i = \frac{\bar{a}_i}{x_i} \quad (2-11)$$

siendo \bar{a}_i la actividad del componente en solución, que es la relación de la fugacidad del componente a la fugacidad del estado de referencia, $\bar{a}_i = \bar{f}_i / f_i^0$. La fugacidad del componente i , f_i^L , en la fase líquida, para fluidos incompresibles, se define por (Modell y Reid, 1974):

$$f_1^L = f_1^s e^{\left[\frac{v_1^L (P - P_1^s)}{RT} \right]} \quad (2-12)$$

donde el término exponencial se conoce como el factor de corrección de Poynting, f_1^s es la fugacidad del componente i en la fase líquida a la temperatura T , bajo su presión de vapor de saturación, P_1^s . A presiones de operación, P , del orden de magnitud de P_1^s , tal factor de corrección se puede despreciar y f_1^s se puede aproximar por P_1 , corregida por el coeficiente de fugacidad del componente puro i , ϕ_1^s , a su presión de saturación P_1^s . Así

$$y_1 \bar{\phi}_1 P = x_1 \gamma_1 P_1^s \phi_1^s \quad (2-13)$$

El buen empleo de esta ecuación es extremadamente valioso para obtener buenas predicciones de las composiciones líquido-vapor en equilibrio. En destilación es frecuente definir la presión de operación, P , y la composición de la fase líquida o de la fase gas. A partir de estos datos debe determinarse la composición de la otra fase, los coeficientes de fugacidad y de actividad y la presión de vapor a la temperatura de saturación, la cual frecuentemente también es necesario determinar.

En el apéndice A se describen algunos métodos para el cálculo de los coeficientes de fugacidad. De estos, uno de los más aceptados actualmente es el de Soave-Redlich-Kwong por su precisión y sencillez. Sin embargo, ya que la ecuación de

equilibrio presenta coeficientes de fugacidad en ambos lados, su influencia tiende a cancelarse cuando tienen valores similares o se aproximan a la unidad. A presiones de alrededor de una atmósfera, suponer un comportamiento de gases ideales introduce un error muy pequeño y cuando se realiza este supuesto, la relación de equilibrio se convierte en:

$$y_i P_i = x_i \gamma_i P_i^S \quad (2-14)$$

Si bien, esta ecuación simplifica los cálculos, la precisión del coeficiente de actividad, γ_i , es de gran importancia y por ello se ha realizado un gran trabajo en el desarrollo de métodos para determinar este valor. Básicamente, para soluciones no ideales el coeficiente de actividad depende de la temperatura, presión y composición del sistema, lo que implica que el coeficiente de actividad de un componente individual en una solución está afectado por los coeficientes de actividad del resto de los componentes del sistema. Esta relación se establece a través de la ecuación de Gibbs-Duhem (Reid, et. al, 1977) para la cual no existe una única forma integrada. Para obtener una relación particular entre la composición y el coeficiente de actividad es necesario suponer un modelo consistente. En la práctica, la ecuación de Gibbs-Duhem se trabaja a través del concepto de energía de Gibbs de exceso, que es la diferencia de la energía de Gibbs observada en una mezcla, con respecto a la que tendría una solución ideal a las mismas condiciones de

presión, temperatura y composición. Con esta base, se ha trabajado en diferentes modelos que proporcionen una forma consistente de la ecuación de Gibbs-Duhem integrada. Algunos de tales modelos se han convertido en métodos populares para el cálculo del coeficiente de actividad. En el apéndice B se describen los métodos más conocidos.

Existen ventajas y desventajas en cada uno de estos métodos que los vuelven útiles de acuerdo con el sistema que se está tratando. Ninguno de ellos tiene una capacidad predictiva completa. Las ecuaciones de Margules y de Van Laar son más sencillas de manejar, pero son más imprecisas y están limitadas a sistemas binarios moderadamente no ideales. Estas ecuaciones proponen las expresiones más sencillas para correlacionar la energía libre de Gibbs de exceso por mol de mezcla (g^E) con la composición. Todas estas expresiones contienen uno, dos o tres parámetros ajustables que, en principio, dependen de la temperatura. La ecuación de Wilson se considera la más adecuada para mezclas binarias fuertemente no ideales, e.g., soluciones de alcoholes con hidrocarburos, pero no es aplicable a mezclas que exhiben una región de inmiscibilidad. Para sistemas binarios, esta ecuación contiene solamente dos parámetros. NRTL, UNIQUAC y UNIFAC son modelos más complejos, pero tienen un rango más amplio de aplicaciones. UNIQUAC aplica tanto a sistemas miscibles como inmiscibles y es tan satisfactoria como la ecuación de Wilson, pero no mejor para sistemas miscibles. Para sistemas líquido-líquido, la capacidad predictiva de UNIQUAC es superior a la NRTL (Holland, 1988).

En forma similar a UNIQUAC, el modelo UNIFAC se compone de una parte combinatorial y una parte residual. La diferencia principal entre estos modelos es que la parte residual de UNIFAC se define por el concepto de solución de grupos, que implica el empleo de coeficientes de actividad residual de grupos químicos en solución con respecto a coeficientes de actividad residual de tales grupos en una solución con moléculas del mismo tipo. Es decir, este modelo contempla la contribución debida a interacciones moleculares. Sin embargo, es un método predictivo, en tanto que UNIQUAC se basa en información experimental. En la actualidad, el método UNIFAC ha adquirido una gran popularidad, debido a su amplio rango de aplicabilidad. Aún así, siempre que se cuente con los datos experimentales apropiados, es preferible utilizar UNIQUAC o algún otro método de acuerdo con su fortaleza.

Para el cálculo de la presión de vapor, la ecuación de Antoine de tres constantes tiene gran aplicación (Rose, 1985):

$$\ln P = A - \frac{B}{T + C} \quad (2-15)$$

la capacidad predictiva de esta ecuación es sorprendentemente buena para todos los líquidos. Algunas veces el ajuste de las constantes es inadecuado para rangos de presión amplios y en este caso, la predicción se mejora con la ecuación de Antoine extendida. Frecuentemente se usa la extensión de 5 parámetros de la forma:

$$\ln P = A - \frac{B}{T + C} + DT + E \ln (T) \quad (2-16)$$

La forma más simple de la ecuación de Antoine es la versión en dos parámetros, donde C toma un valor fijo.

Una ecuación que ha sido particularmente exitosa, debido a su capacidad de correlacionar y predecir presiones de vapor en un amplio rango de temperaturas, es la ecuación de Wagner (Reid, et. al., 1987). Esta ecuación se puede expresar de diversas formas y la más sencilla es:

$$\ln P_r = \frac{a\mathcal{T} + b\mathcal{T}^{1.5} + c\mathcal{T}^3 + d\mathcal{T}^6}{T_r} \quad (2-17)$$

donde $\mathcal{T} = 1 - T_r$

Finalmente, para completar los cálculos de equilibrio, normalmente se requiere calcular la temperatura de burbuja del sistema, o la temperatura de rocío, o ambas.

En la actualidad, un gran número de paquetes termodinámicos computacionales incluyen todo el conjunto de datos y ecuaciones para cálculos de equilibrio. Generalmente presentan varios modelos como opciones que el usuario selecciona para realizar los cálculos. Aún así, una gran parte del esfuerzo en destilación se consume en cálculos de equilibrio.

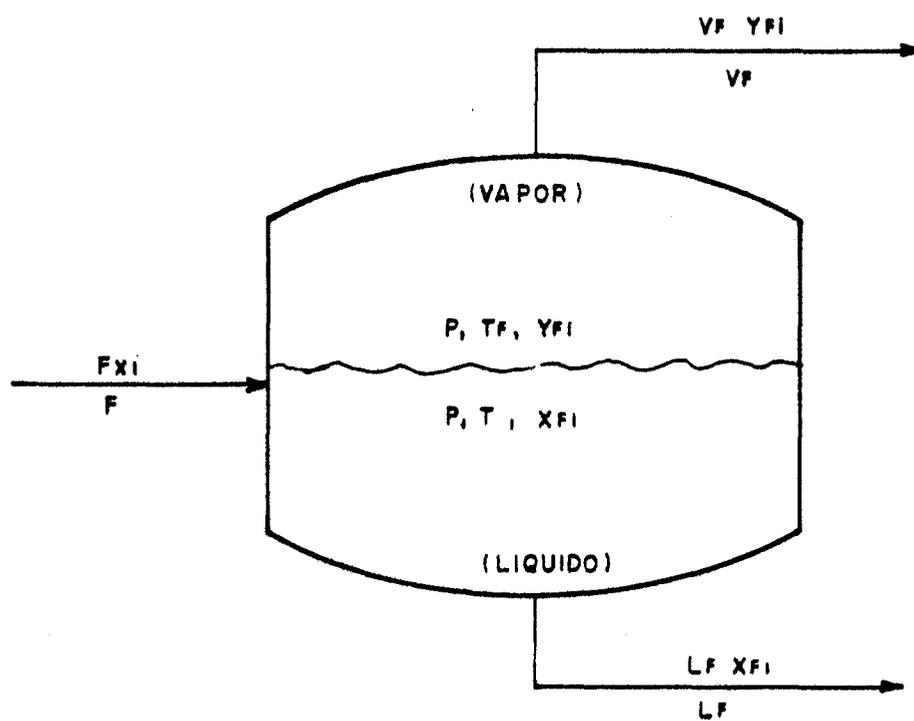


FIGURA 2.1.- DESTILACION INSTANTANEA

2.1.3. DESTILACION INSTANTANEA.

La destilación o vaporización instantánea, algunas veces también denominada destilación de equilibrio, consiste en la vaporización parcial de una mezcla líquida en una sola etapa donde el vapor que se obtiene como destilado está en equilibrio con el líquido residual. Normalmente esta operación se aplica para el tratamiento de mezclas cuyos componentes tienen diferencias grandes en sus volatilidades.

De acuerdo con la figura 2.1, las ecuaciones que describen este proceso son:

relaciones de equilibrio

$$y_{Fi} = f(x_{Fi}) \quad ; \quad i = 1, \dots, c \quad (2-18)$$

$$\sum_{i=1}^c y_{Fi} = 1$$

$$\sum_{i=1}^c x_{Fi} = 1$$

balances de materia

$$F x_i = V_F y_{Fi} + L_F x_{Fi} \quad , \quad i = 1, \dots, c \quad (2-19)$$

donde F , V_F y L_F representan el flujo, en moles por unidad de

tiempo, de la alimentación, destilado y líquido residual respectivamente.

Existen dos formas de llevar a cabo esta operación: isotérmica y adiabática. En la vaporización isotérmica se especifican la temperatura, T_F , y presión, P , de operación, así como las composiciones, $\{x_i\}$, y flujo, F , de entrada y se requiere encontrar V_F , L_F , $\{y_{Fi}\}$ y $\{x_{Fi}\}$. En la vaporización adiabática $Q = 0$ (no se agrega calor) se especifica P , H (entalpía de la mezcla), $\{x_i\}$ y F y las incógnitas son $[T_F, V_F, L_F, \{y_{Fi}\}, \{x_{Fi}\}]$. En este caso se requiere adicionalmente el balance de entalpía (Fig. 2.1)

$$FH = V_F H_F^V + L_F H_F^L \quad (2-20)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones se usan métodos iterativos o de convergencia rápida como regla falsa y Newton-Raphson.

2.1.4. DESTILACION POR CARGAS.

El concepto básico de la destilación por cargas consiste en calentar lentamente una mezcla líquida que se carga en un recipiente con calentamiento de tal forma que el líquido vaporiza continuamente. El vapor se retira y se condensa tan pronto como se genera y se puede coleccionar en una serie de diferentes fracciones. Esta forma de destilación permite que la primera

fracción de vapor esté más rica en el componente más volátil y progresivamente las siguientes fracciones están más ricas en los componentes de volatilidad menor.

Cuando esta operación se realiza en una sola etapa se le denomina destilación simple o Rayleigh.

En la práctica la destilación por cargas usualmente se realiza incorporando varias etapas mediante una columna que se coloca en la parte superior del recipiente hervidor. Este sistema es más eficiente y permite la separación de una mezcla de multicomponentes en un solo equipo.

El balance de materia en el hervidor se da por la siguiente ecuación (Rose, 1985):

$$\ln \left(\frac{L_o}{L_f} \right) = \int_{x_f}^{x_o} \frac{dx}{y-x} \quad (2-21)$$

donde el subíndice cero denota la condición inicial y f la condición final.

Normalmente, la parte derecha de la ecuación se integra gráficamente usando $1/(y-x)$ como ordenada y x como abcisa.

Smoker y Rose (Rose, 1985), extendieron esta ecuación para el caso de la destilación por cargas con varias etapas sobre el hervidor a la siguiente expresión

$$\ln \left(\frac{L_o}{L_f} \right) = \int_{x_{L_f}}^{x_{L_o}} \frac{dx_L}{y_D - x_L} \quad (2-22)$$

que relaciona la composición del fondo, con la composición del destilado. Las relaciones entre x_L y y_D se pueden obtener por pares en un diagrama de McCabe-Thiele a una relación L/V constante.

La composición promedio del destilado se obtiene por medio del balance global

$$\bar{y}_D (L_o - L_f) = L_o x_{L_o} - L_f x_{L_f} \quad (2-23)$$

2.1.5. DESTILACION CONTINUA POR MULTITETAPAS.

La destilación convencional ha alcanzado su máximo desarrollo en la operación continua por multietapas, la cual se describe esquemáticamente en la figura 2.2. El principio de esta operación consiste en permitir repetidas vaporizaciones y condensaciones de la mezcla que se está separando, a través de diferentes platos en los cuales entran en íntimo contacto el vapor que asciende por la columna y el líquido que desciende por la acción de la gravedad. El vapor se genera en el fondo de la columna mediante una vaporización parcial del líquido que ha llegado al hervidor. Este vapor asciende y finalmente llega a la parte superior de la columna donde se condensa. Una parte de

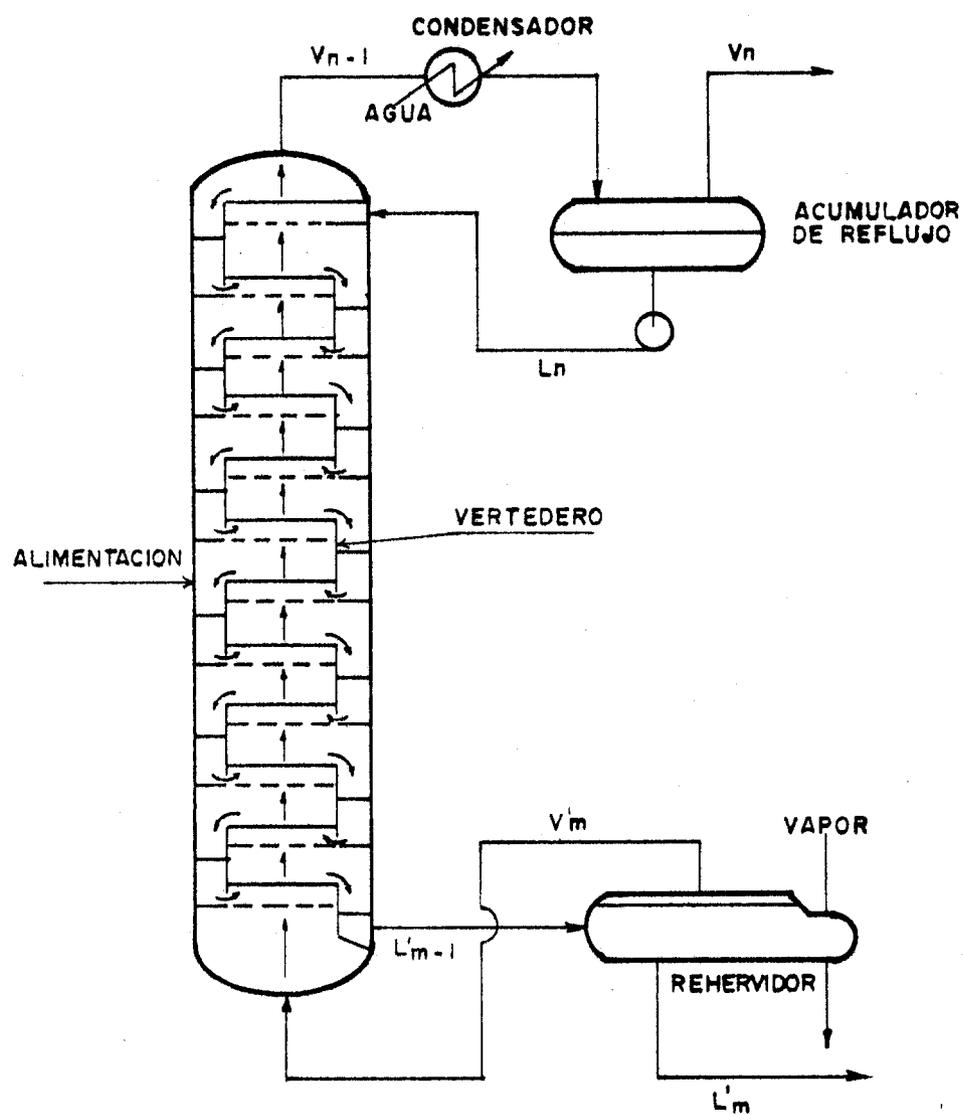


FIGURA 2.2.- TORRE DE DESTILACION CONTINUA POR MULTITAPAS

líquido se retira como producto y otra parte se regresa como reflujo, de tal forma que fluyen a contracorriente el líquido y el vapor. Así, en cada plato de la columna entra una corriente de líquido y una de vapor e igualmente sale otra corriente de líquido y otra de vapor. El vapor que entra a un determinado plato está más caliente que el líquido que llega, por lo que al entrar en contacto estas corrientes una fracción de vapor, rica en el componente pesado, se condensa, y, a su vez, una fracción de líquido, rica en el componente ligero, vaporiza. De esta forma, el vapor que sale del plato va enriquecido en el componente ligero y el líquido ha incrementado su fracción del componente pesado. Esta operación repetida varias veces en la columna permite obtener altas purezas en los extremos.

El diseño de una columna de destilación continua requiere información sobre tres datos básicos: el número de platos requeridos para realizar la separación deseada, el régimen de reflujo y la cantidad de calor requerida en el rehervidor. A partir de estos datos se obtiene el dimensionamiento físico del equipo.

Se han desarrollado diferentes métodos para calcular los datos básicos requeridos. En general, tales métodos parten de la consideración de que se alcanza el equilibrio termodinámico en cada plato. Para esto véase la figura 2.3, en la cual se muestra un plato arbitrario de una columna. Se usa la nomenclatura convencional que parte de la siguiente terminología: la sección superior al plato de alimentación se denomina zona de rectificación y se asigna como "n" a un plato de esta zona, en la

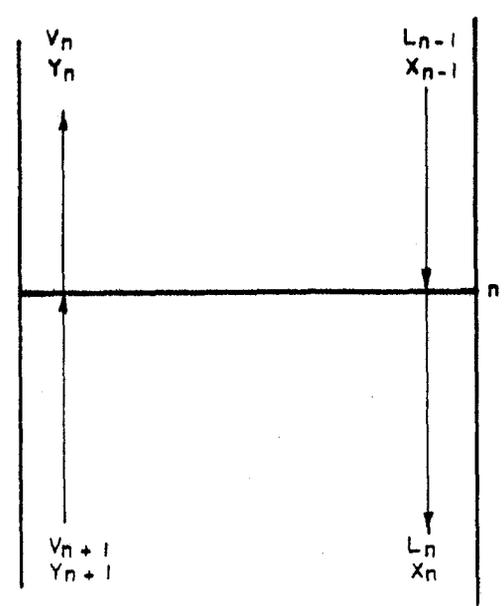


FIGURA 2.3.- PLATO DE EQUILIBRIO

cual el domo se considera como el primer plato; la sección inferior al plato de alimentación se denomina como zona de agotamiento y se asigna como "m" a un plato de esta sección, en la cual el fondo se numera como etapa 1. En el plato mostrado, la corriente L_{n-1} se mezcla con la corriente V_{n+1} y se supone que ocurre un mezclado perfecto de tal forma que las corrientes de vapor, V_n , y de líquido, L_n , que salen están en equilibrio termodinámico. En la práctica esto no es totalmente cierto y existe una diferencia entre los platos teóricos y los platos reales, lo que se concilia mediante un factor de eficiencia. Así, la mayoría de los métodos tradicionales de diseño parten de esta consideración. En forma breve se describen a continuación los métodos más conocidos.

Método de McCabe-Thiele.

Este es un método clásico para tratar problemas de destilación binaria y su mayor utilidad radica en que se obtiene una solución gráfica que proporciona un entendimiento visual de la facilidad o dificultad de las separaciones, por lo que es apropiado para enseñanza.

Los balances de materia se obtienen con la suposición de flujos molares constantes y con las ecuaciones obtenidas se construye el sistema en cuestión en una gráfica de equilibrio x/y donde se trazan las líneas de operación de cada sección de la columna, superimponiendo la línea de alimentación. Los platos teóricos se grafican como se muestra en la figura 2.4.

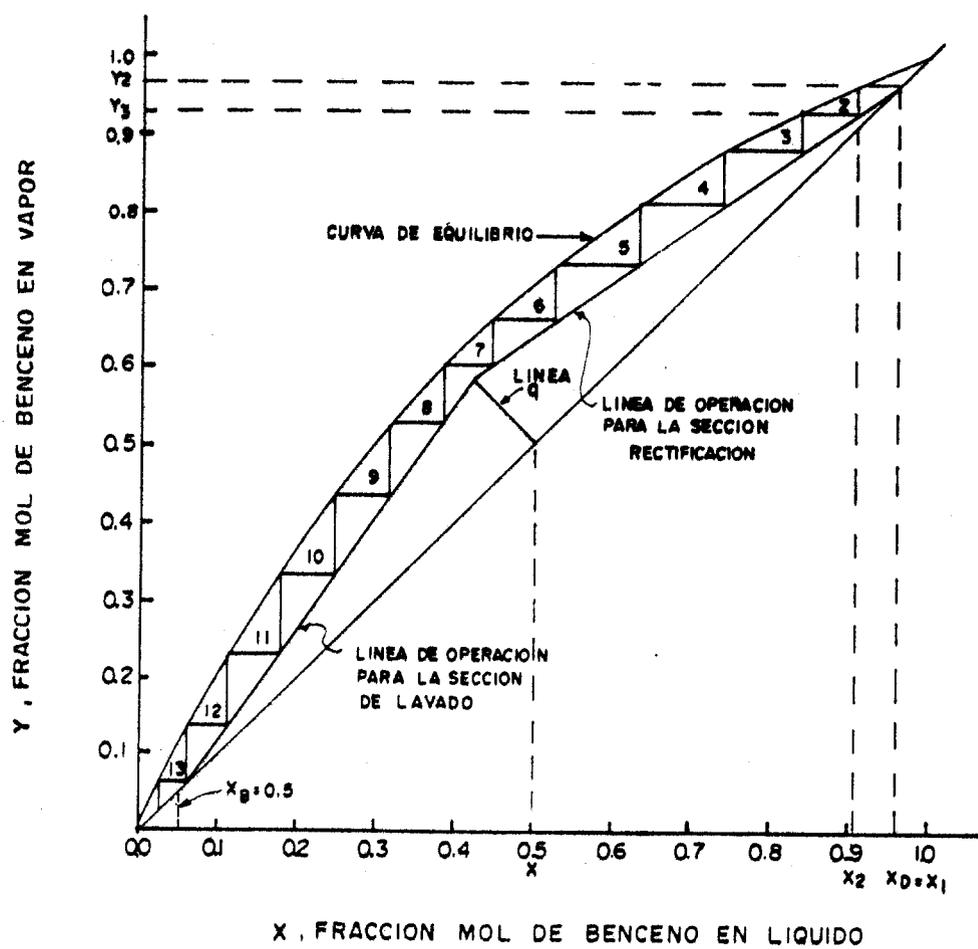


FIGURA 2.4.- DIAGRAMA DE McCABE-THIELE PARA EL SISTEMA BENCENO-TOLUENO

El método de Ponchon y Savarit

Como el anterior, este es un método gráfico clásico para problemas de destilación binaria. Se diferencia del anterior en que los flujos molares no se suponen constantes, debido a calores de mezclado que no son despreciables y/o a que los calores latentes molares de vaporización de los componentes son diferentes, de manera que los flujos en cada plato se modifican. Por esta razón, el balance de materia se combina con el balance de entalpía, lo que permite no sólo obtener las composiciones del líquido y el vapor en la columna, sino que también se obtiene información de las funciones del condensador y del rehervidor.

Las ecuaciones requeridas por este método, además de los balances globales de materia son el balance global de entalpía para toda la columna, los balances de materia y entálpico para cada plato, incluyendo el condensador y el rehervidor, así como las relaciones de reflujo a lo largo de toda la columna.

Tales ecuaciones representan líneas en un diagrama entalpía-composición a partir de las cuales se realizan los trazos que permiten determinar el número de platos teóricos.

Soluciones numéricas en destilación binaria

Los métodos anteriores, si bien proporcionan un buen entendimiento por la interpretación gráfica de los resultados, no son recomendables para diseño por varias razones.

- 1). Normalmente una columna de destilación no se diseña en un solo conjunto de cálculos, sino que se requiere analizar diferentes opciones y esto representa un trabajo muy laborioso para tratarlo gráficamente.
- 2). Para separaciones difíciles y de alta pureza se requieren muchos platos cerca del condensador y esto es difícil de visualizar en una gráfica. La elaboración de diagramas extendidos se vuelve un trabajo arduo.
- 3). El perfil de temperaturas plato por plato es información importante para el análisis y control de columnas de destilación. El método de McCabe-Thiele no proporciona estos datos. Adicionalmente, este método tiene la desventaja de suponer flujos molares constantes.

Por las razones anteriores, la práctica actual de diseño en destilación, consiste en resolver numéricamente los balances de materia y energía plato por plato, partiendo del plato del fondo hasta alcanzar la composición del destilado. Ya que en destilación binaria se conocen las composiciones de los productos de salida, el cálculo se realiza en un solo paso.

El uso de la computadora para resolver las ecuaciones de diseño de destilación, permite realizar un gran número de corridas en corto tiempo.

Métodos cortos para destilación de multicomponentes

En destilación de multicomponentes no se pueden definir, como en destilación binaria, las composiciones del fondo y del

destilado, debido a la presencia de los otros componentes. Existe un número infinito de soluciones para alcanzar la composición deseada de un componente. Debido a esto, en multicomponentes se deben seleccionar dos componentes clave, de forma que exista una solución única que se pueda obtener por algún método apropiado. Normalmente se selecciona un componente clave ligero, lk , acerca del cual se cuenta con suficiente información para especificar su recuperación en el destilado, y un componente clave pesado, hk , para especificar su recuperación en el producto del fondo. Sin embargo, el hecho de alcanzar una única solución al problema planteado, no implica que se obtenga el mejor destilado. Esta situación plantea un proceso iterativo en toda la columna, para lo cual los métodos de convergencia desempeñan un papel de gran importancia.

El enfoque para resolver un problema de destilación de multicomponentes ya no es el de diseño, sino el de simulación y ello implica iniciar los cálculos con una buena propuesta. La técnica normal para plantear esta propuesta consiste en usar un método analítico corto, que proporciona un estimado del resultado.

Los procedimientos cortos actuales se basan en el trabajo de Fenske, Underwood y Gilliland. La combinación de estos proporciona un cuadro completo de la relación entre el número de platos y la razón de reflujo, y proporciona estimados de las separaciones esperadas de los otros componentes.

La ecuación de Fenske relaciona la composición de los componentes clave del destilado y del fondo a través de su volatilidad relativa, α , y del número de platos N mediante la

152519

expresión

$$\alpha^{N_{\min}} = \frac{\left(\frac{x_{lk}}{x_{hk}} \right)_D}{\left(\frac{x_{lk}}{x_{hk}} \right)_B} \quad (2-24)$$

Para determinar la razón de reflujo mínima, L/V , en un sistema de multicomponentes, se usa la relación de Underwood.

$$\left(\frac{L}{V} \right)_{\min} = \sum_{i=1}^c \left(\frac{x_{Di}}{\frac{\alpha_i - \theta}{\alpha_i}} \right) - 1 \quad (2-25)$$

donde θ es una variable que se determina por la solución de la ecuación

$$\sum_{i=1}^c \frac{\alpha_i x_{Fi}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad (2-26)$$

La relación de Gilliland es una gráfica obtenida para una gran cantidad de sistemas en la que relaciona la razón de reflujo y la relación de reflujo mínima, determinada de la ecuación de Underwood, para obtener el número de platos teóricos N .

Para fines computacionales, se usa un ajuste de tal curva de Gilliland publicado por Edjulee:

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 0.75 - 0.75 \left(\frac{\frac{L}{D} - \left(\frac{L}{D}\right)_{\min}}{\left(\frac{L}{D} + 1\right)} \right)^{0.5688} \quad (2-27)$$

Para predecir la distribución esperada de los componentes no clave se usa nuevamente la ecuación de Fenske

$$\frac{\left(\frac{x_{D,1}}{x_{D,lk}} \right)}{\left(\frac{x_{B,1}}{x_{B,lk}} \right)} = \left(\frac{\alpha}{\alpha_{lk}} \right)^N \quad (2-28)$$

Finalmente, para predecir el punto de alimentación existen varios métodos. Uno de ellos es la ecuación de Kirkbride

$$N_F = \frac{N}{1 + X} \quad (2-29)$$

donde:

$$X = \left\{ \frac{F - D}{D} \frac{(x_F)_{lk}}{(x_F)_{lk}} \left(\frac{(x_B)_{lk}}{(x_D)_{lk}} \right)^2 \right\}^{0.206}$$

Estos métodos no son exactos ya que se basan en sistemas ideales y hay varias restricciones que limitan su uso. El caso común de volatilidades relativas no constantes origina resultados erróneos. Aún así, estos métodos se usan para iniciar las

simulaciones de multicomponentes. Algunas veces no se pueden identificar fácilmente los componentes clave y, en ese caso, la práctica consiste en usar diferentes claves, comparar resultados y seleccionar un punto de partida.

Métodos rigurosos en destilación de multicomponentes.

Hasta el presente, los métodos que se emplean para resolver un problema de destilación de multicomponentes deben manejar cada plato de una columna y determinar las relaciones de equilibrio para cada componente en el plato.

El balance de materia debe escribirse para cada componente

$$V_{n-1} y_{1,n-1} + L_{n+1} x_{1,n+1} = V_n y_{1,n} + L_n x_{1,n} \quad (2-30)$$

Generalmente, junto con las ecuaciones de balance de materia, se resuelven también las ecuaciones del balance de entalpía en cada plato:

$$H_{n-1}^V V_{n-1} + H_{n+1}^L L_{n+1} = H_n^V V_n + H_n^L L_n + h_d \quad (2-31)$$

donde h_d es calor perdido en cada plato.

La información que se obtiene al resolver el balance de entalpía es buena en la mayoría de los casos. Sin embargo, Rose (1985) considera que la diferencia en el cálculo de platos con la

ecuación (2-31) o sin ella no es apreciable y, en cambio, incrementa el tiempo computacional. La razón principal para lo anterior, según observa Rose (1985), es que el equilibrio líquido-vapor difícilmente se altera por el balance de entalpía.

En cada plato se tienen como variables x_1 , y_1 , L , V y T , para un sistema de c componentes, lo que da $2c + 3$ variables. Normalmente, esto implica un número grande de ecuaciones que se deben resolver. Estas ecuaciones tienen una forma especial: excluyendo el domo y el plato del fondo, las variables están conectadas solamente a los platos superior e inferior. Los platos de los extremos son las excepciones porque se conectan al balance global de la columna.

El procedimiento de solución para satisfacer el balance de materia generalmente es iterativo. Los métodos son variados y se pueden agrupar en métodos de cálculo plato por plato, métodos matriciales y métodos de relajación.

Los métodos de cálculo plato por plato, conocidos como métodos de Lewis-Matheson, aprovechan la naturaleza diagonal de la matriz de ecuaciones y aplican un procedimiento iterativo para satisfacer el balance de materia. Los procedimientos de iteración son variados e incluyen formas de sustituciones sucesivas, métodos Newton-Rapson y de la secante multidimensional.

Los métodos plato a plato tienen severas fallas. En una computadora, frecuentemente los cálculos se interrumpen porque algunas fracciones se vuelven negativas o mayores de uno y se generan inestabilidades que evitan la convergencia. Se han desarrollado varias formas para reducir este problema como son el

calcular solamente una parte de la columna hasta convergencia, o iniciar cálculos en los dos sentidos, sin embargo, implican mayor tiempo computacional y las inestabilidades solamente se reducen. Debido a ello, los métodos de Lewis-Matheson no son muy utilizados.

Los métodos matriciales no tienen el problema de inestabilidad de los cálculos plato por plato, ya que las ecuaciones se resuelven por tipo y no por plato. Este tipo de métodos se conocen como métodos de Thiele-Geddes y se caracterizan porque las ecuaciones se transforman para resolverlas. La forma usual de transformar las ecuaciones es usar flujos molares de cada componente en el líquido y el vapor como principales variables. Se ha reportado una diversidad de arreglos de las ecuaciones para satisfacer el balance de materia. Holland (1981) observó que la convergencia o divergencia de un procedimiento de cálculo no solamente depende de la elección inicial de las variables independientes sino también del orden preciso y arreglo de cada ecuación del conjunto. Con esta base, Holland (1981) formula los balances de materia por componente y las relaciones de equilibrio como una matriz tridiagonal. Sin embargo, se presentó el problema de que el destilado total calculado a partir del balance global y los regímenes de flujo de destilado totales especificados no concordaban. Para ajustar esto, desarrolló un procedimiento conocido como el método θ , que consiste en encontrar un valor θ que satisfaga el balance de materia calculado y el especificado. Las ecuaciones resultantes en este procedimiento se pueden resolver por el método de

Newton-Raphson. La principal desventaja de los métodos matriciales es que se debe resolver para un mayor número de variables. No obstante, actualmente tienen una gran popularidad, debido a su buena convergencia.

Los métodos de relajación involucran el cálculo del perfil de estado estable de una columna de destilación por integración de un modelo dinámico del sistema a tiempo infinito, donde infinito se toma como un tiempo suficientemente largo para alcanzar un perfil asintótico. El modelo se compone de ecuaciones diferenciales que describen los cambios de composición en el líquido retenido en cada plato. A partir de estos cambios se derivan los flujos de entrada y salida de cada plato. Para esto es necesario partir del perfil inicial al arranque de la columna y la integración se lleva hasta que se alcanza el estado estable. Este método de solución es el más confiable ya que no tiene los problemas de inestabilidades asociadas a los cálculos algebraicos. Sin embargo, requiere tiempos computacionales entre 10 y 100 veces mayores que los métodos algebraicos. Todos los métodos rigurosos de destilación de multicomponentes tienen ventajas y desventajas, tal como se describió, y no se conoce aún un método totalmente confiable para todos los tipos de problemas. Debido a esto, los programas de destilación comerciales más robustos contienen diferentes algoritmos de convergencia, cada uno con diferentes fortalezas y debilidades, de manera tal que al fallar un algoritmo, se prueba otro. En el cuadro 2.1 se enlistan algunos simuladores comerciales con capacidad reconocida para cálculos en destilación.

CUADRO 2.1
PAQUETES COMPUTACIONALES COMERCIALES
RELACIONADOS CON DESTILACION

PROVEEDOR	PAQUETE COMPUTACIONAL	CARACTERISTICAS
DB Robinson & Associates Ltd.	AMSIM	Simula fraccionadores usando el algoritmo Ishii-otto
	COLUM	Especializado para simular no-equilibrio en procesos de alcanolamina.
ASPEN Technology Inc.	ASPEN PLUS	Simulación de diagramas de flujo sin limitaciones dimensionales.
	RATEFRAC	Resuelve problemas de destilación con el enfoque basado en fenómenos de transporte.
	BATCHFRAC	Para columnas de destilación por lotes
Engineering Micro Systems Inc.	BASIS	Un simulador riguroso de destilación por cargas que permite rastrear la destilación en progreso. La base de datos contiene 80 productos químicos comunes.
Bryan Research & Engineering, Inc.	TSWEET	Programa para simulación de una planta de aminas
	PROSIM	Un simulador general para procesos comunes.
	DEHY	Simulador para plantas de deshidratación de glicoles.

CUADRO 2.1. (Continuación)

PROVEEDOR	PAQUETE COMPUTACIONAL	CARACTERISTICAS
COADE/ Chemstations, Inc.	CHEMCAD II	Simulador de diagramas de flujo para uso en una PC. El banco de datos tiene más de 650 compuestos y se pueden usar datos experimentales con un paquete de regresión.
JSD Simulation Service Company	ASPEN/SP*	Simulador de diagramas de flujo que usa un algoritmo para destilación rigurosa. No hay límites en el tamaño del diagrama de flujo.
Gulf Publishing Company	CHEMCALC 1	Calcula número mínimo de platos, reflujo, destilación instantánea, etc.
	CHEMCALC 11	Simulador de un proceso de aminas
	CHEMCALC 16	Simulador para extracción líquido-líquido
Chem Share Corporation	DESIGN II	Simulador de diagramas de flujo con salida gráfica, banco de datos con 870 compuestos
Paul Barton, P.E.	DIST	Paquete interactivo para destilación semi-rigurosa de multicomponentes. El programa realiza los cálculos etapa por etapa del fondo al domo.
Engrsoft	DISTIL SIMU	Genera un diagrama de McCabe-Thiele y grafica las etapas. Incluye un paquete de regresión no lineal para conjuntos de datos X, Y.

CUADRO 2.1. (Continuación)

PROVEEDOR	PAQUETE COMPUTACIONAL	CARACTERISTICAS
Nutter Engineering Div.	Electronic Design Manual	Predice el desempeño hidráulico de platos y empaques Nutter.
Hyprotech	HYSIM	Simulador que usa menús interactivos. La base de datos contiene más de 800 compuestos. Programada en C. No tiene límite en el tamaño de diagramas de diagramas de flujo.
Norton Company	Norton Packed Tower Design Program	Estima el diámetro de columna requerido y la altura para columnas que usan empaques de Norton.
Deerhaven Technical Software	PD-PLUS	Simulador de diagramas de flujo para PC. Tiene una biblioteca con 59 compuestos y maneja hasta 60 compuestos, 300 corrientes y 100 etapas de equilibrio
Simulation Sciences Inc.	PRO/II	Simuladores de diagramas de flujo que usan archivos con palabras clave y menús para entrada de datos. Varios modelos disponibles para destilación
Kesler Engineering, Inc.	SPARO	Sistema de análisis de diagramas de procesos que puede adaptarse a necesidades individuales. Maneja hasta 50 operaciones unitarias, 10 corrientes y 50 compuestos.
Prosystech, Inc.	SPEEDUP	Simulador de procesos integrados que usa la estructura orientada con ecuaciones para procesos en estado estable y transitorio. Genera reportes y salidas gráficas.

CUADRO 2.1. (Continuación).

PROVEEDOR	PAQUETE COMPUTACIONAL	CARACTERISTICAS
Sulzer Brothers Limited	SULPAK-PC	Programa para diseño y dimensionamiento de columnas llenadas con empaques Sulzer
TECS Software, Inc.	DISTIL-S DISTIL-2 DISTIL-R	Programas para simulación de destilación con métodos cortos y rigurosos.
	PACKTWR	Calcula diámetro y caída de presión de torres empacadas
	SWS1	Determina el número de platos requeridos para reducción de amonía y sulfuro de hidrógeno en desorción de agua.
	VALTRAYG	Diseño de platos de válvulas
	AMINE 1	Para modelamiento de plantas de aminas.
SimSci Simulation Sciences, Inc.	PROCESS	Cuenta con programas de destilación instantánea, destilación por cargas, destilación electrolítica y destilación extractiva.

(Stadig, 1991)

2.1.6. SECUENCIACION DE COLUMNAS.

La secuenciación de columnas de destilación ha recibido una gran atención en los últimos 20 años debido a la necesidad de optimizar los costos de procesamiento, principalmente de energía, para la separación de mezclas de multicomponentes.

El problema que se pretende resolver consiste en establecer el orden de separación de componentes que implique el mínimo costo de energía. En una mezcla de multicomponentes, el número de secuencias posibles es bastante grande y para resolver el problema anterior se debe escoger la mejor ruta. Para encontrar la ruta óptima se han desarrollado diferentes métodos.

Los primeros métodos desarrollados se basaban fuertemente en reglas heurísticas (Thompson y King, 1972). Otro grupo de métodos emplean estrategias evolucionarias (Seader y Westerberg, 1977; Nath y Motard, 1981) y otros métodos emplearon técnicas de bifurcación y acotación (Naka et. al., 1982). En general, estos métodos encuentran una ruta de bajo costo, suponiendo que los requerimientos de calentamiento y enfriamiento se proporcionan como servicios. Sin embargo, en destilación es posible utilizar el calor de un condensador en el hervidor de otra columna que opera a más baja temperatura. Este tipo de síntesis de secuencias de destilación con integración de energía se ha tratado también con métodos de programación dinámica (Rathore et. al., 1974 a,b) y técnicas de bifurcación y acotación (Morari y Faith, 1980; Andrecovich y Westerberg, 1985). En la mayoría de los métodos, la heurística desempeña un papel importante.

Si bien es posible encontrar, con alguno de los métodos mencionados, una ruta óptima para separar una mezcla de multicomponentes, en la práctica muchas veces no es factible instrumentarla debido a que se presentan problemas de estabilidad y control (Rose, 1985; Fidkowski y Krolikowski, 1986) poca flexibilidad para la operación y niveles de temperatura y cargas calóricas inadecuadas. Debido a esto, generalmente los esquemas óptimos deben modificarse para satisfacer los requerimientos de operación.

2.1.7. ELEMENTOS INTERNOS DE LAS COLUMNAS DE DESTILACION.

El proceso de transferencia de masa que ocurre en una columna de destilación se lleva a cabo en platos a través de los cuales se burbujea el vapor en una masa de líquido, o bien en secciones empacadas a través de los cuales fluyen a contracorriente el líquido y el vapor, estableciéndose el intercambio de masa de acuerdo con el área superficial dispuesta por el empaque.

La relación entre los platos teóricos calculados y los platos reales de una columna de destilación se establece a través de diferencias de separación de platos que se atribuyen al diseño mecánico del tipo de plato. Existen varias formas de definir esta eficiencia:

a). Eficiencia punto

$$E_{OG} = \frac{Y_{n,local} - Y_{n+1,local}}{Y_{local}^* - Y_{n+1,local}} \quad (2-32)$$

Y_{local}^* es la concentración en equilibrio con x_{local} . La denominación "local" significa que la composición del líquido se supone constante en la dirección vertical, el subíndice G significa que se usan concentraciones del gas y "O" enfatiza que E_{OG} es una medida de la resistencia total a la transferencia de masa para ambas fases.

b). Eficiencia de Murphree para el vapor.

$$E_{MV} = \frac{Y_n - Y_{n+1}}{Y_n^* - Y_{n+1}} \quad (2-33)$$

Y_n^* es la composición de la fase vapor que está en equilibrio con el líquido real que sale del plato.

c). Eficiencia Murphree para la fase líquida.

$$E_{ML} = \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n^* - x_{n-1}} \quad (2-34)$$

x_n^* es la composición del líquido que estaría en equilibrio con el

vapor real que sale del plato.

d). Eficiencia de temperatura de vapor del plato.

$$E_{TV} = \frac{T_n^V - T_{n+1}^V}{T_n^{*V} - T_{n+1}^V} \quad (2-35)$$

T_n^{*V} es la temperatura del vapor en equilibrio con la del líquido que sale del plato real.

e). Eficiencia de temperatura del líquido para el plato.

$$E_{TL} = \frac{T_n^L - T_{n-1}^L}{T_n^{*L} - T_{n-1}^L} \quad (2-36)$$

T_n^L y T_{n-1}^L son las temperaturas de las corrientes líquidas denotadas por los subíndices apropiados y T_n^{*L} es la temperatura de la corriente del líquido en equilibrio con la del vapor que sale del plato real

f). Eficiencia global.

$$E_o = \frac{\text{número de platos teóricos}}{\text{número de platos reales}} \quad (2-37)$$

aunque esta definición de eficiencia es muy sencilla y muy usada, no es representativa de la operación de la columna, debido a que las diferentes composiciones en los diversos platos originan diferentes eficiencias de platos.

Las eficiencias de temperatura no son muy usadas en la práctica de destilación, ya que es más sencillo trabajar con las eficiencias Murphree. Las eficiencias punto bien determinadas son sorprendentemente constantes para los sistemas de destilación en un valor de eficiencia de plato estándar de alrededor de 0.7.

Las eficiencias Murphree presentan mayores desviaciones, aunque por lo general se encuentran valores entre 0.6 y 0.9. Los valores de estas eficiencias están relacionados con el sistema y el tipo de plato, como se observa en el cuadro 2.2, donde se indican los tipos de platos más comunes.

Muchos fabricantes proveen sus propios diseños patentados de platos. Cada uno reclama sus propias ventajas y se soporta en datos de desempeño obtenidos por el mismo fabricante.

Los empaques son materiales con una área superficial grande por unidad de volumen y proveen una fracción de huecos que se usa para llenar la columna de destilación. El líquido fluye hacia abajo sobre la superficie, irrigando el empaque. El vapor fluye a través de los huecos y la transferencia de masa ocurre en la interface líquida. La efectividad del empaque depende del área superficial y del coeficiente de transferencia de masa.

CUADRO 2.2
EFICIENCIAS DE PLATO PARA SISTEMAS DE
DESTILACION REPORTADOS

TIPO DE PLATO	SISTEMA	DIAM (m)	EFICIENCIA MEDIDA (E_{MV})
Cachuchas de burbujeo	etanol/agua	0.75	83 - 87
Cachuchas de burbujeo	metanol/agua	1.00	90 - 95
Cachuchas de burbujeo	bencenol/tolueno	0.50	70 - 80
Malla	etanol/agua	0.75	75 - 85
Malla	metanol/agua	1.00	90 - 100
Malla	bencenol/tolueno	0.50	60 - 80
Válvulas	etanol/agua	0.75	75 - 83
Válvulas	metanol/agua	1.00	70 - 80
Válvulas	benceno/tolueno	0.50	75 - 80
Cachuchas de burbujeo	etilbenceno/estireno		67
Malla	etilbenceno/estireno		70
Válvulas	etilbenceno/estireno		76

(Rose, 1985)

CUADRO 2.3
CARACTERISTICAS DE EMPAQUES

EMPAQUE	TAMANO NOMINAL (mm)						
	6	13	19	25	38	50	76
Anillos Raschig cerámicos							
Espesor de pared, mm	0.8	2.4	2.4	3	4.8	6	9.5
ϵ	0.73	0.63	0.73	0.73	0.71	0.74	0.78
a_p (m^2/m^3)	787	364	262	190	125	92	62
Anillos Rasching metálicos							
Espesor de pared, mm	0.8	0.8	0.8	0.8	1.6	1.6	1.6
ϵ	0.69	0.84	0.88	0.92	0.9	0.92	0.95
a_p (m^2/m^3)	774	420	274	206	135	103	68
Anillos Pall plásticos							
ϵ				0.9	0.91	0.92	
a_p (m^2/m^2)				206	128	102	
Anillos Pall metálicos							
ϵ				0.94	0.95	0.96	
a_p (m^2/m^3)				206	128	102	
Monturas Berl cerámicas							
ϵ	0.6	0.63	0.66	0.69	0.75	0.72	
a_p (m^2/m^3)	899	466	269	249	144	105	

CUADRO 2.3. (continuación)

EMPAQUE	TAMAÑO NOMINAL (mm)						
	6	13	19	25	38	50	76
Monturas Intalox cerámicas							
ϵ	0.75	0.78	0.77	0.775	0.85	0.79	
α_p (m^2/m^3)	984	623	335	256	195	118	
Super Intalox plásticos							
ϵ				0.9		0.93	0.94
α_p (m^2/m)				207		108	89

(Treybal, 1980)

En general, el tamaño y tipo de empaque debe seleccionarse para proporcionar una razón (longitud/diámetro) apropiada para la columna y garantizar un régimen hidrodinámico adecuado.

En el cuadro 2.3 se presentan algunos empaques convencionales con algunas de sus principales características.

El uso de columnas de platos contra columnas empacadas en la práctica depende muchas veces de preferencias del diseñador. Existen argumentos reportados en favor de uno y otro tipo de columna. Sin embargo, existen algunas ventajas claras que en ciertos casos orientan la decisión. En el cuadro 2.4 se presenta una comparación de ventajas para ambos tipos de columna.

ALTURAS DE COLUMNAS DE DESTILACION EMPACADAS

El conocimiento en torres de destilación empacadas es bastante convencional pero es importante porque es la base que permite conocer los nuevos desarrollos en materiales de empaque.

La altura de una torre de destilación empacada depende de las propiedades y regímenes de flujo de las corrientes en contacto, así como del tipo de empaque que se emplee. En este tipo de equipo los cambios de concentración son continuos a lo largo de la torre y no discretos como en las torres de platos.

La altura del empaque de una torre se obtiene por la siguiente expresión para la fase gas:

CUADRO 2.4.

COMPARACION DE VENTAJAS DE COLUMNAS DE PLATOS Y EMPACADAS

Ventajas de columnas de platos

- (1) Costos de capital más bajos en diámetros grandes (> 1 m)
- (2) Menos sensible a alimentaciones sucias y fácil de limpiar.
- (3) Preferida sobre el empaque a flujos bajos de líquido, ya que no hay problemas de humectación.
- (4) Preferida al empaque a flujos altos de líquido, debido a que el flujo de vapor no es tan dependiente del flujo del líquido.
- (5) Es posible la remoción de calor incorporando serpentines de enfriamiento en los platos.

Ventajas de columnas empacadas.

- (1) Costos de capital más bajos en diámetros pequeños (< 1 m)
- (2) Baja caída de presión por etapa teórica (importante para destilación a vacío y productos sensibles al calor).
- (3) Más resistente a la corrosión, con un rango amplio de materiales de construcción disponibles.
- (4) Preferido para sistemas que forman espuma.
- (5) Baja retención, ventajosa para destilación por cargas.

152519

$$z = \int_0^z dz = \int_{y_{A,a}}^{y_{A,b}} \frac{\beta_{1-v}}{k'_y a_p} \frac{d(y y_A)}{(y_{A1} - y_A)} \quad (2-38)$$

donde k'_y es el coeficiente de transferencia de masa para la fase gas y β_{1-v} es un factor de corrección del flujo de bulo (Hines y Maddox, 1984, p. 150).

Para la fase líquida la expresión equivalente es

$$z = \int_0^z dz = \int_{x_{A,a}}^{x_{A,b}} \frac{\beta_{L-1}}{k'_x a_p} \frac{d(Lx_A)}{(x_A - x_{A1})} \quad (2-39)$$

En condiciones ideales de transferencia de masa equimolar y regímenes de flujo de vapor y líquido constantes, $\beta = 1$ y por lo tanto los valores

$$H_{tG} = \frac{V}{k'_y a_p}, \quad H_{tL} = \frac{L}{k'_x a_p} \quad (2-40)$$

definidos como las alturas de la unidad de transferencia para la fase gas y la fase líquida, las cuales se consideran constantes. De acuerdo con esto las ecuaciones (2-38) y (2-39) se expresan como

$$z = H_{tG} \int_{y_{A,a}}^{y_{A,b}} \frac{dy_A}{(y_{A1} - y_A)} = H_{tG} N_{tG} \quad (2-41)$$

$$z = H_{tL} \int_{x_{A,a}}^{x_{A,b}} \frac{dx_A}{(x_A - x_{A1})} = H_{tL} N_{tL} \quad (2-42)$$

donde N_{tG} y N_{tL} representan el número de unidades de transferencia. Si la curva de operación es aproximadamente recta, las expresiones anteriores se pueden escribir como:

$$z = H_{tOG} \int \frac{dy_A}{(y_A^* - y_A)} = H_{tOG} N_{tOG} \quad (2-43)$$

$$z = H_{tOL} \int \frac{dx_A}{(x_A - x_A^*)} = H_{tOL} N_{tOL} \quad (2-44)$$

donde y_A^* y x_A^* representa valores en equilibrio, y

$$H_{tOG} = \frac{V}{K'_y a_p} \quad H_{tOL} = \frac{L}{K'_x a_p} \quad (2-45)$$

están representados en función de los coeficientes globales de transferencia de masa K'_y y K'_x .

En la práctica los regímenes de flujo realmente no son constantes. Si las variaciones en los flujos son apreciables es más correcto utilizar las ecuaciones (2-38) y (2-39).

2.1.8 CONTROL DE COLUMNAS DE DESTILACION.

El control de columnas de destilación es un tema de gran interés en la actualidad, ya que presenta problemas importantes derivados de interacciones y no linealidades que con frecuencia ocurren en la práctica. Debido a ello hay un gran número de estudios orientados al análisis de configuraciones de control planteados con diferentes enfoques (Skogestad, 1992).

En principio, un buen control de una columna de destilación se puede alcanzar si se ha logrado un buen diseño. El objetivo básico de un esquema de control es asegurar que la columna opere según se definió por el diseño. Un objetivo más avanzado es que se puedan compensar desviaciones de las condiciones de diseño y que se logre una operación estable dentro de rangos amplios de desviaciones o perturbaciones. Finalmente, es importante cuidar los costos de la instrumentación y equipo adicional requerido, así como buscar la reducción en costos de operación, principalmente del consumo de energía.

Para una columna de destilación binaria un buen diseño se puede identificar por un perfil de concentraciones como el que se muestra en la figura 2.5. Diseños o condiciones de operación no adecuados generan perfiles como los que se muestran en las figuras 2.6 a 2.10.

En la práctica, la medición directa de concentraciones es muy costosa para utilizarla en los esquemas de control. En su lugar, frecuentemente se utiliza la temperatura en diferentes puntos de la columna, como variable medida. Un perfil de temperaturas

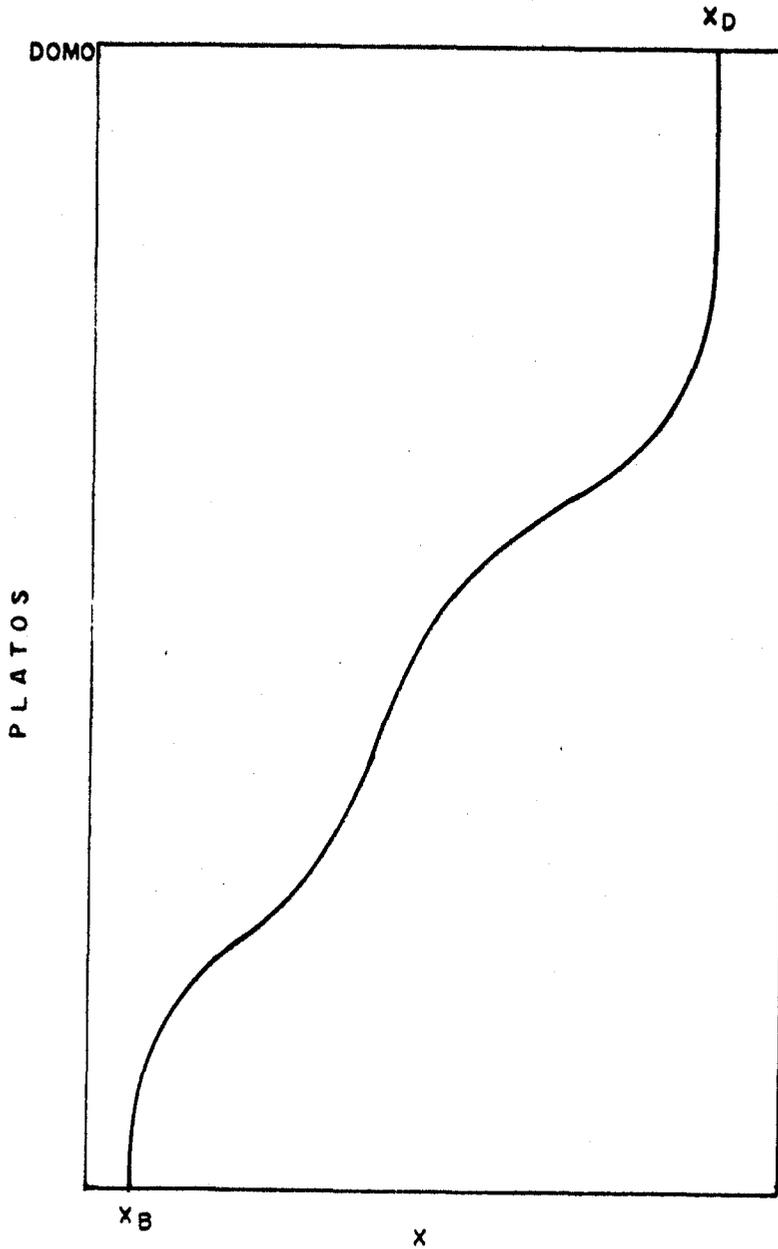


FIGURA 2.5.- PERFIL CORRECTO DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA

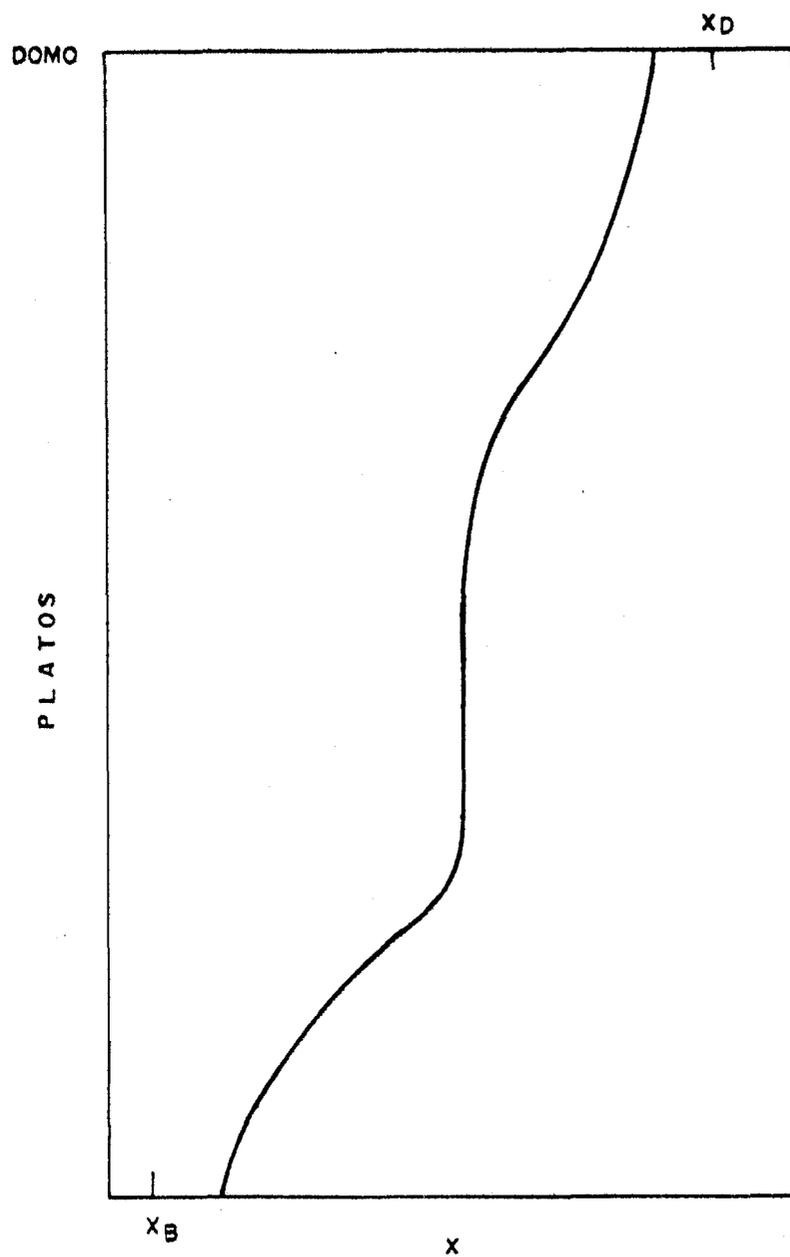


FIGURA 2.6.- PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA OPERANDO A UNA RAZON DE REFLUJO MUY BAJA

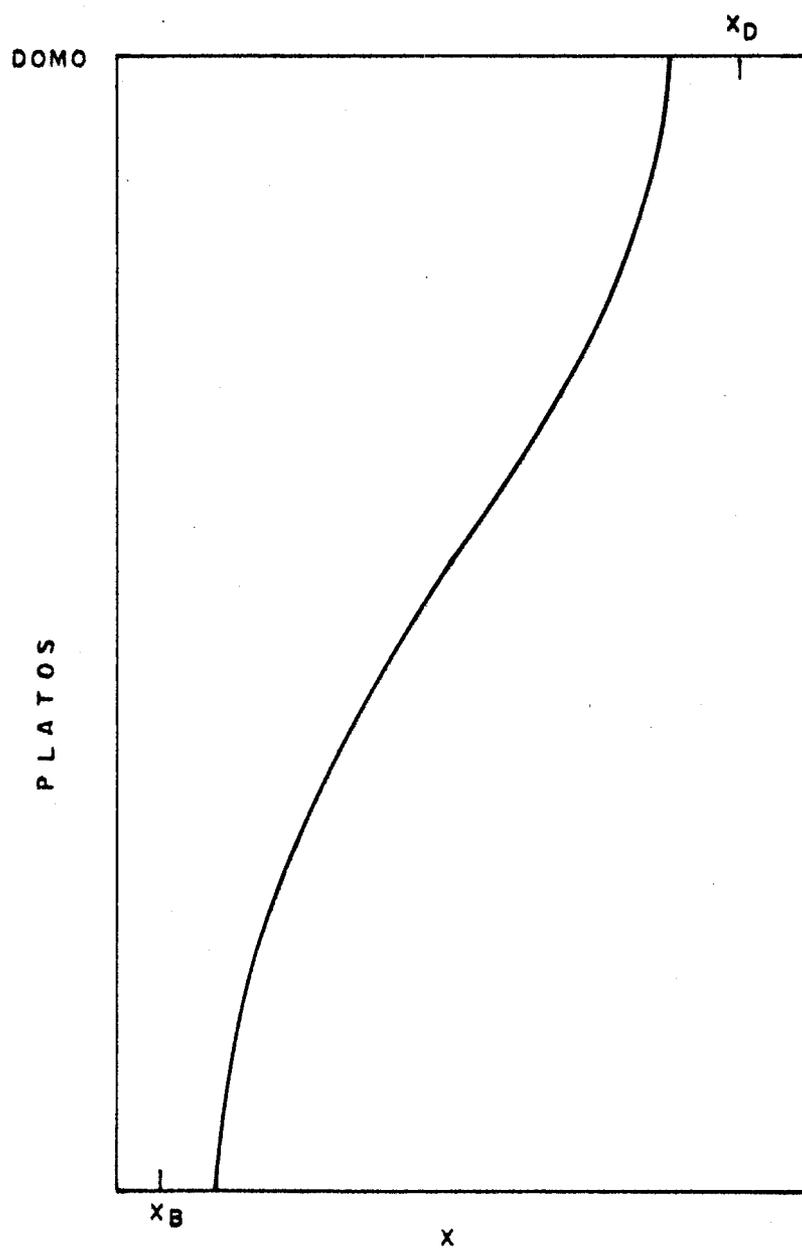


FIGURA 2.7.- PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA CON MUY POCOS PLATOS

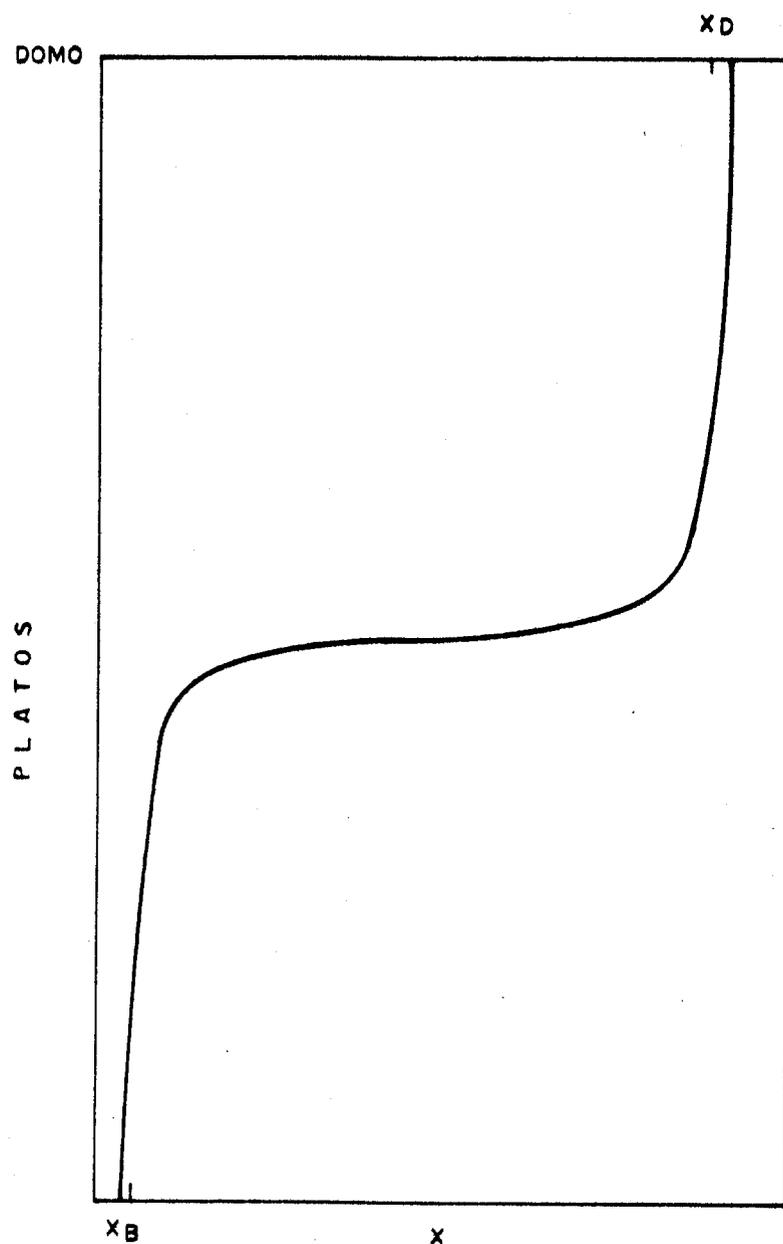


FIGURA 2.8.- PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA OPERANDO A UNA RAZON DE REFLUJO MUY ALTA

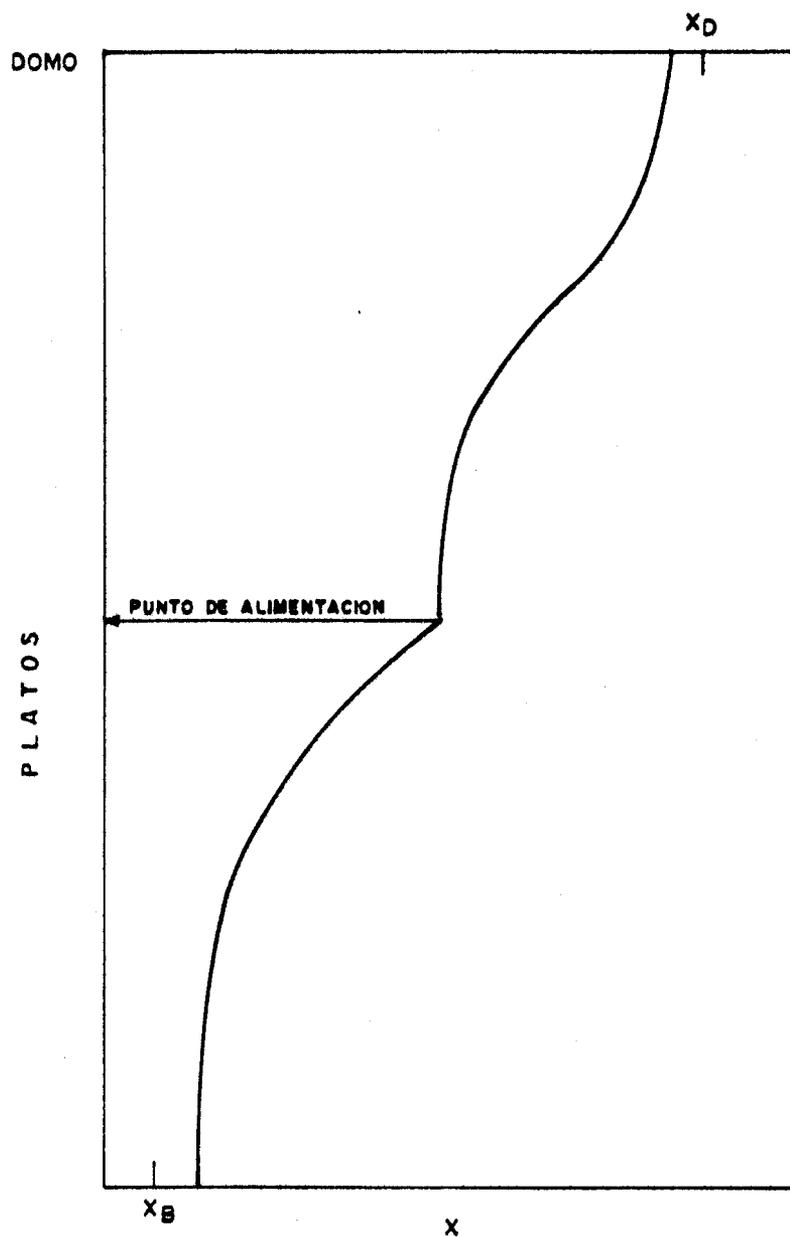


FIGURA. 2.9.- PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA CON UNA POSICION INCORRECTA DEL PUNTO DE ALIMENTACION

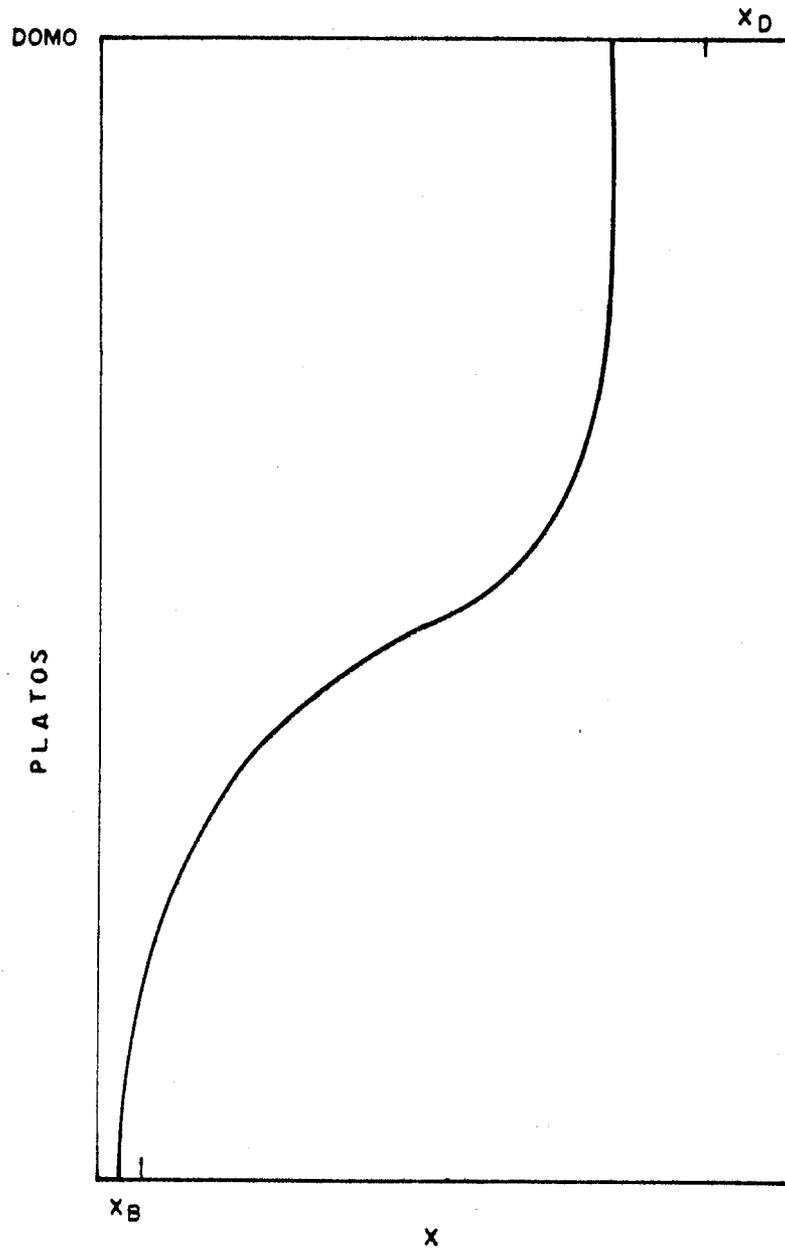


FIGURA 2.10.- PERFIL DE COMPOSICIONES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA CON BALANCE DE MATERIA INCORRECTO

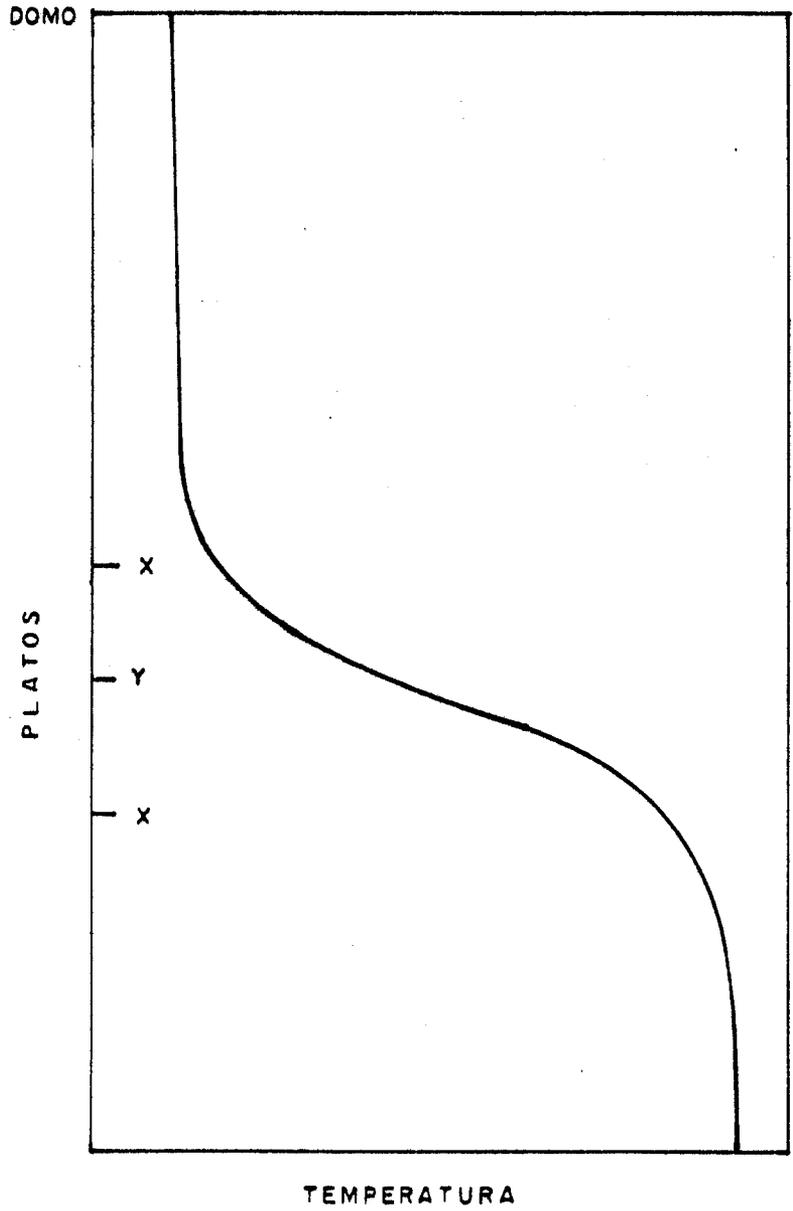


FIGURA 2.11.- PERFIL DE TEMPERATURAS ADECUADO PARA CONTROL EN UNA COLUMNA DE DESTILACION

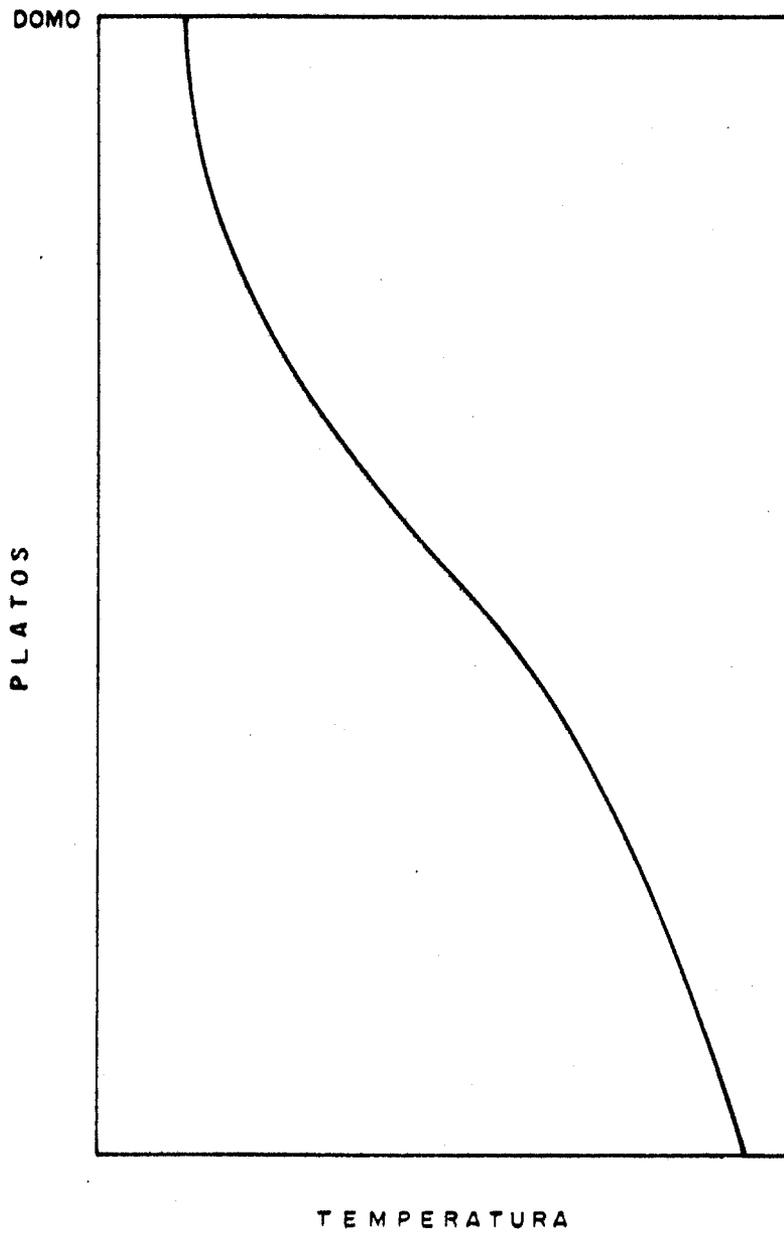


FIGURA 2.12 PERFIL DE TEMPERATURAS NO ADECUADO PARA CONTROL EN UNA COLUMNA DE DESTILACION

adecuado para control se muestra en la figura 2.11, en la cual se indican con "x" los puntos apropiados para los sensores de la estructura de control. El punto marcado con "y" no es adecuado en la práctica por ser un punto demasiado sensible en la columna que cambia rápidamente del valor alto al valor bajo con cambios muy pequeños en la posición. Sin embargo, en el estudio de esquemas de control avanzado este punto proporciona mucha información.

En separaciones difíciles se pueden obtener perfiles de temperatura como el que se muestra en la figura 2.12. En este caso se requieren muchos platos y hay una caída de presión apreciable. El perfil de temperaturas está afectado por la caída de presión y por tanto, por sí solo no puede usarse para control. Se debe tomar en cuenta la corrección por la presión, o usar sensores en la parte alta de la columna.

Los esquemas de control pueden ser muy sencillos o muy complejos dependiendo de la dificultad de las separaciones y tipo de perturbaciones que afectan la operación específica.

El esquema básico de control consiste en satisfacer el balance de materia y el balance de energía especificado para la operación, así como el requerimiento de reflujo para lograr la separación. Para ello se pueden considerar diferentes configuraciones de control como son (L_1/V) , $(D-B)$, $(L_1/V-V)$ (Alvarez, et. al., 1992a) y otras, de las cuales solamente algunas se utilizan en la práctica.

La forma más sencilla de lograr esto es operar con una alimentación controlada, un flujo de producto con una razón controlada y suministrar suficiente vapor al rehervidor para

mantener el reflujo especificado. Esta forma de control es buena cuando no importa la calidad del producto y sólo se busca separar la mezcla en fracciones ligeras y pesadas. Sin embargo, cuando la calidad del producto interesa, se debe tener información sobre la calidad del destilado. Este tipo de control, denominado control realimentado de balance de materia, normalmente utiliza la medición de temperatura en algún punto de la columna cuidadosamente seleccionado. Este punto es de fundamental importancia para lograr un buen control y considerando que el interés principal es conocer la composición, se han propuesto varias técnicas inferenciales para lograrlo (Skogestad, 1992), si bien, en general, se encuentran deficiencias en ellas. Una mejora de este esquema consiste en controlar, adicionalmente, la razón de reflujo, que puede resultar en ahorros de energía y reducir la necesidad del control de flujo de alimentación, ya que el control del reflujo compensará las fluctuaciones de la alimentación.

El control de la presión en columnas que operan a condiciones normales se logra con una línea de venteo. A presiones superiores se utiliza una válvula de control de la presión en la línea de venteo del condensador que permite mantener los inertes que presurizan el sistema. El mismo sistema opera para operación al vacío.

Un esquema de control completo requiere también el control de nivel en los colectores de fondos y destilado, lo que normalmente es sencillo.

La destilación presenta muchas variantes dependiendo de las

mezclas que se quieren procesar, las purezas y flujos especificados, las propiedades de los componentes y las condiciones de operación requeridas. Debido a esto, muchas veces se requieren esquemas de control específicos, según el tipo de problema. Algunos tipos de casos particulares son los siguientes:

- Productos impuros con muchos componentes. En este caso los perfiles de temperatura son menos sensibles y los balances de materia no son tan críticos. Un esquema de control de flujos y provisiones para mantener el reflujo es adecuado.
- Componentes con puntos de ebullición cercanos. En este caso se tienen separaciones difíciles y hay caídas de presión en la columna, las cuales enmascaran la influencia de la composición en el perfil de temperaturas. En el esquema de control debe relacionarse la medición de la temperatura con la presión.
- El producto del fondo o del destilado es muy pequeño. No es recomendable usar control de flujos pequeños, ya que su efecto en el sistema es insignificante. El control de nivel en los colectores es suficiente.
- Solamente la calidad de un producto es de importancia. Esta situación presenta la oportunidad de instrumentar un esquema de control para el producto de interés a expensas del otro.
- El producto superior se recupera como vapor. En esta situación generalmente se selecciona la temperatura del condensador como variable de control para evitar la condensación. El reflujo se condensa fuera de este condensador. En el caso de condensar parcialmente en el mismo condensador para proporcionar el

reflujo, el esquema de control se complica porque se debe controlar el flujo del fluido de enfriamiento, cuya respuesta es lenta, y controlar la presión que es rápido.

Varias situaciones pueden originar tiempos de respuesta diferentes en una columna de destilación. Unas variables pueden tener cambios en segundos, otras en minutos y otras en horas. En estos casos se puede usar control en cascada, de forma que los lazos internos atiendan los cambios rápidos y los lazos externos los cambios más lentos. Algunas veces es suficiente incrementar la capacitancia o añadir alguna acción integral.

El control de un sistema de destilación se vuelve un tema de trabajo de gran reto en la medida en que las configuraciones de procesamiento se hacen más complejas, debido a la integración de prefraccionadores, corrientes laterales, alimentaciones múltiples y, especialmente, el incremento de los niveles de pureza deseados.

Así mismo, el gran consumo de energía asociado a la destilación ha incentivado el desarrollo de esquemas de integración de energía y la búsqueda de estructuras de control que optimicen este consumo. A medida que el proceso se complica, la respuesta del sistema se vuelve altamente no lineal (Luyben, 1987). Recientemente (Skogestad y Morari, 1987), se ha señalado que la destilación es la operación unitaria que más significativamente se podría beneficiar por un control mejorado. Consecuentemente, desde hace varios años se ha estado dirigiendo un esfuerzo considerable al desarrollo de estrategias de control que proporcionen un mejor desempeño que el obtenido con el uso del

control convencional PID. Diferentes formas estudiadas como el control multivariable total con enfoques como el control cuadrático lineal no han encontrado la forma de aplicarse industrialmente. Otras formas como el control dual de composición (control de composición de fondos y destilado) han tenido un éxito muy relativo ya que presenta un comportamiento fuertemente no lineal con respuestas muy lentas y fuertes interacciones. En la actualidad los estudios tienden a la búsqueda de estrategias de control adaptable y a la configuración de sistemas de "una entrada una salida" -UEUS- (Skogestad y Morari, 1987; Waller, 1986).

2.1.9 TENDENCIAS EN DESTILACION.

La descripción realizada hasta este punto, presenta, en general, el conocimiento maduro en destilación. Mucho de este conocimiento se utiliza ya en sistemas de expertos que guían al usuario en cada paso del modelamiento de una columna. Sin embargo, existen importantes tendencias de desarrollo de nuevo conocimiento, así como de su aplicación. Stadig (1991) reporta que el interés por la destilación nunca ha sido tan grande como en la actualidad. La fuerza directriz consiste en la búsqueda de técnicas más efectivas para operar la destilación y en diseños de columnas que mejoren la calidad del producto y reduzcan los costos de energía. Se pueden considerar dos grandes tipos de tendencias de desarrollo en destilación: una en el sentido de mejoramiento de la destilación convencional y otra en el sentido de cambio por sustitución con nuevas formas de realizar la destilación. La

segunda tendencia se trata en el siguiente capítulo. La tendencia de mejoramiento tiene diferentes vertientes. Desde el punto de vista de tecnología, una tendencia consiste en el uso de sistemas de recompresión de vapor para complementar el suministro de calor al rehervidor, mediante la compresión de vapores de la parte alta de columna. Esta tecnología no es nueva, pero actualmente puede justificarse su aplicación. Otra tendencia importante desde el punto de vista de tecnología es el desarrollo de la denominada destilación catalítica (Stadig, 1991) que básicamente consiste en la reacción de componentes para la obtención de productos deseados con alta pureza.

Quizá la tendencia más importante en destilación convencional es el modelamiento de las columnas de multietapas con el enfoque de fenómenos de transporte (Seader, 1989). En este enfoque, los balances de materia y energía en cada plato se sustituyen por ecuaciones de transferencia de masa y calor para cada fase del sistema y solamente se supone la condición de equilibrio en la interface líquido-vapor. Es decir, contrario al modelamiento convencional, no se supone de antemano que las corrientes de líquido y vapor que salen de cada plato estén en equilibrio. Las ecuaciones que se obtienen, son ecuaciones diferenciales de transporte y no algebraicas discretas como las clásicas. Esta es la base fundamental del nuevo enfoque de modelamiento. Ya que en la realidad las corrientes no alcanzan tal equilibrio, la incertidumbre asociada al modelamiento convencional se corrige con los factores de eficiencia.

El nuevo enfoque, con base en el entendimiento de los

fenómenos asociados, evita tal incertidumbre y es una manera fundamental de abordar el tema de la ineficiencia debido al no equilibrio. En algunos sistemas de multicomponentes, aún en algunos sistemas binarios se han observado (Seader, 1989) diferencias grandes entre los valores calculados y experimentales de las eficiencias de Murphree para el vapor. De acuerdo con Seader (1989), esto se debe al incompleto entendimiento que proporciona el modelo clásico de equilibrio para explicar la destilación en multietapas. Las implicaciones de desviaciones de este tipo, cuando se presentan, pueden traducirse en el diseño inadecuado de equipos y en una falla en el cumplimiento de objetivos de optimización y control. Aunque el enfoque de transporte no es nuevo, ya que se emplea en otras aplicaciones de Ingeniería Química, permite un mejor entendimiento de los fenómenos de intercambio entre el líquido y el vapor y se puede identificar la ocurrencia de fenómenos de acoplamiento como 1) difusión contraria a la directriz de concentración (difusión inversa), 2) no difusión aunque exista la fuerza directriz (barreras a la difusión) y 3) difusión con una fuerza directriz cero (difusión osmótica). Como consecuencia de una mejor comprensión de tales fenómenos, se reportan (Stadig, 1991) diseños más eficientes, que implican, diámetros más pequeños y/o columnas más cortas, menor inversión de capital y menor consumo de energía.

El enfoque de modelado por equilibrio se ha usado por cerca de 100 años (Seader, 1989) y todos los sistemas de diseño, enseñanza y aplicación se basan en este tipo de modelos. El cambio hacia el nuevo enfoque no parece ser inmediato. Sin embargo, hay

un campo muy importante para la investigación y en la medida en que los resultados muestren beneficios, se impulsará el enfoque de modelamiento por transporte.

2.2. NUEVAS FORMAS DE DESTILACION.

En el capítulo anterior se presenta el estado actual de la destilación convencional y sus tendencias de desarrollo buscando mejorar la eficiencia de la operación. Los temas centrales de preocupación son la optimización del consumo de energía y la reducción del costo del equipo. Para abordar estos temas actualmente se realiza investigación en tres direcciones: a) esquemas de integración de energía, b) mejoramiento del diseño del equipo de destilación y c) nuevas formas de realizar las separaciones. Los esquemas de integración de energía (Andrecovich y Westerberg, 1985) ofrecen importantes mejoras pero implican problemas de operación y control más difíciles (Fidkowski y Krolikowski, 1986; Morari y Faith, 1980; Waller et. al. 1988). Se ha reportado que el mejoramiento del diseño (Haselden, 1977; Seader, 1980) reduce el consumo de energía.

Recientemente se ha abordado la dirección de búsqueda de cambio por sustitución, que implica la realización de las separaciones mediante formas radicalmente diferentes a la destilación convencional. Algunos consideran (Darton, 1987) que por este camino se puede llegar a sustituir a las torres de destilación.

En la década pasada se han reportado tres nuevas formas de

realizar las separaciones que tienen potencial de aplicación industrial:

- i). El uso de un tambor empacado que gira a alta velocidad (Tecnología Hígee).
- ii). Pervaporación
- iii). Destilación cero gravedad

A continuación se hace una breve descripción de estas nuevas operaciones.

Tecnología Hígee

Esta tecnología se ha estado desarrollando en los laboratorios de Imperial Chemical Industries (ICI) (O'Sullivan, 1983) y consiste en un tambor de altura pequeña en forma de dona que contiene empaque usado en torres de destilación convencional. Haciendo girar el tambor a alta velocidad (1,800 rpm), la fuerza centrífuga obliga al líquido y al vapor que pasan a través del tambor a fluir uno frente al otro en capas delgadas. Como resultado la separación ocurre rápidamente. Los ingenieros de ICI denominan a este proceso como una separación en condiciones de alta gravedad. Algunas ventajas que se identifican en esta operación son las siguientes:

- 1) Los costos del equipo, instalación y operación se reducen sustancialmente
- 2) Debido al corto tiempo de residencia (fracciones de segundo) es

menos probable que los productos sensibles al calor se descompongan

- 3) el alto esfuerzo de corte involucrado evita cualquier tendencia de las mezclas a formar espuma
- 4) el empaque se puede cambiar en algunas horas en lugar de semanas
- 5) el equipo es fácilmente transportable
- 6) el mantenimiento es muy sencillo
- 7) el espacio requerido es pequeño

ICI reporta altas eficiencias de separación aún con mezclas de puntos de ebullición cercanos como etanol (78°C) isopropanol (82°C) que requieren torres de aproximadamente 100 pies de alto. En el sistema Higeo la misma separación se logra en dos unidades. ICI considera que esta tecnología puede sustituir completamente a las torres de destilación y decidirá el momento de hacerla disponible comercialmente.

Pervaporación.

Esta no es realmente una nueva operación ya que ha sido estudiada por varias décadas, sin embargo hasta 1984 se instaló la primera planta comercial para separar etanol-agua dentro del programa de combustibles de alcohol de Brasil (Redman, 1990). Esta planta se arrancó y trabajó por algún tiempo, pero tuvo una serie de problemas y actualmente ya no está en operación.

La operación se realiza en un equipo como el que se muestra

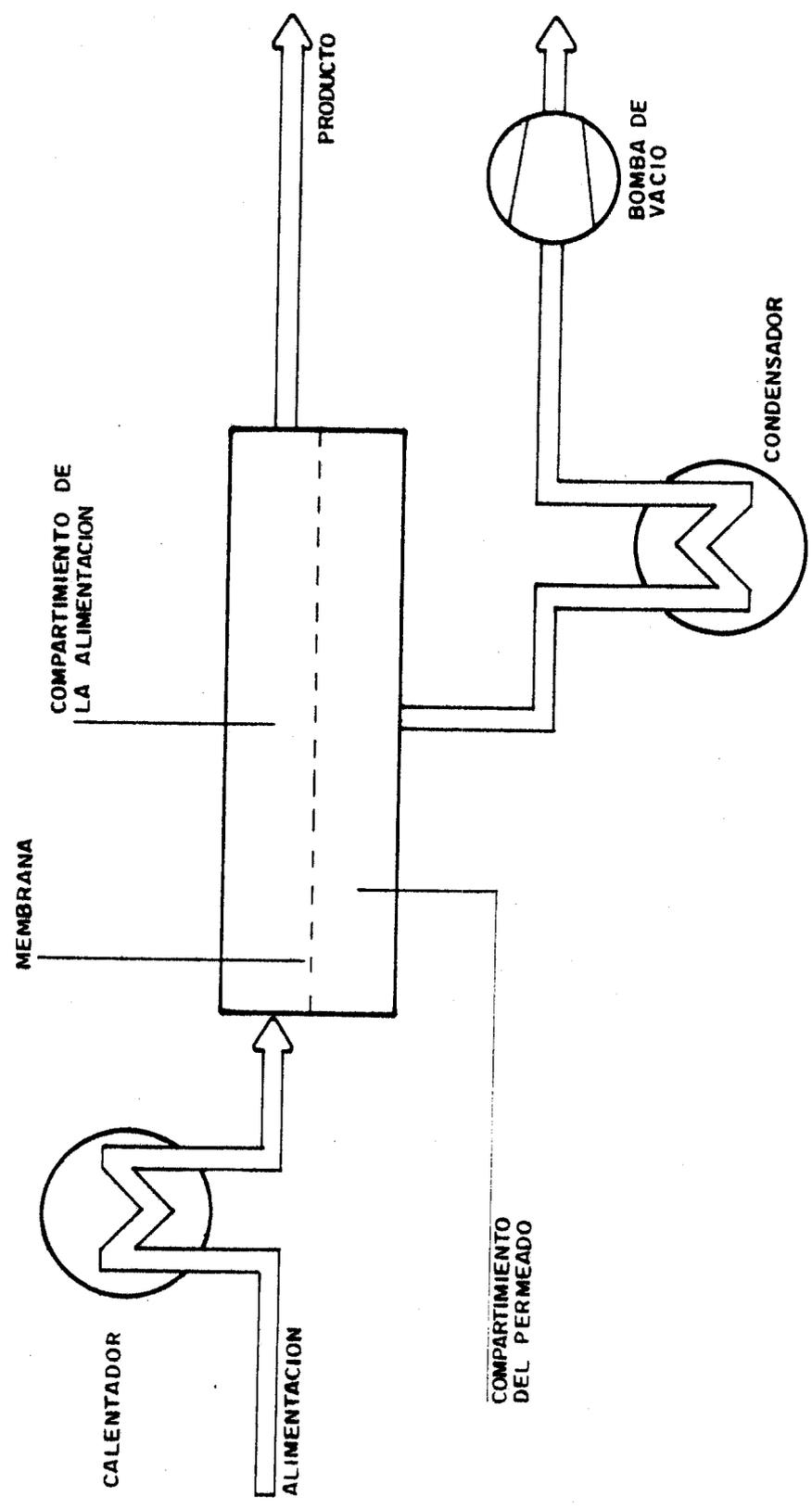


FIGURA 2.13.- ESQUEMA BASICO DEL PROCESO DE PERVAPORACION

152519

esquemáticamente en la figura 2.13. Consiste de una cámara dividida por una membrana no porosa, selectiva hacia uno de los componentes. En un lado de la membrana pasa el líquido de alimentación, el cual permea hacia el otro lado de la membrana, debido al gradiente de concentración y presión que existe en ambos lados de la membrana. La diferencia de presión se logra haciendo vacío en el compartimiento del permeado. La membrana, que tiene un espesor aproximado de 200 Å, es selectiva hacia un componente sobre el otro y esto depende del material con el que se elabora. Los materiales más usados son polisulfonas, celulosa, polipropileno y algunos otros. Para que la membrana, que es porosa, pueda ser utilizada en esta operación, se recubre en una de sus caras, generalmente la del líquido, con una película no porosa muy delgada, 0.5 a 2 Å, con el propósito de sellar los poros abiertos y mejorar la selectividad. Con esto la parte porosa queda como responsable de la separación (Rautenbach y Albrecht, 1987). En esta parte el fluido vaporiza, ya que la presión en los poros es más baja. Se pueden lograr separaciones de muy alta pureza. En el caso etanol-agua se reporta la obtención de etanol con menos de 100 ppm (Redman, 1990). Esto se logra, ya que, debido a la diferencia de presiones, el punto azeotrópico se desplaza, lo que representa una ventaja con respecto a la destilación convencional. Sin embargo, se presentan otros tipos de problemas.

Un problema consiste en la formación de películas líquidas concentradas (polarización de concentración) que afectan la calidad del producto. La transferencia de masa convectiva en combinación con la selectividad de la membrana provoca la

concentración del componente menos permeable. Con esto el flujo del componente permeable preferido se reduce. Este problema no se puede reducir modificando las condiciones de flujo, ya que depende de los materiales y el diseño de la membrana.

Otro problema que se presenta en pervaporación es el comportamiento azeotrópico en puntos diferentes a los conocidos normalmente. En el caso etanol-agua esta situación se presenta a bajas concentraciones (25% de etanol). No se conoce con claridad la razón de este comportamiento, pero puede deberse a un pseudo-equilibrio basado en polarización de concentración.

Un problema adicional en esta operación es la transferencia de calor, ya que el flujo del permeado es muy sensible a las variaciones de temperatura. Para evitar esto se requiere calentamiento intermedio en el sistema, que implica conectar módulos de membranas e intercambiadores de calor en serie. Sin embargo, en muchos casos las áreas de transferencia de calor requeridas son excesivamente grandes, lo que obviamente incrementa los costos.

Los resultados hasta el momento indican que es difícil la aplicación por sí sola de la pervaporación. Se obtienen ahorros de energía en concentraciones altas del componente volátil y en la separación de azeotrópos, pero en concentraciones bajas los costos son superiores a los de la destilación convencional. Debido a esto es probable que se utilice en combinación con torres convencionales de destilación. Por otro lado, hay una tendencia al desarrollo de membranas con mejores características de selectividad.

Destilación cero gravedad.

Recientemente, Seok y Hwang (1985) reportan el desarrollo de una nueva operación unitaria para realizar las separaciones de mezclas líquidas. Esta operación consiste en el empleo de una columna horizontal que opera bajo los principios de capilaridad de un tubo de calentamiento. Considerando que la fuerza de gravedad no interviene en la separación, esta operación recibe el nombre de "destilación cero gravedad" (DCG). Los experimentos que reportan Seok y Hwang (1985) con la separación de mezclas metanol-agua y etanol-agua demuestran una alta factibilidad de esta operación. Se lograron realizar separaciones en una longitud equivalente a $1/9$ de la altura de una torre empacada con el mismo material. Debido a esto la operación también recibe el nombre de microdestilación.

Considerando estos resultados, la destilación cero gravedad (DCG) tiene un alto potencial de aplicación industrial debido a que incide en los dos problemas fundamentales que se han planteado en destilación: reducir el costo del equipo y mejorar la eficiencia en el uso de energía. El primero de estos aspectos se deriva del tamaño del equipo, ya que con longitudes más pequeñas los requerimientos de materiales son menores. Adicionalmente, la construcción de un tubo de calentamiento es relativamente sencilla (Dunn y Reay, 1982), por lo que los costos de fabricación e instalación no son grandes. El segundo aspecto se refiere a que el tubo de calentamiento es reconocido como un aparato altamente eficiente en la transferencia de energía. Estos aspectos implican

que la destilación cero gravedad merece la atención para un estudio más profundo.

2.3. DESTILACION CERO GRAVEDAD.

En este capítulo se presenta una descripción más detallada de la destilación cero gravedad (DCG), así como sus antecedentes y la teoría alcanzada para el diseño y operación del sistema.

Considerando que el antecedente inmediato del aparato DCG es el tubo caliente, a continuación se presenta una breve descripción de este equipo y de sus principios y características de la operación (Dunn y Reay, 1982).

2.3.1. EL TUBO CALIENTE.

DESCRIPCION

El tubo caliente es un aparato de muy alta conductividad térmica, debido a que aprovecha la energía de cambio de fase de un fluido de trabajo que contiene en su interior, y por ello es capaz de transportar más de 1000 veces más la energía que transporta un rodillo de cobre de tamaño equivalente, con el mismo gradiente de temperatura. Es un aparato similar, en algunos aspectos, al termosifón (Fig. 2.14). Este último consiste de un tubo sellado del cual se ha evacuado el aire y se ha introducido una pequeña cantidad de agua. El extremo inferior del tubo se calienta

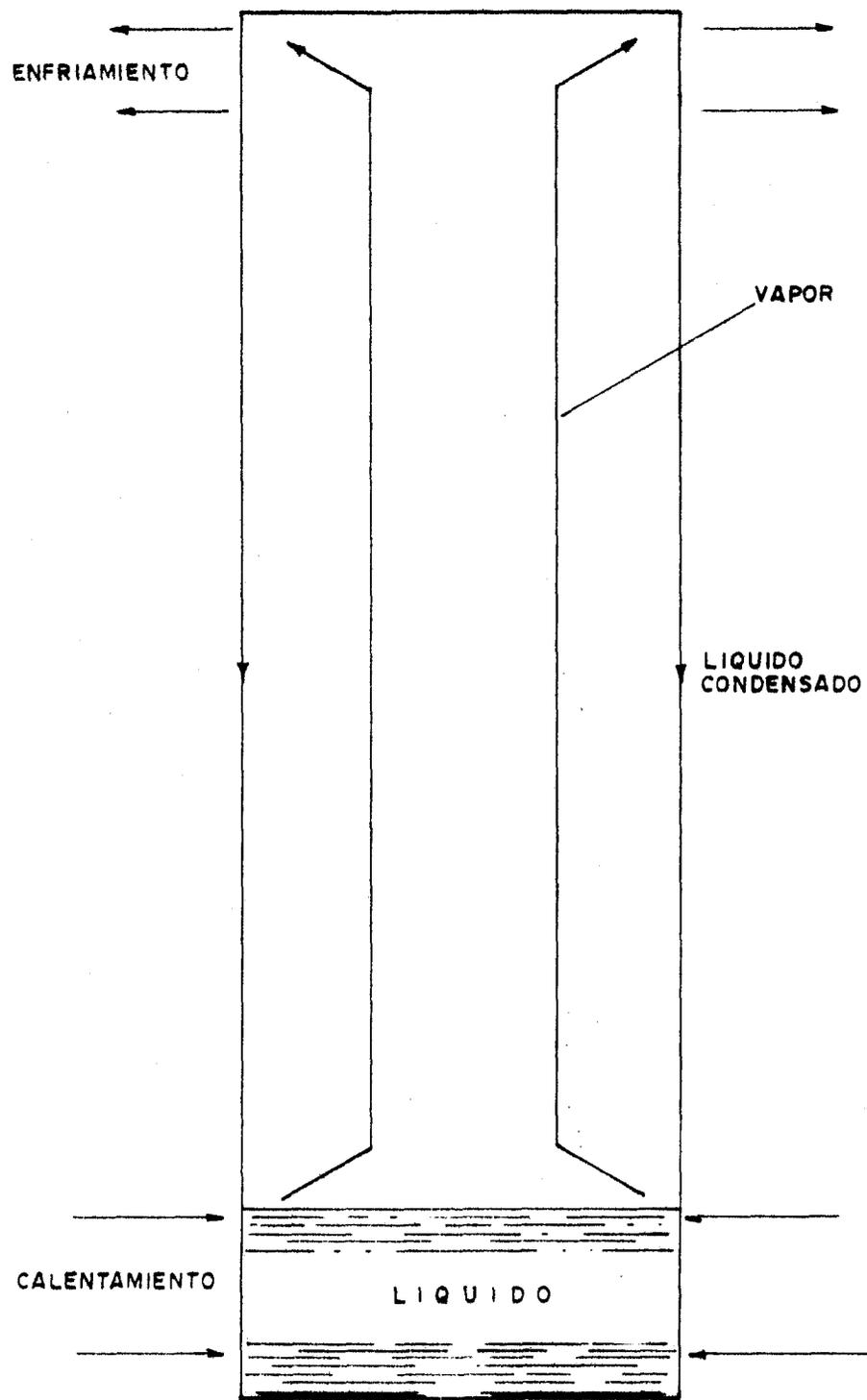


FIGURA 2.14 ESQUEMA BASICO DEL TERMOSIFON

causando que el líquido se evapore y el vapor se mueve hacia el extremo frío del tubo, donde se condensa. El condensado regresa al extremo caliente por gravedad. Puesto que el calor latente de vaporización es grande, se pueden transportar cantidades considerables de calor con una diferencia muy pequeña de temperaturas entre los extremos. Una limitación de este aparato es que debe utilizarse siempre en posición vertical, debido a que requiere la fuerza de gravedad para operar.

El tubo caliente es similar al termosifón, pero contiene adicionalmente una malla adherida en la superficie interna, dispuesta en forma de anillo, con lo que el centro del tubo permanece hueco (Fig. 2.15). La malla se construye con algún material que proporcione poros finos, de forma que actúen las fuerzas capilares y regresen el condensado al evaporador. Así, la fuerza de gravedad no interviene en la operación del equipo, y por consiguiente su posición no está restringida a la orientación vertical.

Las principales partes de un tubo caliente son el evaporador y el condensador. Generalmente se incluye una sección adiabática, como se aprecia en la figura 2.16, la cual depende de los requerimientos geométricos del sistema en el cual se utilice este equipo.

Para la mayoría de las aplicaciones la geometría cilíndrica de un tubo caliente es adecuada, pero se utilizan otras geometrías de acuerdo con requerimientos especiales.

El desempeño de un tubo caliente frecuentemente se expresa en términos de "conductividad térmica equivalente" y se caracteriza

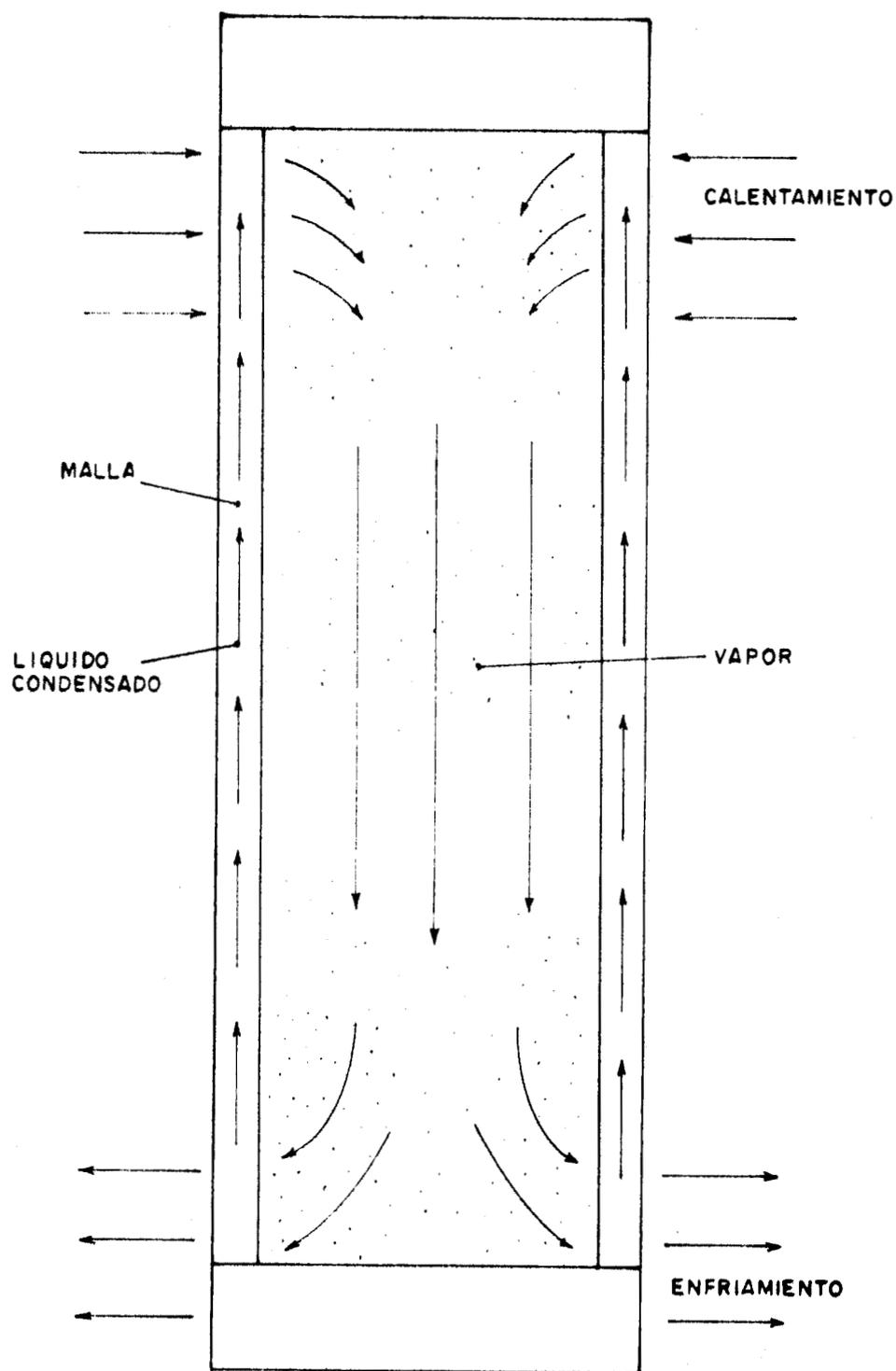


FIGURA 2.15.- ESQUEMA DE UN TUBO CALIENTE

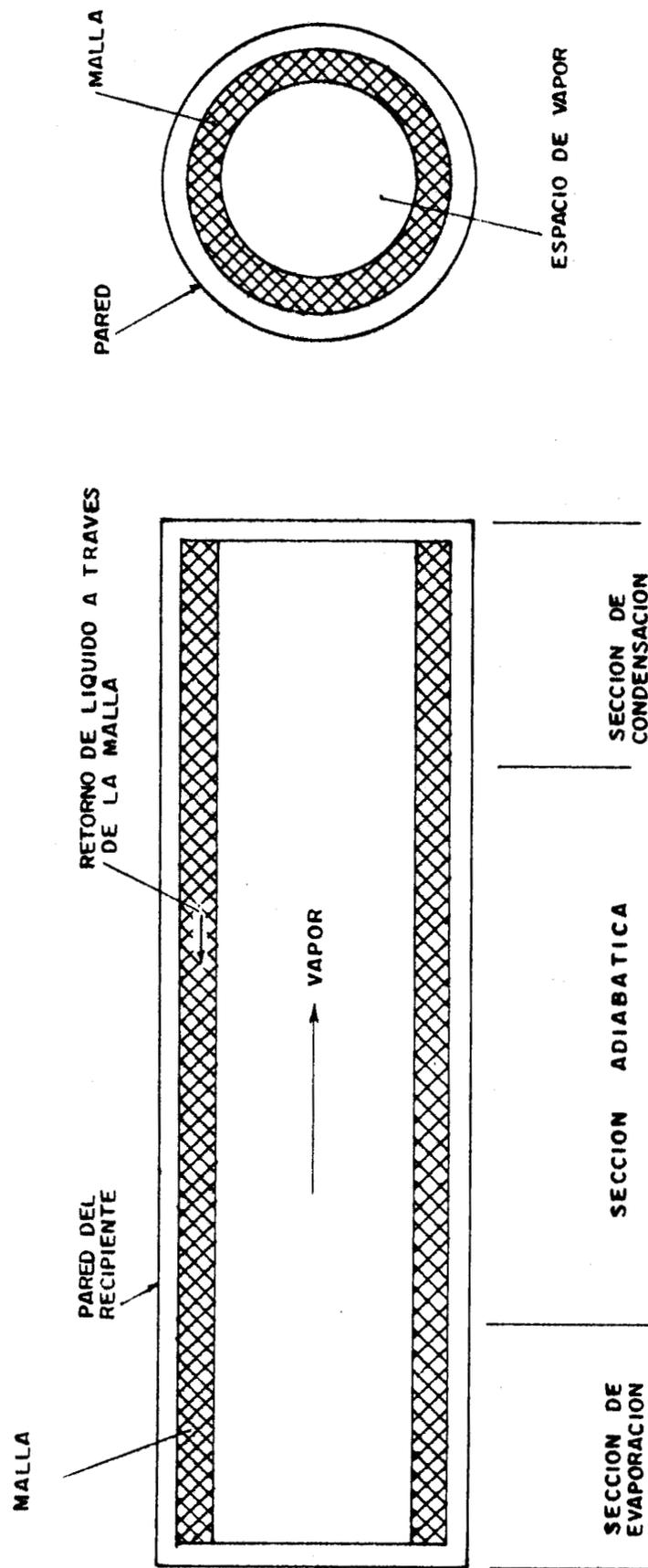


FIGURA 2.16 PRINCIPALES REGIONES DE UN TUBO CALIENTE

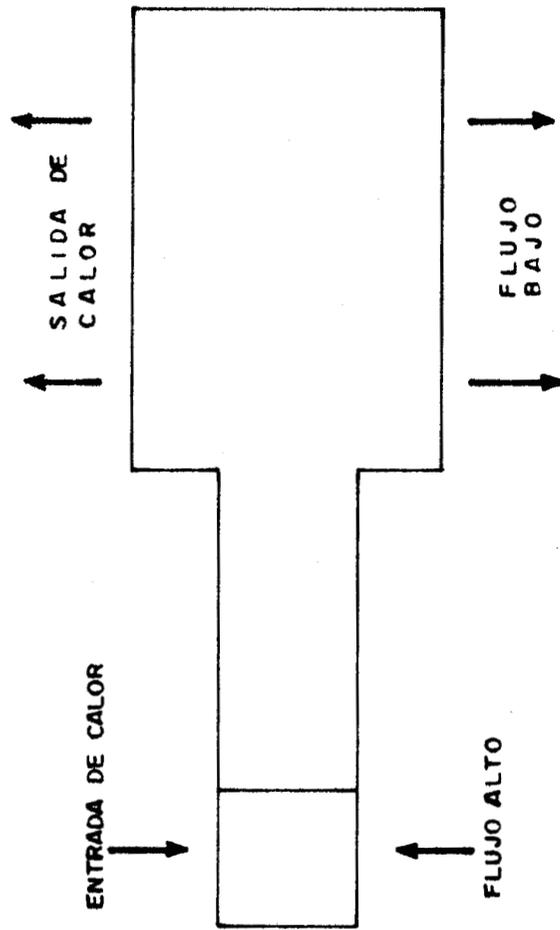


FIGURA 2.17.- TRANSFORMACION DE FLUJO TERMICO EN UN TUBO CALIENTE

por:

- a) una muy alta conducción térmica efectiva
- b) la habilidad para actuar como transformador de flujo (Fig. 2.17). Esto se debe a que se puede disponer de un flujo de entrada de calor alto por unidad de área en una zona, y en otra zona, incrementando el área, se dispondrá de un flujo de salida de calor bajo por unidad de área.
- c) una superficie isotérmica de baja impedancia térmica

Adicionalmente, algunas formas especiales permiten obtener características de impedancia térmica variable y cambios de dirección del flujo de calor.

TEORIA

En esta sección se reseña la base teórica conocida en tubos calientes (Dunn y Reay, 1982) y es con la cual se trabaja en el diseño de estos equipos.

La condición esencial para que un tubo caliente opere es que la cabeza de bombeo capilar máxima $(\Delta P_c)_{\max}$ debe ser mayor que la caída total de presión en el tubo. Esta caída de presión se compone por tres factores:

- 1) la caída de presión ΔP_L requerida para que el líquido regrese del condensador al evaporador
- 2) la caída de presión ΔP_v necesaria para que el vapor fluya del

evaporador al condensador

- 3) la cabeza gravitacional que puede ser cero, positiva o negativa por consiguiente:

$$(\Delta P_c)_{\max} \geq \Delta P_L + \Delta P_v + \Delta P_g \quad (2-46)$$

Si esta condición no se cumple, el medio poroso se secará en el evaporador y el tubo no operará. La propiedad importante de un fluido de trabajo que define la operación de un tubo caliente es la tensión superficial, σ , la cual se relaciona con la presión capilar mediante la expresión

$$\Delta P_c = 2 \sigma_L \frac{\cos \omega}{r} \quad (2-47)$$

donde ω es el ángulo de contacto, según se define en la figura 2.18 y r es un radio promedio del capilar. Este ángulo es función de la atracción o repulsión que experimente el líquido en contacto con el sólido. Cuando las fuerzas son atractivas, se dice que el líquido moja al sólido. En este caso ω tiene valores entre 0 y $\pi/2$.

La condición para que ocurra el mojado es que la energía superficial total se reduzca:

$$\sigma_{SL} + \sigma_{LV} < \sigma_{SV} \quad (2-48)$$

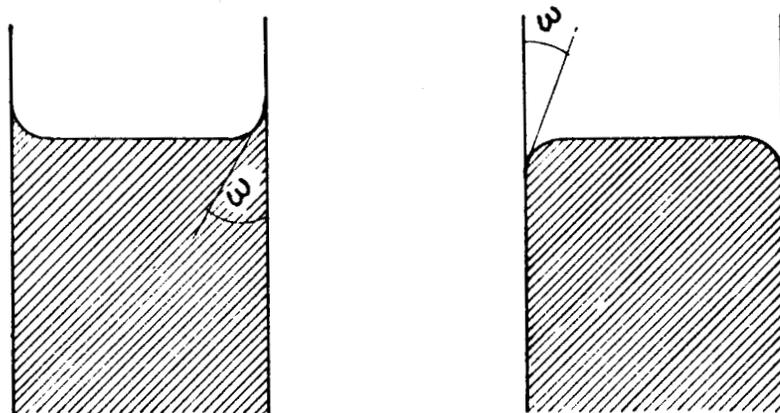


FIGURA 2.18.- DEFINICION DEL ANGULO DE CONTACTO EN CAPILARES

donde los subíndices s, l, v se refieren a las fases sólido, líquido y vapor respectivamente. En la figura 2.19 se presentan las características de mojado con respecto al ángulo de contacto.

Considerando que la tensión superficial observa un comportamiento decreciente con la temperatura, en un tubo caliente habrá un gradiente de presión capilar entre los extremos, debido al gradiente de temperatura prevaleciente. Es decir:

$$\Delta P_c = \sigma_L (T_e) \frac{\cos \omega_e}{r_e} - 2 \sigma_L (T_c) \frac{\cos \omega_c}{r_c} \quad (2-49)$$

donde los subíndices e y c indican el evaporador y el condensador respectivamente.

El valor máximo se tendrá cuando $\cos \omega_e = 1$ y $\cos \omega_c = 0$. Por lo tanto

$$(\Delta P_c)_{\max} = \frac{2\sigma_L (T_e)}{r_e} \quad (2-50)$$

La caída de presión en la fase líquida se determina por la ecuación de Darcy:

$$\Delta P_L = \frac{\mu_L L_{eff} v_z^L}{K} \quad (2-51)$$

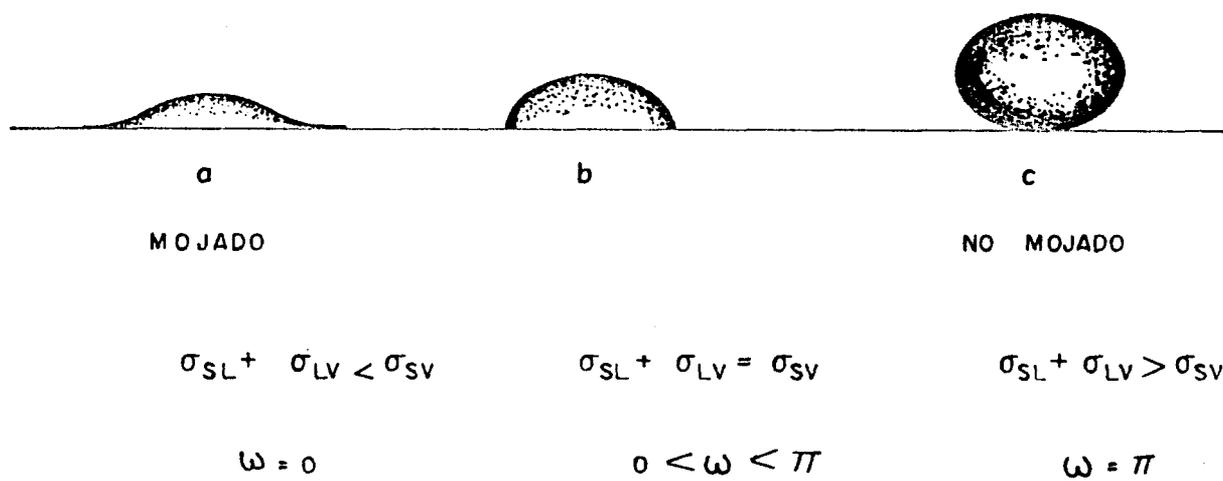


FIGURA 2.19.- CONTACTO EN MOJADO Y NO MOJADO

donde K es la permeabilidad del medio poroso, u_2^L es la velocidad superficial del fluido y L_{eff} es la longitud efectiva del tubo, la cual se define por:

$$L_{eff} = L_a + \frac{L_e + L_c}{2} \quad (2-52)$$

donde L_a , L_e y L_c representan las longitudes de las zonas adiabática, del evaporador y del condensador, respectivamente. Esta aproximación se realiza considerando que la velocidad del fluido en el medio poroso es aproximadamente constante en la sección adiabática; sin embargo, en el evaporador y el condensador hay variaciones de flujo debido a que los fenómenos son diferentes. La aproximación anterior permite mantener una relación lineal entre la velocidad y la caída de presión en la fase líquida. Normalmente se obtienen resultados confiables.

También en la fase vapor se realizan aproximaciones con deficiencias en el modelado, pero se obtienen resultados confiables para el diseño de tubos calientes.

La caída de presión en esta fase, para flujo laminar, se compone básicamente de dos factores (Dunn y Reay, 1982):

- 1) un término inercial en el evaporador que consiste de la presión requerida para imprimir al vapor una velocidad axial u_2 . Este término se puede estimar como el flujo de momento por unidad de área o ρu^2 .
- 2) un término de contribución viscosa, necesario para vencer las

fuerzas de fricción en la cara interna del medio poroso. En régimen laminar este término se obtiene por la integración de la ecuación de Hagen-Poiseuille.

De acuerdo con lo anterior, la caída total de presión en la fase vapor se da por:

$$\Delta P_v = \Delta P_{vc} + \Delta P_{ve} + P_{va} \quad (2-53)$$

que en función de los términos inerciales y viscosos, resulta en

$$\Delta P_v = \rho_{zv}^2 + \frac{8\mu_v \dot{m}}{\rho_v \pi r_v^4} \left[\frac{L_e + L_c}{2} + L_a \right] \quad (2-54)$$

para flujo laminar.

La cabeza gravitacional, el tercer factor que se tiene que vencer de acuerdo con la ecuación (2-46) para que opere el tubo caliente, se da por

$$\Delta P_g = \rho_L g L_t \text{ sen } \zeta \quad (2-55)$$

donde ρ_L es la densidad del líquido, g es la aceleración debida a la gravedad, L_t es la longitud del tubo y ζ es el ángulo del tubo con la horizontal.

Los aspectos anteriores, establecidos con base en la ecuación (2-46), definen la condición de capilaridad que se debe satisfacer

para la operación del sistema. Adicionalmente, el tubo caliente tiene límites superiores de operación. Estos límites son viscosos, sónicos y de arrastre.

El límite viscoso, conocido también, como límite de presión del vapor, está relacionado con la ecuación (2-46), donde se observa que la suma de los términos del extremo derecho debe ser inferior al término del extremo izquierdo. La caída de presión en la fase líquida depende de las propiedades del fluido y la cabeza gravitacional, sólo se puede controlar con la inclinación del tubo. De acuerdo con esto, el término de la presión del vapor debe controlarse para evitar que se seque el medio poroso. Se ha determinado que el siguiente criterio debe satisfacerse (Dunn y Reay, (1982):

$$\frac{\Delta P_v}{P_v} < 0.1 \quad (2-56)$$

Este criterio es importante cuando se opera a presiones bajas, ya que las fuerzas viscosas tienen una mayor influencia en el flujo del vapor.

El límite sónico se refiere a que la velocidad del vapor debe ser pequeña comparada con la velocidad del sonido. Es decir, el número de Mach (Dunn y Reay, 1982)

$$\frac{u_v}{u_{\text{sonido}}} < 0.3 \quad (2-57)$$

Esta limitación implica nuevamente que ΔP_v es pequeña comparada con la presión del vapor en el tubo.

Finalmente el límite de arrastre se refiere al punto en el cual la velocidad del vapor ejerce suficiente fuerza de corte en la interface con el líquido que se encuentra en el medio poroso y arrastra gotas de líquido hacia el condensador. Esto reduce la eficiencia de operación del tubo. La tendencia al arrastre se disminuye por la tensión superficial del líquido. El número de Weber, We , relaciona las fuerzas inerciales del vapor con las fuerzas de tensión superficial

$$We = \frac{\rho_v u_v^2 d_z}{2\pi\sigma_L} \quad (2-58)$$

donde d_z es una dimensión que caracteriza la superficie líquido-vapor. El punto donde se equilibran las fuerzas, $We = 1$, es el punto en el cual iniciará el arrastre. En este punto se encuentra la velocidad límite del vapor

$$u_v = \sqrt{\frac{2\pi\sigma_L}{\rho_v d_z}} \quad (2-59)$$

Para satisfacer las condiciones anteriores se deben seleccionar los fluidos de trabajo de acuerdo con el rango de aplicación deseado. Dentro de este rango, el fluido debe reunir

los siguientes requisitos:

- a) compatibilidad con el medio poroso y todos los materiales
- b) buena estabilidad térmica
- c) humectabilidad del medio poroso y todos los materiales
- d) presiones de vapor no muy altas o bajas dentro del rango de operación de temperatura
- e) alto calor latente
- f) alta conductividad térmica
- g) baja viscosidad del líquido y el vapor
- h) alta tensión superficial
- i) punto de congelamiento bajo

En el cuadro 2.5 se presenta una lista de fluidos de trabajo y el rango útil de temperaturas.

En el cuadro 2.6 se muestran algunos materiales utilizados como medio poroso y algunas de sus características. En el cuadro 2.7 se presenta una lista de datos de compatibilidad.

Las aplicaciones de los tubos calientes incluyen la transformación de flujos de calor, control de temperatura, remoción de calor en procesos de solidificación de plásticos, como moldeo por inyección, enfriamiento de componentes eléctricos, recuperación de calor en procesos y en equipos como reactores, precalentadores de aire, intercambiadores de calor en procesos de granulación, fusión de nieve y descongelamiento y otra diversidad de aplicaciones.

CUADRO 2.5
FLUIDOS DE TRABAJO PARA TUBOS CALIENTES

FLUIDO	PUNTO DE FUSION (°C)	PUNTO DE EBULLICION (°C) A P= 1 ATM	RANGO UTIL (°C)
Helio	-272	-269	-271 - -279
Nitrógeno	-210	-196	-203 - -160
Amonia	- 78	- 33	- 60 - -100
Freon 11	-111	24	- 40 - -120
Pentano	-130	28	- 20 - -120
Freon 113	- 35	48	- 10 - -100
Acetona	- 95	57	0 - 120
Metanol	- 98	64	10 - 130
Flutec PP2	- 50	76	10 - 160
Etanol	-112	78	0 - 130
Heptano	- 90	98	0 - 150
Agua	0	100	30 - 200
Tolueno	- 95	110	50 - 200
Flutec PP9	- 70	160	0 - 200
Thermex	12	257	150 - 395
Mercurio	- 39	361	250 - 650
Cesio	29	670	450 - 900
Potasio	62	774	500 - 1000
Sodio	98	892	600 - 1200
Litio	179	1340	1000 - 1800
Plata	960	2212	1800 - 2300

(Dunn y Reay, 1982).

CUADRO 2.6

DATOS DE MEDIOS POROSOS UTILIZADOS EN TUBOS CALIENTES

MATERIAL	ALTURA CAPILAR (cm) ¹	RADIO DEL PORO (cm)	PERMEABILIDAD (m ²)	POROSIDAD ε (%)
Fibra de vidrio	25.4	-	0.061 x 10 ⁻¹¹	-
Perlas de monel Malla:				
30 - 40	14.6	0.052 ²	4.15 x 10 ⁻¹⁰	40
70 - 80	39.5	0.019 ²	0.78 x 10 ⁻¹⁰	40
100 - 140	64.6	0.013 ²	0.33 x 10 ⁻¹⁰	40
140 - 200	75.0	0.009	0.11 x 10 ⁻¹⁰	40
Polvo de níquel Malla:				
200 μm	24.6	0.038	0.027 x 10 ⁻¹⁰	-
500 μm	>40.0	0.004	0.081 x 10 ⁻¹¹	-
Fibra de níquel 0.01 mm día	>40.0	0.001	0.015 x 10 ⁻¹¹	68.9
Espuma de níquel (Ampornik 220.5)	-	0.023	3.8 x 10 ⁻⁹	96
Espuma de cobre (Amporcop 220.5)	-	0.021	1.9 x 10 ⁻⁹	91
Polvo de cobre (Sinterizado) Polvo de cobre (Sinterizado) Malla:	156.8	0.0009	1.74 x 10 ⁻¹²	52
45 - 56 μm	-	0.0009	-	28.7
100 - 125 μm	-	0.0021	-	30.5
150 - 200 μm	-	0.0037	-	35

CUADRO 2.6 (continuación)

MATERIAL	ALTURA CAPILAR (cm)	RADIO DEL PORO (cm)	PERMEABILIDAD (m ²)	POROSIDAD ε (%)
Níquel 50 Malla: 50	4.8	-	-	62.5
Cobre 60	3.0	-	8.4×10^{-10}	-
Níquel 200	23.4	0.004	0.62×10^{-10}	68.9
Níquel 60 Malla:				
100	-	0.0131	1.523×10^{-10}	-
120	5.4	-	6.00×10^{-10}	-
120 ³	7.9	0.019	3.5×10^{-10}	-
2 ⁴ x 120	-	-	1.35×10^{-10}	-
Fósforo/ Bronce 200	-	0.003	0.46×10^{-10}	-
Titanio 2 x 200	-	0.0015	-	67
4 x 200	-	0.0015	-	68.4
250	-	-	0.302×10^{-10}	-

- 1 obtenida con agua
2 diámetro de partícula
3 oxidado
4 número de capas
(Dunn y Reay, 1982)

CUADRO 2.7

DATOS DE COMPATIBILIDAD DE FLUIDOS
DE TRABAJO CON MATERIALES POROSOS

Material poroso	Fluido de trabajo				
	Agua	Acetona	Amonia	Metanol	Dow-A
Cobre	RU	RU	RU	RU	RU
Aluminio	GNC	RL	RU	NR	UK
Acero inoxidable	GNT	PC	RU	GNT	RU
Níquel	PC	PC	RU	RL	RU

RU: Recomendado por uso

RL: Recomendado por la literatura

PC: Probablemente compatible

NR: No recomendado

UK: Desconocido

GNC: Generación de gas a todas temperaturas

GNT: Generación de gas a temperaturas elevadas

(Dunn y Reay, 1982)

2.3.2. DESCRIPCION DE LA DCG.

La destilación cero gravedad, como ya se mencionó, se lleva a cabo en un aparato similar a un tubo caliente, tal como se muestra en la figura 2.20: consiste de un tubo con calentamiento en un extremo y enfriamiento en el otro. En el interior del tubo se ha sujetado a la pared una malla que cumple la función del medio poroso. El centro del tubo permanece hueco.

Considerando la operación de un tubo caliente horizontal, en el cual un vapor condensable fluye del extremo caliente al extremo frío donde se convierte en líquido puro y viaja en la dirección opuesta por acción capilar, en el caso de una mezcla binaria ocurre la misma acción a contracorriente. Esto permite que, debido a que la fase vapor y la fase líquida están en continuo contacto a lo largo del tubo, exista un intercambio de masa entre las fases. Este intercambio ocurre de manera que el componente menos volátil se concentra en el extremo de alta temperatura, estableciéndose así un perfil continuo de concentraciones a lo largo de la columna. Si se alimenta continuamente una mezcla en el punto donde su composición se balancea con el perfil establecido y se retiran los productos de los extremos frío y caliente de la columna, entonces se está realizando una destilación continua sin la acción de las fuerzas de gravedad, por lo que Seok y Hwang (1985) le denominan "destilación cero gravedad" o microdestilación. En el caso de no existir entradas ni salidas de líquido, en el estado estacionario se establecerá el perfil de concentraciones en el interior de la columna y esta situación corresponde a la condición de reflujo

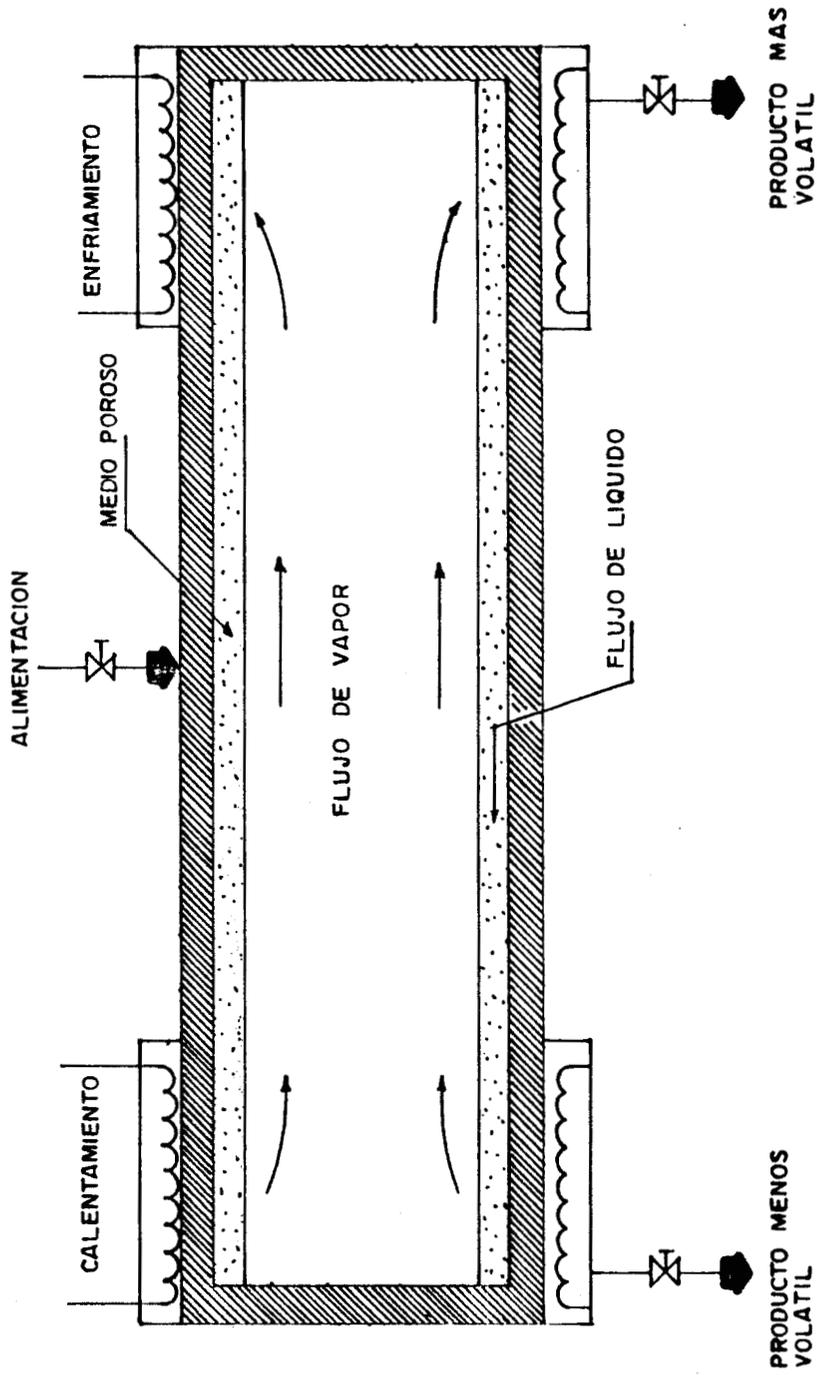


FIGURA 2.20.- ESQUEMA DEL APARATO EMPLEADO EN DESTILACION
CERO GRAVEDAD

total. La microdestilación continua en estado estable involucra también un reflujo parcial que se da con una porción del condensado que no se retira del aparato. Este líquido fluye a través del medio poroso del extremo frío al extremo caliente por acción capilar, es decir, por gradientes de capilaridad o de presión capilar. En la zona de calentamiento, una parte del líquido se evapora y se retira la mayor parte, rica en el componente pesado. El vapor generado en esta zona fluye hacia la zona de enfriamiento debido a la diferencia de presiones. En el recorrido a contracorriente del líquido y el vapor, como ya se mencionó, hay una transferencia de materia entre las fases, que ocurre en la zona adiabática por gradientes de concentraciones. Debido a que la fase vapor inicia con una baja concentración del componente ligero, en el recorrido hacia la zona fría se enriquece en este componente, en tanto que la fase líquida se enriquece en el componente pesado.

Teóricamente, en el estado estable, en cada punto a lo largo del tubo existe equilibrio entre la fase líquida y la fase vapor, según las condiciones de presión y temperatura de cada punto. La transferencia de masa ocurre en la interface porosa (sólido-líquido)-gas y por difusión el componente se mueve en la fase gaseosa hacia el centro de la fase. Esto implica que existen perfiles axial y radial de concentraciones en la columna.

Acoplado con los perfiles axial y radial de concentraciones, se establecen también los perfiles de temperatura y velocidad en la operación del sistema.

La operación de una columna DCG está sujeta a las mismas

condiciones que se requieren en un tubo caliente, según se describió en la sección anterior.

2.3.3. TRABAJO PREVIO EN EL MODELAMIENTO DE LA DCG.

Seok y Hwang (1985) establecen que la transferencia de masa entre las fases ocurre debido a la transferencia de calor y a la difusión y establecen el balance de materia para la fase gas como sigue (Fig. 2.20):

$$\frac{d(Vy)}{dz} = K_{y,p}^L A_s^V (y^e - y) + J_e y^e \quad (2-60)$$

donde y^e es la composición del vapor que pasa de la fase líquida a la fase gas y J_e es el flujo de vaporización en el evaporador. La ecuación (2-60) se simplifica considerando el comportamiento de la columna DCG representado por los fenómenos de la zona adiabática y tomando una longitud efectiva, L_{eff} . Esto significa que el término de vaporización J_e se desprecia, considerando que en la zona adiabática solamente existe la transferencia de masa por difusión. Adicionalmente, se considera que la composición y^e es la correspondiente al equilibrio con la fase líquida, y^* . Con esto, la ecuación (2-60) se reescribe para la sección adiabática como

$$\frac{d(VY)}{dz} = K_{y,p} a_s^v (Y^* - Y) \quad (2-61)$$

Considerando que la columna opera con flujos bajos de vapor, se supone constante y la ecuación (2-61) se adimensionaliza

$$\frac{dY}{dZ} = \frac{V_o N_{oG} (Y^* - Y)}{V} - \left(\frac{Y}{V} \right) \frac{dV}{dZ} \quad (2-62)$$

donde:

$$N_{oG} = K_{y,p} a_s^v L_{eff} / V_o$$

Y

$$Z = z / L_{eff}$$

La ecuación para flujo de calor, considerando vapor saturado es:

$$\frac{dQ}{dZ} = \lambda_B \frac{d(VY)}{dZ} + \lambda_A \frac{d[V(1-Y)]}{dZ} \quad (2-63)$$

El flujo de calor es constante en la sección adiabática, por lo que

$$\frac{dQ}{dz} = 0 \quad (2-64)$$

por lo que, combinando (2-62) y (2-63) y (2-64):

$$\frac{dY}{dz} = (1 - f_H Y) (Y^* - Y) N_{oG} \frac{G_o}{G} \quad (2-65)$$

$$\text{donde } f_H = (\lambda_A - \lambda_B) / \lambda_A$$

Los resultados que obtienen Seok y Hwang (1975) con esta ecuación son buenos, en general, ya que predicen aproximadamente el perfil de composiciones a lo largo de la columna. En los cálculos realizados para los sistemas etanol-agua y metanol-agua se apoyaron en curvas de operación reportadas en la literatura.

El modelo anterior, sin embargo, tiene varios defectos. Considerando que los resultados experimentales de la DCG demuestran una alta eficiencia de separación en columnas de longitudes cortas, en el trabajo de modelamiento anterior no se aprecia una explicación clara de la eficiencia que se logra en la columna. Seok y Hwang (1985) plantean que el área interfacial se incrementa con el medio poroso empleado, pero no presentan datos que soporten esta conjetura. En realidad, la forma de modelamiento empleada, en la cual se utiliza un coeficiente global de transferencia de masa para la fase gas, $(K_y a_p)$, impide ver con claridad cuáles son los factores que contribuyen a la alta eficiencia de separación. Esto se debe a que tal coeficiente engloba los coeficientes locales de las fases líquida y gaseosa, la pendiente de la curva de equilibrio, la dependencia de las

composiciones de bulto y el área interfacial.

La forma más adecuada para resolver el planteamiento anterior es mediante un análisis más profundo de los fenómenos de transporte que se presentan en el sistema. Este enfoque se ha empezado a aplicar recientemente en el modelamiento de columnas de destilación convencionales (Seader, 1989) con excelentes resultados.

La comprensión de los fenómenos y principios básicos del sistema es fundamental para lograr un buen modelamiento del sistema y con ello diseñar, optimizar y controlar la operación. En el modelamiento anterior, aunque se obtengan buenas predicciones, se adolece de una comprensión clara de tales principios básicos y con ello se limitan las etapas siguientes de ingeniería del sistema. Por esta razón, el propósito de este trabajo, además de analizar y presentar el potencial de la DCG dentro de la problemática de las separaciones, consiste en un estudio más profundo de los fenómenos de transporte involucrados en DCG, con la finalidad de comprender con mayor claridad la eficiencia alcanzada y traducir el análisis en un modelo mejorado del comportamiento del sistema.

PARTE III.

DESARROLLO

3.1. MOVIMIENTO DE FLUIDOS Y TRANSFERENCIA INTERFACIAL.

En este capítulo se realiza un análisis de los fenómenos involucrados en DCG, con la finalidad de establecer en forma más clara los principios básicos que gobiernan esta operación y con ello derivar planteamientos para explicar su comportamiento y, así, su alta eficiencia. El análisis se orienta al esclarecimiento de los efectos del medio poroso y de los fenómenos de capilaridad y de tensión superficial en el movimiento de fluidos a lo largo de la columna y así como la transferencia de masa y calor en la interface. Así mismo, se analiza la dependencia de la tensión superficial en la temperatura y la composición y el efecto del medio poroso y de la composición en la difusividad. Como resultado del trabajo de este capítulo se logra una conceptualización más completa de la DCG.

3.1.1. MOVIMIENTO DE FLUIDOS.

En esta sección se analiza con mayor detalle el movimiento de los fluidos en la columna DCG con la finalidad de establecer las ecuaciones que permitan predecir su comportamiento en la operación.

De acuerdo con la información del capítulo anterior, la característica fundamental de la columna DCG es el medio poroso.

El flujo de fluidos en este tipo de medios es un tema de interés debido al gran número de procesos tecnológicos que involucran la acción capilar para el desplazamiento de fluidos en los intersticios de tales medios (Morrow, 1970). Las ecuaciones de transporte para este tipo de sistemas han sido planteadas por varios autores (Whitaker, 1964, 1986; Slattery, 1969). La descripción del medio poroso es central en este tratamiento para entender y predecir el paso de los materiales en este medio. Es posible establecer la caracterización del medio poroso en términos de propiedades geométricas o estructurales de la matriz que afecta al flujo y en términos de las propiedades de flujo que describen la matriz desde el punto de vista del fluido contenido. El problema de la descripción de un medio poroso es en sí la descripción de las propiedades geométricas o estructurales en alguna forma promediada y relacionar estas propiedades estructurales promedio a las propiedades del flujo. Hay dos niveles de descripción. En un nivel microscópico se caracteriza la estructura de los poros. El objetivo de esto es proveer una descripción que pueda relacionarse con las propiedades macroscópicas o de bulto. Es decir, se busca relacionar la caracterización del poro con la porosidad, la permeabilidad, la dispersión, la tortuosidad, la capilaridad, la conectividad, la permeabilidad relativa, la adsorción y la humectabilidad. En un medio poroso, normalmente el tamaño de poros, formas y orientaciones e interconexiones son muy variadas. Debido a esto es frecuente utilizar una distribución estadística de tamaños de poros o un modelo que provea tamaños de poros promedio

(Greenkorn, 1981). Una forma de obtener el tamaño promedio de poro es la medición de la presión capilar, ya que es una propiedad de equilibrio relacionada con la tensión interfacial (Morrow, 1970). La presión capilar se define por la ecuación (2-47)

$$P_c = \frac{2 \sigma \cos \omega}{r}$$

ω se definió según la figura 2.18 y es equivalente a (Greenkorn, 1981)

$$\cos \omega = \frac{\sigma_{sL} - \sigma_{sV}}{\sigma_{LV}} \quad (3-1)$$

para un fluido que impregna totalmente el medio poroso $\sigma_{sV} = 0$ y $\sigma_{sL} = \sigma_{LV} = \sigma$ y $\cos \omega = 1$, con lo que

$$P_c = \frac{2\sigma}{r} \quad (3-2)$$

De acuerdo con esto, los poros no tienen que ser circulares o de igual tamaño. Sencillamente, se suponen iguales al relacionarse con una propiedad promediada. En la práctica, es frecuente realizar mediciones de la presión del gas y del líquido del sistema, las cuales se relacionan con la presión capilar por (Arastoopour y Semrau, 1989):

$$P_c = P_v - P_L \quad (3-3)$$

En el nivel macroscópico la descripción se realiza en términos de propiedades promedio o de bulto, de tal forma que sus variaciones son más grandes que los poros. Este nivel de descripción, que implica un cierto sentido de volumen promediado, se basa en la ley de Darcy:

$$\langle \bar{u} \rangle = - \frac{K}{\mu_L} \cdot \nabla P_L \quad (3-4)$$

donde \bar{u} es un vector y K , la permeabilidad intrínseca es un tensor de segundo orden que depende de las propiedades direccionales de la estructura del poro.

En esta expresión se desprecian los efectos inerciales y los factores de corrección viscosos, que corresponden a modificaciones de la ley de Darcy denominadas de Boussineq (Mey y Merker, 1987) y de Brinkman (Bird et. al. 1960). Whitaker (1986) demuestra que la contribución de los términos viscosos referidos como corrección de Brinkman es despreciable en la determinación del perfil de velocidad, lo que hace innecesario incorporarlos en la expresión que describe el comportamiento del flujo en el medio poroso. Vafai y Thiyagaraja (1987) plantean que los efectos inerciales son importantes en algunos casos, especialmente en transferencia de calor. Nakayama y Koyama (1987 a, b) estudiaron el efecto de los flujos inerciales en medios porosos adyacentes a superficies horizontales con variación de temperatura en la pared, empleando la aproximación de Boussineq en la forma

$$\frac{\partial v_z}{\partial Y} = - \frac{K g \rho \bar{\beta}}{\mu_L} \frac{\partial T}{\partial Z} \quad (3-5)$$

donde $\bar{\beta}$ es el coeficiente de expansión térmica.

Encuentran que se obtienen mejores predicciones en la pared, acoplando la ecuación (3-5) con la ecuación de energía en esta zona. Mey y Merker (1987), estudiando un sistema similar a un tubo caliente, analizaron el efecto de la variación de propiedades en el flujo a través del medio poroso y comparan este efecto con respecto a la consideración de propiedades constantes, tomadas como el promedio entre el extremo frío y el extremo caliente. Encuentran que la solución obtenida con propiedades constantes se desvía aproximadamente un 3% de la obtenida con propiedades variables.

De lo anterior se desprende que los efectos inerciales son importantes en la pared, pero que su contribución en el sistema total es baja. Estos efectos probablemente son importantes en sistemas que operen a altas temperaturas. Aspectos similares se derivan de las componentes de velocidad en diferentes direcciones, planteadas según la ecuación (3-5). Issacci et. al. (1989) simulan la dinámica de un tubo caliente utilizando las ecuaciones de movimiento en coordenadas cartesianas y plantean que es importante analizar el comportamiento en dos direcciones. Sin embargo, el trabajo no se sustenta con datos experimentales. Chellaiah y Viskanta (1987), corrieron experimentos de visualización de flujo de agua en medios porosos y observaron que cuando la temperatura del agua estaba arriba de su punto de

densidad máxima (4°C) se desarrolla un flujo unicelular claramente unidireccional entre el extremo frío y el extremo caliente. El flujo bicelular se presenta abajo de los 4°C para el agua. Adicionalmente observaron que las fuerzas inerciales no eran suficientemente intensas para detectar movimiento convectivo con la técnica de visualización empleada.

De la discusión anterior se deriva que la práctica convencional del empleo de la ecuación de Darcy en tubos calientes es adecuada, si bien en casos de altas o bajas temperaturas es importante considerar otros factores.

La destilación cero gravedad se realiza a temperaturas moderadas y por ello se pueden aplicar principios similares de operación, si bien en estudios posteriores se puede incorporar el análisis de otras variables.

Considerando que en comparación a la resistencia del flujo de líquido axial, la resistencia al flujo de gas es pequeña, la caída de presión en la fase gas es despreciable y por lo tanto la presión de la fase gas P_v se supone constante. Esto es consistente con los límites de operación planteados en la sección anterior para un tubo caliente.

Para la fase líquida, se ha establecido (cap. 2.3) que el flujo convectivo es necesario para el funcionamiento de la columna DCG. Este flujo se establece necesariamente por gradientes de presión. De acuerdo con Chellaiah y Viskanta (1987) y considerando que la razón de longitud de la columna al espesor del anillo poroso es grande, los gradientes radiales de presión se pueden

despreciar, con lo que la ecuación (3-4), para un componente axial, se reduce a:

$$v^L = \frac{-K}{\mu_L} \frac{\partial P_L}{\partial z} \quad (3-6)$$

Combinando las ecuaciones (2-47) y (3-3) se obtiene

$$P_L = P_v - \frac{2 \sigma_L \cos \omega}{r_p} \quad (3-7)$$

donde r_p es el radio efectivo del poro.

Sustituyendo (3-7) en (3-6) se obtiene

$$v^L = \frac{2 K \cos \omega}{\mu_L r_p} \frac{\partial \sigma_L}{\partial z} \quad (3-8)$$

Los cambios en la tensión superficial con respecto al cambio que experimenten las variables del sistema en la columna DCG, se pueden derivar a partir de la ecuación de Gibbs-Duhem para la fase superficial de un sistema (Modell y Reid, 1974):

$$d\sigma = S^\sigma dT - \eta dP + \sum_{i=1}^c \Gamma_i dv_i \quad (3-9)$$

donde S^σ , es la entropía de la fase superficial por unidad de área, η es el espesor de la fase superficial que se define por $\eta = v^\sigma / A^\sigma$ y Γ_i es el número de moles del componente i por unidad de

área superficial.

En un sistema líquido-vapor de varios componentes las expresiones del potencial químico para cada fase son:

$$dv_1^\beta = -\bar{s}_1^\beta dT + \bar{v}_1^\beta dP + \sum_{j \neq 1} \left(\frac{\partial v_1^\beta}{\partial x_j^\beta} \right)_{T, P, x_i} dx_j^\beta \quad (3-10)$$

donde β representa la fase.

La sustitución de la ecuación (3-10) en (3-9), en un sistema a composición constante, resulta en

$$-d\sigma = \left(s^\sigma - \sum_{j=1}^c \Gamma_j \bar{s}_j^\beta \right) dT - \left(\eta - \sum_{j=1}^c \Gamma_j \bar{v}_j^\beta \right) dP \quad (3-11)$$

Combinando la ecuación (3-11) para las fases líquida y gaseosa, se obtiene

$$dP = \frac{\bar{s}_j^V - \bar{s}_j^L}{\bar{v}_j^V - \bar{v}_j^L} dT \quad (3-12)$$

para toda X^β constante

Sustituyendo (3-12) en (3-11) para la fase líquida y suponiendo soluciones ideales donde $\bar{v}_j^L = v_j^L$, que implica

$$\eta - \sum_{j=1}^c \Gamma_j \bar{v}_j^L = \sum_{j=1}^n \Gamma_j \left(\frac{\eta}{\sum \Gamma_j} - v_j^L \right) \cong 0 \quad (3-13)$$

se obtiene

$$-\left(\frac{\partial \sigma}{\partial T}\right) = \left(s^\sigma - \sum_{j=1}^c \Gamma_j \bar{s}_j^L \right) \quad \text{COMPOSICION} \quad \text{CONSTANTE} \quad (3-14)$$

que establece la variación de la tensión superficial con la temperatura.

Por otro lado, para analizar la relación de la tensión superficial con la composición, considérese un sistema de dos fases y dos componentes. De las ecuaciones (3-9) y (3-10)

$$-\left(\frac{\partial \sigma}{\partial x_1^L}\right)_{T,P} = \Gamma_1 \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1^L}\right)_{T,P} - \Gamma_2 \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2^L}\right)_{T,P} \quad (3-15)$$

y de la ecuación de Gibbs-Duhén:

$$\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2^L}\right)_{T,P} = \left(\frac{x_1^L}{x_2^L}\right) \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1^L}\right)_{T,P} \quad (3-16)$$

y de acuerdo con la ecuación (2-7)

$$-\left(\frac{\partial \sigma}{\partial x_1^L}\right)_{T,P} = \left(\Gamma_1 - \frac{x_1^L}{x_2^L} \Gamma_2 \right) RT \left(\frac{\partial \ln \bar{f}_1}{\partial x_1^L}\right)_{T,P} \quad (3-17)$$

Esta ecuación, en términos de los coeficientes de actividad se convierte en

$$-\left(\frac{\partial \sigma}{\partial x_1^L}\right)_{T,P} = \left(\Gamma_1 - \frac{x_1^L}{x_2^L} \Gamma_2\right) RT \left[\frac{1}{x_1^L} + \left(\frac{\partial \ln \gamma_1}{\partial x_1^L}\right)\right]_{T,P} \quad (3-18)$$

que establece la dependencia de la tensión superficial con la composición. Sin embargo, recordando la definición de Γ y sabiendo que

$$x_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2}$$

donde n_1 y n_2 son el número de moles de los componentes 1 y 2 respectivamente, se puede observar que

$$\left(\Gamma_1 - \frac{x_1}{x_2} \Gamma_2\right) = 0$$

con lo que

$$-\left(\frac{\partial \sigma}{\partial x_1}\right)_{T,P} = 0 \quad (3-19)$$

Se debe notar que esta conclusión no es totalmente satisfactoria, tanto teórica como prácticamente. Experimentalmente (Reid, et. al., 1977) se observa que la tensión superficial cambia con la composición. Teóricamente, debe

observarse que se han mantenido la temperatura y la presión constantes en un sistema de dos fases y dos componentes y aún así se permitió la variación de la composición, lo que no es viable. Otro aspecto es la consideración de que en la definición del espesor de la fase superficial se supone la misma área superficial para los diferentes componentes, lo que sólo es válido en moléculas del mismo tamaño.

Lo importante del análisis anterior es que se puede considerar, al menos a bajas presiones, que la tensión superficial es más sensible a cambios en la temperatura que a cambios en la composición. Esto implica que para el caso de la DCG, se puede despreciar la variación de la tensión superficial con la composición, con lo que la temperatura queda como la variable responsable de generar la fuerza motriz que hace operar el sistema.

De acuerdo con la expresión (3-14), que relaciona el cambio de la tensión superficial con la temperatura como la diferencia de las entropías molares de la superficie y del medio, se puede observar que en un sistema con mezclado homogéneo no hay razón para suponer que esta diferencia se modifique. Por consiguiente, el cambio de la tensión superficial con respecto a la temperatura debe tender a un valor constante. Experimentalmente, se observa que esto es aproximadamente cierto (Reid, et. al, 1977). Solamente en regiones a muy baja temperatura tal variación no es constante. Con esta base, se puede considerar que si los cambios de temperatura no son muy abruptos a lo largo de la columna DCG, el cambio de la tensión superficial con respecto a

la posición se mantendrá en un valor aproximadamente constante. Esta consideración es una práctica común en el modelamiento de tubos calientes (Dunn y Reay, 1982). Por lo tanto, se puede aproximar la ecuación (3-8) en función de las condiciones de temperatura en los extremos de la columna considerando humectación perfecta según (3-1) y (3-2):

$$u^L = \frac{2K}{\mu^L r_p} \frac{\sigma_{Lc}(T_c) - \sigma_{Le}(T_e)}{L_t} \quad (3-20)$$

donde $\sigma_{Lc}(T_c)$ es la tensión superficial del componente ligero a la temperatura T_c de la zona de condensación, $\sigma_{Le}(T_e)$ es la tensión superficial del componente pesado a la temperatura T_e del evaporador y L_t es la longitud efectiva de la columna.

La expresión (3-20) permitirá predecir la velocidad del líquido en la columna DCG en función del gradiente capilar establecido por diferencias de tensión superficial.

3.1.2. TRANSFERENCIA DE MASA.

El objetivo de esta sección es describir y justificar la alta eficiencia de transferencia de masa lograda en la experimentación realizada por Seok y Hwang (1985) en la columna DCG. Dos aspectos llaman la atención en los resultados de la experimentación mencionada: 1) las longitudes cortas en las cuales se lograron las separaciones de las mezclas tratadas y 2) el régimen de flujo con el cual se realizó la operación.

El primer aspecto se puede interpretar en cierta forma como lo explican Seok y Hwang (1985) por la existencia de una gran área interfacial. De acuerdo con la ecuación (2-58) entre mayor sea el área interfacial más pequeña será la altura de la unidad de transferencia y por consiguiente la altura total de una torre de destilación será más pequeña. Esta explicación, sin embargo, no parece muy convincente debido a situaciones como las siguientes:

- el contacto del gas con el líquido se lleva a cabo solamente en la cara interna del anillo poroso con la parte hueca de la columna, ya que es muy poco probable que el gas fluya a contracorriente con el líquido por el medio poroso. En poros pequeños el gas y el líquido no coexisten (Arastoopour y Semrau, 1989). Así, aunque el área interfacial del medio poroso por unidad de volumen sea grande, el área neta para la transferencia de masa, comparativamente, se reduce.
- las eficiencias que se observan en columnas empacadas convencionales con diferentes empaques utilizados son del 60% al 90%, por lo que en una operación muy eficiente se puede esperar que la altura de una columna se reduzca del 10 al 40%. En DCG se reporta que se reduce en 8/9 (Seok y Hwang, 1985).
- la tercera situación es nuevamente el régimen de flujo que operó en la separación: el denominado régimen darciano que se caracteriza por números de Reynolds menores de 10. Normalmente, en regímenes con números de Reynolds pequeños los coeficientes de transferencia de masa son bajos.

Este último aspecto se puede apreciar desde el punto de vista de diversas teorías de transferencia de masa.

Considérese la teoría de película (Treybal, 1980) que postula que en un proceso de transferencia de masa entre dos fases, la concentración seguirá la línea punteada de la figura 3.1, de manera que el flujo de materia provocado por el gradiente de concentraciones $C_{A1} - C_{A2}$ se atribuye a la difusión del componente A a través de una película de espesor efectivo δ . Entonces el flujo molar del componente A se expresa por:

$$N_A = - D_{AB} \left. \frac{\partial C_A}{\partial z} \right|_{\delta} = \frac{D_{AB}}{\delta} (C_{A1} - C_{A2}) \quad (3-21)$$

o bien

$$N_A = k_c (C_{A1} - C_{A2}) \quad (3-22)$$

de donde, el coeficiente de película, por definición es:

$$k_c = \frac{D_{AB}}{\delta} \quad (3-23)$$

En esta última expresión se observa que el coeficiente de transferencia de masa, k_c , es directamente proporcional a la difusividad e inversamente proporcional al espesor de la película interfacial, δ . Este espesor depende de las condiciones de flujo

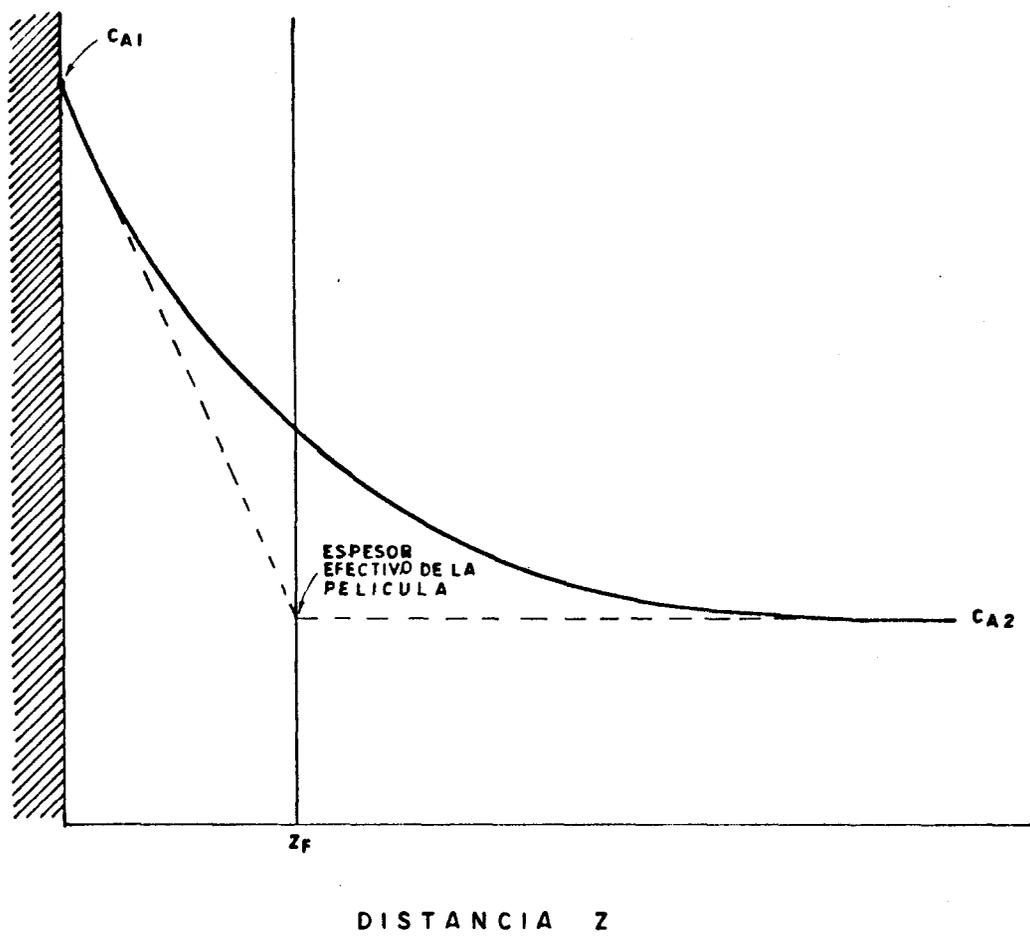


FIGURA 3.1.- TEORIA DE PELICULA

del sistema. Un espesor pequeño se logra en condiciones de régimen de flujo alto. Es decir, una transferencia de masa alta se logra en condiciones de régimen de flujo caracterizado por números de Reynolds grandes. De aquí se desprende que, de acuerdo con la teoría de película, es difícil esperar coeficientes grandes de transferencia de masa en la columna DCG, ya que los números de Reynolds son pequeños.

Además, la teoría de película fue desechada debido a que se observó que a medida que el régimen de flujo aumenta, la dependencia del coeficiente de transferencia de masa es proporcional a D^n , donde n es menor de 1.

Higbie (1935) enfatiza que en muchas situaciones el tiempo de exposición de un fluido a la transferencia de masa es corto de manera que el gradiente de concentraciones como se plantea por la teoría de película, característico del estado estable, no se alcanza a desarrollar y plantea la probabilidad de que las condiciones de flujo estable en equipos industriales ordinarios nunca se alcancen. De acuerdo con esto, en su teoría que denomina de "penetración" plantea que la transferencia de masa depende del tiempo de exposición de las burbujas de gas con el líquido y expresa el coeficiente de película como:

$$k_L = \sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi t_s}} \quad (3-24)$$

donde t_s es el tiempo de exposición. Este tiempo es constante para un sistema determinado y es menor a medida que el régimen de

flujo es más alto. De acuerdo con Higbie, nuevamente, es difícil esperar coeficientes grandes de transferencia de masa en DCG y por el contrario es más viable esperar, que, por efecto del medio poroso los tiempos de exposición sean aún más grandes y por consiguiente los coeficientes más pequeños.

La teoría de renovación de superficie de Danckwerts (Treybal, 1980) plantea que los tiempos constantes de exposición de Higbie son un caso especial de lo que puede ser más real en una interface líquido-gas, que es un mosaico de elementos de superficie con diferentes tiempos de exposición. De acuerdo con esto, la transferencia de masa es función de la razón promedio, s , de remplazo de elementos superficiales, y el coeficiente de transferencia de masa se da por:

$$k_{L_{av}} = \sqrt{D_{AB} s} \quad (3-25)$$

La razón promedio de remplazo de elementos es más alta a medida que el régimen de flujo es más alto. De acuerdo con esta teoría, la expectativa de coeficientes grandes de transferencia de masa en DCG es poca. Así mismo, en las expresiones usadas actualmente, derivadas del análisis de teoría de capa límite, que son de la forma

$$Sh = f \left(Re^{a_1}, Sc^{a_2} \right) \quad (3-26)$$

donde:

$Sh = f(k_c)$, número de Sherwood

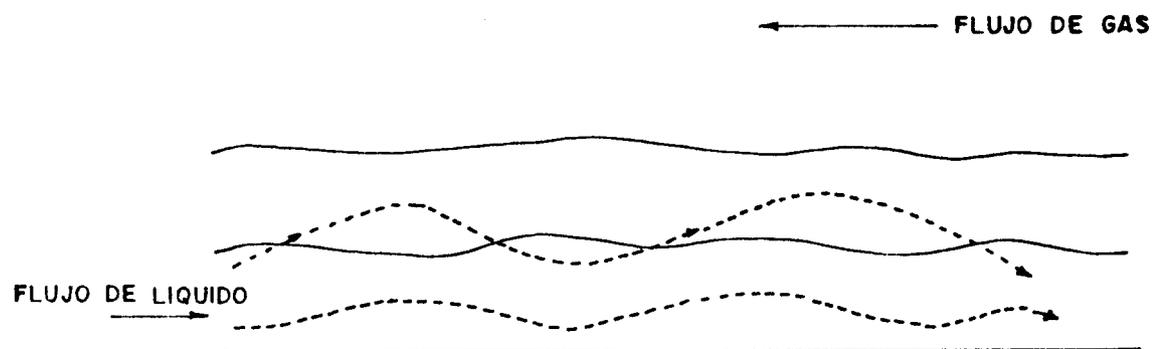
Re = número de Reynolds

Sc = número de Schmidt

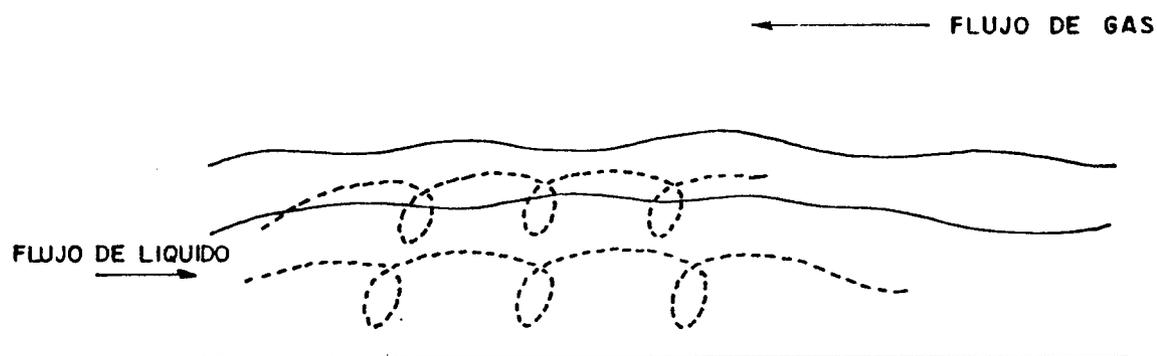
es difícil justificar un proceso de alta transferencia de masa, ya que el coeficiente a_1 es más grande a medida que la intensidad de la turbulencia se incrementa.

Hasta aquí, no está muy clara la razón de la alta eficiencia de separación lograda en DCG en longitudes cortas. Nomura y Farrell (1985) realizaron mediciones experimentales de coeficientes de transferencia de masa y calor en cilindros porosos horizontales y encontraron coeficientes aumentados, pero no explican la razón de tal incremento. Sin embargo, proporcionan evidencia adicional que indica coeficientes altos de transferencia de masa en medios porosos.

Back y McReady (1988) estudiaron el transporte de masa interfacial para flujo gas-líquido co-corriente. La resistencia a la transferencia de masa se derivó en términos del espesor de la película interfacial y del tipo de régimen de flujo. Demostraron que la transferencia de masa depende de la magnitud y frecuencia de las fluctuaciones de velocidad normales a la interface. Se puede apreciar (Fig. 3.2) que este concepto implica un cierto grado de mezclado de la película cerca de la interface. A medida que la turbulencia en el flujo de bulto se incrementa, la frecuencia de fluctuación de velocidades en la interface se



(a)



(b)

FIGURA 3.2.- MEZCLADO DE PELICULA PROMOVIDO POR LAS FLUCTUACIONES DE VELOCIDAD DE ACUERDO CON EL REGIMEN DE FLUJO

a). - Régimen Laminar

b). - Régimen Turbulento

incrementa, el mezclado de la película se incrementa y, por consiguiente, la capacidad de transferencia de masa aumenta. De acuerdo con esto, un flujo en régimen laminar provee una menor fluctuación de velocidad y, consecuentemente, un menor mezclado de película, resultando en una capacidad de transferencia de masa más pequeña.

Si se considera que la razón de transferencia de masa es promovida por el grado de mezclado de película, independientemente de cómo se logre este mezclado, se puede suponer que en la columna DCG existe un alto grado de mezclado de película. Sin embargo, tal nivel de mezclado no se puede esperar en el régimen de flujo prevaleciente. Por lo tanto, se puede suponer que el medio poroso es responsable de este mezclado, debido a que consiste de muchos microcanales que proporcionan trayectorias aleatorias para el flujo del fluido. Esto implica que las fluctuaciones de velocidad normales a la interface son mayores con el medio poroso que sin él. De esta forma, la resistencia efectiva de película se reduce sustancialmente y la transferencia de masa se promueve. De acuerdo con esto, las fluctuaciones de velocidad son función del régimen de flujo prevaleciente y de la estructura del medio. En la fase gas, el medio es hueco y hay formas de estimar la transferencia de masa. En la fase líquida el medio es poroso y su caracterización es complicada (Greenkorn, 1981). Sin embargo, se puede establecer que el espesor de la película interfacial es función del régimen de velocidad y de la estructura del medio poroso. Esto plantea un efecto combinado cuyos resultados son diferentes a los previstos por las teorías convencionales de

transferencia de masa para situaciones en las que están involucrados medios porosos de baja permeabilidad. Dos aspectos destacan aquí: uno es el efecto identificado y su significado físico, y otro la estructura de tal efecto, el cual debe analizarse con mayor profundidad. Esta última tarea está fuera del alcance del presente estudio. Lo importante es que en la extensión del concepto de mezclado de película a medios porosos se ha identificado un efecto en la transferencia de masa. Con esta base, se pueden realizar estimaciones, como se verá más adelante, con correlaciones aproximadas a la magnitud observada.

Esta conceptualización es diferente de la que atribuye la alta transferencia de masa al área interfacial que proporciona el empaque. El concepto de mezclado de película provee la expectativa de altos coeficientes de transferencia de masa en DCG y con ello se puede explicar mejor la alta eficiencia lograda en la separación.

3.1.3. TRANSFERENCIA DE CALOR.

Según se describió anteriormente, la columna DCG consiste básicamente de tres secciones: evaporador, zona adiabática y condensador. El calor se añade al sistema en el evaporador y se extrae en el condensador. En la operación en estado estable no existe acumulación de calor, de manera que el flujo axial de energía a través de la zona adiabática debe ser constante. La principal forma de transporte de calor en el sistema es la que ocurre acompañada con el transporte de materia; así que,

considerando que las composiciones del gas y del líquido varían a lo largo de la columna, debe ocurrir un proceso de transferencia de calor entre las fases y, por consiguiente, también debe establecerse un perfil de temperaturas. A medida que el gas fluye hacia el condensador y se enriquece en el componente ligero, pierde calor, el cual gana el líquido en el flujo de este hacia el evaporador. Se puede concluir que el proceso de transferencia de masa va acompañado por transferencia de calor y que por lo tanto, los perfiles de composición y temperatura deben estar acoplados.

3.1.4. DIFUSIVIDAD EN LAS FASES LIQUIDA Y GASEOSA.

La difusividad desempeña un papel importante en el proceso de transferencia de masa que se lleva a cabo en la columna DCG. Debido a ello, es necesario analizar la naturaleza de los coeficientes de difusión, así como de los coeficientes de transferencia de masa, ya que están estrechamente relacionados, según la definición dada por la expresión (3-23).

Un aspecto que destaca en el perfil de composiciones que se establece en la columna DCG, es que varía en un rango de diluido a concentrado y esto afecta directamente el coeficiente de difusión de la fase líquida. Tal variación se puede estimar a partir de la correlación de Vignes (Reid, et. al. 1977, p. 585)

$$D_{AB} = \left(D_{AB}^{\circ} \right)^{x_B} \left(D_{BA}^{\circ} \right)^{x_A} \quad (3-27)$$

Tomando esto en cuenta, el coeficiente de transferencia de

masa de la fase líquida no será constante a lo largo de la columna. El efecto de la variación de la difusividad en tal coeficiente se puede apreciar en las siguientes correlaciones para sistemas empacados (Treybal, 1980, p. 75):

Flujo laminar:

$$k_L = 1.09 \omega^L / \left(\epsilon R_e^{0.815} S_c^{2/3} \right) \quad (3-28)$$

Flujo turbulento:

$$k_L = 20.4 \omega^L / \left(\epsilon R_e^{0.815} S_c^{2/3} \right) \quad (3-29)$$

considerando que

$$S_c = f (D_{AB})$$

En la fase gas, el coeficiente de difusión no es tan sensible a cambios en la composición (Reid, et. al., 1977) como ocurre en la fase líquida, por lo que se puede considerar aproximadamente constante a lo largo de la columna.

Para disponer de una correlación para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa para la fase gas, se puede partir de la siguiente expresión derivada de analogías de Chilton y Colborn (Geankoplis, 1986, p. 364).

Para flujo en tuberías:

$$\frac{f}{2} = \frac{k_v}{u^v} Sc^{2/3} \quad (3-30)$$

donde f es el factor de fricción de Fanning, que se define por (Geankoplis, 1986, p. 99)

$$f = 16/Re \quad , \quad Re \leq 2100 \quad (3-31)$$

Ya que el coeficiente de transferencia de masa se supone constante para la fase gas, se puede considerar la condición de que en un tubo caliente la caída de presión en el flujo de gas debido a fuerzas viscosas es igual a la cabeza cinética (Dunn y Reay, 1982) cuando en el evaporador o el condensador

$$Re_r = \frac{\rho^v u^v r^v}{\mu^v} = 8 \quad (3-32)$$

donde r^{vv} es el radio del área disponible para el flujo del gas.

Sustituyendo (3-31) y (3-32) en (3-30) se obtiene la siguiente expresión para estimar el coeficiente de transferencia de masa en la fase gas:

$$k_v = u^v / (Sc^{2/3}) \quad (3-33)$$

3.2. MODELO DEL COMPORTAMIENTO DE LA DESTILACION CERO GRAVEDAD.

Hasta este punto, se han establecido los supuestos y aspectos básicos del comportamiento de la DCG. Con la finalidad de derivar un modelo que incorpore los planteamientos realizados, es importante destacar la relevancia de los fenómenos de la zona adiabática. En un tubo caliente esta zona cumple principalmente la función de satisfacer requerimientos de geometría. En la columna DCG el proceso de separación ocurre primordialmente en esta región. El evaporador y el condensador básicamente cambian el estado del fluido. Considerando esto, se puede aproximar el comportamiento de la columna completa, en relación a la separación, con las ecuaciones derivadas para la zona adiabática. Como ya se mencionó, esta es una práctica común en tubos calientes.

Partiendo de lo anterior, se procede a la derivación del modelo matemático basado en las fuerzas directrices que gobiernan la operación DCG. La obtención de este modelo contribuye a alcanzar un mejor conocimiento de la operación. Para que DCG se aplique industrialmente se requiere aún más información, tanto de estudios teóricos como experimentales, como son el escalamiento, el análisis de diseños mecánicos, materiales de construcción, operabilidad, mantenimiento y control, con lo que

se podrán definir las aplicaciones viables, así como sus limitaciones inherentes. Sin embargo, para la obtención de tal información y soportar estudios posteriores de diseño, optimización y control se requiere del entendimiento de los principios básicos y de un modelo consistente. El presente trabajo contribuye en esta dirección, desarrollando en este capítulo las ecuaciones de conservación de materia y energía, que complementan a las ecuaciones de movimiento y transferencia interfacial presentados en el capítulo anterior. Así mismo, un análisis adimensional de estas ecuaciones conduce a establecer las condiciones de equilibrio en la interface.

3.2.1. CONSERVACION DE MASA

En la fase líquida, un componente se mueve en la dirección axial debido a dos factores: 1) difusión promovida por gradientes de concentración a lo largo del tubo y 2) flujo convectivo debido al gradiente de tensión interfacial prevaleciente en la columna.

Suponiendo mezclado perfecto en el medio poroso, no hay gradientes de concentración en la dirección angular. Considerando que el radio de la columna es pequeño y, aún más, que el espesor del medio poroso es pequeño, se puede suponer un perfil de composición radial plano, con lo que la transferencia de masa, en cada punto de la columna, de la fase líquida a la fase gas (o viceversa) se lleva a cabo a través de la película interfacial que separa la composición interfacial de la composición de bulbo.

Con base en lo anterior, los flujos molares en la fase

líquida de un sistema binario para el componente ligero en la zona adiabática son:

$$N_{Az}^L = - C_L D_{eff} \frac{\partial x_A}{\partial z} + C_L x_A v_z^L \quad (3-34)$$

$$N_{Ar}^L = k_L C_L (x_A - x_{Ai}) \quad (3-35)$$

donde z representa la dirección axial y r la dirección radial, x_{Ai} es la composición interfacial; k_L el coeficiente individual de transferencia de masa local. D_{eff} es la difusividad efectiva y se define para medios porosos isotrópicos como (Smith, 1986, p. 542)

$$D_{eff} = \frac{\varepsilon D_{AB}}{\tau} \quad (3-36)$$

ε es la porosidad del medio y τ el factor de tortuosidad, que se puede aproximar como $1/\varepsilon$.

Para establecer el balance de materia de la fase líquida en la columna, tómesese como referencia el elemento diferencial que se muestra en la figura 3.3, en la cual el sentido positivo de la dirección axial se establece del condensador hacia el evaporador. En este elemento diferencial se presentan las siguientes contribuciones al flujo:

$$\text{Entrada del componente A en } z = N_{Az}^L \Big|_z \pi (r_2^2 - r_1^2)$$

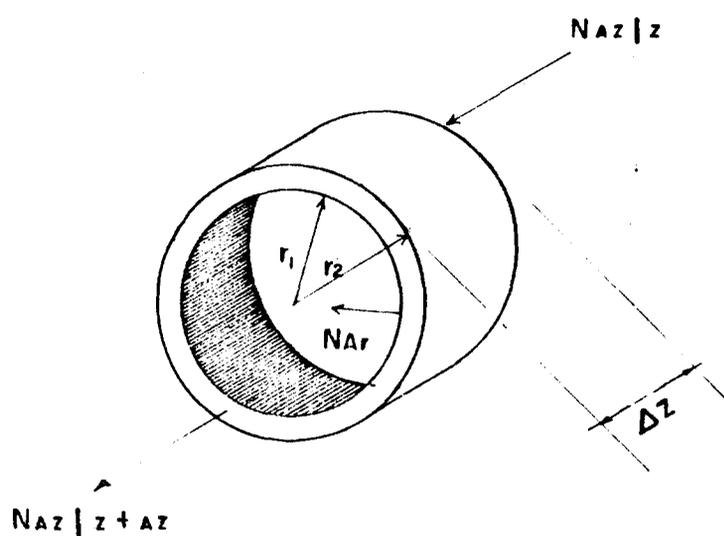


FIGURA 3.3.- ELEMENTO DIFERENCIAL DEL ANILLO POROSO A TRAVES DEL CUAL FLUYE LA FASE LIQUIDA EN D.C.G.

$$\text{Salida del componente A en } z + \Delta z = N_{Az}^L \Big|_{z+\Delta z} \cdot \pi \left(r_2^2 - r_1^2 \right)$$

$$\text{Salida del componente A en } r_1 = N_{Ar}^L \Big|_{r_1} \cdot 2\pi r_1 \Delta z$$

$$\begin{aligned} \text{Acumulación del componente A en} \\ \text{el elemento diferencial} &= \pi \left(r_2^2 - r_1^2 \right) \Delta z \varepsilon \frac{\partial C_A^L}{\partial t} \end{aligned}$$

Estableciendo el balance para el componente A en el elemento diferencial, se tiene:

$$\begin{aligned} N_{Az}^L \Big|_z \cdot \pi \left(r_2^2 - r_1^2 \right) - N_{Az}^L \Big|_{z+\Delta z} \cdot \pi \left(r_2^2 - r_1^2 \right) - \\ - N_{Ar}^L \Big|_{r_1} \cdot 2\pi r_1 \Delta z = \pi \left(r_2^2 - r_1^2 \right) \Delta z \varepsilon \frac{\partial C_A^L}{\partial t} \end{aligned} \quad (3-37)$$

dividiendo (3-27) entre $\pi (r_2^2 - r_1^2) \Delta z$

$$\frac{N_{Az}^L \Big|_z - N_{Az}^L \Big|_{z+\Delta z}}{\Delta z} - \frac{2r_1}{\left(r_2^2 - r_1^2 \right)} N_{Ar}^L = \varepsilon \frac{\partial C_A^L}{\partial t} \quad (3-38)$$

tomando el límite cuando Δz tiende a cero:

$$-\frac{\partial N_{Az}^L}{\partial z} - \frac{2r_1}{(r_2^2 - r_1^2)} N_{Ar}^L = \epsilon \frac{\partial C_A^L}{\partial t} \quad (3-39)$$

Sustituyendo (3-24) y (3-25) en (3-29) y considerando constante la concentración total se obtiene:

$$\begin{aligned} D_{eff} \frac{\partial^2 x_A}{\partial z^2} + \frac{\partial x_A}{\partial z} \cdot \frac{\partial D_{eff}}{\partial z} - u_L \frac{\partial x_A}{\partial z} - \\ - \frac{2r_1 k_L}{(r_2^2 - r_1^2)} (x_A - x_{A1}) = \epsilon \frac{\partial x_A}{\partial t} \end{aligned} \quad (3-40)$$

en esta expresión se ha cambiado la nomenclatura de u_z^L a u_L , ya que es la única componente de la velocidad que interviene en la ecuación.

La ecuación (3-40) está sujeta a las siguientes condiciones frontera

En $z = 0$ (condensador)

$$x_A(o,t) = y_A(o,t) \quad (3-41)$$

En $z = L_t$ (evaporador)

$$\left. \frac{\partial x_A}{\partial z} \right|_{L, t} = 0 \quad (3-42)$$

Estas condiciones frontera se derivan considerando que en el condensador el vapor que llega se condensa totalmente y el líquido adquiere entonces la misma composición del vapor que llega a esta zona (Ec. 3-41). El líquido fluye del condensador hacia el evaporador y al llegar a esta zona se vaporiza totalmente, con lo que la composición en este punto se mantiene constante con respecto a la posición (Ec. 3-42).

En la fase gas los flujos molares también se promueven en la dirección axial por difusión y convención. En la dirección radial, nuevamente se considera un perfil plano de concentraciones, debido a que el radio de la columna es pequeño y a que las velocidades de difusión en la fase gas normalmente son altas, promoviendo un alto grado de mezclado. Con estas consideraciones los flujos molares del componente A en la fase gaseosa son

en la dirección axial:

$$N_{Az}^v = - C_V D_{AB} \frac{\partial y_A}{\partial z} + C y_{Az}^v \quad (3-43)$$

en la dirección radial

$$N_{Ar}^v = k_v C_v \left(Y_{Ai} - Y_A \right) \quad (3-44)$$

donde y_{Ai} es la composición interfacial del gas y k_v es el coeficiente individual de transferencia de masa local para la fase gas.

Para establecer el balance de materia de la fase gas en la columna DCG, tómesese como referencia el elemento diferencial que se muestra en la figura 3.4, en la cual se conserva el sentido de los ejes según se definió para la fase líquida. Las contribuciones al flujo molar del componente A en el elemento de referencia son las siguientes:

$$\text{Entrada del componente A en } z + \Delta z = N_{Az}^v \Big|_{z + \Delta z} \cdot \pi r_1^2$$

$$\text{Salida del componente A en } z = N_{Az}^v \Big|_z \cdot \pi r_1^2$$

$$\text{Entrada del componente A en } r_1 = N_{Ar}^v \Big|_{r_1} \cdot 2 \pi r_1 \Delta z$$

$$\begin{aligned} \text{Acumulación del componente A en} \\ \text{el volumen del elemento} &= \frac{\partial C_A^v}{\partial t} \cdot \pi r_1^2 \Delta z \end{aligned}$$

Sumando las contribuciones anteriores se obtiene:

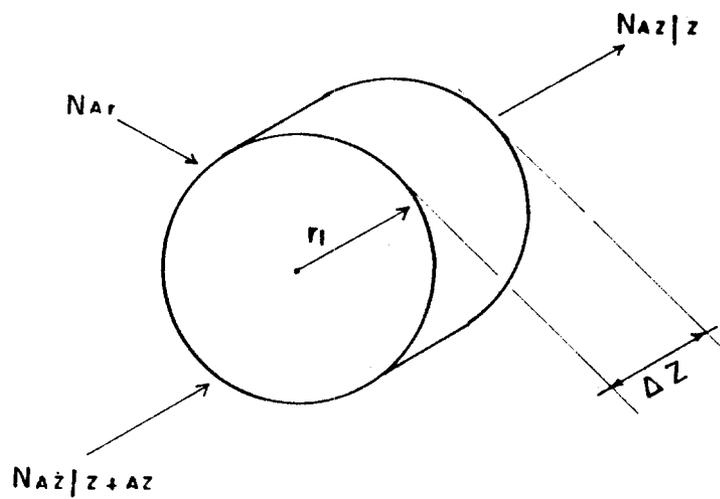


FIGURA 3.4.- ELEMENTO DIFERENCIAL DEL VOLUMEN DE LA ZONA A TRAVES DE LA CUAL FLUYE LA FASE GAS EN DCG.

$$N_{Az}^v \Big|_{z+\Delta z} \cdot \pi r_1^2 - N_{Az}^v \Big|_z \cdot \pi r_1^2 + N_{Ar}^v \Big|_{r_1} \cdot 2\pi r_1 \Delta z = \frac{\partial C_A^v}{\partial t} \cdot \pi r_1^2 \Delta z \quad (3-45)$$

dividiendo entre $\pi r_1^2 \Delta z$ y tomando el límite cuando Δz tiende a cero:

$$\frac{\partial N_{Az}^v}{\partial z} + \frac{2}{r_1} N_{Ar}^v = \frac{\partial C_A^v}{\partial t} \quad (3-46)$$

sustituyendo (3-31) y (3-32) en (3-34) y considerando constante la concentración total:

$$- D_{AB} \frac{\partial^2 y_A}{\partial z^2} + v_z \frac{\partial y_A}{\partial z} + \frac{2 k_v}{r_1} (y_{A1} - y_A) = \frac{\partial y_A}{\partial t} \quad (3-47)$$

En esta expresión se ha realizado el cambio de nomenclatura de v_z^v a v_z , ya que es la única componente de velocidad que interviene.

Las condiciones frontera que aplican a la ecuación (3-47) son

En $z = 0$ (condensador)

$$\frac{\partial y_A}{\partial z} \Big|_{0,t} = 0 \quad (3-48)$$

En $z = L_t$ (evaporador)

$$Y_A (L_t, t) = x_A (L_t, t) \quad (3-49)$$

El razonamiento para derivar las ecuaciones anteriores es similar al establecido para la fase líquida: el gas viaja hacia el condensador y al llegar a esta zona se condensa totalmente, manteniendo constante la composición del gas en este punto (Ec. 3-48). En el evaporador, el gas se genera de una evaporación total del líquido que llega a esta zona, por lo que la composición del vapor es la misma del líquido que lo generó (Ec. 3-49).

Las expresiones (3-40) y (3-47) representan el comportamiento de la transferencia de masa del componente ligero en la columna DCG.

3.2.2. CONSERVACION DE CALOR.

La transferencia de energía en la columna DCG, como ya se mencionó, está acoplada con la transferencia de masa y tiene esencialmente la misma estructura. La transmisión de calor en el sistema DCG ocurre debido a dos factores: 1) conducción y 2) energía transportada con la masa. Es importante notar que en la interfase gas-líquido hay también una interface sólido-fluido debido al medio poroso, aún cuando, la energía transferida a través de esta interface debe ser pequeña en comparación con la energía transportada con la masa.

Con las consideraciones anteriores, los flujos de energía para la fase líquida son:

en la dirección axial

$$E_z^L = q_z^L + \sum_{j=1}^2 N_j^L \bar{H}_j^L \quad (3-50)$$

$$q_z^L = - k_{Teff} \frac{\partial T}{\partial Z} \quad (3-51)$$

$$E_r^L = q_r^L + \sum_{j=1}^2 N_j^L \bar{H}_j^L \quad (3-52)$$

$$q_r^L = h_L \left(T - T_i \right) \quad (3-53)$$

donde \bar{H}_j^L es la entalpía molar parcial del componente j en la fase líquida, h_L es el coeficiente local de transferencia de calor, T_i es la temperatura interfacial y k_{Teff} es la conductividad térmica efectiva, que se puede aproximar, de la forma más sencilla, por

$$k_{Teff} = (1 - \epsilon) k_{TS} + \epsilon k_{TL} \quad (3-54)$$

k_{TS} es la conductividad térmica del medio poroso, y k_{TL} la conductividad térmica del líquido.

De acuerdo con lo anterior, el balance de energía para la fase líquida se expresa como:

$$-\frac{\partial E_z^L}{\partial z} - \frac{2r_1}{(r_2^2 - r_1^2)} \cdot E_r^L = \rho_m \hat{c}_{p_m} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3-55)$$

donde ρ_m y \hat{c}_{p_m} son los valores promedio de la densidad y la capacidad calorífica por unidad de masa del líquido y el medio poroso.

Sustituyendo las ecuaciones (3-50) a (3-53) en (3-55) se obtiene:

$$K_{Teff} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{\partial \left(N_{Az}^L \bar{H}_A^L + N_{Bz}^L \bar{H}_B^L \right)}{\partial z} - \frac{2r_1}{(r_2^2 - r_1^2)} \left[h_L (T - T_i) + N_{Ar}^L \bar{H}_A^L + N_{Br}^L \bar{H}_B^L \right] = \rho_m \hat{c}_{p_m} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3-56)$$

con el uso de

$$\bar{H}_j = c_{p_j} \Delta T \quad (3-57)$$

donde $\Delta T = (T - T_0)$, siendo T_0 la temperatura de referencia y c_{p_j} la capacidad calorífica molar del componente j , y sustituyendo (3-34) y (3-35) en (3-56), desarrollando y reagrupando, la ecuación de energía para la fase líquida queda como:

$$K_{Teff} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \left[C_L D_{eff} \frac{\partial x_A}{\partial z} (c_{p_A} - c_{p_B}) - C_L v_L (c_{p_A} x_A + c_{p_B} x_B) \right] \frac{\partial T}{\partial z} +$$

$$\begin{aligned}
& + \left[C_L D_{eff} \frac{\partial x_A^2}{\partial z^2} (C_{p_A} - C_{p_B}) - C_L \theta_z^L \frac{\partial x_A}{\partial z} (C_{p_A} - C_{p_B}) + \right. \\
& + C_L \frac{\partial x_A}{\partial z} \frac{\partial D_{eff}}{\partial z} (C_{p_A} - C_{p_B}) - \left. \frac{2r_1}{(r_2^2 - r_1^2)} k_L C_L (C_{p_A} + C_{p_B}) (x_A - x_{A1}) \right] \Delta T - \\
& \frac{2 r_1}{(r_2^2 - r_1^2)} h_L (T - T_1) = \rho_m \hat{c}_{p_m} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3-58)
\end{aligned}$$

Las condiciones frontera para (3-58) son similares que para la ecuación (3-40) de conservación de masa

En $z = 0$ (condensador)

$$T_L(o, t) = T_v(o, t) \quad (3-59)$$

En $z = L_t$ (evaporador)

$$\left. \frac{\partial T_L}{\partial z} \right|_{L_t, t} = 0 \quad (3-60)$$

Lo anterior implica que el líquido que se condensa tiene la misma temperatura del vapor que llega al condensador (Ec. 3-59), y en el evaporador, ya que el líquido mantiene su composición constante, la temperatura se mantiene también sin cambio respecto

a la posición.

Los flujos de energía para la fase gas se establecen en forma similar que para la fase líquida:

$$E_z^v = q_z^v + \sum_{j=1}^2 N_j^v \bar{H}_j^v \quad (3-61)$$

$$q_z^v = -k_{TV} \frac{\partial T}{\partial z} \quad (3-62)$$

$$E_r^v = q_r^v + \sum_{j=1}^2 N_j^v \bar{H}_j^v \quad (3-63)$$

$$q_r^v = h_v \left(T_i - T \right) \quad (3-64)$$

El balance de energía para la fase gas tiene la misma estructura que el balance de materia:

$$\frac{\partial E_z^v}{\partial z} + \frac{2}{r_1} E_r^v = \rho_v \hat{c}_{pV} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3-65)$$

Sustituyendo (3-61) a (3-64) en (3-65) se obtiene

$$-k_{TV} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\partial \left(N_{Az}^v \bar{H}_A^v + N_{Bz}^v \bar{H}_B^v \right)}{\partial z} + \frac{2}{r_1} \left[h_v \left(T_i - T \right) + \right.$$

$$+ N_{Ar}^V \bar{H}_A^V + N_{Br}^V \bar{H}_B^V \Big] = \rho_V \hat{c}_{pV} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3-66)$$

Se verá más adelante que esta ecuación tiene únicamente propósitos analíticos. Por consiguiente, si el gas se considera ideal:

$$\bar{H}_V = c_{pV} \Delta T \quad (3-67)$$

y sustituyendo (3-43) y (3-44) en (3-66), desarrollando y agrupando se llega a

$$\begin{aligned} & - k_{TV} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \left[C_V D_{AB} \frac{\partial y_A}{\partial z} (C_{pB} - C_{pA}) + C_V \omega_V (C_{pA} Y_A + C_{pB} Y_B) \right] \frac{\partial T}{\partial z} \\ & + \left[C_V D_{AB} \frac{\partial^2 y_A}{\partial z^2} (C_{pB} - C_{pA}) - C_V \omega_V \frac{\partial y_A}{\partial z} (C_{pB} - C_{pA}) - \right. \\ & \left. - \frac{2}{r_1} k_V C_V (Y_{A1} - Y_A) (C_{pA} + C_{pB}) \right] \Delta T + \frac{2}{r_1} h_V (T_1 - T) = \\ & = \rho_V \hat{c}_{pV} \frac{\partial T}{\partial t} \end{aligned} \quad (3-68)$$

La ecuación (3-68) está sujeta a las siguientes condiciones frontera:

En $z = 0$ (condensador)

CUADRO 3.1

ECUACIONES DE CONSERVACION DE MATERIA Y ENERGIA
EN DESTILACION CERO GRAVEDAD.

CONSERVACION DE MATERIA

FASE LIQUIDA:

$$D_{eff} \frac{\partial^2 x_A}{\partial z^2} + \frac{\partial x_A}{\partial z} \cdot \frac{\partial D_{eff}}{\partial z} - v_L \frac{\partial x_A}{\partial z} -$$

$$\frac{2r_1 k_L}{(r_2^2 - r_1^2)} (x_A - x_{A1}) = \epsilon \frac{\partial x_A}{\partial t} \quad (3-40)$$

FASE GAS

$$D_{AB} \frac{\partial^2 y_A}{\partial z^2} + v_v \frac{\partial y_A}{\partial z} + \frac{2k_v}{r_1} (y_{A1} - y_A) = \frac{\partial y_A}{\partial t} \quad (3-47)$$

CUADRO 3.1 (Continuación)

CONSERVACION DE ENERGIA

FASE LIQUIDA:

$$\begin{aligned}
& k_{Teff} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \left[C_L D_{eff} \frac{\partial x_A}{\partial z} (C_{pA} - C_{pB}) - C_L u_L (C_{pA} x_A + C_{pB} x_B) \right] \frac{\partial T}{\partial z} + \\
& + \left[C_L D_{eff} \frac{\partial x_A^2}{\partial z^2} (C_{pA} - C_{pB}) - C_L u_L \frac{\partial x_A}{\partial z} (C_{pA} - C_{pB}) + \right. \\
& + \left. C_L \frac{\partial x_A}{\partial z} \frac{\partial D_{eff}}{\partial z} (C_{pA} - C_{pB}) - \frac{2r_1}{(r_2^2 - r_1^2)} k_L C_L (C_{pA} + C_{pB}) (x_A - x_{A1}) \right] \Delta T - \\
& \frac{2r_1}{(r_2^2 - r_1^2)} h_L (T - T_1) = \rho_m \hat{c}_{p_m} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3-58)
\end{aligned}$$

FASE GAS:

$$\begin{aligned}
& - k_{TV} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \left[C_V D_{AB} \frac{\partial y_A}{\partial z} (C_{pB} - C_{pA}) + C_V u_V (C_{pA} y_A + C_{pB} y_B) \right] \frac{\partial T}{\partial z} \\
& + \left[C_V D_{AB} \frac{\partial y_A^2}{\partial z^2} (C_{pB} - C_{pA}) - C_V u_V \frac{\partial y_A}{\partial z} (C_{pB} - C_{pA}) - \right. \\
& - \left. \frac{2}{r_1} k_V C_V (y_{A1} - y_A) (C_{pA} + C_{pB}) \right] \Delta T + \frac{2}{r_1} h_V (T_1 - T) = \\
& = \rho_V \hat{c}_{p_V} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3-68)
\end{aligned}$$

$$\left. \frac{\partial T_v}{\partial z} \right|_{0,t} = 0 \quad (3-69)$$

En $z = L_t$ (evaporador)

$$T_v(L_t, t) = T_L(L_t, t) \quad (3-70)$$

Las cuales se derivan de acuerdo con razonamientos previos ya planteados en las ecuaciones anteriores de materia y energía.

Las expresiones (3-58) y (3-68) representan el comportamiento del flujo de energía en la columna de destilación cero gravedad.

En el cuadro 3.1 se presentan las ecuaciones de transferencia de masa y transferencia de calor desarrolladas en esta sección.

3.2.3. LOS NUMEROS ADIMENSIONALES QUE RIGEN LA DCG.

En esta sección se realiza un análisis dimensional de las ecuaciones desarrolladas en las secciones anteriores con la finalidad de identificar las contribuciones de los diferentes factores involucrados en las ecuaciones. Para ello se introducen las siguientes variables adimensionales

$$Z = \frac{z}{L} \quad , \quad t^* = \frac{t\theta}{L_t}$$

$$\bar{X} = \frac{x - x_{Lt}}{x_o - x_l} \quad \bar{Y} = \frac{y - y_{Lt}}{y_o - y_{Lt}} \quad (3-71)$$

$$\bar{T} = \frac{T - T_o}{T_{Lt} - T_o}$$

y los siguientes tiempos característicos:

1). Tiempo convectivo

Fase líquida:

$$\tau_{cs} = \frac{L_t}{u_L} \quad (3-72)$$

Fase gas:

$$\tau_{cg} = \frac{L_t}{u_V} \quad (3-73)$$

2) Tiempo dispersivo

Fase líquida:

$$\tau_D = \frac{L_t^2}{D_{eff}} \quad (3-74)$$

Fase gas:

$$\tau_D = \frac{L_t^2}{D_{AB}}$$

3). Tiempo de transferencia de masa

Fase líquida

$$\tau_m = \frac{\delta_r}{K_L} \quad (3-75)$$

$$\text{donde } \delta_r = \frac{1}{2} \frac{r_2^2 - r_1^2}{r_1}$$

Fase gas

$$\tau_m = \frac{\delta_r}{k_v} \quad (3-76)$$

$$\text{donde } \delta_r = \frac{1}{2} r_1$$

4). Tiempo conductivo

Fase líquida:

$$\tau_k = \frac{\rho_m \hat{C}_{p_m} L_t^2}{k_{Teff}} \quad (3-77)$$

Fase gas:

$$\tau_k = \frac{\rho_m \hat{C}_{p_m} L_t^2}{k_{TV}} \quad (3-78)$$

5). Tiempo para la transferencia de calor

Fase líquida

$$\tau_h = \frac{\delta_r \rho_m C_{p_m}}{h_L} \quad (3-79)$$

Fase gas

$$\tau_h = \frac{\delta_r \rho_m C_{p_m}}{h_v} \quad (3-80)$$

Realizando las sustituciones adecuadas, las ecuaciones

(3-40), (3-47), (3-58) y (3-68) se transforman en:

Transferencia de masa en la fase líquida:

$$\frac{1}{\varepsilon Pe_m} \bar{X}'' + \frac{\alpha_D}{\varepsilon} \cdot \frac{1}{Pe_m} (\bar{X}')^2 - \frac{1}{\varepsilon} \bar{X}' + \frac{1}{\varepsilon} st_m (\bar{X} - \bar{X}_1) = \bar{X}'_t \quad (3-81)$$

donde $\alpha_D = \ln \left(\frac{D_{BA}^0}{D_{AB}^0} \right)$, \bar{X}' y \bar{X}'' son la primera y segunda derivadas adimensionales de la composición con respecto a la posición y \bar{X}'_t es la primera derivada de la composición adimensional con respecto al tiempo adimensional.

Transferencia de masa en la fase gas

$$\frac{1}{Pe_m} \bar{Y}'' + \bar{Y}' + st_m (\bar{Y}_1 - \bar{Y}) = \bar{Y}'_t \quad (3-82)$$

donde \bar{Y}' y \bar{Y}'' representan la primera y segunda derivadas de la composición adimensional, con respecto a la posición adimensional y \bar{Y}'_t es la primera derivada adimensional de la composición con respecto al tiempo.

Transferencia de calor en la fase líquida:

$$\frac{1}{Pe_h} \bar{T}'' + \left[\frac{1}{Pe_m} \bar{X}' - 1 \right] \bar{T}' + \left[\frac{1}{Pe_m} \bar{X}'' - \bar{X}' + \frac{\alpha_D}{Pe_m} (\bar{X}')^2 - st_m (\bar{X} - \bar{X}_1) \right] \Delta \bar{T} - st_h (\bar{T} - \bar{T}_1) = \bar{T}'_t \quad (3-83)$$

\bar{T}' y \bar{T}'' son la primera y segunda derivadas, respectivamente, de la

temperatura adimensional con respecto a la posición adimensional y \bar{T}'_t es la primera derivada adimensional de la temperatura con respecto al tiempo.

Transferencia de calor fase gas:

$$\begin{aligned}
 - \frac{1}{Pe_h} \bar{T}'' + \left[\frac{1}{Pe_m} \bar{Y}' + 1 \right] \bar{T}' + \left[\frac{1}{Pe_m} \bar{Y}'' - \bar{Y}' - St_m (\bar{Y}_i - \bar{Y}) \right] \Delta \bar{T} + \\
 + St_h (\bar{T}_i - \bar{T}) = \bar{T}'_t \quad (3-84)
 \end{aligned}$$

En estas ecuaciones, los números adimensionales se definen como sigue:

Número de Peclet

Masa

$$Pe_m = \frac{\tau_D}{\tau_{A3}} \quad (3-85)$$

Calor

$$Pe_h = \frac{\tau_K}{\tau_{A3}} \quad (3-86)$$

Número de Stanton

Masa:

$$St_m = \frac{\tau_{A3}}{\tau_m} \quad (3-87)$$

Calor

$$St_h = \frac{\tau_{A3}}{\tau_h} \quad (3-88)$$

Estos números adimensionales representan la relación de fuerzas que intervienen en la transferencia de masa y calor en DCG. Así, el número de Peclet para la transferencia de masa proporciona la relación del transporte de masa por convección al transporte de masa por difusión y para la transferencia de calor, el mismo número indica la relación del calor transportado por convección al calor transportado por conducción. Por otro lado, el número de Stanton para la transferencia de masa proporciona la relación de la transferencia de masa interfacial a la transferencia de masa convectiva y para la transferencia de calor, este número indica la relación de la transferencia de calor interfacial a la transferencia de calor por convección.

En el cuadro 3.2 se presentan las ecuaciones de conservación en forma adimensionalizada y en el cuadro 3.3 se presenta una estimación de los números adimensionales para el sistema metanol-agua. Algunos datos para el cálculo de estos números se presentan en el cuadro 3.5.

Analizando los valores de los números del cuadro 3.3 en la estructura de las ecuaciones del cuadro 3.2 se deriva que la transferencia de calor interfacial es más rápida que la convección. A su vez, la convección es un proceso que tanto en la fase gas como en la fase líquida ocurre mucho más rápido que la difusión de materia y la conducción de calor. Por otro lado, el transporte de materia en la interfase es un proceso que ocurre mucho más rápido que la convección en ambas fases. En términos de resistencias esto se puede expresar como:

CUADRO 3.2
 ECUACIONES DE CONSERVACION EN DCG ADIMENSIONALIZADAS

CONSERVACION DE MASA	
FASE LIQUIDA:	
$\frac{1}{\varepsilon Pe_m} \bar{X}'' + \frac{\alpha_D}{\varepsilon} \cdot \frac{1}{Pe_m} (\bar{X}')^2 - \frac{1}{\varepsilon} \bar{X}' + \frac{1}{\varepsilon} st_m (\bar{X} - \bar{X}_1) = \bar{X}'_t$	
(3-81)	
<p>donde $\alpha_D = \ln \left(\frac{D_{BA}^o}{D_{AB}^o} \right)$</p>	
FASE GAS:	
$\frac{1}{Pe_m} \bar{Y}'' + \bar{Y}' + st_m (\bar{Y}_1 - \bar{Y}) = \bar{Y}'_t$	
(3-82)	

CUADRO 3.2. (Continuación)

CONSERVACION DE ENERGIA

FASE LIQUIDA:

$$\frac{1}{Pe_h} \cdot \bar{T}'' + \left[\frac{1}{Pe_m} \bar{X}' - 1 \right] \bar{T}' + \left[\frac{1}{Pe_m} \bar{X}'' - \bar{X}' + \frac{\alpha_D}{Pe_m} (\bar{X}')^2 - \right. \\ \left. - st_m (\bar{X} - \bar{X}_1) \right] \Delta \bar{T} - st_h (\bar{T} - \bar{T}_1) = \bar{T}'_t \quad (3-83)$$

FASE GAS:

$$- \frac{1}{Pe_h} \bar{T}'' + \left[\frac{1}{Pe_m} \bar{Y}' + 1 \right] \bar{T}' + \left[\frac{1}{Pe_m} \bar{Y}'' - \bar{Y}' - st_m (\bar{Y}_1 - \bar{Y}) \right] \Delta \bar{T} + \\ + st_h (\bar{T}_1 - \bar{T}) = \bar{T}'_t \quad (3-84)$$

CUADRO 3.3.

ESTIMACION DE LOS NUMEROS ADIMENSIONALES DE LAS ECUACIONES
DE CONSERVACION EN DCG PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA

NUMERO	FASE LIQUIDA	FASE GAS
Conservación de masa		
Pe_m	1.2×10^7	2×10^4
St_m	3×10^2	3×10^2
Conservación de energía		
Pe_m	1.2×10^7	3×10^4
St_m	1.6×10^5	5×10^4
Pe_h	1.43×10^4	3×10^2
St_h	2.0	43

Resistencia a la conducción, difusión >> resistencia convección > resistencia a la transferencia de masa interfacial > resistencia a la transferencia de calor interfacial.

De acuerdo con esto, la transferencia de calor ocurre más rápido que la transferencia de masa, lo que implica que el perfil de temperaturas se estabilice con mayor rapidez que el perfil de concentraciones. Para tener una mejor estimación de la rapidez de un proceso respecto al otro, (transferencia de calor con respecto a transferencia de masa) considérese un cambio de concentración de 0.01 en la primera derivada de la composición para la fase líquida y la fase gas. Con base en datos temperatura-composición, se obtienen los valores que se muestran en el cuadro 3.4. Se puede apreciar, con base en las estimaciones del cuadro 3.4 que la velocidad de respuesta de cambio en la temperatura es mucho mayor que la velocidad de respuesta de cambio en la composición. El cambio es tan rápido que la ecuación de temperatura observa una composición de estado cuasi-estacionario con respecto a la composición. La única posibilidad para que esto sea válido es que las temperaturas del gas, del líquido y de la interfase, sean aproximadamente similares y que, al mismo tiempo, las composiciones de la interfase y de bulto sean muy similares. Para la operación a presión atmosférica, lo anterior implica que el proceso ocurre en estado de saturación para ambas fases.

CUADRO 3.4

ANALISIS DE SENSIBILIDAD DE LAS ECUACIONES DE
CONSERVACION (Valores estimados)

FASE LIQUIDA	FASE GAS
$\bar{X}' = 0.01$	$\bar{Y}' = 0.01$
$\bar{X}'' = 0.$	$\bar{Y}'' = 0.$
$\bar{T}' = 0.2$	$\bar{T}' = 0.4$
$\bar{T}'' = 0.$	$\bar{T}'' = 0.3$
$(\bar{T} - \bar{T}_1) = 0.2$	$(\bar{T}_1 - \bar{T}) = 0.3$
$\bar{X}'_t = 200$	$\bar{Y}'_t = 3$
$\bar{T}'_t = 8 \times 10^6$	$\bar{T}'_t = 384$
$\bar{T}'_t / \bar{X}'_t = 4 \times 10^4$	$\bar{T}'_t / \bar{Y}'_t = 128$

3.2.4. CONDICIONES INTERFACIALES.

Las ecuaciones de materia y energía presentadas anteriormente para las fases líquida y gaseosa, están acopladas a través de las condiciones en la interface debido al intercambio de materia y energía que ocurre en esta zona.

Ya que la interface es una zona que no tiene capacitancia, las siguientes condiciones aplican:

Transferencia de masa:

$$N_{Ar}^L = N_{Ar}^V \quad (3-89)$$

o bien:

$$C_L k_L \left(x_A - x_{A1} \right) = C_V k_V \left(y_{A1} - y_A \right) \quad (3-90)$$

Transferencia de energía

$$E_r^L = E_r^V$$

o bien:

$$\sum_{j=1}^2 N_j^L \bar{H}_j^L + q_r^L = \sum_{j=1}^2 N_j^V \bar{H}_j^V + q_r^V \quad (3-91)$$

o expresando (3-56) en otra forma

$$\sum_{j=1}^2 N_j \Delta \bar{H}_{v,j} + q_r^v - q_r^L = 0 \quad (3-92)$$

donde $\Delta \bar{H}_{v,j}$ es el calor latente de cambio de fase para el componente j .

De acuerdo con el análisis de la sección 3.2.3, el flujo de calor por conducción es despreciable y las temperaturas se estabilizan rápidamente, por lo que las fases están saturadas. Esto conduce a:

$$T_L \cong T_V \cong T_i \quad (3-93)$$

Lo anterior implica que en la interface el líquido y el vapor están aproximadamente en equilibrio. Con esto:

$$y_{A1} = f(x_{A1}) \quad (3-94)$$

y el perfil de temperaturas se puede obtener por medio de cálculos de punto de burbuja

$$f(T) = \sum_{j=1}^2 y_j - 1 \quad (3-95)$$

De acuerdo con la expresión (3-93), derivada del análisis de la sección anterior, la temperatura obtenida mediante este cálculo proporciona el perfil para ambas fases, por lo que se hace

innecesario el uso de las ecuaciones de transferencia de calor.

Las consideraciones anteriores son válidas en condiciones de un alto grado de mezclado, el cual se ha supuesto debido al radio pequeño de la columna DCG. Sin embargo, si el radio es grande no se puede evitar el uso de las ecuaciones (3-58) y (3-68) y, aún más, tanto en las ecuaciones de materia como de energía no se puede suponer el perfil aplanado, especialmente para la fase gas.

Para el caso que se está analizando y para los fines del presente estudio las consideraciones planteadas son adecuadas.

3.2.5. METODO DE SOLUCION DEL MODELO DCG PARA EL CASO DEL ESTADO ESTACIONARIO.

El modelo DCG desarrollado en la sección anterior consiste de dos ecuaciones diferenciales parciales (EDP) no lineales para las composiciones de las fases líquida y vapor (ecs. 3-40 y 3-45) acopladas a través de las ecuaciones de equilibrio en la interface (ecs. 3-90 y 3-94) y la ecuación de cálculo de punto de burbuja (ec. 3-95). Para discretizar, es decir, aproximar con ecuaciones algebraicas, las dos EDP, se pueden aplicar varios métodos estándar, como son diferencias finitas, elemento finito, colocación y combinaciones de ellos. Ya que en DCG se reportan separaciones de alta pureza, se necesita un método que pueda manejar perfiles con pendientes pronunciadas y zonas suaves. En este caso es conveniente usar funciones prueba que se definan solamente en una parte de la región del problema y juntar funciones adyacentes para aproximar el dominio total (Finlayson, 1980). Las zonas de gradientes pronunciados se pueden

discretizar en regiones o elementos más pequeños y con ello la aproximación se mejora. Para manejar estas condiciones y las no linealidades del modelo, así como para instrumentar el modelo con simplicidad, se seleccionó aproximar el perfil de solución en estado estacionario con una combinación lineal de polinomios cúbicos de Hermite soportados en intervalos de dominio finito:

$$x_A(z) \cong X(z) = \sum_{K=1}^{NE} c_{XK} \xi_{XK}(z) \quad (3-96)$$

$$y_A(z) \cong Y(z) = \sum_{K=1}^{NE} c_{YK} \xi_{YK}(z) \quad (3-97)$$

donde $\{z_1, \dots, z_{NT}\}$ denota la malla de nodos, NT el número de puntos de colocación en cada elemento y NE el número de elementos. ξ_x y ξ_y son los polinomios cúbicos de Hermite en cada elemento. En el apéndice C se detallan las características de estos polinomios.

Por conveniencia se transforma la abscisa z en una abscisa u normalizada entre 0 y 1 para cada elemento:

$$u = \frac{z - z_K}{h_K} \quad (3-98)$$

donde h_K es el tamaño del elemento K.

La sustitución de las funciones de aproximación en las ecuaciones de transferencia de masa, considerando la

transformación de la abscisa, convierte las ecuaciones diferenciales parciales en ecuaciones algebraicas: cada una de ellas proporciona un residuo $R(u)$. Para esto se utilizan condiciones de colocación en los nodos interiores $\{u_2, \dots, u_{NT-1}\}$, donde NT , el número total de puntos de colocación, resulta de añadir los dos puntos extremos de cada elemento a los NC puntos interiores de colocación. Es decir, los residuos $R_x(u)$, para la sustitución de la fase líquida, y $R_y(u)$ para la sustitución de la fase gas, se fuerzan a que desaparezcan en $\{u_2, \dots, u_{NT-1}\}$:

$$R_y(u_j) = 0 \quad , \quad j = 2, \dots, NT-1 \quad (3-99)$$

Las funciones de aproximación deben satisfacer las condiciones frontera. En el caso de estado estacionario, las condiciones frontera se manejaron de acuerdo con los valores reportados por Seok y Hwang (1985), con la finalidad de establecer apropiadamente las comparaciones contra los datos de estos autores, si bien, la forma correcta de expresarlas es de acuerdo con lo establecido en la sección 3.2.2. Así:

en $K = 1, \quad u = 0$

$$X_1(0) = c_{x,1} \xi_{x,1}(0) = x_{AC} \quad (3-100)$$

$$Y_1(0) = c_{y,1} \xi_{y,1}(0) = y_{AC} \quad (3-101)$$

en $K = NE$, $u=1$

$$X_{NE}(1) = c_{X,NE} \xi_{Y,NE}(1) = x_{Ae} \quad (3-102)$$

$$Y_{NE}(1) = c_{Y,NE} \xi_{Y,NE}(1) = y_{Ae} \quad (3-103)$$

La composición de la fase líquida en el punto de alimentación se manejó numéricamente como un punto especial entre dos elementos, definiéndose, como el promedio de dos puntos adyacentes y la alimentación:

$$X_{K,1} = \frac{L X_{K-1,3} + F X_F + (L + F) X_{K,2}}{2(L + F)}$$

La composición de la fase gas en el mismo punto se dejó que se definiera por las ecuaciones del sistema.

Como resultado de la aproximación, el conjunto de ecuaciones diferenciales se transforma en un conjunto de $NE \times NT-2$ ecuaciones algebraicas para cada fase, más las ecuaciones (3-100) y (3-102) de condiciones frontera para la fase líquida y las ecuaciones (3-101) y (3-103) de condiciones frontera para la fase gas.

El conjunto de ecuaciones algebraicas para la fase líquida se da por:

$$\frac{\varepsilon^2}{h_K^2} \left[\left(D_{AB1}^o \right)^{1-X_K(u_j)} \left(D_{AB1}^o \right)^{X_K(u_j)} \right] X_K''(u_j) +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\varepsilon^2}{h_k^2} \ln \left(\frac{D_{BA}^o}{D_{AB}^o} \right) \left[\left(D_{AB1}^o \right)^{1-X_K(u_j)} \left(D_{AB1}^o \right)^{X_K(u_j)} \right] \left[X'_K(u_j) \right]^2 - \\
& - \omega_1 X'_K(u_j) - \frac{2r_1 k_L}{r_2^2 - r_1^2} \left[X_K(u_j) - X_{A1} \right] = 0 \quad (3-104)
\end{aligned}$$

$$K = 1, \dots, NE, \quad j = 1, \dots, NT$$

excepto para los puntos $j = 1$ en $k = 1$ y $j = NT$ en $K = NE$, donde se usan las ecuaciones (3-100) y (3-102). En la expresión anterior $X'_K(u_j)$ y $X''_K(u_j)$ representan la primera y segunda derivada de las funciones prueba respectivamente. En el apéndice D se presenta el desarrollo algebraico para llegar a la expresión (3-104).

El conjunto de ecuaciones algebraicas obtenidas para la fase gas es el siguiente:

$$- \frac{D_{ABV}}{h_k^2} Y''_K(u_j) + \frac{\omega_V}{h_k} Y'_K(u_j) + \frac{2 k_V}{r_1} \left(Y_{A1} - Y_K(u_j) \right) = 0 \quad (3-105)$$

$$K = 1, \dots, NE; \quad j = 1, \dots, NT$$

excepto para los puntos $j = 1$ en $k = 1$ y $j = NT$ en $K = NE$, donde

se usan las ecuaciones (3-101) y (3-103). En esta expresión $Y'_k(u_j)$ y $Y''_k(u_j)$ representan la primera y segunda derivada respectivamente. Los detalles algebraicos del desarrollo se presentan en el apéndice D.

El sistema anterior de ecuaciones algebraicas, en conjunto con las ecuaciones (3-90) y (3-94) se resolvió iterativamente por medio del método de Gauss-Seidel, obteniéndose como resultado los coeficientes de las funciones prueba de composición, las composiciones interfaciales y las temperaturas en los nodos de la malla.

Para convergencia se exigió una tolerancia de 0.0005 en la diferencia de los valores calculados entre iteraciones para cada punto de colocación. La rapidez de convergencia es excelente, lográndose en aproximadamente 5 iteraciones. En un principio, todos los elementos se definieron del mismo tamaño. Sin embargo, considerando que en el elemento del condensador las desviaciones eran muy pequeñas, se incrementó el tamaño de este elemento hasta aproximadamente un 40% de la longitud total, el evaporador se dejó como un elemento y el resto de los elementos quedaron del mismo tamaño. Se realizaron corridas con 6, 8, 10, 12 y 15 elementos y se encontró que 8 elementos proporcionan una aproximación adecuada.

El algoritmo de cálculo se presenta en el apéndice E.

3.2.6. DATOS Y PARAMETROS DEL MODELO.

Para probar el modelo numéricamente se tomaron tres casos de

datos experimentales reportados por Seok y Hwang (1985): dos para el sistema metanol-agua y uno para el sistema etanol-agua. La información disponible en estos casos consiste de los flujos de entrada y salida, la composición de la alimentación, del condensado y del "fondo" (producto en el evaporador) y la razón V/L , que es la relación del flujo molar del gas entre el flujo molar del líquido que operó en los diferentes casos.

Los flujos específicos de gas y de líquido, para el estado estacionario, se obtuvieron mediante balances globales de materia, de acuerdo con lo siguiente:

En el condensador:

$$V = L + D \quad (3-106)$$

dividiendo entre L y reorganizando se obtiene

$$L = \frac{D}{\left[\left(\frac{V}{L} \right) - 1 \right]} \quad (3-107)$$

ya que D y (V/L) son datos conocidos, se puede obtener el valor del flujo de líquido en la columna y de aquí, el flujo de gas. Conociendo, los valores de los flujos se pueden obtener las velocidades promedio del líquido y del gas, las cuales se pueden utilizar directamente en el modelo. Sin embargo, se requieren datos adicionales del medio poroso como son la porosidad y el diámetro del poro. Desafortunadamente, Seok y Hwang no reportan estos datos y debido a ello fue necesario estimarlos por prueba y error, con apoyo en correlaciones reportadas (Morrow, 1970; Geenkorn, 1981).

En el cuadro 2.6 se dispone del dato de permeabilidad de la fibra de vidrio, el cual se puede tomar como un dato inicial para estimar el resto de los parámetros. No obstante se nota que no se cuenta con suficientes especificaciones de las características en los cuales tal dato se obtiene y esto es importante, ya que la permeabilidad es una propiedad muy sensible a la forma en la cual se construya el medio poroso (Greenkorn, 1981). Diferencias pequeñas en la estructura del medio, cambian el valor de este parámetro en varios órdenes de magnitud. Con todo, se reconoce que hay una relación entre la permeabilidad, la porosidad y el diámetro promedio del poro y para ello se dispone de diversas correlaciones (Morrow, 1970; Greenkorn, 1981; Dunn y Reay, 1982). Sin embargo, los datos que se obtienen varían notablemente, dependiendo de la correlación empleada. Debido a esto, fue necesario ajustar tales parámetros conciliando la ecuación de Darcy, con el flujo de líquido, ya conocido, y algunas correlaciones seleccionadas.

La ecuación de Koseny-Carman relaciona la permeabilidad del medio con la porosidad, de acuerdo a (Greenkorn, 1981):

$$K = \frac{\epsilon^3}{c_s \tau^2} \quad (3-108)$$

donde c_s es un factor de forma. Este factor de forma es un parámetro adicional que se desconoce para el medio que se está tratando, el cual es fibra de vidrio orientada al azar. Para este tipo de medios, es común emplear un radio hidráulico, el cual se

obtiene por la relación del volumen del espacio de poros entre el área superficial mojada, de acuerdo con la expresión (Morrow, 1970):

$$r_h = \frac{\varepsilon}{(1 - \varepsilon)} \frac{1}{A_t} \quad (3-109)$$

donde A_t es el área superficial del sólido por unidad de volumen. Una forma de relacionar ésta área, con la porosidad y la permeabilidad es la siguiente (Greenkorn, 1981):

$$A_t^2 = \frac{C_s \varepsilon^3}{\tau K} \quad (3-110)$$

Con las sustituciones adecuadas en las últimas ecuaciones, se obtiene un sistema de 3 ecuaciones con 4 incógnitas y por ello fue necesario el apoyo de la ecuación de Darcy en la ecuación de flujo promedio

$$\bar{v}_z = \frac{L}{\bar{A}} \quad (3-111)$$

donde \bar{A} es el área promedio disponible al flujo. Adicionalmente, la permeabilidad también debió ajustarse, suponiendo principalmente que el empaçado de la columna se Seok y Hwang (1985) tuvo menor compactación que la correspondiente a un tubo caliente para el cual se cuenta con el dato inicial. Es decir, se consideró que el medio poroso es más permeable que lo reportado.

Las difusividades binarias para la fase líquida se calcularon con la correlación de Scheibel (Reid, et.al, 1977):

$$D_{ABl}^o = \frac{\bar{K} T}{\mu_B v_A^{1/3}} \quad (3-112)$$

donde

$$\bar{K} = \left(8.2 \times 10^{-8} \right) \left[1 + \left(\frac{3 v_B}{v_A} \right)^{2/3} \right] \quad (3-113)$$

v_A y v_B son los volúmenes molares de los componentes ligero y pesado, respectivamente.

Para las difusividades en la fase gas, se utilizó la correlación de Wilke-Lee (Treybal, 1980).

$$D_{ABV} = \frac{10^{-4} (1.084 - 0.249 \sqrt{1/M_A + 1/M_B}) T^{3/2} \sqrt{1/M_A + 1/M_B}}{P_t (r_{AB})^2 f(kT/\epsilon_{AB})} \quad (3-114)$$

donde M_A y M_B son los pesos moleculares de los componentes, r_{AB} es la separación molecular en colisión, k es la constante de Boltzmann y $f(kT/\epsilon_{AB})$ es una función de colisión.

Para el cálculo de la presión de vapor, se utilizó la ecuación de Antoine de tres parámetros y para el cálculo de los coeficientes de actividad en la fase líquida se utilizó la

CUADRO 3.5

DATOS UTILIZADOS EN EL MODELO DCG PARA LOS TRES CASOS ESTUDIADOS

(Las unidades se reportan en la sección de nomenclatura).

PARAMETRO	SISTEMA 1 METANOL-AGUA	SISTEMA 2 METANOL-AGUA	SISTEMA 3 ETANOL-AGUA
P	760.0	760.0	760.0
T_{bA}	64.0	64.0	78.0
T_{bB}	100.0	100.0	100.0
Parámetros de Antoine			
A_A	7.87863	7.87863	8.04494
B_A	1473.11	1473.11	1554.3
C_A	230.0	230.0	222.65
A_B	7.96681	7.96681	7.96681
B_B	1668.21	1668.21	1668.21
C_B	228.0	228.0	228.0
(G/V)	1.09	1.21	1.17
F	6.0	6.0	3.2
D	1.1	1.4	0.8
X_F	0.2	0.2	0.2
X_B	0.0226	0.0113	0.02
L_t	43.0	43.0	43.0
r_1	0.41	0.41	0.41
r_2	0.53	0.52	0.53
d_p	0.0022	0.0022	0.0022
ϵ	0.355	0.355	0.355
K	0.000061	0.000061	0.000061
σ_{A1}	0.01755	0.01755	0.02105
σ_{B1}	0.0626	0.0626	0.0589

CUADRO 3.5. (Continuación)

PARAMETRO	SISTEMA 1 METANOL-AGUA	SISTEMA 2 METANOL-AGUA	SISTEMA 3 ETANOL-AGUA
ρ_{AV}	0.00224	0.00029	0.7253
ρ_{BV}	0.00029	0.00029	0.000445
ρ_{A1}	0.735	0.735	0.7253
ρ_{B1}	0.972	0.972	0.965
M_A	32.0	32.0	44.0
M_B	18.0	18.0	18.0
μ_{A1}	0.00323	0.00323	0.0032
μ_{B1}	0.0036	0.0036	0.000107
μ_{BV}	0.000119	0.000119	0.000123
D_{AB1}°	0.000064417	0.000064417	0.000048513
D_{BA1}	0.00014587	0.00014587	0.00015052
D_{ABV}	0.19117	0.19117	0.14671
T_{CA}	512.6	512.6	512.6
T_{CB}	647.3	647.3	647.3
Ecuación de Wilson			
C_{12}	205.3	205.3	382.3
C_{21}	482.16	482.16	955.49
A_{WA}	64.51094	64.51094	53.70027
B_{WA}	- 0.1095359	- 0.1095359	- 0.017282
C_{WA}	0.00002116	0.00002116	0.00002116

(Reid, et. al., 1977; Holland, 1988; Dunn y Reay, 1982; Hudson y Van Winkle, 1970).

ecuación de Wilson. La tensión superficial se obtuvo de tablas reportadas (Dunn y Reay, 1982) y para las propiedades físicas se dieron valores promedio, ya que como se discutió anteriormente, se obtiene una buena aproximación con valores proporcionados en esta forma.

En el cuadro 3.5 se presentan los datos utilizados para los tres casos estudiados.

3.2.7. RESULTADOS DE LA SIMULACION EN ESTADO ESTACIONARIO.

Para realizar la simulación del comportamiento de la DCG en estado estable, primeramente se seleccionó el empleo de la correlación del coeficiente de transferencia de masa bajo (Ec. 3-28), correspondiente al régimen laminar para la fase líquida. Los resultados que se obtuvieron no fueron satisfactorios, ya que no se obtuvieron buenas convergencias y los perfiles de composición calculados después de un número grande de iteraciones (hasta 50) tenían fuertes desviaciones con respecto a los datos experimentales reportados por Seok y Hwang (1985). Cuando se utilizó la correlación para alta transferencia de masa (Ec. 3-29), correspondiente a régimen turbulento para la fase líquida, se obtuvo en general una buena aproximación para los tres casos de estudio. En las figuras 3.5 a 3.7 se muestran los perfiles de composición del componente ligero en la fase líquida para los sistemas metanol-agua y etanol-agua, y se comparan con los datos experimentales reportados por Seok y Hwang (1985) a diferentes valores de V/L , que es la razón del flujo molar del gas al flujo molar del líquido.

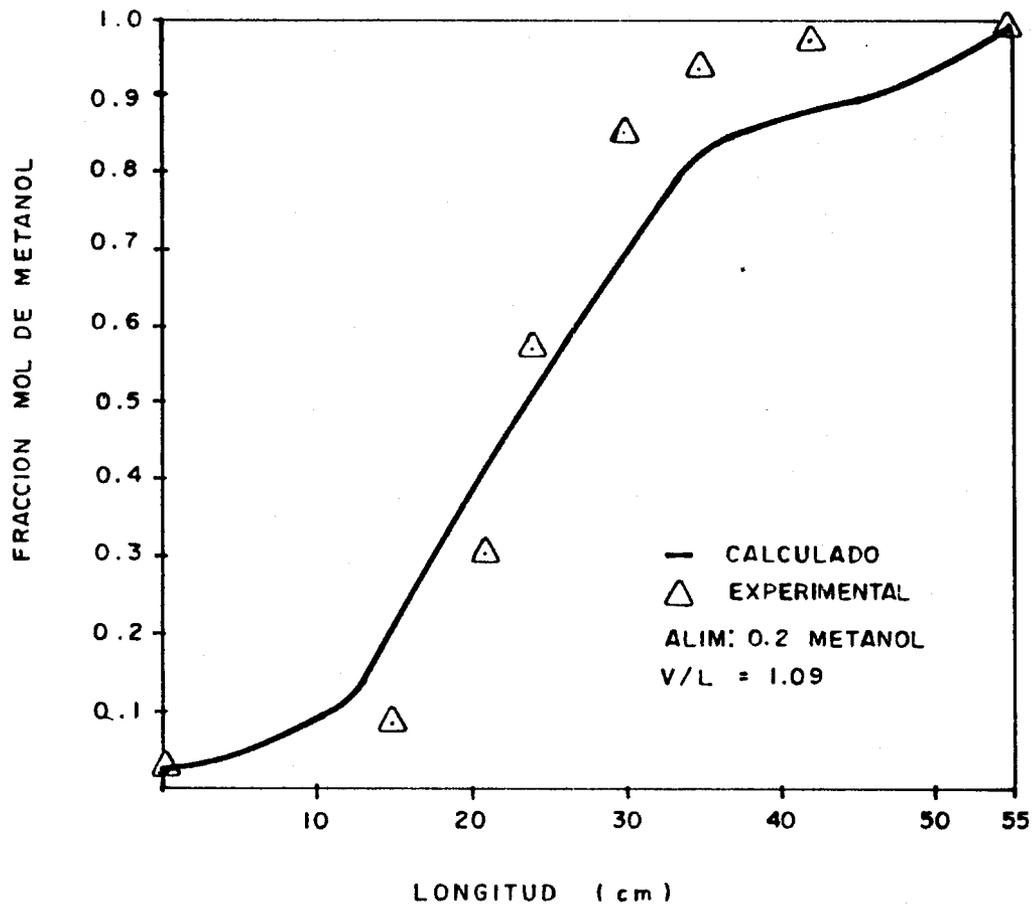


FIGURA 3.5.- COMPARACION DEL PERFIL CALCULADO CONTRA DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985) PARA EL SISTEMA METANOL - AGUA. EMPLEO DE LA CORRELACION DE ALTA TRANSFERENCIA DE MASA EN TODA LA COLUMNA

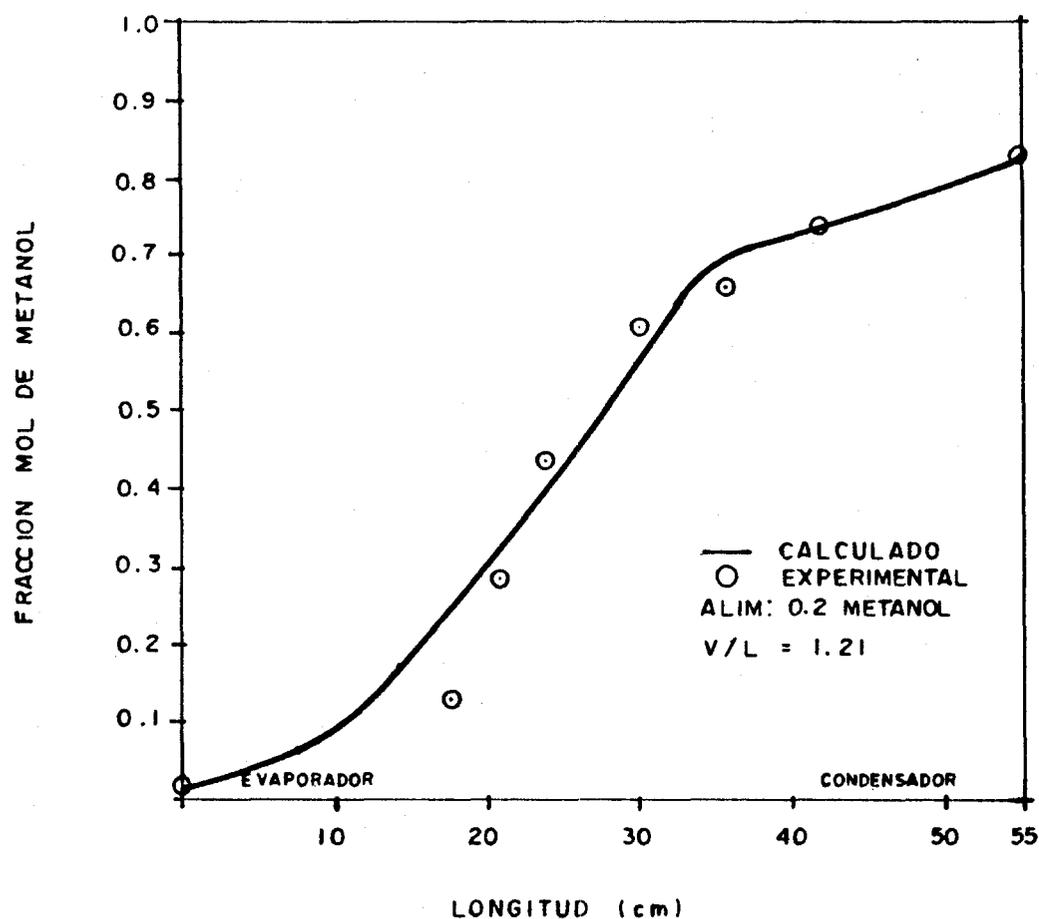


FIGURA 3.6.- COMPARACION DEL PERFIL DE COMPOSICION CALCULADO EN LA FASE LIQUIDA DE LA COLUMNA DCG PARA EL SISTEMA METANOL - AGUA CONTRA DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985), EMPLEO DE LA CORRELACION DE ALTA TRANSFERENCIA DE MASA EN TODA LA COLUMNA

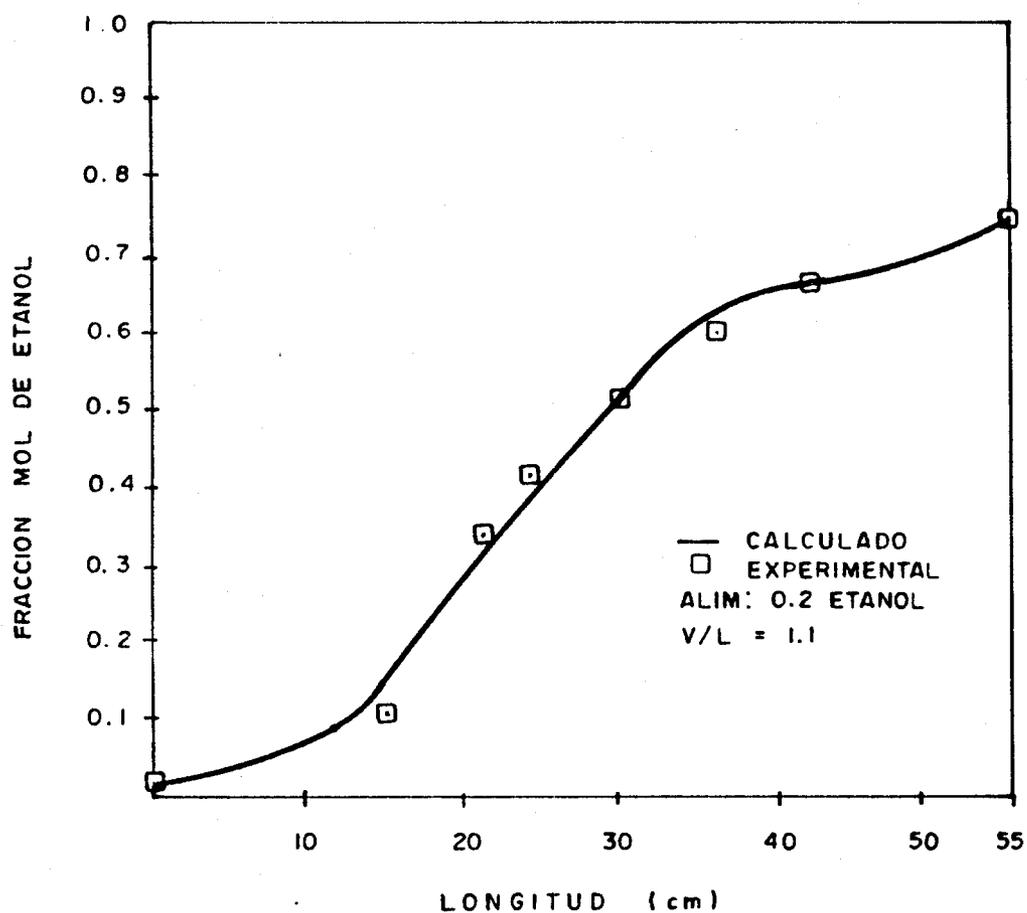


FIGURA 3.7.- COMPARACION DEL PERFIL DE COMPOSICION CALCULADO EN LA FASE LIQUIDA DE LA COLUMNA DCG PARA EL SISTEMA ETANOL-AGUA CONTRA DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985). EMPLEO DE LA CORRELACION DE ALTA TRANSFERENCIA DE MASA EN TODA LA COLUMNA

Se observa que en los tres casos persiste una pequeña desviación en la región cercana al evaporador. Una posibilidad para que se presente esta situación es que en esta zona las razones de transferencia de masa son más bajas, debido al efecto de las fuerzas interfaciales. De hecho, el proceso conocido de formación de burbujas en tubos calientes y el paso de esta burbuja a la fase gaseosa involucra energía adicional que hace que la temperatura en el medio poroso se incremente algunos grados ($1-2^{\circ}\text{C}$) sobre el punto normal de ebullición (Dunn y Reay, 1982). Esto se debe a que las burbujas de vapor deben moverse contra las fuerzas interfaciales con un consecuente incremento en la temperatura y presión y con ello ocurre una disminución en la transferencia de masa. Con base en esta observación, se realizaron simulaciones con el empleo de las correlaciones para baja (Ec. 3-28) y alta (Ec. 3-29) transferencia de masa para las mitades del evaporador y condensador, respectivamente. Como se puede apreciar en las figuras 3.8 a 3.10, en las cuales se muestran los perfiles de temperatura y composición para la fase líquida, las predicciones mejoraron sustancialmente. Para el caso de baja separación de los sistemas metanol-agua y etanol-agua, el ajuste obtenido corresponde con bastante aproximación a la información experimental. En las figuras 3.5 y 3.8 que corresponden al caso de alta separación para el sistema metanol-agua se observa una desviación en el lado del condensador. Esta situación se debe a la pendiente tan pronunciada del perfil en esta zona, lo que frecuentemente se traduce en dificultades para obtener buenos ajustes (Finlayson, 1980), especialmente si el modelo utilizado

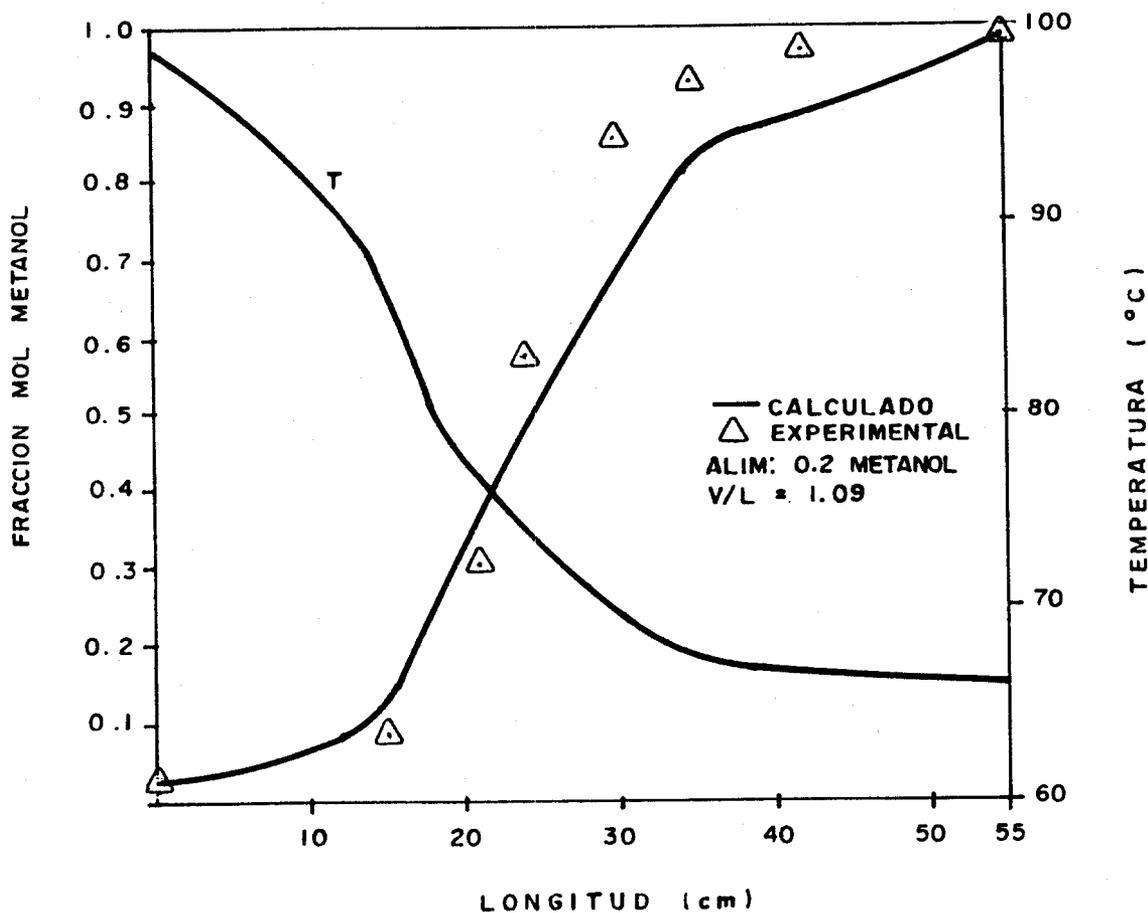


FIGURA 3.8.- PERFILES DE TEMPERATURA Y COMPOSICION PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA CON RAZON DE TRANSFERENCIA DE MASA BAJA EN EL LADO DEL EVAPORADOR. COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985)

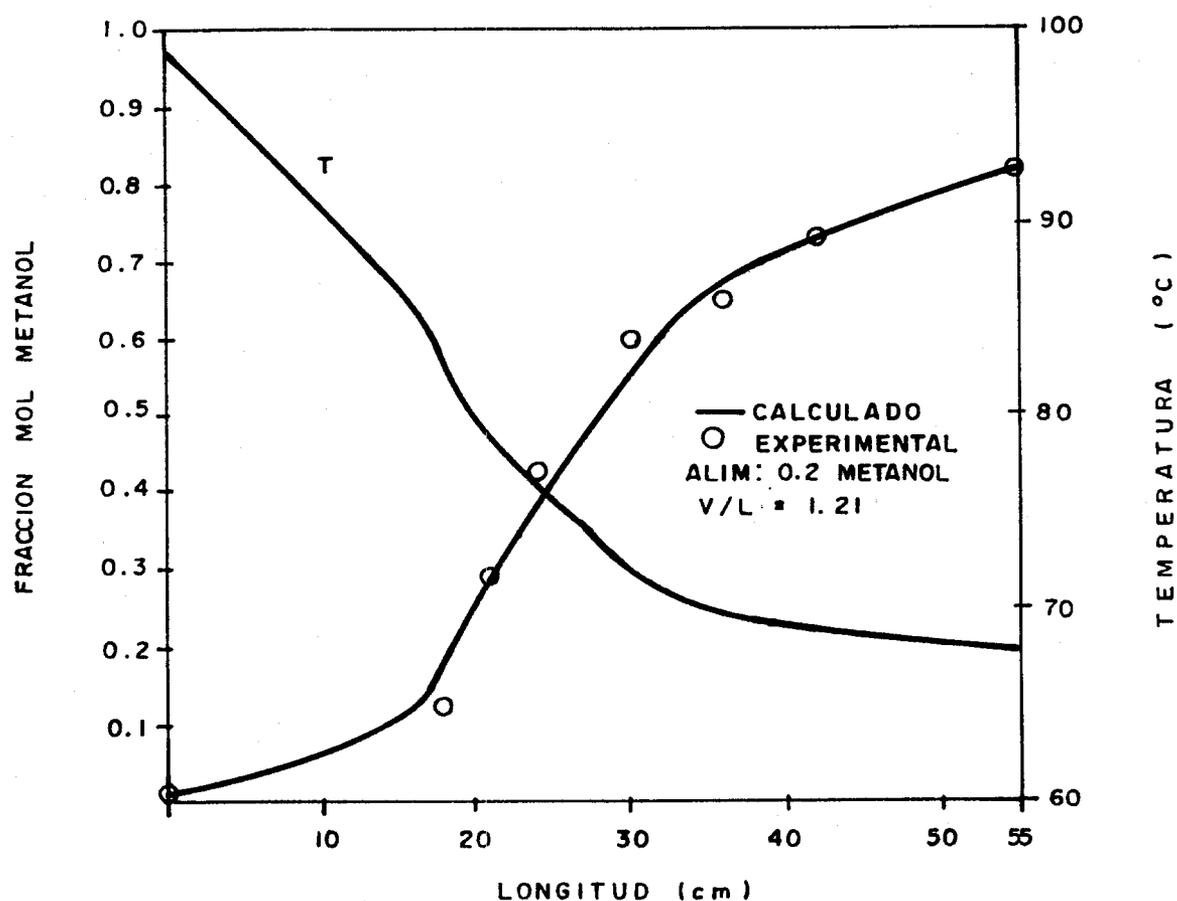


FIGURA 3.9.- PERFILES DE TEMPERATURA Y COMPOSICION PARA EL SISTEMA METANOL-AGUA CON RAZON DE TRANSFERENCIA DE MASA BAJA EN EL LADO DEL EVAPORADOR, COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985)

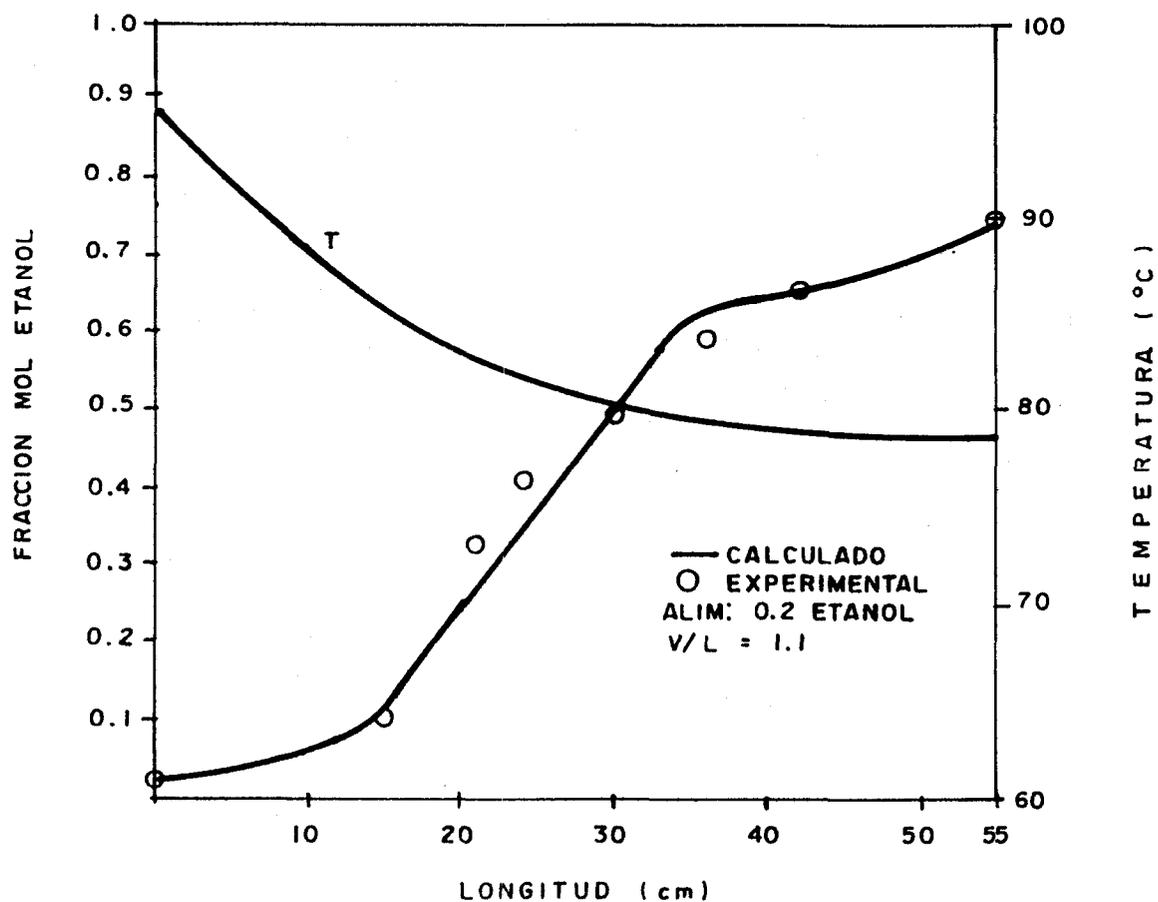


FIGURA 3.10.- PERFILES DE TEMPERATURA Y COMPOSICION PARA EL SISTEMA-ETANOL-AGUA CON RAZON DE TRANSFERENCIA DE MASA BAJA EN EL LADO DEL EVAPORADOR. COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES REPORTADOS POR SEOK Y HWANG (1985)

está afectado por algunas simplificaciones que pueden ser importantes en esa región. Este es el caso que se presenta, ya que el modelo DCG que se ha utilizado corresponde a la zona adiabática de la columna. La inclusión, en este modelo, de los fenómenos de las zonas de evaporación y condensación debe conducir a mejorar aún más las predicciones obtenidas, lo que, para los propósitos del presente trabajo, ya no se consideró.

Con respecto a las razones de transferencia de masa, se observa que ocurren condiciones similares a las de régimen turbulento para la fase líquida en una gran parte de la columna, debido a los efectos de mezclado promovidos por el medio poroso. Esto, sin duda, proporciona una explicación satisfactoria de la alta eficiencia de separación lograda en DCG, que se traduce en columnas de longitud corta para lograr altos grados de separación.

Aún así, se requiere la verificación experimental para obtener información que permita una afirmación concluyente sobre la naturaleza de los coeficientes de transferencia de masa.

3.2.8. COMPORTAMIENTO DINAMICO. RESPUESTA DE LA COLUMNA DCG A UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION.

El análisis dinámico de un sistema es una parte fundamental en el estudio de una operación, ya que se obtiene información importante para el diseño de esquemas de control que permitan el logro de los objetivos del proceso.

En este capítulo se da un primer paso en el análisis del comportamiento dinámico de la columna DCG. para ello se cuenta con el modelo matemático desarrollado en las secciones

anteriores, el cual ha demostrado una buena capacidad predictiva del comportamiento en estado estacionario para tres casos estudiados. Así mismo, se cuenta con un método numérico de solución que converge con relativa rapidez en el estado estacionario (menos de 10 iteraciones) y que en este caso se puede utilizar para resolver el perfil de composiciones en el espacio.

Para analizar el comportamiento dinámico se cuenta ahora con dos ecuaciones diferenciales del tipo:

fase líquida:

$$\frac{\partial x_A}{\partial t} = f \left(x_A, x_{A1}, \frac{\partial x_A}{\partial z}, \frac{\partial^2 x_A}{\partial z^2} \right) \quad (3-115)$$

fase gas:

$$\frac{\partial y_A}{\partial t} = f \left(y_A, y_{A1}, \frac{\partial y_A}{\partial z}, \frac{\partial^2 y_A}{\partial z^2} \right) \quad (3-116)$$

que corresponde a las ecuaciones (3-40) y (3-47) presentadas en el capítulo 3.2.1. Este sistema de ecuaciones corresponde a un problema de valor inicial con dos ecuaciones diferenciales parciales acopladas y dos ecuaciones algebraicas (Ecs. (3-90) y (3-94), cap. 3.2.4).

Considerando la rigidez de las ecuaciones debido a los términos convectivos, se seleccionó el método implícito de Euler (Finlayson, 1980) por su estabilidad para obtener la solución dinámica del sistema de interés. Las ecuaciones que se obtienen son del tipo:

fase líquida:

$$\frac{x_{A,t+1} - x_{A,t}}{h_t} = f \left(x_{A,t+1} \right) + O(h_t) \quad (3-117)$$

fase-gas:

$$\frac{y_{A,t+1} - y_{A,t}}{h_t} = f \left(y_{A,t+1} \right) + O(h_t) \quad (3-118)$$

donde h_t es el paso de integración.

Para resolver el sistema completo de ecuaciones se modificó ligeramente el algoritmo de cálculo para el estado estacionario, según se presenta en el apéndice E.

En este capítulo se analiza la respuesta a un cambio de escalón en la composición de la alimentación, ya que es una perturbación que frecuentemente puede ocurrir en sistemas de proceso y presenta problemas importantes de control.

La condición inicial que aplica en la situación planteada es

$$\begin{aligned} x_{AF}(z_F, 0) &= x_{FN} \\ x_A(z, 0) &= x_{AS} \quad ; \quad z \neq z_F \\ y_A(z, 0) &= y_{AS} \end{aligned} \quad (3-119)$$

donde x_{AF} es la composición de la alimentación, z_F el punto de alimentación, x_{FN} la composición nueva de la alimentación, x_{AS} y y_{AS} son las composiciones en estado estacionario, antes de la

perturbación.

Se realizaron los cálculos para un incremento de 0.2 a 0.25 (situación viable en la práctica) de fracción mol del componente ligero en la alimentación y se resolvió el sistema para alta transferencia de masa, debido a sus mejores características de convergencia.

En las figuras 3.11, 3.15 y 3.19 se aprecia la evolución de los perfiles de composición para los sistemas metanol-agua y etanol-agua. Se observa cómo los mayores cambios ocurren en la zona adiabática y en el condensador, en tanto que el evaporador presenta menos sensibilidad. Ya que la zona adiabática tiene mayor libertad de cambio, es la zona que presenta la mayor ganancia.

Para el sistema metanol-agua de baja pureza y el sistema etanol-agua, al incrementarse la composición de la alimentación, se incrementó la pureza del destilado (Figs. 3.11 y 3.19). Sin embargo, en el sistema metanol-agua de alta separación (Fig. 3.15) la pureza del destilado disminuyó, lo que concuerda con observaciones de Seok y Hwang (1985).

El tiempo requerido para la estabilización, de 8 a 9 min, es característico del tiempo para la transferencia de masa en la fase gas, lo que es consistente, ya que es la fase que se va enriqueciendo en el componente ligero. Este tiempo, se observa tanto en el destilado, como en los puntos de la columna que experimentan el mayor cambio en composición.

Por otro lado, se puede observar en las figuras 3.13, 3.17 y 3.21 que la constante de tiempo característica es de 1 a 2

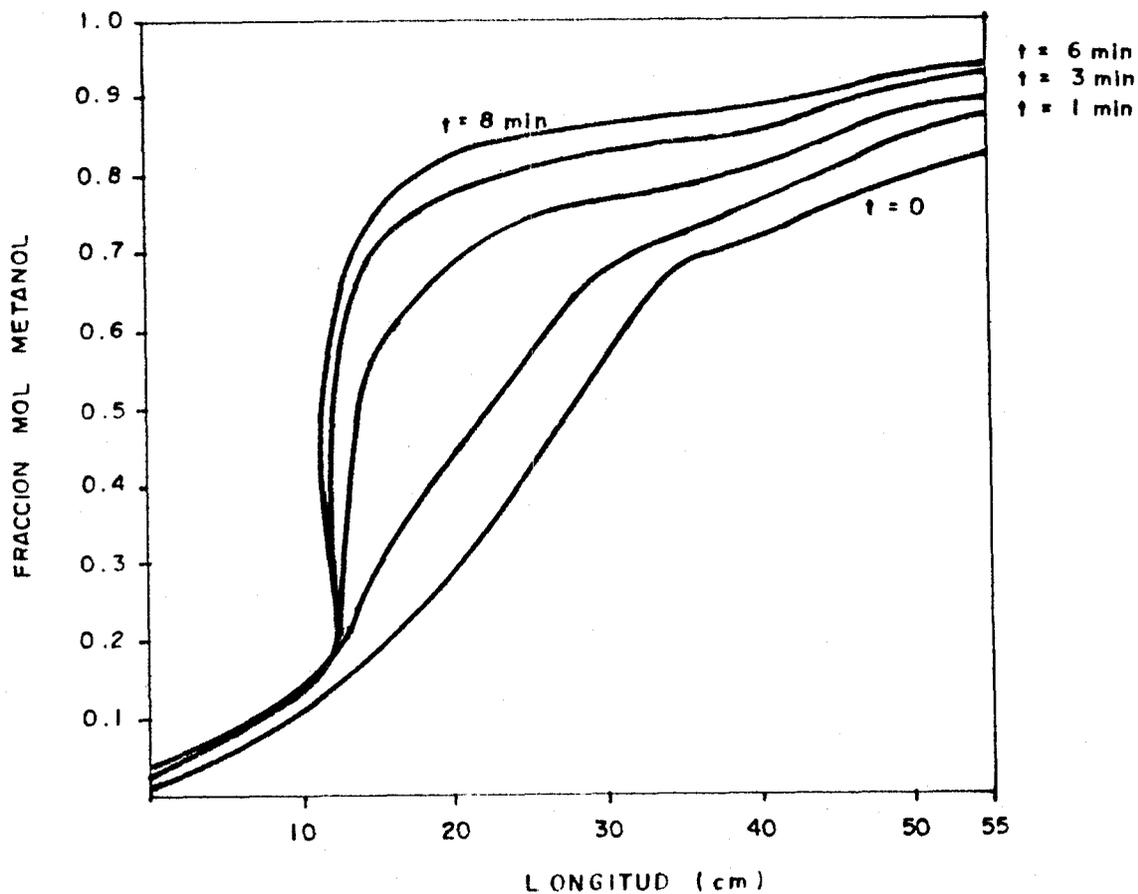


FIGURA 3.11.- EVOLUCION DEL PERFIL DE COMPOSICION DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE METANOL

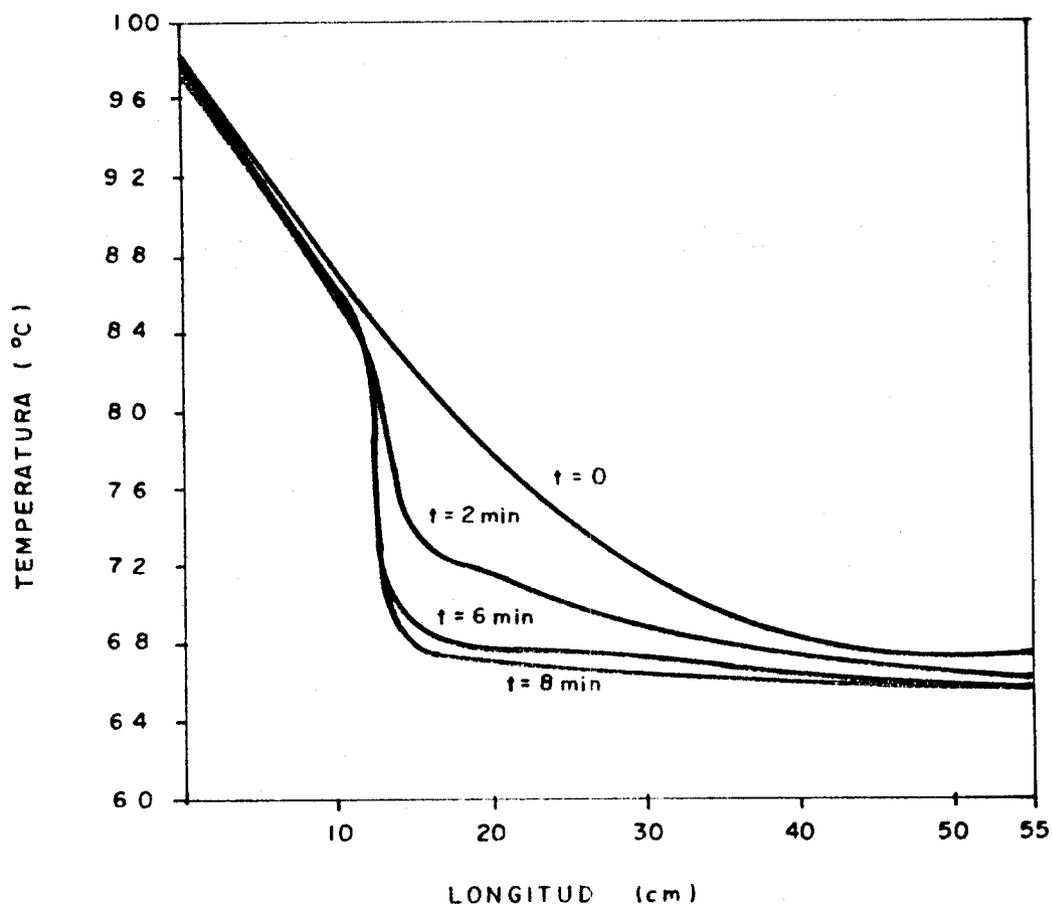


FIGURA 3.12.- EVOLUCION DEL PERFIL DE TEMPERATURAS DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE METANOL

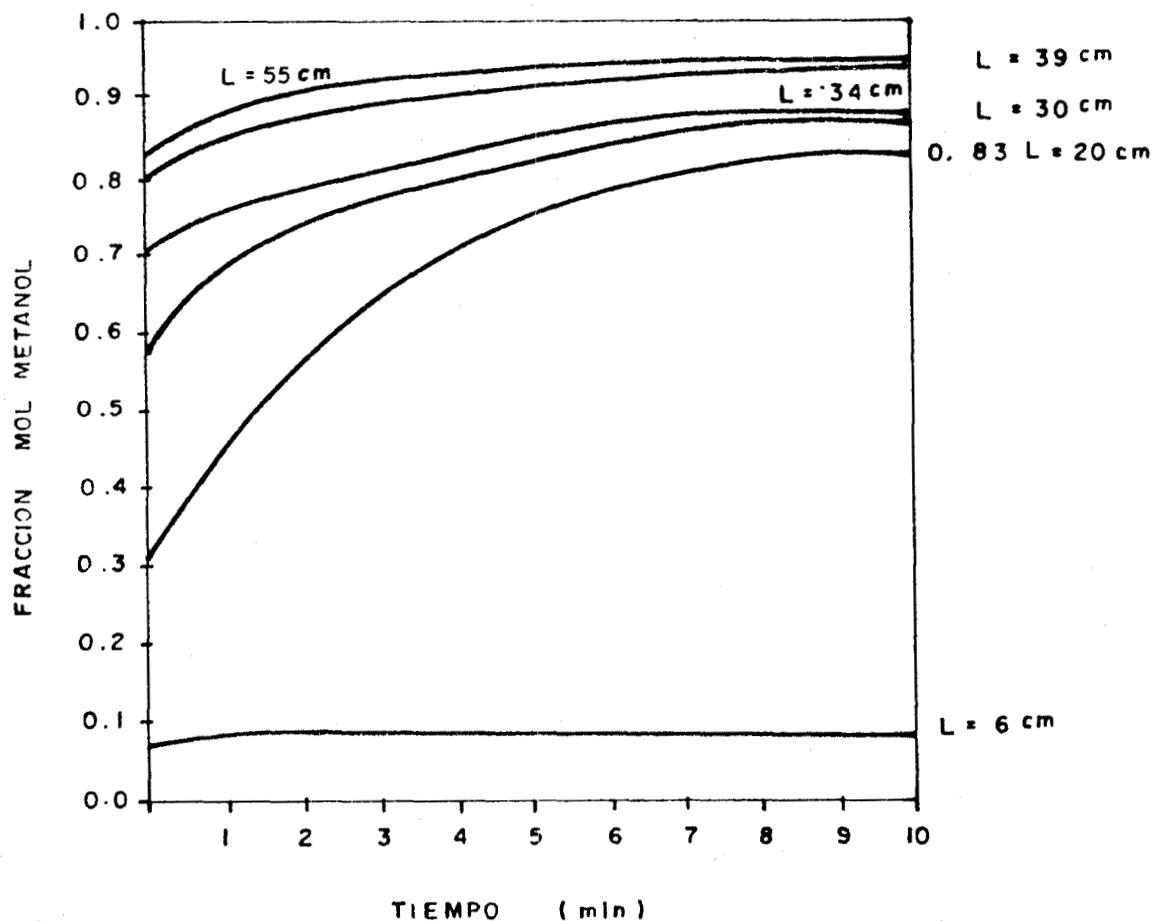


FIGURA 3.13.- EVOLUCION DE LA COMPOSICION DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE METANOL

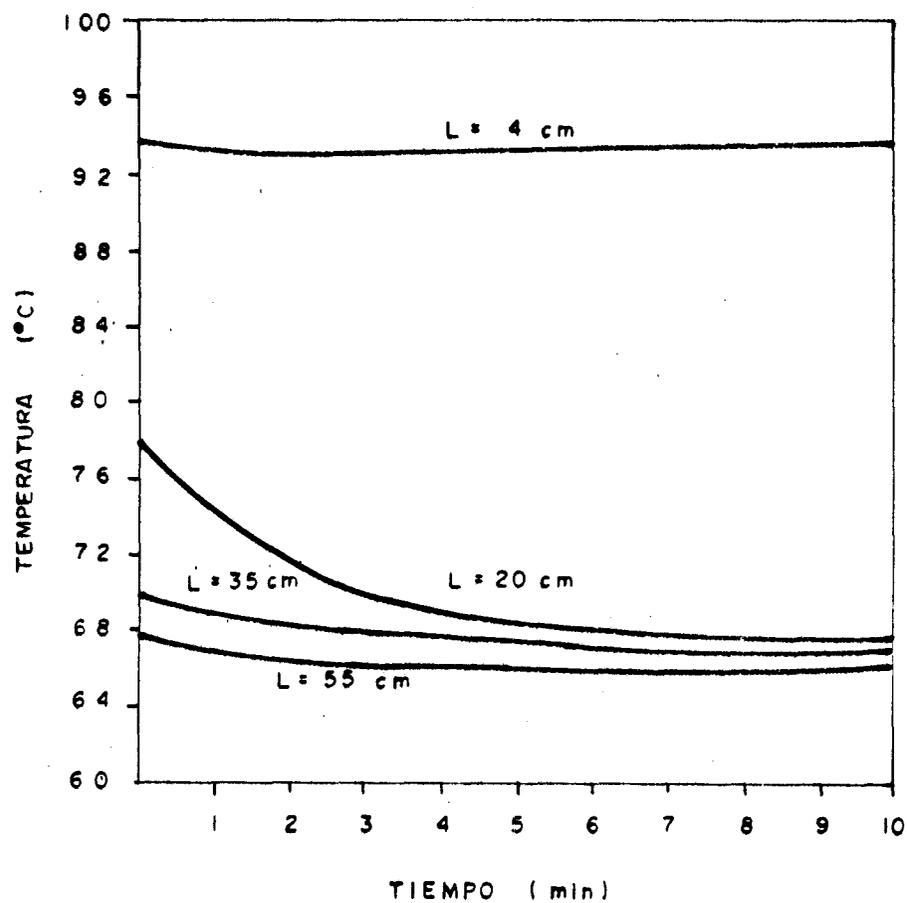


FIGURA 3.14.- EVOLUCION DE LA TEMPERATURA DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DGC, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE METANOL.

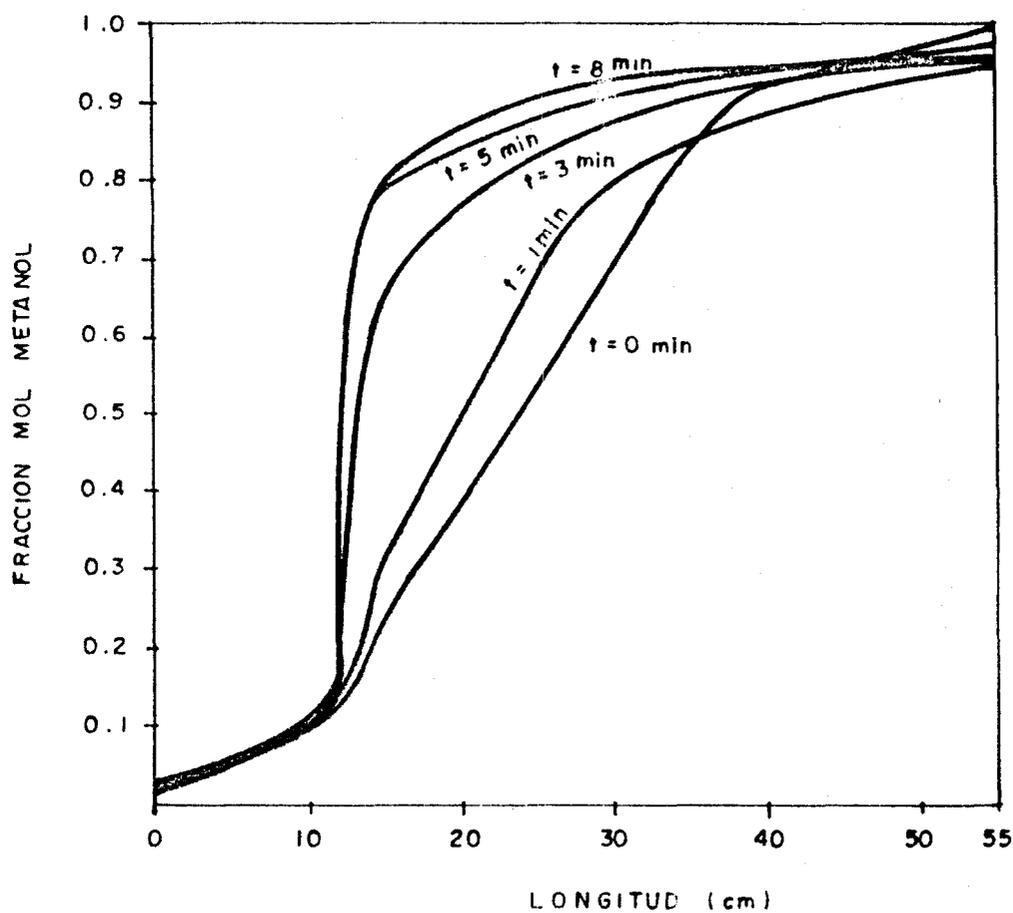


FIGURA 3.15.- EVOLUCION DEL PERFIL DE COMPOSICION DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE METANOL

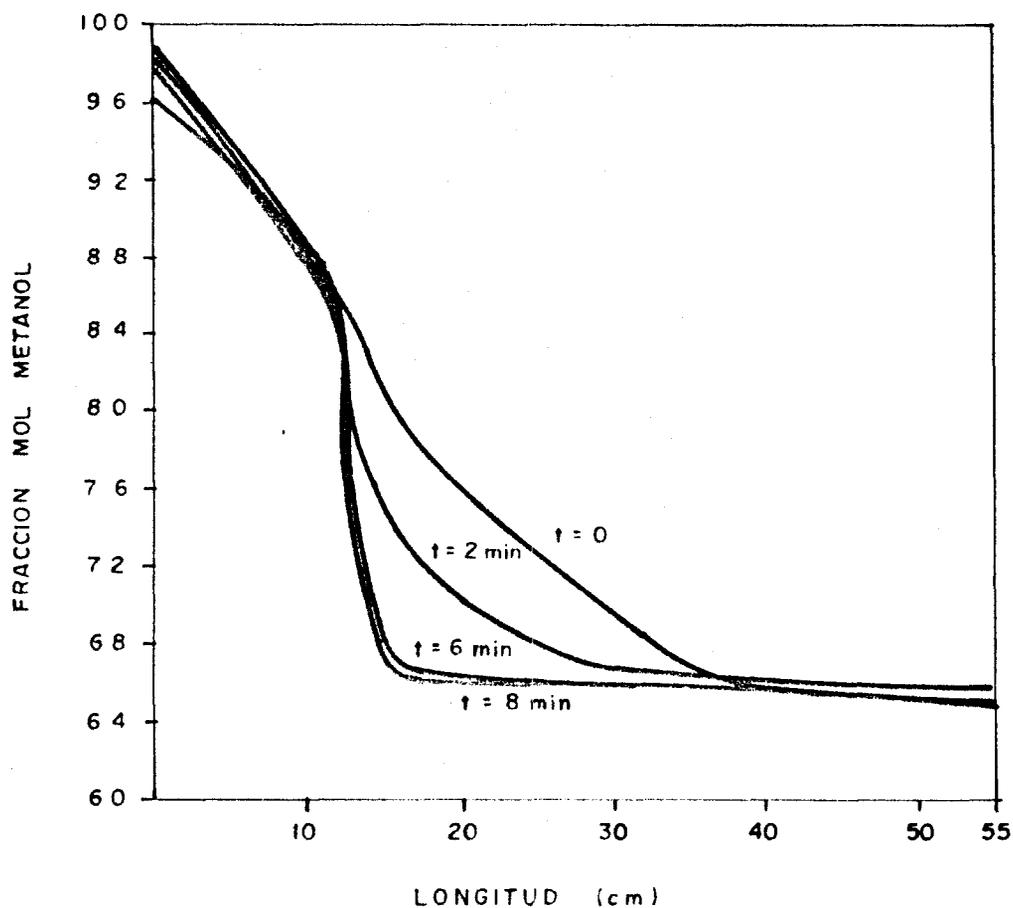


FIGURA 3.16.- EVOLUCION DEL PERFIL DE TEMPERATURAS DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE METANOL

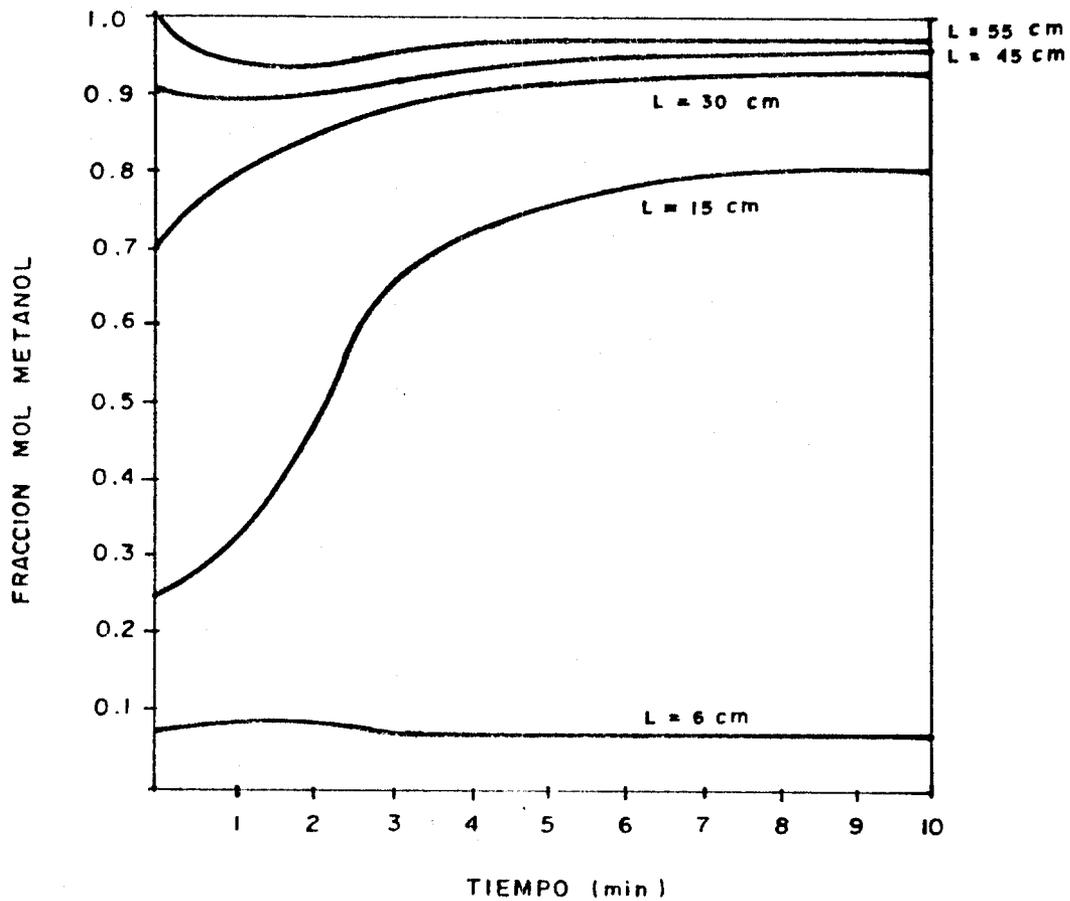


FIGURA 3.17.- EVOLUCION DE LA COMPOSICION DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE METANOL

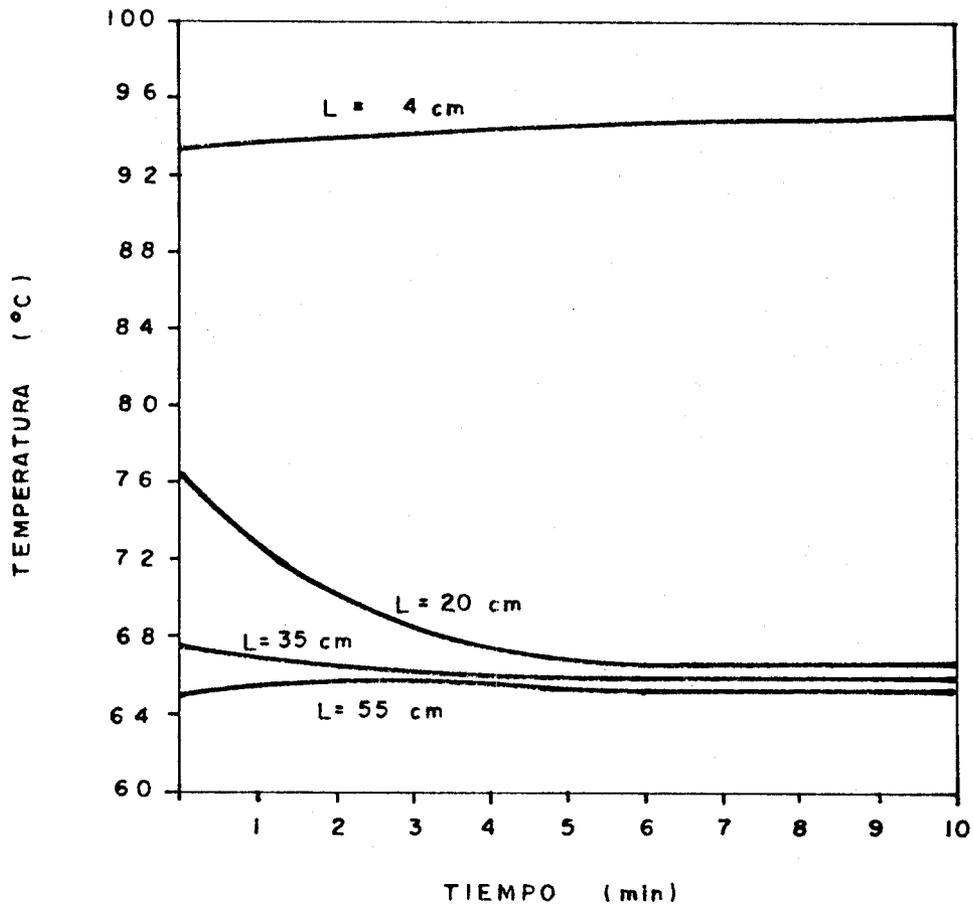


FIGURA 3.18.- EVOLUCION DE LA TEMPERATURA DEL SISTEMA METANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE METANOL.

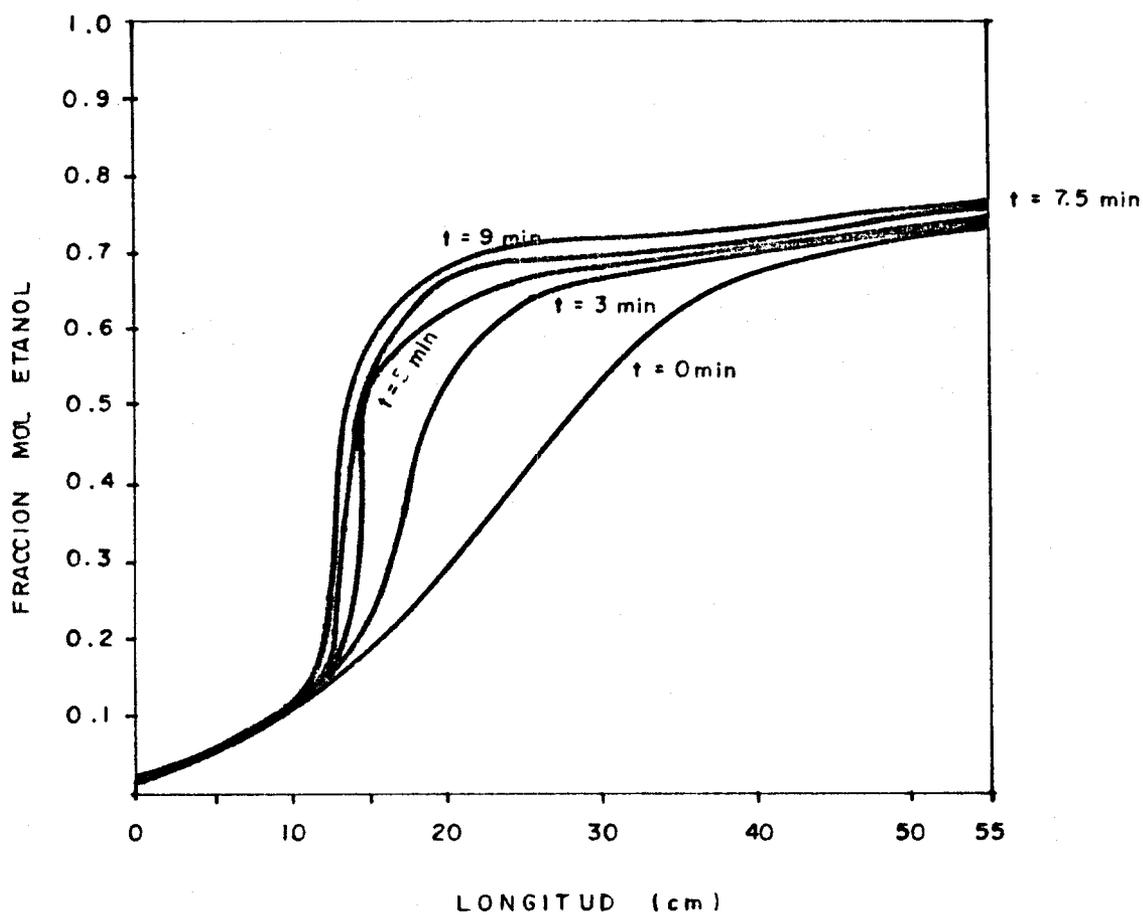


FIGURA 3.19.- EVOLUCION DEL PERFIL DE COMPOSICION DEL SISTEMA ETANOL - AGUA EN LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE ETANOL

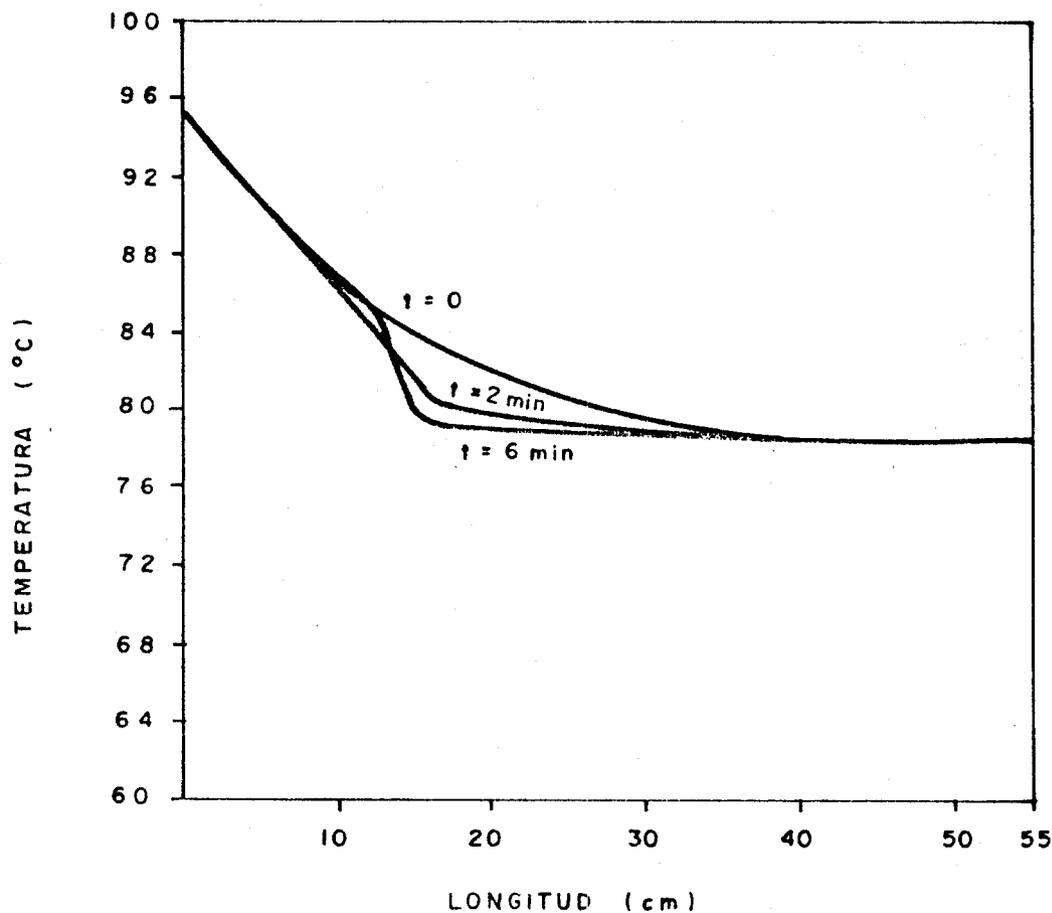


FIGURA 3.20.- EVOLUCION DEL PERFIL DE TEMPERATURAS DEL SISTEMA ETANOL-AGUA EN LA COLUMNA DCG PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE ETANOL

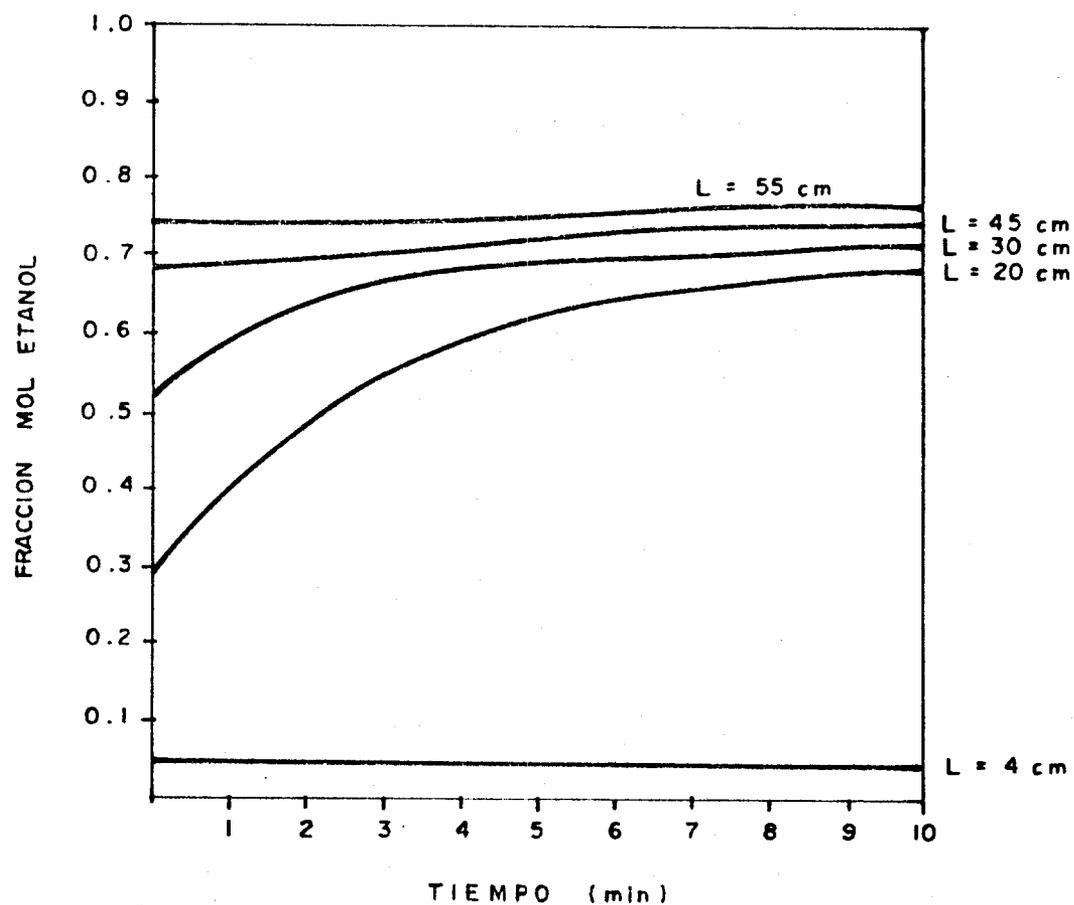


FIGURA 3.21.- EVOLUCION DE LA COMPOSICION DEL SISTEMA ETANOL - AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 a 0.25 FRACCION MOL DE ETANOL

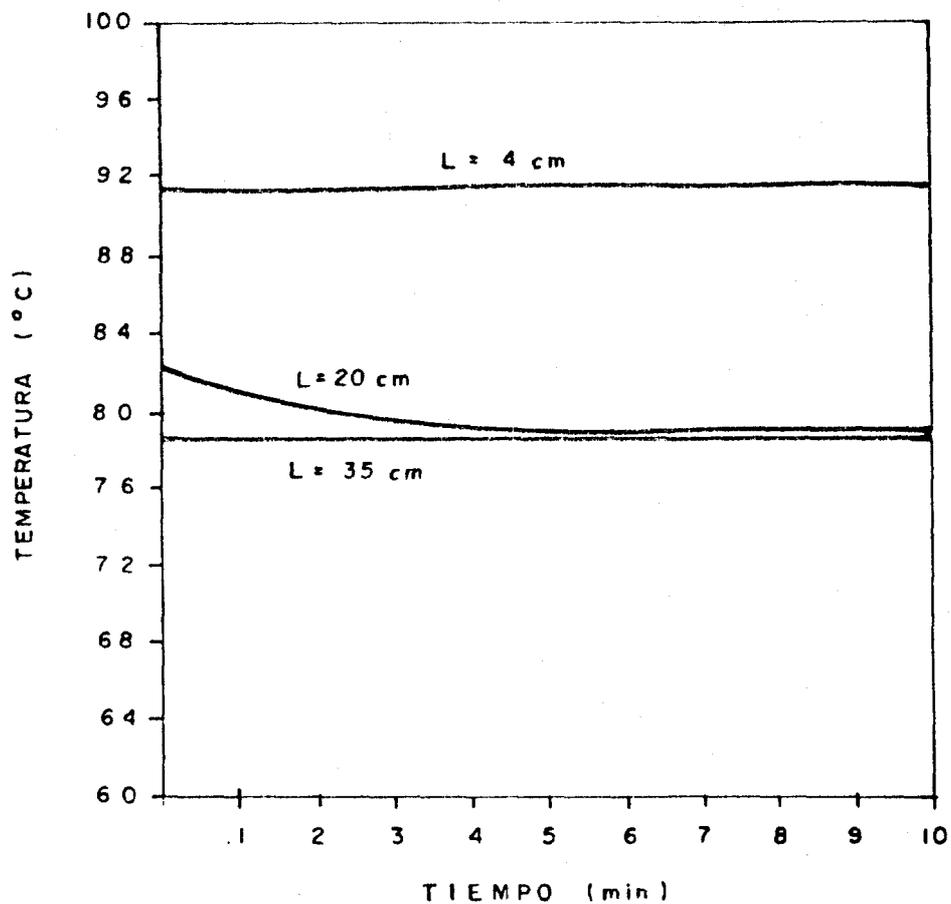


FIGURA 3.22.- EVOLUCION DE LA TEMPERATURA DEL SISTEMA ETANOL-AGUA EN DIFERENTES PUNTOS DE LA COLUMNA DCG, PROVOCADO POR UN CAMBIO EN LA COMPOSICION DE LA ALIMENTACION DE 0.2 ó 0.25 FRACCION MOL DE ETANOL

minutos para cambios en la sección adiabática, el cual es cercano el tiempo convectivo para la fase líquida (sección 3.2.3). Lo importante, es que se observa la influencia de los efectos de capilaridad en la columna, como responsables de la convección en la fase líquida.

Tanto el tiempo característico, como el de estabilización, en DCG son mucho más pequeños que los de una columna convencional, los cuales en este caso son de varias horas y esto puede representar una ventaja.

En las figuras 3.13 y 3.21 se observa que la dinámica de cambio de la composición, especialmente en la zona adiabática, muestra respuestas características de primer orden, en tanto que en el condensador se puede considerar que las respuestas son más aproximadas a un segundo orden sobreamortiguado. La razón para esto, es el enfriamiento aplicado en la zona. En el caso, del sistema metanol-agua de alta pureza se observa que, en el condensador, el primer efecto del cambio es la disminución del componente ligero y posteriormente se incrementa la fracción mol de éste. Esto se puede atribuir a la acumulación inicial de materia en la fase gas, que es la fase que más rápidamente se enriquece, y considerando que viaja con alta velocidad hacia el condensador, afecta muy pronto a esta zona. Sin embargo, debe recordarse también que el modelo no es totalmente correcto en el condensador, y como ocurre para el caso de estado estacionario, debe esperarse un comportamiento diferente al incluir los fenómenos de esta zona.

Para tener una afirmación concluyente, es necesario tener

estudios dinámicos más completos, analizando el efecto de cambio en otras variables, como son los flujos, presión y otros. En todo caso, el contar con un modelo para estudios dinámicos en DCG, así como con un método de solución, y el obtener información que indique congruencia con los fenómenos físicos, son aspectos que se han logrado en el presente trabajo.

3.2.9. INFORMACION COMPARATIVA EN CONSUMOS DE ENERGIA.

Con la finalidad de obtener datos adicionales sobre las ventajas potenciales de la destilación cero gravedad (DCG), así como para establecer bases más amplias que orienten el desarrollo y aplicación de esta operación el Centro de Investigación en Química Aplicada (CIQA) de Saltillo, Coahuila, México, y la Universidad Autónoma Metropolitana U. Iztapalapa (UAM-I) de México, D.F., recibieron el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (Ramírez y Alvarez, 1992) para evaluar esta tecnología.

En CIQA se construyó una columna DCG (Villarreal, et. al., 1992) con las dimensiones aproximadas a las reportadas por Seok y Hwang (1985). Se trataron mezclas metanol-agua y etanol-agua de diferente composición y en cada caso se determinaron las composiciones de los productos en ambos extremos y se midieron los consumos de energía.

En la UAM-I se construyó una torre empacada de destilación continua (Alvarez, et. al. 1992b) a escala laboratorio y se procesaron mezclas metanol-agua y etanol-agua de diferente composición realizándose el mismo tipo de mediciones que se

realizaron en la columna DCG construída en CIQA.

Estos trabajos alcanzaron la fase experimental de inicio, que básicamente consistió en la construcción de los aparatos y la compra de algún equipo de adquisición de datos. En las primeras corridas experimentales, más bien exploratorias, se identificaron necesidades de ajuste e instrumentación adicional que se pretenden realizar en una segunda etapa del proyecto.

En este tipo de pruebas experimentales iniciales, tanto en los datos de entrada como de salida, hubo variaciones que no permitieron una comparación directa entre los resultados obtenidos en ambas instituciones. Debido a ello, Alvarez et. al. (1992b) propusieron una forma normalizada para realizar el análisis comparativo. Para ello se calculó en ambos casos el calor aplicado en el hervidor por g-mol de vapor generado.

$$q = \frac{Q_{\text{hervidor}}}{V} \quad (3-120)$$

y se estableció como medida de eficiencia el calor empleado por grado de separación obtenida, la cual se da por el cociente

$$R_q = q/W_s \quad (3-121)$$

donde W_s es el factor de separación, x_D/x_F (x_D y x_F denotan la fracción mol del componente ligero en el destilado y en la alimentación, respectivamente).

Los resultados obtenidos se presentan en los cuadros 3.6 y 3.7 y en las figuras 3.23 y 3.24. Se aprecia que tanto para el sistema metanol-agua como el sistema etanol-agua, la eficiencia en el uso de energía, de acuerdo con el criterio empleado, es mejor

CUADRO 3.6.

DATOS DE EFICIENCIA COMPARATIVA EN LA SEPARACION DE MEZCLAS METANOL-AGUA MEDIANTE DESTILACION CERO GRAVEDAD Y DESTILACION CONVENCIONAL EN COLUMNA EMPACADA.

PARAMETRO	COLUMNA EMPACADA CONVENCIONAL	DCG
W_s	2.43	3.57
	3.32	4.08
	5.06	4.38
q	16.83	9.56
	18.44	9.78
	17.33	9.77
R_q	6.92	3.71
	5.55	2.39
	3.42	2.22

(Alvarez, et. al., 1992b)

CUADRO 3.7.

DATOS DE EFICIENCIA COMPARATIVA EN LA SEPARACION DE MEZCLAS
 ETANOL-AGUA MEDIANTE DESTILACION CERO GRAVEDAD Y DESTILACION
 CONVENCIONAL EN COLUMNA EMPACADA.

PARAMETRO	COLUMNA EMPACADA CONVENCIONAL	DCG
W_s	1.16	1.97
	1.85	2.08
	2.25	2.8
q	13.31	9.87
	16.85	9.93
	19.94	9.93
R_q	11.47	5.01
	9.10	4.77
	8.86	3.54

(Alvarez, et. al., 1992b)

en la destilación cero gravedad, ya que se consume menor cantidad de energía por mol de vapor generado, para lograr una separación determinada.

Esta información soporta las expectativas iniciales del presente trabajo, en relación a que el empleo del principio del tubo caliente (reconocido por su alta eficiencia en el consumo de energía) en procesos de separación puede conducir a reducciones de costo importantes en el renglón de energía.

SISTEMA METANOL-AGUA

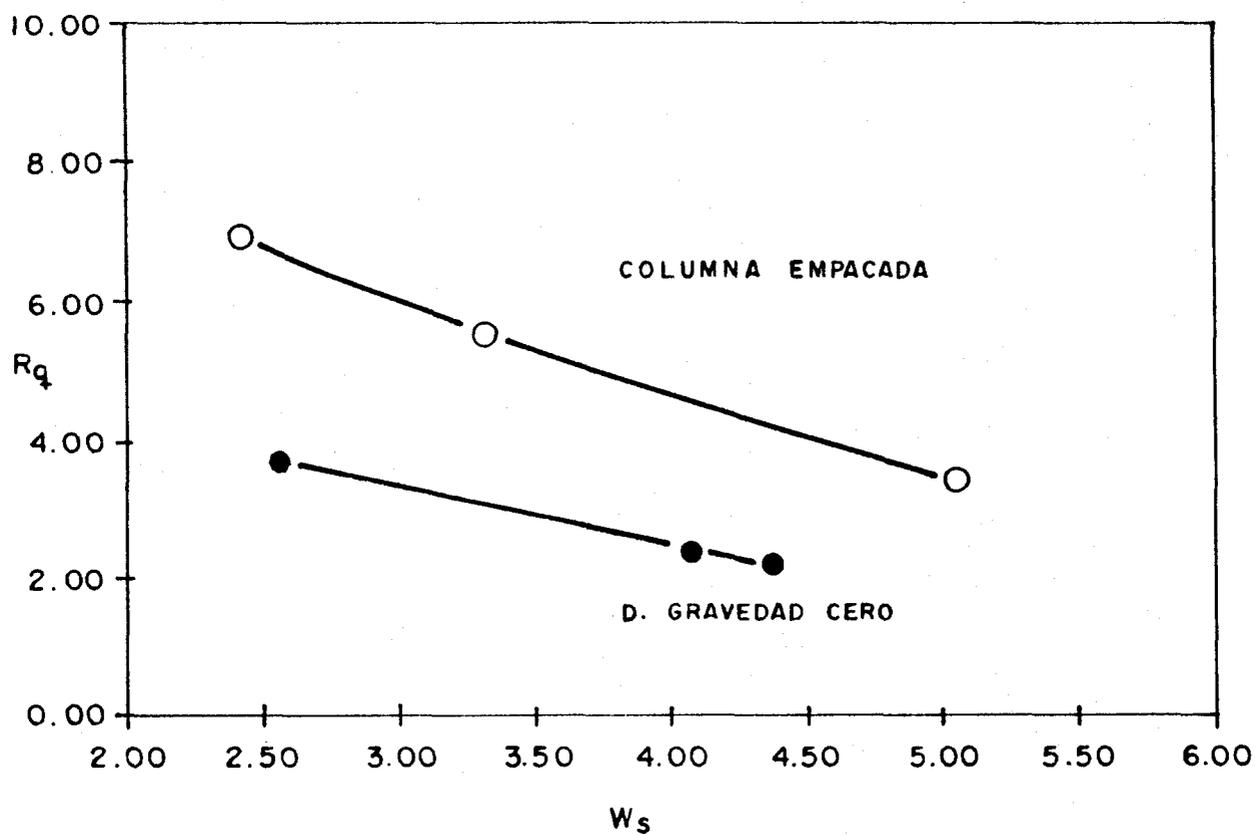


FIGURA 3.23.- COMPARACION DE LA EFICIENCIA EN EL CONSUMO DE ENERGIA DE LA DESTILACION CERO GRAVEDAD CON RESPECTO A LA DESTILACION CONVENCIONAL EN UNA COLUMNA EMPACADA PARA EL SISTEMA METANOL - AGUA

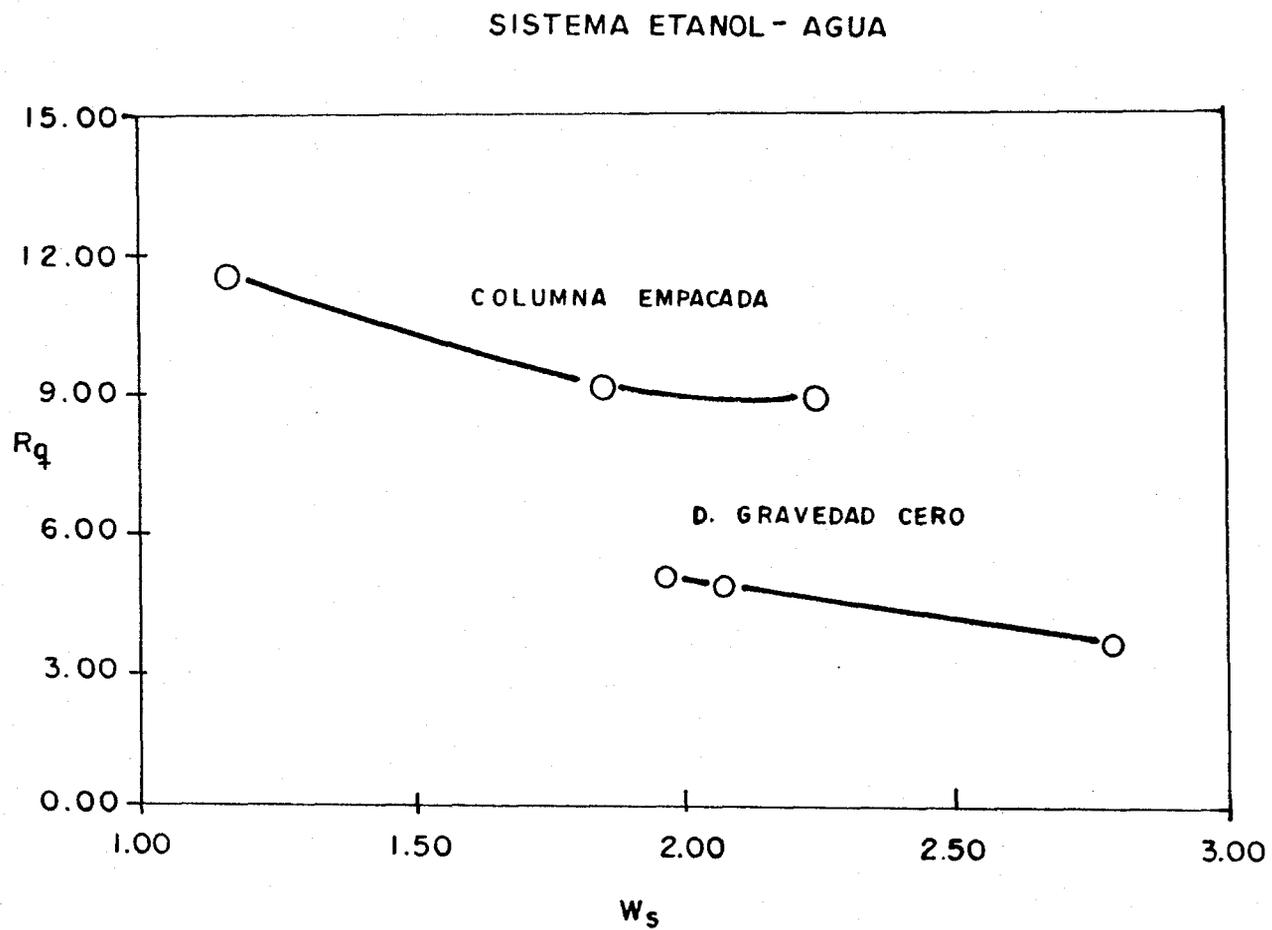


FIGURA 3.24.- COMPARACION DE LA EFICIENCIA EN EL CONSUMO DE ENERGIA DE LA DESTILACION CERO GRAVEDAD CON RESPECTO A LA DESTILACION CONVENCIONAL EN UNA COLUMNA EMPACADA PARA EL SISTEMA ETANOL - AGUA

3.3. CONCLUSIONES DEL MODELADO.

Como resultado del análisis conceptual y del modelamiento matemático derivado de principios básicos, se ha logrado un mejor conocimiento de la destilación cero gravedad (DCG).

A partir del análisis se establecen las siguientes consideraciones en el comportamiento de la DCG:

- 1). El gradiente de presión en la fase líquida, provocado por el gradiente de tensión interfacial que se establece por la diferencia de temperaturas en los extremos de la columna DCG, proporciona la fuerza motriz para la realización del proceso.
- 2). Las fuerzas inerciales tienen un efecto poco significativo en la operación.
- 3). El efecto de la variación de la composición en la tensión interfacial es pequeño con respecto al efecto de la variación de la temperatura. Es decir, el gradiente de temperaturas es el principal responsable de generar los gradientes capilares que proporcionan la fuerza de bombeo en DCG.
- 4). La variación de la tensión interfacial con respecto a la temperatura y con respecto a la posición es aproximadamente constante.
- 5). La operación se realiza en condiciones de alta transferencia

- de masa, promovida por un efecto de mezclado de película que provee el medio poroso.
- 6). Los perfiles radiales de temperatura y composición se pueden suponer planos.
 - 7). El proceso se lleva a cabo en condiciones cercanas al equilibrio. Si bien, se planteó previamente por Seok y Hwang (1985), en este trabajo se proporciona un marco analítico que lo demuestra, para columnas delgadas.
 - 8). Las temperaturas interfacial, del líquido y del gas son muy similares.
 - 9). El proceso se lleva a cabo en condiciones cercanas a la saturación, por lo que el perfil de temperaturas se puede obtener por medio de cálculos de punto de burbuja.
 - 10). La transferencia de calor en la interface es el proceso que ocurre con mayor rapidez en la operación, por lo que las ecuaciones de energía presentan un estado cuasi-estacionario, con respecto a las ecuaciones de conservación de masa.

Estas consideraciones permiten establecer un modelo matemático para la zona adiabática de la columna, del cual se observa una alta capacidad predictiva, derivada de la simulación en estado estacionario y su comparación con datos experimentales reportados por Seok y Hwang (1985). En la simulación dinámica no se cuenta con datos experimentales contra los cuales se puedan comparar resultados, sin embargo los resultados demuestran consistencia. La zona adiabática presenta la mayor ganancia a cambios en composición. La respuesta dinámica observa un

comportamiento del tipo de primer orden con el tiempo característico de la convección y el tiempo de estabilización de la transferencia de masa en la interface. Esto concuerda con las consideraciones del modelo. La respuesta del sistema, bajo las consideraciones anteriores, justifica la alta eficiencia de la operación tanto en la separación lograda, como en los bajos consumos de energía. Con esto se observan ventajas claras de la DCG con respecto a la destilación convencional.

PARTE IV.

CONCLUSIONES.

4.1. CONCLUSIONES GENERALES.

En el presente trabajo, partiendo de una revisión del conocimiento existente en destilación convencional, se observa que esta operación unitaria enfrenta dos grandes retos: la reducción del consumo de energía para realizar las separaciones y la reducción de costos de inversión y operación. En los últimos 20 años se ha buscado incidir en estos problemas, mediante la realización de trabajo de investigación en esquemas de integración de energía y el diseño de equipo mejorado, así como desarrollos en empaques y de platos. En la actualidad se definen dos tendencias de desarrollo: una en la línea de mejoramiento y otra en la línea de cambio por sustitución.

En el presente trabajo se encuentra que en la línea de mejoramiento la tendencia más importante consiste en la difusión y aplicación del modelamiento basado en fenómenos de transporte. Se considera que este es un enfoque más fundamentado que el enfoque convencional de equilibrio, corregido por eficiencias. El modelamiento de los fenómenos de transporte sin duda abre una nueva área de investigación y la destilación convencional deberá beneficiarse con nuevo conocimiento y mejores resultados en la práctica.

En la tendencia de cambio por sustitución se han identificado tres operaciones unitarias, que con principios teóricos diferentes a los de la destilación convencional inciden en la reducción de costos de inversión. Estas operaciones son la pervaporación, la destilación a alta gravedad (tecnología Hige) y la destilación cero gravedad. La pervaporación tiene un rango limitado de aplicación y por consiguiente sólo se puede aplicar conjuntamente con torres de destilación. La tecnología Hige es actualmente propiedad de ICI y no se ha difundido suficiente información que permita estimar su desarrollo futuro. La destilación cero gravedad (DCG), reportada por Seok y Hwang (1985), que opera bajo los principios de capilaridad de un tubo caliente, tiene un gran potencial de aplicación ya que incide en los dos problemas fundamentales que se han planteado en destilación. Esto se basa, por un lado, en que se logran altos grados de separación en columnas muy cortas con respecto a las torres convencionales y, por otro, que el tubo caliente se reconoce como un aparato muy eficiente en la transferencia de calor (Dunn y Reay, 1982).

El modelamiento previo realizado por Seok y Hwang (1985) considera a la columna DCG como una torre empacada convencional. Sin embargo, no se logra explicar la alta eficiencia de separación lograda en esta operación.

En el presente trabajo se logró establecer una conceptualización de la destilación cero gravedad, y se derivó y validó el modelo matemático asociado. La conceptualización propuesta se enfoca en los nuevos principios de separación que son el flujo del líquido en el medio poroso causado por fuerzas

capilares, debido al gradiente de tensión superficial inducido por la temperatura y las propiedades del medio poroso. En esta conceptualización se manifiesta el efecto de la capilaridad con el equilibrio de fases, la difusividad en el medio poroso y la transferencia de masa.

En contraste con el modelamiento previo derivado por analogía con una columna empacada convencional, el modelo propuesto explica la alta eficiencia alcanzada en DCG. El modelo consiste de ecuaciones diferenciales parciales acopladas con ecuaciones algebraicas, cuya solución en estado estacionario se obtiene con la técnica de colocación en elemento finito, utilizando polinomios cúbicos de Hermite como funciones base. La solución en estado transitorio se obtuvo por el método implícito de Euler, utilizando las mismas funciones base para obtener la respuesta en el espacio. El modelo muestra una gran capacidad de predecir los perfiles de composición.

En este trabajo se ha hecho evidente que la alta eficiencia de separación que se alcanza en DCG no se puede explicar desde el punto de vista de las teorías conocidas de transferencia de masa. Sin embargo, con el enfoque de mezclado de película, derivado como extensión a medios porosos del concepto de fluctuaciones en la interface que proponen Back y McReady (1988), se obtiene una base teórica consistente que permite analizar la transferencia de masa en DCG. Como consecuencia, se demuestra que los resultados experimentales sólo pueden obtenerse con una combinación de correlaciones de coeficientes de transferencia de masa para regímenes de flujo alto y bajo, lo que sugiere que la naturaleza

del medio poroso puede promover el mezclado de película por medio de un mecanismo similar al propuesto por Back y McReady (1988). Sin embargo, es necesario realizar mayor trabajo teórico y experimental para definir en forma concluyente la estructura del efecto identificado.

Aunque no se cuenta con información experimental para el estado transitorio, los resultados de la simulación dinámica son consistentes con los tiempos característicos esperados y soportan las conclusiones obtenidas respecto al efecto de las fuerzas capilares en la operación del sistema.

Finalmente, la comparación de datos experimentales de consumos de energía en separaciones realizadas en DCG y en una torre empacada convencional, demuestra que DCG es más eficiente en el uso de la energía y por consiguiente, se confirma su potencial de aplicación.

NOMENCLATURA

- \bar{a}_i : actividad del componente i en solución
 a_p : área interfacial, m^2/m^3
 A_s : área transversal, m^2
 A_t : área superficial del sólido por unidad de volumen, m^2/m^3
 B : flujo de producto en el fondo de la columna, $gmol/s$
 c : coeficiente de las funciones de aproximación
 C : concentración, $g-mol/cm^3$
 \hat{C}_p : capacidad calorífica molar, $cal/(gmol^\circ C)$
 c_p : capacidad calorífica por unidad de masa, $cal/(g^\circ C)$
 D : flujo de líquido en el destilado, $gmol/s$
 D_{AB} : coeficiente de difusión binaria para el sistema A-B, cm^2/s
 D_{eff} : coeficiente de difusión efectiva, cm^2/s
 d_z : dimensión que caracteriza la superficie líquid-vapor, cm
 E : flujo de energía $cal/(cm^2.s)$
 f : factor de fricción de Fanning, adimensional
 f_1 : fugacidad de un componente en solución, din/cm^2
 F : flujo de alimentación, $gmol/s$
 g : factor de aceleración de la gravedad, cm/s^2
 g^E : energía libre de Gibbs de exceso por mol de mezcla, $cal/gmol$
 \bar{G}_1 : energía libre de Gibbs molar parcial, $cal/gmol$
 h_d : calor disipado en cada plato de la columna, cal
 h_k : tamaño de elemento, cm
 h_L : coeficiente de transferencia de calor para la fase líquida, $cal/(cm^2.s.^\circ K)$
 h_t : paso de integración, s
 h_v : coeficiente de transferencia de calor para la fase gas,

- cal/(cm².s.°K)
- H : entalpía de mezcla, cal/gmol
- \bar{H} : entalpía molar parcial, cal/gmol
- H_t : altura de una unidad de transferencia, cm
- K : permeabilidad del medio, cm²
- k_{Teff} : conductividad térmica efectiva, cal/(s.cm)
- k_{TL} : conductividad térmica del líquido, cal/(s.cm)
- k_{TS} : conductividad térmica del sólido, cal/(s.cm)
- k_{TV} : conductividad térmica del vapor, cal/(s.cm)
- k_L : coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida,
g-mol/(s.cm²) (g-mol/cm³)
- k_v : coeficiente de transferencia de masa para la fase gas,
g-mol/(s cm²) (g-mol/cm³)
- k'_x : coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida
g-mol/(s cm²)
- k'_y : coeficiente de transferencia de masa para la fase gas,
g-mol/(s cm²)
- K'_x : coeficiente global de transferencia de masa para la fase
líquida, g-mol/(s cm²)
- K'_y : coeficiente global de transferencia de masa para la fase
gas, g-mol/(s-cm²)
- L : flujo molar del líquido, g-mol/s
- L_t : longitud total de la columna DCG, cm
- \dot{m} : flujo másico, gmol/s
- n : número de moles
- N : número de platos teóricos
- N_A : flujo molar del componente A, gmol/(cm².s)

- N_t : número de unidades de transferencia
 P_c : presión capilar, mmHg
 Pe : número de Peclet, adimensional
 P_L : presión de la fase líquida, mmHg
 P_v : presión capilar, mmHg
 q : moles de líquido saturado por moles totales de alimentación
 Q : calor añadido, cal/s
 r_1 : radio de la columna DCG, excluyendo el medio poroso, cm
 r_2 : radio interno de la columna DCG, cm
 r_p : radio efectivo de poro, cm.
 R : constante de los gases ideales, cal/(gmol-°k)
 Re : número de Reynolds, adimensional
 R_q : razón de consumo de energía, cal/g-mol
 R_x : función residual en la fase líquida
 R_y : función residual en la fase gas
 s : razón de reemplazo, s⁻¹
 S : entropía, cal/(gmol-°K)
 Sc : número de Schmidt, adimensional
 Sh : número de Sherwood, adimensional
 St : número de Stanton, adimensional
 t : tiempo, s
 t^* : tiempo, adimensional
 t_s : tiempo de exposición, s
 T : temperatura, °C
 \bar{T} : temperatura adimensional
 u : abscisa normalizada ente 0 y 1

- u : velocidad superficial del fluido, cm/s
 v : volumen molar, cm^3/gmol
 V : flujo de vapor, gmol/s
 We : número de Webber, adimensional
 W_s : factor de separación, adimensional
 X : función de aproximación para la composición de la fase líquida
 \bar{X} : concentración adimensional para la fase líquida
 x_A : concentración del componente A en el líquido, fracción mol
 x_c : concentración del componente A en el líquido en el extremo del condensador, fracción mol.
 x_e : concentración del componente A en el líquido en el extremo del evaporador, fracción mol
 Y : función de aproximación para la composición de la fase gas
 \bar{Y} : concentración adimensional para la fase gas
 y_A : concentración del componente A en la fase vapor, fracción mol
 y_c : concentración del componente A en la fase vapor, en el extremo del condensador, fracción mol
 y_e : concentración del componente A en la fase vapor en el extremo del evaporador, fracción mol
 z : coordenada axial
 Z : coordenada adimensional

Letras griegas

- α : volatilidad relativa
 β : factor de corrección de flujo de bulbo

- $\bar{\beta}$: coeficiente de expansión volumétrica
 γ : coeficiente de actividad
 Γ : concentración en la fase superficial, moles/cm²
 δ : espesor de película, cm
 ϵ : porosidad
 ζ : ángulo con la horizontal
 η : espesor de la fase superficial, cm
 θ : variable de convergencia en el balance de materia
 λ : calor latente de vaporización, cal/gmol
 μ : viscosidad, (din.s)/cm²
 ν : potencial químico, cal/gmol
 ξ : funciones base para la aproximación polinómica
 ρ : densidad, g/cm³
 σ : tensión superficial, din/cm
 τ : factor de tortuosidad
 τ_D : tiempo dispersivo, s
 τ_h : tiempo para la transferencia de calor, s
 τ_k : tiempo conductivo, s
 τ_m : tiempo para la transferencia de masa, s
 τ_{cs} : tiempo convectivo, s
 $\bar{\phi}$: coeficiente de fugacidad
 ψ : constante de integración
 ω : ángulo de contacto

Subíndices

- A : componente más volátil
 c : condensador
 D : destilado

e : evaporador
F : alimentación
i : interfacial
K : número de elemento
L : fase líquida
m : sección de agotamiento
n : sección de rectificación
p : poro
r : coordenada radial
R : rehervidor
v : fase vapor
x : fase líquida
y : fase gas
z : coordenada axial

Superíndices

L : fase líquida
o : estado de referencia
s : estado de saturación
v : fase gas

BIBLIOGRAFIA.

- Alvarez J., Alvarez J., Martínez C., Non-linear Analysis of Distillation Control Structures, DYCORN 92, IFAC, University of Maryland, 1992a, Vol. II, 399-404.
- Alvarez C., J.; Martínez V., C.; Vargas V. F.; Galán, D.D.; Estudio Comparativo de la Destilación Convencional y la Destilación Cero Gravedad. Informe Final, UAM-I., México, D.F., 1992b.
- Andreacovich, M.J.; Westerberg, A.W. A simple Synthesis Method Based on Utility Bounding for Heat-Integrated Distillation Sequences. *AIChE J.* 1985, 31, 363-365.
- Arastoopour, H.; Semrau, J. Mathematical Analysis of Two-Phase Flow in Low-Permeability Porous Media. *AIChE J.* 1989, 35, 1710-1718.
- Back, D.D.; McReady, M.J. Theoretical Study of Interfacial Transport in Gas-Liquid Flows. *AIChE J.* 1988, 34, 1789-1802.
- Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lightfoot, E.N.; *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1960.
- Chellaiah, S.; Viskanta, R. Natural Convection Flow Visualization in Porous Media, *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 1987, 14, 607-616.
- Darton, R. Distillation and Absorption in 1987. *Chem. Eng.* 1987 (Nov), 36.
- Dunn, P.D.; Reay, D.A. *Heat Pipes*, 3a. ed.; Pergamon Press: Oxford, U.K., 1982.
- Fidkowsky, Z.; Krolikowsky, L. Thermally Coupled System of

- Distillation Columns: Optimization Procedure. *AIChE J.* 1986, 32, 537-546.
- Finlyason, B.A. Orthogonal Collocation on Finite Elements. *Nonlinear Analysis in Chemical Engineering*; McGraw-Hill: New York, 1980; Chapter 4.
- Greenkorn, R.A. Steady Flow through Porous Media. *AIChE J.* 1981, 27, 529-545.
- Haselden, G.G. Distillation Process and Apparatus. U.S. Patent 4 025 398, 1977.
- Higbie, R., The Rate of Absorption of a Pure Gas into a Still Liquid During Short Periods of Exposure, *Trans AIChE*, 1935, 31, 365-388.
- Hines, A.L.; Maddox, R.N. *Transferencia de Masa. Fundamentos y Aplicaciones.* 1a. Ed. en Español, Prentice-Hall Hispanoamericana, México, D.F., 1987.
- Holland, Ch.D., *Fundamentos y Modelos de Procesos de Separación*, Primera Impresión en Español, Prentice/Hall Internacional, Bogotá, 1981.
- Holland, Ch. D., *Fundamentos de Destilación de Mezclas Multicomponentes*, 1a. ed. en Español, Editorial Limusa, México, D.F., 1988.
- Hudson, J.W.; Van Winkle, M. Multicomponent Vapor-Liquid Equilibria in Miscible Systems from Binary Parameters, *Ind. Eng. Chem.*, 1970, 9, 446.
- Issacci, F.; Catton, I.; Heiss, A.; Ghoniem, N.M. Analysis of Heat Pipe Vapor Dynamics, *Chem. Eng. Com.*, 1989, 85, 85-94.
- Kaviany, M. Boundary-Layer Treatment of Forced Convection Heat

- Transfer from a Semi-infinite Flat Plate Embedded in Porous Media. *J. Heat Transfer* 1987, 30, 345-349.
- Luyben, W.L. Derivation of Transfer Functions for Highly Non linear Distillation Columns, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1987, 26, 2490-2495.
- Merker, G.P.; Mey, S. Free convection in a shallow cavity with variable properties-I. Newtonian fluid. *Int. J. Heat Mass transfer* 1987, 30, 1825-1832.
- Mey, S.; Merker, G.P., Free convection in a shallow cavity with variable properties - 2. Porous media, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1987, 30, 1833-1837.
- Modell, M.; Reid, R.C. *Thermodynamics and its Applications*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1974.
- Morari, M.; Faith, D.C. The Synthesis of Distillation Trains with Heat Integration. *AIChE J.* 1980 26, 916-928.
- Morrow, N.R. Physics and Thermodynamics of Capillary Action in Porous Media. *Ind. Eng. Chem.* 1970, 62 (June), 32-56.
- Naka, Y.; Terashita, M.; Tokamatso, T. A Thermodynamic Approach to Multicomponent Distillation System Synthesis, *AIChE J.*, 1982, 28, 812-820.
- Nakayama, A.; Koyama, H. Steady film condensation and boiling adjacent to a body of arbitrary shape in a porous medium, *Int. J. Heat Fluid Flow* 1987a 8, 145-148.
- Nakayama, A.; Koyama, H. Integral treatment of buoyancy-induced flows in a porous medium adjacent to horizontal surfaces with variable wall temperature. *Int. J. Heat Fluid Flow* 1978b, 21, 297-300.

- Nakayama, A.; Koyama, H.; Kuwahara, F. Two-Phase Boundary Layer Treatment for Subcooled Free-Convection Film Boiling Around a Body of Arbitrary Shape in a Porous Medium. *J. Heat Transfer* 1987, 109, 997-1002.
- Nath, R.; Motard, R.L.; Evolutionary Synthesis of Separation Processes, *AIChE J.*, 1981, 27, 578-587.
- Nomura, J.; Farrel, P.V. Heat and Mass Transfer Coefficients for Porous Horizontal Cylinders, *AIChE J.*, 1985, 31, 1217-1219.
- O'Sullivan, D. Novel Separation Technology May Supplant Distillation Towers (Imperial Chemical Industries). *Chem. Eng. News* 1983, 61 (Mar 7), 26-28.
- Ramírez G., E.A.; Alvarez C., J. Desarrollo y Evaluación de la Tecnología de Destilación Cero Gravedad. Informe Final. Clave P125CCOT904791, México, D.F., 1992.
- Rathore, R.N.S.; Van Wormer, K.A.; Powers, G.J. Synthesis Strategies for Multicomponent Separation Systems with Energy Integration, *AIChE J.*, 1974, 20, 491-502.
- Rathore, R. N. S.; Van Wormer, K.A.; Powers, G.J.; Synthesis of Distillation Systems with Energy Integration, *AIChE J.*, 1974, 20, 940-950.
- Rautenbach, R.; Albrecht, R., Pervaporation and Gas Permeation-fundamentals of process design, *Int. Chem. Eng.*, 1987, 27, 10-24.
- Redman, J. Pervaporation heading for new horizons. *Chem. Eng.* 1990 (Feb), 46-49.
- Reid, R.C.; Prausnitz, J.M.; Poling, B.E. *The Properties of Gases and Liquids*, 4a. Ed.; McGraw-Hill: New York, 1987.

- Reid, R.C.; Prausnitz, J.M.; Sherwood, T.K. The Properties of Gases and Liquids, 3a. ed.; McGraw-Hill: New York, 1977.
- Rose, L.M.; Distillation Design in Practice, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, 1985.
- Seader, J.D. Continuous Distillation Apparatus. U.S. Patent 4 234 291, 1980.
- Seader, J.D. The Rate-based Approach for Modeling Staged Separations, CEP, 1989 (Oct.), 41-49.
- Seader, J.D.; Westerberg, A.W. A Combined Heuristic and Evolutionary Strategy for Synthesis of Simple Separation Sequences, AIChE J., 1977, 951-954.
- Seok, D.R.; Hwang, S. Zero-Gravity Distillation Utilizing the Heat Pipe Principle (Micro-Distillation), AIChE J. 1985, 31, 2059-2065.
- Skogestad S., Dynamics and Control of Distillation Columns - A Critical Survey, DYCORN 92, IFAC, University of Maryland, 1992, Vol. II, 1-25.
- Skogestad, S.; Morari, M. Control Configuration Selection for Distillation Columns, AIChE J., 1987, 33, 1620-1635.
- Slattery, J.C., "Single-Phase Flow through Porous Media, AIChE J., 1969, 15, 866-872.
- Smith, J.M. Modelo de poros en desorden. Ingeniería de la Cinética Química, 1st ed. in Spanish; Compañía Editorial Continental: México, D.F., 1986; cap. 11.
- Smith, J.M.; Van Ness, H.C. "Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics", 3a. ed.; McGraw-Hill: Tokyo, 1975; Cap. 7.
- Stading, W.P. Trends and Developments in Distillation, Chemical

- Processing, 1991 (Feb), 45-53.
- Thompson, R. W.; King, C.J.; Systematic Synthesis of Separation Schemes, AIChE J., 1972, 18, 941-948.
- Treybal, R. E. Mass-Transfer Data for Simple Situations. Mass-Transfer Operations, 3a. ed.; McGraw-Hill: Tokyo, 1981; Cap. 3.
- Vafai, K., Thiyagaraja, R.; Analysis of flow and heat transfer at the interface region of a porous medium, Int. J. Heat Mass Transfer, 1987, 30, 1391-1405.
- Villarreal C., L.A.; Ramírez G., E.A., Méndez P., A.; Experimentación Piloto en Destilación Cero Gravedad. Informe Final. CIQA, Saltillo, Coah., 1992.
- Waller, K.V.; Finnerman, D.H.; Sandelin, P.M.; Häggblom, K.E.; Gustaffsson, S.E. An Experimental Comparison of Four Control Structures for Two-Point Control of Distillation. Ind. Eng. Chem. Res. 1988, 27, 624-630.
- Whitaker, S., The equations of motion in porous media, Chem. Eng. Sci., 1966, 21, 291-300.
- Whitaker, S. Flow in Porous Media I. A Theoretical Derivation of Darcy's Law. Transp. Porous Media 1986, 1, 3-25.

APENDICE A.

EXPRESIONES PARA EL CALCULO DEL COEFICIENTE DE FUGACIDAD

REDLICH-KWONG

$$\ln \phi_1 = \ln \left(\frac{V}{V-b} \right) + \frac{b_1}{V-b} - \ln z + \frac{ab_1}{b^2 R T^{1.5}} \left[\ln \left(\frac{V+b}{V} \right) - \frac{b}{V+b} \right] -$$

$$- \frac{2 \sum_j y_{1j} a_{1j}}{b R T^{1.5}} \ln \left(\frac{V+b}{V} \right)$$

SOAVE-REDLICH-KWONG

$$\ln \phi_1 = \frac{b_1}{b} (z-1) - \ln z + \ln \left(\frac{V}{V-b} \right) + \frac{a'(T)}{T} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \frac{b_1}{b} - 2 \sum_j \frac{(1-k_{1j}) [a'_i(T) a'_j(T)]^{0.5} y_j}{a'(T)} \right\} \ln \left(\frac{V+b}{V} \right)$$

$$a'(T) = (\hat{\Omega} a / \hat{\Omega} b) RTbF$$

$$a'(T) = (\hat{\Omega} a / \hat{\Omega} b) RTb_1 F_1$$

SUGIE-LU

$$\ln \phi_1 = \ln \frac{f}{p} + \frac{(b-c) \beta_1 - 0.08 R \gamma_1 \epsilon}{(V-b+c)} + \frac{a(\beta_1 - \alpha_1)}{b R T^{1.5}} \ln \left(\frac{V+b+c}{V+c} \right) +$$

$$+ \frac{a}{R T^{1.5} (V+b+c)} \left(\frac{c\beta_1 + 0.08 R \gamma_1 \epsilon}{(V+c)} - \beta_1 \right) +$$

$$+ \frac{1}{RT} \sum_{j=1}^{10} \frac{1}{jV^j} \left\{ \left(j\beta_1 + \gamma_1 \frac{d_{\omega j}}{d_j} \right) d_{jT} + \right.$$

$$+ \left[\alpha_1 + (j - 1)\beta_1 + \gamma_1 \frac{e_{\omega_j}^*}{e_j} \right] e_j T^{-0.5} \left. \right\}$$

donde:

$$\alpha_1 = \frac{2}{\delta} \sum_k y_k \delta_{1k} - \delta ; \beta_1 = \frac{\epsilon_1 - \epsilon}{\epsilon}$$

$$\delta_1 = \omega_1 - \omega ; \delta = \sum_k y_1 y_k \delta_{1k}$$

$$\delta_{1k} = \left(\frac{T_{c1}^{2.5}}{P_{c1}} \frac{T_{ck}^{2.5}}{P_{ck}} \right) (1 - K_{1k})$$

$$\epsilon = \sum_k y_k \epsilon_k \quad \epsilon_k = \frac{T_{ck}}{P_{ck}}$$

$d_{\omega_j}^*$, $e_{\omega_j}^*$ = funciones de $d^*(\omega)$ y $e^*(\omega)$

LEE - ERBAR - EDMISTER

$$\ln \phi_1 = \frac{1}{bRT} \left[(2 A'_1 - aB'_1 - bRT) \ln \left(\frac{V - b}{Y} \right) + \right. \\ \left. + \left(\frac{cB'_1}{2} - C'_1 \right) \ln \left(1 + \frac{b^2}{V^2} \right) \right] + B_1 (Z - 1) - \ln Z$$

donde:

$$B'_1 = \frac{b_1}{b}$$

$$A'_1 = a_1^{0.5} \sum_{k=1}^n y_k \alpha_{1k} a_k^{0.5}$$

$$C'_1 = c_1 \sum_{k=1}^n y_k \beta_{1k} c_k^{0.5}$$

BENEDICT - WEBB - RUBIN

$$\begin{aligned} \ln \phi_1 = & - \ln Z + \frac{1}{RT} \left[(B_o - B_{o1}) RT - 2 (A_o A_{o1})^{0.5} - \right. \\ & - 2 (C_o C_{o1})^{0.5} T^{-2} \left. \right] V^{-1} + \frac{3}{2RT} \left[RT (b^2 b_1)^{1/3} - \right. \\ & - (a^2 a_1)^{1/3} \left. \right] V^{-2} + \frac{3}{5RT} \left[a (\alpha^2 \alpha_1)^{1/3} + \alpha (a^2 a_1)^{1/3} \right] V^{-5} + \\ & + \frac{1}{RT} 3 V^{-2} \left(c^2 c_1^{1/3} T^{-2} \left(\frac{1 - e^{-\gamma V^{-2}}}{\gamma V^{-2}} - \frac{e^{-\gamma V^{-2}}}{2} \right) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{RT} \frac{2 V^{-2} c}{T^2} \frac{\gamma_1}{\gamma} \left(\frac{1 - e^{-\gamma V^{-2}}}{\gamma V^{-2}} - e^{-\gamma V^{-2}} \left(\frac{1 + \gamma V^{-2}}{2} \right) \right) \right] \end{aligned}$$

ECUACION VIRIAL (sólo con B)

$$\ln \phi_1 = \frac{2}{V} \sum y_i B_{1j} - \ln Z$$

ECUACION DE PENG-ROBINSON

$$\ln \phi_1 = \frac{B_1}{B} (Z-1) - \ln (Z-BP) -$$

$$- \frac{A^2}{2\sqrt{2}B} \left(\frac{2A_i^{-2}}{A^2} - \frac{B_i}{B} \right) \ln \left(\frac{Z + (1 + \sqrt{2})BP}{Z + (1 - \sqrt{2})BP} \right)$$

donde:

$$A = \sum_i Y_i A_i \quad ; \quad A^2 = \left(\sum_i Y_i A_i \right)^2 \quad ; \quad \bar{A}_i^2 = A_i \sum_j Y_j A_j (1 - k_{ij})$$

$$B = \sum_i Y_i B_i \quad ; \quad A_i = \frac{a_i^{1/2} \alpha_i^{1/2}}{RT} \quad ; \quad B_i = \frac{b_i}{RT}$$

(Reid et. al., 1977; Holland, 1988).

APENDICE B.

MODELOS PARA LOS COEFICIENTES DE ACTIVIDAD.

ECUACION DE MARGULES DE DOS SUFIJOS

$$g^E = A x_1 x_2$$

$$RT \ln \gamma_1 = A x_2^2$$

$$RT \ln \gamma_2 = A x_1^2$$

ECUACION DE MARGULES DE TRES SUFIJOS

$$g^E = x_1 x_2 [A + B (x_1 - x_2)]$$

$$RT \ln \gamma_1 = (A + 3B) x_2^2 - 4B x_2^3$$

$$RT \ln \gamma_2 = (A - 3B) x_1^2 - 4B x_1^3$$

ECUACION DE VAN LAAR

$$g^E = \frac{A x_1 x_2}{x_1 (A/B) + x_2}$$

$$RT \ln \gamma_1 = A \left(1 + \frac{A}{B} \frac{x_1}{x_2} \right)^{-2}$$

$$RT \ln \gamma_2 = B \left(1 + \frac{B}{A} \frac{x_2}{x_1} \right)^{-2}$$

ECUACION DE MARGULES DE CUATRO SUFIJOS

$$g^E = x_1 x_2 \left[A + B \left(x_1 - x_2 \right) + C \left(x_1 - x_2 \right)^2 \right]$$

$$RT \ln \gamma_1 = \left(A + 3B + 5C \right) x_2^2 - 4 \left(B + 4C \right) x_2^3 + 12C x_2^4$$

$$RT \ln \gamma_2 = \left(A - 3B + 5C \right) x_1^2 + 4 \left(B - 4C \right) x_1^3 + 12C x_1^4$$

ECUACION DE WILSON

$$\frac{g^E}{RT} = - \sum_i x_i \ln \left(\sum_j \Lambda_{ij} x_j \right)$$

$$\ln \gamma_i^L = 1 - \ln \left(\sum_j x_j \Lambda_{ij} \right) - \sum_k \left(\frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_j x_j \Lambda_{kj}} \right)$$

donde:

$$\Lambda_{ij} = \frac{\omega_j^L}{\omega_i^L} \exp \left[- \frac{(\lambda_{ij} - \lambda_{ii})}{RT} \right]$$

$$\lambda_{1j} = \lambda_{j1} \quad ; \quad \Lambda_{1j} \neq \Lambda_{j1}$$

ECUACION NRTL

$$\frac{g^E}{RT} = \sum_i \left(\frac{\sum_j x_j \tau_{ji} \Lambda_{ji}}{\sum_l x_l \Lambda_{li}} \right)$$

$$\ln \gamma_k = \sum_j \left(\frac{x_j \tau_{jk} \Lambda_{jk}}{\sum_l x_l \Lambda_{lk}} \right) + \sum_i \left(\frac{x_i \Lambda_{ki}}{\sum_l x_l \Lambda_{li}} \right) \left[\tau_{ki} - \sum_j \left(\frac{x_j \tau_{ji} \Lambda_{ji}}{\sum_l x_l \Lambda_{li}} \right) \right]$$

donde:

$$\tau_{j1} = \frac{\lambda_{j1} - \lambda_{11}}{RT} \quad ; \quad \Lambda_{j1} = \exp \left(- \alpha_{j1} \tau_{j1} \right)$$

$$\tau_{1j} = \frac{\lambda_{1j} - \lambda_{jj}}{RT} \quad ; \quad \Lambda_{1j} = \exp \left(- \alpha_{1j} \tau_{1j} \right) \quad ; \quad \alpha_{1j} = \alpha_{j1}$$

ECUACION UNIQUAC

$$g^E = g^C + g^R$$

$$g^C = \sum_i x_i \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \sum_i x_i q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i}$$

$$\frac{g^R}{RT} = - \sum_i \left(x_i q_i \ln \sum_j \theta_j \Lambda_{ji} \right)$$

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R$$

donde:

$$\ln \gamma_i^C = 1 - \frac{\phi_i}{x_i} + \ln \frac{\phi_i}{x_i} - \frac{z}{2} q_i \left(1 - \frac{\phi_i}{\theta_i} + \ln \frac{\phi_i}{\theta_i} \right)$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 - \ln \sum_j \theta_j \Lambda_{ji} - \sum_j \left(\frac{\theta_k \Lambda_{ik}}{\sum_j \theta_j \Lambda_{jk}} \right) \right]$$

$$\Lambda_{ji} = \exp \left[- \frac{(\lambda_{ji} - \lambda_{ii})}{RT} \right] \quad \phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j}$$

$$\Lambda_{ij} = \exp \left[- \frac{(\lambda_{ij} - \lambda_{jj})}{RT} \right] \quad \theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j}$$

z = número de coordinación

$$\ln \gamma_1 = \ln \gamma_1^C + \ln \gamma_1^R$$

$$\ln \gamma_1^C = \ln \frac{\phi_1}{x_1} + \frac{z}{2} q_1 \ln \frac{\theta_1}{\phi_1} + l_1 - \frac{\phi_1}{x_1} \sum_j x_j l_j$$

$$\ln \gamma_1^R = \sum_k \nu_{k1} \left(\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_{k1} \right)$$

donde:

$$l_1 = (z/2) (r_1 - q_1) - (r_1 - 1) \quad q_1 = \sum_k \nu_{k1} Q_k$$

$$r_1 = \sum_k \nu_{k1} R_k \quad \theta_1 = x_1 q_1 / \sum_j x_j q_j$$

$$\phi_1 = x_1 r_1 / \sum_j x_j r_j$$

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \Theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \left(\frac{\Theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \Theta_n \Psi_{nm}} \right) \right]$$

$$\ln \Gamma_{k1} = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \Theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \left(\frac{\Theta_{m1} \Psi_{km}}{\sum_n \Theta_{n1} \Psi_{nm}} \right) \right]$$

$$\Theta_{m1} = X_{m1} Q_m / \sum_n X_{n1} Q_n$$

$$\Theta_m = X_m Q_m / \sum_n X_n Q_n$$

$$X_{m1} = \nu_{m1} / \sum_n \nu_{n1}$$

$$X_m = \sum_j X_j \nu_{mj} / \sum_n \sum_j X_j \nu_{nj}$$

$$\Psi_{mn} = \exp(-a_{mn}/T)$$

ν_{ki} = cuenta del k - ésimo grupo con el componente i

(a_{mn}) = Sistema de parámetros de interacción de grupos, $a_{mn} \neq a_{nm}$.

R_k = Medida de la relación de volumen de Van der Waals para el grupo k.

Q_k = Medida de la relación de área de Van der Waals para el grupo k.

(Reid, et. al., 1977; Holland, 1988).

APENDICE C.

POLINOMIOS CUBICOS DE HERMITE

El empleo de los polinomios cúbicos de Hermite como funciones prueba en un método de colocación en elemento finito, tiene la ventaja, con respecto a otro tipo de polinomios cúbicos, de que la primera derivada es continua automáticamente en los extremos de cada elemento, lo que reduce el número de ecuaciones en aproximadamente la tercera parte (Finlayson, 1980). Las funciones prueba en cada elemento se muestran en la figura C.1 y en la figura C.2 se muestra la interconexión de los polinomios de Hermite en elementos adyacentes. Cada función prueba necesita cuatro parámetros para definir el polinomio cúbico. Además hay cuatro cantidades que son de interés: el valor de la función y de la primera derivada en cada extremo del elemento. Considerando, la transformación de ejes realizada en el cap. 3.3 para normalizar cada elemento entre cero y uno, las funciones prueba se definen de forma que tres de las cantidades de interés sean cero y la cuarta uno. Así, en el elemento K:

$$\begin{aligned}
 H_1 &= (1 - u)^2 (1 + 2u) \\
 H_2 &= u(1 - u)^2 h_K \\
 H_3 &= u^2(3 - 2u) \\
 H_4 &= u^2(u - 1) h_K
 \end{aligned}
 \tag{C.1}$$

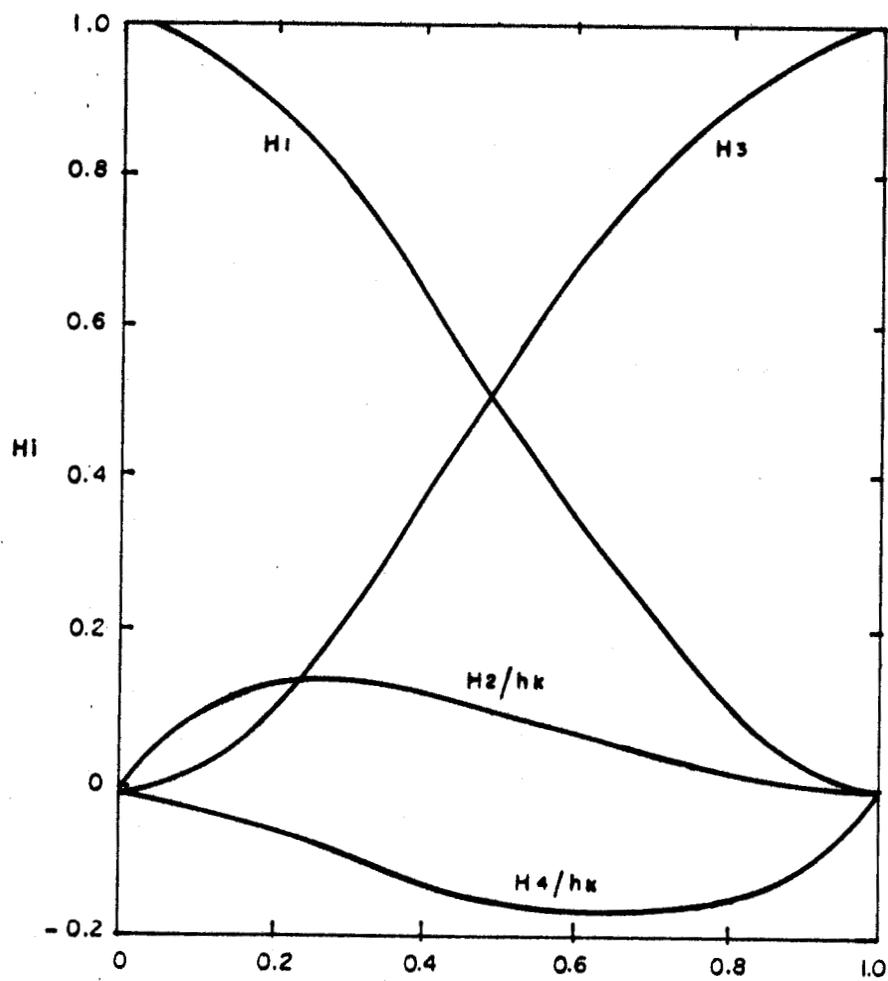


FIGURA C.1.- POLINOMIOS CUBICOS DE HERMITE

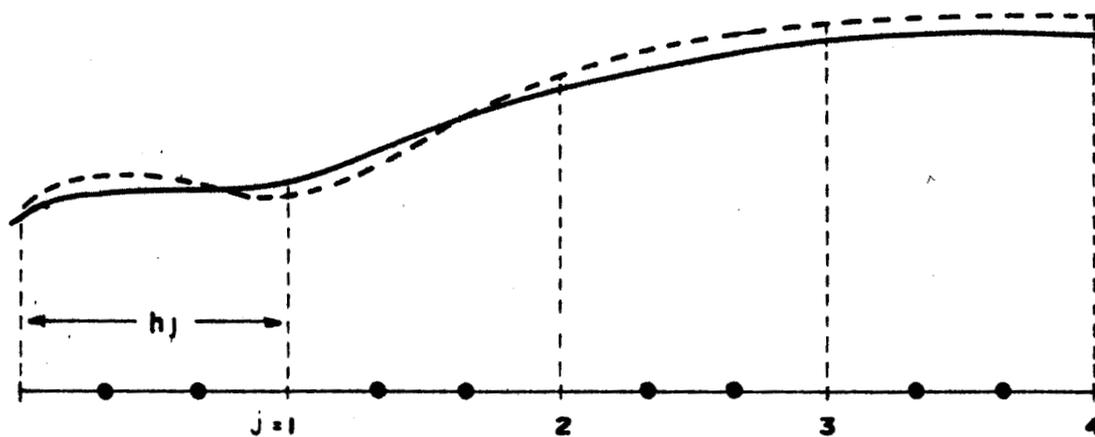


FIGURA C.2. - APROXIMACION DE UNA FUNCION CON POLINOMIOS CUBICOS DE HERMITE EN ELEMENTOS FINITOS
FUNCION: LINEA PUNTEADA APROXIMACION: LINEA SOLIDA

Así, la función, en cada elemento, se representa por

$$X(u) = \sum_{I=1}^4 c_I H_I(u) \quad (C.2)$$

con la primera derivada como:

$$\frac{dx}{dz} = \frac{1}{h_K} \frac{dx}{du} = \frac{1}{h_K} \sum_{I=1}^4 c_I \frac{d H_I}{du} \quad (C.3)$$

y la segunda derivada

$$\frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{1}{h_K^2} \frac{d^2 x}{du^2} = \frac{1}{h_K^2} \sum_{I=1}^4 c_I \frac{d^2 H_I}{du^2} \quad (C.4)$$

La característica del sistema de ecuaciones (C-1) a (C-4) es que

en $u = 0$

$$H_1 = 1 \quad (C.5)$$

$$H_2 = H_3 = H_4 = 0$$

$$H'_1 = H'_3 = H'_4 = 0$$

$$H'_2 = h_K$$

$$X(0) = c_1$$

en $u = 1$

$$H_1 = H_2 = H_4 = 0 \quad (\text{C.6})$$

$$H'_1 = H'_3 = 0$$

$$H'_2 = H'_4 = h_k$$

$$H_3 = 1$$

$$X(1) = c_3$$

De acuerdo con lo anterior, se nota que:

$$c_{1,k} = c_{3,k-1} \quad (\text{C.7})$$

APENDICE D.

DESARROLLO DE LAS ECUACIONES DE COMPOSICION PARA UTILIZARSE
EN EL METODO DE COLOCACION EN ELEMENTO FINITO.

FASE LIQUIDA.

Partiendo de la ecuación de composición en estado estable:

$$D_{eff} \frac{\partial^2 x_A}{\partial z^2} + \frac{\partial x_A}{\partial z} \frac{\partial D_{eff}}{\partial z} + v_1 \frac{\partial x_A}{\partial z} - \frac{2r_1 k_1}{(r_2^2 - r_1^2)} (x_A - x_{A1}) = 0 \quad (D.1)$$

Desarrollando la difusividad

$$D_{eff} = \frac{\epsilon}{\tau} D_{AB1}$$

$$\tau = 1/\epsilon$$

$$D_{AB1} = \left(D_{AB1}^{\circ} \right)^{1-x_A} \left(D_{BA1}^{\circ} \right)^{x_A}$$

por lo tanto:

$$D_{eff} = \epsilon^2 \left(D_{AB1}^{\circ} \right)^{1-x_A} \left(D_{BA1}^{\circ} \right)^{x_A} \quad (D.2)$$

y la primera derivada:

$$\frac{\partial D_{eff}}{\partial z} = \frac{\epsilon^2 \partial \left[\left(D_{AB1}^{\circ} \right)^{1-x_A} \left(D_{BA1}^{\circ} \right)^{x_A} \right]}{\partial z}$$

∂z

con lo que

$$\frac{\partial D_{eff}}{\partial z} = \epsilon^2 \ln \left(\frac{D_{BA}^0}{D_{AB}^0} \right) \left(D_{AB1}^0 \right)^{1-X_A} \left(D_{BA1}^0 \right)^{X_A} \frac{\partial X_A}{\partial z} \quad (D.3)$$

Desarrollando el coeficiente de transferencia de masa

$$k_1 = c_{K1} u_1 / \left\{ \epsilon Re_1 c_{R1} \left[\frac{\mu_1}{\rho_1 \left(D_{AB1}^0 \right)^{1-X_A} \left(D_{BA1}^0 \right)^{X_A}} \right]^{0.67} \right\} \quad (D.4)$$

donde c_{K1} y c_{R1} son coeficientes que dependen del régimen de aplicación de la correlación:

Para régimen laminar

$$c_{K1} = 1.09, \quad c_{R1} = 0.67$$

Para régimen turbulento

$$c_{K1} = 20.4, \quad c_{R1} = 0.815$$

Rearreglando (D.4)

$$k_1 = \frac{c_{K1} u_1 \left[\rho_1 \left(D_{AB1}^0 \right)^{1-X_A} \left(D_{BA1}^0 \right)^{X_A} \right]^{0.67}}{\left(\epsilon Re^{c_{RL}} \mu_1^{0.67} \right)} \quad (D.5)$$

Por otro lado, de acuerdo con el método de colocación en elemento finito y la función de aproximación con polinomios cúbicos de Hermite, desarrollada en el apéndice C, en cada elemento:

$$x_A \cong x_K(u) = \sum_{I=1}^4 c_I H_I(u) \quad (D.6)$$

$$\frac{\partial x_A}{\partial z} \cong \frac{1}{h_K} x'_K(u) = \frac{1}{h_K} \sum_{I=1}^4 c_I H'_I(u) \quad (D.7)$$

$$\frac{\partial^2 x_A}{\partial z^2} \cong \frac{1}{h_K^2} x''_K(u) = \frac{1}{h_K^2} \sum_{I=1}^4 c_I H''_I(u) \quad (D.8)$$

Sustituyendo (D.2), (D.3), (D.5)-(D.8) en (D.1) se obtiene:

$$\begin{aligned} & \frac{\epsilon^2}{h_K^2} \left[\left(\mathcal{D}_{AB1}^{\circ} \right)^{1-x_K(u)} \left(\mathcal{D}_{BA1}^{\circ} \right)^{x_K(u)} \right] x''_K(u) + \\ & + \frac{\epsilon^2}{h_K^2} \ln \left(\frac{\mathcal{D}_{BA1}^{\circ}}{\mathcal{D}_{AB1}^{\circ}} \right) \left[\left(\mathcal{D}_{AB1}^{\circ} \right) \left(\mathcal{D}_{BA1}^{\circ} \right) \right] \left(x'_K(u) \right) - \\ & - \frac{\alpha_1}{h_K} x'_K(u) - \frac{2 r_1}{\left(r_2^2 - r_1^2 \right)} \frac{c_{K1} \alpha_1 \left[\left(\mathcal{D}_{AB1}^{\circ} \right)^{1-x_K(u)} \left(\mathcal{D}_{BA1}^{\circ} \right)^{x_K(u)} \right]}{\left(\epsilon \operatorname{Re}_1^{C_{R1}} \mu^{0.67} \right)} \end{aligned}$$

$$\left(x_k(u) - x_{A1} \right) = 0 \quad (D.9)$$

que proporciona un sistema de 4 ecuaciones algebraicas en cada elemento.

FASE GAS.

Partiendo de la ecuación de composición del vapor en estado estable:

$$- D_{ABV} \frac{\partial^2 y_A}{\partial z^2} + u_v \frac{\partial y_A}{\partial z} + \frac{2 k_v}{r_1} \left(y_{A1} - y_A \right) = 0 \quad (D.10)$$

con la función de aproximación

$$y_A \cong Y_k(u) = \sum_{I=1}^4 c_I H_I(u) \quad (D.11)$$

y sus derivadas

$$\frac{\partial y_A}{\partial z} \cong \frac{1}{h_k} Y'_k(u) = \frac{1}{h_k} \sum_{I=1}^4 c_I H'_I(u) \quad (D.12)$$

$$\frac{\partial^2 y_A}{\partial z^2} \cong \frac{1}{h_k^2} Y''_k(u) = \frac{1}{h_k^2} \sum_{I=1}^4 c_I H''_I(u) \quad (D.13)$$

Recordando, además, que:

$$k_v = u_v / (Sc)^{2/3} \quad (D.14)$$

Se obtiene

$$\frac{D_{ABV}}{h_K^2} Y_K(u) + \frac{u_V}{h_K} Y'_K(u) + \frac{2 u_V}{r_1 (Sc)^{2/3}} \left(Y_{A1} - Y_K(u) \right) = 0 \quad (D.15)$$

Esta última expresión proporciona un sistema de cuatro ecuaciones algebraicas en cada elemento, para la fase gas, donde las incógnitas son los coeficientes, c_i , de los polinomios de Hermite.

APENDICE E

PROCEDIMIENTO INSTRUMENTADO EN LA SOLUCION DEL SISTEMA DE
ECUACIONES DEL MODELO DCG.

Algoritmo básico de cálculo.

Estado estacionario

1. Se define una malla de colocación y supone perfil inicial de X e Y.
2. Se calculan las composiciones interfaciales.
3. En cada elemento, se resuelve el sistema de ecuaciones de composición de la fase gas, determinando los coeficientes que aproximan el residuo a cero, dentro de la tolerancia especificada. Como resultado se obtienen las funciones de aproximación de la composición del gas en cada elemento.
4. Con las funciones de aproximación obtenidas en 3, se obtienen nuevos valores del perfil de composición del gas.
5. Con el nuevo perfil obtenido para la fase gas, se recalculan las composiciones interfaciales.
6. En cada elemento, se resuelve el sistema de ecuaciones de composiciones de la fase líquida, dentro del criterio de la tolerancia especificada. Como resultado se obtienen las funciones de aproximación de la composición del líquido en cada elemento.
7. Se verifica la diferencia de los nuevos perfiles de composición obtenidos, con respecto a los perfiles

anteriores.

8. Si la diferencia es menor o igual que la tolerancia especificada, el sistema ha convergido y se continúa en 9. En caso contrario, se regresa a 2.
9. Se imprimen resultados del estado estacionario.

Estado transitorio.

10. Se sustituyen las ecuaciones de los puntos 3 y 6 del algoritmo de cálculo para el estado estable por las ecuaciones correspondientes al estado transitorio.
11. Se especifica el diferencial de tiempo, Δt .
12. Se especifica un cambio de composición en la alimentación.
13. Se siguen los pasos 2 a 9 del algoritmo básico de cálculo para el estado estable.
14. Se incrementa Δt . Si el tiempo total, $t + \Delta t$, es igual al tiempo total especificado de cálculo se termina la ejecución. Si no, se siguen incrementando los pasos 2 a 9 del algoritmo de cálculo para el estado estacionario.